

محاسبه‌ی ابتدا به ساکن ویژگی‌های ساختاری و الکترونی ترکیب SnBi_2Te_4

نوع مقاله: علمی پژوهشی

حمد ا... صالحی، ناصر ابراهیمی

گروه فیزیک، دانشکده‌ی علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

* salehi_h@scu.ac.ir

چکیده:

در این تحقیق ویژگی‌های الکترونی و ساختاری عایق توپولوژی SnBi_2Te_4 در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی و با روش امواج تخت بهبود یافته‌ی خطی با پتانسیل کامل با بسته نرم‌افزاری Wien2k محاسبه شده است. گاف نواری انبوهه با تقریب PBE برابر با 0.36 الکترون‌ولت و با تقریب LDA برابر با 0.22 الکترون‌ولت به دست آمده است و نشان می‌دهد که این ماده می‌تواند برای کاربردهای الکترونیکی در دمای اتاق مناسب باشد. نتایج به دست آمده با دیگر داده‌های موجود سازگاری دارد.

اطلاعات مقاله:

دریافت: ۱۱ شهریور ۱۴۰۱

پذیرش: ۲۷ آذر ۱۴۰۱

صفحه ۱ تا صفحه ۱۱

در دسترس در نشانی:

www.ijcse.ir

زبان نشریه: فارسی

شاپا چاپی: ۲۳۵۲-۲۳۲۲

شاپا الکترونیکی:

۲۷۸۳-۳۰۰۳

کلیدواژه:

عایق توپولوژی، نظریه‌ی تابعی

چگالی، گاف نواری.

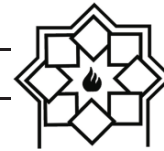
20.1001.1.23222352.1401.12.0.1.4

DOR:

۱- مقدمه

انرژی در ساختار انبوهه دارد که بالاترین نوارهای الکترونی اشغال شده را از پایین‌ترین نوارهای خالی جدا می‌کند. اما ساختار سطح (یا در حالت دو بعدی، لبه) یک عایق توپولوژی الزاماً حالت‌های بدون گافی دارد که با تقارن بازگشت زمانی حفظ شده‌اند. حالت‌های سطحی (یا لبه‌ای) یک عایق توپولوژی، حالت‌های رسانشی با ویژگی‌های متمایز از همه سامانه‌های الکترونی یک‌بعدی یا دوبعدی که تاکنون شناخته

در سال‌های اخیر به ویژه پس از سال ۲۰۰۰ میلادی شاخه‌ی جدیدی در فیزیک ماده چگال بر اساس این که برهم‌کنش اسپین-مدار می‌تواند فازهای جدیدی به نام فازهای الکترونی عایق توپولوژی در ماده پدید آورد [۱] و هم‌چنین بر اساس پیش‌بینی و مشاهده این فازها در مواد واقعی به وجود آمده است [۲]. عایق توپولوژی همانند عایق معمولی، یک گاف

