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

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 надґраток [100] $(\mathrm{CdTe})_m/(\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te})_n$ залежно від товщини напівпровідникових шарів CdTe і $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$ 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 енерґетичного спектра надґратки $3d$–станів Mn в порівнянні з відповідним внеском у випадку об'ємного $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$. Показано, що надґратка на основі напівмагнетного $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$ з невеликою товщиною шару CdTe є напівпровідниковим матеріялом з подібними до об'ємного $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$ магнетними властивостями, але зі складнішою залежністю ширини забороненої зони від магнетної компоненти. Результати розрахунку апробовано при поясненні експериментального спектра фотолюмінесценції в надґратковій структурі на основі $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$.

Ключові слова: зонна структура, напівмагнетний напівпровідник, надґратка.

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

I. ВСТУП

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

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

З геометричної точки зору надґратка $(\mathrm{CdTe})_m/(\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te})_n$ становить собою сукупність n атомних площин CdTe і m площин $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$, перпендикулярних певному кристалографічному напрямкові, які періодично повторюються вздовж нього з періодом надґратки. Теоретичний підхід для розрахунку енерґетичного спектра як надґратки, так і вихідних матеріялів 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 CdTe. Для напівмагнетного напівпровідника $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$ необхідно враховувати наявність $3d$–орбіталей Mn, що робить задачу знаходження спектра нетривіяльною. Зупинимось спочатку детальніше на розрахунку зонної структури об'ємного напівмагнетного напівпровідника в моделі сильного зв'язку.

II. ЗОННА СТРУКТУРА ОБ'ЄМНОГО КРИСТАЛА

Напівмагнетний напівпровідник $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$ є твердим розчином на основі сполуки зі структурою цинкової обманки — CdTe, у якому частина немагнетних катіонів заміщена елементом перехідної групи — 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 матеріялу, а магнетні $3d$–електрони Mn утворюють зони, що розщеплюються в результаті сильної кулонівської та обмінної взаємодій. Більшість оптичних і магнетних властивостей напівмагнетного напівпровідника $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$ можна пояснити обмінною взаємодією зонних sp–електронів і $3d$–електронів, а також Mn–Mn–обмінною взаємодією [6]. Тому для коректного опису зонного спектра напівмагнетного напівпровідника базис гамільтоніяна повинен включати s–, p–орбіталі кожного атома та d–орбіталі катіона.

Гамільтоніян напівмагнетного напівпровідника має вигляд:

$$H = H_{sp} + H_d + H_{sp-d}. \tag{1}$$

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 провідности 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_{ss}, E_{sapc}, E_{scpa} [4], які для об'ємних CdTe і MnTe відшукували з аналітичного розв'язку відповідних секулярних задач у точках Γ і X зони Бриллюена:

$$\begin{aligned}
E_{ss} &= \frac{1}{2}([E_{\Gamma_1^c} - E_{\Gamma_1^v}]^2 - [E_{sc} - E_{sa}]^2)^{\frac{1}{2}},\\
E_{xx} &= \frac{1}{2}([E_{\Gamma_{15}^c} - E_{\Gamma_{15}^v}]^2 - [E_{pc} - E_{pa}]^2)^{\frac{1}{2}},\\
E_{xy} &= \frac{1}{2}([E_{\Gamma_{15}^c} - E_{X_5^v}]^2 - [E_{sa} - E_{pc}]^2)^{\frac{1}{2}},\\
E_{sapc} &= \frac{1}{2}([E_{sa} + E_{pc} - 4E_{X_1^v}]^2 - [E_{sa} - E_{pc}]^2)^{\frac{1}{2}} \qquad (2)\\
E_{scpa} &= \frac{1}{2}([E_{sc} + E_{pa} - 4E_{X_1^v}]^2 - [E_{sc} - E_{pa}]^2)^{\frac{1}{2}},\\
E_{sc} + E_{sa} &= E_{\Gamma_1^c} + E_{\Gamma_1^v},\\
E_{pc} + E_{pa} &= E_{\Gamma_{15}^c} + E_{\Gamma_{15}^v}.
\end{aligned}$$

Значення енерґій E_Γ вибирали з експериментальних даних, а для гіпотетичного кубічного MnTe — з результатів першопринципних розрахунків [8]. Діягональні матричні елементи E_{sa}, E_{sc}, E_{pa}, E_{pc} знаходили через відповідні енерґії 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 трактуються в узагальненій формі Мотта–Габбарда [11]:

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

Тут $n_{i\mu\sigma}$ — числа заповнення $3d$–орбіталі типу μ ($\mu = t_{2g}$, e_g) зі спіном σ на i вузлі Mn. Параметри U і J відповідають за внутрішньоцентрову кулонівську й обмінну взаємодії. 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 виміряної константи обмінної sp–d взаємодії: $V_{pd} = 0.219$ еВ [12].

