

## ОСОБЛИВОСТІ ЗОННОЇ СТРУКТУРИ НАДГРАТОК ТИПУ $(\text{CdTe})_m/(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})_n$

С. В. Мельничук, Я. М. Михайлевський, І. М. Юрійчук  
Чернівецький державний університет імені Юрія Федьковича,  
вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, 58012, Україна

(Отримано 19 січня 2000 р.; в остаточному вигляді — 14 червня 2000 р.)

Теоретично розрахована зонна структура надграток  $[100] (\text{CdTe})_m/(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})_n$  залежно від товщини напівпровідникових шарів  $\text{CdTe}$  і  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  та концентрації магнетної компоненти. Розрахунки проведені в рамках методу сильного зв'язку, базис якого включає  $s$ -,  $p$ -орбіталі кожного атома та  $d$ -орбіталі катіона. Проаналізовано внесок у формування енергетичного спектра надгратки  $3d$ -станів  $\text{Mn}$  в порівнянні з відповідним внеском у випадку об'ємного  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ . Показано, що надгратка на основі напівмагнетного  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  з невеликою товщиною шару  $\text{CdTe}$  є напівпровідниковим матеріалом з подібними до об'ємного  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  магнетними властивостями, але зі складнішою залежністю ширини забороненої зони від магнетної компоненти. Результати розрахунку апробовано при поясненні експериментального спектра фотолюмінесценції в надгратковій структурі на основі  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ .

**Ключові слова:** зонна структура, напівмагнетний напівпровідник, надгратка.

PACS number(s): 73.20.Dx, 78.66.Hf

### I. ВСТУП

Надгратки на основі напівмагнетного напівпровідника  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  викликають останнім часом значний інтерес у дослідників [1,2]. Завдяки магнетній компоненті такі гетероструктури мають унікальні оптичні й магнетні властивості, а саме, аномально велике зееманівське розщеплення, гігантське фарадеївське повертання площини поляризації світла та ін. [3]. Особливістю напівмагнетного напівпровідника  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  є можливість коригувати ширину його забороненої зони як умістом магнетної компоненти, так і магнетним полем. Для надграток типу  $(\text{CdTe})_m/(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})_n$  з'являється ще декілька ступенів вільності при керуванні шириною забороненої зони, пов'язаних з її залежністю від товщини напівпровідникових шарів, які складають надгратку. Незважаючи на те, що такі гетероструктури досить широко експериментально досліджуються, їхній енергетичний спектр і, особливо, спектр короткоперіодних надграток ( $n, m < 10$ ) вивчений недостатньо.

У цій роботі теоретично вивчено зонну структуру надграток  $(\text{CdTe})_m/(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})_n$  з напрямком росту  $[100]$  залежно від геометрії надгратки та концентрації магнетної домішки. Проаналізовано внесок у формування енергетичного спектра  $3d$ -станів  $\text{Mn}$  в порівнянні з відповідним внеском у випадку об'ємного кристала. Результати розрахунку апробовано при поясненні експериментального спектра фотолюмінесценції надгратки на основі  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ .

З геометричної точки зору надгратка  $(\text{CdTe})_m/(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})_n$  становить собою сукупність  $n$  атомних площин  $\text{CdTe}$  і  $m$  площин  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ , перпендикулярних певному кристалографічному напрямку, які періодично повторюються вздовж нього з періодом надгратки. Теоретичний підхід для розра-

хунку енергетичного спектра як надгратки, так і вихідних матеріалів базується на напівемпіричному методі сильного зв'язку, базис якого складають атомні орбіталі, центровані на вузлах кристала. У цій моделі враховано взаємодію тільки між найближчими сусідами. Модель дозволяє одержати реальну зонну структуру по всій зоні Бріллюена кристала для цілого ряду бінарних напівпровідників групи  $A^2B^6$  [4], в тому числі і для  $\text{CdTe}$ . Для напівмагнетного напівпровідника  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  необхідно враховувати наявність  $3d$ -орбіталей  $\text{Mn}$ , що робить задачу знаходження спектра нетривіальною. Зупинимось спочатку детальніше на розрахунку зонної структури об'ємного напівмагнетного напівпровідника в моделі сильного зв'язку.

