

# POLARON TỪ TRONG VẬT LIỆU BÁN DẪN TỪ PHA LOÃNG

PHAN VĂN NHÂM<sup>1,\*</sup>, BÙI DÌNH HỘI<sup>2,\*\*</sup>

<sup>1</sup>Trường Đại học Duy Tân

\*Email: phanvannham@duytan.edu.vn

<sup>2</sup>Khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế

\*\*Email: buidinhhoi@hueuni.edu.vn

**Tóm tắt:** Áp dụng lý thuyết trường trung bình động cho mô hình Kondo mạng, chúng tôi khảo sát trạng thái polaron từ trong vật liệu bán dẫn từ pha loãng. Sau khi thu được hệ phương trình tự hợp cho phép xác định các hàm Green đơn hạt, chúng tôi xây dựng công thức khảo sát tán xạ Raman  $B_{1g}$ . Từ các tính chất của bức tranh tán xạ Raman, chúng tôi khẳng định sự tồn tại trạng thái polaron từ của hệ bán dẫn từ pha loãng ở pha thuận từ. Sự tồn tại của trạng thái polaron từ này trở nên rõ ràng hơn khi giảm nhiệt độ hay tăng cường độ tương tác trao đổi.

**Từ khóa:** Mô hình Kondo mạng, bán dẫn từ pha loãng, lý thuyết trường trung bình động, polaron từ.

## 1 GIỚI THIỆU

Bán dẫn từ pha loãng (DMS) là một trong những loại vật liệu thu hút sự quan tâm rất lớn với khả năng tạo nên một cuộc cách mạng trong công nghệ spintronics khi quá trình xử lý và lưu trữ dữ liệu diễn ra đồng thời [1]. Do pha tạp loãng của các ion từ (ví dụ Mn) trong vật liệu bán dẫn (ví dụ GaAs) mà lớp  $d$  của ion từ vừa hình thành các moment từ định xứ lại vừa tạo ra các lỗ trống, đóng vai trò hạt tải [2]. Tương tác trao đổi vì vậy đóng vai trò quan trọng trong việc hình thành các tính chất từ của hệ. Khi nhiệt độ thấp, hệ ở trạng thái sắt từ (FM) và khi tăng nhiệt độ qua giá trị tới hạn, hệ ở trạng thái thuận từ (PM). Sự chuyển pha thuận-sắt từ (PM-FM) luôn là tính chất quan trọng nhất trong việc khảo sát tính chất từ của hệ DMS [3].

Để hiểu được bản chất chuyển pha PM-FM trong vật liệu DMS, người ta thường cho rằng ở trạng thái PM, hệ tồn tại các đám sắt từ hay trạng thái polaron từ liên kết [4]. Khi giảm nhiệt độ, kích thước của polaron từ tăng làm tăng khả năng xen phủ giữa các đám sắt từ. Khi nhiệt độ nhỏ hơn nhiệt độ chuyển pha FM-PM, các đám sắt từ xen phủ hoàn toàn và hệ ở trạng thái FM. Để mô tả bức tranh chuyển pha này, người ta thường sử dụng lý thuyết thẩm polaron [4]. Trong bài báo này, chúng tôi sử dụng lý thuyết trường trung bình động (DMFT) để khảo sát sự hình thành trạng thái polaron trong vật liệu DMS. DMFT là lý thuyết khá thành công khi nghiên cứu các hệ điện tử tương quan mạnh, dựa trên gần đúng là năng lượng riêng của hàm Green một hạt không phụ thuộc vào xung lượng [5]. Kết quả vì vậy là chính xác khi số chiều của hệ là vô hạn [5]. Trong vật liệu DMS, hạt tải là lỗ trống. Các lỗ trống này có khả năng nhảy giữa các nút mạng tinh thể đồng thời tương tác trao đổi với momen từ định xứ. Vì vậy, để mô tả hạt tải trong vật liệu DMS, người ta thường sử dụng mô hình Kondo mạng. Mô hình này đã được áp dụng để mô tả tính chất thăng giáng spin của hệ DMS trong pha thuận từ bằng lý thuyết DMFT [6]. Hơn nữa, do mật độ lỗ trống nhỏ hơn rất nhiều so với mật độ của ion từ, dẫn tới việc hình thành các polaron từ. Polaron từ này có thể hiểu như là giả hạt tạo thành do lỗ trống phân cực các spin của ion tạp từ [7]. Lý thuyết DMFT vì vậy có khả năng mô tả tốt bức tranh polaron từ trong vật liệu DMS. Trong bài báo này tính chất polaron từ trong vật liệu DMS được khảo sát từ kết quả của tán xạ Raman  $B_{1g}$  trong khuôn khổ lý thuyết DMFT. Ở gần đúng số chiều vô hạn, hàm tương quan của tán xạ Raman không cần tính tới bỏ chính đỉnh, nên có thể dễ dàng xác định bằng lý thuyết DMFT [8].

