

## BİSMUT VƏ STİBİUM ƏSASINDA HAZIRLANMIŞ KOMPOZİSİYALI SUPERQƏFƏS STRUKTURLARININ ENERJİ ZONA QURULUŞU

N.B. MUSTAFAYEV

Azərbaycan Milli Elmlər Akademiyasının Fizika İnstitutu,

AZ 1143, Bakı şəhəri, H.Cavid pr. 131

e-mail: [nadir.mustafayev@physics.ab.az](mailto:nadir.mustafayev@physics.ab.az)

Bismut və stibium əsasında hazırlanmış kompozisiyalı superqəfəs strukturlarının zona quruluşunu və enerji spektrini müəyyən edən tənlilər sistemi alınmışdır. Bu strukturlarda Fermi enerjisinin qiyməti, yükdaşıyıcıların konsentrasiyası və effektiv kütləsi hesablanmışdır.

**Açar sözlər:** bismut, bismut-stibium, periodik laylı struktur, zona quruluşu, enerji spektri.

**PACS:** 73.21.Cd, 73.43.Cd.

### GİRİŞ

Üst-üstə ardıcıl düzülmiş təbəqələrdən ibarət periodik struktura superqəfəs deyirlər. Superqəfəsin periodu kristalın qəfəs sabitindən çox böyük, elektronun sərbəst uçuş məsafəsindən isə kiçik olur. Belə struktura kristal qəfəsin periodik potensialından başqa, əlavə periodik potensial əmələ gəlir. Bu əlavə potensial superqəfəs potensialı adlanır. Müxtəlif növ superqəfəs strukturları mövcuddur. Kompozisiyalı superqəfəs strukturları daha yaxşı tədqiq edilmişdir. Onlar qəfəs sabitləri yaxın, lakin qadağan zonalarının eni ilə fərqlənən müxtəlif kimyəvi tərkibli təbəqələrdən hazırlanan periodik strukturlardır [1]. Məhz qadağan olunmuş zonanın eni periodik dəyişdiyinə görə, bu strukturlarda əlavə periodik potensial – superqəfəs potensialı yaranır.

Bismut və stibium əsasında hazırlanmış superqəfəs strukturlarının tədqiqi böyük maraq kəsb edir. Belə strukturlar molekulyar-şüa epitaksiyası [2-4] və elektro-kimyəvi çökdürmə [5] üsulu ilə alınır. Bu işdə Bi/Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub> kompozisiyalı superqəfəs strukturlarının zona quruluşu və enerji spektri tədqiq olunur.

### BİSMUT KRİSTALININ VƏ Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub> BƏRK MƏHLULUNUN ZONA QURULUŞU

Bildiyimiz kimi, bismut kristalı yarımmetaldir. Elektronların və deşiklərin konsentrasiyası eynidir ( $n = p = 3 \times 10^{17} \text{ sm}^{-3}$ ). Brillüen zonasının  $T$  nöqtəsindəki valent zonasının enerji maksimumu Brillüen zonasının  $L$  nöqtəsindəki keçiricilik zonasının enerji minimumundan yuxarıda yerləşir (aşağı temperaturalarda fərq 38 meV təşkil edir). Başqa sözlə, bismutun

yarımmetal xassələri  $T$ -zona ilə  $L$ -zonanın enerjiyə görə qismən üst-üstə düşməsi ilə əlaqədardır.

Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub> bərk məhlullarına gəldikdə isə, onlar stibiumun  $X$  tərkibindən asılı olaraq ya yarımmetal, ya da yarımkəçirici ola bilər. Belə ki, stibiumun tərkibi  $X=0.04$  olduqda  $L$  nöqtəsindəki  $L_s$  və  $L_a$  zonaları inversiya edir, tərkib  $X=0.07$  olduqda isə  $L_a$  və  $T$  zonalarının kəsişməsi yox olur və yarımmetal-yarımkəçirici keçidi baş verir [6]. Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub> bərk məhlullarının valent zonası ( $X < 0.2$  oblastında) yüngül deşiklər zonasından (Brillüen zonasının  $L$  nöqtəsində) və ağır deşiklər zonalarından (Brillüen zonasının  $T$  və  $\Sigma$  nöqtələrində) ibarətdir.  $T$  və  $\Sigma$  zonalarının ekstremumları  $X$  ilə xətti olaraq dəyişir [7, 8]:

