

## Ab-initio Calculation of Optical Properties of the compound $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$

\*Hamdollah Salehi<sup>1</sup>, Naser ebrahimi<sup>2</sup>

1- Associate Professor, Department of physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran.

2- Ph.D Student, Department of physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran.

**Citation:** Salehi H, ebrahimi N. Ab-initio Calculation of Optical Properties of the compound  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$ . Metallurgical Engineering 2021; 24(1): 10-17 <http://dx.doi.org/10.22076/ME.2021.523783.1307>

 <http://dx.doi.org/10.22076/ME.2021.523783.1307>

### **ABSTRACT**

In this research, optical properties such as dielectric function; Refractive index; Absorption coefficient and electron energy loss spectrum of  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  topological insulator have been calculated by using of Full potential linear augmented plane waves (FP-LAPW) within the framework of density functional theory (DFT) implemented in Wien2k code. PBE and LDA approximations have been used to calculate the exchange-correlation potential. The optical gap and the static refractive index have been obtained about 0.35 eV and 6.2. The absorption coefficient has two main peaks in 2.46eV and 7.36 eV that the second maximum is in the range of UV range and predicts that this material can be used in the field of UV-related devices such as sensors and detectors. The results are consistent with other available data.

**Keywords:** Topological insulator, Density functional theory, Band gap.

Received: 26 January 2021

Accepted: 30 October 2021

■ ..... ■

\* *Corresponding Author:*

Hamdollah Salehi, PhD

Address: Department of physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran.

Tel: +98 (9166182239)

E-mail: Salehi\_h@scu.ac.ir

## محاسبه ابتدا به ساکن ویژگی های اپتیکی ترکیب $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$

\*حمدا.. صالحی<sup>۱</sup>، ناصر ابراهیمی<sup>۲</sup>

۱- دانشیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران.  
 ۲- دانشجوی دکتری، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران.

### چکیده

در این تحقیق ویژگی های اپتیکی از جمله تابع دی الکتریک، ضریب شکست، ضریب جذب و تابع اتلاف عایق توپولوژی  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل با بسته نرم افزاری Wien2k محاسبه شده است. برای محاسبه پتانسیل تبادل-همبستگی از تقریب های (Perdew-Burke-Ernzerhof) PBE و LDA (local density approximation) استفاده شده است. گاف اپتیکی در حدود ۰/۳۶ الکترون ولت و ضریب شکست استاتیکی برابر با ۶/۲ به دست آمده است. ضریب جذب دارای دو بیشینه اساسی در ۲/۴۶ eV و ۷/۳۶ eV است که بیشینه دوم در محدوده پرتو فرابنفش قرار دارد و نشان می دهد که این ماده می تواند در زمینه ساخت قطعات مرتبط با پرتو فرابنفش مانند حسگرها و آشکارسازها مورد توجه قرار گیرد. نتایج به دست آمده با دیگر داده های موجود سازگاری دارد.

واژه های کلیدی: عایق توپولوژی، نظریه تابعی چگالی، گاف اپتیکی.

دریافت: ۱۳۹۹/۱۱/۰۷ | پذیرش: ۱۴۰۰/۰۸/۰۸

### ۱. مقدمه

ویژگی عایق توپولوژی در برخی بلورها، آمار مطالعات روی  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  و نیم رساناهای لایه ای هم خانواده در سال های اخیر افزایش چشم گیری داشته است. در همین راستا مطالعات تجربی و نظری اخیر روی چندین ترکیب لایه ای سه تایی به شکل کلی  $\text{AB}_2\text{Te}_4$ ،  $\text{A}=\text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$ ،  $\text{B}=\text{Sb}, \text{Bi}$  به دنبال نشان دادن رفتار عایق توپولوژی در این مواد از جمله  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  بوده اند [۴]. این بلور در ساختار سه گوشه با گروه فضایی  $R\bar{3}m$  (۱۶۶) تشکیل می شود [۵]. یاخته یک  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  از سه ورقه اتمی هفت لایه با توالی  $\text{Te1-Bi-Te2-Sn-Te2-Bi-Te1}$  شکل گرفته است. فاز سه گوشه پایدارترین فاز این ماده در دمای اتاق است [۶]. در سال ۲۰۱۷ ساختار نواری  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  با استفاده از کد Vienna محاسبه و گاف نواری ۰/۴۹ الکترون ولت برای آن به دست آمد [۷]. هم چنین گاف نواری  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  با تقریب LMTO<sup>۱</sup> برابر با ۰/۴۸ الکترون ولت و با تقریب GGA (برابر با ۰/۴۵ الکترون ولت و با تقریب GGA<sup>۲</sup> با در نظر گرفتن جفت

در سال های پس از سال ۲۰۰۰ میلادی شاخه جدیدی در فیزیک ماده چگال بر این اساس که برهم کنش اسپین-مدار می تواند فازهای جدیدی به نام فازهای الکترونی عایق توپولوژی در ماده پدید آورد و هم چنین بر اساس پیش بینی و مشاهده این فازها در مواد واقعی به وجود آمده است [۱، ۲]. عایق توپولوژی همانند عایق معمولی، یک گاف انرژی در ساختار انبوه دارد که بالاترین نوارهای الکترونی اشغال شده را از پایین ترین نوارهای خالی جدا می کند. اما ساختار سطح (یا در حالت دوبعدی، لبه) یک عایق توپولوژی الزاماً حالت های بدون گافی دارد که با تقارن بازگشت زمانی حفظ شده اند. حالت های سطحی یک عایق توپولوژی، حالت های رسانشی با ویژگی های متمایز از همه سامانه های الکترونی یک بعدی یا دو بعدی که تاکنون شناخته شده اند پدید می آورند. علاوه بر این پیش بینی شده است که ویژگی های تراپردی و الکترونی خاصی نیز در عایق های توپولوژی وجود داشته باشد و بنابراین امکان دارد که در اسپین ترونیک یا محاسبات کوانتومی از آن ها استفاده شود [۳]. پس از پیش بینی و کشف