Електронний спектр $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$ 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 розрізняти 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 $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$ моделюється псевдочетвірним твердим розчином $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}{\uparrow}_{x/2}\mathrm{Mn}{\downarrow}_{x/2}\mathrm{Te}$ [7].

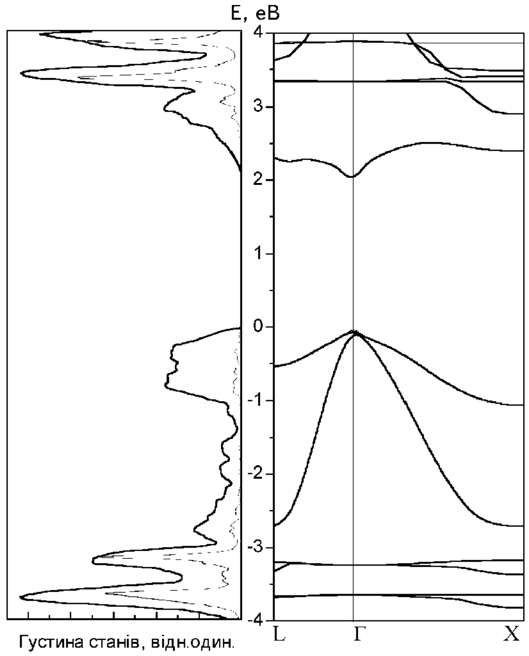

Рис. 1. Зонна структура та густина електронних станів напівпровідника $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$, $x = 0.24$.

Величина внутрішньоцентрового ефективного розщеплення U_{eff}, яка задає положення заповнених і незаповнених $3d$–станів Mn, є визначальною при параметризації гамільтоніяна (2). Дослідження синхротронного випромінювання й фотоемісійної спектроскопії в $Cd_{1-x}Mn_xTe$ свідчать, що зона заповнених $3d$–станів розташована на 3.4 еВ нижче від краю валентної зони напівпровідника E_v [6,7]. Вивченням ультрафіолетової фотоемісії із зони провідности в $Cd_{1-x}Mn_xTe$ встановлено, що величина ефективного розщеплення знаходиться в межах $U_{\text{eff}} = 7.0\pm0.2$ еВ [12]. Це дозволяє стверджувати, що зони незаповнених $3d$–станів розташовані в ділянці першої зони провідности приблизно на віддалі 3.6 еВ вище від краю валентної зони.

На рис. 1 зображено розрахований з отриманими параметрами зонний спектр напівмагнетного $Cd_{1-x}Mn_xTe$ при $x = 0.24$, а також густина електронних станів кристала. Густина електронних станів розраховувана інтеґруванням за зоною Бріллюена методом спеціяльних точок [14,15]. Парціяльний внесок у густину $3d$–станів Mn показаний пунктирною лінією. Як видно з малюнка, нижче від краю валентної зони в ділянці між -4 і -3 еВ спостерігаються два піки, які відповідають зоні заповнених $3d$–станів. Зона незаповнених станів дає максимум дещо вище від дна зони провідности. Відзначимо, що $3d$–стани роблять помітний внесок у стани валентної зони в ділянці від -2.5 до 0 еВ. 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 матеріялів зі структурою цинкової обманки, кожна атомна площина в перпендикулярному напрямку [100] містить атоми одного сорту (катіони або аніони), причому ці площини чергуються [13]. Надалі в теоретичному розгляді ми будемо вважати, що надґратка є ненапруженою, тобто постійна ґратки двох матеріялів, що утворюють надґратку, однакова. Це наближення для надґраток $(CdTe)_m/(Cd_{1-x}Mn_xTe)_n$ справедливе для малих концентрацій x ($x < 0.3$), оскільки різниця постійних ґраток CdTe і $Cd_{1-x}Mn_xTe$ 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:

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

де 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 $\mathbf{R}(plk)$:

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

Тут α 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:

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

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.

