Document Type: Full length research Paper

Pages: 69-80

Structural and electronic properties of $InSb_{1-x}Bi_x$(x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1)

Saba Ahmadvand, Shirin Namjoo*, Mahsa Ganji, Mehrdad Dadsetani

Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Lorestan University, Khorramabad, Lorestan, Iran

Received: 06.10.2023 Final revised: 11.11.2023 Accepted: 29.01.2024

Doi: 10.22055/jrmbs.2024.18899

Abstract

In this study, the structural properties and electronic band structure of $InSb_{1-x}Bi_x$ (x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) alloys are investigated using density functional theory utilizing the WIEN2K package. The results related to the structural properties showed that the lattice constant, as a function of x, is in excellent agreement with Vegard's linear rule. Calculations involving the investigation of the band structure using the mBJGGA exchange-correlation potential reveal that InSb is a semiconductor with a small gap , exhibiting a normal band order at the Γ point while InBi is a metal that exhibits a band inversion at the Γ point. By adding Bi to InSb and forming $InSb_{0.75}Bi_{0.25}$ and $InSb_{0.25}Bi_{0.75}$ alloys, the normal band order and the gap at the Γ point disappear. This leads to a transition from a narrow band gap semiconductor with normal band order (InSb) to a gapless semiconductor ($InSb_{0.75}Bi_{0.25}$) and a metal ($InSb_{0.25}Bi_{0.75}$) with an inverted band order. By replacing half of the Sb atoms with Bi atoms in InSb and creating the $InSb_{0.5}Bi_{0.5}$ alloy, not only is an inverted band order observed at the Γ point but a band gap is also created and a transition from a conventional semiconductor to a topological semiconductor occurs.

Keywords: Density Functional Theory, Inverted Band Order, Topological Semiconductor, Spin- Orbit Splitting

*Corresponding Author: namjoo_sh@yahoo.com

This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

خواص ساختاری و الکترونی $InSb_{1-x}Bi_x(x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1)$

صبا احمدوند، شیرین نامجو*، مهسا گنجی، مهرداد دادستانی

گروه آموزشی فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه لرستان، خرم‌آباد، لرستان، ایران

دریافت: ۱۴۰۲/۰۷/۱۴ ویرایش نهائی: ۱۴۰۲/۰۸/۲۰ پذیرش: ۱۴۰۲/۱۱/۰۹

Doi: 10.22055/jrmbs.2024.18899

چکیده

در این مطالعه ویژگی‌های ساختاری و ساختار نواری $InSb_{1-x}Bi_x$ (x= 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی و توسط کد کامپیوتری WIEN2K مورد بررسی قرار گرفته است. نتیجه‌های مربوط به‌محاسبهٔ ویژگی‌های ساختاری نشان می‌دهد که ثابت شبکه به‌صورت تابعی از x، در سازگاری عالی با قانون خطی ویگارد قرار دارد. محاسبات مربوط به‌بررسی ساختار نواری با به‌کارگیری پتانسیل تبادلی–همبستگی mBJGGA نشان می‌دهد که InSb یک نیم‌رسانا با پهنای گاف کوچک است که ترتیب نواری عادی‌ای را در نقطه Γ نشان می‌دهد درحالی‌که InBi یک فلز است که دارای وارونگی نواری در نقطهٔ Γ است. با اضافه‌شدن Bi به InSb و ایجاد آلیاژهای $InSb_{0.75}Bi_{0.25}$ و $InSb_{0.25}Bi_{0.75}$، نظم نواری عادی و گاف نواری در نقطهٔ Γ از بین می‌رود و این منجر به‌گذار از نیم‌رسانا با پهنای گاف کم و نظم نواری عادی (InSb) به‌سمت نیم‌رسانای بدون گاف ($InSb_{0.75}Bi_{0.25}$) و فلز ($InSb_{0.25}Bi_{0.75}$) با ترتیب نواری وارون می‌شود. با جایگزین‌شدن نیمی از اتم‌های Sb توسط اتم‌های Bi در InSb و ایجاد آلیاژ $InSb_{0.5}Bi_{0.5}$، نه‌تنها در نقطهٔ Γ نظم نواری وارون مشاهده می‌شود، بلکه در این نقطه یک گاف نواری نیز ایجاد می‌شود، بنابراین گذار از نیم‌رسانای معمولی به‌سمت نیم‌رسانای توپولوژی اتفاق می‌افتد.

کلیدواژگان: نظریهٔ تابعی چگالی، ترتیب نواری وارون، نیم‌رسانای توپولوژی، شکافتگی اسپین–مدار

مقدمه

InSb یکی از پرکاربردترین ترکیب‌های متعلق به گروه ترکیبات III-V است.

ترکیب‌های نیم‌رسانای III-V از دو عنصر تشکیل شده‌اند که یکی از آنها متعلق به گروه سوم و دیگری متعلق به گروه پنجم جدول تناوبی است. InSb دارای کوچک‌ترین پهنای گاف نواری (E_g=۰٫۱۸ eV در دمای ۳۰۰ کلوین) در میان ترکیبات III-V است [۱]. این گاف نواری کوچک باعث می‌شود که InSb نور را به‌طور مؤثر در ناحیهٔ فروسرخ جذب و گسیل کند و بنابراین می‌تواند برای بسیاری از کاربردهای اپتوالکترونیکی از قبیل آشکارسازهای فروسرخ، حسگرها و دیودهای نوری مناسب باشد [۴-۲]. از دیگر ویژگی‌های این ترکیب می‌توان به تحرک‌پذیری بالای الکترون در آن اشاره کرد. به‌دلیل این ویژگی منحصربه‌فرد از این ترکیب برای توسعه ترانزیستورهای پرسرعت، تقویت‌کننده‌ها و سایر قطعه‌های الکترونیکی استفاده می‌شود [۵]. یکی از راه‌های تغییر کارایی و

* نویسنده مسئول: namjoo_sh@yahoo.com

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.