Phân tích tán xạ Raman là cơ sở để nghiên cứu sự chuyển pha trong các loại vật liệu, đặc biệt khảo sát sự mất trật tự spin, sự hình thành trạng thái polaron từ hay các trạng thái sắt từ trong các hệ pha tạp từ [9]. Bằng lý thuyết polaron từ liên kết, người ta đã khảo sát tán xạ Raman để nghiên cứu tính chất polaron từ trong hệ DMS [10]. Trên cơ sở của lý thuyết DMFT, chúng tôi đã chỉ ra rằng khi tương tác trao đổi đủ lớn, tín hiệu tán xạ Raman xuất hiện đỉnh ở vùng năng lượng thấp, thể hiện sự tồn tại trạng thái polaron từ. Tín hiệu đỉnh này giảm khi tăng nhiệt độ thể hiện sự ảnh hưởng của thăng giáng nhiệt lên tính chất polaron từ.

Bài báo được chia làm 4 phần. Ngoài nội dung giới thiệu ở phần 1, chúng tôi trình bày mô hình và những tính toán lý thuyết ở phần 2. Phần 3 mô tả kết quả tính số và cuối cùng, phần 4 trình bày kết luận của bài báo.

## 2 MÔ HÌNH VÀ TÍNH TOÁN LÝ THUYẾT

Để mô tả tính chất của hạt tải trong hệ DMS, chúng tôi sử dụng mô hình Kondo mạng [3]. Trong gần đúng liên kết chặt, Hamiltonian của mô hình có thể viết dưới dạng

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + 2J \sum_i \alpha_i \mathbf{S}_i \mathbf{s}_i - \mu \sum_i n_i, \quad (1)$$

trong đó  $c_{i\sigma}^\dagger$  ( $c_{i\sigma}$ ) là toán tử sinh (hủy) hạt tải có spin  $\sigma$  tại nút  $i$ .  $t$  là tích phân nhảy nút được chuẩn hóa theo số chiều  $d$  của hệ,  $t = t^*/2\sqrt{d}$  [5]. Trong các tính toán dưới đây, chúng tôi đặt  $t^* = 1$  như là đơn vị của năng lượng.  $\mathbf{S}_i$  là momen từ của tạp chất định xứ tại nút  $i$  còn  $\mathbf{s}_i = \sum_{ss'} c_{is}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{ss'} c_{is'}/2$  là momen từ của hạt tải ( $\boldsymbol{\sigma}$  là các ma trận Pauli),  $\mu$  là thế hóa, và  $n_i = \sum_\sigma c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  là toán tử số hạt. Số hạng thứ 2 trong Hamiltonian (1) mô tả tương tác trao đổi trong vật liệu DMSs. Tham số  $\alpha_i$  có giá trị hoặc 1 hoặc 0 tương ứng với nút  $i$  có hoặc không ion từ. Nếu gọi  $x$  là mật độ ion từ pha tạp trong DMS, thì  $\alpha$  phân bố theo hàm

$$\mathcal{P}(\alpha) = (1-x)\delta(\alpha) + x\delta(1-\alpha), \quad (2)$$

Dưới đây, chúng tôi áp dụng lý thuyết DMFT cho mô hình được trình bày ở Hamiltonian (1). DMFT là lý thuyết trường trung bình phụ thuộc thời gian. Năng lượng riêng vì vậy không phụ thuộc vào xung lượng nhưng phụ thuộc vào tần số. Hàm Green của hạt tải vì vậy có thể viết dưới dạng

$$G_\sigma(i\omega_n) = \int d\varepsilon \rho(\varepsilon) \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon + \mu - \Sigma_\sigma(i\omega_n)}, \quad (3)$$

trong đó  $\omega_n = (2n+1)\pi T$  là tần số Matsubara ở nhiệt độ  $T$ ,  $\Sigma_\sigma(i\omega_n)$  là năng lượng riêng còn  $\rho(\varepsilon)$  là mật độ trạng thái của hạt tải không tương tác, có dạng  $\rho(\varepsilon) = \exp(-\varepsilon^2)/\sqrt{\pi}$ .