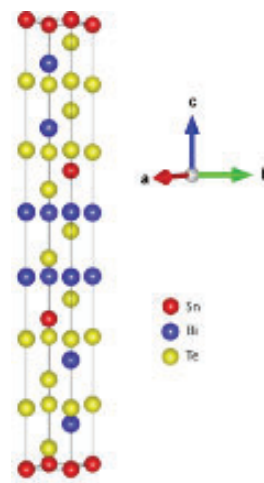


شده‌اند پدید می‌آورند. علاوه بر این که این حالت‌ها از نظر بنیادی جالب هستند، پیش‌بینی شده است که ویژگی‌های تراپردی و الکترونی خاصی نیز در عایق‌های توپولوژی وجود داشته باشد و بنابراین امکان دارد که در اسپین‌ترونیک یا محاسبات کوانتومی از آن‌ها استفاده شود [۳]. امروزه Bi_2Te_3 به عنوان مناسب‌ترین ماده ترموالکتریک برای کار در دمای اتاق شناخته می‌شود و تحقیقات فراوانی دربارهٔ محلول‌های جامد این ماده با ترکیب‌های هم‌خانواده مانند SnTe به منظور بهبود دادن ویژگی‌های ترموالکتریکی آن انجام شده است [۴]. پس از پیش‌بینی و کشف ویژگی عایق توپولوژی در بلورهای Bi_2Te_3 ، Bi_2Se_3 و Sb_2Te_3 ، آمار مطالعات روی Bi_2Te_3 و نیمه‌رساناهای لایه‌ای هم‌خانواده در سال‌های اخیر افزایش چشم‌گیری داشته است. در همین راستا مطالعات تجربی و نظری اخیر روی چندین ترکیب لایه‌ای سه‌تایی به شکل کلی AB_2Te_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 SnBi_2Te_4 بوده‌اند [۵]. این بلور در ساختار سه گوشه با گروه فضایی $R\bar{3}m$ (۱۶۶) تشکیل می‌شود [۶]. یاختهٔ یک‌ه SnBi_2Te_4 از سه ورقهٔ اتمی هفت‌لایه با توالی $\text{Te1-Bi-Te2-Sn-Te2-Bi-Te1}$ شکل گرفته است. فاز سه گوشه پایدارترین فاز این ماده در دمای اتاق است [۷]. در این مرجع ویژگی‌های ساختاری و الکترونی ترکیب SnBi_2Te_4 در فشارهای بالا محاسبه شده است و با کد محاسباتی Vasp و با تقریب شیب تعمیم‌یافته انجام شده است در حالی که در این کار، این دو ویژگی فوق با جزییات بیش‌تری از جمله تراکم‌پذیری؛ مدول حجمی و ... محاسبه شده است و محاسبات با استفاده از کد محاسباتی Wien2k و با دو تقریب

شیب تعمیم‌یافته و چگالی موضعی نیز محاسبه شده است و این دو کد محاسباتی با هم تفاوت دارند و دو کار متفاوت است. نتایج آن‌ها در گاف الکترونی 0.1 الکترون‌ولت است که با مقدار تجربی که 0.22 الکترون‌ولت است تفاوت زیادی دارد. در حالی که نتایج به دست آمده در این کار سازگاری بهتری با نتایج تجربی دارد. در یک تحقیق چگالی حالت‌ها و ساختار نواری SnBi_2Te_4 با استفاده از بستهٔ شبیه‌سازی Vienna محاسبه شده و گاف نواری 0.49 الکترون‌ولت برای آن به دست آمده است [۸]. همچنین گاف نواری SnBi_2Te_4 با تقریب LMTO برابر با 0.48 الکترون‌ولت و با تقریب GGA برابر با 0.45 الکترون‌ولت و با تقریب GGA در نظر گرفتن جفت‌شدگی اسپین-مدار گاف 0.27 الکترون‌ولت به دست آمده است [۹]. به طور معمول با در نظر گرفتن جفت‌شدگی اسپین-مدار، گاف نواری کوچک‌تری در محاسبات به دست می‌آید و نمونه‌های مشابهی در مورد گاف نواری CsBi_4Te_6 [۱۰] TiSbTe_6 [۱۱] نیز دیده می‌شود. در یک کار تحقیقی دیگر اثر فشار روی ویژگی‌های الکترونی و ساختاری SnBi_2Te_4 به صورت تجربی و نظری بررسی شده و نتایج آن نشان می‌دهد که این ماده یک نیمه‌رسانا با گاف غیرمستقیم در حدود 0.1 الکترون‌ولت است [۷]. همچنین محاسبات اصول اولیه LMTO بستگی قوی با تقریب چگالی موضعی روی SnBi_2Te_4 انجام شده و گاف 0.48 الکترون‌ولت برای آن به دست آمده است [۱۲]. با توجه به اهمیت و کاربرد بالقوهٔ عایق‌های توپولوژی، در این تحقیق ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و ایتیکی عایق توپولوژی SnBi_2Te_4 در حالت انبوه بررسی و محاسبه شده است. علت انتخاب این ماده برای تحقیق، قطبش اسپینی بالای آن نسبت به دیگر



عایق‌های توپولوژی است [۱۳]. همچنین ویژگی‌های ساختاری و الکترونی عایق‌های توپولوژی بی‌نظم دوبعدی در سال ۲۰۲۰ توسط بارنو و همکاران مورد بررسی قرار گرفت [۱۴]. علاوه بر این در سال ۲۰۲۲ پایداری اسپین بار در عایق توپولوژی $\text{SnBi}_2\text{Te}_4/\text{Co}$ مورد بررسی قرار گرفت [۱۵]. در شکل (۱) ساختار شبکه SnBi_2Te_4 که با استفاده از نرم‌افزار VESTA رسم شده، نشان داده شده است.