این مقاله تحت مجوز کریتیو کامنز تخصیص ۴.۰ بین‌المللی می‌باشد

بهبود عملکرد این ابزارهای الکترونیکی و اپتوالکترونیکی، تشکیل آلیاژهایی از InSb است. این آلیاژها یک بازه از ویژگی‌های غیرقابل انتظار را ارائه می‌دهند و از نظر فناوری خصوصاً در صنایع الکترونیک و الکترواپتیک بسیار مورد توجه هستند. یک دسته از این آلیاژها، آلیاژهایی هستند که با اضافه‌شدن بیسموت به InSb شکل می‌گیرند. بیسموت سنگین‌ترین عنصر غیر رادیواکتیو است. اضافه‌کردن بیسموت به InSb می‌تواند اثرات قابل توجهی روی ساختار نواری، شکافتگی اسپین–مدار و ویژگی‌های اپتیکی آن داشته باشد. پیش‌بینی می‌شود که اضافه‌کردن بیسموت به InSb و در نتیجه ایجاد آلیاژهای InSb-Bi، باعث کاهش قابل توجه گاف نواری و همچنین افزایش شکافتگی اسپین–مدار شود؛ بنابراین این دسته از آلیاژها برای ساخت ابزارهای اپتوالکترونیکی‌ای که در نواحی فروسرخ میانی و فروسرخ نزدیک کار می‌کنند، می‌توانند بسیار مناسب باشند. این ترکیبات از منظر توپولوژیکی هم می‌توانند بسیار حائز اهمیت باشند. پیش‌بینی می‌شود که اضافه‌شدن عنصر سنگین بیسموت به InSb سبب گذار به‌سمت نیم‌رسانای توپولوژی شود. مطابق مطالعات پیشین صورت‌گرفته [۶،۷]، اضافه‌شدن As به InSb باعث شکل‌گیری فاز توپولوژی می‌شود. باتوجه به‌اینکه بیسموت عنصر سنگین‌تری نسبت به آرسنیک است انتظار مشاهده فاز توپولوژی در آلیاژهای سه‌تایی $InSb_{1-x}Bi_x$ وجود دارد. جستجو و بررسی مواد توپولوژی و مطالعهٔ ساختار الکترونی آنها به‌عنوان یک موضوع جدید، بسیار جذاب و مدرن در فیزیک مادهٔ چگال ظهور پیدا کرده است. عایق‌های توپولوژی دارای هر دو فاز رسانا و نارسانا به‌طور هم‌زمان در یک ماده هستند. آنها در لایه‌های درونی نارسانا هستند، اما در لایه‌های سطحی رسانندگی قطبیده و محافظت شده‌ای از خود نشان می‌دهند که برای کاربرد در زمینه‌های اسپینترونیک و ترانزیستورهای بدون اتلاف نویدبخش هستند.

علی‌رغم اهمیت و کاربرد آلیاژهای InSb-Bi در زمینه‌های متعددی از قبیل الکترونیک، اپتوالکترونیک و همچنین عایق‌های توپولوژی، مطالعات صورت‌گرفته روی این ترکیبات بسیار محدود است. به‌همین دلیل این مطالعه اختصاص داده‌شده است به‌بررسی خواص ساختاری و ساختار نواری InSb، InBi و همچنین آلیاژهای سه‌تایی $InSb_{1-x}Bi_x$ این مطالعه در ادامه کاری است که نامجو و همکاران به‌منظور بررسی خواص ساختاری و ساختار نواری آلیاژهای $InSb_{1-x}As_x$ آنها انجام داده‌اند [۸].

روش محاسبات

محاسبات بر پایهٔ نظریهٔ تابعی چگالی استوار است و از روش امواج تخت به‌ساختهٔ خطی با پتانسیل کامل [۹،۱۰] برای حل معادلات تک‌ذرهٔ کوهن–شم استفاده شده است. در این روش با انتخاب کره‌های موفین–تین حول هر یک از اتم‌ها، فضای درون هر یاخته به دو ناحیه تقسیم می‌شود. تابعی چگالی، پتانسیل و توابع موج الکترون‌های ظرفیت در درون کره‌ها برحسب توابع شعاعی و هماهنگ‌های کروی و در خارج از آنها برحسب امواج تختی که بردار موج آنها از تقارن‌های گروه فضایی پیروی می‌کنند، بسط داده می‌شود.

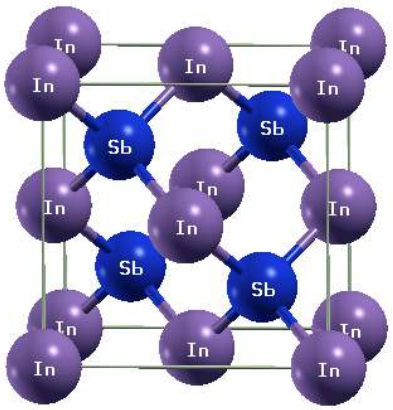
کلیه محاسبات با استفاده از کد کامپیوتری Wien2k [۱۱] انجام‌گرفته است. پارامتر RK_{max} (R، شعاع کوچک‌ترین کرهٔ موفین–تین و K_{max} بردار موج تخت برای بسط تابع موج برحسب امواج تخت در ناحیهٔ بین جایگاهی است) برابر ۸ و بردار موج قطع برای بسط پتانسیل و چگالی بار در ناحیهٔ بین جایگاهی $G_{max}=12$

انتخاب شد. محاسبه‌ها در حضور برهم‌کنش اسپین-مدار انجام شده است. انتگرال فضای فاز برای محاسبه ویژگی‌های ساختاری با استفاده از ۳۰۰۰ نقطه k در منطقهٔ نخست بریلوئن انجام شده است. برای گزینش نقطه‌های k در منطقه نخست بریلوئن از روش تتراهدرون خطی استفاده شده است [۱۲]. از آنجا که برای محاسبهٔ ساختار نواری به تعداد نقطه‌های k بیشتری نیاز است، بنابراین ۷۰۰۰ نقطه k به‌منظور مطالعهٔ ساختار نواری این ترکیب‌ها در نظر گرفته شده است. شعاع کره‌های مافین-تین چنان انتخاب شده‌اند که علاوه بر رعایت شرط عدم همپوشانی کره‌ها، کمترین نشست بار از کره‌های مافین-تین را داشته باشیم. شعاع کره موفین تین برای اتم‌های In، Sb و Bi برابر با R_{MT} = ۲٫۵ a.u در نظر گرفته شده است. برای مطالعهٔ ساختار نواری از پتانسیل تبادلی همبستگی mBJGGA[1] استفاده شده است [۱۳]. در این مطالعه برای بررسی ویژگی‌های ساختاری تابعی تبادلی همبستگی GGA (Wu-Cohen) [۱۴] به‌کارگرفته‌شده است.