$$E_T = (46.9 - 601.3 \cdot X) \text{ meV} \quad (1)$$

$$E_\Sigma = (-70 + 359 \cdot X) \text{ meV}$$

Burada enerjilər Brillüen zonasının  $L$  nöqtəsindəki qadağan olunmuş zonanın ortasından hesablanır. Qadağan olunmuş zonanın eni də  $X$  ilə xətti olaraq dəyişir [9]:

$$E_{gL} = (10 - 242 \cdot X) \text{ meV} \quad (2)$$

Effektiv kütləsi  $m^* = 0.9 m_0$  [8] olan ağır  $\Sigma$  deşiklərinin enerji spektri parabolik modelə təsvir edilir. Ağır  $T$  deşiklərinin enerji spektri parabolik modelə təsvir edildikdə effektiv kütlənin anizotropluğu nəzərə alınır:  $m_x^* = m_y^* = 0.063 m_0$  və  $m_z^* = 0.667 m_0$  ( $z$  oxu triqonal  $C_3$  oxu boyunca yönəldilib). Brillüen zonasının  $L$  nöqtəsində enerji spektri Mak-Klür modeli [10] ilə təsvir edilir:

$$(E + \frac{1}{2} E_{gL} + \frac{1}{2} \alpha_{ay'y'} k_{y'}^2) (E - \frac{1}{2} E_{gL} - \frac{1}{2} \alpha_{sy'y'} k_{y'}^2) = Q_{xx}^2 k_x^2 + Q_{yy'}^2 k_{y'}^2 + Q_{zz'}^2 k_{z'}^2 \quad (3)$$

Burada  $x$  oxu binar  $C_2$  oxuna paraleldir,  $y'$  oxu bissektor oxu ilə,  $z$  oxu isə triqonal  $C_3$  oxu ilə  $\varphi_0 \approx 6^\circ$  bucağı təşkil edir;  $Q_{ij}$  kəmiyyətləri sürətin matris elementləri ilə təyin edilir;  $\alpha_a$  və  $\alpha_s$ , müvafiq olaraq  $L_a$  və  $L_s$  zonalarının izoenergetik səthinin ayrılıyına daha uzaq zonaların təsirini nəzərə alan təshihəedicilər effektiv kütlələrdir;  $k$  – dalğa vektoru,  $E$  isə

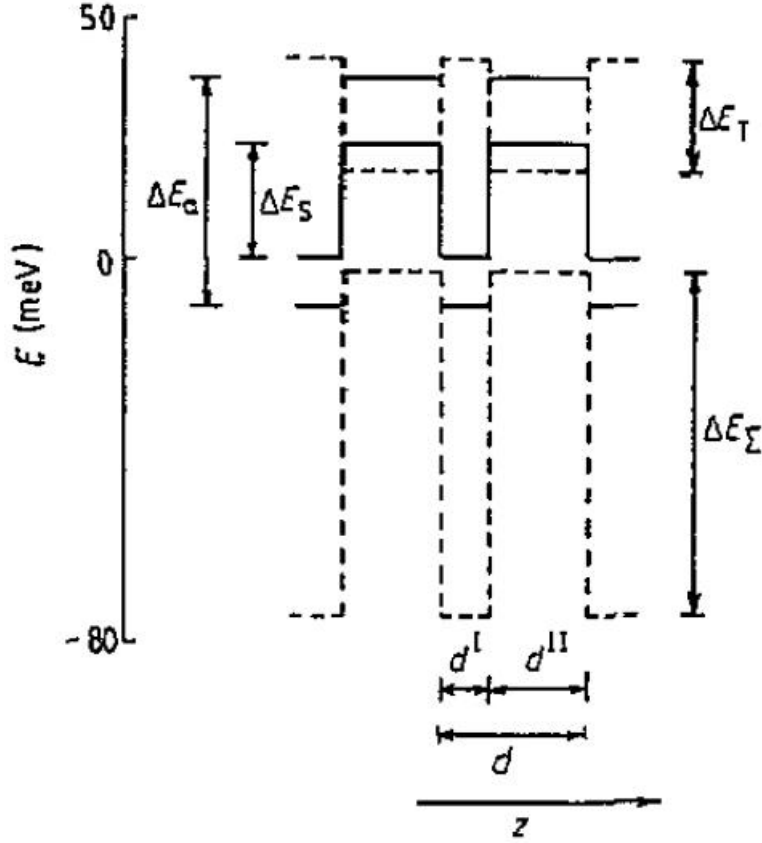
qadağan olunmuş  $E_{q-L}$  zonasının ortasından hesablanan enerjidir. Stibiumun  $0 \leq X \leq 0.6$  tərkib intervallında [9]  $\alpha_{ay'y'} = 1.1 + 0.7 \cdot X$ ,  $\alpha_{sy'y'} = 0.615 + 0.4X$ ,  $Q_{xx} = 0.457 - 0.188 \cdot X$ ,  $Q_{yy'} = 0.03 - 0.04 \cdot X$ ,  $Q_{zz'} = 0.344$  (qiymətlər atom vahidlərində verilib, yəni hesab edilir ki,  $\hbar = 1$ ,  $e = 1$  və  $m_0 = 1$ ). Sti-