### II. ЗОННА СТРУКТУРА ОБ'ЄМНОГО КРИСТАЛА

Напівмагнетний напівпровідник  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  є твердим розчином на основі сполуки зі структурою цинкової обманки —  $\text{CdTe}$ , у якому частина немагнетних катіонів заміщена елементом перехідної групи —  $\text{Mn}$ . Електронна зонна структура напівпровідникових сполук із магнетними компонентами достатньо повно вивчена теоретично й експериментально [5–7]. Зони  $sp$ -типу таких напівпровідників виявляють поведінку, аналогічну  $sp$ -зонам немагнетного матеріалу, а магнетні  $3d$ -електрони  $\text{Mn}$  утворюють зони, що розщеплюються в результаті сильної кулонівської та обмінної взаємодій. Більшість оптичних і магнетних властивостей напівмагнетного напівпровідника  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  можна пояснити обмінною взаємодією зонних  $sp$ -електронів і  $3d$ -електронів, а також  $\text{Mn}$ – $\text{Mn}$ -обмінною взаємодією [6]. Тому для коректного опису зонного спектра напівмагнетного на-

півпровідника базис гамільтоніяна повинен включати  $s$ -,  $p$ -орбіталі кожного атома та  $d$ -орбіталі катіона.

Гамільтоніян напівмагнетного напівпровідника має вигляд:

$$H = H_{sp} + H_d + H_{sp-d}. \quad (1)$$

Тут  $H_{sp}$  і  $H_{sp-d}$  — звичайний зонний гамільтоніян напівпровідника групи  $A^2B^6$ , до  $sp$ -базису якого додані катіонні  $d$ -орбіталі і  $s^*$ -орбіталі катіона й аніона. Останні дозволяють коректніше описати поведінку першої зони провідності у високосиметричних точках зони Бріллюена [4]. Матричні елементи гамільтоніяна  $H_{sp}$  в базисі сильного зв'язку виражаються через відомі параметри сильного зв'язку —  $E_{ss}$ ,  $E_{xx}$ ,  $E_{xy}$ ,  $E_{sac}$ ,  $E_{sca}$  [4], які для об'ємних CdTe і MnTe відшукували з аналітичного розв'язку відповідних секулярних задач у точках  $\Gamma$  і  $X$  зони Бриллюена:

$$\begin{aligned} E_{ss} &= \frac{1}{2}([E_{\Gamma_1^c} - E_{\Gamma_1^v}]^2 - [E_{sc} - E_{sa}]^2)^{\frac{1}{2}}, \\ E_{xx} &= \frac{1}{2}([E_{\Gamma_{15}^c} - E_{\Gamma_{15}^v}]^2 - [E_{pc} - E_{pa}]^2)^{\frac{1}{2}}, \\ E_{xy} &= \frac{1}{2}([E_{\Gamma_{15}^c} - E_{X_5^v}]^2 - [E_{sa} - E_{pc}]^2)^{\frac{1}{2}}, \\ E_{sac} &= \frac{1}{2}([E_{sa} + E_{pc} - 4E_{X_5^v}]^2 - [E_{sa} - E_{pc}]^2)^{\frac{1}{2}} \quad (2) \\ E_{sca} &= \frac{1}{2}([E_{sc} + E_{pa} - 4E_{X_5^v}]^2 - [E_{sc} - E_{pa}]^2)^{\frac{1}{2}}, \\ E_{sc} + E_{sa} &= E_{\Gamma_1^c} + E_{\Gamma_1^v}, \\ E_{pc} + E_{pa} &= E_{\Gamma_{15}^c} + E_{\Gamma_{15}^v}. \end{aligned}$$

Значення енергій  $E_{\Gamma}$  вибирали з експериментальних даних, а для гіпотетичного кубічного MnTe — з результатів першопринципних розрахунків [8]. Діагональні матричні елементи  $E_{sa}$ ,  $E_{sc}$ ,  $E_{pa}$ ,  $E_{pc}$  знаходили через відповідні енергії атомних станів [9]. Числові значення параметрів сильного зв'язку для CdTe і MnTe й обговорення методу їх вибору наведені в праці [10].

