

ВПЛИВ КОНЦЕНТРАЦІЇ Mn НА ШИРИНУ ЗАБОРОНЕНОЇ ЗОНИ ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ ЗАМІЩЕННЯ CdMnTe

Семків І.В.¹, к.т.н.; Ільчук Г.А.¹, д.ф.-м.н., проф.;
Кашуба А.І.^{1,2}, к.ф.-м.н.; Петрусь Р.Ю.¹, к.ф.-м.н.; Змійовська Е.О.¹

¹ Національний університет “Львівська політехніка”, м. Львів

² Львівський національний університет імені Івана Франка, м. Львів

Об’єктом дослідження слугували кристалічні сполуки твердого розчину заміщення $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ з концентрацією компоненти мангану $x = 0.032; 0.12; 0.31$.

На основі експериментальних рентгенівських дифрактограм встановлено, що позиції піків рефлексів з ростом компоненти мангану зміщуються, а сталі кристалічної ґратки зменшуються.

Спектральні залежності оптичного поглинання монокристалічних твердих розчинів сполук CdMnTe в діапазоні від 300 до 1100 нм отримано з використанням спектрофотометра AvaSpec-2048 фірми AVANTES. Дослідження проводилося для двох сполук з концентрацією мангану $x = 0.032; 0.31$.

На спектрах оптичного поглинання спостерігається чітке положення краю фундаментального оптичного поглинання. Оскільки CdMnTe є прямозонним напівпровідником, то спектр було перебудовано в координатах $(\alpha \cdot hv)^2 - hv$. Провівши екстраполяцію лінійних ділянок кривих $(\alpha \cdot hv)^2$ до перетину з віссю абсцис було отримано значення оптичної ширини забороненої зони даної сполуки. Для концентрації $x = 0.032$ значення становить $E_g = 1.496$ еВ, а для концентрації $x = 0.31$ набуває значення $E_g = 1.989$ еВ, що відповідає даним сполукам.

Розрахунки зонно-енергетичних властивостей монокристалічних зразків CdMnTe проводили з використанням теорії функціоналу густини (DFT). Для опису обміннокореляційних властивостей сполук використовувалось наближення узагальненої градієнтної апроксимації GGA з параметризацією Пердю, Бурке і Ернцгергофа.

Дослідження зонно-енергетичних діаграм дозволяють охарактеризувати твердий розчин за допомогою концентраційної зміни ширини забороненої зони E_g . На основі отриманих результатів можна зробити висновок, що зміна значення E_g при зміні концентрації відповідає лінійному закону з певними відхиленням. Відхилення від лінійної концентраційної залежності ширини забороненої зони у твердих розчинах поширене для твердих розчинів. Зумовлено це надлишковими носіями (електронами і дірками), що призводять до збільшення ширини забороненої зони E_g .