

Спонтанная спиновая поляризация систем примесных гибридизированных состояний электронов в полосе проводимости кристаллов

В.И. Окулов

Институт физики металлов УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, г. Екатеринбург, 620990, Россия
E-mail: okulov@imp.uran.ru

Е.А. Памятных

*Уральский государственный университет им. А.М. Горького
пр. Ленина, 51, г. Екатеринбург, 620083, Россия*

В.П. Силин

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Ленинский пр., 53, г. Москва, 119991, Россия

Статья поступила в редакцию 17 мая 2011 г.

Развито теоретическое описание спонтанной спиновой поляризации систем гибридизированных электронных состояний на донорных примесях низкой концентрации в полосе проводимости кристалла. На основе общих уравнений для энергии спинового расщепления электронного спектра, сформулированных в рамках ферми-жидкостного подхода, показано, что в системах такого рода осуществляется механизм спинового упорядочения электронов проводимости, значительно более эффективный, чем обычно рассматриваемый механизм обменного взаимодействия с магнитными примесями. В рамках модели ферми-жидкостных констант для случая полной поляризации системы дано обоснование возможности реализации спонтанного спинового упорядочения электронов в гибридизированных состояниях. Обсуждаются возможности обнаружения проявлений спонтанной спиновой поляризации электронной примесной системы в термодинамических свойствах (теплоемкости и модулей упругости). На основе анализа имеющихся экспериментальных данных представлены свидетельства таких проявлений.

Розвинено теоретичний опис спонтанної спінової поляризації систем гібридизованих електронних станів на донорних домішках низької концентрації в смузї провідності кристала. На основі загальних рівнянь для енергії спінового розщеплювання електронного спектру, які сформульовано у рамках фермі-рідинного підходу, показано, що в системах такого роду здійснюється механізм спінового впорядкування електронів провідності, який значно ефективніше, ніж механізм обмінної взаємодії з магнітними домішками, який звичайно розглядається. У рамках моделі фермі-рідинних констант для випадку повної поляризації системи дано обґрунтування можливості реалізації спонтанного спінового впорядкування електронів у гібридизованих станах. Обговорюються засоби виявлення проявів спонтанної спінової поляризації електронної домішкової системи в термодинамічних властивостях (теплоємності і модулів пружності). На основі аналізу наявних експериментальних даних представлено свідчення таких проявів.

PACS: 72.20.Dр Общая теория, механизмы рассеяния;
72.20.Fr Транспорт и подвижность в слабых полях, пьезосопротивление;
72.80.Eу Полупроводники III–V и II–VI групп.

Ключевые слова: примеси в полупроводниках, гибридизированные состояния, спиновая поляризация электронов, спиновое упорядочение, электронная теплоемкость.

Введение

Перспективное направление исследований в области физики полупроводниковых кристаллов с примесями переходных элементов нацелено на изучение спонтанной спиновой поляризации проводящих электронов. В работах этого направления в основном рассматриваются системы, в которых поляризация индуцируется взаимодействием с упорядоченной локализованной спиновой плотностью. Большой объем исследований выполнен, в частности, на кристаллах полупроводников с примесями марганца. Согласно существующим представлениям, локализованные спины примесей марганца образованы электронами d -оболочки, энергии которых расположены в запрещенной или валентной полосе, а взаимодействие спинов осуществляется косвенным образом (механизм Рудермана–Киттеля) через взаимодействие с носителями тока. В такой системе, как и в других, которые изучались до сих пор, локализованные электронные состояния и состояния электронов проводимости принадлежат к разным энергиям, что накладывает серьезные ограничения на осуществление спинового упорядочения. Однако в кристаллах с примесями переходных элементов возможно образование примесных электронных состояний, которые гибридируются с состояниями полосы проводимости и, тем самым, соответствуют совместному существованию компонент электронной плотности, отвечающих локализации на примесях и свободному движению. Энергии таких состояний находятся в интервале, формирующемся в окрестности донорного примесного уровня энергии. Проявление гибридизации в физических свойствах возможно в том случае, когда граница заполнения электронных состояний (энергия Ферми) оказывается в таком интервале. Связанные с этим низкотемпературные эффекты исследовали в работах [1–5]. В гибридных состояниях локализованная электронная плотность принадлежит электрону проводимости с определенной энергией, что отвечает резонансному рассеянию этого электрона. То же можно сказать и о локализованной спиновой плотности, когда она возникает под влиянием обменного взаимодействия между электронами в гибридных состояниях. Таким образом, достижение спиновой поляризации электронов проводимости оказывается возможным существенно иным, более эффективным способом, чем через механизм Рудермана–Киттеля. Однако спонтанная спиновая поляризация систем электронов в гибридных состояниях имеет значение отнюдь не только как механизм поляризации электронов проводимости, но и в других аспектах, поскольку может проявляться в широком круге электронных свойств.