شکل ۱- ساختار بلوری SnBi_2Te_4 .

۲- روش تحقیق

در این تحقیق از کد محاسباتی Wien2k [۱۶] و روش امواج تخت بهبودیافته خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) [۱۷] در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) [۱۸] برای حل معادلات کوهن-شم [۱۹] استفاده شده است. برای محاسبه پتانسیل تبدیلی-همبستگی از تقریب شیب تعمیم‌یافته [۲۰] استفاده شده است. تعداد نقاط فضای k برای انتگرال‌گیری در منطقه اول بریلوین برای ترکیب SnBi_2Te_4 ، ۸۰۰ نقطه و RK_{max} (این کمیت به صورت حاصل ضرب کوچک‌ترین شعاع کره مافین-تین در عدد قطع K_{max}) مجذور انرژی قطع بسط

تابع موج در منطقه بین جایگاهی) تعریف می‌شود) که میزان ماتریس همگرایی را مشخص می‌کند نیز ۷/۵ در نظر گرفته شده است. شعاع کره مافین-تین را نیز پس از بررسی ساختار بلور، برای عناصر Sn، Bi و Te برابر با ۲/۵ بوهر در نظر گرفتیم. همچنین انرژی جدایی ۶- ریدبرگ را برای جداسازی حالت‌های ظرفیت از حالت‌های مغزه مبنا قرار دادیم و با تعیین مبنای همگرایی ۰/۰۰۰۱ ریدبرگ، بعد از ۱۲ چرخه به همگرایی مورد نظر دست یافتیم.

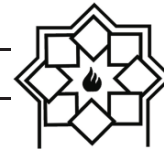
۳- نتایج و بحث

۳-۱- پارامترهای ساختاری

در محاسبات به روش نظریه تابعی چگالی علی‌رغم این که اطلاعات ورودی ممکن است بر نتایج تجربی یا نظری استوار باشند، اما با مقایسه انرژی مربوط به حجم‌های مختلف سلول واحد، می‌توان پایدارترین حالت را شناسایی و به دنبال آن به پارامترهای ساختاری بهینه دست یافت. مختصات اتمی استفاده شده برای شروع شبیه‌سازی در جدول (۱) آورده شده است. یکی از مهم‌ترین پارامترهای ساختاری، ثابت شبکه است که به عنوان تأیید نظری مجدداً محاسبه می‌گردد. برای انجام محاسبات ابتدا با استفاده از داده‌های تجربی و نظری موجود و بنا بر گروه تقارنی فضایی، ساختار شبکه شبیه‌سازی شده است. تغییرات انرژی بر حسب حجم از طریق معادله مورناگون به شکل زیر به دست می‌آید:

$$E(V) = E_0 + \frac{BV_0}{B'} \left[\frac{V}{V_0} + \frac{(V/V_0)^{1-B'} - B'}{B' - 1} \right] \quad (1)$$

که در آن V_0 حجم بهینه شده یاخته قراردادی، E_0 کمینه انرژی کل در دمای صفر کلون، B مدول حجمی و B' مشتق آن است. با توجه به وجود سه مجهول اصلی V_0 ، E_0 و B در



معادله مورناگون حداقل به انتخاب سه حجم مختلف از بلور نیازمندیم تا محاسبه انرژی و رابطه (۱) بتوانیم به سایر کمیت‌ها دست یابیم. با استفاده از نمودار حجم بر حسب انرژی، حجم بهینه و پارامترهای ساختاری مربوط به همه تقریب‌ها محاسبه و در جدول (۲) ذکر شده است.

جدول ۱- مختصات اتمی اتم‌های تشکیل‌دهنده SnBi_2Te_4 که در یک سلول شش گوشه با گروه فضایی ۱۶۶ متبلور می‌شوند [۲۱].