biumun  $0 \leq X \leq 0.7$  tərkib intervalında tərkibin artması ilə  $\phi_0$  bucağının qiyməti  $6^\circ$ -dən  $0^\circ$ -dək azalır [7].

### Bi/Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub> KOMPOZİSİYALI SUPERQƏFƏS STRUKTURUNUN ZONA QURULUŞU

Yuxarıda qeyd olunan məlumatdan istifadə edib, Bi/Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub> superqəfəs strukturunun enerji zona diaqra-

mını qura bilərik. Enerjini bismutun keçiricilik zonasının dibindən hesablayacağıq. Diaqramı qurarkən nəzərə alacağıq ki, istilik tarazlığında periodik struktur boyunca  $\partial E_F / \partial z = 0$  şərti ödənilməlidir (burada  $E_F$  – Fermi enerjisi,  $z$  isə laylar müstəvisinə perpendikulyar istiqamətdir). Bi/Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub> superqəfəs strukturunun enerji zona diaqramı şəkil 1-də göstərilmişdir.



Şəkil 1. Bi/Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub> superqəfəs strukturunun enerji zona diaqramı. Enerji bismutun keçiricilik zonasının dibindən millielektronvolt vahidlərində hesablanır,  $z$  oxu laylar müstəvisinə perpendikulyardır,  $\Delta E_\sigma$  və  $\Delta E_S$  – Brillüen zonasının  $L$  nöqtəsindəki zonaların,  $\Delta E_T$  və  $\Delta E_T$  isə  $T$  və  $\Sigma$  nöqtələrindəki zonaların laylararası sərhəddə qırılmalarıdır. Diaqramda  $d^I$  – bismut layının,  $d^{II}$  isə Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub> layının qalınlığıdır.

Brillüen zonasının  $L$  nöqtəsində Bi/Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub> superqəfəs strukturunun enerji spektri, Mak-Klür modelinin effektiv Hamiltonianından istifadə etməklə Şrodinqer tənliyinin həllindən tapıla bilər. Əgər  $z$  oxu

triqonal  $C_3$  oxu boyunca yönəlibsə və  $x$  oxu binar  $C_2$  oxuna,  $y$  oxu isə bissektor oxuna paraleldirsə ( $\varphi_0$  bucağı kiçik olduğundan nəzərə alınmaya bilər), tənlik aşağıdakı şəkildə olur:

$$\begin{bmatrix} H_{11} - E & 0 & H_{13} & H_{14} \\ 0 & H_{11} - E & -H_{41} & H_{31} \\ H_{31} & -H_{14} & H_{33} - E & 0 \\ H_{41} & H_{13} & 0 & H_{33} - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \chi_1(r) \\ \chi_2(r) \\ \chi_3(r) \\ \chi_4(r) \end{bmatrix} = 0 \quad (4)$$