Настоящая статья посвящена предсказанию и теоретическому описанию спиновой поляризации гибридных состояний. Будут приведены общие урав-

нения, описывающие это явление, их простое модельное решение, показана возможность выполнения условий существования. Обсуждаются также экспериментальные данные по температурным зависимостям примесных вкладов в теплоемкость и модули упругости, в которых обнаружены проявления поляризации рассмотренного типа.

Мы рады тому, что наша статья будет опубликована в этом выпуске журнала, посвященном Валентину Григорьевичу Песчанскому, замечательному физическому и нашему другу, внесшему большой вклад в фундамент науки.

Теоретическое предсказание спонтанной спиновой поляризации электронной системы в гибридных примесных состояниях

Наша цель состоит в том, чтобы обосновать возможность и реальность осуществления спонтанной спиновой поляризации электронов в условиях гибридизации их состояний. Гибридные состояния рассматриваемого типа возникают при расположении донорного энергетического уровня примесного атома в полосе проводимости кристалла-матрицы при малой концентрации примесей. Обычно речь идет о примесных атомах переходных d -элементов, но принципиальным является лишь донорный характер состояний и сравнительная узость интервала гибридизации. Подобные примесные состояния образуются и в валентной полосе, их детальная теория развита ранее [6]. Явление гибридизации отражает трансформацию состояния донорного электрона от связанного состояния в атоме к совокупности таких состояний полосы проводимости, в которых сочетается частичная локализация на примесном ионе со свободным движением в полосе проводимости. Это означает, другими словами, что поле примесного иона не полностью связывает донорный электрон, попавший в полосу проводимости, а изменяет состояния определенного интервала энергий ϵ полосы проводимости в окрестности резонансной энергии ϵ_r (донорного примесного уровня), придавая им свойство частичной локализации. Теоретическое описание этого явления, по сути совпадающего с резонансным рассеянием электронов, основано на введении слагаемого $n_d \omega_i(\epsilon)$ в плотность числа состояний электронов в единице объема с данной энергией, отражающего добавочный вклад от донорных примесных атомов. Это слагаемое пропорционально концентрации донорных электронов n_d и функции $\omega_i(\epsilon)$, описывающей энергетическую зависимость примесного вклада, который проявляется в упомянутом выше интервале гибридизации. Для последующего рассмотрения спиновой поляризации состояний проведем сначала рассмотрение для такого атома примеси, который имеет ионный остов с заполненными оболочками и один донорный

электрон на внешней оболочке. Тогда, в соответствии с данным выше определением, концентрация n_d равна концентрации примесей n_i , а функция $\omega_i(\varepsilon)$, отличная от нуля внутри интервала гибридизации, удовлетворяет равенству

$$\int d\varepsilon \omega_i(\varepsilon) = 1. \quad (1)$$

Кроме того, согласно известному результату теории резонансного рассеяния, функция $\omega_i(\varepsilon)$ вблизи энергии ε_r имеет вид лоренцевского пика. Это согласуется с равенством (1), несмотря на конечный интервал интегрирования, в силу того, что ширина резонансного интервала 2Γ значительно больше ширины пика 2Δ , а вдали от резонансной энергии лоренцевская зависимость модифицируется в спадание до нуля на границах интервала. Без существенной погрешности можно аппроксимировать функцию $\omega_i(\varepsilon)$ во всем резонансном интервале лоренцевским пиком с добавлением малой константы, обеспечивающей скачкообразный переход к нулю на границах интервала и выполнение равенства (1). В такой аппроксимации функция $\omega_i(\varepsilon)$ имеет следующий вид:

$$\omega_i(\varepsilon) = (\Delta/\pi) \left\{ \left[(\varepsilon - \varepsilon_r)^2 + \Delta^2 \right]^{-1} + (1/\Gamma\Delta) \left[\pi/2 - \arctg(\Gamma/\Delta) \right] \right\}, \quad \varepsilon_r - \Gamma < \varepsilon < \varepsilon_r + \Gamma. \quad (2)$$

