

УДК 530.29

С.В. Мельничук¹, Я.М. Михайлевський¹, І.М. Юрійчук²¹Чернівецький національний університет, кафедра теоретичної фізики²Чернівецький національний університет,
кафедра напівпровідникової мікроелектроніки**НЕПРЯМА ОБМІННА ВЗАЄМОДІЯ В НАПІВМАГНІТНОМУ
НАПІВПРОВІДНИКУ $Cd_{1-x}Mn_xTe$** S.V. Melnychuk¹, Y.M. Mykhaylevsky¹, I.M. Yuriyчук²¹National University of Chernivtsi, department of theoretical physics²National University of Chernivtsi, department of semiconductor microelectronics**INDIRECT EXCHANGE INTERACTION IN SEMIMAGNETIC
SEMICONDUCTOR $Cd(1-X)Mn(X)Te$**

© Мельничук С.В., Михайлевський Я.М., Юрійчук І.М., 2001

Проаналізовано залежність констант непрямой обмінної взаємодії напівмагнітного напівпровідника $Cd_{1-x}Mn_xTe$ від хвильового вектора зони Бріллюена з врахуванням його реальної зонної структури. Розрахунок зонної структури виконано в *sps-моделі сильного зв'язку з включенням в базис *3d*-станів іону Mn. Запропонована модель дає кількісно наближені до експериментальних даних величини зееманівського розщеплення зонних станів у точці L зони Бріллюена. Вивчено залежність констант обмінної взаємодії від вмісту магнітного іона Mn.**

The dependence of indirect exchange interaction parameters of semimagnetic semiconductor $Cd_{1-x}Mn_xTe$ on wave vector of Brillouine zone is analyzed taking into account its real band structure. Calculation of band structure is carried out in the framework of *sps tight-binding model, which basis includes *3d*-states of Mn ion. Proposed model gives the values of Zeeman splitting of band states that are close to experimental data. The dependence of exchange interaction parameters on the content of Mn ion is studied.**

Вступ. У напівмагнітному напівпровіднику (НМН) $Cd_{1-x}Mn_xTe$ взаємодія між локалізованими *d*-електронами магнітної компоненти і делокалізованими зонними станами зумовлює цікаві магнітні і оптичні ефекти, зокрема сильне зееманівське розщеплення валентної зони і зони провідності. Магнітний іон в напівпровіднику обмінною взаємодією поляризує зонні електрони, що, своєю чергою, приводить до взаємодії між спінами двох магнітних іонів. Ця, так звана непряма обмінна взаємодія є аналогом РККІ взаємодії в металі для напівпровідника. Непрямий обмін і відповідні константи обмінної взаємодії в НМН досліджувалися різними авторами [1–4]. У теоретичних розрахунках допускалася параболічність зон напівпровідника або вибиралася проста модель сильного зв'язку [1, 2]. Як відомо, оптичні процеси в напівпровіднику відбуваються, переважно, з участю міжзонних переходів електрон-дірка, для пояснення яких важливим є врахування деталей зонного спектра напівпровідника.

У цій роботі ми проаналізували непряму обмінну взаємодію в НМН $Cd_{1-x}Mn_xTe$, враховуючи реальну зонну структуру напівпровідника, яка розраховувалася у *sps**-моделі

сильного зв'язку [5, 6] з включенням в базис локалізованих $3d$ -станів іону Mn. Ця модель з відповідним набором параметрів, що визначаються підгонкою до експериментальних даних, дає змогу досить точно описати зонну структуру цілого ряду напівпровідників групи A^2B^6 . Використання такого підходу дало нам можливість прослідкувати залежність константи непрямой обмінної взаємодії від хвильового вектора зони Бріллюена кристала.

