

Politechnika Gdańska
Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej

Patryk Jasik

**Rozrzedzony magnetyzm dla półprzewodników
ferromagnetycznych na przykładzie domieszkowanego
manganem arsenku galu (Ga, Mn)As.**

PRACA MAGISTERSKA

Promotor: dr inż. Robert Laskowski

Gdańsk 2001

SPIS TREŚCI:

1. WSTĘP	5
2. WPROWADZENIE TEORETYCZNE	7
2.1. MODEL ZENERA	7
2.2. ODDZIAŁYWANIE RKKY	9
2.3. METODA $\mathbf{k}\hat{p}$	5
3. DEFINICJA HAMILTONIANU	24
3.1. HAMILTONIAN $\mathbf{k}\hat{p}$	24
3.2. HAMILTONIAN NAPRĘŻEŃ.....	27
3.3. HAMILTONIAN WYMIANY $p-d$	29
4. OBLICZENIA NUMERYCZNE	31
4.1. STRUKTURA ELEKTRONOWA I POWIERZCHNIE FERMIEGO.....	31
4.2. TEMPERATURA CURIE.....	40
5. PODSUMOWANIE	44
6. LITERATURA	45

1. Wstęp

Rozwój technologii epitaksjalnej stworzył możliwości produkowania nowych nieznanych dotąd materiałów. Związki półprzewodnikowe III – V, domieszkowane manganem, wyprodukowane za pomocą epitaksji, tworzą struktury kwantowe, w których elektrony lub fotony mają bardzo ciekawe własności. Zwiększenie precyzji atomowego nakładania warstw i ich obróbki, pozwoliły na zaobserwowanie i przeanalizowanie wielu interesujących zjawisk, takich jak: kwantowy efekt Halla, przewodnictwo jednoelektronowe oraz umożliwiły wyprodukowanie punktowych i komorowych laserów półprzewodnikowych [1].

Odkrycie ferromagnetyzmu w związkach półprzewodnikowych III – V oraz II – VI, domieszkowanych manganem, o strukturze blendy cynkowej, pozwoliło na rozpoczęcie badań nad fizyką wcześniej nieznanych układów kwantowych i magnetyzmu w półprzewodnikach. Na przykład zostało wykazane istnienie magnetycznych przemian fazowych w związkach heterostrukuralnych typu (In, Mn)As, (Cd, Mn)Te i (Ga, Mn)As, wywołanych naświetlaniem tych kryształów przez promieniowanie o długości fali z zakresu światła widzialnego. Odkryto również zjawisko samoistnego przepompowywania, przez kwantową studnię potencjału, spolaryzowanych nośników, na przykład z (Ga, Mn)As do (In, Ga)As, przy zerowym zewnętrznym polu magnetycznym. Powstała również hipoteza, że kontrolowanie kierunku i wzajemnego ułożenia momentów magnetycznych w tych kryształach może przyczynić się do stworzenia czujników pomiarowych o dużo większej precyzji oraz szybszych i wydajniejszych pamięci komputerowych [1, 3].

Bardzo szybko okazało się, że największym osiągnięciem, w rozwijaniu tej nowej teorii, będzie gruntowne zbadanie źródeł powstających oddziaływań magnetycznych, których skutkiem ma być osiągnięcie temperatury Curie o wiele wyższej niż dotychczas obserwowane 110 K. Wyniki takie można uzyskać dla niewielkiej, bo tylko 5% koncentracji jonów manganowych w badanym kryształ arsenku galu. Punktem wyjścia stał się model Zenera, który został zaproponowany w 1950 roku dla wyjaśnienia ferromagnetyzmu w metalach. Dzięki niemu można teoretycznie założyć istnienie materiałów o temperaturze Curie wyższej nawet od temperatury pokojowej, co może być istotnym krokiem dla rozwoju elektroniki półprzewodnikowej, używającej jako nośnika zarówno ładunku, jak i spinu [2, 3].

Ze względu na złożoność zagadnienia, jakim jest magnetyzm w teorii ciała stałego, ograniczę się, w niniejszej pracy, do opisu metody wyznaczania pasm energetycznych dla półprzewodników ferromagnetycznych oraz przedstawię wyniki numeryczne, przedstawiające kształt wierzchołka pasma walencyjnego, na przykładzie domieszkowanego manganem arsenku galu. W ostatniej części pracy chciałbym przedstawić metodę wyznaczania temperatury Curie.

2. Wprowadzenie teoretyczne

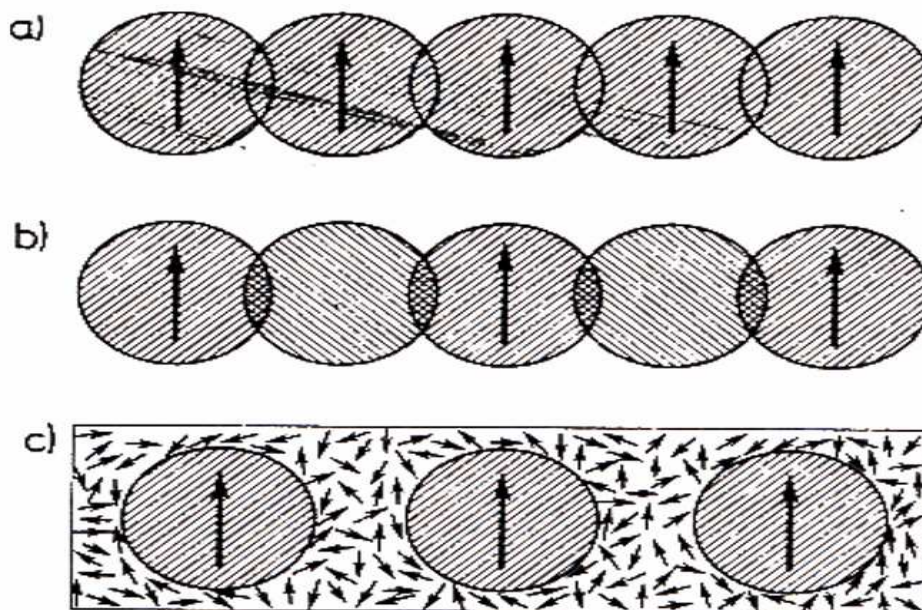
Rozdział ten jest poświęcony trzem istotnym problemom niezbędnym do zrozumienia metody wyznaczania struktury pasmowej w półprzewodnikach, a co za tym idzie, do poznania metody obliczania temperatury Curie. Pierwszym z nich jest model Zenera, który nawet z historycznego punktu widzenia dał początek badaniom struktur ferromagnetycznych zarówno metali, jak i półprzewodników. Model ten został następnie rozwinięty przez Rudermana, Kittla, Kasuya'ę i Yosida'ę (RKKY). To właśnie dzięki formalizmowi oddziaływania RKKY obliczanie struktury pasmowej domieszkowanych półprzewodników stało się o wiele dokładniejsze i sprawniejsze. Trzecim zagadnieniem jest metoda $\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}$, która w połączeniu z metodą RKKY pozwoliła na znaczny postęp w badaniach nad strukturą pasmową półprzewodników ferromagnetycznych (w naszym przypadku domieszkowanego manganem arsenku galu (Ga, Mn)As).

2.1. Model Zenera

Istnieje kilka rodzajów oddziaływań magnetycznych, które prowadzą do powstawania bardzo interesujących zjawisk w ciałach stałych. Oddziaływania te możemy podzielić na kilka grup ze względu na charakter czynników biorących udział w powstawaniu tych oddziaływań [5].

- Wymiana bezpośrednia. Oddziaływanie to wywodzi się z bezpośrednich oddziaływań kulombowskich elektronów obu jonów pary biorących w nim udział. Jony magnetyczne oddziałują ze sobą ze względu na nakrywanie się ich rozkładów ładunku.
- Nadwymiana. Często zdarza się, że para jonów magnetycznych przedzielona jest w sieci krystalicznej jodem niemagnetycznym (tj. jodem z całkowicie zapełnionymi wszystkimi powłokami elektronowymi). Jony magnetyczne oddziałują wtedy ze sobą za pośrednictwem elektronów ich wspólnego, niemagnetycznego sąsiada i oddziaływanie takie jest silniejsze od bezpośredniego oddziaływania wymiennego obu jonów magnetycznych.

- Wymiana pośrednia. Ten typ oddziaływań magnetycznych może wiązać elektrony z częściowo zapełnionych powłok f metali ziem rzadkich. Obok zwykłego oddziaływania wymiennego, elektrony te mogą również oddziaływać za pośrednictwem elektronów przewodnictwa. Oddziaływanie to może okazać się silniejsze od bezpośrednich oddziaływań wymiennych, z uwagi na niewielkie na ogół nakrywanie się elektronowych funkcji falowych powłok f dwóch różnych jonów.



Rys. 2.1.1. Schematyczna ilustracja oddziaływań typu: (a) wymiany bezpośredniej, (b) nadwymiany, (c) wymiany pośredniej.

Jak już zostało wspomniane we wstępie model Zenera, opisujący ferromagnetyczne oddziaływania za pośrednictwem swobodnych nośników (elektronów albo dziur), stał się punktem wyjścia dla rozwoju badań nad związkami półprzewodnikowymi o właściwościach ferromagnetycznych. Zakłada się tu, że słabo zlokalizowane lub wcale niezlokalizowane nośniki pośredniczą w dalekozasięgowym ferromagnetycznym oddziaływaniu pomiędzy momentami magnetycznymi (punkt (c) na rys. 2.1.1.).

Model ferromagnetyzmu, powstającego poprzez oddziaływanie wymienne sprzęgające nośniki i zlokalizowane momenty, był jako pierwszy zaproponowany przez Zenera. Według tego modelu, polaryzacja zlokalizowanych momentów prowadzi do rozszczepienia pasm energetycznych, a co z kolei prowadzi do obniżenia energii

nośników. W wystarczająco niskiej temperaturze, spadek energii nośników jest kompensowany wzrostem energii swobodnej, który jest spowodowany zmniejszaniem się entropii, co z kolei związane jest z polaryzacją zlokalizowanych momentów magnetycznych.

Jednakże, model Zenera został na długie lata porzucony, ponieważ nie uwzględniał, ani swobodnego charakteru elektronów magnetycznych, ani kwantowych oscylacji spolaryzowanych elektronów wokół zlokalizowanych spinów, a są to bardzo ważne zjawiska w teorii metali magnetycznych. W szczególności, rezultaty „rywalizacji” ferromagnetycznych i antyferromagnetycznych oddziaływań w metalach, w ramach modelu Zenera, prowadzą raczej do tworzenia się szkła spinowego, aniżeli do ferromagnetycznego ciała stałego [2, 4].

Model ten stał się znowu interesujący, kiedy okazało się, że może być bardzo użyteczny w przypadku półprzewodników, ponieważ średnia odległość pomiędzy nośnikami w półprzewodnikach jest w ogólności dużo większa niż pomiędzy momentami magnetycznymi. Z tego powodu pośrednie oddziaływanie wymienne ma charakter ferromagnetyczny dla większości par momentów magnetycznych, a co za tym idzie zmniejsza się tendencja ku tworzeniu szkła spinowego.

Aktualnie, dla losowego rozkładu zlokalizowanych momentów magnetycznych, wartość temperatury Curie T_C w przybliżeniu pola średniego, uzyskiwanej dotychczas z modelu Zenera, otrzymuje się z modelu zaproponowanego przez Rudermana, Kittla, Kasuya’ę i Yosida’ę, który będzie omówiony w następnym podrozdziale.

2.2. Oddziaływanie RKKY

W podrozdziale tym opisane zostanie pokrótce oddziaływanie wymienne, które zachodzi między elektronami przewodnictwa a zlokalizowanymi momentami magnetycznymi. Zanim rozważymy konsekwencje tego oddziaływania w rozrzedzonych stopach, na przykład takich jak domieszkowany manganem arsenek galu (Ga, Mn)As, przedyskutujemy jego rolę w tworzeniu sprzężenia pośredniego między zlokalizowanymi momentami.

Pomiędzy elektronami w stanie s i momentami jądrowymi występuje kontaktowe oddziaływanie nadsztywne. Obserwator związany z jądrem przypisuje to oddziaływanie polu magnetycznemu wytworzonym przez moment magnetyczny elektronu i przez ruch elektronu wokół jądra. Jeśli elektron ma orbitalny moment pędu względem jądra, to wokół jądra istnieje prąd elektronowy. Ale nawet wtedy, gdy moment pędu jest równy zeru, wokół jądra istnieje prąd związany ze spinem elektronu, powodujący to właśnie oddziaływanie. Fröhlich i Nabarro zasugerowali po raz pierwszy, że oddziaływanie to może prowadzić do polaryzacji momentów jądrowych. Postać tego oddziaływania znaleziona została przez Rudermana i Kittla. Analogicznie do tego sprzężenia momentów jądrowych, oddziaływanie wymienne między elektronami przewodnictwa a zlokalizowanymi elektronami może także prowadzić do pośredniego sprzężenia między zlokalizowanymi momentami elektronowymi. Jak to zostało przedstawione w podrozdziale 2.1., właśnie to sprzężenie może być jednym ze źródeł ferromagnetyzmu w metalach przejściowych. Kasuya zbadał oddziaływanie to bardziej szczegółowo, zwracając uwagę na jego wpływ na fale spinowe i opór elektryczny. Także Yosida rozpatrywał to oddziaływanie w celu wyjaśnienia własności magnetycznych CuMn. W związku z tymi pracami pośrednie sprzężenie momentów magnetycznych za pośrednictwem elektronów przewodnictwa nazywane jest oddziaływaniem Rudermana – Kittla – Kasuyi – Yosidy (RKKY) [5, 7, 9, 13].