اتم	جایگاه	x	y	z
Sn	3a	۰	۰	۰
Bi	6c	۰	۰	۰/۴۲۸۱
Te-1	6c	۰	۰	۰/۱۳۵۹
Te-2	6c	۰	۰	۰/۲۸۸۱

پس از انجام محاسبات خود-سازگار، پارامترهای شبکه بهینه سازی می‌شوند. بهینه‌سازی پارامترهای شبکه با استفاده از وردش حجم یاخته یک پیرامون حجم تعادلی آن و پیدا کردن حجم متناظر با کمترین انرژی انجام می‌شود. نتایج

این بهینه‌سازی با تقریب‌های LDA و PBE در شکل (۲) نمودار حجم بر حسب انرژی نشان داده شده است. با توجه به وابستگی انرژی به حجم بلور و با به کار بردن معادله حالت مورناگون [۲۲] برای ساختار مورد نظر، ثابت شبکه، مدول حجمی، مشتق مدول حجمی نسبت به فشار و تراکم‌پذیری محاسبه می‌شود. نتیجه‌های به دست آمده با استفاده از دو تقریب LDA و PBE همراه با نتایج تجربی و نظری حاصل از تحقیق‌های دیگر در جدول (۲) آورده شده است. با توجه به نتایج به دست آمده از جدول (۲) مشاهده می‌شود که نتایج حاصل از تقریب PBE دارای کمترین خطا و بیش‌ترین مطابقت با نتایج تجربی است. علاوه بر این مدول حجمی معیاری از سختی بلور است و به بیان دیگر انرژی لازم برای ایجاد یک تغییر شکل معین در سامانه است. هر چه این کمیت بیش‌تر باشد بلور سخت‌تر و خاصیت تراکم‌پذیری آن کم‌تر است و در نتیجه انتظار داریم اتم‌ها در فاصله دورتری از هم قرار داشته باشند.

جدول ۲- پارامترهای شبکه SnBi_2Te_4 و مقایسه آن‌ها با نتایج نظری و تجربی دیگران.

مقدار نظری	درصد خطا نسبت به مقدار تجربی		مقدار تجربی	مقدار محاسبه شده		کمیت محاسبه شده
	LDA	PBE		با تقریب LDA	با تقریب PBE	
۴/۳۹۱۵	-۱/۱۱۷	۱/۳۱۵	۴/۳۹۵۴*	۴/۳۴۶۳	۴/۴۵۳۲	ثابت شبکه a(Å)
۴۱/۱۹۴۸	-۲/۵۷۰	۱/۱۵۲	۴۱/۶۰۶**	۴۰/۵۳۶۸	۴۲/۰۸۵۲	ثابت شبکه c(Å)
۶۸۸/۰۱۶	-	-	۶۹۶/۱۱۹	۶۶۳/۱۶۲	۷۲۲/۷۷۷	حجم یاخته واحد ($\text{\AA}^3$)
۳۵	-	-	-	۵۵/۲۰	۴۶/۱۳	مدول انبوهه B (GPa)
۶/۲	-	-	-	۴/۴۸	۴/۰۷	مشتق مدول انبوهه B'
-	-	-	-	۰/۰۱۸۱	۰/۰۲۱۶	تراکم‌پذیری K (GPa^{-1})
[۷]			[۲۳]	این کار	این کار	مرجع

*, ** از این مقدارها به عنوان نقطه شروع برای شبیه‌سازی ساختار استفاده شده است.