Зонна структура $Cd_{1-x}Mn_xTe$. Напівмагнітний напівпровідник $Cd_{1-x}Mn_xTe$ є твердим розчином на основі сполуки із структурою цинкової обманки – $CdTe$, у якому частина немагнітних катіонів заміщена елементом перехідної групи – Mn. Більшість особливостей його оптично магнітних властивостей неможливо пояснити без врахування сильної гібридизації $3d$ -електронів Mn з зонними sp -станами [1]. Тому базис задачі обов'язково повинен включати разом з s , p -орбіталями кожного атома також d -орбіталі Mn. Вибираємо як базис центровані на вузлах \mathbf{R} ґратки атомні орбіталі катіона і аніона $\varphi_{v\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ ($v=c, a$ – відповідає катіону і аніону, $\alpha=s, s^*, p_x, p_y, p_z$) і $3d$ -функції Mn $\phi_{dm}(\mathbf{r} - \mathbf{R})$, де m визначає проекцію орбітального моменту.

Модельний гамільтоніан НМН має такий вигляд:

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

де $H_{sp} = \sum_{n,k,\sigma} \varepsilon_n(k) c_{nk\sigma}^+ c_{nk\sigma}$ – звичайний зонний гамільтоніан напівпровідника групи A_2B_6 ,

sp -базис якого додатково включає s^* -орбіталі катіона й аніона. s^* -орбіталі мають s -симетрію і дають змогу коректніше описати поведінку першої зони провідності напівпровідника [6]; $c_{nk\sigma}^+$ – оператори народження електрона з хвильовим вектором \mathbf{k} і спіном σ в зоні n . Доданок H_d описує внутріцентрові обмінно-кореляційні ефекти в наполовину заповненій d -зоні, що трактується в узагальненій формі Мотта–Хаббарда [7]:

$$H_d = \sum_{im\sigma} \left(\varepsilon_d n_{im\sigma} + \left(\frac{U}{2} \right) n_{im\sigma} n_{im-\sigma} - \left(\frac{J}{2} \right) \sum_{m \neq m'} n_{im\sigma} n_{im'\sigma} \right), \quad (2)$$

де $n_{im\sigma}$ – числа заповнення d -орбіталі на i вузлі Mn, ε_d – енергія d -електронів.

Параметри U і J характеризують внутріцентрову кулонівську й обмінну взаємодію, відповідно. В рамках одноелектронного наближення d -зони Mn розщеплюються на дві підзони, нижня з яких повністю заповнена і лежить вглибині валентної зони, а величина розщеплення становить $U_{eff} = U + 4J$ [7]. Останній доданок в (1) описує взаємодію між d і sp -станами зони.

Електронний спектр $Cd_{1-x}Mn_xTe$ розраховувався в наближенні віртуального кристала на основі двох граничних випадків – $CdTe$ і $MnTe$. Матричні елементи гамільтоніана (1) в базисі сильного зв'язку виражаються через параметри сильного зв'язку, які для об'ємних $CdTe$ і $MnTe$, наведені в [8]. Якщо для $CdTe$ ці параметри знаходилися безпосередньо з експериментальних даних, то для $MnTe$ зі структурою цинкової обманки при визначенні параметрів сильного зв'язку використовувалися результати першопринципних розрахунків феромагнітної фази $MnTe$ [9].

Величина ефективного внутріцентрового розщеплення d -станів Mn – $U_{eff} = U + 4J$, як свідчать результати дослідження синхротронного випромінювання і фотоемісійної спектроскопії в $Cd_{1-x}Mn_xTe$, становить $U_{eff} = 7,0 \pm 0,2$ еВ [10]. Ще один важливий параметр задачі – V_{pd} , що характеризує величину p - d гібридизації, оцінювався з експериментально вимірною константи обмінної sp - d взаємодії: $V_{pd} = 0,219$ еВ. Зонна структура $Cd_{1-x}Mn_xTe$ розрахована з

вказаними параметрами і відповідне обговорення наведені в [8]. Тут тільки зауважимо, що зона заповнених d -станів розташована на $\varepsilon_d = -3,4$ еВ нижче від краю валентної зони напівпровідника, тоді як зони заповнених d -станів знаходяться в області першої зони провідності приблизно на віддалі 3,6 еВ вище від краю валентної зони. Такі особливості зонної структури узгоджуються з відомими експериментальними результатами.