1. Linear Muffin-tin orbitals
2. Generalized Gradient Approximation

\* نویسنده مسئول:  
 دکتر حمدا.. صالحی

نشانی: اهواز، دانشگاه شهید چمران اهواز، دانشکده علوم، گروه فیزیک.  
 تلفن: (۹۱۶۶۱۸۲۳۳۹) ۰۹۸

پست الکترونیکی: Salehi\_h@scu.ac.ir

۱۲ چرخه به همگرایی مورد نظر دست یافتیم. هم چنین مختصات اتمی استفاده شده برای شروع شبیه سازی در فشار  $3/5$  گیگاپاسکال و در فاز شش گوشه در جدول (۱) آورده شده است. در حالی که در فشار صفر ترکیب در فاز سه گوشه بوده و مختصات آن دارای تغییراتی می باشد.

جدول ۱. مختصات اتمی اتم های تشکیل دهنده  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  که در یک سلول شش گوشه با گروه فضایی  $166$  در متبلور می شوند [۱۶].

اتم	جایگاه	$x$	$y$	$z$
Sn	$3a$	۰	۰	۰
Bi	$6c$	۰	۰	$0/4281$
Te-1	$6c$	۰	۰	$0/1359$
Te-2	$6c$	۰	۰	$0/2881$

### ۳. نتایج و بحث

#### تابع دی الکتریک

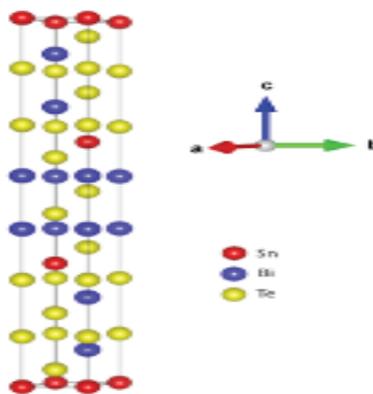
طیف اپتیکی منبع وسیعی از اطلاعات را برای مطالعه ساختار نواری، خواص الکترونی، برانگیختگی ها و نوسانات شبکه در اختیار ما قرار می دهد. برای دستیابی به خواص اپتیکی یک جامد لازم است رفتار ثابت های اپتیکی مختلف برحسب انرژی تابش مورد بررسی قرار گیرد. یکی از مهم ترین ثابت های اپتیکی تابع دی الکتریک مختلط است. این تابع نقطه شروع مناسبی برای دستیابی به سایر خواص اپتیکی است. این کمیت یک تانسور است. تابع دی الکتریک مختلط وابسته به بسامد  $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$  پاسخ اپتیکی محیط به فوتون ها با انرژی  $E = \hbar\omega$  را توصیف می کند [۱۷]. کمیت های  $\epsilon_1(\omega)$  و  $\epsilon_2(\omega)$  به ترتیب سهم های حقیقی و موهومی از  $\epsilon(\omega)$  هستند. سهم موهومی تابع دی الکتریک  $\epsilon_2(\omega)$  می تواند از عناصر ماتریسی اندازه حرکت [۱۸] و محاسبات ساختار الکترونی (چگالی حالت ها) به دست آید. سهم حقیقی  $\epsilon_1(\omega)$  نیز می تواند با استفاده از  $\epsilon_2(\omega)$  و با تبدیل های کرامرز-کرونیک [۱۹] حساب شود. سهم موهومی تابع دی الکتریک  $\epsilon_2(\omega)$  به صورت زیر توصیف می شود [۲۰]:

$$(1)$$

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{e^2 \hbar}{\pi m^2 \omega^2} \sum_{v,c} \int_{\text{BZ}} |M_{cv}(\mathbf{k})|^2 \delta[\omega_{cv}(\mathbf{k}) - \omega] d^3k$$

انتگرال روی منطقه اول بریلوئن گرفته می شود،  $M_{cv}(k) = \langle u_{ck} | \mathbf{e} \cdot \nabla | u_{vk} \rangle$  گشتاورهای دو قطبی هستند که در آن بردار قطبش میدان الکتریکی است. عناصر ماتریسی برای گذار مستقیم میان حالت های ظرفیت  $u_{vk}(r)$  و نوار رسانش  $u_{ck}(r)$  هستند، و  $\hbar\omega_{cv}(k) = E_{ck} - E_{vk}$

شدگی اسپین-مدار گاف  $0/27$  الکترون ولت به دست آمده است [۸]. در یک کار تحقیقی دیگر اثر فشار روی ویژگی های الکترونی و ساختاری  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  به صورت تجربی و نظری بررسی و نتایج آن نشان می دهد که این ماده یک نیم رسانا با گاف غیر مستقیم در حدود  $0/1$  الکترون ولت است [۵]. هم چنین در سال ۲۰۱۲ با استفاده از روش LMTO بستگی قوی با تقریب چگالی موضعی برای ترکیب  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  گاف نواری  $0/48$  الکترون ولت به دست آمد [۹]. با توجه به اهمیت و کاربرد بالقوه آن، در این کار ویژگی های اپتیکی از جمله ضریب شکست؛ ضریب خاموشی، ضریب جذب و تابع اتلاف ترکیب  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  در حالت انبوه بررسی و محاسبه شده است. علاوه بر این در سال ۲۰۲۰ نیز ویژگی های ساختاری این ترکیب مورد بررسی قرار گرفت [۱۰]. در شکل (۱) ساختار شبکه  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  که با استفاده از نرم افزار VESTA رسم شده، نشان داده شده است.