W odpowiednio korzystnych warunkach, na izolowanej domieszce w metalu prostym może utworzyć się lokalny moment magnetyczny. Efekt ten ma charakter wieloelektronowy i wynika z oddziaływania dwóch elektronów znajdujących się na tym samym jonie. Moment taki może pojawić się wówczas, gdy jedna z powłok jest zapełniona tylko częściowo. Strukturę takiej powłoki możemy opisać za pomocą kilku prostych reguł, zwanych regułami Hunda [5, 9].

- Pierwsza reguła Hunda. Ze wszystkich stanów n elektronów rozmieszczonych na $2(2l + 1)$ poziomach częściowo zapełnionej powłoki najniższą energię mają stany z największym całkowitym spinem S , na jaki pozwala zasada Pauliego.
- Druga reguła Hunda. Najniżej położone stany jonu mają największą wartość całkowitego orbitalnego momentu pędu L , na jaką pozwalają pierwsza reguła Hunda i zasada Pauliego.
- Trzecia reguła Hunda. Dwie pierwsze reguły Hunda pozwalają określić wartości L oraz S dla stanów o najniższej energii, co wciąż jeszcze zmusza nas do dalszego

badania pozostałych wchodzących w grę $(2L+1)(2S+1)$ stanów. Stany te można klasyfikować ze względu na wartość całkowitego momentu pędu J , który zgodnie z fundamentalnym prawem dodawania momentów pędu, będzie teraz przybierał wartości od $L-S$ do $L+S$. W rezultacie w stanie o najniższej energii całkowity moment pędu J przyjmuje jedną z dwóch wartości

$$\begin{aligned} J &= |L-S| & \text{dla } n \leq 2l+1 \\ J &= L+S & \text{dla } n \geq 2l+1 \end{aligned}$$

Znając już mechanizm powstawania lokalnych momentów magnetycznych, możemy sobie wyobrazić, że jeżeli mamy wiele takich momentów, to będziemy także mieli do czynienia z takim oddziaływaniem pomiędzy nimi, które doprowadzi do wspólnego ukierunkowania się tych momentów. W takim wypadku będziemy mieli i bezpośrednie oddziaływania magnetyczne pomiędzy momentami magnetycznymi, zlokalizowanymi na poszczególnych domieszkach. Istnieje również oddziaływanie pomiędzy momentami magnetycznymi, które zachodzi na drodze oddziaływania elektron – elektron. Fizycznie rzecz ujmując, oddziaływanie to wynika z rozpraszania elektronów przewodnictwa na pojedynczej domieszce, co doprowadza do ustawienia odpowiedniego lokalnego momentu magnetycznego w danym kierunku, następnie informacja o ustawieniu tego momentu przenoszona jest do drugiej domieszki i rozpraszanie elektronów na tej domieszce staje się zależne od jej lokalnego spinu.

Postać oddziaływania RKKY można łatwo otrzymać w ramach formalizmu uogólnionej podatności [7, 15, 19]. Załóżmy, że hamiltonian oddziaływania pomiędzy zlokalizowanym w punkcie $\mathbf{r} = 0$ spinem \mathbf{S}_α a spinem elektronu przewodnictwa \mathbf{s}_i ma postać

$$H = -J \sum_i \mathbf{S}_\alpha \mathbf{s}_i \delta(\mathbf{r}_i). \quad (2.2.1)$$

A więc na każdy z elektronów przewodnictwa działa pole efektywne dane wyrażeniem

$$\mathbf{H}_{\text{ef}}(\mathbf{r}) = -\frac{J}{g\mu_B} \mathbf{S}_\alpha \delta(\mathbf{r}). \quad (2.2.2)$$

Odpowiedź gazu elektronowego na takie pole jest określona jego podatnością $\chi(\mathbf{k})$, która zdefiniowana jest dalej w równaniu (2.2.5). Ponieważ transformata Fouriera tego pola w punkcie $\mathbf{r} = 0$ wynosi

$$\mathbf{H}_{\text{ef}}(\mathbf{k}) = -\frac{J}{g\mu_B} \mathbf{S}_\alpha, \quad (2.2.3)$$

więc gęstość spinu w tym punkcie można wyznaczyć z równania

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = -V g\mu_B \mathbf{s}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \chi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{H}_{\text{ef}}(\mathbf{k}), \quad (2.2.4)$$

czyli podstawiając (2.2.3) do (2.2.4) otrzymujemy

$$\mathbf{s}(\mathbf{r}) = \frac{J}{g^2 \mu_B^2 V} \sum_{\mathbf{k}} \chi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{S}_\alpha. \quad (2.2.5)$$

Aby wyjaśnić dalsze postępowanie musimy zdefiniować podatność występującą w równości (2.2.4). I tak w przypadku gazu elektronów swobodnych podatność $\chi(\mathbf{k})$ dla $T = 0$ K opisana jest wzorem

$$\chi(\mathbf{k}) = \frac{3g^2 \mu_B^2 (N/V)}{8\varepsilon_F} F\left(\frac{k}{2k_F}\right), \quad (2.2.6)$$

gdzie

$$F\left(\frac{k}{2k_F}\right) = \frac{1}{2} + \frac{k_F}{2k} \left(1 - \frac{k^2}{4k_F^2}\right) \log \left| \frac{2k_F + k}{2k_F - k} \right|, \quad (2.2.7)$$

a N jest całkowitą liczbą elektronów w układzie.

Jak już wcześniej zostało wspomniane elektrony traktujemy jako swobodne i działamy na nie polem \mathbf{H}_{ef} , czyli po podstawieniu (2.2.6) do (2.2.5) otrzymujemy następujące wyrażenie na gęstość spinu w punkcie \mathbf{r} :

$$\mathbf{s}(\mathbf{r}) = \frac{3NJ}{8\epsilon_F V^2} \sum_{\mathbf{k}} F\left(\frac{k}{2k_F}\right) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{S}_\alpha. \quad (2.2.8)$$

Sumę po \mathbf{k} w (2.2.8) można obliczyć zastępując ją całką. Całkę zaś łatwo obliczyć wykorzystując przedstawienie całkowe

$$\log\left|\frac{2k_F + k}{2k_F - k}\right| = 2 \int_0^\infty \frac{dx \sin(2k_F x) \sin(kx)}{x}. \quad (2.2.9)$$

W wyniku otrzymujemy

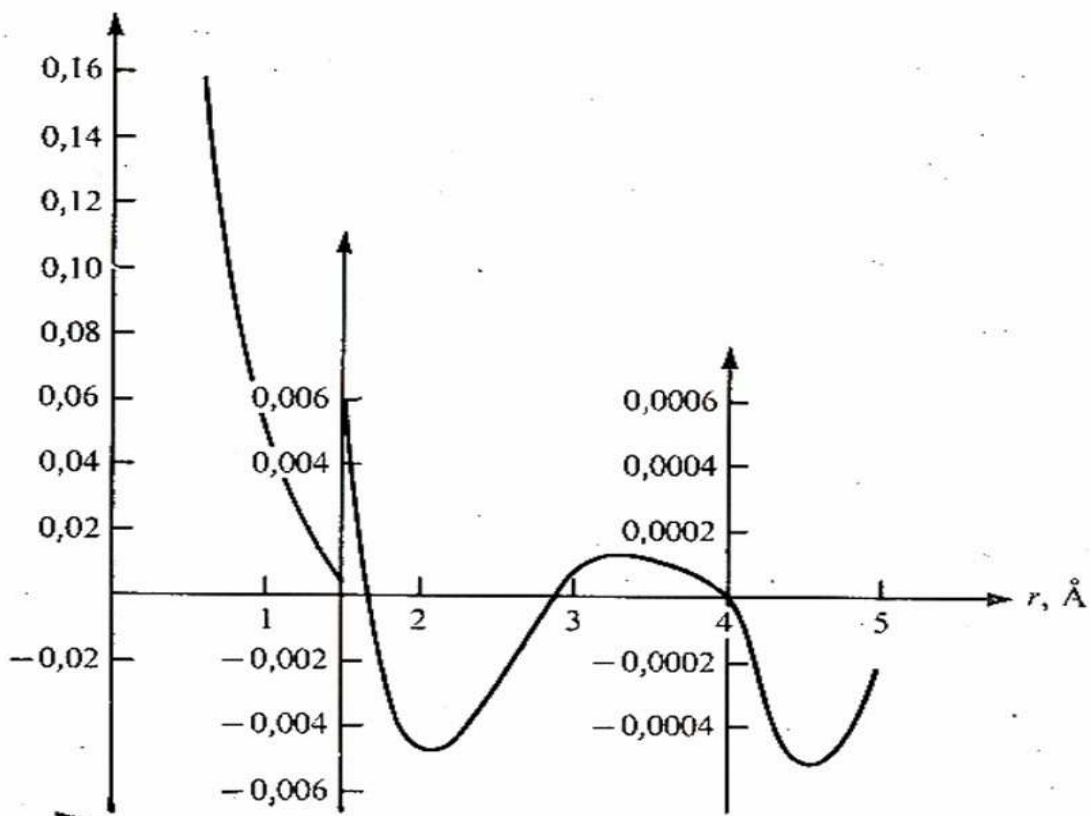
$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \chi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} &= \frac{3g^2 \mu_B^2 (N/V)}{8\epsilon_F} \frac{1}{2\pi^2 r} \int dk k F\left(\frac{k}{2k_F}\right) \sin(kr) = \\ &= \frac{3g^2 \mu_B^2 (N/V)}{8\epsilon_F} \frac{k_F^3}{16\pi} \left\{ \frac{\sin(2k_F r) - 2k_F r \cos(2k_F r)}{(k_F r)^4} \right\}. \end{aligned} \quad (2.2.10)$$

Część tego wyrażenia występująca w nawiasie klamrowym jest wykreślona na rysunku 2.2.1.

Widzimy więc, że po wprowadzeniu momentu zlokalizowanego do metalu spiny elektronów przewodnictwa wytwarzają w pobliżu tego momentu oscylującą polaryzację spinową.

Jeżeli drugi zlokalizowany spin \mathbf{S}_β usytuowany jest w punkcie \mathbf{r} , to oddziałuje on z tą indukowaną gęstością spinową, co prowadzi do efektywnego oddziaływania między zlokalizowanymi spinami. A zatem podstawiając (2.2.5) do (2.2.1) otrzymujemy [7]

$$H_{\text{RKKY}} = -\frac{J^2}{g^2 \mu_B^2 V} \sum_{\mathbf{k}} \chi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{S}_\alpha \mathbf{S}_\beta. \quad (2.2.11)$$



Rys. 2.2.1. Gęstość spinowa elektronów przewodnictwa wytworzona przez spin domieszki w ośrodku metalicznym.

Oddziaływanie to objawia się na wiele sposobów. Ruderman i Kittel pokazali, że prowadzi ono do poszerzenia linii absorpcyjnej w jądrowym rezonansie magnetycznym. Oddziaływanie to jest także źródłem sprzężenia między zlokalizowanymi momentami w metalach ziem rzadkich. Ponieważ oddziaływanie to zależy od gęstości elektronów przewodnictwa poprzez zależność od pędu Fermiego, powinna być zatem możliwa ciągła zmiana uporządkowania magnetycznego poprzez zmianę składu stopu. Efekt ten był rzeczywiście obserwowany poprzez domieszkowanie ferromagnetycznego półprzewodnika EuSe gadolinem i lantanem. Zastąpienie każdego jonu Eu^{2+} jonem Gd^{3+} lub La^{3+} prowadzi do wzrostu liczby elektronów przewodnictwa o jeden. Oprócz silnego wzrostu przewodnictwa, także paramagnetyczna temperatura Curie wzrasta nawet aż do temperatury pokojowej. Podobne zjawiska możemy obserwować w domieszkowanym manganem arsenku galu (Ga, MnAs).

2.3. Metoda $\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}$

Metoda, która zostanie opisana w tym podrozdziale, jest jednym z najważniejszych elementów teorii opisujących strukturę pasm energetycznych i oddziaływania pomiędzy swobodnymi nośnikami a zlokalizowanymi momentami magnetycznymi w półprzewodnikach ferromagnetycznych. Wiele doświadczeń potwierdziło, że metoda $\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}$ bardzo dobrze sprawdza się w badaniach związków o strukturze diamentu lub blendy cynkowej (interesujący nas $(\text{Ga}, \text{Mn})\text{As}$ posiada właśnie strukturę blendy cynkowej). Z tego też powodu cały rachunek przeprowadzony w tej pracy utrzymany jest w konwencji metody $\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}$.

Metoda $\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}$ była początkowo stosowana z powodzeniem do badania metodami teorii zaburzeń struktury pasm energetycznych w otoczeniu pewnych wybranych symetrycznych punktów w przestrzeni \mathbf{k} . W tej postaci, wynikającej bezpośrednio z blochowskiego charakteru funkcji falowej, stosowano ją w pewnych przypadkach już na początku rozwoju teorii pasmowej. Metoda ta została rozwinięta przez Shockley'a dla pasm zdegenerowanych, a Dresselhaus, Kip, Kittel i Kane włączyli do rozważań oddziaływanie spin – orbita. Pokazali oni również, że przybliżenie $\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}$ może być wykorzystane jako metoda empiryczna do określenia struktury pasmowej. W połączeniu z uwzględnieniem własności symetrii można metodą $\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}$ ustalić strukturę pasmową w otoczeniu dowolnego punktu w przestrzeni \mathbf{k} , używając niewielkiej liczby parametrów, które dostatecznie dokładnie można określić doświadczalnie (zabronione przerwy energetyczne, masy efektywne). Takie rachunki można przeprowadzać dla dowolnego punktu w przestrzeni wektora falowego, jednakże najwygodniej jest to robić dla symetrycznych punktów strefy Brillouina. To właśnie z tych względów metodę $\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}$ można określać jako metodę empiryczną [6, 8].