بحث و نتیجه‌گیری

InSb در ساختار مکعبی مرکز سطحی با گروه فضایی $F\bar{4}3m$ متبلور می‌شود [۱۵]. پایدارترین ساختار برای این ترکیب، ساختار سولفید روی است درحالی‌که پایدارترین ساختار برای InBi ساختار تتراگونال PbO است [۱۶]. در این مطالعه به‌منظور مقایسهٔ خواص الکترونی InBi با InSb، ساختار سولفید روی InBi در نظر گرفته شده است. ساختار سولفید روی یک ساختار FCC است با پایه دو اتمی در موقعیت‌های (۰۰۰) و (۰٫۲۵ ۰٫۲۵ ۰٫۲۵). در مورد InSb اتم‌های In موقعیت‌های صفر و اتم‌های Sb موقعیت‌های (۰٫۲۵ ۰٫۲۵ ۰٫۲۵) را اشغال می‌کنند.

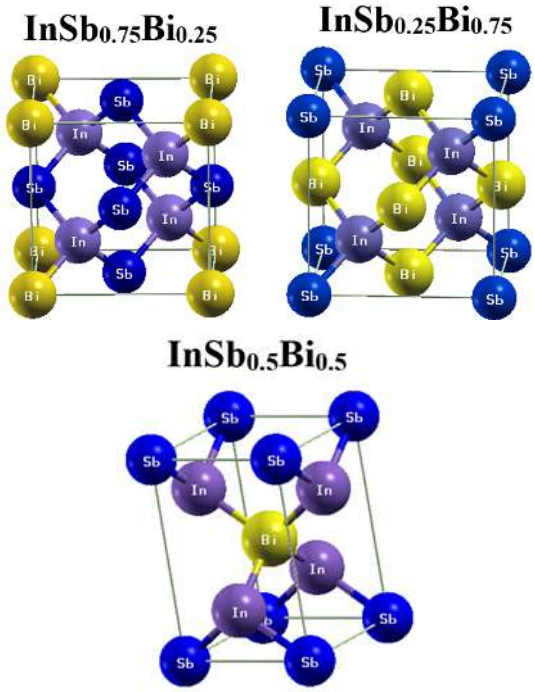
پایهٔ آلیاژهای $InSb_{1-x}Bi_x$ ترکیب InSb است. این آلیاژها با قرارگرفتن اتم‌های Bi در موقعیت‌های اتم Sb در ساختار سولفید روی ایجاد می‌شوند. ساختار سولفیدروی InSb در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱. ساختار سولفید روی برای ترکیب InSb

باتوجه به‌وجود چهار جایگاه برای اتم‌های Sb در ساختار سولفید روی InSb، آلیاژهای $InSb_{0.75}Bi_{0.25}$ ، $InSb_{0.5}Bi_{0.5}$ و $InSb_{0.25}Bi_{0.75}$ به‌ترتیب با قرارگرفتن یک، دو و سه اتم Bi در جایگاه‌های اتم Sb ایجاد می‌شوند. همان‌گونه که از شکل فوق مشخص است چهار موقعیت اتم‌های Sb معادل هستند و بنابراین در شکل‌گیری $InSb_{0.75}Bi_{0.25}$ ($InSb_{0.25}Bi_{0.75}$)، با قرارگرفتن یک اتم Bi (سه اتم Bi) در هر یک از جایگاه‌های اتم Sb (در هر سه جایگاه از چهار جایگاه اتم Sb) تنها یک ساختار متمایز ایجاد می‌شود. ساختار

[1]modified Beck- Johnson exchange potential together with Local- Density Approximation



شکل۲. نمایش ساختار آلیاژهای $InSb_{0.75}Bi_{0.25}$، $InSb_{0.25}Bi_{0.75}$ و $InSb_{0.5}Bi_{0.5}$

آلیاژهای $InSb_{0.75}Bi_{0.25}$ و $InSb_{0.25}Bi_{0.75}$ که یک ساختار مکعبی هشت اتمی است در شکل۲ نشان داده شده است. همچنین در شکل‌گیری آلیاژ $InSb_{0.5}Bi_{0.5}$ باتوجه‌به معادل بودن موقعیت‌های اتم Sb، با قرارگرفتن دو اتم Bi در هر دو موقعیت از چهار موقعیت اتم Sb تنها یک ساختار متفاوت ایجاد می‌شود. این ساختار که یک ساختار چهارگوشه با ۴ اتم است در شکل۲ نشان داده شده است.

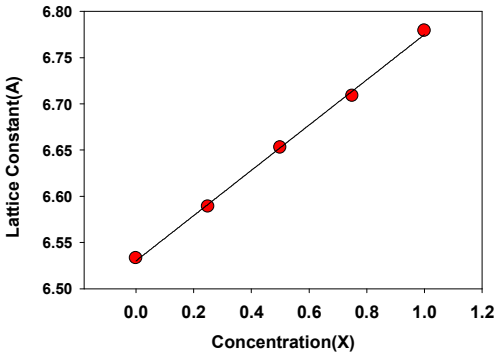
ثابت شبکه برای InSb، InBi و آلیاژهای سه‌تایی آن‌ها با بهینه‌سازی انرژی برحسب حجم محاسبه شده و نتایج به‌همراه دیگر نتایج نظری و همچنین نتایج تجربی موجود در جدول۱ آورده شده است. همان‌طور که در این جدول نشان داده شده است برای ترکیب‌های دوتایی پارامتر شبکه در سازگاری خوبی با نتایج تجربی قرار دارد. پارامترهای شبکه برای InSb و InBi به ترتیب به‌اندازه ۰/۸ درصد و ۲/۲ درصد با مقدارهای تجربی فاصله دارند. علت تفاوت در نتایج به‌دست‌آمده و دیگر مطالعه‌های نظری می‌تواند به‌دلیل استفاده از پتانسیل‌های تبادلی همبستگی مختلف و یا روش‌های محاسباتی مختلف باشد.