Burada:

$$H_{11} = E_a(z) - \alpha_{ayy} \frac{\hat{p}_y^2}{2h^2}$$

$$H_{33} = E_s(z) + \alpha_{syy} \frac{\hat{p}_y^2}{2h^2}$$

$$\begin{aligned} H_{13} &= t \cdot \hat{p} \\ H_{31} &= t^* \cdot \hat{p} \\ H_{14} &= u \cdot \hat{p} \\ H_{41} &= u^* \cdot \hat{p} \\ \hat{p} &= -i\hbar\nabla \end{aligned} \quad (5)$$

$E_a(z)$  və  $E_s(z)$  – müvafiq olaraq  $L_a$  və  $L_s$  zona ekstremumlarının enerjisi,  $\chi(r)$  – dalğa funksiyası,  $u$  və  $t$  isə sürətin matris elementləridir.

(4) tənliyi dörd biricins diferensial tənliklər sisteminə ekvivalentdir. Onların əvəzlənməsi nəticəsində alırıq:

$$\begin{aligned} & \{[(E_a - E + \frac{1}{2}\alpha_{a yy}\nabla_y^2)(E_s - E - \frac{1}{2}\alpha_{s yy}\nabla_y^2) + Q_{xx}^2\nabla_x^2 + Q_{yy}^2\nabla_y^2 + Q_{zz}^2\nabla_z^2]^2 + \\ & + Q_{zz}^2(\partial E_a/\partial z)(\partial E_s/\partial z)\}\chi(r) = 0 \end{aligned} \quad (6)$$

Burada  $Q_{jj}^2 = \hbar^2(u_j^*u_j + t_j^*t_j)$ . Dalğa funksiyasını aşağıdakı kimi seçə bilərik:

$$\chi(r) = \psi(z) \exp(ik_x x + ik_y y) \quad (7)$$

Burada

$$\psi^\mu(z) = A^\mu \exp(\kappa^\mu z) + B^\mu \exp(-\kappa^\mu z) \quad (8)$$

Bismut laylarını  $\mu = I$  indeksi ilə,  $\text{Bi}_{1-X}\text{Sb}_X$  laylarını isə  $\mu = II$  indeksi ilə işarə edəcəyik. Məsələn, qoy  $d^I$  – bismut layının,  $d^{II}$  isə  $\text{Bi}_{1-X}\text{Sb}_X$  layının qalınlığı olsun. Tutaq ki, laylararası sərhədlərdən biri  $z_0$  nöqtəsindədir, yəni  $z_0 - d^I < z < z_0$  oblastı bismut layına,  $z_0 < z < z_0 + d^{II}$  oblastı isə  $\text{Bi}_{1-X}\text{Sb}_X$  layına təsadüf edir. Onda  $z_0 - d^I < z < z_0 + d^{II}$  oblastı üçün yazıla bilər:

$$E_{a,s}(z) = E_{a,s}^I + (E_{a,s}^{II} - E_{a,s}^I)\theta(z - z_0) \quad (9)$$

Bu halda (6) tənliyi  $z_0$  nöqtəsi yaxınlığında aşağıdakı şəkil alır:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = K\psi(z)\delta(z - z_0) \quad (10)$$

Burada  $K^2 = (E_a^{II} - E_a^I)(E_s^I - E_s^{II})/Q_{zz}^2$ . Lay daxilində tənlik

$$\nabla_z^2 \psi^\mu(z) = (\kappa^\mu)^2 \psi^\mu(z) \quad (11)$$

şəklindədir. Burada

$$(\kappa^\mu)^2 = [(\frac{1}{2}\alpha_{a yy}^\mu k_y^2 - E_a^\mu + E)(\frac{1}{2}\alpha_{s yy}^\mu k_y^2 + E_s^\mu - E) + (Q_{xx}^\mu k_x^2 + (Q_{yy}^\mu k_y)^2)]/Q_{zz}^2 \quad (12)$$

Sərhəd şərtləri belədir:

$$\begin{aligned} \psi^I(z_0) &= \psi^{II}(z_0) \\ \frac{\partial \psi}{\partial z} \Big|_{z>z_0} - \frac{\partial \psi}{\partial z} \Big|_{z<z_0} &= K\psi(z_0) \end{aligned} \quad (13)$$