Полная плотность состояний $g(\varepsilon)$ в интервале гибридизации включает также вклад состояний свободного движения $g_c(\varepsilon)$ и представляет собой сумму

$$g(\varepsilon) = g_c(\varepsilon) + n_i \omega_i(\varepsilon), \quad \varepsilon_r - \Gamma < \varepsilon < \varepsilon_r + \Gamma, \quad (3)$$

а вне интервала гибридизации:

$$g(\varepsilon) = g_c(\varepsilon), \quad 0 < \varepsilon < \varepsilon_r - \Gamma. \quad (4)$$

Такой плотности состояний отвечает следующее выражение для концентрации электронов в интервале энергий от 0 до ε :

$$n(\varepsilon) = n_c(\varepsilon) + (n_i/\pi) \left\{ \pi/2 + \arctg[(\varepsilon - \varepsilon_r)/\Delta] + (\varepsilon - \varepsilon_r)/\Delta_{sm} \right\}, \quad (5)$$

где $dn_c(\varepsilon)/d\varepsilon = g_c(\varepsilon)$, $1/\Delta_{sm} = (1/\Gamma)[\pi/2 - \arctg(\Gamma/\Delta)] \approx \Delta/\Gamma^2$. Это выражение входит в уравнение для энергии Ферми ε_F , которое в интервале гибридизации имеет вид

$$n(\varepsilon_F) = n_i + n_{0e}, \quad (6)$$

где n_{0e} — концентрация той части электронов проводимости, которая не связана с рассматриваемыми донорами. Уравнение (6) с учетом приведенных выше определений можно записать в следующей форме:

$$\text{ctg} \left\{ (\pi/n_i) [n_c(\varepsilon_r + \varepsilon_0) - n_{0e}] \right\} = \frac{\varepsilon_0/\Delta + \text{tg}(\varepsilon_0/\Delta_{sm})}{1 + (\varepsilon_0/\Delta) \text{tg}(\varepsilon_0/\Delta_{sm})}, \quad (7)$$

где $\varepsilon_0 = \varepsilon_F - \varepsilon_r$. В этой форме записи легко ввести упрощения, учитывая малость определенных параметров, характеризующих интервал гибридизации. Так, в силу плавности изменения функции $n_c(\varepsilon)$ на интервале гибридизации можно положить $n_c(\varepsilon_r + \varepsilon_0) \approx n_c(\varepsilon_r) \equiv n_0$. Далее, величина ε_0 , заключенная внутри интервала гибридизации шириной 2Γ , мала по сравнению с Δ_{sm} , так что $\text{tg}(\varepsilon_0/\Delta_{sm}) \approx \varepsilon_0/\Delta_{sm} \approx \varepsilon_0\Delta/\Gamma^2$. Можно убедиться, что такие упрощения не влияют на правильность решения уравнения (7) в предельных случаях. В результате получается квадратное уравнение для ε_0 и следующее выражение для ε_F во всем интервале гибридизации:

$$\varepsilon_F = \varepsilon_r + 2\varepsilon_\Delta \left\{ 1 + [1 + (2\varepsilon_\Delta/\Gamma)^2]^{1/2} \right\}^{-1}, \quad (8)$$

где

$$\varepsilon_\Delta = \Delta \text{ctg} \left\{ (\pi/n_i) [n_0 - n_{0e}] \right\}, \quad n_i > n_0 - n_{0e}. \quad (9)$$

Формула (8) описывает зависимость энергии Ферми от концентрации донорных электронов выше нижней границы $\varepsilon_F = \varepsilon_r - \Gamma$ ($n_i = n_0 - n_{0e}$), на которой она сшивается с зависимостью, которая вне интервала гибридизации задается уравнением

$$n_c(\varepsilon_F) = n_i + n_{0e}, \quad \varepsilon_F < \varepsilon_r - \Gamma. \quad (10)$$

Соответствующая зависимость концентрации электронов проводимости (компоненты свободного движения в гибридных состояниях) в интервале гибридизации следует из той же формулы (8):

$$\begin{aligned} n_c(\varepsilon_F) &\approx n_0 + g_c(\varepsilon_r) \varepsilon_0 = \\ &= n_0 \left[1 + (2\varepsilon_\Delta/E_r) \left\{ 1 + [1 + (2\varepsilon_\Delta/\Gamma)^2]^{1/2} \right\}^{-1} \right], \quad \varepsilon_F > \varepsilon_r - \Gamma, \end{aligned} \quad (11)$$