شکل ۱. ساختار بلوری  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$

#### ۲. مواد و روش تحقیق

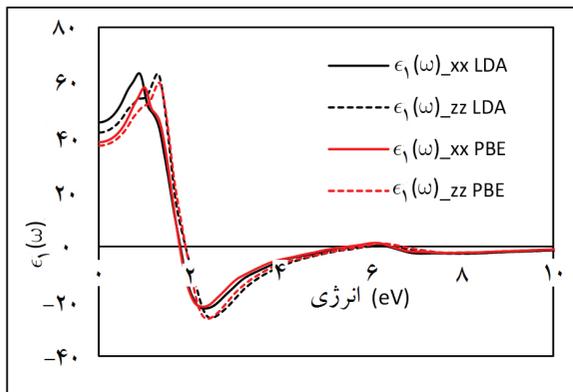
در این تحقیق از کد محاسباتی Wien2k و روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل<sup>۳</sup> (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی<sup>۴</sup> (DFT) برای حل معادلات کوهن-شم استفاده شده است [۱۱-۱۴]. برای محاسبه پتانسیل تبادل-همبستگی از تقریب شیب تعمیم یافته [۱۵] استفاده شده است. تعداد نقاط فضای  $k$  برای انتگرال گیری در منطقه اول بریلوئن برای ترکیب  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$   $800$  نقطه و  $RK_{\text{max}}$  که میزان ماتریس همگرایی را مشخص می کند نیز  $7/5$  در نظر گرفته شده است. شعاع کره مافین تین را نیز پس از بررسی ساختار بلور، برای عناصر Sn، Bi و Te برابر با  $2/5$  بوهر در نظر گرفتیم. هم چنین انرژی جدایی  $6$ - ریدبرگ را برای جداسازی حالت های ظرفیت از حالت های مغزه مینا قرار دادیم و با تعیین مبنای همگرایی  $0/0001$  ریدبرگ، بعد از

3. Full potential linear augmented plane waves

4. Density Functional Theory

تابع دی الکتریک،  $\epsilon_2(\omega)$ ، بیشینه‌ای در  $E = 1.64\text{eV}$  دارد. با توجه به آستانه سهم موهومی تابع، گاف اپتیکی کم‌تر از  $0.4$  الکترون ولت وجود دارد که با مقدار محاسبه شده گاف نواری، یعنی  $0.36$  الکترون ولت هم‌خوانی دارد. هم‌چنین ساختار نواری  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  در راستای مسیر تقارنی تعیین شده توسط نرم‌افزار Wien2k همراه با چگالی حالت‌های کلی بر حسب انرژی در بازه  $2-2$  تا  $2$  الکترون ولت در شکل (۳ب) نشان داده شده است. انرژی فرمی به عنوان مبدأ مقیاس انرژی انتخاب شده است. تراز فرمی درون گاف نواری و بسیار نزدیک به قله نوار ظرفیت قرار گرفته است. با توجه به نمودار چگالی حالت‌های کلی در این شکل، گاف انرژی  $0.36\text{eV}$  و  $0.22\text{eV}$  به ترتیب برای تقریب‌های LDA و PBE دیده می‌شود.

دانستن هردوسهم حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، محاسبه تابع‌های اپتیکی مهمی مانند ضریب شکست  $n(\omega)$ ، ضریب خاموشی  $K(\omega)$ ، ضریب جذب  $\alpha(\omega)$ ، رسانندگی نوری  $\sigma(\omega)$ ، تابع اتلاف انرژی  $L(\omega)$  و بازتابندگی  $R(\omega)$  را امکان‌پذیر می‌کند.



شکل ۲. نمودار سهم حقیقی تابع دی الکتریک برای بلور  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  بر حسب انرژی محاسبه شده با دو تقریب LDA و PBE.

### ضریب شکست و ضریب خاموشی

ضریب شکست پارامتر فیزیکی مهمی است که وابسته به اثر متقابل میکروسکوپی اتمی می‌باشد. ضریب شکست را براساس تابع دی الکتریک می‌توان به شکل معادله (۳) تعریف نمود [۲۲، ۲۳]:

(۳)

$$n(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \left( \epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega) \right)^{1/2} + \epsilon_1(\omega) \right]^{1/2}$$

ضریب شکست یک ماده می‌تواند اطلاعاتی درباره رفتار نور در آن ماده به ما بدهد. در بخش بالایی شکل (۴) نمودار ضریب شکست بر حسب انرژی نشان داده شده است. در انرژی‌های

انرژی برانگیختگی است. سهم حقیقی تابع دی الکتریک نیز همان گونه که گفته شد با کمک سهم موهومی و روابط کرامرز-کرونینگ به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega' \epsilon_2(\omega) d\omega'}{(\omega'^2 - \omega^2)} \quad (2)$$

