

## SỬ DỤNG PHƯƠNG PHÁP GẦN ĐÚNG THỂ KẾT HỢP (CPA) ĐỂ TÍNH MẬT ĐỘ TRẠNG THÁI CỦA BÁN DẪN TỪ PHA LOÃNG Ga<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>As

Nguyễn Xuân Ca (Khoa KH Tự nhiên & Xã hội- ĐH Thái Nguyên)  
 Hoàng Anh Tuấn (Viện Vật lý & Điện tử Hà Nội)

### 1. Mở đầu

Trong thời gian gần đây bán dẫn từ pha loãng(DMS) đã thu hút được sự chú ý lớn của các nhà khoa học do tồn tại đồng thời cả tính sắt từ và tính bán dẫn. Vật liệu DMS tiêu biểu là Ga<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>As (x ≈ 1-10%) với Mn thay thế Ga tại các nút dương [1]. Tương tác chủ yếu giữa các ion Mn<sup>2+</sup> là tương tác trao đổi RKKY[2,3] thông qua hạt tải (lỗ trống trong Ga<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>As). Lý thuyết về tương tác trên đã được đề cập đến trong một vài bài báo gần đây [4-6].

Tuy nhiên, cơ chế RKKY không giải thích được nguồn gốc tính sắt từ khi mật độ hạt tải thấp trong Ga<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>As. Vì vậy, cơ chế của tương tác từ giữa các ion Mn có thể liên quan đến tính sắt từ khi mật độ hạt tải thấp. Yagi và Kayanuma [7] thừa nhận rằng lỗ trống p di chuyển xung quanh và tương tác với các spin định xứ tại nút Mn là tương tác trao đổi phản sắt từ. Dựa trên mô hình đó với sự thay thế ngẫu nhiên các spin định xứ Ising, các tác giả đã nghiên cứu cơ chế tương tác trao đổi hiệu dụng. Tuy nhiên, trong lý thuyết của họ hiệu ứng không từ tính đã được bỏ qua. Gần đây, Takahashi và Kubo [8] đã chỉ ra rằng thế hút không từ tính tại các nút từ tăng cường tính sắt từ trong (Ga,Mn)As.

Dựa trên mô hình do Takahashi và Kubo cung cấp, với phương pháp gần đúng thể kết hợp và sử dụng lý thuyết của Yagi và Kayanuma, chúng tôi sẽ xác định sự phụ thuộc của mật độ trạng thái vào các tham số hệ thống (nồng độ pha tạp, hằng số tương tác hiệu dụng ...)

### 2. Mô hình và tính toán giải tích

Sử dụng mô hình do Takahashi và Kubo đề xuất, mô hình này bao gồm tương tác trao đổi và thế hút không từ tính. Hamiltonian được cho bởi:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \sum_i u_i, \quad (1)$$

ở đó  $u_i$  là  $u_i^A$  hoặc  $u_i^M$  phụ thuộc vào ion chiếm nút  $i$ :

$$u_i = \begin{cases} E_A \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}; i \in A \\ E_M \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} - \Delta \sum_{\sigma} (\sigma S_i) c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}; i \in Mn. \end{cases} \quad (2)$$

Trong đó  $c_{i\sigma}^+$  ( $c_{i\sigma}$ ) là các toán tử sinh (huỷ) hạt tại nút  $i$  với spin  $\sigma$ ,  $S_i (= \pm 1)$  chỉ hướng của spin định xứ tại nút  $i$  và  $\Delta = JS/2$  là hằng số tương tác hiệu dụng. EA(EM) tương ứng là thế không từ tính định xứ tại A (Mn). Với N<sup>+</sup> và N<sup>-</sup> là số nút với spin lên hoặc xuống thì độ từ hoá trung bình của các spin định xứ được xác định:  $M = (N^+ - N^-)/NS$ , với  $NS = xN$ . Trong đó N là số nút mạng và x là tỉ lệ phân tử gam của nguyên tử Mn. Với độ từ hoá trung bình M, mỗi nút được chiếm chỗ bởi một nguyên tử A (ký hiệu là nút 0) với xác suất  $p_0 = 1-x$ , hoặc một nguyên tử Mn với spin lên (ký hiệu là nút +) với xác suất  $p_+ = x(1+M)/2$ , hoặc một nguyên tử Mn với spin

xuông (ký hiệu là nút  $\alpha$ ) với xác suất  $p_{\alpha} = x(1-M)/2$ . Theo CPA, hàm Green địa phương  $G_{\sigma}^{\alpha}(\mathcal{E})$  tại nút  $\alpha$  ( $\alpha = +, -, 0$ ) cho hạt tải với spin  $\sigma$  được xác định:

$$G_{\sigma}^{\alpha}(\mathcal{E}) = G_{\sigma}(\mathcal{E}) + G_{\sigma}(\mathcal{E})T_{\sigma}^{\alpha}(\mathcal{E})G_{\sigma}(\mathcal{E}), \quad (3)$$

trong đó  $T_{\sigma}^{\alpha}(\mathcal{E})$  là T- ma trận một nút cho hạt tải với spin  $\sigma$ ,  $G_{\sigma}(\mathcal{E})$  là hàm Green của môi trường hiệu dụng được cho bởi:

$$G_{\sigma}(\mathcal{E}) = \int \frac{\rho_0(z)dz}{\mathcal{E} - z - \sum_{\sigma}(z)}, \quad (4)$$

với  $\rho_0(z)$  là mật độ trạng thái không bị nhiễu loạn (DOS),  $\sum_{\sigma}(z)$  là thế kết hợp. Sử dụng mật độ trạng thái bán tròn:

$$\rho_0(z) = \frac{2}{\pi w^2} \sqrt{w^2 - z^2}, \quad (5)$$

với  $w$  là một nửa độ rộng vùng, thay (5) vào (4) ta có

$$G_{\sigma}(\mathcal{E}) = \frac{2}{w^2} \left[ \mathcal{E} - \sum_{\sigma}(\mathcal{E}) - \sqrt{(\mathcal{E} - \sum_{\sigma}(\mathcal{E}))^2 - w^2} \right]. \quad (6)$$

Biểu diễn  $\sum_{\sigma}(\mathcal{E})$  theo  $G_{\sigma}(\mathcal{E})$  ta có:

$$\sum_{\sigma}(\mathcal{E}) = \mathcal{E} - \frac{w^2}{4} G_{\sigma}(\mathcal{E}) - \frac{1}{G_{\sigma}(\mathcal{E})}. \quad (7)$$

CPA đòi hỏi trung bình của ma trận tán xạ triệt tiêu  $\langle T_{\sigma}^{\alpha}(\mathcal{E}) \rangle = 0$ . Điều này tương đương với:

$$G_{\sigma}(\mathcal{E}) = \left\langle (G_{\sigma}^{-1}(\mathcal{E}) + \sum_{\sigma}(\mathcal{E}) - u_{\sigma}^{\alpha})^{-1} \right\rangle, \quad (8)$$

trong đó  $u_{\sigma}^{\alpha}$  là thế tán xạ của hạt tải với spin  $\sigma$  tại nút  $\alpha$ ;  $u_{\sigma}^{\alpha} = EA$  với xác suất  $p_0$ ,  $u_{\sigma}^{\alpha} = EM - \Delta\sigma$  với xác suất  $p_+$  và  $u_{\sigma}^{\alpha} = EA + \Delta\sigma$  với xác suất  $p_-$ . Thay  $u_{\sigma}^{\alpha}$  vào phương trình (8) ta được một phương trình bậc 4 đối với  $G_{\sigma}(\mathcal{E})$ :

$$G_{\sigma}(\mathcal{E}) = \frac{1-x}{\mathcal{E} - \omega G_{\sigma}(\mathcal{E}) - E_A} + \frac{x(1+M)/2}{\mathcal{E} - \omega G_{\sigma}(\mathcal{E}) - E_M + \Delta\sigma} + \frac{x(1-M)/2}{\mathcal{E} - \omega G_{\sigma}(\mathcal{E}) - E_M - \Delta\sigma}. \quad (9)$$

Phương trình bậc 4 này có thể được tìm được nghiệm giải tích bằng phương pháp Ferrari. Khi đó mật độ trạng thái tổng cộng được xác định bởi:

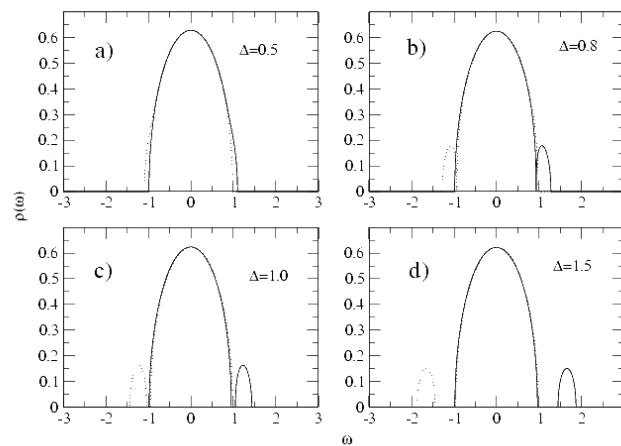
$$\rho_0(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_\sigma(\varepsilon). \quad (10)$$

### 3. Kết quả tính số

Từ các công thức giải tích (9),(10) chúng tôi sẽ tính số để xác định mật độ trạng thái. Trong các kết quả tính số dưới đây chúng tôi lấy độ rộng vùng  $W=1$ . Mật độ trạng thái đóng vai trò quyết định trong việc xác định các tính chất vật lý của hệ bán dẫn từ pha loãng, đặc biệt là sự hình thành vùng tạp do sự đưa thêm vào tạp chất. Trong phần này, chúng tôi tính toán mật độ trạng thái với các tham số khác nhau và chỉ ra tại sao vùng tạp lại được hình thành và tách ra từ vùng chính.