Sərhəd şərtlərini  $z = d^{II}$  və  $z = d$  nöqtələri üçün yazsaq (burada  $d = d^I + d^{II}$ ), onda

$$\psi^\mu(z+d) = \psi^\mu(z) \exp(iqd) \quad (14)$$

Blox şərtindən ( $q$  – laylar müstəvisinə perpendikulyar istiqamətdə dalğa vektorudur) istifadə edib,  $A^\mu$  və  $B^\mu$  əmsalları üçün biricins tənliklər sistemi ala bilərik. Sistemin həllindən superqəfəs strukturunun enerji spektri tapılır. Göstərmək olar ki, Brillüen zonasının  $L$  nöqtəsi üçün dispersiya tənliyi

$$\cos(qd) = \cosh(\kappa^I d^I) \cosh(\kappa^{II} d^{II}) + \frac{1}{2} \left( \frac{\kappa^I}{\kappa^{II}} + \frac{\kappa^{II}}{\kappa^I} - \frac{K^2}{\kappa^I \kappa^{II}} \right) \sinh(\kappa^I d^I) \sinh(\kappa^{II} d^{II}) \quad (15)$$

şəklindədir.

Ağır dəşiklərin (Brillüen zonasının  $T$  və  $L$  nöqtələrində) enerji spektri standart parabolik modellə təsvir edilir. Məsələn,  $T$  nöqtəsi üçün dispersiya tənliyi

$$\cos(qd) = \cos(\kappa_T^I d^I) \cosh(\kappa_T^{II} d^{II}) + \frac{1}{2} \left( \frac{\kappa_T^{II}}{\kappa_T^I} - \frac{\kappa_T^I}{\kappa_T^{II}} \right) \sin(\kappa_T^I d^I) \sinh(\kappa_T^{II} d^{II}) \quad (16)$$

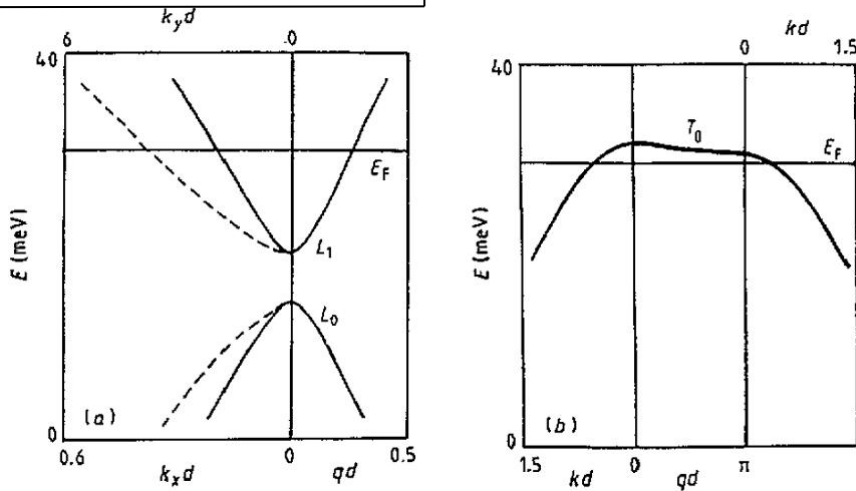
şəklindədir. Burada:

$$\begin{aligned} (\kappa_T^I)^2 &= (m_z^T/m_x^T)k_x^2 + (m_z^T/m_y^T)k_y^2 - 2m_z^T E/\hbar^2 \\ (\kappa_T^{II})^2 &= (m_z^T/m_x^T)k_x^2 + (m_z^T/m_y^T)k_y^2 + 2m_z^T (\Delta E_T - E)/\hbar^2 \end{aligned} \quad (17)$$