Hàm Green định xứ này có thể được xác định qua biểu thức

$$G_\sigma(i\omega_n) = \int d\alpha \mathcal{P}(\alpha) \frac{\delta \ln \mathcal{Z}_{\text{eff}}^\alpha}{\delta \mathcal{G}_\sigma^{-1}(i\omega_n)}, \quad (4)$$

với  $\mathcal{Z}_{\text{eff}}^\alpha$  là hàm phân bố còn  $\mathcal{G}_\sigma(i\omega_n)$  là hàm Green của trường hiệu dụng. Hàm phân bố được xác định bởi

$$\mathcal{Z}_{\text{eff}}^\alpha = \text{Tr} \int Dc_\sigma^\dagger Dc_\sigma e^{-S_{\text{eff}}^{[s,\alpha]}(c_\sigma^\dagger, c_\sigma)}. \quad (5)$$

Ở đây  $S_{\text{eff}}^{[s,\alpha]}(c_\sigma^\dagger, c_\sigma)$  là tác dụng của trường hiệu dụng

$$\begin{aligned} S_{\text{eff}}^{[s,\alpha]}(c_\sigma^\dagger, c_\sigma) &= - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma c_\sigma^\dagger(\tau) \mathcal{G}_\sigma^{-1}(\tau - \tau') c_\sigma(\tau') \\ &\quad + \int_0^\beta d\tau \sum_\sigma J s \sigma \alpha c_\sigma^\dagger(\tau) c_\sigma(\tau). \end{aligned} \quad (6)$$

Sử dụng phép biến đổi Fourier, tác dụng hiệu dụng trong phương trình (6) được viết lại

$$S_{\text{eff}}^{[s,\alpha]}(c_\sigma^\dagger, c_\sigma) = - \sum_{n\sigma} c_{n\sigma}^\dagger [\mathcal{G}_\sigma^{-1}(i\omega_n) - J s \sigma \alpha] c_{n\sigma}, \quad (7)$$

với  $c_{n\sigma}^\dagger$  và  $c_{n\sigma}$  là các biến Grassman, từ phương trình (5) ta thu được hàm phân bố

$$\mathcal{Z}_{\text{eff}}^\alpha = \text{Tr} \left[ 2 \exp \sum_{n\sigma} \ln \frac{\mathcal{G}_\sigma^{-1}(i\omega_n) - J s \sigma \alpha}{i\omega_n} \right]. \quad (8)$$

Từ phương trình (4) ta dễ dàng thu được hàm Green

$$G_\sigma(i\omega_n) = \sum_{\alpha s} \frac{W_{\alpha s}}{\mathcal{G}_\sigma^{-1}(i\omega_n) - J s \sigma \alpha}. \quad (9)$$

Ở đây,

$$W_{0s} = \frac{2(1-x)}{\mathcal{Z}_{\text{eff}}^0} \exp \sum_{n\sigma} \ln \frac{\mathcal{G}_\sigma^{-1}(i\omega_n)}{i\omega_n} \quad (10)$$

và

$$W_{1s} = \frac{2x}{\mathcal{Z}_{\text{eff}}^1} \exp \sum_{n\sigma} \ln \frac{\mathcal{G}_\sigma^{-1}(i\omega_n) - J s \sigma}{i\omega_n}. \quad (11)$$

Để thu được hệ phương trình tự hợp xác định hàm Green của hạt tải, chúng ta chú ý phương trình Dyson

$$G_\sigma^{-1}(i\omega_n) = \mathcal{G}_\sigma^{-1}(i\omega_n) - \Sigma_\sigma(i\omega_n). \quad (12)$$