где $E_r = n_0/g_c(\varepsilon_r)$. С повышением концентрации n_i (уменьшением параметра $(n_0 - n_{0e})/n_i$) величины ε_F и $n_c(\varepsilon_F)$ асимптотически приближаются соответственно к $\varepsilon_r + \Gamma$ и к $n_c(\varepsilon_r + \Gamma)$. Полученные зависимости, отвечающие стабилизации энергии Ферми и концентрации электронов проводимости в узких интервалах значений в зависимости от концентрации примесей, рассмотрены выше в предположении, что концентрация собственных электронов кристалла n_{0e} сравнительно мала (меньше $n_0 - n_i$). Другой подход, также отвечающий возможностям наблюдения роли гибридизации, состоит в рассмотрении зависимостей от n_{0e} при фиксированной концентрации примесей. Исходные соотношения и результаты, сформулированные выше, применимы и в таком подходе. Формулы (8) и (11) описывают прохождение интервала гибридизации при изменении n_{0e} от $n_0 - n_i$ до n_0 . При последующем повышении величины n_{0e} концентрация электронов проводимости снова становится равной этой величине, в соответствии с тем, что донорные электроны рассматриваемых примесей

вне интервала гибридизации проявляются только при $n_{0e} < n_0 - n_i$.

Переходя теперь к рассмотрению спиновой поляризации в гибридизированных состояниях, обратимся, прежде всего, к определению предполагаемого спинового состояния электрона на отдельной примеси, а затем применим теорию, основы которой изложены в нашей работе [7], к описанию поляризации системы донорных электронов. В упомянутой работе [7] было принято упрощающее предположение о том, что исходные состояния электронов в атоме примеси вырождены по спину. Однако для атомов переходных элементов такое предположение не отвечает реальности, и расщепление их орбитальных уровней энергии по спину следует учитывать. Чтобы записать соответствующие более полные уравнения, конкретизируем рассматриваемую примесную систему. Хорошо известно, что среди атомов примесей с незаполненной d -оболочкой в немагнитных полупроводниках атомы марганца, обладающие пятью d -электронами, характерны тем, что образуют локализованные состояния с энергиями в валентной полосе кристаллов. В связи с этим естественно оказывается то, что эффекты гибридизации состояний в полосе проводимости характерны для примесных атомов с превышающим 5 числом d -электронов, среди которых атомы железа, имеющие лишь один дополнительный d -электрон. Именно для примесей железа эффекты гибридизации исследованы наиболее детально, поэтому на изучение их электронной системы будет в основном ориентировано наше дальнейшее рассмотрение. Можно при этом рассчитывать на то, что обобщение на ряд систем с другим числом d -электронов будет достаточно простым. Предположим, что совокупность пяти d -электронов атома примеси находятся в состояниях (также гибридизированных) в валентной полосе кристалла и имеют одинаково ориентированные спины. Противоположно ориентированы в атоме спины остальных d -электронов (по одному на каждый примесный атом), состояния которых в кристалле расположены в полосе проводимости вблизи границы заполнения (энергии Ферми). Осуществление такой ситуации надежно подтверждено экспериментальными данными на селениде ртути с примесями железа, о которых будет упоминаться ниже, и она, скорее всего, характерна (с отличиями в определенных деталях) для широкого круга систем. Если у других примесных атомов в полосе проводимости оказываются состояния двух и более электронов, то каждому из них будет отвечать свой резонансный донорный уровень и совокупность соответствующих гибридизированных состояний.