Доданок  $H_d$  описує внутрішньоцентрові обмінно-кореляційні ефекти в наполовину заповненій  $3d$ -зоні, що трактується в узагальненій формі Мотта-Габбарда [11]:

$$H_d = \sum_{i\mu\sigma} \left( \varepsilon_{\mu} n_{i\mu\sigma} + \frac{U}{2} n_{i\mu\sigma} n_{i\mu-\sigma} - \frac{J}{2} \sum_{\nu \neq \mu} n_{i\mu\sigma} n_{i\nu\sigma} \right). \quad (3)$$

Тут  $n_{i\mu\sigma}$  — числа заповнення  $3d$ -орбіталі типу  $\mu$  ( $\mu = t_{2g}, e_g$ ) зі спіном  $\sigma$  на  $i$  вузлі Mn. Параметри  $U$  і  $J$  відповідають за внутрішньоцентрову кулонівську

й обмінну взаємодію. Незважаючи на багаточастинкову природу гамільтоніяна (3), зонну структуру напівмагнетного напівпровідника можна описати в одноелектронному наближенні, у рамках якого  $3d$ -зони Mn розщеплюються на дві підзони, нижня з яких повністю заповнена і лежить у глибині валентної зони [7]. Величина розщеплення складає  $U_{\text{eff}} = U + 4J$ .

Доданок  $H_{sp-d}$  у (1) описує взаємодію між  $sp$ -станами зони і  $3d$ -станами Mn. Параметр  $V_{pd}$ , що характеризує величину  $p$ - $d$  гібридизації, оцінювали з експериментально вимірної константи обмінної  $sp$ - $d$  взаємодії:  $V_{pd} = 0.219$  eV [12].

Електронний спектр  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  розраховано в наближенні віртуального кристала на основі двох граничних випадків — CdTe і MnTe. Для гіпотетичного MnTe зі структурою цинкової обманки при визначенні параметрів сильного зв'язку використано результати розрахунків феромагнетної фази MnTe з перших принципів [8]. Необхідно розрізнити два напрямки спіну на вузлах MnTe: уверх —  $\uparrow$  і вниз —  $\downarrow$ . Парамагнетну фазу отримуємо, якщо припустити, що спіни обох орієнтацій у вузлах катіонної ґратки розподілені випадково. При параметризації гамільтоніяна парамагнетного MnTe це означає, що необхідно усереднити параметри сильного зв'язку для двох можливих напрямків спіну. Тому в наближенні віртуального кристала спектр парамагнетного  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  моделюється псевдочетвірним твердим розчином  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_{\uparrow x/2}\text{Mn}_{\downarrow x/2}\text{Te}$  [7].

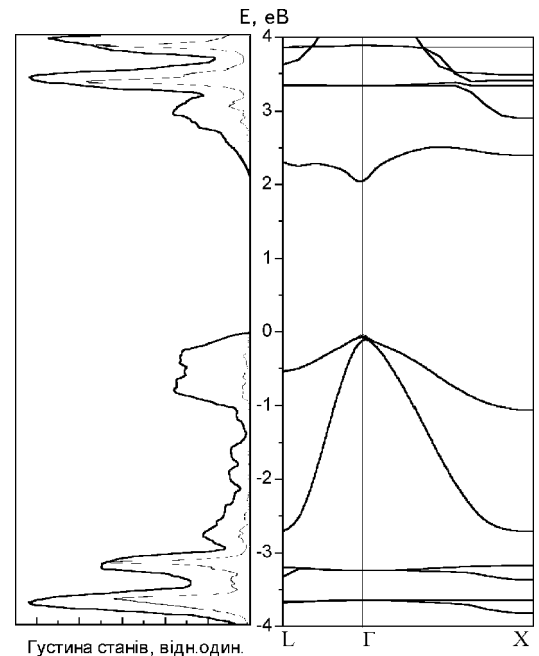


Рис. 1. Зонна структура та густина електронних станів напівпровідника  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ ,  $x = 0.24$ .

Величина внутрішньоцентрового ефективного розщеплення  $U_{\text{eff}}$ , яка задає положення заповнених і незаповнених  $3d$ -станів Mn, є визначальною при параметризації гамільтоніяна (2). Дослідження синхро-

тронного випромінювання й фотоемісійної спектроскопії в  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  свідчать, що зона заповнених  $3d$ -станів розташована на 3.4 eV нижче від краю валентної зони напівпровідника  $E_v$  [6,7]. Вивченням ультрафіолетової фотоемісії із зони провідності в  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  встановлено, що величина ефективного розщеплення знаходиться в межах  $U_{\text{eff}} = 7.0 \pm 0.2$  eV [12]. Це дозволяє стверджувати, що зони незаповнених  $3d$ -станів розташовані в ділянці першої зони провідності приблизно на віддалі 3.6 eV вище від краю валентної зони.