W przybliżeniu jednoelektronowym funkcje własne równania Schrödingera

$$H\psi \equiv \left\{ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) \right\} \psi = \varepsilon\psi \quad (2.3.1)$$

są jednoelektronowymi funkcjami Blocha

$$\psi = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.3.2)$$

gdzie $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ jest operatorem pędu, $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ jest funkcją periodyczną, zmieniającą się w granicach wektora falowego \mathbf{k} , a n wskazuje numer pasma energetycznego. Podstawiając funkcję (2.3.2) do (2.3.1) dochodzimy do równania na modulującą funkcję $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

$$H_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \equiv \left\{ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}) \right\} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.3.3)$$

Człon $\frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \hat{\mathbf{p}}$ w hamiltonianie $H_{\mathbf{k}}$ (2.3.3), którego nie ma w hamiltonianie (2.3.1), można formalnie rozpatrywać jako potencjał zaburzający, oczywiście tylko dla małych $\varepsilon_n(\mathbf{k})$. Nazywa się go zaburzeniem $\mathbf{k} \hat{\mathbf{p}}$. Pojawienie się tego członu nie jest związane z żadnym fizycznym, realnym potencjałem, ale wynika jedynie z przejścia od równania na funkcję $\psi_{n\mathbf{k}}$ do równania na funkcję $u_{n\mathbf{k}}$ [6, 16].

Rozwiązania równania (2.3.3) szuka się rozkładając $u_{n\mathbf{k}}$ na pewien zupełny układ funkcji. Ponieważ dla danego \mathbf{k} zbiór $u_{n\mathbf{k}}$ tworzy układ zupełny w przestrzeni funkcji periodycznych z okresem sieci, to wybierając $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ można rozłożyć $u_{n\mathbf{k}}$ dla dowolnego \mathbf{k} na funkcje dla $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$:

$$u_{n\mathbf{k}} = \sum_{n'} A_{nn'}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}). \quad (2.3.4)$$

Jest to tzw. \mathbf{k}_0 - reprezentacja. Wydzielając w hamiltonianie $H_{\mathbf{k}}$ część $H_{\mathbf{k}_0}$ można równanie (2.3.3) zapisać w postaci

$$\left\{ H_{\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar}{m_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2 (k^2 - k_0^2)}{2m_0} \right\} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_n(\mathbf{r}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.3.5)$$

gdzie

$$H_{\mathbf{k}_0} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k}_0 \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_0} + U(\mathbf{r}). \quad (2.3.6)$$

Podstawiając rozkład (2.3.4) do (2.3.5), mnożąc lewą stronę (2.3.5) przez $u_{n\mathbf{k}_0}$ i całkując po objętości komórki elementarnej dochodzimy do układu równań algebraicznych, z którego można znaleźć wartości własne:

$$\sum_{n'} \left\{ \left[\varepsilon_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_0} (k^2 - k_0^2) \right] \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \hat{\mathbf{p}}_{nn'}(\mathbf{k}_0) \right\} A_{nn'} = \varepsilon_n(\mathbf{k}) A_{nn'}, \quad (2.3.7)$$

gdzie

$$\hat{\mathbf{p}}_{nn'}(\mathbf{k}_0) = \langle u_{n\mathbf{k}_0} | \hat{\mathbf{p}} | u_{n'\mathbf{k}_0} \rangle = \int_{\Omega_0} u_{n\mathbf{k}_0}^* \hat{\mathbf{p}} u_{n'\mathbf{k}_0} \mathbf{d}\mathbf{r} \quad (2.3.8)$$

jest elementem macierzowym operatora pędu dla punktu $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$. Aby otrzymać równanie (2.3.7), trzeba wziąć pod uwagę, że funkcje u są ortogonalne i unormowane w komórce elementarnej, tzn.

$$\int_{\Omega_0} u_{n\mathbf{k}_0}^* u_{n'\mathbf{k}_0} \mathbf{d}\mathbf{r} = \delta_{nn'}.$$

Układ (2.3.7) jest rozwiązywalny, jeżeli jego wyznacznik równa się zeru:

$$\det \left| \left[\varepsilon_n(\mathbf{k}_0) - \varepsilon_n(\mathbf{k}) + \frac{\hbar^2}{2m_0} (k^2 - k_0^2) \right] \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \hat{\mathbf{p}}_{nn'}(\mathbf{k}_0) \right| = 0. \quad (2.3.9)$$

Równanie sekularne (2.3.9) może służyć do określenia wartości własnych $\varepsilon_n(\mathbf{k})$. Aby znaleźć zależność $\varepsilon_n(\mathbf{k})$, trzeba znać energie i elementy macierzowe wszystkich pasm energetycznych dla dowolnego jednego wektora falowego $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, tzn. należy mieć określone $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ i $\hat{\mathbf{p}}_{nn'}(\mathbf{k}_0)$. Wielkości te jesteśmy zmuszeni brać z danych doświadczalnych i dlatego metoda $\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}$ jest metodą empiryczną.

Równanie (2.3.7) jest prawdziwe dla dowolnego wektora \mathbf{k} , jednakże najbardziej użyteczne jest ono przy obliczeniach kształtu pasm energetycznych w bezpośrednim otoczeniu punktu \mathbf{k}_0 . Jeżeli $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ jest dostatecznie małą wielkością, to operator $\frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)\hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2}{2m_0}(k^2 - k_0^2)$ w (2.3.5) można rozpatrywać jako małe zaburzenie operatora $H_{\mathbf{k}_0}$ i odpowiednio człony

$$\frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)\hat{\mathbf{p}}_{nn'} + \frac{\hbar^2}{2m_0}(k^2 - k_0^2)$$

w (2.3.7) jako małe poprawki do energii $\varepsilon_n(\mathbf{k}_0)$.

Dla jednego izolowanego pasma energetycznego zależność energii od wektora falowego w otoczeniu punktu \mathbf{k}_0 można otrzymać z (2.3.7) za pomocą zwykłej teorii zaburzeń [14, 16]. W drugim rzędzie rachunku zaburzeń dostajemy

$$\begin{aligned} \varepsilon_n(\mathbf{k}) = & \varepsilon_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)\hat{\mathbf{p}}_{nn'} + \frac{\hbar^2}{2m_0}(k^2 - k_0^2) + \\ & + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{n' \neq n} \frac{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)\hat{\mathbf{p}}_{nn'}(\mathbf{k}_0)(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)\hat{\mathbf{p}}_{n'n}(\mathbf{k}_0)}{\varepsilon_n(\mathbf{k}_0) - \varepsilon_{n'}(\mathbf{k}_0)}. \end{aligned} \quad (2.3.10)$$

Jeżeli w punkcie \mathbf{k}_0 istnieje ekstremum, to z warunku $(\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_n)_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} = 0$ mamy

$$\hat{\mathbf{p}}_{nn}(\mathbf{k}_0) + \hbar\mathbf{k}_0 = 0. \quad (2.3.11)$$

Wykorzystując związek (2.3.11) dostajemy z (2.3.10) wyrażenie na energię w pobliżu ekstremalnego punktu \mathbf{k}_0 :

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha, \beta=1}^3 \left(\frac{1}{m_{\alpha\beta}} \right)_n (k_\alpha - k_{0\alpha})(k_\beta - k_{0\beta}), \quad (2.3.12)$$

gdzie wielkości $\left(m_{\alpha\beta}^{-1} \right)_n$ są określone związkiem

$$\left(\frac{1}{m_{\alpha\beta}} \right)_n = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{m_0} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{n' \neq n} \frac{\hat{p}_{nn'}^\alpha(\mathbf{k}_0) \hat{p}_{n'n}^\beta(\mathbf{k}_0)}{\varepsilon_n(\mathbf{k}_0) - \varepsilon_{n'}(\mathbf{k}_0)}, \quad (2.3.13)$$

a $\hat{p}_{nn'}^\alpha(\mathbf{k}_0)$ jest składową α wektora $\hat{\mathbf{p}}_{nn'}^\alpha(\mathbf{k}_0)$ (wskaźniki α i β oznaczają współrzędne x, y, z).

Prawo dyspersji $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ w pobliżu ekstremalnego punktu \mathbf{k}_0 w pojedynczym niezdegenerowanym i izotropowym pasmie

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2}{2m} \quad (2.3.12a)$$

jest określone jednym parametrem – masą efektywną m .

Z równania (2.3.13) wynika, że odchylenie wielkości masy efektywnej m od masy swobodnego elektronu jest całkowicie określone przez człon $\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}$ hamiltonianu. Drugi składnik prawej strony (2.3.13) pokazuje, że różnica pomiędzy efektywną masą w n – tym pasmie energetycznym m_n a masą m_0 jest uwarunkowana istnieniem innych pasm. Można powiedzieć umownie, że różnica pomiędzy m_n a m_0 jest spowodowana oddziaływaniem między pasmami. To oddziaływanie jest określone elementami macierzowymi operatora pędu $\hat{\mathbf{p}}_{nn'}(\mathbf{k}_0)$ i odstępami energetycznymi między pasmami $\varepsilon_n(\mathbf{k}_0) - \varepsilon_{n'}(\mathbf{k}_0)$ w punkcie \mathbf{k}_0 . Fizyczna przyczyna różnicy pomiędzy m_n i m_0 leży w realnym oddziaływaniu elektronu z potencjałem krystalicznym. Oddziaływanie zaś stanów jest następstwem wybranej metody przybliżonego rozwiązywania problemu, która pozwala otrzymać analityczne wyrażenie na kształt pasm energetycznych w pobliżu punktów ekstremalnych [5, 6, 9].

Jak wiadomo, problem znajdowania wartości własnych operatora sprowadza się do problemu diagonalizacji macierzy tego operatora. Diagonalizację hamiltonianu H w zwykłej teorii zaburzeń przeprowadza się metodą kolejnych przybliżeń, którą to metodę stosuje się, gdy wszystkie nediagonalne elementy macierzowe H_{ij} są małe w porównaniu z odpowiednimi różnicami energii poziomów niezaburzonych $\varepsilon_i - \varepsilon_j$. W wielu przypadkach tak nie jest. Część nediagonalnych elementów macierzowych jest duża, a zatem wynika z tego, że pasma leżą blisko siebie. Wygodnie jest wówczas

posługiwać się metodą teorii zaburzeń w postaci zaproponowanej przez Löwdina. W metodzie tej zakłada się, że wszystkie stany można rozdzielić na dwie grupy – A i B . Stany grupy A mogą silnie oddziaływać między sobą, ale słabo ze stanami grupy B . Wynika z tego, że stany A i B są od siebie odległe na skali energii. Podobnie jak w zwykłej teorii zaburzeń, oddziaływania wiążące stany A i B usuwa się za pomocą procedury iteracyjnej, co powoduje zmianę elementów macierzowych oddziaływania między stanami w A . Następnie przekształconą w ten sposób macierz oddziaływania diagonalizuje się ściśle. Löwdin pokazał, że nowe elementy macierzowe H_{ij} wiążą się z wyjściowym H_{ij}^0 za pomocą równania [6]

$$H_{ij} = H_{ij}^0 + \sum_{\beta} \frac{H_{i\beta}^0 H_{\beta j}^0}{\epsilon_i - H_{\beta\beta}^0}, \quad (i, j \in A, \beta \in B). \quad (2.3.14)$$

Przedstawiając zaburzoną funkcję falową dla i -tego stanu ψ_i w postaci rozkładu na funkcje niezaburzone

$$\psi_i = \sum_j^{A,B} a_{ij} \psi_j^0, \quad (2.3.15)$$

dostajemy układ równań

$$\sum_j^A (H_{ij} - \epsilon_i \delta_{ij}) a_{ij} = 0, \quad (i, j \in A), \quad (2.3.16)$$

który pozwala określić wartość własną ϵ_i i -tego stanu i współczynniki a_{ij} dla niezaburzonych stanów i, j w grupie A .

Jeżeli stany i należą do grupy A , a stany k do grupy B , to współczynniki a_{ki} wyrażają się przez współczynniki a_{ji} ($i, j \in A$) w następujący sposób:

$$a_{ki} = \sum_j^A \frac{H_{kj}^0}{\epsilon_i - H_{kk}^0} a_{ji}, \quad (i, j \in A, k \in B). \quad (2.3.17)$$

Wartość własną ε_i w wyrażeniach (2.3.14) i (2.3.16) zwykle można zastąpić niezaburzoną wartością H_{ii}^0 .

Zbieżność metody Löwdina jest dobra, jeżeli spełniony jest warunek

$$|H_{ij}| \ll |\varepsilon_i^0 - \varepsilon_j^0|, \quad (i \in A, j \in B). \quad (2.3.18)$$

Grupę stanów A wybiera się w ten sposób, aby ten warunek był spełniony. Na przykład, jeżeli pewne stany są zdegenerowane ze względu na symetrię, to łączy się je w grupę A . Różne pasma energetyczne są zazwyczaj oddalone od siebie w dowolnym punkcie \mathbf{k}_0 średnio o 3 – 5 eV lub więcej. Jeśli mamy pasma, między którymi odległość jest o wiele mniejsza od 3 eV, to można połączyć je w grupę A i badać w otoczeniu punktu \mathbf{k}_0 metodą Löwdina, rozpatrując człon $\frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)\hat{\mathbf{p}}_{nn}$ w (2.3.7) jako zaburzenie.