Для гибридизированных состояний в полосе проводимости на основе изложенных исходных предположений записываем уравнения, определяющие энергию спонтанной спиновой поляризации всей электронной

системы донорных примесей. При этом в общем случае допускаем возможность заполнения обоих спиновых состояний электронов, введя для них соответствующие резонансные энергии ε_r^\pm , плотности состояний ω_i^\pm и g_c^\pm . Спиновую поляризацию характеризуем энергией спинового расщепления $\beta(\varepsilon_p)$ согласно определению энергии электрона $\varepsilon_{p\sigma}$ с орбитальными числами p и спиновым индексом $\sigma = \pm$:

$$\varepsilon_{p\sigma} = \varepsilon_p + \sigma\beta(\varepsilon_p) / 2. \quad (12)$$

Энергия $\beta(\varepsilon_p)$, которую полагаем зависящей только от орбитальной энергии, в интервале гибридизации разделяется на два слагаемых, отвечающих вкладам локализации и свободного движения:

$$\beta(\varepsilon) = \beta_i(\varepsilon) + \beta_c(\varepsilon). \quad (13)$$

В статье [7] для этих слагаемых приведена система интегральных уравнений, в которых в качестве ядер входят функции ферми-жидкостного взаимодействия, зависящего от спина. В приближении, учитывающем зависимость этих функций только от энергий электронов, они описывают взаимодействие компонент локализации и свободного движения ($\psi_i^\pm(\varepsilon, \varepsilon')$ и $\psi_c^\pm(\varepsilon, \varepsilon')$), а также связь компонент различных состояний ($\psi_{ic}^\pm(\varepsilon, \varepsilon')$). Следствием упомянутой системы уравнений является уравнение для функции $\beta(\varepsilon)$, которое запишем здесь, согласно упомянутому выше обобщению, с учетом исходной спиновой поляризации примесного атома:

$$\begin{aligned} \beta(\varepsilon) = & \\ = \int d\varepsilon' & \left[\Psi^+(\varepsilon, \varepsilon') f(\varepsilon' + \beta(\varepsilon')/2) - \Psi^-(\varepsilon, \varepsilon') f(\varepsilon' - \beta(\varepsilon')/2) \right], \end{aligned} \quad (14)$$

где

$$\begin{aligned} \Psi^\pm(\varepsilon, \varepsilon') = & \left[\psi_i^\pm(\varepsilon, \varepsilon') + \psi_{ic}^\pm(\varepsilon, \varepsilon') \right] n_i \omega_i^\pm(\varepsilon') + \\ & + \left[\psi_c^\pm(\varepsilon, \varepsilon') + \psi_{ic}^\pm(\varepsilon, \varepsilon') \right] g_c^\pm(\varepsilon'). \end{aligned} \quad (15)$$

Уравнение (14) следует решать совместно с уравнением для энергии Ферми (химического потенциала) системы поляризованных по спину электронов гибридизированных состояний, которое аналогично уравнению (6):

$$\begin{aligned} \int d\varepsilon & \left[g^+(\varepsilon) f(\varepsilon + \beta(\varepsilon)/2) + g^-(\varepsilon) f(\varepsilon - \beta(\varepsilon)/2) \right] = \\ & = n_i + n_{0e} \end{aligned} \quad (16)$$

где

$$g^\pm(\varepsilon) = n_i \omega_i^\pm(\varepsilon) + g_c^\pm(\varepsilon) \quad (17)$$

— суммарная плотность состояний спиновых подуровней.

Приведенные уравнения имеют достаточно общий характер, и довольно ясно, как при рассмотрении других, более сложных систем, можно включить в приведенную систему дополнительные вклады как групп

состояний, так и энергетических полос. Важным следствием решения этих уравнений является существование спиновой поляризации компоненты свободного движения гибридизированных состояний, соответствующая ей энергия выражается через $\beta(\epsilon)$ следующим равенством:

$$\beta_c(\epsilon) = \int d\epsilon' \left[\Psi_c^+(\epsilon, \epsilon') f(\epsilon' + \beta(\epsilon')/2) - \Psi_c^-(\epsilon, \epsilon') f(\epsilon' - \beta(\epsilon')/2) \right], \quad (18)$$

где

$$\Psi_c^\pm(\epsilon, \epsilon') = \psi_{ic}^\pm(\epsilon, \epsilon') n_i \omega_i^\pm(\epsilon') + \psi_c^\pm(\epsilon, \epsilon') g_c^\pm(\epsilon). \quad (19)$$

Она отвечает той части спонтанной спиновой поляризации, которая проявляется в свойствах электронов проводимости гибридизированных состояний. Таким образом, согласно изложенному во Введении, поляризация донорных электронов проводимости оказывается связанной с поляризацией локализованной электронной плотности напрямую, т.е. при одной энергии, а не косвенным образом, и может возникать без упорядочения во всей электронной системе кристалла.