На рис. 1 зображено розрахований з отриманими параметрами зонний спектр напівмагнетного  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  при  $x = 0.24$ , а також густина електронних станів кристала. Густина електронних станів розраховувана інтегруванням за зоною Бріллюена методом спеціальних точок [14,15]. Парціальний внесок у густину  $3d$ -станів Mn показаний пунктирною лінією. Як видно з малюнка, нижче від краю валентної зони в ділянці між  $-4$  і  $-3$  eV спостерігаються два піки, які відповідають зоні заповнених  $3d$ -станів. Зона незаповнених станів дає максимум дещо вище від дна зони провідності. Відзначимо, що  $3d$ -стани роблять помітний внесок у стани валентної зони в ділянці від  $-2.5$  до  $0$  eV. Наші розрахунки спектра напівмагнетного напівпровідника збігаються в загальних рисах із теоретичними обчисленнями інших авторів.

### III. ЗОННИЙ СПЕКТР НАДҐРАТКИ

У випадку надґратки [100], сформованої з двох матеріалів зі структурою цинкової обманки, кожна атомна площина в перпендикулярному напрямку [100] містить атоми одного сорту (катиони або аніони), причому ці площини чергуються [13]. Надалі в теоретичному розгляді ми будемо вважати, що надґратка є ненапруженою, тобто постійна ґратки двох матеріалів, що утворюють надґратку, однакова. Це наближення для надґраток  $(\text{CdTe})_m/(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})_n$  справедливе для малих концентрацій  $x$  ( $x < 0.3$ ), оскільки різниця постійних ґраток CdTe і  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$

для  $x = 0.3$  складає величину не більшу від 1% [5].  
Виберемо систему координат, щоб вісь  $OZ$  була спрямована паралельно напрямкові [100], а осі  $OX$ ,  $OY$  — уздовж базисних векторів елементарних трансляцій двовимірної ґратки. Рівноважне положення довільного атома надґратки структури визначаємо вектором:

$$\mathbf{R}(plk) = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_z \mathbf{a}_z + \boldsymbol{\tau}_z^p + \boldsymbol{\tau}_{\parallel}^{pk}, \quad (4)$$

де  $\mathbf{a}_z$  — вектор елементарних трансляцій у напрямку [100],  $l_z$  нумерує періоди надґратки,  $p$  нумерує атомні площини в межах періоду надґратки ( $1 \leq p \leq 2(n+m)$ ), а вектор  $\boldsymbol{\tau}_z^p$  задає положення атомної площини  $p$ ;  $l_1, l_2$  — цілі числа;  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$  — вектори елементарних трансляцій двовимірної ґратки; вектор  $\boldsymbol{\tau}_{\parallel}^{pk}$  визначає позицію атома  $k$ -типу в атомній площині  $p$  усередині двовимірної елементарної комірки ( $k = 1, 2$ ).

Власні функції кристала характеризуються вектором  $\mathbf{k}$ , що лежить у межах зони Бріллюена надґратки. У моделі сильного зв'язку хвильову функцію кристала записуємо у вигляді лінійної комбінації атомних орбіталей  $\phi_{\alpha}(\mathbf{r})$ , центрованих на вузлах  $\mathbf{R}(plk)$ :

$$\Psi_{\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha p} c_{\alpha p}(\mathbf{k}\alpha) \phi_{\alpha}(\mathbf{r}). \quad (5)$$

Тут  $\alpha$  пробігає значення  $s^-$ ,  $p^-$ ,  $d^-$ ,  $s^*$ -орбіталей катіона і  $s^-$ ,  $p^-$ ,  $s^*$ -орбіталей аніона. Записуючи гамільтоніян (1) у базисі (5), одержуємо секулярну матрицю для розрахунку електронного спектра надґратки:

$$|H_{\alpha p, \alpha' p'}(\mathbf{k}\alpha) - E \delta_{ij}| = 0. \quad (6)$$

Матриця (6) має блочну структуру. Кількість блоків і відповідно розмірність матриці (6) залежать від товщини напівпровідникових шарів, які складають надґратку, тобто від чисел  $m$  і  $n$ . Загальна структура секулярної матриці подана в таблиці 1.

$H(a_1, a_1)$	$H(a_1, c_1)$	0	0	...	0	$H(a_1, c_{2(n+m)})$
$H(c_1, a_1)$	$H(c_1, c_1)$	$H(c_1, a_2)$	0	...	0	0
0	$H(a_2, c_1)$	$H(a_2, a_2)$	$H(a_2, c_2)$	...	0	0
0	0	...	...	...	0	0
...	...	...	...	...	...	...
...	...	...	...	...	...	...
$H(c_{2(n+m)}, a_1)$	0	0	0	...	$H(c_{2(n+m)}, a_{2(n+m)-1})$	$H(c_{2(n+m)}, \dots)$

Таблиця 1. Структура секулярної матриці надґратки.