جدول۱. ثابت شبکه تعادلی(x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) $InSb_{1-x}Bi_x$ و مقایسه با نتایج تجربی و نظری موجود.

ثابت شبکه (آنگستروم)			
مطالعه‌های نظری دیگر	کارهای تجربی	مطالعه حاضر	غلظت آلیاژ
٦/٣٤[١٨] ,٦/٣٤٦ [١٩] , ٦/٦٣ [٢٠]	٦/٤٧٩ [١٥]	٦/٥٣٣	٠
٦/٦٨ [٢٠]		٦/٥٨٨	٠/٢٥
٦/٧١ [٢٠]		٦/٦٥٢	٠/٥
٦/٨٤ [٢٠]	--------	٦/٧٠	٠/٧٥
٦/٩١[٢٠] ,٦/٧١٢ [٢١], ٦/٨٦ [٢٢]	٦/٦٢٦ [١٧]	٦/٧٨	١

نتایج حاصل از محاسبه پارامتر شبکه آلیاژها در توافق خوبی با تنها مطالعهٔ نظری که با استفاده از پتانسیل تبادلی همبستگی GGA(PBE) [۲۳] به بررسی خواص ساختاری پرداخته است، قرار دارد [۲۰]. برای این آلیاژها هیچ‌گونه نتیجهٔ تجربی برای مقایسه وجود

ندارد. در تشابه با ترکیب‌های دوتایی InBi و InSb پیش‌بینی می‌شود که مقادیر محاسبه شده پارامترهای شبکه برای آلیاژها در سازگاری خوبی با نتایج تجربی باشد. هنگامی که نقطه‌های مشخص‌کننده ثابت شبکه به‌ازای غلظت‌های مختلف با معادلهٔ مرتبه نخست a=۰٫۲۴x+۶٫۵۳ برازش داده می‌شود، مشاهده می‌شود میزان انحراف نقطه‌های موردنظر از این معادله‌های خطی بسیار ناچیز است (شکل۳). این امر نشان می‌دهد که قانون ویگارد [۲۴] می‌تواند تخمینی عالی برای به‌دست‌آوردن ثابت شبکه آلیاژهای $InSb_{1-x}Bi_x$ باشد. قانون تجربی ویگارد بیان می‌کند که ویژگی‌های فیزیکی یک آلیاژ با تقریب خوبی می‌تواند با یک رابطهٔ خطی بین ویژگی فیزیکی و غلظت آلیاژ به‌دست آید.



شکل۳. ثابت شبکه برحسب غلظت ناخالصی برای InSb، InBi و آلیاژهای $InSb_{1-x}Bi_x$(0.25, 0.5, 0.75). نقاط مشخص‌کننده پارامتر شبکه برحسب غلظت با معادلهٔ مرتبه نخست ۰٫۲۴x +۶٫۵۳ =a برازش داده شده‌اند.

همان‌گونه که شکل فوق نشان می‌دهد پارامتر شبکه با افزایش غلظت ناخالصی Bi افزایش می‌یابد. علت این امر به بزرگ‌بودن شعاع اتمی Bi در مقایسه با Sb مرتبط است.

در ادامه پایداری ترمودینامیکی آلیاژهای InSb1-xBix با محاسبه انرژی تشکیل که به‌صورت:

$$E_f = E\,(alloy) - x\,E(InBi) - (1-x)\,E(InSb) \quad ۱$$

تعریف می‌شود مورد بررسی قرار گرفته است. در رابطهٔ فوق E(alloy)، E(InBi) و E(InSb) به‌ترتیب کمینه انرژی کل $InSb_{1-x}Bi_x$، InBi و InSb است. مقدار انرژی تشکیل محاسبه شده برای $InSb_{0.75}Bi_{0.25}$، $InSb_{05}Bi_{05}$ و $InSb_{0.25}Bi_{0.75}$ به‌ترتیب eV/atom ۰٫۰۱۳، eV/atom ۰٫۰۲ و eV/atom ۰٫۰۱۷ است. مقادیر بسیار کوچک مثبت انرژی تشکیل می‌تواند نشان‌دهنده امکان‌پذیری این سیستم‌های شبه‌پایدار از طریق فرایند سنتز گرماگیر مناسب باشد. مقدار انرژی تشکیل محاسبه شده برای $InSb_{05}Bi_{05}$ بیشتر از مقادیر محاسبه شده انرژی تشکیل برای $InSb_{0.75}Bi_{0.25}$ و $InSb_{0.25}Bi_{0.75}$ است که این امر نشان‌دهنده شبه‌پایداری کمتر $InSb_{05}Bi_{05}$ نسبت به $InSb_{0.75}Bi_{0.25}$ و $InSb_{0.25}Bi_{0.75}$ است.

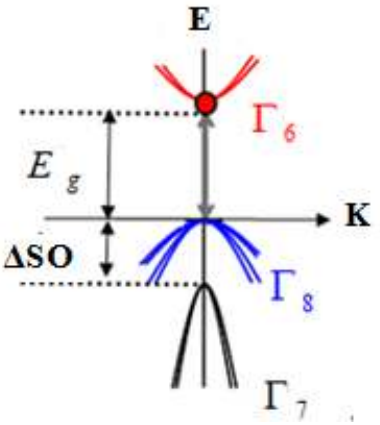
بر پایه ثابت‌های شبکه تعادلی به‌دست‌آمده از مرحله قبل در ادامه به‌محاسبهٔ ساختار نواری InSb، InBi و $InSb_{1-x}Bi_x$ (0.25, 0.5, 0.75) پرداخته می‌شود. نوارهای انرژی برای ترکیبات III-V با ساختار سولفید روی، در مرکز ناحیهٔ نخست بریلوئن دارای تقارن گروه نقطه‌ای Γ_8 (نوار تبهگن چهارگانه آبی‌رنگ)،Γ_7 (نوار ظرفیت مشکی رنگ با تبهگنی دوگانه) و Γ_6 (نوار قرمزرنگ با تبهگنی دوگانه) هستند [۲۵]. شکافتگی اسپین–مدار به‌صورت تفاوت انرژی بین حالت‌های Γ_8 و Γ_7 به‌صورت:

$$\Delta SO=E(\Gamma_8)- E(\Gamma_7) \quad ۲$$

است. همچنین گاف نواری به‌صورت:

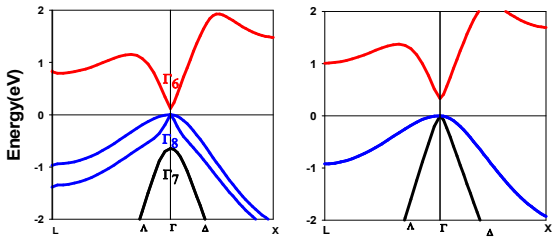
$$E_g=E(\Gamma_6)-E(\Gamma_8) \quad ۳$$

است. ترتیب نواری‌ای که در اکثر ترکیب‌های III-V با ساختار سولفید روی (از انرژی بالا به‌سمت انرژی پایین) مشاهده می‌شود به‌صورت Γ_6، Γ_8، Γ_7 است. چنین ترتیب نواری‌ای ترتیب نواری عادی نامیده می‌شود. این ترتیب نواری عادی، گاف نواری و شکافتگی اسپین–مدار به‌طور شماتیک در شکل۴ نشان‌داده‌شده است.



شکل۴. ساختار نواری ترکیب‌های نیم‌رسانای III-V به‌صورت شماتیک [۲۶].

چنانچه برهم‌کنش اسپین–مدار در نظر گرفته نشود، در این صورت قلهٔ نوار ظرفیت در مرکز ناحیهٔ اول بریلوئن برای ترکیب‌های III-V به‌علت تبهگنی اوربیتال‌های اتمی، تبهگن شش‌تایی است. در این حالت دارای سه نوار ظرفیت هستیم که به‌علت اسپین هریک تبهگن دوگانه هستند. برای درک بهتر این مطلب ساختار نواری InSb با و بدون در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپین–مدار و با به‌کارگیری تقریب mBJGGA در شکل۵ نشان داده شده است. شکل۵ ساختار نواری InSb را با به‌کارگیری پتانسیل تبادلی–همبستگی mBJGGA نشان می‌دهد. همان‌گونه که از این ساختار نواری مشخص است، InSb یک نیم‌رسانا با گاف نواری مستقیم ۰٫۱۲ الکترون–ولتی در مرکز ناحیه نخست بریلوئن است. مقدار گاف نواری محاسبه شده با به‌کارگیری این تقریب در سازگاری بسیار خوبی با مقدار تجربی ۰٫۱۸ الکترون‌ولت قرار دارد [۱].



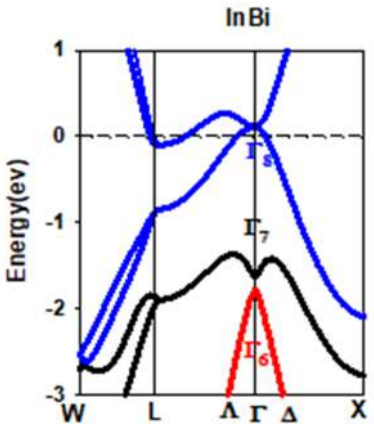
شکل۵. ساختار نواری InSb در حضور برهم‌کنش اسپین مدار (چپ) و بدون درنظرگرفتن اسپین–مدار (راست) با به‌کارگیری تابعی تبادلی همبستگی mBJGGA.

مقدار گاف نواری محاسبه شده در مطالعه حاضر با به‌کارگیری پتانسیل تبادلی–همبستگی mBJGGA در مقایسه با کارهای نظری دیگر که از پتانسیل‌های GGA و LDA برای محاسبه گاف نواری استفاده کرده‌اند، به سازگاری بیشتری با نتایج تجربی منجر می‌شود. به‌عنوان‌مثال نتیجه به‌دست‌آمده از محاسبات حاضر بهبود قابل توجهی را نسبت به‌نتیجه‌های به‌دست‌آمده از محاسبات هاچلافی[1] و همکاران [۲۷] که گاف این

[1] Hachelafi

ترکیب را صفر محاسبه کرده است، نشان می‌دهد. علت اختلاف زیاد نتیجه‌های ناشی از محاسبات هاچلافی با مقدار تجربی و نتایج محاسبات حاضر، استفاده از تابعی تبادلی همبستگی GGA(PBE) در محاسبه گاف نواری است.

همان‌طور که اشاره شد شکافتگی اسپین–مدار به‌صورت تفاوت انرژی بین حالت‌های Γ_8 و Γ_7 است. در مطالعه حاضر این کمیت ۰٫۶۴ الکترون–ولت به‌دست‌آمده است که این مقدار در توافق خوبی با مقدار تجربی ۰٫۸۱ الکترون–ولت [۱] قرار دارد. با توجه به پیش‌بینی دقیق‌تر گاف نواری با استفاده از پتانسیل تبادلی همبستگی mBJGGA، ادامه محاسبات با استفاده از همین تابعی انجام‌گرفته است. شکل۶ ساختار نواری InBi را که با در نظرگرفتن برهم‌کنش اسپین–مدار و با استفاده از تقریب mBJGGA مورد بررسی قرار گرفته است، نشان می‌دهد.



شکل۶. ساختار نواری InBi با به‌کارگیری پتانسیل تبادلی همبستگی mBJGGA.