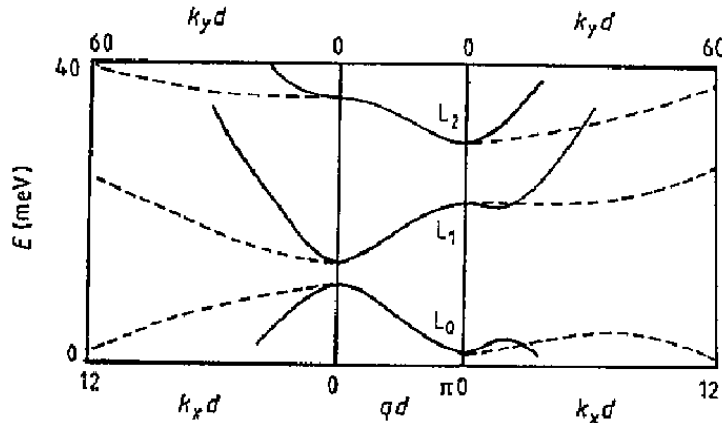
### ƏDƏDİ HESABLAMALARIN NƏTİCƏLƏRİ

Periodu 10 nm olan ( $d^I = 4$  nm və  $d^{II} = 6$  nm)  $\text{Bi}/\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$  superqəfəs strukturunun (15) və (16) dispersiya tənlikləri əsasında hesablanmış enerji spektri şəkil 2-də göstərilmişdir. Hesablama  $E_g^I < E < E_g^{II}$  enerji intervalında aparılıb.  $L_0$  və  $L_1$  minizonaları arasında enerji məsafəsi 4.5 meV -dir. Diferensiallama üsulu ilə (15) tənliyindən tapılmış effektiv kütlənin  $L$  nöqtəsində qiyməti 0.007  $m_0$  təşkil edir.  $L_1$  və  $T_0$  minizonaları qismən üst-üstə düşür (örtülmə qiyməti 13.4 meV -dir). Elektronəytrallıq tənliyinin həllindən

tapılmış 10 K temperaturunda elektronların Fermi enerjisi 12 meV -ə bərabərdir (Fermi enerjisinin qiyməti  $L_1$  minizonasının dibindən hesablanıb). Sərbəst yükdaşıyıcıların konsentrasiyası  $2 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$  təşkil edir. Hesablama göstərir ki,  $d^I/d^{II}$  nisbəti azaldıqca  $L_1$  və  $T_0$  minizonalarının kəsişməsi azalır,  $d^I/d^{II} < 0.3$  olduqda isə (məsələn, əgər  $d^I = 2$  nm və  $d^{II} = 8$  nm) kəsişmə yox olur və  $\text{Bi}/\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$  superqəfəs strukturu yarımmetal halından yarımqeçirici hala keçir.



Şəkil 2. Periodu  $d = 10$  nm olan ( $d^I = 4$  nm və  $d^{II} = 6$  nm)  $\text{Bi}/\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$  superqəfəs strukturunun Brillüen zonasının (a)  $L$  nöqtəsində və (b)  $T$  nöqtəsində enerji spektri. Enerji bismutun keçiricilik zonasının dibindən hesablanır. Qırıq-qırıq əyrilərlə enerjinin dalğa vektorunun  $k_y$  komponentindən asılılığı göstərilib.



Şəkil 3. Periodu  $d = 120$  nm olan ( $d^I = d^{II} = 60$  nm)  $\text{Bi}/\text{Bi}_{0.99}\text{Sb}_{0.12}$  superqəfəs strukturunun Brillüen zonasının  $L$  nöqtəsində enerji spektri. Enerji bismutun keçiricilik zonasının dibindən hesablanır. Qırıq-qırıq əyrilərlə enerjinin dalğa vektorunun  $k_y$  komponentindən asılılığı göstərilib.

Şəkil 3-də periodu 120 nm olan ( $d^I = d^{II} = 60$  nm)  $\text{Bi}/\text{Bi}_{0.88}\text{Sb}_{0.12}$  superqəfəs strukturunun enerji spektri göstərilib. Hesablamalar göstərir ki, periodu  $d \geq 100$  nm olan superqəfəs strukturlarında effektiv kütlənin  $m_x$  və  $m_y$  komponentləri nəzərə çarpacaq dərəcədə dalğa vektorunun  $q$  komponentindən (yəni dalğa vektorunun laylar müstəvisinə perpendikulyar komponentindən) asılıdır. Dalğa vek-

torunun müəyyən  $q = q_0$  qiymətində  $L_0$  və  $L_1$  minizonalalarının  $m_x$  və  $m_y$  effektiv kütlə komponentləri öz işarəsini dəyişir və nəticədə minizona enerjisinin dalğa vektorunun  $k_x$  və  $k_y$  komponentlərindən (yəni dalğa vektorunun laylar müstəvisinə paralel komponentlərindən) asılılığı “yəhərşəkilli” forma alır.