که در آن  $P$  مقدار اصلی کوشی انتگرال است [۲۱]. برای محاسبه ویژگی‌های اپتیکی به یک شبکه فشرده از نقاط  $k$  با توزیع یک‌نواخت نیاز داریم. در این تحقیق از  $3000$  نقطه  $k$  استفاده کرده‌ایم. سهم حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک به ترتیب در شکل‌های (۲) و (۳) نشان داده شده است. ریشه  $\epsilon_1(\omega)$ ، یا به بیان دیگر مقدار انرژی که به ازای آن کمیت  $\epsilon_1(\omega)$  صفر می‌گردد دارای مفهوم فیزیکی می‌باشد و در واقع شرط لازم برای پلاسمون‌های حجمی در ماده هستند ولی شرط کافی برای آن‌ها، وجود اتلاف انرژی است. علاوه بر این سهم حقیقی تابع دی الکتریک در انرژی صفر، تابع دی الکتریک استاتیک را تعیین می‌کند، ثابت دی الکتریک استاتیک یکی از مهمترین کمیت‌ها در بررسی طیف سهم حقیقی تابع دی الکتریک است. هم‌چنین در ناحیه‌ای که  $\epsilon_1(\omega)$  منفی است، امواج منتشر نمی‌شوند و فرایندهای جذب و اتلاف صورت می‌گیرد. با توجه به شکل (۲) با بررسی  $\epsilon_1(\omega)$  که با استفاده از تقریب‌های مختلف محاسبه شده است، مشاهده می‌شود که در انرژی صفر، سهم حقیقی تابع دی الکتریک (ثابت دی الکتریک استاتیک)  $38$  الکترون ولت می‌شود و می‌تواند یکی از انرژی‌های لازم برای پلاسمون حجمی باشد و به ازای موج الکترومغناطیس با انرژی بیشتر از  $38$  الکترون ولت موج در ترکیب انتشار نمی‌یابد اما با افزایش انرژی موج فرودی به ازای فوتون‌هایی با انرژی بزرگ‌تر از  $40$  الکترون ولت دوباره موج قادر به انتشار در ترکیب است. هم‌چنین حد بسامد صفر  $\epsilon_1(\omega)$  یک کمیت اساسی است که پاسخ دی الکتریک به میدان الکتریکی استاتیک را نشان می‌دهد. ثابت دی الکتریک استاتیک  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  با توجه به شکل (۲) برابر با  $38$  است. ضریب شکست استاتیک ماده برابر با  $\sqrt{\epsilon_1(0)}$  است [معادله (۴)] که نزدیک به  $6.2 \approx \sqrt{38}$  خواهد بود. علاوه بر این در شکل (۲) و (۳) بیانگر این است که تابع دی الکتریک در این حالت یک تانسور است و چون ساختار مورد بررسی شش گوشه می‌باشد، تانسور دی الکتریک در این حالت به صورت  $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} \neq \epsilon_{zz}$  می‌باشد. در شکل (۳) سهم موهومی تابع دی الکتریک نشان داده شده است که سهم موهومی تا قبل از انرژی  $0.4$  الکترون ولت دارای تغییراتی آرام است که ناشی از جذب فوتون‌های کم انرژی است که منجر به گذارهای درون‌نواری می‌شوند اما بعد از انرژی  $0.4$  الکترون ولت سهم موهومی به صورت ناگهانی افزایش می‌یابد که این امر بیانگر جذبی است که به دنبال آن گذارهای میان‌نواری رخ می‌دهد. سهم موهومی

نیاز دارند لذا میزان گذار الکترون ها کاهش یافته و سرعت نور در ترکیب افزایش می یابد و به دنبال آن ضریب شکست روند نزولی در پیش می گیرد.

ضریب خاموشی برای یک ماده نیز سنجشی از میزان جذب پرتو الکترومغناطیسی توسط آن ماده است. رابطه ضریب خاموشی مشابه با ضریب شکست و به شکل معادله (۵) می باشد [۲۲،۲۳]:

$$K(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \left( \varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega) \right)^{1/2} - \varepsilon_1(\omega) \right]^{1/2} \quad (5)$$

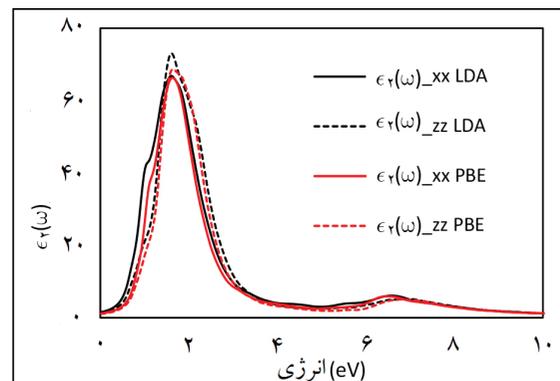
نمودار ضریب خاموشی بر حسب انرژی در بخش پایینی شکل (۴) نشان داده شده است. اگر ضریب خاموشی در یک بلور پایین باشد موج الکترومغناطیس به آسانی از آن عبور می کند. در نتیجه همان طور که در شکل (۴) نشان داده شده است تا انرژی هایی در بازه گاف نواری که هنوز گذار الکترون ها آغاز نشده است موج الکترومغناطیسی قادر به عبور آسان تر از درون ترکیب است، اما با افزایش انرژی فوتون های فرودی رفته رفته گذار آغاز می شود و عبور موج به سادگی قبل از آن نخواهد بود که این امر با افزایش ضریب خاموشی همراه است، تا این که در انرژی ۶ الکترون ولت ضریب خاموشی کاهش می یابد. لازم به توضیح است که تغییرات ضریب شکست مانند سهم حقیقی تابع دی الکتریک و تغییرات ضریب خاموشی همانند سهم موهومی تابع دی الکتریک است و چون سهم موهومی تابع دی الکتریک نشان دهنده جذب است مشاهده می شود که نمودار ضریب خاموشی شباهت بسیار زیادی با سهم موهومی تابع دی الکتریک دارد. بیشینه های موضعی ضریب خاموشی  $K(\omega)$  متناظر با صفرهای سهم حقیقی تابع دی الکتریک است:

#### جذب

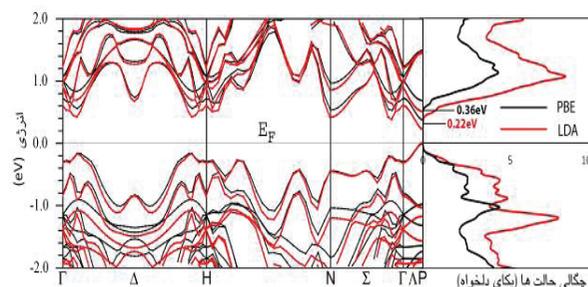
ضریب جذب با رابطه زیر داده می شود [۲۲،۲۳].

$$\alpha(\omega) = 2\omega \left[ \frac{\left( \varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega) \right)^{1/2} - \varepsilon_1(\omega)}{2} \right]^{1/2} \quad (6)$$

تابع جذب  $\alpha(\omega)$  که در شکل (۵) نشان داده شده است، پارامتر مهمی از نظر کاربردهای اپتوالکترونیکی مواد است. طیف جذب نشان می دهد که انرژی آستانه جذب حدود ۰/۶ الکترون ولت است. با گذر از انرژی آستانه، قله هایی در جذب دیده می شود که هر یک متناظر با یک گذار الکترونی هستند. نخستین قله جذب در ۲/۴۶ الکترون ولت دیده می شود که



(الف)



(ب)

**شکل ۳.** (الف) نمودار سهم موهومی تابع دی الکتریک برای بلور  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  بر حسب انرژی محاسبه شده با دو تقریب LDA و PBE، و (ب) ساختار نواری انبوهه (چپ) و چگالی حالتها (راست) در بلور  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  محاسبه شده با دو تقریب PBE و LDA.

کم مقدار ضریب شکست  $n(\omega)$  نزدیک به مقدار استاتیکی ۶ است و در انرژی های بالاتر کاهش ناگهانی در ضریب شکست رخ می دهد. با محاسبه سهم حقیقی تابع دی الکتریک در انرژی صفر می توان به ضریب شکست استاتیکی سامانه دست یافت که در معادله (۴) بیان شده است [۲۲،۲۳].

$$n_0 = \sqrt{\varepsilon_1(0)} \quad (4)$$

مقدار ضریب شکست استاتیک طبق شکل (۴) برابر با مقدار ۶ می باشد که در بخش حقیقی تابع دی الکتریک نیز ذکر گردیده است. با افزایش انرژی فوتون فرودی، ضریب شکست ابتدا تا انرژی در بازه گاف دارای تغییرات بسیار محدود است اما بعد از محدوده گاف با توجه به این که گذار الکترون ها به نوار رسانش آغاز می گردد سرعت نور در ترکیب کاهش می یابد و به دنبال آن ضریب شکست ترکیب افزایش می یابد. با انجام گذارهای اولیه که انرژی آنها هم در ساختار نواری و هم در سهم موهومی تابع دی الکتریک نشان داده شد الکترون هایی که در لبه بالایی نوار ظرفیت قرار دارند گذار انجام می دهند و الکترون های بعدی که جایگزینی بیشتری در اتم دارند به انرژی های بالاتری برای گذار احتمالی خود

فرا بنفش مانند آشکارسازها و جذب کننده‌ها مناسب باشد. در فرآیند جذب الکترون‌ها با جذب انرژی از نوار ظرفیت به نوار رسانش گذار انجام می‌دهند به همین دلیل قله‌های نمودار جذب و سهم موهومی تابع دی‌الکتریک دارای همخوانی مناسبی هستند.

### رسانندگی اپتیکی

رسانندگی و ثابت دی‌الکتریک با رابطه زیر با هم ارتباط دارند [۲۳]:

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{4\pi i}{\omega} \sigma(\omega) \quad (7)$$

تابع رسانندگی یک تابع مختلط است و از رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$\sigma(\omega) = \sigma_1(\omega) + i \sigma_2(\omega) \quad (8)$$

که در آن  $\sigma_1(\omega)$  سهم حقیقی رسانندگی و  $\sigma_2(\omega)$  سهم موهومی رسانندگی اپتیکی است. بنا بر نظریه الکترون-آزاد درود  $\sigma(\omega)$  با رابطه زیر داده می‌شود [۲۳]:

$$\sigma(\omega) = \frac{N_0 e^2}{m_{eff}} \frac{\omega'}{\omega^2 + \omega'^2} \quad (9)$$

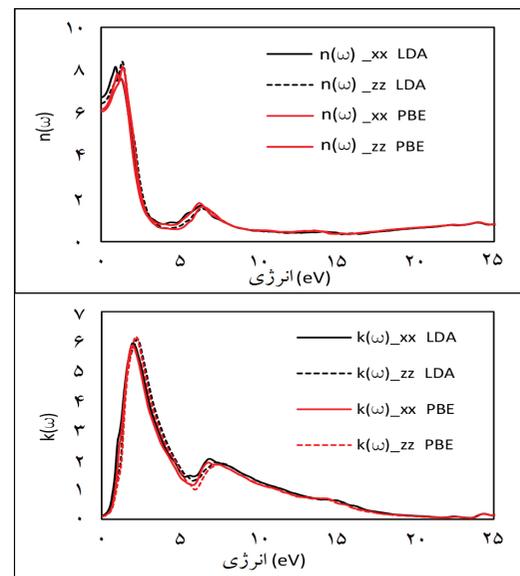
که در آن  $\omega'$  بسامد میرایی،  $N_0$  چگالی الکترون‌های آزاد،  $e$  بار الکترون و  $m_{eff}$  جرم مؤثر است. رسانندگی اپتیکی به صورت تابعی از گذارهای درون-نواری و میان-نواری توصیف می‌شود، یا به بیان دیگر رسانندگی اپتیکی گذارهای بین نواری را نشان می‌دهد که دارای یک مقدار آستانه است و مقدار آن برابر گاف نواری است. شکل (۶) سهم حقیقی رسانندگی اپتیکی  $\sigma(\omega)$  برای  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  را نشان می‌دهد. بیشینه رسانندگی اپتیکی در انرژی ۲/۰۸ الکترون ولت رخ می‌دهد، که این قله به سبب گذار الکترون‌ها از حالت‌های اشغال شده زیر تراز فرمی به اولین قله حالت‌های اشغال نشده در نوار رسانش است.

