

© 1998 р. С.В. Мельничук, Я.М. Михайлевський,
І.М. Раренко, І.М. Юрійчук

Чернівецький державний університет ім.Ю.Федьковича, Чернівці

ЗОННИЙ СПЕКТР ПОВЕРХНІ НАПІВМАГНІТНИХ НАПІВПРОВІДНИКІВ $Cd_{1-x}Mn_xTe$

Теоретично досліджено зонний спектр тетраедричних напівпровідників, обмежених ідеальною поверхнею (100). Розрахунки виконані в sps^* -моделі сильного зв'язку з урахуванням d -зон для напівпровідників CdTe, MnTe та їх твердих розчинів. Вивчено особливості спектру в залежності від концентрації магнітної компоненти.

Band structure of zinc-blende semiconductors with ideal (100) surface is investigated theoretically. Calculations for CdTe, MnTe semiconductors and their solid solutions are carried out in sps^* -tight-binding model with inclusion of d -zones. The peculiarities of spectrum in dependence on magnetic component concentration are investigated.

Властивості напівмагнітних напівпровідників, що містять іони Mn^{2+} , є об'єктом інтенсивних досліджень на протязі останніх років [1]. Сильна обмінна s - pd взаємодія (~ 1 eV) суттєво змінює структуру енергетичного спектру та поведінку вільних носіїв заряду.

Вивчення гетеропереходів та надграток за участю напівмагнітних напівпровідників відкриває нові можливості у дослідженні розмірно-залежних взаємодій. Найбільш вивченими на даний час є структури на основі CdTe/CdMnTe. Основна особливість таких гетеропереходів полягає у тому, що поверхня розділу містить різну кількість атомів Mn в залежності від його концентрації у твердому розчині та від кристалографічного напрямку. Це зумовлює зміну різноманітних обмінних взаємодій та впливає на фотолюмінесцентні, магнетооптичні та інші властивості даних структур.

Для дослідження властивостей надграток та гетеропереходів важливою є інформація про енергетичне положення та кількість поверхневих станів, що виникають внаслідок порушення трансляційної періодичності при утворенні границь розділу. Першим кроком у цьому напрямку є вивчення нереконструйованої границі розділу напівпровідникового кристалу з вакуумом (ідеальної поверхні). Дослідження особливостей зонного спектру ідеальної поверхні є основою для вивчення більш складних гетероструктур на базі напівмагнітних напівпровідників.

У даній роботі досліджується зонний спектр

ідеальної поверхні (100) напівпровідників CdTe, MnTe та їх твердих розчинів $Cd_{1-x}Mn_xTe$. Утворення ідеальної поверхні приводить до розриву властивих об'ємному напівпровіднику зв'язків. На кожному атомі, що знаходиться на поверхні (100), припадає два об'ємних і два розірваних зв'язки. Дегібридизовані стани, що відповідають обірваним зв'язкам, розщеплюються за рахунок взаємодії між сусідами та наявності трансляційної інваріантності в зоні поверхневих станів [2,3].

Гамільтоніан кристалу будовався в базисі сильного зв'язку, в який включено sp -орбітали кожного атому та d -орбітали катіонів. Параметри sp -, sd -, pd -взаємодій та діагональні матричні елементи визначалися на основі інформації про енергетичні рівні сполук у високосиметричних точках зони Бріллюена [4]. Розмірність матриці гамільтоніану кристалу, обмеженого ідеальною поверхнею, є безмежною. Для моделювання поверхні використовувався метод пластин [3], який полягає в тому, що напівбезмежний кристал обмежують другою поверхнею, яка ідентична першій. Система моделюється пластиною із скінченною товщиною, але безмежною у двох інших вимірах. Як показують чисельні розрахунки, хвильові функції поверхневих станів на протилежних поверхнях не перекриваються вже при врахуванні 12-15 атомних площин. Подальше збільшення кількості атомних шарів не впливає на структуру енергетичного спектру поверхні.

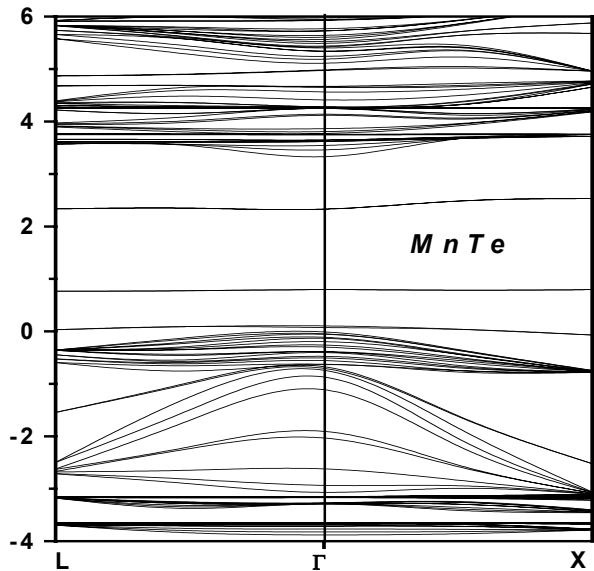
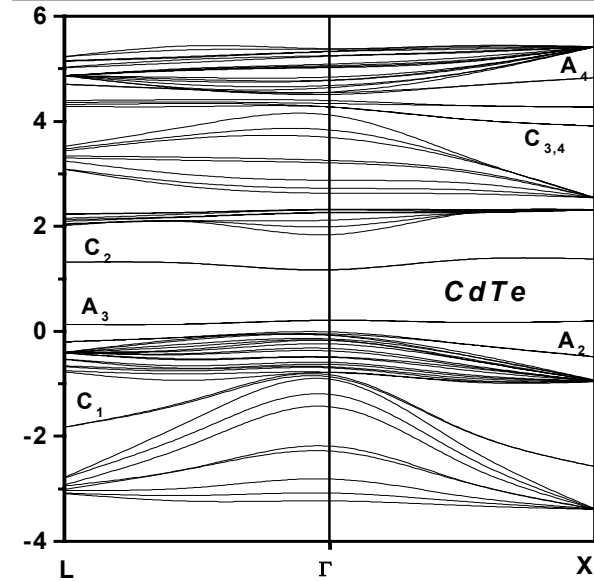