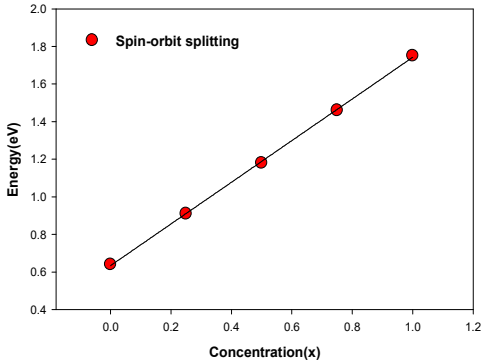
همان‌گونه که از این شکل مشخص است InBi یک فلز با ترتیب نواری وارون است. وجود وارونگی نواری در ساختار نواری می‌تواند نشانه‌ای از برهم‌کنش قوی اسپین–مدار باشد. با محاسبهٔ شکافتگی اسپین–مدار در این ترکیب می‌توان به قوی‌بودن برهم‌کنش اسپین–مدار پی‌برد. در مطالعهٔ حاضر مقدار شکافتگی اسپین مدار ۱٫۸۸ الکترون–ولت به‌دست‌آمده است که در مقایسه با مقدار مشابه در InSb (۰٫۶۴ الکترون‌ولت) بسیار بزرگ و قابل‌توجه است، بنابراین بزرگ‌بودن برهم‌کنش اسپین–مدار در InBi سبب بروز وارونگی نواری در ساختار نواری این ترکیب می‌شود که این ترتیب نواری وارون در مرکز ناحیهٔ اول بریلوئن می‌تواند نشانه‌ای محکم بر وجود فاز توپولوژیکی باشد، بنابراین، باتوجه‌به وارونگی نواری‌ای که به‌علت وجود عنصر سنگین بیسموت در ساختار نواری InBi مشاهده شد، انتظار می‌رود اضافه‌کردن این عنصر به InSb بتواند اثرات قابل‌توجهی روی ساختار نواری و ترتیب نواری این ترکیب ایجاد کند. به‌همین منظور در ادامه به‌بررسی ساختار نواری $InSb_{0.75}Bi_{0.25}$، $InSb_{0.5}Bi_{0.5}$ و $InSb_{0.25}Bi_{0.75}$ که به‌ترتیب با جایگزین‌شدن ۰٫۲۵، ۰٫۵ و ۰٫۷۵ اتم‌های Sb توسط اتم‌های Bi در ساختار سولفید روی InSb ایجاد می‌شود، می‌پردازیم. اضافه‌شدن بیسموت به InSb، تغییرات قابل توجهی روی ساختار نواری و شکافتگی اسپین–مدار ایجاد می‌کند. با توجه به سنگین بودن عنصر بیسموت، اضافه‌شدن بیسموت به InSb سبب افزایش برهم‌کنش اسپین مدار و ایجاد وارونگی نواری در

ساختار نواری می‌شود. همان‌گونه که در جدول۲ آورده شده است یکی از اثرات افزایش غلظت Bi، افزایش شکافتگی اسپین–مدار است. علت این امر می‌تواند با توجه به این حقیقت که شکافتگی اسپین-مدار با افزایش عدد اتمی افزایش می‌یابد، توجیه شود. از آنجا که Bi در مقایسه با Sb دارای عدد اتمی بزرگ‌تری است؛ بنابراین با افزایش غلظت Bi شکافتگی اسپین–مدار افزایش می‌یابد. مقادیر شکافتگی اسپین–مدار در جدول۲ آورده شده است.

جدول۲. شکافتگی اسپین–مدار $InSb_{1-x}Bi_x$(x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1)

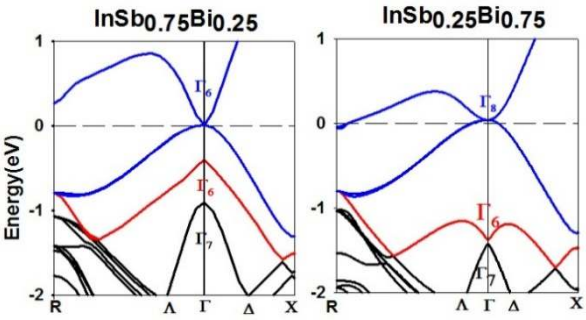
ترکیب	شکافتگی اسپین–مدار (الکترون–ولت)
InSb	۰٫۶۴
$InSb_{0.75}Bi_{0.25}$	۰٫۹۱
$InSb_{0.5}Bi_{0.5}$	۱٫۱۸
$InSb_{0.25}Bi_{0.75}$	۱٫۴۶
InBi	۱٫۸۸

مشخص‌کننده شکافتگی اسپین–مدار با معادله ΔSO= ۱٫۱x +۰٫۶۳ برازش داده شده‌اند. همان‌گونه که شکل۷ نشان می‌دهد، میزان انحراف شکافتگی اسپین مدار از این معادله خطی بسیار ناچیز است و این امر نشان می‌دهد که نتیجه‌های به‌دست‌آمده از محاسبه شکافتگی اسپین–مدار برحسب غلظت ناخالصی به‌خوبی از قانون ویگارد پیروی می‌کنند.



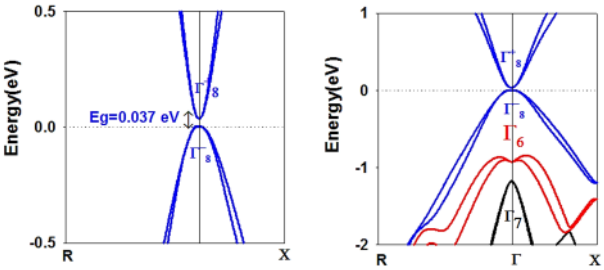
شکل۷. شکافتگی اسپین–مدار برحسب غلظت ناخالصی برای InBi, InSb و آلیاژهای $InSb_{1-x}Bi_x$(0.25, 0.5, 0.75). نقاط مشخص‌کننده شکافتگی اسپین–مدار با معادلهٔ ΔSO=0.63+1.1x برازش داده شده است.