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

Таблиця 1. Структура секулярної матриці надґратки.

Вигляд блоків $\mathrm{H}(bI, b'J)$ $(1 \leq I,\ J \leq 2(n+m))$ 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 $\mathrm{H}(c_{2(n+m)}, a_1)$, $\mathrm{H}(a_{2(n+m)}, c_1)$. Матричні елементи матриць $\mathrm{H}(bI, b'J)$, що відповідають взаємодіям усередині напівпровідникових шарів, виражаються через параметри сильного зв'язку відповідного об'ємного напівпровідника. На границях розділу матричні елементи вибрано як середнє арифметичне відповідних величин об'ємних напівпровідників. У діягональних блоках різних напівпровідників необхідно врахувати зсув зон ΔE_v, що має місце внаслідок наявності границі розділу двох кристалів. Величину зсуву зон надґратки $(\mathrm{CdTe})_m/(\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te})_n$ вибрано так, щоб при $n,m \to \infty$ 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 надґратки, особливо це стосується ширини забороненої зони.

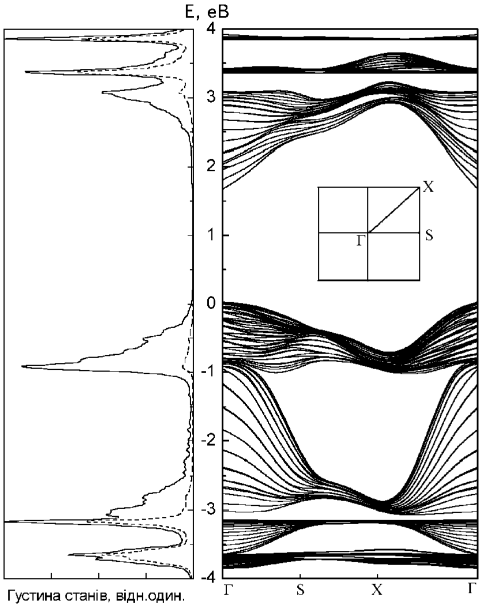

Рис. 2. Зонна структура та густина електронних станів надґратки [100] $(\mathrm{CdTe})_{10}/(\mathrm{Cd}_{0.76}\mathrm{Mn}_{0.24}\mathrm{Te})_{16}$. На вставці зображено поперечний переріз зони Бріллюена надґратки при k_z=0.

Енерґетичний спектр надґратки при певному значенні хвильового вектора $\mathbf{k}$ отримуємо в результаті діягоналізації секулярної матриці (6). На рис. 2, як приклад, зображено спектр надґратки [100] $(\mathrm{CdTe})_m/(\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te})_n$, період якої містить 10 шарів CdTe і 16 шарів $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$. Результати розрахунку подано вздовж деяких високосиметричних напрямків зони Бріллюена надґратки. На рис. 2 також наведена повна густина станів надґратки та парціяльний внесок у неї $3d$–станів Mn (пунктирна лінія). Спектр має складну структуру з характерними міні–зонами, які виникають у результаті "складання" в напрямку росту надґратки 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 $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$ (рис. 1), розташована в глибині валентної зони $E_v = -3.4$ еВ, а зона незаповнених станів — у зоні провідности (∼3.4 еВ). Відзначимо, що енерґетичне положення зон порівняно з відповідним розташуванням зон в об'ємному $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$ не зазнає помітних змін. Аналіз парціяльних густин дозволяє встановити вплив $3d$–станів Mn на формування міні–зон надґратки. Як видно, внесок $3d$–станів Mn у міні–зони, як валентної, так і зони провідности, незначний, тому можна стверджувати, що вони формуються, в основному, s–, p–станами двох напівпровідників. Аналогічні висновки справедливі і для спектра об'ємного $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$ та спектра ідеальної поверхні кристала $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$ [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 провідности порівняно зі спектром ідеальної поверхні $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$ [18], де для хвильових векторів на краю зони Бріллюена вони можуть навіть знаходитись у забороненому проміжку. Такі особливості спектра справедливі і для надґраток з іншою кількістю шарів m, n та іншого складу, в тому числі і для короткоперіодних надґраток.