Константи непрямой обмінної взаємодії. Непряма обмінна взаємодія в напівмагнітному напівпровіднику типу $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ складається з двох конкуруючих механізмів – феромагнітного і антиферомагнітного, що відповідають взаємодії магнітного іона з носіями різних зон НМН [2]. Слабкіший і додатний (феромагнітний) обмін відповідає обмінній взаємодії з зонними станами першої зони провідності, яка сформована переважно катіонними s -станами, тому цей обмін є, передусім, одноцентровим. Сильніша, антиферомагнітна взаємодія зумовлена взаємодією магнітного іона з зонними станами заповненої зони напівпровідника, які мають, насамперед, аніонний p -тип. Цей обмін є результатом обмінної взаємодії d -станів Mn з орбіталями p -типу сусідніх іонів Te, і, враховуючи сильну p - d гібридизацію, характерну для НМН, більшою мірою залежить від параметрів напівпровідникової матриці і від хвильового вектора зони Бріллюена.

Гамільтоніан непрямой обмінної взаємодії має такий вигляд:

$$H_{ex} = -\frac{1}{2} \sum_i \sum_{nkk'} J_n(\mathbf{k}, \mathbf{k}') e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}} S_i \left[\sum_{\mu\nu} c_{nk\mu}^+ \sigma_{\mu\nu} c_{nk'\mu} \right], \quad (3)$$

де $\sigma_{\mu\nu}$ – матриці Паулі; $J_n(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ – константа обмінної взаємодії між локалізованим магнітним моментом $3d$ -оболонки S і зонними станами $\psi_{nk}(\mathbf{r})$, $\psi_{nk'}(\mathbf{r})$;

$$J_n(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_m \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \phi_{dm}^*(\mathbf{r}) \psi_{nk}^*(\mathbf{r}') w(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) \phi_{dm}(\mathbf{r}') \psi_{nk'}(\mathbf{r}), \quad (4)$$

де $w(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$ – екранований кулонівський потенціал.

Ефективний гамільтоніан, який описує зеєманівське розщеплення зонних станів в магнітному полі \mathbf{B} , має такий вигляд:

$$H_z = -\mu_B g^i B s - J_n(\mathbf{k}, \mathbf{k}) \mathbf{M} \mathbf{B}, \quad (5)$$

де s – спін електрона; g^i – ефективний g -фактор; \mathbf{M} – намагніченість, для якої в наближенні середнього поля маємо $\mathbf{M} = N \chi \langle \mathbf{S} \rangle$; N – кількість катіонів на одиницю об'єму і $\langle \mathbf{S} \rangle$ – усереднений спін іона Mn.

Перший член в (5) описує пряму взаємодію зонних станів з магнітним полем, а другий – зумовлений обмінною взаємодією з d -електронами Mn. Таким чином, величина констант обмінної взаємодії $J_n(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ визначає величину ефективного зеєманівського розщеплення зонних станів, а залежність величини розщеплення по зоні Бріллюена буде визначатися відповідною залежністю констант обмінної взаємодії від хвильового вектора \mathbf{k} . Константи обмінної взаємодії для зони провідності і валентної зони прийнято позначати $J_c(\mathbf{k}, \mathbf{k}) = N\alpha$ і $J_v(\mathbf{k}, \mathbf{k}) = N\beta$, відповідно [1]. Розглянемо залежність констант $N\alpha$ і $N\beta$ від хвильового вектора в рамках наведеної вище моделі сильного зв'язку.

Зонна функція в моделі сильного зв'язку має такий вигляд:

$$\psi_{nk}(\mathbf{r}) = \sum_{v,\alpha} a_{nk v \alpha} \left[\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \phi_{v\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \boldsymbol{\tau}_v) \right], \quad (6)$$

де для катіона і аніона відповідно маємо $\boldsymbol{\tau}_c = (0,0,0)$ і $\boldsymbol{\tau}_a = (a/4, a/4, a/4)$; a – стала ґратки.