### طیف اتلاف

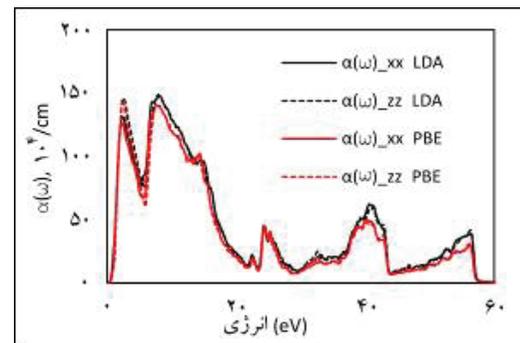
طیف اتلاف انرژی می‌تواند ناشی از تحرک الکترون‌های تک انرژی در جامد و یا از تحریک دسته‌جمعی الکترون‌های ظرفیت باشد. تابع اتلاف  $L(\omega)$  نیز از آن‌جا که اتلاف انرژی یک الکترون پرسرعت گذرنده درون ماده را توصیف می‌کند دارای اهمیت است و می‌تواند به شکل زیر از ثابت دی‌الکتریک به دست آید [۲۴-۲۶]:

$$(10)$$

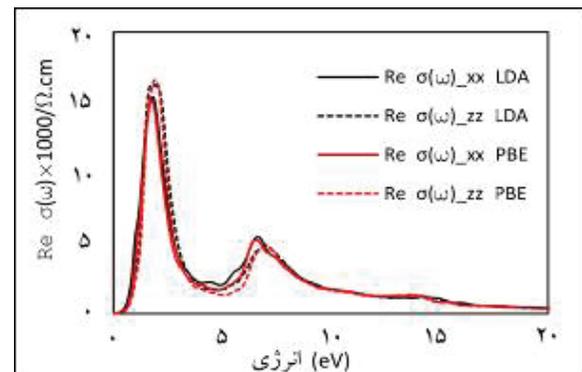
$$L(\omega) = -\text{Im} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\omega)} \right] = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)}$$



شکل ۴. نمودارهای ضریب شکست  $n(\omega)$  و ضریب خاموشی  $k(\omega)$  برای بلور  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  بر حسب انرژی محاسبه شده با دو تقریب LDA و PBE.



شکل ۵. تابع جذب بر حسب انرژی برای بلور  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  محاسبه شده با دو تقریب LDA و PBE.

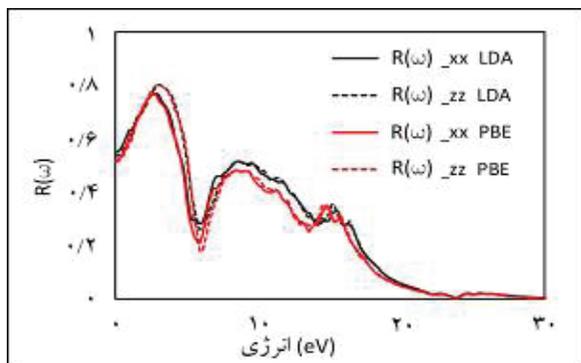


شکل ۶. رسانندگی اپتیکی بر حسب انرژی برای بلور  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  محاسبه شده با دو تقریب LDA و PBE.

این انرژی در ناحیه مرئی طیف تابش قرار دارد. قله بعدی جذب در انرژی ۷/۶۳ الکترون ولت رخ می‌دهد. این انرژی متناظر با پرتوهای فرا بنفش است و می‌توان نتیجه گرفت که این ماده می‌تواند برای ساخت قطعات مورد استفاده در زمینه

خواهد داشت. این مقدار انرژی بر طبق نتایج حاصل از سهم حقیقی تابع دی الکتریک، برابر با میزان انرژی فوتون های فرودی است که به ازای آن دوباره موج الکترومغناطیسی در ترکیب انتشار می یابد و با بیشترین میزان جذب روبه رو می گردد. چون در انرژی هایی که تابع دی الکتریک مقداری کمتر از صفر دارد، نور در داخل بلور منتشر نمی شود و بازتاب دارای بیشترین دامنه است. بیشینه های مهم در تابع بازتاب بر اثر گذارهای درون-نواری پدید می آیند. در انرژی های بسیار کم، ضریب بازتاب در حدود ۵۱٪ است. این ضریب در انرژی ۳ الکترون ولت به بیشینه ای در حدود ۸۰٪ می رسد. هم چنین دیده می شود که در بالاتر از انرژی ۲۰ الکترون ولت ضریب بازتاب کاهش اساسی یافته و به صفر میل می کند.