Вигляд блоків  $H(bI, b'J)$  ( $1 \leq I, J \leq 2(n+m)$ ) гамільтонової матриці й відповідне обговорення наведені в праці [16], тут зробимо лише деякі зауваження. З огляду на взаємодію тільки з найближчими сусідами ненульовими є лише блоки з  $I = J, J \pm 1$ , тому матриця має стрічкову структуру. Циклічні крайові умови зумовлюють появу також ненульових блоків  $H(c_{2(n+m)}, a_1)$ ,  $H(a_{2(n+m)}, c_1)$ . Матричні елементи матриць  $H(bI, b'J)$ , що відповідають взаємодіям усередині напівпровідникових шарів, виражаються через параметри сильного зв'язку відповідного об'ємного напівпровідника. На границях розділу матричних елементів вибрано як середнє арифметичне відповідних величин об'ємних напівпровідників. У діагональних блоках різних напівпровідників необхідно врахувати зсув зон  $\Delta E_v$ , що має місце внаслідок наявності границі розділу двох кристалів. Величину зсуву зон надгратки  $(\text{CdTe})_m/(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})_n$  вибрано так, щоб при  $n, m \rightarrow \infty$  вона збігалася з експериментальним значенням  $\Delta E_v = 0.100$  меВ [17]. Зауважимо, що зміна цього параметра в межах від 0 до 200 меВ, як показують числові розрахунки, не впливає суттєво на спектр надгратки, особливо це стосується ширини забороненої зони.

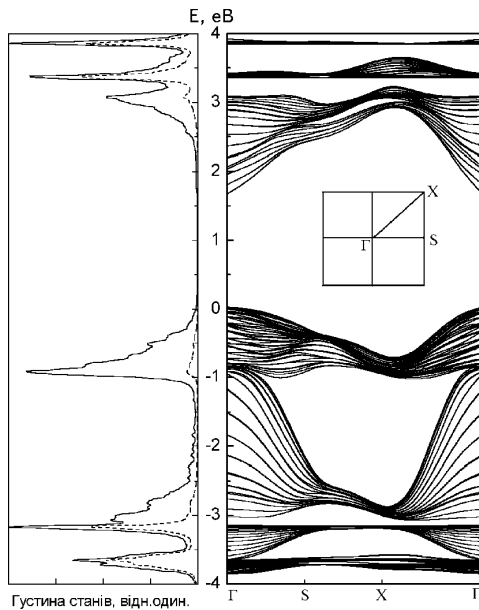


Рис. 2. Зонна структура та густина електронних станів надгратки [100]  $(\text{CdTe})_{10}/(\text{Cd}_{0.76}\text{Mn}_{0.24}\text{Te})_{16}$ . На вставці зображено поперечний переріз зони Бріллюена надгратки при  $k_z=0$ .

Енергетичний спектр надгратки при певному значенні хвильового вектора  $\mathbf{k}$  отримуємо в результаті діагоналізації секулярної матриці (6). На рис. 2, як приклад, зображено спектр надгратки [100]  $(\text{CdTe})_m/(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})_n$ , період якої містить 10 шарів CdTe і 16 шарів  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ . Результати розрахунку подано вздовж деяких високосиметричних напрямків зони Бріллюена надгратки. На рис. 2 також наведена повна густина станів надгратки та

парціальний внесок у неї 3d-станів Mn (пунктирна лінія). Спектр має складну структуру з характерними міні-зонами, які виникають у результаті “складання” в напрямку росту надгратки зон відповідних об'ємних кристалів. На рисунку можна чітко виділити групу рівнів, що відповідають 3d-станам Mn. Зона заповнених станів, як і в об'ємному  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  (рис. 1), розташована в глибині валентної зони  $E_v = -3.4$  еВ, а зона незаповнених станів — у зоні провідності ( $\sim 3.4$  еВ). Відзначимо, що енергетичне положення зон порівняно з відповідним розташуванням зон в об'ємному  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  не зазнає помітних змін. Аналіз парціальних густин дозволяє встановити вплив 3d-станів Mn на формування міні-зон надгратки. Як видно, внесок 3d-станів Mn у міні-зони, як валентної, так і зони провідності, незначний, тому можна стверджувати, що вони формуються, в основному, s-, p-станами двох напівпровідників. Аналогічні висновки справедливі і для спектра об'ємного  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  та спектра ідеальної поверхні кристала  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  [18], хоча в останніх двох випадках, а особливо у випадку ідеальної поверхні, 3d-стани дають помітніший внесок у зони. Відзначимо також, що зони незаповнених станів розташовані на більшій відстані вглиб зони провідності порівняно зі спектром ідеальної поверхні  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  [18], де для хвильових векторів на краю зони Бріллюена вони можуть навіть знаходитись у забороненому проміжку. Такі особливості спектра справедливі і для надграток з іншою кількістю шарів  $m, n$  та іншого складу, в тому числі і для короткоперіодних надграток.