Obliczanie struktury pasmowej metodą $\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}$ pozwala na bezpośrednie uwzględnienie oddziaływania spin – orbita, odgrywającego ważną rolę w wielu materiałach półprzewodnikowych z uwagi na małą koncentrację nośników. Oddziaływanie to jest bardzo słabe dla lekkich pierwiastków, ale szybko rośnie przy przejściu do ciężkich. Mała wartość energii oddziaływania spin – orbita w lżejszych pierwiastkach w porównaniu ze średnią wielkością wzbronionych przerw energetycznych (rzędu 3 – 5 eV) pozwala zwykle na traktowanie tego oddziaływania jako zaburzenia [6, 16]. Uwzględnienie oddziaływania spin – orbita, tzn. dodanie do hamiltonianu z równania (2.3.1) członu H_{SO} prowadzi do pojawienia się w równaniu (2.3.5) na $u_{n\mathbf{k}_0}$ dwóch nowych składników

$$H_1 = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\nabla U \times \hat{\mathbf{p}})\hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (2.3.19)$$

oraz

$$H_2 = \frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}(\nabla U \times \mathbf{k})\hat{\boldsymbol{\sigma}}. \quad (2.3.20)$$

W postaci $H_{SO} = H_1 + H_2$ jest to operator działający tylko na modulującą funkcję $u_{\mathbf{k}}$.

Dla lekkich pierwiastków (węgiel, krzem) zależne od spinu człony $H_1 + H_2$ można traktować (podobnie jak niezależny od spinu człon $\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}$) jako zaburzenie. Wspólny operator zaburzenia ma w takim razie postać

$$H' = H_{\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}} + H_{SO} \equiv \frac{\hbar}{m_0} \left\{ \mathbf{k}\hat{\mathbf{p}} + \frac{1}{4m_0c^2} [\nabla U \times (\hat{\mathbf{p}} + \hbar\mathbf{k})] \hat{\boldsymbol{\sigma}} \right\}. \quad (2.3.21)$$

Wyrażenie (2.3.19) na H_1 jest analogiczne do atomowego członu oddziaływania spin – orbita. W (2.3.20) proporcjonalny do \mathbf{k} człon H_2 reprezentuje dodatkową energię oddziaływania spin – orbita wywodzącą się z właściwości ruchu elektronu w periodycznym polu kryształu, a dokładniej – pochodzącą od pseudopędu $\hbar\mathbf{k}$. Okazuje się, że H_2 jest znacznie mniejsze od H_1 , ponieważ pseudopęd $|\hbar\mathbf{k}|$ jest bardzo mały w porównaniu ze średnim pędem elektronu

$$|\bar{\mathbf{p}}| = \langle u_{\mathbf{k}}^* | \hat{\mathbf{p}} | u_{\mathbf{k}} \rangle \sim \frac{\hbar}{a}$$

(a – stała sieci) w obszarze rdzenia, gdzie oddziaływanie spin – orbita odgrywa największą rolę (bowiem im bliżej jądra tym $\nabla U(\mathbf{r})$ jest większy). Ponieważ w pobliżu jądra wkład od H_1 przewyższa wkład od H_2 , to stosunek H_2 i H_1 jest tym mniejszy, im cięższy jest atom. Dla ciężkich atomów, dla których wielkość H_1 nie jest mała, a zatem nie może być rozpatrywana jako zaburzenie, włącza się ją do części zerowej hamiltonianu, dodając H_1 do $H_{\mathbf{k}_0}$ (2.3.6), a H_2 uważa się za zaburzenie, podobnie jak $H_{\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}}$. Operator zaburzenia ma wówczas postać

$$H' = H_{\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}} + H_2 = \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \hat{\boldsymbol{\pi}}, \quad (2.3.22)$$

gdzie $\hat{\boldsymbol{\pi}}$ jest operatorem wyrażanym wzorem

$$\hat{\boldsymbol{\pi}} = \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{4m_0c^2} (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \nabla U). \quad (2.3.23)$$

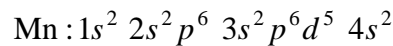
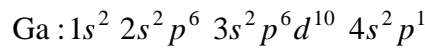
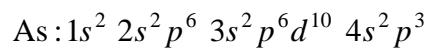
Metoda $\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}$ okazała się bardzo owocna w obliczeniach struktury pasmowej kryształów o symetrii diamentu i blendy cynkowej, gdzie była stosowana nie w jednopasmowym, ale dwupasmowym (lub nawet trójpasmowym) przybliżeniu [6, 8].

W wielu półprzewodnikach IV grupy, związkach pierwiastków grup III i V oraz II i VI, odległość między pasmami przewodnictwa i walencyjnym jest dostatecznie mała (~ 1 eV), aby te stany można było połączyć według metody Löwdina w grupę A , a wszystkie bardziej oddalone energetycznie stany – w grupę B . Innymi słowy, oddziaływanie między pasmami przewodnictwa i walencyjnym (oddziaływanie $\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}$ i niezależne od \mathbf{k} oddziaływanie spin – orbita H_1) rozpatruje się ściśle. Oddziaływanie pasm energetycznych A z wyższymi i niższymi pasmami B uważa się za zaburzenie, które uwzględnia się w najniższym rzędzie rachunku zaburzeń.

3. Definicja hamiltonianu

Celem tego rozdziału jest przedstawienie hamiltonianu dla dziur w kryształach o strukturze blendy cynkowej, który oprócz członu kp i członu naprężeń, zawierałby również człon odpowiedzialny za oddziaływanie wymienne pomiędzy swobodnymi nośnikami, a zlokalizowanymi momentami magnetycznymi w przybliżeniu pola molekularnego.

Wiadomo, że konfiguracje elektronowe pierwiastków wchodzących w skład badanego tu kryształu arsenku galu domieszkowanego manganem są następujące:



Zatem pasmo walencyjne tworzą stany elektronów znajdujących się na powłokach $4p$ i $4s$. Dzieje się tak, gdyż stany te mieszają się ze sobą, ponieważ leżą bardzo blisko siebie na skali energii. Jednak główny wkład przy tworzeniu pasma walencyjnego mają stany elektronów z powłoki $4p$, ponieważ elektrony z powłoki $4s$ obsadzają niższe poziomy energetyczne. Natomiast pasmo przewodzenia tworzą stany elektronów znajdujących się na powłokach $5s$.

3.1. Hamiltonian $k\hat{p}$

Na podstawie teorii grup można stwierdzić, że stany elektronowe w środku strefy Brillouina klasyfikują się według odpowiednich reprezentacji. Ze względu na symetrię badanego kryształu, interesujące dla nas są reprezentacje Γ_1 i Γ_{15} [8]. Γ_1 jest reprezentacją w pełni symetryczną ze względu na wszystkie operacje grupy symetrii, dlatego też może być „utożsamiana” (w modelu LCAO – Linear Combination of Atomic Orbitals) ze stanami atomowymi typu s . Natomiast trójwymiarowa

reprezentacja Γ_{15} rozpiną funkcje falowe transformujące się tak jak funkcje: x, y, z , czyli tak jak orbitale p_x, p_y, p_z . Dlatego można twierdzić, że stany elektronowe znajdujące się w punkcie Γ strefy Brillouina, sklasyfikowane jako Γ_{15} , są „utożsamiane” ze stanami atomowymi typu p (w sensie LCAO). Ze względu na to, że w rozważaniach interesują nas stany dziurowe z pasma walencyjnego, a nie stany elektronowe z pasma przewodnictwa oraz przerwa energetyczna pomiędzy tymi pasmami jest duża i wynosi $E_g = 1,52$ eV, możemy zignorować wpływ pasma przewodnictwa na stany dziurowe. Dzięki temu nasz model zawęża się do modelu trzech pasm Γ_{15} .

Ponieważ istotne jest tu uwzględnienie oddziaływania spinowo – orbitalnego, które ma w naszym przypadku znaczący wpływ na stan układu ($\Delta = 0,34$ eV), nie można zignorować tutaj spinu elektronów. Zatem uwzględniając spiny elektronów, nasza trójwymiarowa baza Γ_{15} staje się sześciowymiarowa, redukowalna ze względu na operacje podwójnej grupy symetrii kryształu. Reprezentacja Γ_{15} redukuje się więc do dwuwymiarowej reprezentacji Γ_7 i czterowymiarowej reprezentacji Γ_8 . W pewnym przybliżeniu, poprzez analogię do stanów atomowych, można uważać, że Γ_7 odpowiadają stany z $j = \frac{1}{2}$, natomiast Γ_8 stany z $j = \frac{3}{2}$. Bazą dla reprezentacji Γ_7 i Γ_8 są następujące funkcje [4, 10]:

$$\begin{aligned} \Gamma_8\left(j_z = -\frac{1}{2}\right): u_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iY)\uparrow, \\ \Gamma_8\left(j_z = -\frac{3}{2}\right): u_2 &= i\frac{1}{\sqrt{6}}[(X + iY)\downarrow - 2Z\uparrow], \\ \Gamma_8\left(j_z = \frac{3}{2}\right): u_3 &= \frac{1}{\sqrt{6}}[(X - iY)\uparrow + 2Z\downarrow], \\ \Gamma_8\left(j_z = \frac{1}{2}\right): u_4 &= i\frac{1}{\sqrt{2}}(X - iY)\downarrow, \\ \Gamma_7\left(j_z = \frac{1}{2}\right): u_5 &= \frac{1}{\sqrt{3}}[(X + iY)\downarrow + Z\uparrow], \\ \Gamma_7\left(j_z = -\frac{1}{2}\right): u_6 &= i\frac{1}{\sqrt{3}}[-(X - iY)\uparrow + Z\downarrow], \end{aligned}$$

gdzie X , Y i Z są amplitudami Kohna – Luttingera, które transformują się jak współrzędne x , y i z . Czasami wygodnie jest je interpretować jako funkcje atomowe p_x , p_y i p_z , ale należy mieć na uwadze, że są to z reguły mieszaniny różnych stanów atomowych.

Wykorzystując formalizm Löwdina, przedstawiony w podrozdziale 2.3., łączymy stany Γ_8 i Γ_7 , ze względu na małą wartość czynnika Δ (w porównaniu z wielkością przerwy energetycznej), w grupę stanów A . Natomiast wszystkie pozostałe (odległe energetycznie) stany, w grupę stanów B . Zatem w powyższej bazie, hamiltonian $k p$ przyjmuje postać:

$$H_{kp} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \begin{bmatrix} P+Q & L & M & 0 & iL/\sqrt{2} & -i\sqrt{2}M \\ L^* & P-Q & 0 & M & -i\sqrt{2}Q & i\sqrt{3/2}L \\ M^* & 0 & P-Q & -L & -i\sqrt{3/2}L^* & -i\sqrt{2}Q \\ 0 & M^* & -L^* & P+Q & -iM^* & -iL^*/\sqrt{2} \\ -iL^*/\sqrt{2} & i\sqrt{2}Q & i\sqrt{3/2}L & i\sqrt{2}M & P+\Delta & 0 \\ i\sqrt{2}M^* & -i\sqrt{3/2}L^* & i\sqrt{2}Q & iL/\sqrt{2} & 0 & P+\Delta \end{bmatrix}.$$

Gdzie wyrażenia na P , Q , L , M i Δ są dane w postaci:

$$\begin{aligned} P &= \gamma_1 k^2, \\ Q &= \gamma_2 (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2), \\ L &= -i2\sqrt{3}\gamma_3 (k_x - ik_y)k_z, \\ M &= \sqrt{3}[\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) - i2\gamma_3 k_x k_y], \\ \Delta &= 2m_0 \Delta_0 / \hbar^2. \end{aligned}$$

Natomiast γ_1 , γ_2 oraz γ_3 są zmodyfikowanymi parametrami Luttingera.

Z budowy tego hamiltonianu wynika, że podmacierz o wymiarze 4×4 , z elementami diagonalnymi od $[1,1]$ do $[4,4]$, opisuje stany Γ_8 oraz ich oddziaływanie ze stanami Γ_7 . Natomiast podmacierz 2×2 , o elementach diagonalnych $[5,5]$ i $[6,6]$, opisuje odszczepione na skutek oddziaływania spin – orbita, o czynnik Δ , stany Γ_7 . Pozostałe elementy odpowiedzialne są za opis oddziaływania jakie występuje pomiędzy

stanami Γ_8 i Γ_7 , a sąsiednimi pasmami. co pozwala na wykorzystanie rachunków przeprowadzonych w podrozdziale 2.3. i zastosowanie metody rachunku zaburzeń do obliczeń struktury pasmowej badanego tu kryształu [4, 10, 16].

Powyższy hamiltonian zakłada istnienie symetrii inwersyjnej w układzie. Oznacza to, że nie jest możliwe badanie przy pomocy opisywanej tutaj teorii, efektów wynikający z braku symetrii inwersyjnej. Szczególnie będzie to widoczne w rozdziale 4.1., w którym przedstawimy strukturę pasmową badanego materiału.

3.2. Hamiltonian naprężeń

Jak się okazuje występowanie naprężeń ma znaczny wpływ na strukturę pasmową półprzewodników ferromagnetycznych. Dlatego też wyprowadzając hamiltonian dla stanów dziurowych pasma walencyjnego, w kryształach o strukturze blendy cynkowej, nie można pominąć członu odpowiedzialnego za wpływ naprężeń na badany kryształ. Efekt ten został opisany przez Bira i Pikusa [8, 10], a hamiltonian naprężeń wyprowadzony przez nich ma następującą postać

$$H_{st} = \begin{bmatrix} -p-q & -s & r & 0 & s/\sqrt{2} & -\sqrt{2}r \\ -s^* & -p+q & 0 & r & -\sqrt{2}q & \sqrt{3/2}s \\ r^* & 0 & -p+q & s & \sqrt{3/2}s^* & \sqrt{2}q \\ 0 & r^* & s^* & -p-q & \sqrt{2}r^* & s^*/\sqrt{2} \\ s^*/\sqrt{2} & -\sqrt{2}q & \sqrt{3/2}s & \sqrt{2}r & -ae & 0 \\ -\sqrt{2}r^* & \sqrt{3/2}s^* & \sqrt{2}q & s/\sqrt{2} & 0 & -ae \end{bmatrix}.$$

Gdzie wyrażenia na p , q , r , s i e są dane w postaci:

$$p = a(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}),$$

$$q = b \left[e_{zz} - \frac{1}{2}(e_{xx} + e_{yy}) \right],$$

$$r = \frac{\sqrt{3}}{2} b (e_{xx} - e_{yy}) - i d e_{xy},$$

$$s = -d(e_{xz} - ie_{yz}),$$

$$e = e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}.$$

Natomiast a , b i d są potencjałami deformacyjnymi, a e jest tensorem naprężeń osiowych.