Рис.1. Зонний спектр поверхні (100) напівпровідників CdTe та MnTe.

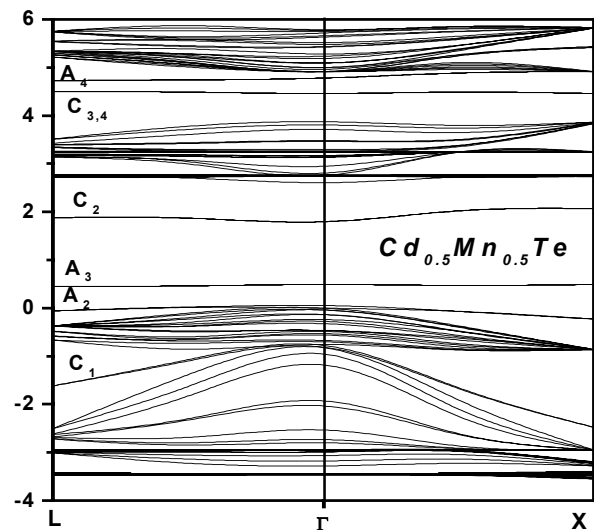


Рис.2. Зонний спектр поверхні (100) напівмагнітного напівпровідника $Cd_{1-x}Mn_xTe$.

На рис.1 приведено розраховану зонну структуру поверхні (100) вздовж деяких високосиметричних напрямків зони Бріллюена для CdTe та MnTe. Поверхня (100) в напівпровіднику з структурою цинкової обманки є полярною, тобто може складатись або з катіонів (Cd, Mn), або із аніонів (Te). Поверхневі стани, що відповідають двом типам поверхні, позначені відповідно через C_i та A_i . Для аніонної поверхні CdTe, як видно із рис.1, спостерігається 5 поверхневих зон. Стани A_1 відщеплюються від s -орбіталей, A_2 і A_3 від p -станів валентної зони. Для катіонної поверхні також маємо 5 поверхневих зон. Стани C_1 і C_2 походять від s -орбіталей катіона.

Для MnTe, крім аналогічних як у CdTe зон, що породжені станами валентної зони і зони провідності, характерною є поява поверхневих d -зон. В порівнянні з об'ємним MnTe, поверхневі d -зони помітно розщеплюються як в точці Г, так і в інших точках зони Бріллюена. Це приводить до того, що край зони провідності поверхні MnTe нарівні з катіонними s -станами, формується також станами ($e_g \downarrow$) Mn. Дисперсія поверхневих зон, що знаходяться в забороненій зоні об'ємного матеріалу для CdTe більша, ніж для MnTe, оскільки заборонена зона CdTe вужча і стани дозволених зон суттєвіше впливають на поверхневі стани у забороненій зоні.

На рис.2 приведено зонний спектр поверхні для кристалу $Cd_{1-x}Mn_xTe$, де $x=0,5$ (рис.2). Як видно із розрахунків, в наближенні віртуального кристалу має місце монотонна залежність положення поверхневих рівнів від концентрації Mn. Для детальнішого аналізу поведінки поверхневих d -зон необхідно провести розрахунок спроектованих на поверхню парціальних густин електронних станів, що є предметом подальших досліджень.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Zunger A. Electronic structure of 3d transition-atom impurities in semiconductors // Solid Stat. Phys., ed. by H.Ehrenreich, D. Turnbull, Orland: Acad.Press. - 1986. - 39. - P.276-464.
2. Нестеренко Б.А., Снитко О.В. Физические свойства атомарно-чистой поверхности полупроводников. - Киев.: Наукова думка, 1983.
3. Бехштедт Ф., Ендерлайн Р. Поверхности и границы раздела полупроводников. - М.: Мир, 1990.
4. Мельничук С.В., Михайлевський Я.М., Раренко І.М., Юрійчук І.М. Зонна структура напівмагнітних твердих розчинів $Cd_{1-x}Mn_xTe$ // Науковий вісник ЧДУ. Вип. 29: Фізика. - Чернівці: ЧДУ, 1998. - С.39-44.