ساختار نواری $InSb_{0.25}Bi_{0.75}$، $InSb_{0.75}Bi_{0.25}$ و همچنین $InSb_{0.5}Bi_{0.5}$ به‌ترتیب در شکل‌های۸ و ۹ نشان‌داده‌شده است. مطابق شکل۷، $InSb_{0.75}Bi_{0.25}$ یک نیم‌رسانای بدون گاف با ترتیب نواری وارون در نقطه Γ است درحالی‌که $InSb_{0.25}Bi_{0.75}$ فلزی است که دارای ترتیب نواری وارون در مرکز ناحیهٔ اول بریلوئن است. ازآنجاکه $InSb_{0.25}Bi_{0.75}$ و $InSb_{0.75}Bi_{0.25}$ دارای تقارن مکعبی هستند؛ بنابراین مشخصه نوارهای انرژی آن‌ها در اطراف نقطه Γ مشابه مشخصه این نوارها در InBi است و در این آلیاژها نیز بدون اینکه در نقطه Γ گاف نواری ایجاد شود Γ_6 پایین‌تر از Γ_8 قرار می‌گیرد. این امر به‌خوبی در شکل۸ نشان‌داده‌شده است.



شکل۸. ساختار نواری $InSb_{0.25}Bi_{0.75}$ و $InSb_{0.75}Bi_{0.25}$ در حضور برهم‌کنش اسپین مدار با به‌کارگیری تابعی تبادلی همبستگی mBJGGA.

به‌دلیل وجود تقارن چهارگوشی در $InSb_{0.5}Bi_{0.5}$، تبهگنی چهارگانه Γ_8 در نقطه گاما از بین می‌رود و یک گاف نواری کوچک به‌اندازه ۰٫۰۳۷ الکترون‌ولت بین (Γ^+_8 انرژی بالاتر) و (Γ^-_8 انرژی پائین‌تر) در نقطه Γ به‌وجود می‌آید. این امر به‌خوبی در شکل۹ نشان‌داده‌شده است.



شکل۹. ساختار نواری $InSb_{0.5}Bi_{0.5}$ در حضور برهم‌کنش اسپین مدار با به‌کارگیری تابعی تبادلی همبستگی mBJGGA (راست). به‌منظور نشان‌دادن گاف نواری در نقطه Γ، ساختار نواری $InSb_{0.5}Bi_{0.5}$ در بازه انرژی کوچک‌تر نشان‌داده‌شده است (چپ).

بحث و نتیجه‌گیری

با استفاده از روش امواج تخت به‌ساخته خطی با پتانسیل کامل، در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی، ویژگی‌های ساختاری و ساختار نواری InSb، InBi و آلیاژهای سه‌تایی $InSb_{1-x}Bi_x(x=0.25, 0.5, 0.75)$ مورد بررسی قرار گرفته است. پارامترهای شبکه ترکیب‌های InBi، InSb و آلیاژهایی سه‌تایی $InSb_{1-x}Bi_x(x=0.25, 0.5, 0.75)$ با به‌کارگیری تابعی تبادلی همبستگی GGA(Wu-Cohen) محاسبه شده‌اند. نتیجه‌های به‌دست‌آمده در سازگاری خوبی با نتیجه‌های تجربی و نظری موجود قرار دارند. برای محاسبه ساختار نواری، پتانسیل تبادلی همبستگی mBJGGA به‌کارگرفته شده است. همچنین برای انجام این محاسبات برهم‌کنش اسپین–مدار نیز در نظر گرفته شده است. نتایج حاصل از محاسبات نشان می‌دهد که InSb نیم‌رسانایی با گاف نواری کوچک ۰٫۱۲ الکترون–ولت و ترتیب نواری عادی است درحالی‌که InBi در فاز فلزی قرار دارد و دارای وارونگی نواری در نقطه Γ است. در مطالعه حاضر مقدار شکافتگی اسپین مدار برای InBi، ۱٫۸۸ الکترون–ولت به‌دست‌آمده است که در مقایسه با مقدار مشابه در InSb که در مطالعه حاضر مقدار آن ۰٫۶۴ الکترون–ولت محاسبه شده است، بسیار بزرگ و قابل‌توجه است. باتوجه‌به سنگین بودن عنصر بیسموت، اضافه‌شدن آن به InSb سبب افزایش قابل‌توجه قدرت شکافتگی اسپین مدار می‌شود. میزان شکافتگی اسپین مدار از ۰٫۶۴ الکترون–ولت در InSb به ۰٫۹۱ الکترون–ولت در $InSb_{0.75}Bi_{0.25}$ ، ۱٫۱۸ الکترون–ولت در $InSb_{0.5}Bi_{0.5}$ و ۱٫۴۶ الکترون–ولت در $InSb_{0.25}Bi_{0.75}$ می‌رسد. همچنین با اضافه‌شدن Bi به InSb و ایجاد آلیاژهای $InSb_{0.25}Bi_{0.75}$ و $InSb_{0.75}Bi_{0.25}$ ضمن حفظ‌شدن تقارن مکعبی گذار از نیم‌رسانای با پهنای گاف کم و

نظم نواری عادی به‌ترتیب به‌سمت فلز با نظم نواری وارون و نیم‌رسانای بدون گاف با نظم نواری وارون رخ می‌دهد که اگر بتوان به‌طریقی با شکستن تقارن مکعبی در ساختار نواری آن‌ها گاف نواری ایجاد کرد، می‌توان در آن‌ها گذار فاز توپولوژیکی را مشاهده کرد. در $InSb_{0.5}Bi_{0.5}$ به‌دلیل شکسته‌شدن تقارن مکعبی ضمن ایجاد وارونگی نواری در ساختار نواری، یک گاف نواری ۰٫۰۳۷ الکترون‌ولتی در نقطه Γ ایجاد می‌شود. ازآنجاکه وجود وارونگی نواری در نقاط با تقارن بالا نشانه‌ای قوی از وجود فاز توپولوژی در یک ترکیب است؛ بنابراین با جایگزین‌شدن نیمی از اتم‌های Sb در InSb توسط اتم‌های Bi و ایجاد آلیاژ $InSb_{0.5}Bi_{0.5}$، گذار از نیم‌رسانای با پهنای گاف کم و نظم نواری عادی به‌سمت نیم‌رسانای توپولوژی رخ می‌دهد. ازآنجاکه عایق‌ها و نیم‌رساناهای توپولوژی به‌دلیل ویژگی‌های منحصربه‌فردی که دارند می‌توانند در صنعت بسیار حائز اهمیت باشند بنابراین، می‌توان به اهمیت گذار به‌سمت این ترکیب‌ها پی‌برد.

مرجع‌ها

[1]. C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, Wiley (1996).