Изучение условий возникновения спиновой поляризации электронов гибридизированных состояний и ее концентрационных зависимостей при малых значениях $\beta(\epsilon)$ без учета исходной поляризации примесных атомов уже проводилось, некоторые результаты изложены в статье [8]. Рассмотрим другой простой предельный случай, который актуален для электронной системы примесей железа или подобных им, состояния которой в полосе проводимости являются естественным объектом для излагаемой теории. Именно, будем считать, что донорные электроны заполняют состояния только с одним значением спиновой переменной. Этому предположению отвечает учет в уравнениях (14), (16) слагаемых с одним спиновым индексом, что означает выполнение условия $|\beta| > \Gamma$. Такой подход к описанию системы с примесями железа вполне обоснован, потому что в примесном атоме состояния электрона, оказавшиеся в полосе проводимости, уже отвечают определенной поляризации. То же состояние поляризации может сохраняться и у гибридизированных состояний, особенно при достаточном заполнении интервала гибридизации. Это подтверждается в экспериментах по концентрационной зависимости константы Кюри в селениде ртути с примесями железа. Образующаяся в валентной полосе кристалла спиновая поляризация электронов примесей отвечает значению спина пяти электронов на атом примеси и может служить началом отсчета для изучаемой поляризации в полосе проводимости.

Для обсуждения основных закономерностей качественного характера примем простую модель, аппроксимируя функции ферми-жидкостного взаимодействия константами и полагая, что взаимодействие однород-

ных компонент гибридизированных состояний является слабым по сравнению с взаимодействием локализованных ($\psi_c \ll \psi_i$). В такой модели, опуская спиновый индекс и обозначив $\psi_i + \psi_{ic} \equiv \psi$, имеем:

$$\beta = \psi n_i [1 - (n_0 - n_{0e})/n_i], \quad n_i > n_0 - n_{0e}. \quad (20)$$

Полное описание поляризованного гибридизированного состояния включает теперь формулы (8), (9), (11), описывающие концентрационную зависимость энергии Ферми и концентрации электронов проводимости как функции той же переменной $(n_0 - n_{0e})/n_i$. В этих формулах следует только заменить резонансную энергию ϵ_r на $\epsilon_r + \beta/2$. Величина β в силу нашего предположения отрицательна (низший спиновый подуровень), так что отрицателен и параметр взаимодействия ψ . При концентрациях, значительно превышающих $n_0 - n_{0e}$, формула (20) предельно упрощается: $\beta \approx \psi n_i$, однако по существу она не становится тривиальной. Речь идет о спонтанной спиновой поляризации электронов, состояния которых в полосе проводимости характеризуются импульсом, но имеют компоненты, отвечающие локализации и свободному движению, и, соответственно, долю каждой из компонент в спиновой поляризации. Для проведения оценки осуществления полной поляризации гибридизированных электронов введем безразмерный параметр $A = \psi g_c(\epsilon_r)$, характеризующий интенсивность взаимодействия электронов в полосе проводимости в окрестности интервала гибридизации. Поскольку речь идет о взаимодействии локализованных компонент, то этот параметр по порядку величины можно считать близким к единице. Условие $|\beta| > \Gamma$ полной поляризации при достаточно малых $(n_0 - n_{0e})/n_i$ можно теперь записать в виде

$$(n_i/n_0) |A| > (\Gamma/E_r). \quad (21)$$

Параметр E_r , введенный в формуле (11), характеризует масштаб изменения концентрации электронов проводимости. Значительно меньше этого масштаба ширина интервала гибридизации, характеризуемая параметром Γ . Поэтому правая часть неравенства (21) мала по сравнению с единицей, тогда как левая часть, скорее всего, порядка или больше единицы и возрастает с ростом концентрации примесей. Это дает серьезные основания для осуществления спиновой поляризации рассмотренного типа. Она сопровождается поляризацией электронов проводимости — доли свободного движения в гибридизированных состояниях, характеризуемой параметром β_c , который согласно формуле (18) в принятой нами простой модели равен:

$$\beta_c = (\psi_{ic}/\psi) \beta = \psi_{ic} n_i [1 - (n_0 - n_{0e})/n_i]. \quad (22)$$

Константу ψ_{ic} нет оснований считать малой по сравнению с ψ . Поэтому формула (22) в простом виде снова иллюстрирует факт более эффективного дости-

жения спиновой поляризации в условиях гибридизации, чем при обычном механизме взаимодействия с локализованными спинами при различных энергиях.