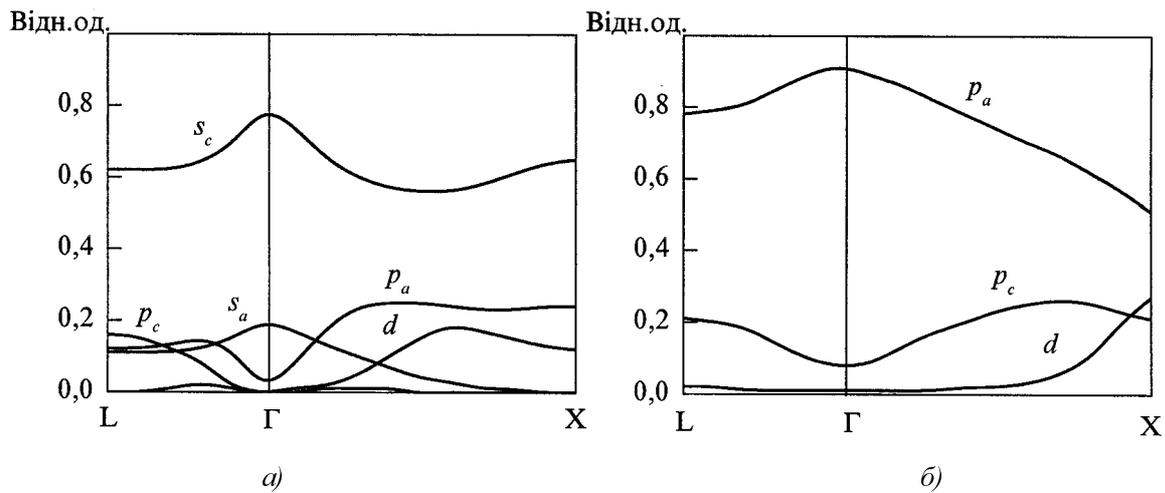


Рис. 1. Відносний внесок базисних sp і d -функцій у хвильову функцію зони провідності (а) і валентну зону (б) НМН $Cd_{0,6}Mn_{0,4}Te$ для різних значень хвильового вектора зони Бріллюена напівпровідника

Коефіцієнти розкладу $a_{nk\nu\alpha}$ – це власні вектори гамільтоніана (1) в базисі сильного зв'язку, які отримуються діагоналізацією відповідної секулярної матриці. Зауважимо, що оскільки базис задачі включає d -функції, то відповідні коефіцієнти розкладу для d -функцій в (6) будуть відмінними від нуля. Це означає, що d -функції можуть давати деякий внесок в зонні стани НМН, величина якого залежить від хвильового вектора зони Бріллюена. На рис. 1 показано внесок у хвильову функцію зони провідності (а) і валентної зони (б) базисних sp і d -функцій вздовж деяких високосиметричних напрямків зони Бріллюена. Як приклад ми привели результати розрахунку для НМН $Cd_{1-x}Mn_xTe$ із вмістом Mn $x=0,4$. Як видно з рис. 1 зона провідності формується, переважно s -станами катіона, а валентна зона – p -орбітальми аніона. Проте d -функції дають помітний внесок, величина якого зростає при наближенні хвильового вектора до краю зони. Його величина істотніша для валентної зони – результат sp - d гібридизації. Якісно такі самі результати для sp -функцій одержуються і для інших значень x , на відміну від випадку d -функцій, внесок яких збільшується із зростанням вмісту Mn.

Згідно з (4) константа обмінної взаємодії виражається через обмінні одноцентрові і двоцентрові інтеграли типу

$$I_{c\alpha} = \sum_m \int d^3r \int d^3r' \phi_{dm}^*(\mathbf{r}) \phi_{v\alpha}^*(\mathbf{r}') w(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) \phi_{dm}(\mathbf{r}') \phi_{v\alpha}(\mathbf{r}). \quad (7)$$

Для розрахунку обмінних інтегралів ми використали атомні одноелектронні хвильові функції слетерівського типу, які для спрощення числових обчислень розкладалися по гауссових орбітальх [11,12]. Екранований кулонівський потенціал вибирався у вигляді

$$w(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) = \frac{e^2 e^{-\eta(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}}{\epsilon \epsilon_0 (|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}, \quad (8)$$

де η – константа екранування, яку визначали з умови, що відповідна константа обмінної взаємодії в точці Г дорівнювала експериментальній величині 0,22 eV.

Враховуючи те, що зона провідності сформована переважно s -станами катіона в константу $N\alpha$, основний внесок дають обмінні інтеграли, центровані на одному вузлі, тобто інтеграли (7) з $v\alpha=cs$. Залежність $N\alpha$, вздовж найцікавіших з експериментальної точки зору напрямків зони Бріллюена, показана на рис. 2, а.