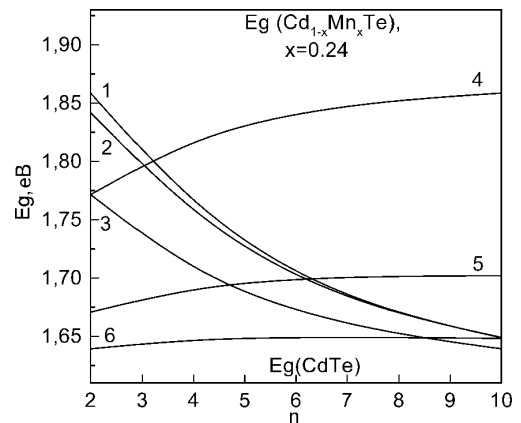


Рис. 3. Ширина забороненої зони надграток  $(\text{CdTe})_m/(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})_n$ ,  $x = 0.24$  залежно від товщини напівпровідникових шарів: 1 –  $(\text{CdTe})_n/(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})_{10}$ ; 2 –  $(\text{CdTe})_n/(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})_6$ ; 3 –  $(\text{CdTe})_n/(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})_2$ ; 4 –  $(\text{CdTe})_2/(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})_n$ ; 5 –  $(\text{CdTe})_6/(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})_n$ ; 6 –  $(\text{CdTe})_{10}/(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})_n$ .

Значної зміни, залежно від величини  $x$  і товщини напівпровідникових шарів, що утворюють надгратку, зазнає ширина забороненої зони  $E_g$ . На рис. 3 зображена залежність ширини забороненої зони надгратки

від кількості напівпровідникових шарів в інтервалі енергій від 1.61 eV (розрахована величина ширини забороненої зони  $E_g$  в моделі сильного зв'язку для CdTe) до 1.93 eV (розрахована  $E_g$  для  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ ,  $x = 0.24$ ). На рис. 4 ця залежність зображена для різного складу напівмагнетного напівпровідника  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  у випадку симетричних надграток ( $m = n$ ). Ширина забороненої зони для короткоперіодичних надграток суттєво залежить від кількості шарів. Причому зі зміною кількості шарів CdTe (криві 1,2,3)  $E_g$  змінюється різкіше, ніж при зміні кількості шарів  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  (криві 4,5,6). Зі збільшенням товщини CdTe  $E_g$  наближається до свого значення в об'ємному матеріалі — 1.61 eV.

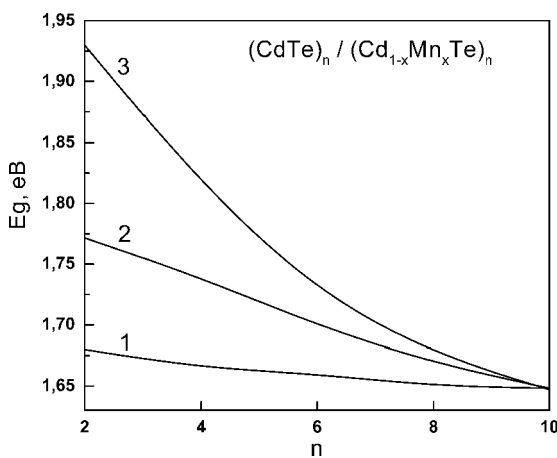


Рис. 4. Ширина забороненої зони симетричних надграток  $(\text{CdTe})_n / (\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})_n$  з різною концентрацією магнетної компоненти залежно від товщини напівпровідникових шарів: 1 —  $x = 0.10$ ; 2 —  $x = 0.24$ ; 3 —  $x = 0.50$ .