Экспериментальные свидетельства спонтанной спиновой поляризации электронов в гибридизированных примесных состояниях

Гибридизация примесных электронных состояний проявляется в низкотемпературных термодинамических свойствах кристалла. В работах [9,10] получены формулы, описывающие температурные зависимости электронных примесных вкладов в теплоемкость c и тензор модулей упругости λ_{klmn} в условиях проявления эффектов гибридизации и с учетом межэлектронного взаимодействия в модели ферми-жидкостных констант. Эти формулы имеют следующий вид:

$$c = \gamma_i T \left[\eta_2 - u \eta_1^2 (1 + u \eta_0)^{-1} \right], \quad (23)$$

$$\lambda_{klmn} = \lambda_{klmn}^h \eta_0 (1 + u \eta_0)^{-1}, \quad (24)$$

где

$$\eta_n = E_F \int d\varepsilon [(\varepsilon - \varepsilon_F) / T]^n [-\partial f(\varepsilon) / \partial \varepsilon] \omega_i(\varepsilon), \quad (25)$$

$f(\varepsilon)$ — функция Ферми, $u = (n_i/n_0)(1 + A)$, A — параметр ферми-жидкостного взаимодействия. Рассматривается интервал низких температур, когда химический потенциал можно считать равным энергии Ферми, которая предполагается расположенной выше резонансной энергии. Коэффициенты γ_i и λ_{klmn}^h от температуры не зависят. В соответствии с изложенным выше, формулы (23)–(25) можно применить к описанию поляризованной по спину системе электронов в гибридизированных состояниях, если справедливо наше предположение о заполнении только одного спинового подуровня. Нужно лишь считать, что резонансная энергия смещена на $\beta/2$. Другое изменение должно, строго говоря, касаться ферми-жидкостного параметра A , но поскольку введение констант ферми-жидкостного взаимодействия довольно грубое приближение, для выводов качественного характера можно полагать, что параметр A здесь тот же, что и в предыдущем рассмотрении. При этом оказывается, что для реальных условий и интервалов температур характер температурных зависимостей теплоемкости и модулей упругости весьма существенно зависит от значений параметра A . Это означает, что имеются возможности для того, чтобы по наблюдению температурных зависимостей определять существование спиновой поляризации, основываясь на условии (21).

Обратим теперь внимание на то, что в упомянутых выше статьях [9,10] изложены результаты экспериментов по температурной зависимости примесных вкладов в теплоемкость и скорость поперечного ультразвука в селениде ртути с примесями железа. Была выполнена

подгонка полученных зависимостей для ряда концентраций теоретическими кривыми на основе формул (23), (24). С учетом данных других экспериментов, проведенных на тех же кристаллах, в результате подгонки удалось достичь вполне удовлетворительного согласия теоретических и наблюдавшихся зависимостей и определить согласованные по всем экспериментам значения параметров, характеризующих электронную систему гибридизированных состояний. В том числе найдены значения величин A , Γ , E_F , входящих в неравенство (21). Прежде чем обсуждать конкретные числа, следует отметить важную качественную деталь. При подгонке оказалось, что для сколько-нибудь удовлетворительного описания наблюдаемых немонокотных зависимостей необходимо, чтобы величина u была отрицательной. Это означает, что параметр A отрицателен и $|A| > 1$. Но уже этого факта достаточно, как показано выше, для того, чтобы сделать вывод о поляризации электронов. Полученное значение A равно $-1,2$, а отношение Γ/E_F близко к $0,3$. Таким образом, неравенство (21) выполняется с большим запасом. Даже если принять во внимание приблизительность введения параметра взаимодействия и модельность теории в некоторых других отношениях, все же необходимо признать, что спонтанная спиновая поляризация электронов гибридизированных состояний в селениде ртути с примесями железа весьма вероятна. Конечно, для однозначного ответа требуются прямые эксперименты по определению спиновой поляризации, в которых нужно обнаружить очень малую намагниченность малого числа примесей. Но главный вывод, который останется справедливым, даже если в исследованном нами объекте не обнаружится спиновой поляризации, состоит все же в том, что рассмотренный нами механизм поляризации является эффективным, и заслуживает внимания, если искать способы получения поляризованных электронов.