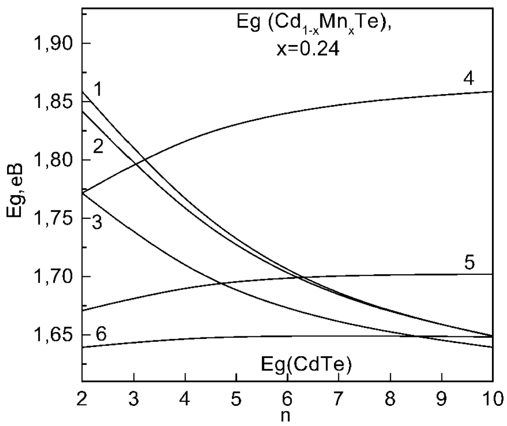

Рис. 3. Ширина забороненої зони надґраток $(\mathrm{CdTe})_m/(\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te})_n$, $x = 0.24$ залежно від товщини напівпровідникових шарів: 1 – $(\mathrm{CdTe})_n/(\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te})_{10}$; 2 – $(\mathrm{CdTe})_n/(\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te})_6$;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

Значної зміни, залежно від величини x і товщини напівпровідникових шарів, що утворюють надґратку, зазнає ширина забороненої зони E_g. На рис. 3 зображена залежність ширини забороненої зони надґратки від кількости напівпровідникових шарів в інтервалі енерґій від 1.61 еВ (розрахована величина ширини забороненої зони E_g в моделі сильного зв'язку для CdTe) до 1.93 еВ (розрахована E_g для $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$, $x = 0.24$). На рис. 4 ця залежність зображена для різного складу напівмагнетного напівпровідника $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$ у випадку симетричних надґраток ($m = n$). Ширина забороненої зони для короткоперіодичних надґраток суттєво залежить від кількости шарів. Причому зі зміною кількости шарів CdTe (криві 1,2,3) E_g змінюється різкіше, ніж при зміні кількости шарів $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$ (криві 4,5,6). Зі збільшенням товщини CdTe E_g наближається до свого значення в об'ємному матеріялі — 1.61 еВ.

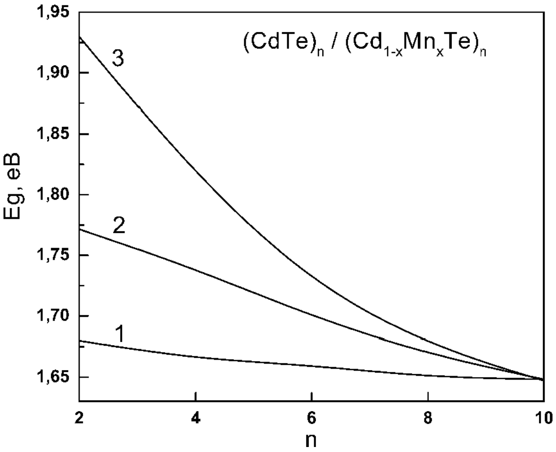

Рис. 4. Ширина забороненої зони симетричних надґраток $(\mathrm{CdTe})_n/(\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te})_n$ з різною концентрацією магнетної компоненти залежно від товщини напівпровідникових шарів: 1 — $x = 0.10$; 2 — $x = 0.24$; 3 — $x = 0.50$.

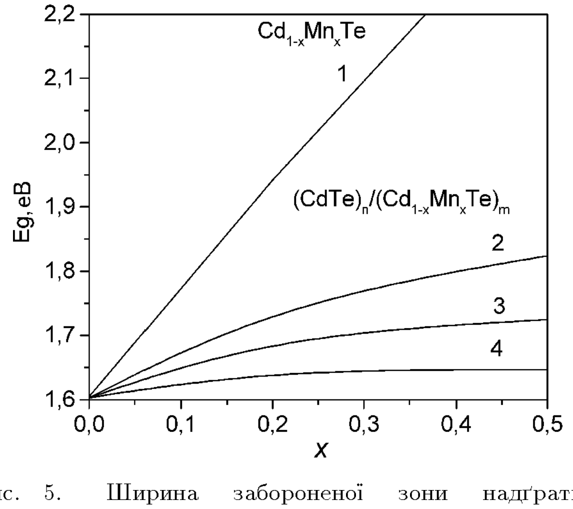

Рис. 5. Ширина забороненої зони надґратки $(\mathrm{CdTe})_m/(\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te})_n$ залежно від концентрації магнетної компоненти для різних товщин шарів CdTe: 1 — об'ємний $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$; 2 — $m = 4$, $n = 16$; 3 — $m = 6$, $n = 16$; 4 — $m = 10$,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