Ponieważ podstawową technologią tworzenia rozważanego tu typu kryształu jest metoda polegająca na bombardowaniu płaskiej powierzchni strumieniem molekuł, tak zwana metoda MBE – Molecular Beam Epitaxy. Dzięki tej metodzie kryształ powstaje stopniowo, poprzez narastanie bardzo cienkich warstw molekuł. W naszym przypadku na płaską powierzchnię są natryskiwane atomy arsenu, galu i manganu, oczywiście w odpowiednich proporcjach, tak żeby mógł powstać kryształ o interesujących nas właściwościach. W wyniku stopniowego nakładania się na siebie bardzo cienkich warstw, w kryształach tym powstają naprężenia biaksjalne (dwuosiowe), występujące tylko w warstwach epitaksjalnych. Zatem przyjmując potencjały deformacyjne a i d , odpowiedzialne odpowiednio za występowanie naprężeń prostopadłych do warstw epitaksjalnych i naprężeń ścinających, za równe zero, możemy łatwo przekształcić hamiltonian naprężeń trójosiowych H_{st} do hamiltonianu naprężeń biaksjalnych, który przyjmuje wówczas następującą postać [4]

$$H_{bs} = b \begin{bmatrix} -q & 0 & r & 0 & 0 & -i\sqrt{2}r \\ 0 & q & 0 & r & i\sqrt{2}q & 0 \\ r & 0 & q & 0 & 0 & i\sqrt{2}q \\ 0 & r & 0 & -q & -i\sqrt{2}r & 0 \\ 0 & -i\sqrt{2}q & 0 & i\sqrt{2}r & 0 & 0 \\ i\sqrt{2}r & 0 & -i\sqrt{2}q & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

W konkretnych obliczeniach przyjęto naprężenie e_{xx} równe 2% i dalej

$$e_{xx} = e_{yy} \text{ i } e_{zz} = -2e_{xx} \frac{c_{12}}{c_{11}},$$

gdzie c_{12} i c_{11} są współczynnikami elastyczności.

3.3. Hamiltonian wymiany $p-d$

Podczas wytwarzania badanego tu krysztalu (Ga, Mn)As metoda MBE, jony manganowe zostaja losowo porzrucane po sieci krystalicznej. Jest to slabo domieszkowany polprzewodnik, poniewaz na 100 jonow galu przypada jedynie 5 jonow manganu. Jednak tak slabe domieszkowanie w znacacy sposob wplywa na wlascosci calego krysztalu, poniewaz momenty magnetyczne zwiazane z jonami manganu silnie oddzialuja z momentami magnetycznymi zwiazanymi z jonami galu i arsenu. Jest to posrednie oddzialywanie wymienne, poniewaz momenty te oddzialuja ze soba za pomoca niezlokalizowanych nošnikow (w naszym przypadku sa to dziury). Oddzialywanie to zachodzi pomiedzy elektronami znajdujacymi sie na powlokach $3d$ jonow manganu, a elektronami znajdujacymi sie na powlokach $4p$ jonow arsenu i galu [4, 10, 13, 17]. Hamiltonian tego oddzialywania zostal wyprowadzony przez Dietla w przyblizeniu pola molekularnego pochodzacego od jonow manganu. Usrednienie to polega na tym, iz przyjmujemy, ze wklad momentu magnetycznego pochodzacego od manganu do momentow magnetycznych galu i arsenu, w kazdym wuzle sieci, wynosi 5 %. Postać hamiltonianu $p-d$ jest przedstawiona za pomoca nastepujacego wyrazenia

$$H_{pd} = B_G \begin{bmatrix} 3b_x w_z & i\sqrt{3}b_x w_- & 0 & \dots \\ -i\sqrt{3}b_x w_+ & (2b_z - b_x)w_z & 2ib_z w_- & \dots \\ 0 & -2ib_z w_+ & -(2b_z - b_x)w_z & \dots \\ 0 & 0 & -i\sqrt{3}b_x w_+ & \dots \\ \sqrt{6}b_x w_+ & -i\sqrt{2}(b_x + b_z)w_z & \sqrt{2}b_z w_- & \dots \\ 0 & -\sqrt{2}b_z w_+ & i\sqrt{2}(b_x + b_z)w_z & \dots \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \dots & 0 & \sqrt{6}b_x w_- & 0 \\ \dots & 0 & i\sqrt{2}(b_x + b_z)w_z & -\sqrt{2}b_z w_- \\ \dots & i\sqrt{3}b_x w_- & \sqrt{2}b_z w_+ & -i\sqrt{2}(b_x + b_z)w_z \\ \dots & -3b_x w_z & 0 & -\sqrt{6}b_x w_+ \\ \dots & 0 & -(2b_x - b_z)w_z & ib_z w_- \\ \dots & -\sqrt{6}b_x w_- & -ib_z w_+ & (2b_x - b_z)w_z \end{bmatrix}.$$

Gdzie B_G , w_z , w_{\pm} , b_z oraz b_x sa dane w postaci:

$$B_G = \beta M / 6g\mu_B,$$

$$w_z = M_z/M,$$

$$w_{\pm} = (M_x \pm iM_y)/M,$$

$$b_z = \beta_z/\beta,$$

$$b_x = \beta_x/\beta,$$

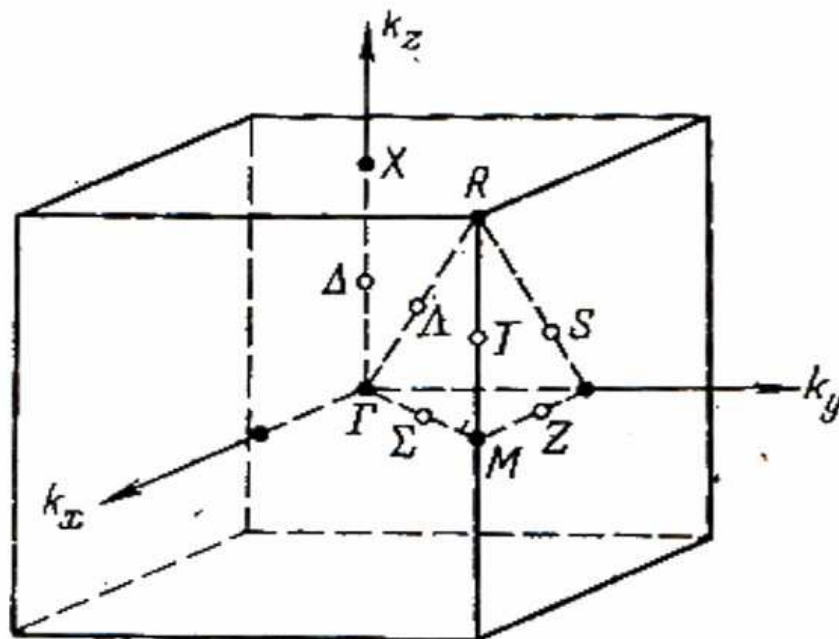
ale w materiałach o strukturze sześcienniej $b_z = b_x = 1$. Natomiast β jest całkowitą wymianą $p-d$, a magnetyzację oznaczono jako M .

W obliczeniach została użyta wartość $B_G = -0,03$ eV, co odpowiada magnetyzacji nasycenia dla $x = 0,05$, przy oznaczeniu $(\text{Ga}_{1-x}, \text{Mn}_x)\text{As}$.

4. Obliczenia numeryczne.

Celem pierwszej części tego rozdziału jest wyznaczenie struktury pasmowej badanego materiału. Przedstawione zostaną tutaj zależności energii od wektora falowego w kierunkach wysokiej symetrii w strefie Brillouina (kierunki Δ , Λ , Σ patrz rys. 4.1) oraz powierzchnie Fermiego.

W drugiej części tego rozdziału wyznaczona zostanie temperatura Curie dla badanego ferromagnetyka.



Rys. 4.1. Strefa Brillouina prostej sieci regularnej z wyszczególnionymi charakterystycznymi punktami i kierunkami.

4.1. Struktura pasmowa i powierzchnie Fermiego.

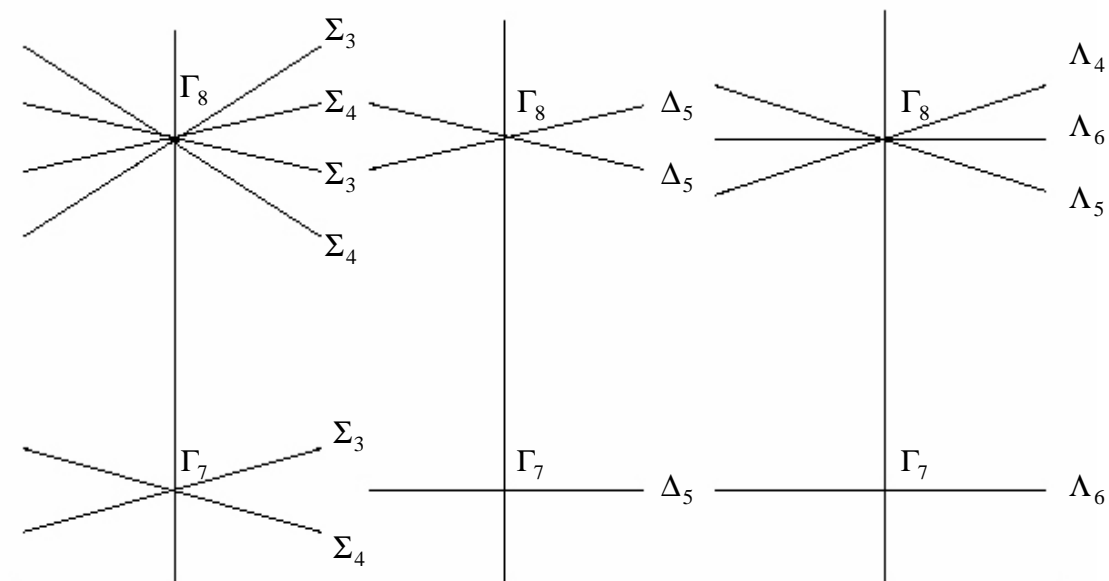
Badając wierzchołek pasma walencyjnego i jego otoczenie w kierunkach charakterystycznych Δ , Σ i Λ oraz im równoważnych, możemy zauważyć, że

magnetyzacja i odkształcenia próbki, mają znaczący wpływ na kształt tego pasma i jego degenerację.

Jak się okazało, w punkcie Γ (czyli w środku strefy Brillouina) reprezentacja stanów Γ_7 , niezależnie od kierunku charakterystycznego, jest zawsze podwójnie zdegenerowana w przypadku braku naprężeń i magnetyzacji. Brak magnetyzacji oznacza brak jonów Mn w kryształach, czyli jest to czysty półprzewodnik. Reprezentacja Γ_8 jest natomiast zdegenerowana poczwórnie, ale po odsunięciu się od środka strefy, niezależnie od kierunku charakterystycznego, zawsze rozdegenerowuje się na dwa, podwójnie zdegenerowane stany (punkt a) na rys. 4.1.2., 4.1.3., 4.1.4.). Po przyłożeniu naprężeń biaksjalnych, reprezentacja Γ_8 rozdegenerowuje się na dwa podwójnie zdegenerowane stany, już w punkcie Γ strefy Brillouina, natomiast reprezentacja Γ_7 zachowuje się bez zmian (punkt c) na rys. 4.1.2., 4.1.3., 4.1.4.). W przypadku wprowadzenia do kryształu domieszek magnetycznych, czyli $M = (0\ 1\ 0)$ i $e_{xx} = 0\%$, obydwie reprezentacje rozdegenerują się całkowicie (punkt b) na rys. 4.1.2., 4.1.3., 4.1.4.). Rozszczepienie to ma charakter zemanowski i zachodzi ze względu na wartość j odpowiadającą danej reprezentacji, co było opisane w podrozdziale 3.1. Wprowadzanie naprężeń biaksjalnych nie zmienia już, w tym momencie, stopnia degeneracji reprezentacji Γ_7 i Γ_8 . Naprężenia wpływają jedynie na kształt pasma i wielkość rozszczepienia stanów niezdegenerowanych (punkt d) na rys. 4.1.2., 4.1.3., 4.1.4.).