Результаты и выводы

Нами развито теоретическое описание спонтанной спиновой поляризации электронов в гибридизированных состояниях на донорных примесях в полупроводниках, сформулированы уравнения для ее определения, предложена простая модель для их решения. В работе приведены серьезные аргументы в пользу реальности осуществления спиновой поляризации данного типа, основанные как на теоретических соображениях, так и на экспериментальных данных. Показано, что если спиновая поляризация осуществлена, то она по сути своей сопровождается образованием системы поляризованных по спину электронов проводимости, т.е. гибридизация состояний создает предпосылки для создания таких систем.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 09-02-01389),

программы Отделения физических наук РАН (грант № 09-Т-2-1014) и Российско-Американской программы BRNE.

1. В.И. Окулов, *ФНТ* **30**, 1194 (2004) [*Low Temp. Phys.* **30**, 897 (2004)]; *ФММ* **100**, 23 (2005).
2. В.И. Окулов, Л.Д. Сабирзянова, К.С. Сазонова, С.Ю. Паранчич, *ФНТ* **30**, 441 (2004) [*Low Temp. Phys.* **30**, 328 (2004)].
3. В.И. Окулов, Г.А. Альшанский, В.Л. Константинов, А.В. Королев, Э.А. Нейфельд, Л.Д. Сабирзянова, Е.А. Памятных, С.Ю. Паранчич, *ФНТ* **30**, 558 (2004) [*Low Temp. Phys.* **30**, 417 (2004)].
4. В.И. Окулов, А.В. Гергерт, Т.Е. Говоркова, А.В. Королев, А.Т. Лончаков, Л.Д. Сабирзянова, С.Ю. Паранчич, М.Д. Андрийчук, В.Р. Романюк, *ФНТ* **31**, 1143 (2005) [*Low Temp. Phys.* **31**, 872 (2005)].
5. В.И. Окулов, Т.Е. Говоркова, В.В. Гудков, И.В. Жевстовских, А.В. Королев, А.Т. Лончаков, К.А. Окулова, Е.А. Памятных, С.Ю. Паранчич, *ФНТ* **33**, 282 (2007) [*Low Temp. Phys.* **33**, 207 (2007)].
6. К.А. Кикоин, *Электронные свойства примесей переходных металлов в полупроводниках*, Энергоатомиздат, Москва (1991).
7. В.И. Окулов, Е.А. Памятных, В.П. Силин, *ФНТ* **35**, 891 (2009) [*Low Temp. Phys.* **35**, 702 (2009)].
8. V.I. Okulov, E.A. Pamyatnykh, and Yu.I. Zabaznov, *Solid State Phenom.* **168-169**, 489 (2011).
9. В.И. Окулов, А.Т. Лончаков, Т.Е. Говоркова, К.А. Окулова, С.М. Подгорных, Л.Д. Паранчич, С.Ю. Паранчич, *ФНТ* **37**, 281 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 220 (2011)].
10. В.И. Окулов, В.В. Гудков, И.В. Жевстовских, А.Т. Лончаков, Л.Д. Паранчич, С.Ю. Паранчич, *ФНТ* **37**, 443 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 347 (2011)].

Spontaneous spin polarization of impurity hybridized state systems of electrons in conduction band of crystals

V.I. Okulov, E.A. Pamyatnykh, and V.P. Silin

The theoretical description of spontaneous spin polarization of electron hybridized state systems on donor impurities of low concentration in conduction band of a crystal has been developed. Based on general equations for spin splitting energy of electron spectrum, formulated within the scope of the Fermi-liquid approach, it has been shown that in such systems one occurs spin ordering mechanism of conduction electrons significantly more effective than the mechanism of exchange interaction with magnetic impurities, traditionally considered. The possibility of the realization of spontaneous spin ordering of electrons in hybridized states is substantiated within the scope of Fermi-liquid constant model for the case of full polarization of a system. One discusses the possibilities of revealing the manifestations of spontaneous spin polarization of electron impurity system in thermodynamic properties (electron specific heat and elastic modulus). Analyzing available experimental data, the evidences of such manifestations are presented.

PACS: 72.20.Dp General theory, scattering mechanisms;
 72.20.Fr Low-field transport and mobility; piezoresistance;
 72.80.Ey III–V and II–VI semiconductors.

Keywords: impurities in semiconductors, hybridized states, spin polarization of electrons, spin ordering, electron specific heat.