Như vậy, từ các phương trình (3), (9), và (12) chúng tôi thu được hệ phương trình tự hợp cho phép xác định được các năng lượng riêng  $\Sigma_\sigma(i\omega_n)$  và các hàm Green tương ứng. Khi có kết quả của hàm Green, chúng ta có thể xác định được mật độ trạng thái (DOS)  $A_\sigma(\omega) = -\text{Im}G_\sigma(\omega)/\pi$ . Tán xạ Raman được xác định thông qua hàm phổ của hạt tải theo hệ thức

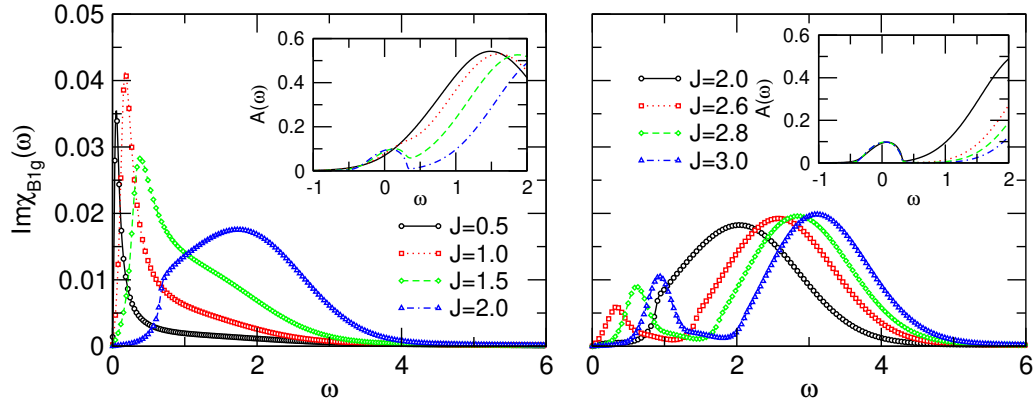
$$\text{Im}\chi_{B1g}(\omega) = \pi \int d\nu \int d\varepsilon \rho(\varepsilon) [f(\nu) - f(\nu + \omega)] A(\varepsilon, \nu) A(\varepsilon, \nu + \omega), \quad (13)$$

trong đó  $A(\varepsilon, \nu)$  là hàm phổ của hạt tải và  $f(\nu)$  là hàm phân bố Fermi-Dirac [8]. Ở pha thuận từ hàm Green của hạt tải với spin hướng lên và hướng xuống là như nhau, vì vậy ta có thể xác định  $A(\varepsilon, \nu)$  theo đồng nhất thức

$$A(\varepsilon, \nu) = A_\sigma(\varepsilon, \nu) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{\nu - \varepsilon + \mu - \Sigma_\sigma(\nu)}. \quad (14)$$

### 3 KẾT QUẢ TÍNH SỐ

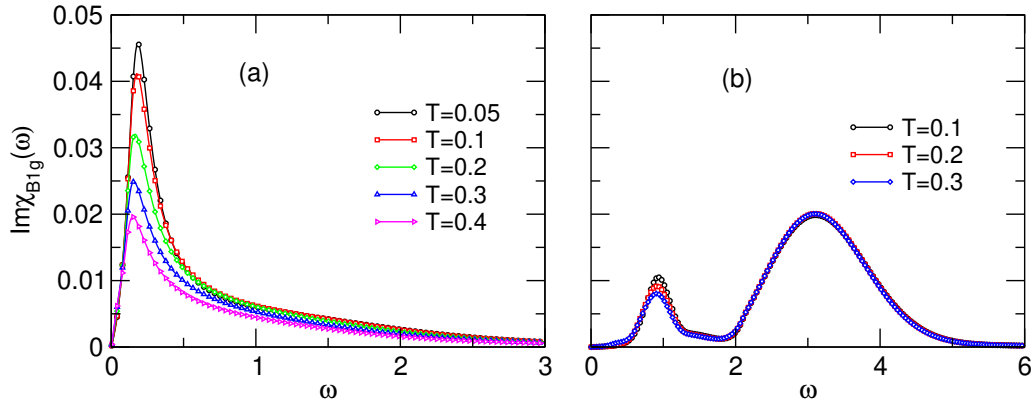
Trong phần này chúng tôi trình bày kết quả tính số mô tả trạng thái polaron từ trong vật liệu DMS thông qua khảo sát bức tranh tán xạ Raman được cho ở phương trình (13). Hàm phổ  $A(\varepsilon, \nu)$  được xác định với những giá trị cố định của nhiệt độ  $T$ , tương tác trao đổi  $J$ . Không mất tính tổng quát chúng ta xét hệ trong trường hợp mật độ pha tạp  $x = 0.1$  và mật độ hạt tải là  $n = 0.05$ . Khi đó thế hóa  $\mu$  được điều chỉnh để thỏa mãn điều kiện cố định mật độ hạt tải. Để thuận tiện, trong các tính toán số chúng tôi thực hiện trên tần số thực, khi đó các tần số Matsubara được thay bằng tần số thực theo phép kéo dài giải tích  $i\omega_n = \omega + i0^+$ .