\* Trường hợp  $M=1$

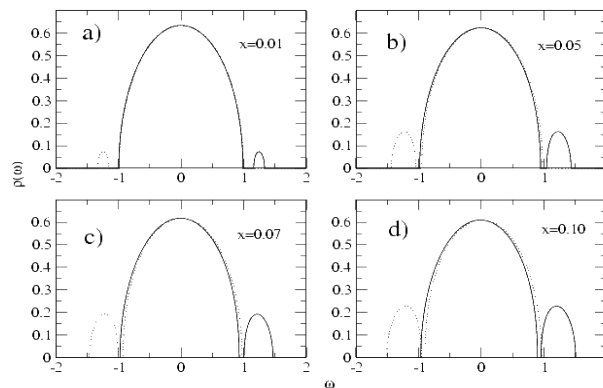
$$x=0.05$$



Hình 1: Mật độ trạng thái theo năng lượng khi thay đổi hằng số tương tác

Ở hình 1 (nét đứt tương ứng với spin up, nét liền tương ứng với spin down) chúng tôi tính toán mật độ trạng thái tổng cộng với các giá trị  $x=0.05$ ,  $EM=0$ , coi EA là giá trị năng lượng gốc ( $EA=0$ ), và bốn giá trị của  $\Delta$ .

$$\Delta=1.0$$



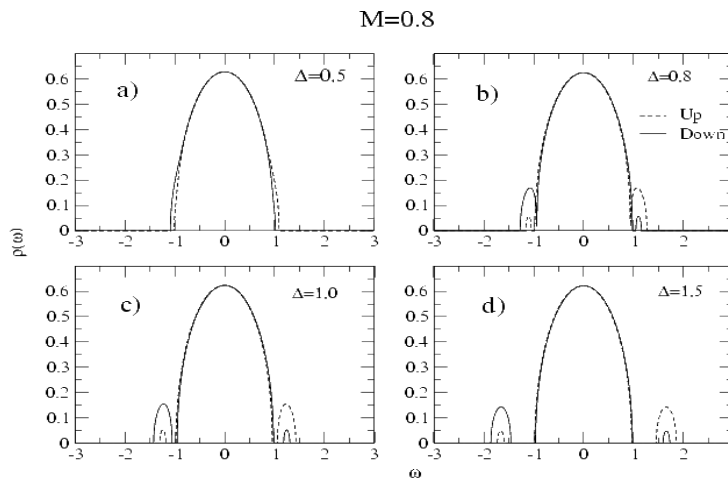
Hình 2: Mật độ trạng thái theo năng lượng khi thay đổi nồng độ pha tạp x

Nếu tương tác  $\Delta$  không lớn lắm thì vùng tạp không được tách ra từ vùng chính như thấy ở đồ thị (a,b). Tuy nhiên, khi  $\Delta$  đủ lớn thì vùng tạp được hình thành và tách ra từ vùng chính như thấy ở đồ thị c và d. Tất cả các mẫu DMS cho thấy rằng mật độ hạt tải thấp hơn nhiều so với nồng độ tạp chất ( $n < x$ ) do sự bù trừ mạnh. Vì vậy, thế hoá học  $\mu$  được định vị trong vùng tạp hoặc ở biên vùng chính. Tất cả các tính chất vật lý được xác định ở biên vùng năng lượng thấp

Tương tự như vậy ở hình 2 chúng tôi cố định tương tác  $\Delta = 1$  và thay đổi nồng độ pha tạp x. Trong mô hình này mức tạp (mức năng lượng acceptor) và sự hình thành của một vùng tạp phụ thuộc vào tương tác sắt từ.

Độ rộng của vùng tạp và vùng chính cũng như độ dẫn của hệ phụ thuộc vào nồng độ pha tạp. Khi x tăng thì độ rộng vùng tạp tăng, vì số trạng thái trong vùng tạp tăng lên. Đến một giá trị x nào đó đủ lớn thì vùng tạp sẽ hoà vào vùng chính.