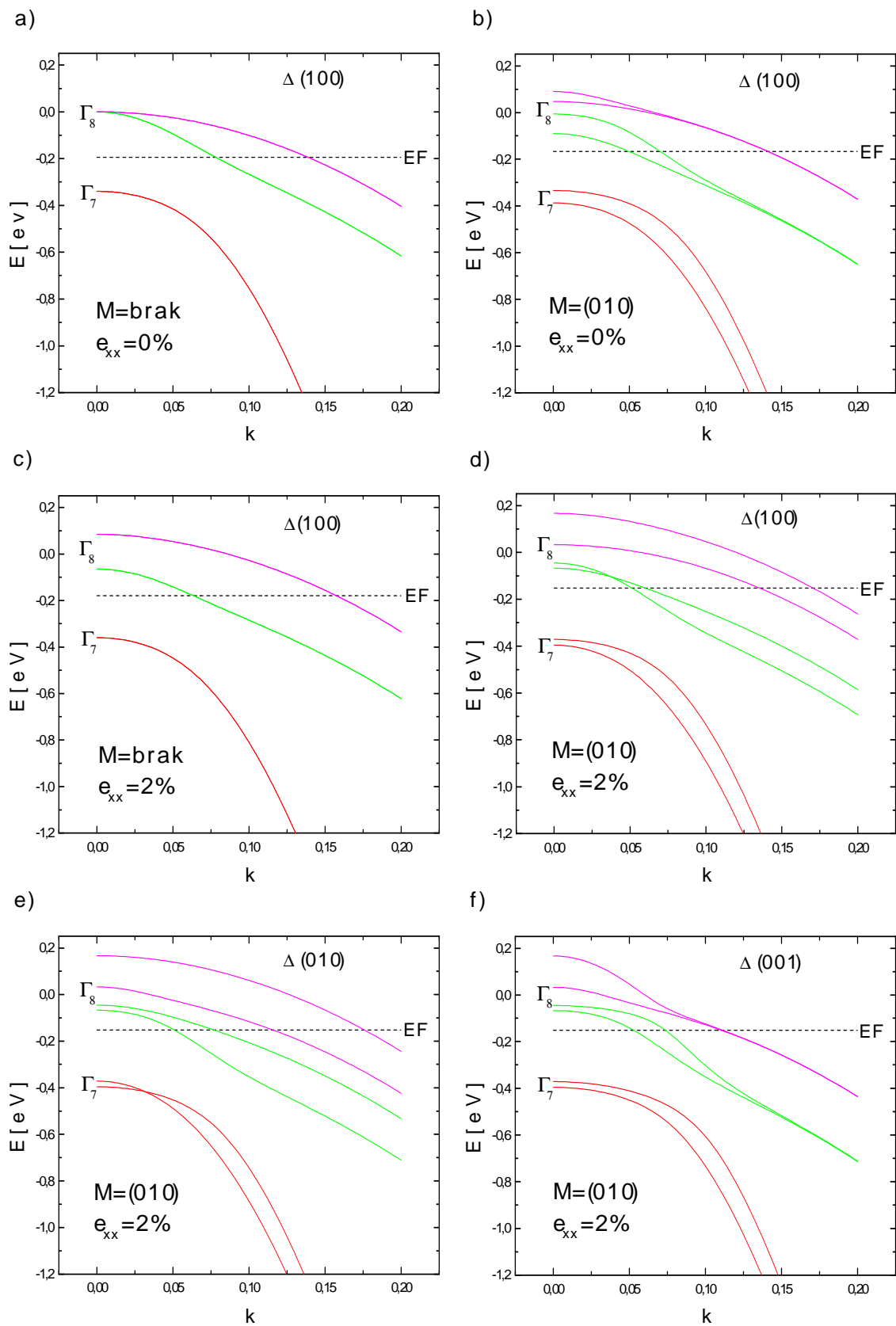
Na wszystkich wykresach magnetyzacja jest ustawiona w kierunku $(0\ 1\ 0)$, ponieważ przy takim położeniu magnetyzacji, energia układu jest optymalna dla naprężeń biaksjalnych $e_{xx} = 2\%$. Dzięki temu możemy obserwować jak zmienia się kształt pasma walencyjnego wzdłuż osi Δ i Σ dla kierunków sobie równoważnych (punkty d), e), f) na rys. 4.1.2., 4.1.3.).

Jak zostało zauważone w rozdziale 3.1., wykorzystywany do obliczeń hamiltonian zakłada istnienie symetrii inwersyjnej, przy czym operacja inwersji nie jest operacją symetrii dla rzeczywistego kryształu arsenku galu. Wpływa to w sposób znaczny na strukturę pasmową. Zgodnie z wnioskami, wynikającymi z teorii grup, kształt pasm wokół punktu Γ powinien być taki, jak przedstawiony na rys. 4.1.1. [4, 6]

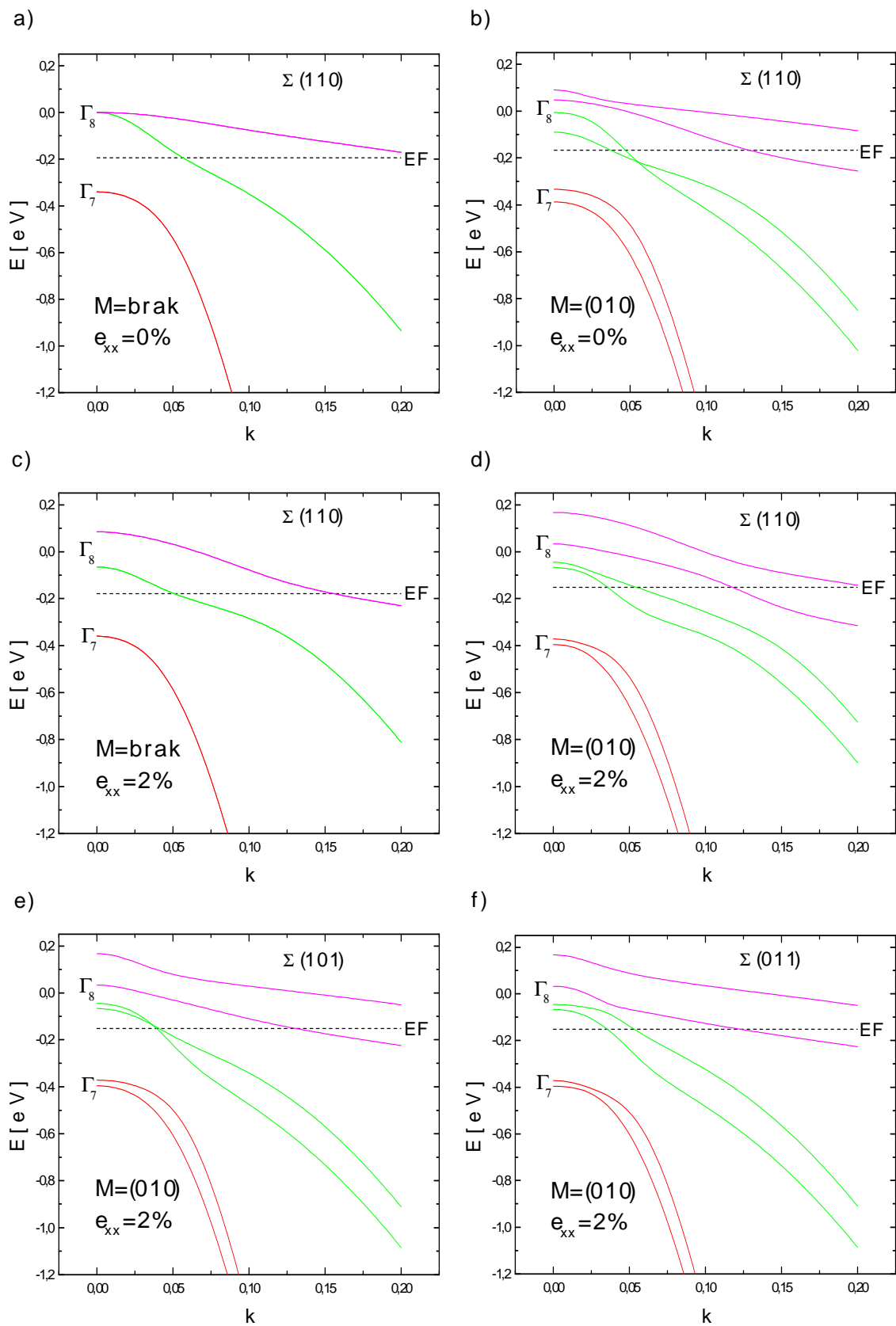


Rys. 4.1.1. Rozszczepienie stanu Γ_{15} ze względu na oddziaływanie spin – orbita, na stany Γ_8 i Γ_7 . Przy oddalaniu się od środka strefy Brillouina stany Γ_8 i Γ_7 przechodzą w stany transformujące się według odpowiednich reprezentacji. Wszystkie reprezentacje Σ są jednowymiarowe, Δ dwuwymiarowe, Λ_6 dwuwymiarowe, Λ_5 i Λ_4 jednowymiarowe.

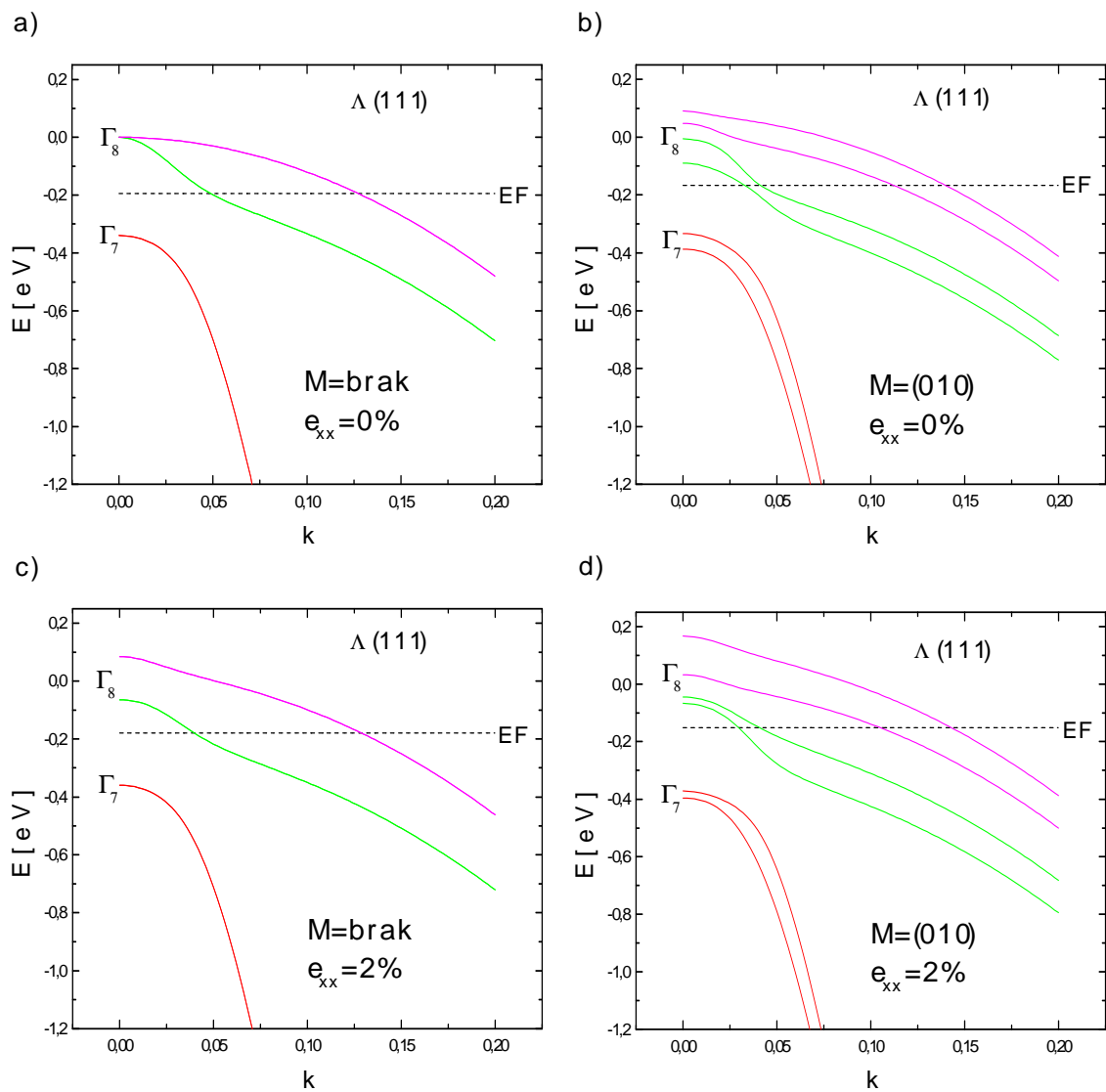
Na rysunkach 4.1.5., 4.1.6., 4.1.7. oraz 4.1.8. przedstawiono powierzchnie Fermiego (jest to zawsze 1/8 powierzchni). Rysunek 4.1.5. przedstawia powierzchnię Fermiego dla zerowej magnetyzacji i braku naprężeń; widać pełną symetrię tetraedryczną (trzy rogi w kierunkach x , y , z). Po wprowadzeniu magnetyzacji powierzchnie rozdegenerowują się, co pokazane jest na rysunku 4.1.6. Natomiast na rysunkach 4.1.7. i 4.1.8. przedstawione są powierzchnie Fermiego zniekształcone przez wprowadzenie naprężeń biaksjalnych. Widać wyraźnie jak obniża się symetria tych powierzchni (rogi tylko w kierunku x i y).