Hình 1: Phần ảo của tán xạ Raman  $B_{1g}$ ,  $\text{Im}\chi_{B_{1g}}(\omega)$ , tại  $T = 0.1$  ứng với các giá trị khác nhau của  $J$  [(a)- $J$  nhỏ và (b)- $J$  lớn]. Các hình nhỏ thể hiện mật độ trạng thái tương ứng với các đường trong hình chính.

Hình 1 mô tả phần ảo của tán xạ Raman  $\text{Im}\chi_{B_{1g}}(\omega)$  như là hàm của tần số  $\omega$  với các giá trị khác nhau của hằng số tương tác  $J$  ở nhiệt độ  $T = 0.1$  đảm bảo hệ ở trạng thái thuận từ. Khi  $J$  nhỏ, Hình 1(a) cho ta thấy tán xạ Raman chỉ có một đỉnh duy nhất. Vị trí đỉnh dịch chuyển sang phải khi tăng cường độ tương tác. Như vậy, khi có tương tác từ, trong hệ xuất hiện thăng giáng spin và thăng giáng spin tăng khi tăng tương tác trao đổi. Đỉnh xuất hiện ở tán xạ Raman thể hiện sự tồn

tại trạng thái polaron từ trong pha thuận từ của hệ. Chú ý rằng, với  $J$  nhỏ, dải tạp chưa được hình thành hoặc nếu có thì vẫn chưa tách khỏi dải chính (xem hình nhỏ ở trong Hình 1a). Khi  $J$  lớn như trong Hình 1(b) dải tạp và dải chính tách nhau hoàn toàn và lúc này tán xạ Raman thể hiện cấu trúc 2 đỉnh rõ rệt. Đỉnh xuất hiện với tần số thấp cho ta tín hiệu sự tồn tại trạng thái polaron từ hình thành từ dải tạp, trong khi đỉnh xuất hiện với tần số cao thể hiện kích thích giả hạt hình thành do đóng góp của dải chính. Tăng cường độ tương tác, đỉnh ứng với tần số thấp dịch chuyển theo chiều tăng của năng lượng. Vì vậy, chúng ta có thể khẳng định trạng thái polaron từ hình thành do tương tác trao đổi giữa hạt tải với các momen tạp từ. Kết quả nghiên cứu của chúng tôi vì vậy phù hợp với quan sát trạng thái polaron từ trong DMS pha tạp thấp [9].



Hình 2: Phần ảo của tán xạ Raman  $B_{1g}$ ,  $\text{Im}\chi_{B_{1g}}(\omega)$ , khi  $J = 1$  (a) và khi  $J = 3$  (b) ứng với các giá trị khác nhau của nhiệt độ  $T$ .

Để khảo sát ảnh hưởng của nhiệt độ lên trạng thái polaron từ trong hệ DMS chúng tôi trình bày trên Hình 2 phần ảo của tán xạ Raman  $B_{1g}$  như là hàm của tần số  $\omega$  tại các nhiệt độ khác nhau khi hằng số tương tác trao đổi nhỏ [ $J = 1$ , Hình 2(a)] và khi hằng số tương tác lớn [ $J = 3$ , Hình 2(b)]. Từ Hình vẽ ta nhận thấy khi tăng nhiệt độ, vị trí đỉnh của tán xạ Raman dịch chuyển về phía tần số thấp cùng với giảm trọng số hàm phổ. Điều đó thể hiện thăng giáng nhiệt làm giảm khả năng tồn tại trạng thái polaron từ, thăng giáng spin vì vậy cũng giảm khi nhiệt độ tăng. Điều này hoàn toàn phù hợp với các lý thuyết khảo sát trạng thái polaron từ trong vật liệu DMS [4]. Như vậy, từ khảo sát các tính chất của tán xạ Raman, chúng tôi có thể khẳng định sự tồn tại của trạng thái polaron từ trong pha thuận từ của vật liệu DMS.