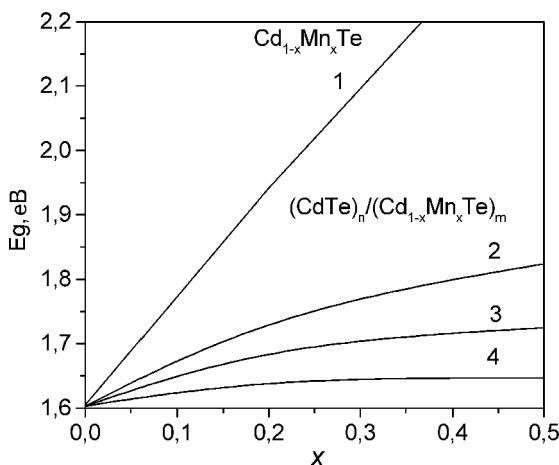


Рис. 5. Ширина забороненої зони надгратки  $(\text{CdTe})_m / (\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})_n$  залежно від концентрації магнетної компоненти для різних товщин шарів CdTe: 1 — об'ємний  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ ; 2 —  $m = 4$ ,  $n = 16$ ; 3 —  $m = 6$ ,  $n = 16$ ; 4 —  $m = 10$ ,  $n = 16$ .

На рис. 5 наведено залежність  $E_g$  від концентрації

Mn для надгратки, шар напівмагнетного матеріалу якої є досить великої товщини  $m = 16$ . Подано декілька залежностей для різної товщини шару CdTe, а також при його відсутності, тобто для об'ємного  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ . Ширина забороненої зони надграток, на відміну від ширини зони об'ємного  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ , нелінійно залежить від  $x$ , і це особливо важливо для надграток з великим  $n > 10$ . Відзначимо також, що в останньому випадку ширина зони при  $x > 0.3$  практично перестає залежати від концентрації Mn.

Таким чином, надгратка на основі напівмагнетного  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  з певною невеликою кількістю шарів CdTe є напівпровідниковим матеріалом з подібними до об'ємного  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  магнетними властивостями (оскільки останні зумовлені розташуванням  $3d$ -зон, що міняються незначно), але зі складнішою залежністю ширини забороненої зони від магнетної компоненти.

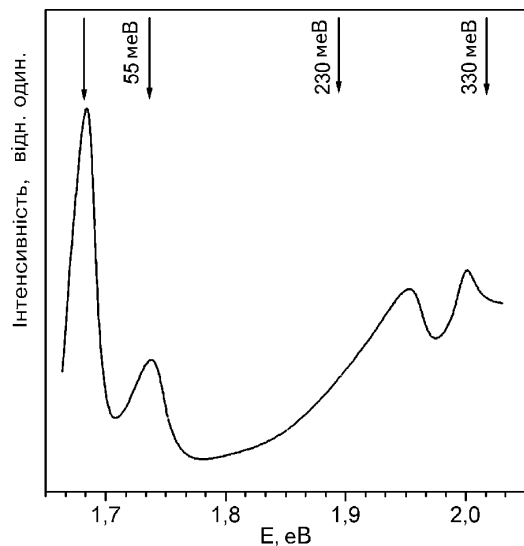


Рис. 6. Експериментальний спектр фотолюмінесценції надгратки  $(\text{CdTe})_{10} / (\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})_{16}$ ,  $x = 0.24$  [17]. Стрілками вказано розраховані відносні енергетичні віддалі міні-зон надгратки в точці Г зони Бріллюена.

У праці [17] досліджено екситонну фотолюмінесценцію в надграткових структурах типу  $(\text{CdTe})_m / (\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})_n$ . Спектр фотолюмінесценції надгратки  $(\text{CdTe})_{10} / (\text{Cd}_{0.76}\text{Mn}_{0.24}\text{Te})_{16}$  при  $T = 2$  K наведено на рис. 6, де в інтервалі енергій 1.6–2.1 eV спостерігаються чотири піки, перший з яких — при 1.685 eV. Інші три піки розташовані щодо першого відповідно на 55 meV, 240 meV, 305 meV. Експериментальні піки можна зіставити з точністю до енергії зв'язку екситона з переходами в точці Г зони Бріллюена з краю зони провідності на ряд міні-зон валентної зони. Перший пік відповідає, очевидно, переходам із краю зони провідності на групу рівнів надгратки, що формує край валентної зони. Розрахована ширина забороненої зони надгратки  $(\text{CdTe})_{10} / (\text{Cd}_{0.76}\text{Mn}_{0.24}\text{Te})_{16}$  складає 1.65 eV, що відрізняється від положення першого піка на величину

порядку енергії зв'язку екситона. Наступні піки на рис. 6 можна трактувати як переходи на групи рівнів, що утворюють перші міні-зони надґратки (рис. 2). У точці  $\Gamma$  ці міні-зони розташовані нижче від краю валентної зони на величину 55 меВ, 230 меВ, 330 меВ

відповідно, що непогано корелює з експериментальним положенням піків. Стрілками на рис. 6 ми вказали відносно положення перших міні-зон надґратки (поєднавши положення першої стрілки з першим експериментальним піком).