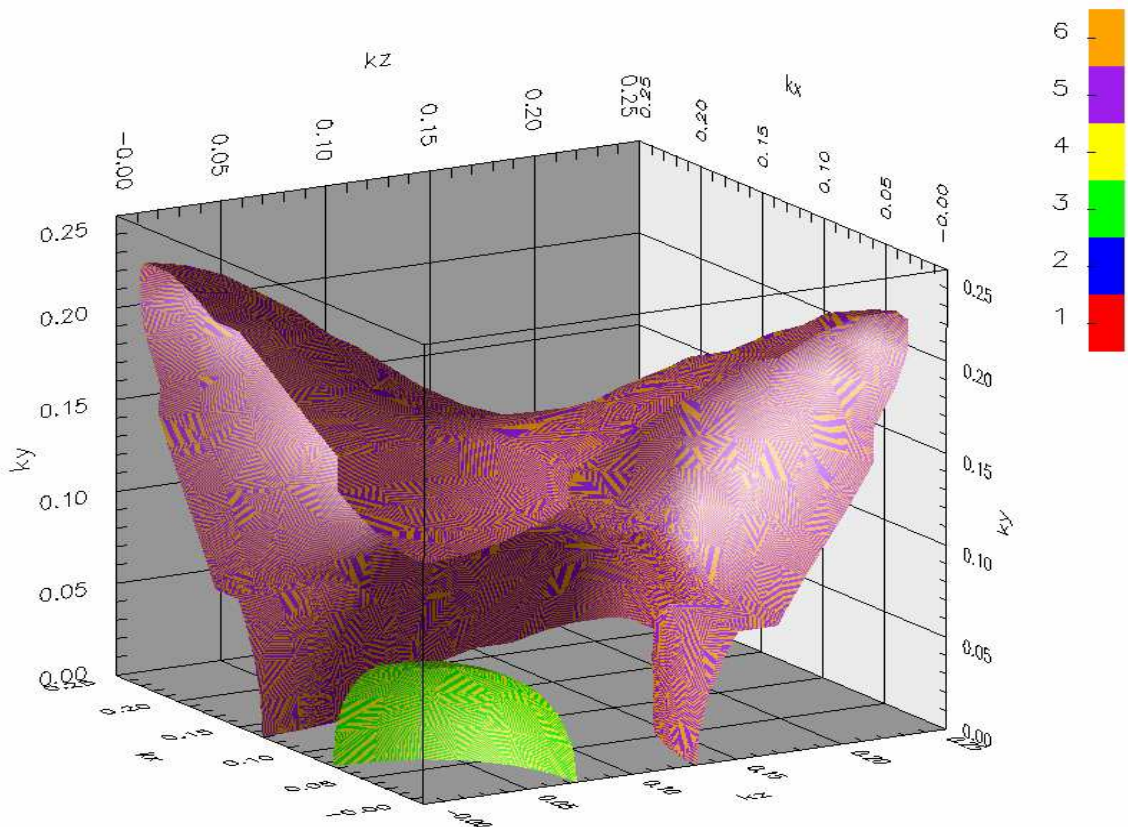
Rys. 4.1.2. Wykresy przedstawiają kształt pasma walencyjnego w otoczeniu punktu Γ strefy Brillouina, w kierunku Δ i jemu równoważnych, przy zadanym kierunku magnetyzacji i wartości naprężenia.



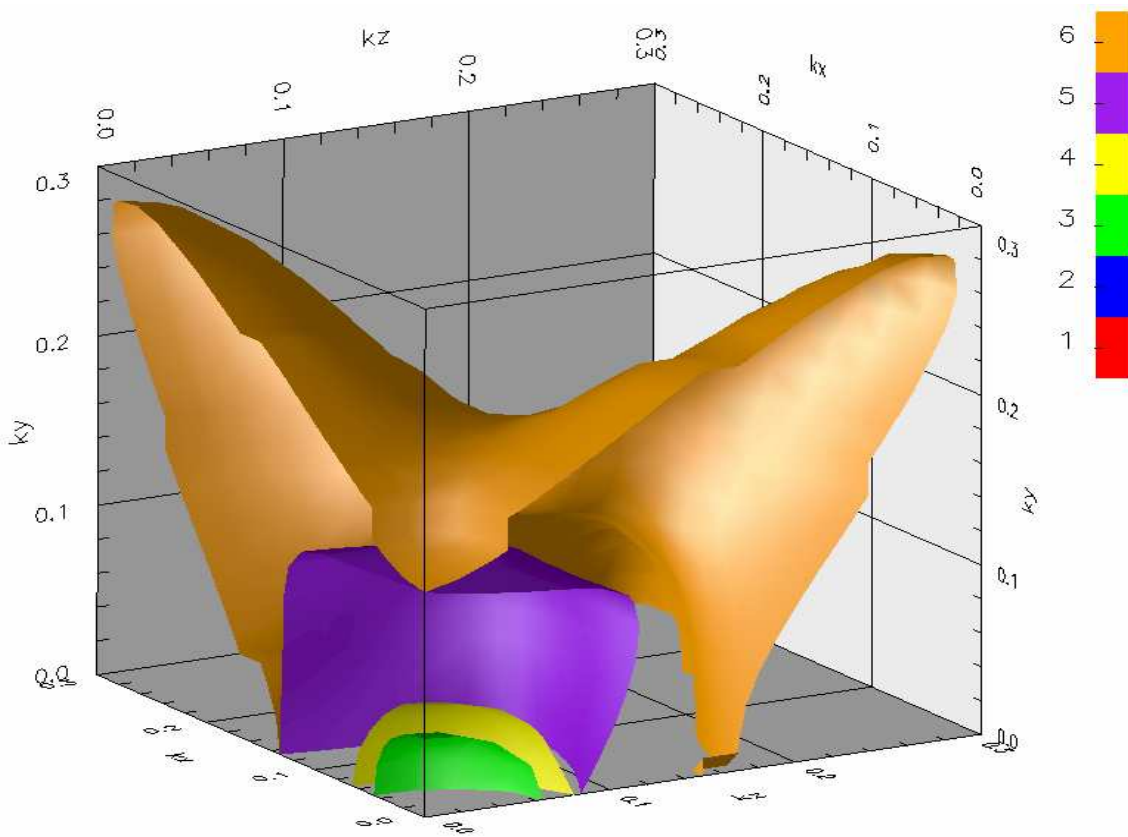
Rys. 4.1.3. Wykresy przedstawiają kształt pasma walencyjnego w otoczeniu punktu Γ strefy Brillouina, w kierunku Σ i jemu równoważnych, przy zadanym kierunku magnetyzacji i wartości naprężenia.



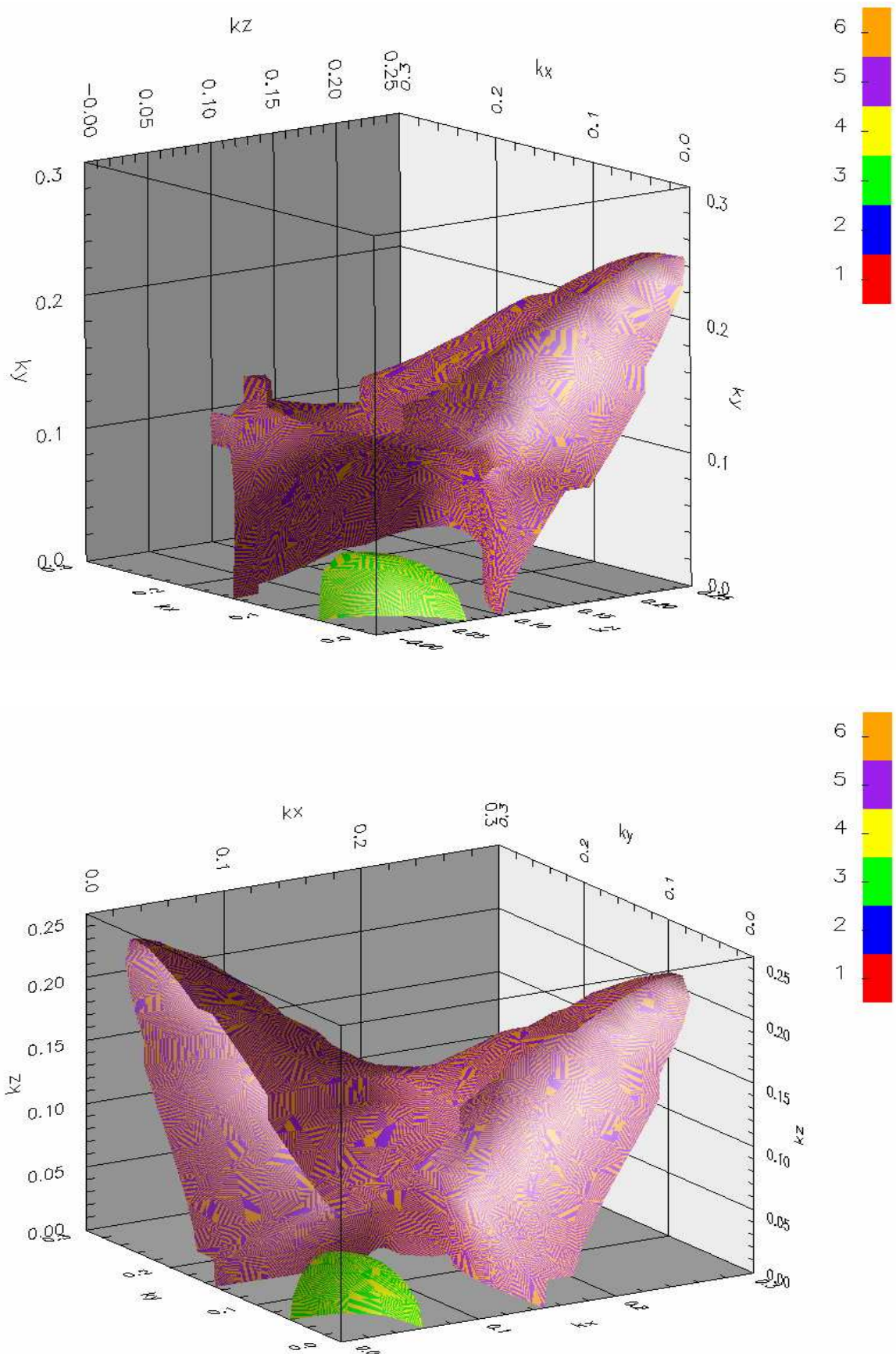
Rys. 4.1.4. Wykresy przedstawiają kształt pasma walencyjnego w otoczeniu punktu Γ strefy Brillouina w kierunku Δ przy zadanym kierunku magnetyzacji i wartości naprężenia.



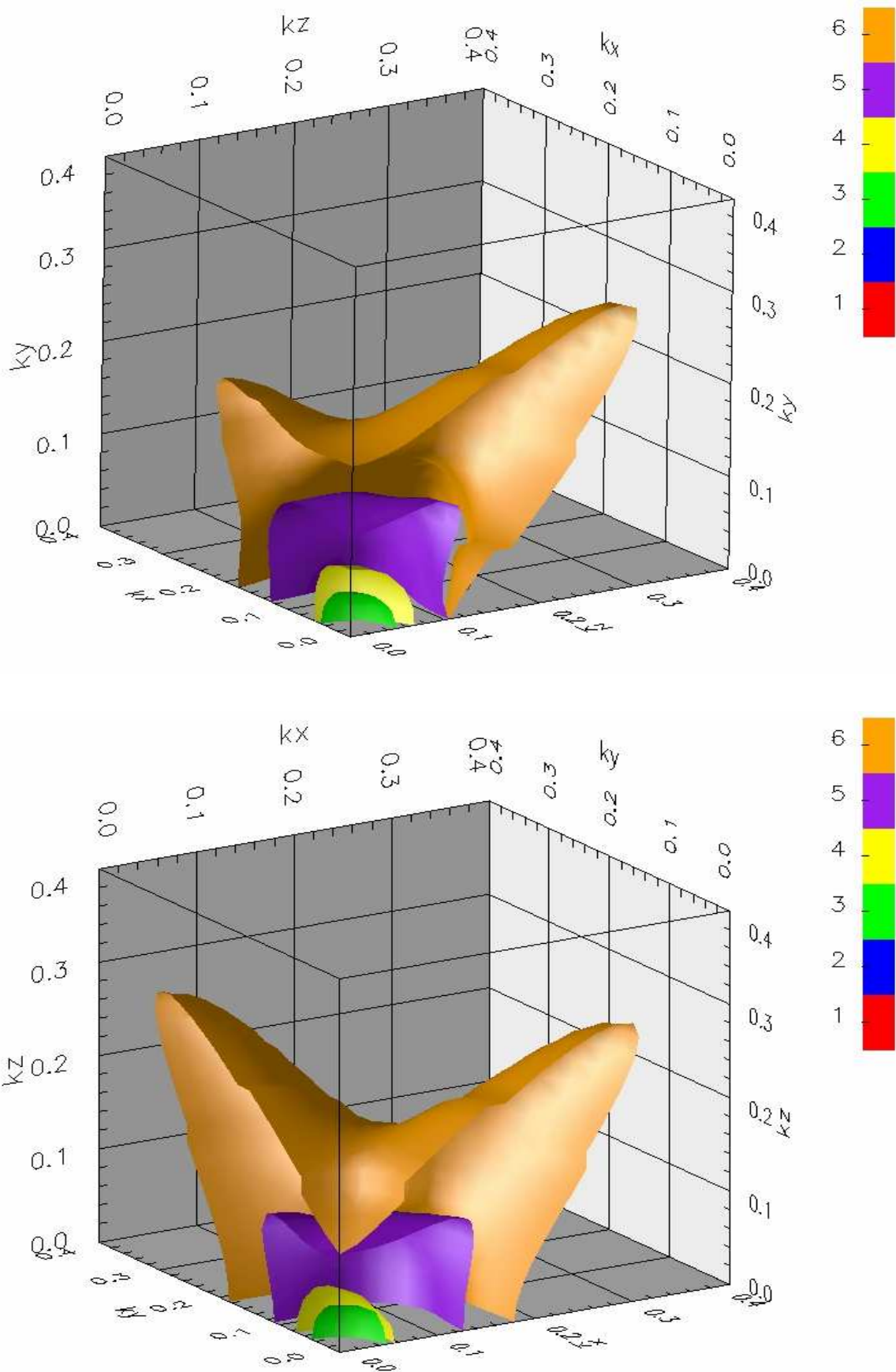
Rys. 4.1.5. Kształt powierzchni Fermiego bez zadanej magnetyzacji i przyłożonych naprężeń.



Rys. 4.1.6. Kształt powierzchni Fermiego dla magnetyzacji w kierunku (0 1 0), brak naprężeń.



Rys. 4.1.7. Kształt powierzchni Fermiego (dwa rzuty) bez zadanej magnetyzacji, naprężenia w kierunku x i y wynoszą 2% (widać wyraźną deformację powierzchni).