علاوه بر این لازم به توضیح است که سهم حقیقی تابع دی الکتریک با ضریب بازتاب ارتباط معکوس با هم دارند، یعنی جایی که سهم حقیقی تابع دی الکتریک منفی می شود (در شکل ۲) در بازه ۲ تا ۴ الکترون ولت ضریب بازتاب بیشترین مقدار خود را خواهد داشت (شکل ۸) و در نتیجه افت های شدید و ناگهانی در سهم حقیقی تابع دی الکتریک قله های تیزی را در ضریب جذب به وجود می آورد. لذا مقادیر منفی نمودار سهم حقیقی تابع دی الکتریک نشان دهنده بیشترین بازتاب در آن ناحیه خواهد بود.

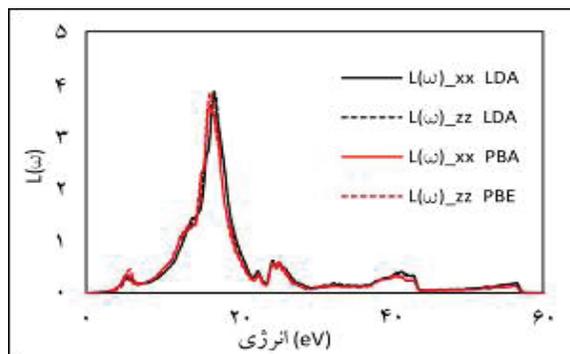


شکل ۸. تابع بازتابندگی بر حسب انرژی برای بلور  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  محاسبه شده با دو تقریب LDA و PBE.

#### ۴. نتیجه گیری

محاسبه ها با استفاده از روش FP-LAPW در چارچوب نظریه تابعی چگالی انجام شده است. محاسبات ساختار الکترونی وجود یک گاف مستقیم به اندازه ۰/۳۶ الکترون ولت را نشان می دهد و سهم موهومی تابع دی الکتریک ماده نیز این مقدار گاف را تأیید می کند. تابع جذب قله ای در ناحیه فرابنفش دارد و نشان می دهد که این ماده جذب کننده پرتو فرابنفش است. هم چنین ویژگی های اپتیکی این ترکیب نیز بررسی شده و نتایج نشان دهنده وجود گاف اپتیکی به اندازه ۰/۳۶ الکترون ولت و ضریب شکست برابر با ۶/۲ هستند. همخوانی نسبی مؤلفه های تانسوری xx و zz این توابع بیانگر همسان گردی نوری بلور می باشد.

شکل (۷) تابع اتلاف  $L(\omega)$  برای  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  را بر حسب انرژی نشان می دهد. قله اصلی در نمودار افت، همان قله پلاسمونی است و ترکیب در بسامدهای بالاتر از آن به صورت شفاف رفتار می کند. ممکن است چندین قله برای یک ماده وجود داشته باشد. به بیان ساده تر اتلاف بیانگر تعداد الکترون هایی است که از نوار ظرفیت به نوار رسانش منتقل می شود. بیشینه تابع اتلاف نشان دهنده یک ویژگی متناظر با نوسان پلازما است. بسامد این نوسان، بسامد پلازما نامیده می شود. بیشینه مشخصی در انرژی های کم تر از ۵ الکترون ولت و بالاتر از ۲۶ الکترون ولت دیده نمی شود. بیشینه تابع اتلاف در انرژی ۱۶/۵ الکترون ولت قرار دارد. در این حالت شدت انتقال بین نواری کمترین مقدار خود را دارد. وجود قله پلاسمونی بیانگر این است که در این نقطه سهم های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک ناچیز است و قله اصلی می تواند مطابق با یکی از ریشه های سهم حقیقی تابع دی الکتریک باشد که در این نقطه افت شدید بازتابش اتفاق می افتد.



شکل ۷. تابع اتلاف بر حسب انرژی برای بلور  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  محاسبه شده با دو تقریب LDA و PBE.

#### بازتابندگی

یکی دیگر از پارامترهای مهم اپتیکی ضریب انعکاس  $R$  است که انرژی انعکاس یافته از سهم فصل مشترک جامد را توصیف می کند و به ازای فرود عمود (زاویه تابش صفر) از رابطه زیر به دست می آید [۲۶-۲۴]:

$$R(\omega) = \frac{\left| \sqrt{\varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)} - 1 \right|^{1/2}}{\left| \sqrt{\varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)} + 1 \right|} \quad (11)$$

ضریب بازتاب مشخص کننده دامنه یا شدت موج بازتابیده نسبت به موج فرودی است. ضریب بازتاب وابسته به انرژی فوتون فرودی است. کمینه نمودار بازتاب بیانگر بیشترین مقدار جذب است. هم چنین مجذور ضریب بازتاب  $R(\omega)$  بلور  $\text{SnBi}_2\text{Te}_4$  در شکل (۸) نشان داده شده است. در این شکل، یکی از کمینه های نمودار بازتاب در انرژی ۷ الکترون ولت رخ می دهد بنابراین در این انرژی خاص مقدار بیشینه ای