- [1] A.P. Silin. Semiconductor superlattices. Sov. Phys. Usp., 1985, 28, 972-993.
- [2] X.J. Yi, H.C. Wang, A. DiVenere, C.L. Hou, J. Chen, J.B. Ketterson and G.K. Wong.  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{Bi}$  superlattice grown by molecular beam epitaxy. Appl. Phys. Lett., 1994, 64, 1283-1285.
- [3] Sunglae Cho, Yunki Kim, Antonio DiVenere, George K. Wong, John B. Ketterson and Jung-II Hong. Bi/Sb superlattices grown by molecular beam epitaxy. J. Vac. Sci. Technol. A, 1999, 17, 2987-2990.
- [4] S. Cho, Y. Kim, S.J. Youn, A. DiVenere, G.K. Wong, A.J. Freeman, J.B. Ketterson, L.J. Olafsen, I. Vurgaftman, J.R. Meyer and C.A. Hoffman. Artificially ordered Bi/Sb superlattice alloys: fabrication and transport properties. Phys. Rev. B, 2001, 64, 235330.
- [5] Xincun Dou, Guanghai Li, Hechang Lei, Xiaohu Huang, Liang Li and Ian W. Boyd. Template epitaxial growth of thermoelectric Bi/BiSb superlattice nanowires by charge-controlled pulse electrodeposition. J. Electrochem. Soc., 2009, 156, 9, K149-K154.
- [6] G.A. Mironova, M.V. Sudakova and Ya.G. Ponomarev. Investigation of the band structure of semiconducting  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  alloys. Sov. Phys. JETP, 1980, 51, 5, 918-929.
- [7] N.B. Brandt, R. Hermann, G.I. Golysheva, L.I. Devyatkova, D. Kusnik, W. Kraak and Ya.G. Ponomarev. Electron Fermi surface of semimetallic alloys  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  ( $0.23 \leq x < 0.56$ ). Sov. Phys. JETP, 1982, 56, 6, 1247-1256.
- [8] N.A. Red'ko, and N.A. Rodionov. Topological phase transitions in  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  alloys and composition dependence of the position of the heavy-hole band. JETP Lett., 1985, 42, 6, 303-306.
- [9] S.Sh. Akhmedov, R. Herrmann, K.N. Kashirin, A. Krapf, V. Kraak, Ya.G. Ponomarev and M.V. Subakova. Appearance of a saddle point in the energy spectrum of  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  alloys. Sov. Phys. JETP, 1990, 70, 2, 370-379.
- [10] J.W. McClure. The energy band model for bismuth: Resolution of a theoretical discrepancy. J. Low Temp. Phys., 1976, 25, 527-540; J.W. McClure and K.H. Choi. Energy band model and properties of electrons in bismuth. Solid State Commun., 1977, 21, 11, 1015-1018.

**N.B. Mustafayev**

### **ENERGY BAND STRUCTURE OF THE BISMUTH AND ANTIMONY BASED COMPOSITIONAL SUPERLATTICES**

A set of equations determining the band structure and energy spectrum of the bismuth and antimony based compositional superlattices has been obtained and solved. The Fermi energy, concentration and effective mass of carriers in these superlattices have been calculated.

**Н.Б. Мустафаев**

### **ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ЗОННАЯ СТРУКТУРА КОМПОЗИЦИОННЫХ СВЕРХРЕШЕТОК НА ОСНОВЕ ВИСМУТА И СУРЬМЫ**

Получена и решена система уравнений, определяющая зонную структуру и энергетический спектр композиционных сверхрешеток на основе висмута и сурьмы. Вычислены энергия Ферми, концентрация и эффективная масса носителей в этих сверхрешетках.