Rys. 4.1.8. Kształt powierzchni Fermiego (dwa rzuty) dla magnetyzacji w kierunku $(0\ 1\ 0)$, naprężenia w kierunku x i y wynoszą 2% (widać wyraźną deformację powierzchni).

4.2. Temperatura Curie.

Jak zostało wspomniane we wstępie, temperatura Curie jest bardzo ważnym parametrem charakteryzującym własności półprzewodników ferromagnetycznych. Określa ona tak zwany punkt krytyczny, powyżej którego ferromagnetyk traci swoje właściwości ferromagnetyczne. Jest to często zjawisko niepożądane, dlatego też próbuje się stworzyć materiały, dla których temperatura Curie wzrośnie do temperatury pokojowej. W podrozdziale tym przedstawię metodę wyznaczania temperatury punktu krytycznego oraz wyznaczę ją wykorzystując obliczenia z podrozdziału 4.1. Jest to standardowa metoda postępowania opisana dokładniej w Ref. [5].

Magnetyzację nieoddziałujących ze sobą jonów możemy wyrazić w postaci

$$M = g\mu_B S N_0 x B_S \left(\frac{g\mu_B S H}{k_B T} \right) = M_0 \left(\frac{H}{T} \right). \quad (4.2.1)$$

W przybliżeniu pola molekularnego przyjmuje się, dla materiałów ferromagnetycznych, tak jak to zostało wyjaśnione w podrozdziale 3.3., że każdy z momentów magnetycznych ma tę samą wartość średnią. Wówczas dla jonów oddziałujących ze sobą, przyjmujemy, że jedyny efekt oddziaływania sprowadza się do tego, iż pole działające na każdy ze spinów nie jest polem zewnętrznym, lecz polem efektywnym H_{ef} . Przy założeniu, że pole zewnętrzne jest równe zero, wyrażenie na H_{ef} dane jest następującym wzorem

$$H_{ef} = \chi M, \quad (4.2.2)$$

gdzie χ jest stałą sprzężenia.

Zatem podstawiając (4.2.2) do (4.2.1) otrzymujemy wyrażenie na magnetyzację w postaci

$$M = M_0 \left(\frac{H_{ef}}{T} \right) = M_0 \left(\frac{\chi M}{T} \right). \quad (4.2.3)$$

Rozwiązując powyższe równanie ze względu na M otrzymujemy wyrażenie na temperaturę Curie T_C , dane następującym wzorem

$$T_C = N_0 x \frac{(g\mu_B)^2}{3k_B} S(S+1)\chi. \quad (4.2.4)$$

Ponieważ z prostej relacji termodynamicznej wynika [5, 9, 18], że pole efektywne możemy wyrazić w postaci

$$H_{\text{ef}} = \frac{\partial F}{\partial M}, \quad (4.2.5)$$

gdzie F jest energią swobodną układu, to podstawiając (4.2.5) do (4.2.2) otrzymujemy wyrażenie na stałą sprzężenia daną wzorem

$$\chi = \left. \frac{\partial F}{\partial M} \right/ M \Big|_0. \quad (4.2.6)$$

Zatem podstawiając (4.2.6) do (4.2.4) otrzymujemy wyrażenie na temperaturę Curie,

$$T_C = N_0 x \frac{(g\mu_B)^2}{3k_B} S(S+1) \left. \frac{\partial F}{\partial M} \right/ M \Big|_0. \quad (4.2.7)$$

Dla małych wartości magnetyzacji M , energię swobodną można przybliżyć następującym wyrażeniem, (co widać na rys. 4.2.1.)

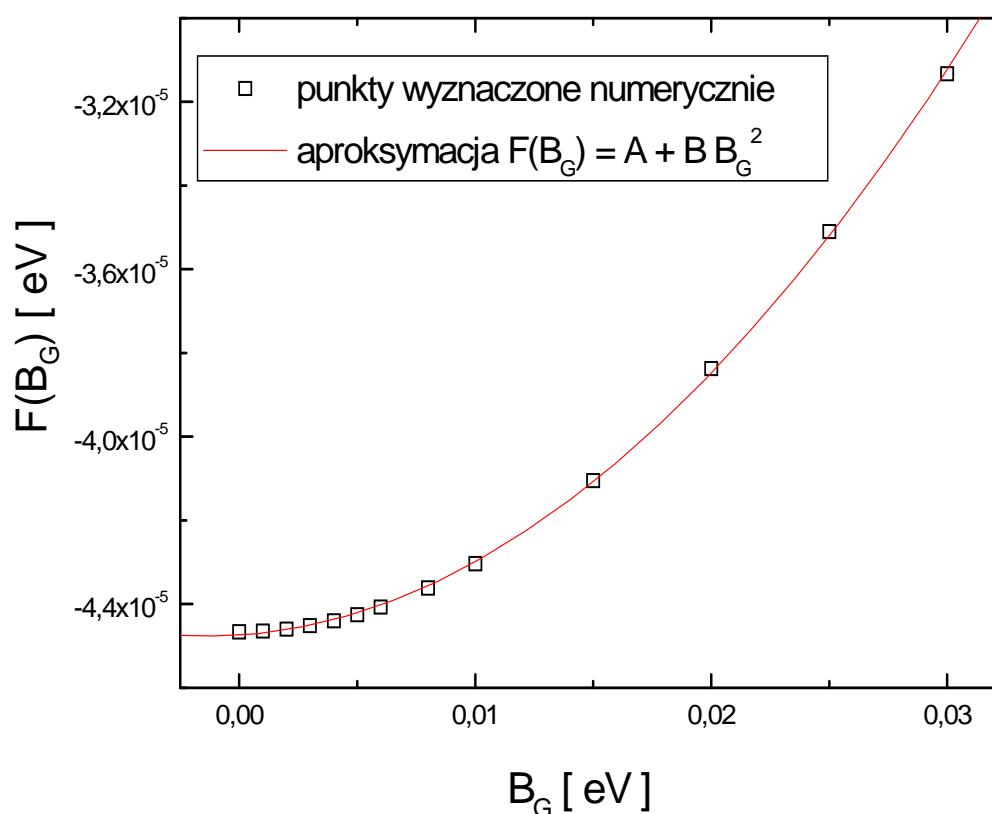
$$F(M) = A + BM^2. \quad (4.2.8)$$

Z czego wynika, że pochodna energii swobodnej względem magnetyzacji wynosi $\partial F/\partial M = 2BM$, a co za tym idzie stała sprzężenia jest równa $\chi = 2B$.

Wykonując obliczenia energii swobodnej w funkcji namagnesowania oraz fitując odpowiednio wyrażenie (4.2.8) do otrzymanych danych, można wyznaczyć współczynniki A i B . Ponieważ w praktyce wygodnie jest operować parametrem B_G ,

energia została wyznaczona jako funkcja właśnie tego parametru. Przy czym wiadomo, że parametr B_G jest związany z magnetyzacją prostą zależnością liniową typu $B_G = cM$ (patrz rozdział 3.3.). [4] Obliczenia wykonano dla koncentracji nośników, $p = 3,5 \cdot 10^{-4} \frac{\text{szt.}}{\text{\AA}^3}$. Wygodnie jest wyznaczyć tę koncentrację w funkcji energii Fermiego. Jest ona liczona jako zwykła całka w przestrzeni wektora falowego. Jeżeli mamy stabelaryzowane dane $p(E_F)$, to można wyznaczyć funkcję odwrotną do p , a następnie wyliczyć energię swobodną z następującego wyrażenia

$$E = \int_0^p dp' E_F(p')$$



Rys. 4.2.1. Z wystarczająco dobrym przybliżeniem możemy przyjąć, że dla małych M aproksymacja energii swobodnej funkcją $F(B_G) = A + B B_G^2$ jest słuszna. Parametr B_G jest powiązany z magnetyzacją zależnością $B_G = cM$, gdzie c jest wielkością stałą.

Zatem po uwzględnieniu przybliżenia (4.2.8), temperaturę Curie dla (Ga, Mn)As można ostatecznie obliczyć z następującego wyrażenia

$$T_C = N_0 x \frac{(g\mu_B)^2}{3k_B} S(S+1)2B. \quad (4.2.9)$$

Wykorzystując wzór (4.2.9), otrzymujemy, dla arsenku galu domieszkowanego w 5% manganem, temperaturę Curie równą około $T_C = 110$ K, co dość dobrze zgadza się z doświadczeniem.

5. Podsumowanie

W niniejszej pracy został przedstawiony model ferromagnetyzmu w półprzewodniku GaAs domieszkowanym manganem. Podstawą tego modelu jest odpowiedni opis oddziaływania zachodzący pomiędzy momentami magnetycznymi, zlokalizowanymi na domieszkach manganowych. Oddziaływanie to można traktować jako efekt pośredniej wymiany pomiędzy jonami Mn, zachodzącej poprzez dziury.

Podstawą energetycznego opisu badanego materiału jest hamiltonian, opisujący stany dziurowe w pasmie walencyjnym, dla kryształu o strukturze blendy cynkowej. Badanym materiałem był arsenek galu domieszkowany manganem (Ga, Mn)As. Hamiltonian ten składa się z trzech członów. Pierwszym z nich jest człon $\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}$, który opisuje oddziaływanie pomiędzy stanami dziurowymi z pasma walencyjnego, a stanami z pozostałych pasm energetycznych z uwzględnieniem oddziaływania spinowo – orbitalnego. Następnym składnikiem hamiltonianu jest człon naprężeń, który opisuje ich wpływ na kształt i degenerację pasma walencyjnego. Ostatnim członem jest hamiltonian $p - d$ opisujący pośrednie oddziaływanie wymienne jakie zachodzi pomiędzy stanami $3d$ jonów manganowych, a stanami $4p$ jonów arsenu i galu. Oddziaływanie to również ma wpływ na kształt, a szczególnie na degenerację pasma walencyjnego. Dzięki skonstruowaniu tego hamiltonianu, właśnie w takiej postaci, udało mi się za pomocą obliczeń numerycznych pokazać kształt pasma walencyjnego w okolicy jego wierzchołka, w kierunkach charakterystycznych strefy Brillouina. Następnie zostało przedstawionych kilka powierzchni Fermiego, na podstawie których pokazany został wpływ naprężeń i domieszkowania na ich kształt i symetrię. W ostatniej części tej pracy została pokazana metoda wyznaczania temperatury Curie.

Uważam, że za pomocą przedstawionego tu modelu rozrzedzonego ferromagnetyzmu w półprzewodnikach, można by, w dalszych badaniach uwzględnić wpływ braku inwersji na kształt i degenerację pasma walencyjnego. W ramach tego modelu otwierają się również duże możliwości badania magnetostrykcji w półprzewodnikach, czyli badanie wpływu namagnesowania na własności elastyczne kryształu. O wiele trudniejszym problemem, jednakże bardzo interesującym ze względu na korzyści technologiczne, byłoby zbadanie efektów związanych z niejednorodnościami namagnesowania i istnieniem struktury domenowej w kryształach podobnych do (Ga, Mn)As.

6. Literatura

- [1] Dietl T., Ohno H., Matsukura F., Cibert J., Ferrand D., 2000. Zener model description of ferromagnetism in zinc – blende magnetic semiconductors, *Science*, vol. 287, 1019 – 1022
- [2] Dietl T., Haury A., Merle d'Aubigne Y., 1997. Free carrier – induced ferromagnetism in structures of diluted magnetic semiconductors, *Phys. Rev. B*, vol. 55, 3347 – 3350.
- [3] Ohno H., Chiba D., Matsukura F., Omiya T., Abe E., Dietl T., Ohno Y., Ohtani K., 2000. Electric – field control of ferromagnetism, *Nature*, vol. 408, 944 – 946.
- [4] Dietl T., Ohno H., Matsukura F., 2000. Hole – mediated ferromagnetism in tetrahedrally coordinated semiconductors, *Phys. Rev.*
- [5] Ashcroft N., Mermin D., 1986. *Fizyka ciała stałego*, PWN, Warszawa.
- [6] Cydilkowski I.M., 1976. *Elektrony i dziury w półprzewodnikach*, PWN, Warszawa.
- [7] White R., 1979. *Kwantowa teoria magnetyzmu*, PWN, Warszawa.
- [8] Bir G.L., Pikus G.E., 1977. *Symetria i odkształcenia w półprzewodnikach*, PWN, Warszawa.
- [9] Kittel Ch., 1999. *Wstęp do fizyki ciała stałego*, PWN, Warszawa.
- [10] Bahder T.B., 1990. Eight – band kp model of strained zinc – blende crystals, *Phys. Rev. B*, vol. 41, 11992 – 12001.
- [11] Binney J.J., Dowrick N.J., Fisher A.J., Newman M.E., 1998. *Zjawiska krytyczne. Wstęp do teorii grupy renormalizacji*, PWN, Warszawa.
- [12] Staliński B., praca zbiorowa, 1977. *Fizyka i chemia ciała stałego*, PAN, Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych.
- [13] Yosida K., 1998. *Theory of magnetism*, Springer Series in Solid – State Sciences, 122.
- [14] Auerbach A., 1998. *Interacting electrons and quantum magnetism*, Springer – Verlag, New York, Inc.
- [15] Ziman J.M., 1977. *Wstęp do teorii ciała stałego*, PWN, Warszawa.
- [16] Dawydow A.S., 1967. *Mechanika kwantowa*, PWN, Warszawa.
- [17] Imada M., Fujimori A., Tokura Y., 1998. Metal – insulator transitions, *Rev. of Mod. Phys.*, vol. 70, no. 4.
- [18] Landau L., Lifszic E., 1959. *Fizyka statystyczna*, PWN, Warszawa.
- [19] Harrison W. A., 1976. *Teoria ciała stałego*, PWN, Warszawa.