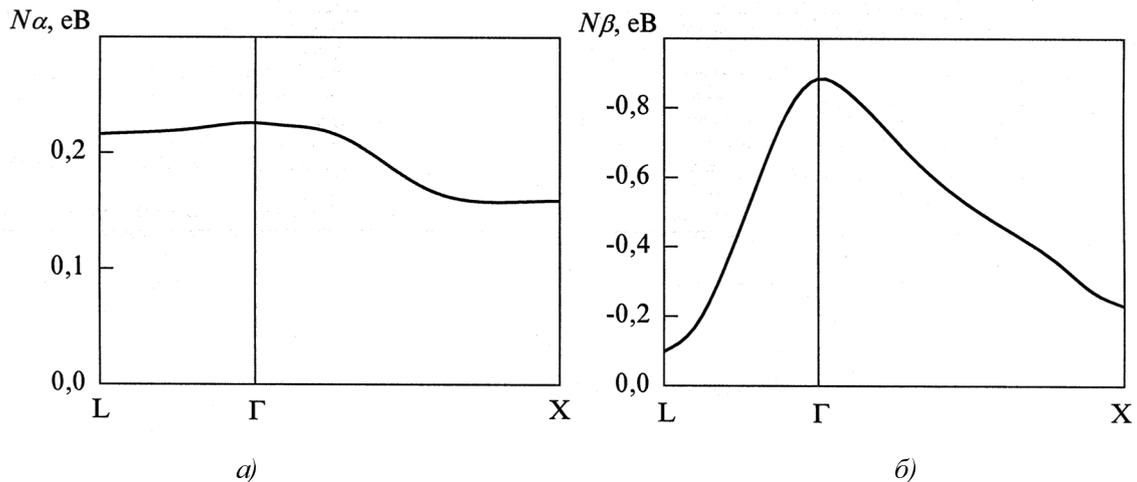


Рис. 2. Залежність константи непрямой обмінної взаємодії для зони провідності (а) і валентної зони (б) НМН $Cd_{0,6}Mn_{0,4}Te$ від хвильового вектора зони Бріллюена напівпровідника

Константа обмінної взаємодії $J_v(\mathbf{k}, \mathbf{k})$ для валентної зони визначається насамперед обмінною взаємодією $3d$ -електронів і p -станів аніона і істотно залежить від величини p - d гібридизації, тобто від доданка H_{pd} гамільтоніана (1). Для валентної зони можна знехтувати обміном типу (7) [2]. Здійснюючи над гамільтоніаном (1) унітарне перетворення, що виключає H_{pd} для константи $J_v(\mathbf{k}, \mathbf{k})$, отримаємо такий вираз [2, 4]:

$$J_v(\mathbf{k}, \mathbf{k}) = -2|V_{kd}^v|^2 \left[\frac{1}{\varepsilon_{kv} - \varepsilon_d} + \frac{1}{\varepsilon_d + U_{eff} - \varepsilon_{kv}} \right], \quad (9)$$

де ε_{kv} – енергія зонних електронів,

$$V_{kd}^v = \sum_{p_i} a_{vkap_i} \left[\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\delta} e^{-ik\delta} V_{p_i d} \right]. \quad (10)$$

Сумування по δ ведеться по чотирьох найближчих сусідах магнітного іона. $V_{p_i d}$ – параметри сильного зв'язку гамільтоніана напівмагнітного напівпровідника. Зауважимо, що оскільки ці параметри визначалися на основі експериментального значення константи обмінної взаємодії $N\beta = -0,88$ еВ в точці Γ , то результати розрахунку константи у цій точці збігаються з експериментальними. Залежність константи $N\beta$ від хвильового вектора показана на рис. 2, б.