На рис. 5 наведено залежність E_g від концентрації Mn для надґратки, шар напівмагнетного матеріялу якої є досить великої товщини $m = 16$. Подано декілька залежностей для різної товщини шару CdTe, а також при його відсутності, тобто для об'ємного $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$. Ширина забороненої зони надґраток, на відміну від ширини зони об'ємного $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$, нелінійно залежить від x, і це особливо важливо для надґраток з великим $n > 10$. Відзначимо також, що в останньому випадку ширина зони при $x > 0.3$ практично перестає залежати від концентрації Mn.

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

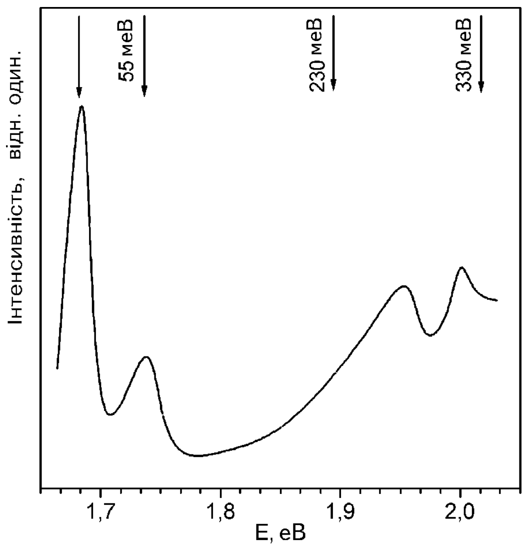

Рис. 6. Експериментальний спектр фотолюмінесценції надґратки $(\mathrm{CdTe})_{10}/(\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te})_{16}$, $x = 0.24$ [17]. Стрілками вказано розраховані відносні енерґетичні віддалі міні–зон надґратки в точці Г зони Бріллюена.

У праці [17] досліджено екситонну фотолюмінесценцію в надґраткових структурах типу $(\mathrm{CdTe})_m/(\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te})_n$. Спектр фотолюмінесценції надґратки $(\mathrm{CdTe})_{10}/(\mathrm{Cd}_{0.76}\mathrm{Mn}_{0.24}\mathrm{Te})_{16}$ при $T = 2$ K наведено на рис. 6, де в інтервалі енерґій 1.6–2.1 еВ спостерігаються чотири піки, перший з яких — при 1.685 еВ. Інші три піки розташовані щодо першого відповідно на 55 меВ, 240 меВ, 305 меВ. Експериментальні піки можна зіставити з точністю до енерґії зв'язку екситона з переходами в точці Г зони Бріллюена з краю зони провідности на ряд міні–зон валентної зони. Перший пік відповідає, очевидно, переходам із краю зони провідности на групу рівнів надґратки, що формує край валентної зони. Розрахована ширина забороненої зони надґратки $(\mathrm{CdTe})_{10}/(\mathrm{Cd}_{0.76}\mathrm{Mn}_{0.24}\mathrm{Te})_{16}$ складає 1.65 еВ, що відрізняється від положення першого піка на величину порядку енерґії 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 Г 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 відносне 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] *Полумагнитные полупроводники* (Мир, Москва, 1992) [Перевод на русский под ред. Я. Фурдины, Я. Косута].

[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 твeдых тел* (Мир, Москва, 1983).

[10] С. В. Мельничук, Я. М. Михайлевский, І. М. Раренко, 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. Раренко, І. М. Юрійчук, Наук. вісн. Чернівецького ун-ту, фізика, вип. 40, 30 (1998).

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

S. V. Melnichyk, Y. M. Mykhailevsky, I. M. Yurijchuk

Chernivtsi State University

2 Kotsyubynski str., Chernivtsi, UA–58012, Ukraine

E–mail: microel@chdu.cv.ua

The band structure of the [100] $(\mathrm{CdTe})_m/(\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te})_n$ superlattices is calculated theoretically depending on the semiconductor CdTe and $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$ 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 $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$. It is shown that a superlattice on the base of the diluted magnetic semiconductor $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$ 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 $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$.