\* Trường hợp  $M=0.8$




Hình 3: Mật độ trạng thái theo năng lượng khi thay đổi nồng độ pha tạp, với  $M=0.8$

Trong hình 3 chúng tôi sử dụng các dữ liệu  $EM=EA=0$ ,  $x=0.05$  và bốn số liệu khác nhau của  $\Delta$ . Nếu  $\Delta$  là đủ nhỏ thì chỉ thấy một vùng xuất hiện như ở đồ thị a, điều này rất phù hợp với lý thuyết gần đúng tinh thể ảo. Khi  $\Delta$  khá lớn, vùng tạp tách ra phía dưới và phía trên vùng chính như thấy ở đồ thị c,d. Vùng tạp tách ra phía dưới vùng chính tương ứng với trạng thái spin đối song, còn vùng tạp tách ra phía trên tương ứng với trạng thái kết cặp spin song song. Do số hạt với spin lên khác số hạt với spin xuống nên diện tích của hai vùng tạp là khác nhau. Tổng diện tích của hai vùng tạp hai bên vùng chính cho ta mật độ pha tạp x.

#### 4. Kết luận

Trong bài báo này, chúng tôi đã sử dụng phương pháp gần đúng thế kết hợp để nghiên cứu mật độ trạng thái của bán dẫn từ pha loãng  $Ga_{1-x}Mn_xAs$ . Xuất phát từ phương trình CPA với giả thiết lấy trung bình theo cấu hình sẽ không có tán xạ từ các thế hiệu dụng để đi tìm hàm Green một electron và mật độ trạng thái trong mô hình s-d đơn giản. Chúng tôi đã sử dụng mô hình do Takahashi và Kubo đề xuất. Mô hình này bao gồm tương tác trao đổi và thế hút không từ tính. Các spin định xứ của d-electron được lấy xấp xỉ bằng spin Ising, mà những spin này tương tác với các spin của hạt tải không định xứ thông qua tương tác s-d.

Kết quả thu được cơ bản phù hợp với kết quả của lý thuyết trường trung bình động. Tuy nhiên, ở bài báo này chúng tôi mới chỉ xây dựng trên một lý thuyết gần đúng và một mô hình đơn giản. Chẳng hạn, chúng tôi bỏ qua tương tác siêu trao đổi giữa các d-electron, thừa nhận mật độ hạt tải như là một tham số độc lập. Đặc biệt, cấu trúc vùng phức tạp trong DMS chưa được tính đến. Mục đích của chúng tôi khi bỏ qua những điều này là nhằm đơn giản hoá mô hình. Chúng tôi mong rằng khi xem xét đến các hiệu ứng kể trên kết quả thu được sẽ được cải thiện và phù hợp tốt hơn với thực nghiệm.

Với kết quả tìm được còn mở ra khả năng xem xét tính chất truyền dẫn, tính chất quang... của hệ bán dẫn từ pha loãng. Vấn đề này chúng tôi dự định sẽ tiếp tục nghiên cứu trong thời gian tới 

### SUMMARY

#### **Apply the Coherent Potential Approximation(CPA) into the study of the density of status in diluted magnetic semiconductors Ga<sub>1-x</sub>MnxAs.**

In this writing, we have applied the Coherent potential approximation (CPA) to study the density of stastes (DOS) in diluted magnetic semiconductors

Ga<sub>1-x</sub>MnxAs. We derived CPA equations for one electron Green function in the simplified model, where the localized spin of d-eletrons is approximated by Ising spins which are coupled with itinerant spin-carriers through the s-d interaction. We have shown that the DOS depends on the system paramaters, i.e., effective coupling constant and impurity concentration. In this paper, the results are in good agreement with ones obtained by dynamical mean field theory and these can be partially explained by the impurity band formation and the spin disorder scattering [12].

### TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1].H.Ohno et al (1996), Phys. Letter, 69, 363.
- [2].T.Dietl et al (2000)., Science, 287, 1019.
- [3].J. Konig, H. H. Lin and A. H. MacDonald (2000), Phys. Rev. Lett, 84, 5628.
- [4]. H. Akai (1998), Phys. Rev. Lett, 81, 3002.
- [5].M.Berciu and R. N. Bhatt (2001), Phys. Rev. Lett, 87,107203.
- [6].S.Das Sarma, E. H. Hwang and A. Kaminski (2003), Phys. Rev, B67,155201.
- [7].M. Yagi and Y. Kayanuma (2002), J. Phys. Soc. Jpn, 71, 2010.
- [8].M. Takahashi and K. Kubo (2003), J. Phys. Soc. Jpn, 72, 2866.
- [9].Le Duc Anh, Pham Tuan Minh, Hoang Anh Tuan and Nguyen Toan Thang (2004), *Proceedings of the 9th APPC*, Ha Noi, October 25-31, 2004.
- [10].Sh.U.Yuldashev et al (2003), Appl. Phys. Lett, 84,1206.
- [11].M Auslender and M. E. Kogan (2001), Eur. Phys. J, B19, 525.
- [12].E. H. Hwang and S. Das Sarma , Cond-mat/0503077.