Як свідчать результати розрахунку, константи непрямой обмінної взаємодії набувають максимальних значень у точці Γ зони Бріллюена. Константа $N\alpha$ практично не залежить від хвильового вектора вздовж напрямку $\Gamma - L$, і дещо зменшується при наближенні до точки X . Для константи $N\beta$ спостерігається сильніша залежність по зоні Бріллюена, зокрема по абсолютній величині константа на краю зони, як в точці L , так і в точці X в декілька разів менша від її величини у точці Γ . Така поведінка констант якісно узгоджується з результатами, отриманими в [2–4], розрахунки яких базувалися на більш грубих моделях. Проте наші результати виявили деякі кількісні відмінності. Так, для константи $N\alpha$, яка в усіх роботах вважалася незалежною від хвильового вектора, у нас прослідковується залежність від вектора \mathbf{k} , якою не можна знехтувати, особливо у точці X зони Бріллюена. Це – результат коректного врахування дисперсії власних векторів $a_{nk\nu\alpha}$ у зоні Бріллюена, що входять у вираз для константи обмінної взаємодії (4). Для константи обмінної взаємодії з

валентною зоною, наші розрахунки у точці L дають дещо менші значення (приблизно у два рази) порівняно з [2, 4] і відмінні від нуля у точці X, що ближче до цих експериментальних вимірів.

Співвідношення між величиною констант у точках L і Γ та відповідно між величиною зеєманівського розщеплення електронних станів у цих точках в НМН $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ дискутується до сьогодні. Якнайповніше оптично магніті вимірювання міжзонних переходів у $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ були проведені в широких межах концентрацій Mn і температур в [4]. Результати роботи дають для співвідношення зеєманівського розщеплення у точках L і Γ зони Бріллюена значення $\Delta E_L/\Delta E_\Gamma=1/16$. Розраховані співвідношення обмінних констант у простій моделі сильного зв'язку – $\Delta E_L/\Delta E_\Gamma=1/4$ [4], що набагато менше від експериментальної величини. Оптично магніті ефекти поблизу точки L зони Бріллюена НМН $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ досліджувалися також в [3]. Величина зеєманівського розщеплення ΔE в критичних точках Γ і L визначена на основі теоретико-групового аналізу і у випадку неорієнтованого зразка становить

$$\Delta E_1 = r(N\alpha - N\beta) |x \langle S_z \rangle|, \quad (11)$$

де $r=1$ для точки Γ і $r=0.43$ для точки L.

Розрахована в роботі [3] величина розщеплення в точці L дорівнює $\Delta E_L=0,19$ еВ, що майже втричі менше від експериментальної, відповідно співвідношення розщеплення у двох точках становить $\Delta E_L/\Delta E_\Gamma \approx 1/5$.

Розраховані нами за (4) і (9) константи непрямой обмінної взаємодії для НМН $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ у точці L дорівнюють $N\alpha = 0,20$, $N\beta = -0,09$, величина розщеплення становить $\Delta E_L=0,12$ еВ, а співвідношення розщеплення у двох точках – $\Delta E_L/\Delta E_\Gamma \approx 1/9$. Результати наших розрахунків кількісно дещо краще корелюють з експериментальними даними. У точці X для констант отримаємо $N\alpha = 0,16$, $N\beta = -0,22$, величина розщеплення становить $\Delta E_X=0,19$ еВ, а $\Delta E_X/\Delta E_\Gamma \approx 1/6$. Для цієї точки експериментальних даних немає. Ми навели результати розрахунку констант у випадку НМН $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ з $x=0,4$. Як свідчать розрахунки, константи обмінної взаємодії у точках L і Γ зони Бріллюена практично не залежать від вмісту магнітного іона Mn. У точці X така залежність істотна тільки для константи $N\beta$ і становить приблизно 10 % при зміні x на 0,1.

Висновки. Виконані в роботі теоретичні дослідження непрямой обмінної взаємодії в НМН $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ дають змогу проаналізувати дисперсію констант обмінної взаємодії у зоні Бріллюена. Константи набувають максимальних значень у точці Γ і в кілька разів менші за абсолютною величиною на краю зони. Розрахунок базується на врахуванні реальної зонної структури напівпровідника, отриманої в рамках *sps**-моделі сильного зв'язку, з включенням в базис *3d*-станів іону Mn, і дає ближчі до експерименту величини зеєманівського розщеплення зонних станів на краю зони Бріллюена. Отже, послідовний розрахунок констант обмінної взаємодії повинен враховувати залежність власних векторів секулярної матриці напівпровідника від хвильового вектора.