## References

- [1] Kane.C.L and Mele .E. J, "Quantum spin hall effect in graphene," *Phys. Rev. Lett*, **95**, no. 226801, pp. 1-4, 2005.
- [2] Roy.R, "Topological phases and the quantum spin hall effect in three dimensions," *Phys. Rev.*, **B79**, no. 195322, pp. 1-5, 2009.
- [3] Dankert.A, Geurs.J, Kamalakar.M.V, Charpentier.S and Dash.S.P, "Room temperature electrical detection of spin polarized currents in topological insulators," *Nano Letters*, **15**, no. 12, pp. 7976-7981, 2015.
- [4] Ereemeev.S.V, Landolt.G, Menshchikova.T.V, B. Slomski, Y. M. Koroteev, Z. S. Aliev, M. B. Babanly, J. Henk, A. Ernst, L. Patthey, A. Eich, A. A. Khajetoorians, J. Hagemester, O. Pietzsch, J. Wiebe, R. Wiesendanger, P. M. Echenique, S. S. Tsirkin and I., "Atom-specific spin mapping and buried topological states in a homologous series of topological insulators," *Nat. Commun.*, **3**, no. 365, 2012.
- [5] Kuznetsova.L, Kuznetsov.V and Rowe.D, "Thermoelectric properties and crystal structure of ternary compounds in the Ge(Sn,Pb)Te-Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> systems," *J. Phys. Chem. Solids* **61**, pp. 1269-1274, 2000.
- [6] Vilaplana.R, J. Sans, F. Manjón, A. A. Chacón, J. S. Benítez, C. Popescu, O. Gomis, A. Pereira, B. G. Domene, P. R. Hernández, A. Muñoz, D. Daisenberger and O. Oeckler, "Structural and electrical study of the topological insulator SnBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> at high pressure," *J. Al. Com* **685**, p p. 962-970, 2016.
- [7] Zou.Y.C, Chen.Z.G, E. Z. F. Kong, Y. L. L. Wang, J. Drennan, Z. Wang, F. X. K. Cho and J. Zou, "Atomic disorders in layer structured topological insulator SnBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> nanoplates," *Nano Res*, **11**, no. 2, p. 696-706, 2017.
- [8] Kuropatwa.B.A, Assoud.A and Kleinke.H, "Effects of Cation Site Substitutions on the Thermoelectric Performance of Layered SnBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> utilizing the Trier Elements Ga, In, and Tl," *ZAAC*, **639**, no. 14, pp. 2411-2420, 2013.
- [9] Kuropatwa.B.A, Kleinke.H and Anorg.Z, "Thermoelectric Properties of Stoichiometric Compounds in the (SnTe)<sub>x</sub>(Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>)<sub>y</sub> System," *Allg. Chem.* **638**, no. 15, pp. 2640-2647, 2012.
- [10] Tatiana V. M, Sergey. V. E, Vladimir. M. K, and Evgueni. V. C, "Interplay of Topological States on TI/TCI Interfaces," *Materials* **13**, pp.4481-4490, 2020.
- [11] Blaha.P, Schwarz.K, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka and J. Luitz, "Wien2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties," Wien, 2001.
- [12] Wimmer.E, Krakauer.H, Weinert.M and Freeman.A.J, "Full-potential self-consistent linearized-augmented-plane-wave method," *Phys. Rev. B*, **24**, pp. 864-875, 1981.
- [13] Hohenberg.P and Kohn.W, "Inhomogeneous electron gas," *Phys. Rev. B*, **136**, pp. 864-871, 1964.
- [14] Kohn.W and Sham.L.J, "Self-consistent equations including exchange and correlation effects," *Phys. Rev. A*, **140**, pp. 1133-1138, 1965.
- [15] Perdew.J.P, Burke.K and Ernzerhof.M, "Generalized gradient approximation made Simple," *Phys. Rev. Lett* **77**, pp. 3865-3868, 1996.
- [16] Adouby.K, Touré.A. Kra .A, G, J. O.Fourcade, J. C. Jumas and C. P. Vicente, "Phase diagram and local environment of Sn and Te: SnTeBi and SnTeBi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> systems," *C. R. Acad. Sci. Chem* **3**, no. 1, pp. 51-58, 2000.
- [17] Ehrenreich.H and Cohen.M, "Self-Consistent Field Approach to the Many-Electron Problem," *Phys. Rev* **115**, no. 4, pp. 786-790, 1959.
- [18] Alouani.M and Wills.J, "Calculated optical properties of Si, Ge; and GaAs under hydrostatic pressure," *Phys. Rev. B* **54**, no. 4, pp. 2480-2490, 1996.
- [19] Dressel.M and Grüner.G, *Electrodynamics of Solids: Optical Properties of Electrons in Matter*, Cambridge: Cambridge University Press, 2002.
- [20] Khenata.R, Bouhemadou.A, Sahnoun.M, Rabah.M, Baltach.H and Reshak.A.H, "Elastic, electronic and optical properties of ZnS, ZnSe and ZnTe under pressure," *Comp. Mat. Sci*, **38**, pp. 29-38, 2006.
- [21] Arfken.G, *Mathematical Methods for Physicists*, 3rd ed., Orlando: Academic Press, pp. 401-403, 1985.
- [22] Fox.M, "Optical Properties of Solids, Oxford: Oxford University Press, 2001.
- [23] Givens .M. P, "Optical Properties of Metals," *Solid States Physics* **6**, pp. 322, 1958.
- [24] Sahas.S, Sinha.T.P and Mookerjee.A, "Electronic structure; chemical bonding; and optical properties of paraelectric BaTiO<sub>3</sub>," *Phys. Rev. B*, **62**, no. 13, pp. 8828-8834, 2000.
- [25] Ambrosch-Draxl.C and Sofo.J.O, "Linear optical properties of solids within full potential linear augmented plane wave method," *Computer phys communications*, **175**(1), pp.1-14, 2006.
- [26] Khachai.H, Khenata.R, Bouhemadou.A, Haddou.A, Reshak A.H, Amrani.B, Rached.D, and Soudini.B, "FP-APW+Lo calculations of the electronic and optical properties of alkali metal sulfides under pressure," *Journal of Phys: Condensed Matter*. **21**(9), pp.095404, 2009.