- 
- [1] W. Grieshaber, A. Haury, J. Cibert, Y. Merle d'Aubigne, A. Wasiela, J. A. Gaj, Phys. Rev. B **53**, 4891 (1996).
- [2] P. Chen, J. Nicholls, J. H. C. Hogg, T. Stirner, W. E. Hagston, B. Lunn, D. E. Ashenford, Phys. Rev. B **52**, 4732 (1995).
- [3] A. K. Bhattacharjee, G. Fishman, J. Cryst. Growth **184/185**, 942 (1998).
- [4] P. Vogl, H. P. Hjalmarson, J. D. Dow, J. Phys. Chem. Solids **44**, 365 (1983).
- [5] *Полумангнитные полупроводники* (Мир, Москва, 1992) [Перевод на русский под ред. Я. Фурдины, Я. Косуца].
- [6] B. E. Larson, K. C. Haas, H. E. Ehrenreich, A. E. Carlson, Phys. Rev. B **37**, 4137 (1988).
- [7] K. C. Haas, H. Ehrenreich, Acta Phys. Pol. A **73**, 933 (1988).
- [8] Su-Huai Wei, A. Zunger, Phys. Rev. B **35**, 2340, (1987).
- [9] У. Харрисон, *Электронная структура и свойства твердых тел* (Мир, Москва, 1983).
- [10] С. В. Мельничук, Я. М. Михайлевский, І. М. Паренко, І. М. Юрійчук, Наук. вісн. Чернівецького ун-ту, фізика, вип. 29, 39 (1998).
- [11] J. Masek, B. Velicky, V. Janis, J. Phys. C **20**, 59 (1987).
- [12] M. Taniguchi, K. Mimura, H. Sato, J. Harada, K. Miyazaki, H. Namatame, Y. Ueda, Phys. Rev. B **51**, 6932 (1995).
- [13] Ф. Бехштедт, Р. Ендерлайн, *Поверхности и границы раздела полупроводников* (Мир, Москва, 1990).
- [14] D. J. Chadi, M. L. Cohen, Phys. Rev. B **8**, 5747, (1973).
- [15] Y. R. Ren, J. D. Dow, J. Shen, Phys. Rev. B **38**, 10677, (1988).
- [16] С. В. Мельничук, В. І. Студенець, І. М. Юрійчук, Журн. фіз. досл. **1**, 570 (1997).
- [17] S. K. Chang, A. V. Nurmikko, J. W. Wu, L. A. Kolodzievski, R. L. Gunshor, Phys. Rev. B **37**, 1191 (1988).
- [18] С. В. Мельничук, Я. М. Михайлевский, І. М. Паренко, І. М. Юрійчук, Наук. вісн. Чернівецького ун-ту, фізика, вип. 40, 30 (1998).

## PECULIARITIES OF THE $(\text{CdTe})_m/(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})_n$ SUPERLATTICES BAND STRUCTURE

S. V. Melnychuk, Y. M. Mykhailevsky, I. M. Yuriychuk  
*Chernivtsi State University*  
 2 Kotsyubynski str., Chernivtsi, UA-58012, Ukraine  
 E-mail: microel@chdu.cv.ua

The band structure of the  $[100]$   $(\text{CdTe})_m/(\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})_n$  superlattices is calculated theoretically depending on the semiconductor CdTe and  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  layers width and magnetic component concentration. Calculations are carried out within semiempirical tight-binding method, which includes  $s$ -,  $p$ -orbitals of each atom and cation  $d$ -orbitals. The Mn  $3d$ -states contribution to the formation of the superlattice energy spectrum is analyzed and compared with the corresponding contribution in the case of bulk  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ . It is shown that a superlattice on the base of the diluted magnetic semiconductor  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  with a small width of CdTe layers is a semiconductor material with the similar magnetic properties but with a more complicated dependence of the crystal forbidden band gap on the magnetic component concentration. The results of band structure calculations are used for explaining the experimental photoluminescence spectrum of a superlattice based on  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ .