

## Polarón magnético bidimensional

A. Reyes, A. Camacho, F.J. Rodríguez y L. Quiroga  
Departamento de Física, Universidad de los Andes, Santafé de Bogotá

### Abstract

El acoplamiento de un par electrón-hueco (excitón) en un semiconductor con iones magnéticos diluidos puede ser incrementado por el efecto de la interacción de intercambio entre el spin de los portadores y el de los iones magnéticos. El complejo así obtenido, denominado polarón magnético, es más estable que el excitón normal. En este trabajo describimos el sistema por medio de una ecuación de Wannier no lineal que resolvemos numéricamente. Presentamos resultados del cálculo de la energía de enlace del polarón magnético ( $Cd_{1-x}Mn_xTe$ ) en situaciones de alto confinamiento. En este límite el sistema puede ser correctamente modelado como un sistema estrictamente bidimensional. Analizamos la variación de la estabilidad de este nuevo complejo como función de la temperatura para distintas concentraciones.

The electron-hole coupling (exciton) in a diluted magnetic semiconductor can be enhanced due to the exchange interaction between the carrier spin and the magnetic ions spins. The obtained complex, known as magnetic polaron, is more stable than the normal exciton. In the present work we describe such a system through a non-linear Wannier equation, that we solve numerically. We present binding energy calculations of ( $Cd_{1-x}Mn_xTe$ ) in high confinement situations. Within this limit, the system can be accurately modeled as a strictly 2-dimensional system. We analyse the stability of this new complex as a function of temperature for several concentrations.

En semiconductores magnéticos diluidos, la fuerte interacción de intercambio entre portadores e iones magnéticos da lugar a propiedades magneto-ópticas únicas[1]. Una de las características interesantes es la formación del polarón magnético (PM) que consiste en un alineamiento de los spins de iones magnéticos causado por la presencia del portador lo que a su vez, reduce la energía de este último. En principio, la reducción de la dimensionalidad favorece la formación de PM.

En este trabajo examinamos la energía de enlace, densidad de probabilidad y espectros de absorción de PM estrictamente bidimensionales. Este modelo describe correctamente situaciones experimentales realistas, donde el ancho del pozo cuántico de confinamiento de electrones y huecos sea menor que el radio de Bohr del excitón ( $a_B \simeq 40\text{Å}$  para CdTe). El PM puede ser descrito por el hamiltoniano

$$H = \frac{P^2}{2m^*} - \frac{e^2}{\epsilon r} - \alpha \sum_j \vec{s} \cdot \vec{S}_j \delta(\vec{r} - \vec{R}_j) \quad (1)$$

donde  $m^*$  es la masa reducida del excitón,  $\epsilon$  la constante dieléctrica del cristal,  $\alpha$  la constante de intercambio y  $\vec{R}_j$  representa la posición (aleatoria) de los iones magnéticos en la red cristalina. En el marco de la aproximación de Hartree[1], la ecuación de valores propios para el PM se escribe como

$$\left[ \frac{P^2}{2m^*} - \frac{e^2}{\epsilon r} - \alpha \sum_j \langle \vec{s} \cdot \vec{S}_j \rangle \delta(\vec{r} - \vec{R}_j) \right] \Phi(r) = E\Phi(r) \quad (2)$$

$$-\alpha \sum_j \vec{s} \cdot \vec{S}_j |\Phi(r)|^2 \Xi = (E - E_0)\Xi \quad (3)$$

donde

$$\langle \vec{s} \cdot \vec{S}_j \rangle = \langle \Xi | \vec{s} \cdot \vec{S}_j | \Xi \rangle \quad (4)$$

El promedio en la ecuación anterior debe ser entendido como el promedio termodinámico y

$$E_0 = \int \Phi^*(r) \left[ \frac{P^2}{2m^*} - \frac{e^2}{\epsilon r} \right] \Phi(r) d^2r \quad (5)$$

En la ecuación (2)  $\Phi$  representa la función de onda en la coordenada relativa del PM y en la ecuación (3)  $\Xi$  representa el spinor correspondiente. A bajas temperaturas, y en el límite de una distribución continua de iones magnéticos, la ecuación (2) toma la forma

$$\left[ \frac{P^2}{2m^*} - \frac{e^2}{\epsilon r} - \frac{5}{4} x (\alpha N_0) B_{5/2} \left[ \frac{\alpha}{2K_B T} |\Phi(r)|^2 \right] \right] \Phi(r) = E\Phi(r) \quad (6)$$

donde  $x$  es la concentración de iones magnéticos,  $N_0$  es la densidad de celdas unitarias del cristal y  $B_{5/2}$  es la función de Brillouin. Este resultado muestra claramente que el problema del PM se reduce a resolver una ecuación de Wannier no-lineal, donde el potencial efectivo electrón-hueco tiene una componente electrostática de Coulomb y una componente de spin.

El potencial de Coulomb en el espacio recíproco para un sistema bidimensional es

$$V^C(\vec{k} - \vec{k}') = \frac{2\pi e^2}{\epsilon |\vec{k} - \vec{k}'|} \quad (7)$$

La contribución spin-spin al potencial de acoplamiento es

$$V^S(\vec{k} - \vec{k}') = \frac{5\pi}{2} (\alpha N_0) \int_0^\infty d\rho \rho B_{5/2} \left[ \frac{\alpha |\Phi(\rho)|^2}{2K_B T} \right] \int_0^{2\pi} d\phi J_0(\sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos(\phi)}) \quad (8)$$

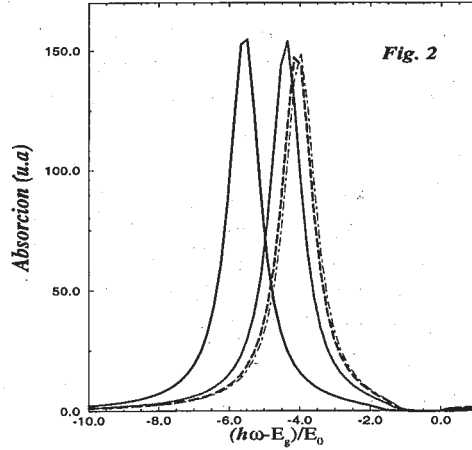
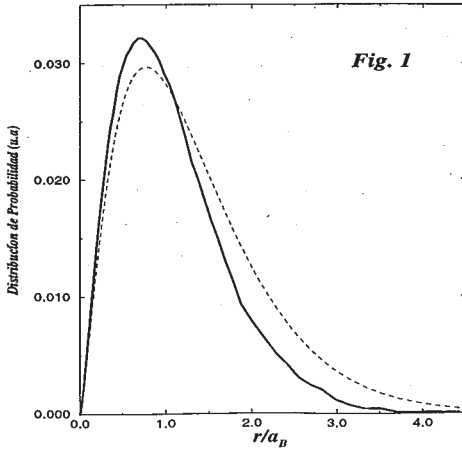
Este potencial depende de la temperatura.

En la ecuación (8) se ha tomado el promedio sobre las orientaciones relativas de  $\vec{k}$  y  $\vec{k}'$  dado que estamos interesados en considerar estados ópticamente activos (estados s), en particular el estado fundamental. Resolvemos la ecuación (6) por

medio del formalismo de función de Green en el espacio recíproco[2] que lleva a la ecuación

$$[E(k) - \Omega]G(k, \Omega) - \sum_{\vec{k}'} (V^C(\vec{k} - \vec{k}') + V^S(\vec{k} - \vec{k}'))G(k', \Omega) = \mu(k) \quad (9)$$

donde  $\mu(k)$  es el elemento matricial de transición dipolar óptico de la banda de valencia a la banda de conducción. La función de Green ( $G(k, \Omega)$ ) solución de la ecuación (9) nos da la energía de enlace del PM, la densidad de probabilidad de separación efectiva electrón-hueco y el espectro de absorción.

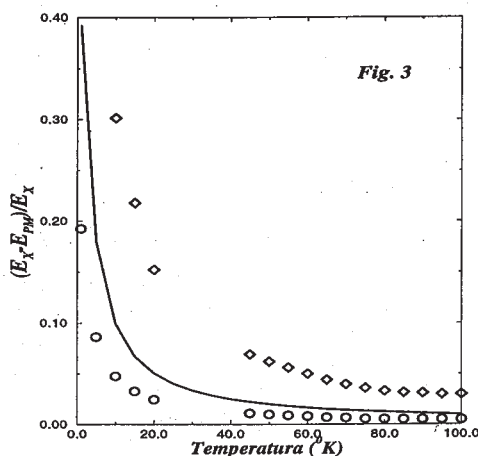


El efecto de la interacción spin-spin sobre la distribución de probabilidad en la separación electrón-hueco se presenta en la figura 1 ( $x=0.1$ ). La línea punteada representa al excitón puro bidimensional con un máximo de probabilidad al radio de Bohr. El polarón magnético a  $T = 1K$  se representa por la línea continua y tiene un máximo a distancias menores que el radio de Bohr bidimensional. Esto demuestra claramente que el solapamiento de las funciones de onda del par electrón-hueco está más concentrada a distancias pequeñas y por lo tanto es de esperar que la recombinación radiativa sea más eficiente. Esto queda demostrado en la figura 2 donde presentamos los espectros de absorción óptica para el polarón magnético a distintas temperaturas. Línea continua gruesa  $T = 1K$ , línea punteada  $T = 10K$ , línea a trazos  $T = 50K$  y línea raya-punto excitón puro bidimensional. Como era de esperarse el polarón magnético a baja temperatura ve incrementada su energía de enlace por un factor importante. A medida que la temperatura aumenta la resonancia óptica del polarón magnético tiende a confundirse rápidamente con la del excitón bidimensional. Esto está en perfecto acuerdo con los resultados experimentales, donde se muestra claramente que los efectos de polarón magnético son muy importantes a muy bajas temperaturas[4, 5].

La energía de enlace del polarón magnético ( $E_{PM}$ ) respecto a la del excitón ( $E_X$ ) bidimensional ( $4Ry$ ) para distintas concentraciones de iones magnéticos se

muestra en la figura 3. La línea continua corresponde a una concentración  $x=0.1$  ampliamente reportada experimentalmente para pozos cuánticos. La comparación con nuestros resultados sólo puede ser cualitativa dado que nuestro modelo es estrictamente bidimensional. Sin embargo el acuerdo es bastante bueno. Igualmente reportamos algunos datos para concentraciones  $x=0.05$  (círculos) y  $x=0.30$  (rombos). Como es natural la energía de enlace del polarón disminuye muy rápidamente con la temperatura a bajas concentraciones. A altas concentraciones se debería tener en cuenta el acoplamiento antiferromagnético entre spins de iones magnéticos. Este último efecto no lo tiene en cuenta nuestro modelo y por lo tanto los resultados  $x=0.30$  sobrevaloran la energía de enlace del polarón, aunque reproducen cualitativamente bien la tendencia observada experimentalmente.

En resumen, hemos presentado los espectros de absorción y energías de enlace del polarón magnético bidimensional. Nuestros resultados exactos obtenidos por primera vez con un procedimiento no variacional, como es la solución autoconsistente en el espacio recíproco de una ecuación de Wannier no-lineal, permiten que la inclusión de elementos que hagan el modelo más realista como un ancho finito para el pozo cuántico y acoplamientos antiferromagnéticos sean fácilmente incluidos, con un pequeño aumento en el costo computacional. Sin embargo la física esencial ha sido reproducida por nuestro modelo.



Trabajo cofinanciado por COLCIENCIAS proyecto No. 1204-05-264-94.

#### Referencias

- [1] P.A. Wolff, en "Semiconductors and Semimetals", ed. J.K. Furdyna and J. Kossut, **25**, 413 (1988).
- [2] Shun-Lien Chuang et al., Phys. Rev. B **43**, 1500 (1991).
- [3] J.A. Gaj et al., Solid State Commun., **29**, 435 (1979).
- [4] D.R. Yakovlev et al., Solid State Commun., **82**, 29 (1992).
- [5] V.V. Rossin et al., Phys. Rev. B **51**, 11209 (1995).