1. Полумангнитные полупроводники / Под ред. Я. Фурдины., Я. Косуца. – М., 1992.
2. Larson B.E., Haas K.C., Ehrenreich H.E., Carlson A.E. // *Phys. Rev. B.*, 1988. – 37. – P. 4137–4153.
3. Bhattacharjee A.K. // *Phys. Rev. B.*, 1990. – 41. – P. 5696–5700.
4. Coquillatt D., Lascaray J.P., Gaj J.A., Deportes J., Furdyna J.K. // *Phys. Rev. B.*, 1989. – 39. – P. 10088–10097.
5. Харрисон В. Электронная структура и свойства твердых тел. – М., 1983. – 6.
6. Vogl P., Hjalmarson H.P., Dow J.D., // *J. Phys. Chem. Solids*, 1983. – 44. – P. 365–378.
7. Haas K.C.,

Ehrenreich H. // Acta Physica polonica, 1988. – A73. – P. 933–941. 8. Мельничук С.В., Михайлевський Я.М., Раренко І.М., Юрійчук І.М. // Наук. вісн. Чернівецького університету. 1998. – 29. С.39–41. 9. Su-Huai Wei, Zunger A. // Phys. Rev. B., 1987. – 35. – P. 2340–2357. 10. Taniguchi M., Mimura K., Sato H., Harada J., Miyazaki K., Namatame H., Ueda Y. // Phys. Rev. B., 1995. – 51. – P. 6932–6939. 11. Ohata K., Taketa H., Huzinaga S. // J. Phys. Jap., 1966. – 21. – P. 2306–2319. 12. Мельничук С.В., Михайлевський Я.М., Савчук А.И., Трифоненко Д.Н. // ФТТ, 1997. – 39. – С. 344–347.

УДК 537.311.322

С.В. Сиротюк, Ю.Є. Кинаш, С.Н.Краєвський
 Національний університет “Львівська політехніка”,
 кафедра напівпровідникової електроніки

ЕЛЕКТРОННА ЕНЕРГЕТИЧНА СТРУКТУРА ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ Si_xGe_{1-x}

S.V.Syrotyuk, Yu.E.Kynash, and S.N.Kraevskiy
 National University “Lviv Polytechnic”, department of Electrophysics

ELECTRON ENERGY STRUCTURE OF THE Si_xGe_{1-x} SOLID SOLUTIONS

© Сиротюк С.В., Кинаш Ю.Є., Краєвський С.Н., 2001

Розраховано електронні енергетичні спектри Si, Ge і твердих розчинів Si_xGe_{1-x} у наближенні функціонала локальної електронної густини. Матриця гамільтоніана обчислювалась у змішаному базисі, який включає функції Блоха глибоких електронів та плоскі хвилі. Отримані зонні енергії Si і Ge краще узгоджуються з експериментом, ніж розраховані за методом атомних апріорних псевдопотенціалів. Виявлено, що в околі концентрації Si $x=0,25$ зонні енергії електронів провідності у долинах L_{1c} та X_{1c} відрізняються тільки на соті частки eВ, тобто отримується багатодолинний напівпровідник, у якому ширина забороненої зони менша від аналогічної у чистому Si, але більша від такої у чистому Ge.

The electronic energy bands of Si, Ge and solid solutions Si_xGe_{1-x} have been evaluated by means of the local electronic density functional approximation. The Hamiltonian matrix has been calculated on mixed basis including the core Bloch states and plane waves. The band energies in Si and Ge obtained here are in better agreement with experiment than ones calculated within the atomic norm-conserving ab initio pseudopotential approach. We found that in the vicinity of Si concentration $x=0.25$ the band energies of conduction electrons at L_{1c} and X_{1c} differs each other by 10^{-2} eV, and therefore we deal with multivalley semiconductor, in which the band gap is less than in pure Si and greater than in pure Ge.

Вступ. Тверді розчини Si_xGe_{1-x} є перспективними для виготовлення біполярних інтегральних схем на гетеропереходах. Тому дослідження їхніх фізичних властивостей проводиться сьогодні як для масивних, так і для плівкових зразків [1]. Ниткоподібні кристали