[2]. N. Kuze, E.G. Camargo, K. Ueno, T. Morishita, M. Sato, M. Kurihara, H. Endo, K. Ishibashi, High performance miniaturized InSb photovoltaic infrared sensors operating at room temperature, Journal of Crystal Growth, 301-302 (2007) 997-1000. https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2006.11.179

[3]. P. Carrington, E. Repiso, Q. Lu, H. Fujita, A.R.J. Marshall, Q. Zhuang, A. Krier, InSb-based quantum dot nanostructures for mid-infrared photonic devices, SPIE **9919** (2016) 99190C. https://doi.org/10.1117/12.2236869

[4] S.-H. Park, H.-S. Kim, H.-S. Shin, H.-D. Kim, Y.-H. Cho, Y.-K. Kim, Development of InSb semiconductor detector for high resolution radiation measurement, Journal of the Korean Physical Society, 58 (2011) 1577-1580. https://doi.org/10.3938/jkps.58.1577

[5] T. Ashley, M.T. Emeny, D.G. Hayes, K.P. Hilton, R. Jefferies, J.O. Maclean, S.J. Smith, A.W.H. Tang, D.J. Wallis, P.J. Webber, High-performance InSb based quantum well field effect transistors for low-power dissipation applications, 2009 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM), 2009, pp. 1-4. http://doi.org/10.1109/IEDM.2009.5424207

[6] S. Namjoo, A.S.H. Rozatian, I. Jabbari, Influence of lattice expansion on the topological band order of InAsxSb1−x (x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) alloys, Journal of Alloys and Compounds, 628 (2015) 458-463. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2014.12.131

[7] Z. Zhu, G.W. Winkler, Q. Wu, J. Li, A.A. Soluyanov, Triple Point Topological Metals, Physical Review X, 6 (2016) 031003. https://doi.org/10.1103/PhysRevX.6.031003

[8] S. Namjoo, A.S.H. Rozatian, I. Jabbari, P. Puschnig, Optical study of narrow band gap InAsxSb1-x (x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) alloys,, Physical Review B, 91 (2015) 205205. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.205205

[9] D.J. Singh, L. Nordstrom, Planewaves, Pseudopotentials, and the LAPW method, Springer Science & Business Media (2006).

[10] S. Blügel, G. Bihlmayer, Full-potential linearized augmented planewave method,

Computational nanoscience: do it yourself, 31 (2006) 85-129.

[11] P. Blaha, K. Schwarz, G.K. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, wien2k, An augmented plane wave+ local orbitals program for calculating crystal properties, 60 (2001).

[12] P.E. Blöchl, O. Jepsen, O.K. Andersen, Improved tetrahedron method for Brillouin-zone integrations, Physical Review B, 49 (1994) 16223-16233. http://doi.org/10.1103/PhysRevB.49.16223

[13] F. Tran, P. Blaha, Accurate Band Gaps of Semiconductors and Insulators with a Semilocal Exchange-Correlation Potential, Physical Review Letters, 102 (2009) 226401. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.226401

[14] Z. Wu, R.E. Cohen, More accurate generalized gradient approximation for solids, Physical Review B, 73 (2006) 235116. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.235116

[15] O. Madelung, Semiconductors: data handbook, Springer Science & Business Media (2004).

[16] M. Ferhat, A. Zaoui, Structural and electronic properties of III-V bismuth compounds, Physical Review B, 73 (2006) 115107. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.115107

[17] M.K. Rajpalke, W.M. Linhart, K.M. Yu, M. Birkett, J. Alaria, J.J. Bomphrey, S. Sallis, L.F.J. Piper, T.S. Jones, M.J. Ashwin, T.D. Veal, Bi-induced band gap reduction in epitaxial InSbBi alloys, Applied Physics Letters, 105 (2014). https://doi.org/10.1063/1.4902442

[18] S. Kalvoda, B. Paulus, P. Fulde, H. Stoll, Influence of electron correlations on ground-state properties of III-V semiconductors, Physical Review B, 55 (1997) 4027-4030. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.55.4027

[19] S.Q. Wang, H.Q. Ye, A plane-wave pseudopotential study on III–V zinc-blende and wurtzite semiconductors under pressure, Journal of Physics: Condensed Matter, 14 (2002) 9579. https://doi.org/10.1088/0953-8984/14/41/313

[20] P. Saeidi, M.H. Shahidi kaviyani, S. Yalameha, The structural and elastic properties of InSb1-xBix alloys, Computational Condensed Matter, 18 (2019) e00358. https://doi.org/10.1016/j.cocom.2018.e00358

[21] A. Assali, M. Bouslama, L. Chaabane, A. Mokadem, F. Saidi, Structural and opto-electronic properties of InP1−xBix bismide alloys for MID−infrared optical devices: A DFT + TB-mBJ study, Physica B: Condensed Matter, 526 (2017) 71-79. https://doi.org/10.1016/j.physb.2017.09.058

[22] A. Zaoui, D. Madouri, M. Ferhat, First-principles study of the ground state stability of III–V bismuth compounds, Philosophical Magazine Letters, 89 (2009) 807-813. https://doi.org/10.1080/09500830903304125

[23] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized Gradient Approximation Made Simple, Physical Review Letters, 77 (1996) 3865-3868. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865

[24] L. Vegard, Die Konstitution der Mischkristalle und die Raumfüllung der Atome, Zeitschrift für Physik, 5 (1921) 17-26. https://doi.org/10.1007/BF01349680

[25] N. Peyghambarian, S.W. Koch, A. Mysyrowicz, Introduction to semiconductor optics, Prentice-Hall, Inc., Upper Saddle River, NJ, USA (1993).

[26] W. Feng, D. Xiao, Y. Zhang, Y. Yao, Half-Heusler topological insulators: A first-principles study with the Tran-Blaha modified Becke-Johnson density functional, Physical Review B, 82 (2010) 235121. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.235121

[27] K. Hachelafi, B. Amrani, F.E.H. Hassan, S. Hiadsi, Theoretical study of InAs, InSb and their alloys InAsxSb1-x, Advances in Condensed Matter Physics, India (2009).