## 4 KẾT LUẬN

Trong bài báo này chúng tôi đã khảo sát bức tranh trạng thái polaron từ hình thành trong vật liệu bán dẫn từ pha loãng ở pha thuận từ. Bằng lý thuyết trường trung bình động, mô hình mạng Kondo đã được giải một cách tường minh cho phép ta xác định một cách tự hợp hàm Green của hạt tải trong vật liệu bán dẫn từ pha loãng. Khi bỏ qua bổ chính đỉnh, phần ảo của tán xạ Raman  $B_{1g}$  dễ dàng được xác định khi biết kết quả hàm phổ của hạt tải. Kết quả cho ta thấy, tại một nhiệt độ xác định, hệ tồn tại trạng thái polaron từ. Tăng cường độ tương tác trao đổi, đỉnh của tán xạ Raman thể hiện trạng thái liên kết polaron từ dịch về phía năng lượng cao. Tăng nhiệt độ cũng làm giảm đáng kể sự tồn tại trạng thái polaron từ. Kết quả nghiên cứu của chúng tôi vì vậy thể hiện rõ bản chất tồn tại trạng thái polaron từ trong vật liệu bán dẫn từ pha loãng. Việc khảo sát chi tiết hơn ảnh hưởng của nồng độ pha tạp, nồng độ của hạt tải hay cả thể mất trật tự lên bức tranh polaron từ trong vật liệu bán dẫn từ pha loãng là cần thiết và sẽ được chúng tôi tiến hành trong tương lai gần.

### Lời cảm ơn

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Quỹ Phát triển khoa học và công nghệ Quốc gia (NAFOSTED) trong đề tài mã số 103.01-2017.68.

### TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] T. Jungwirth, J. Wunderlich, V. Novák, K. Olejník, B. L. Gallagher, R. P. Campion, K. W. Edmonds, A. W. Rushforth, A. J. Ferguson, P. Němec (2014), *Reviews of Modern Physics* **86**, 855-896.
- [2] O.M. Fedorych, E. M. Hankiewicz, Z. Wilamowski, J. Sadowski (2002), *Physical Review B* **66**, 045201-1-045201-6.
- [3] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, D. Ferrand (2000), *Science* **287**, 1019-1022.
- [4] A. Kaminski, S. Das Sarma (2003), *Physical Review B* **68**, 235210-1-235210-6.
- [5] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. J. Rozenberg (1996), *Reviews of Modern Physics* **68**, 13-125.
- [6] Van-Nham Phan, Minh-Tien Tran (2015), *Physical Review B* **92**, 155201-1-155201-6.

- [7] A. Kaminski, S. Das Sarma (2002), Physical Review Letter **88**, 247202-1-247202-4.
- [8] J. K. Freericks, T. P. Devereaux, R. Bulla (2001), Physical Review B **64**, 233114-1-233114-4.
- [9] C. S. Snow, S. L. Cooper, D. P. Young, Z. Fisk, Arnaud Comment, Jean-Philippe Ansermet (2001), Physical Review B **64**, 174412-1-174412-12.
- [10] Masakatsu Umehara (2000), Physical Review B **61**, 12209–12215.

**Title:** MAGNETIC POLARON IN DILUTED MAGNETIC SEMICONDUCTORS

**Abstract:** Adapting the dynamical mean field theory for the Kondo lattice model, we have addressed the magnetic polaron formation in diluted magnetic semiconductors. After deriving a set of self-consistent equations determining the Green functions of the itinerant carriers, we express the  $B_{1g}$  channel Raman scattering in terms of the spectral functions. The Raman scattering signatures indicate a formation of the magnetic polaron in paramagnetic diluted magnetic semiconductors. Increasing magnetic coupling or decreasing temperature lead to grow the magnetic polaron state.

**Keywords:** Kondo lattice model, diluted magnetic semiconductors, dynamical mean field theory, magnetic polaron.