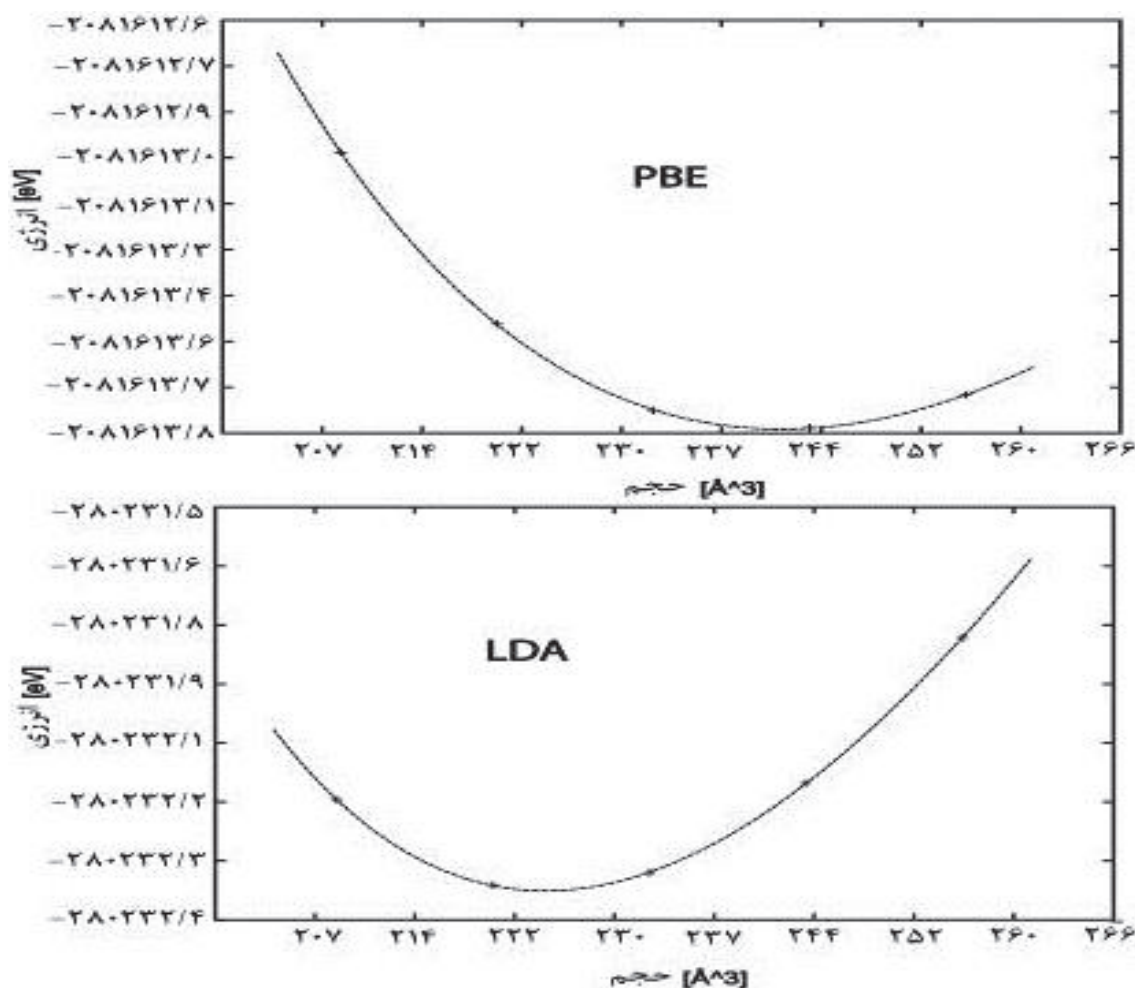


هستند. نمودار تغییرات انرژی بر حسب حجم علاوه بر پارامترهای ساختاری، بینشی نسبت به پایداری سامانه نیز در اختیار ما می‌گذارد.

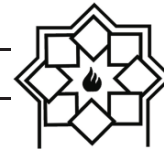
۳-۲- ساختار نواری و چگالی حالت‌ها

اهمیت محاسبه ساختار نواری در نتایج حاصل از آن نهفته است. گاف نواری یکی از مهم‌ترین پارامترهایی است که تطابق آن با نتایج تجربی در اکثر کارهای پژوهشی مورد توجه می‌باشد.

مقادیر کم مدول حجمی که در همه تقریب‌ها کم‌تر از ۶۰ گیگاپاسکال می‌باشند، بیانگر تراکم‌پذیری بیش‌تر و سختی کم‌تر ترکیب SnBi_2Te_4 است. با استفاده از پارامترهای بهینه شده شبکه، یک ساختار جدید ساخته می‌شود و محاسبات خودسازگار روی آن انجام می‌شود و از روی نتایج این محاسبات ویژگی‌های مختلف ماده محاسبه می‌شوند. این ویژگی‌ها عبارت از ساختار نواری و گاف انرژی، چگالی ابر الکترونی، چگالی حالت‌ها و خواص اپتیکی ماده



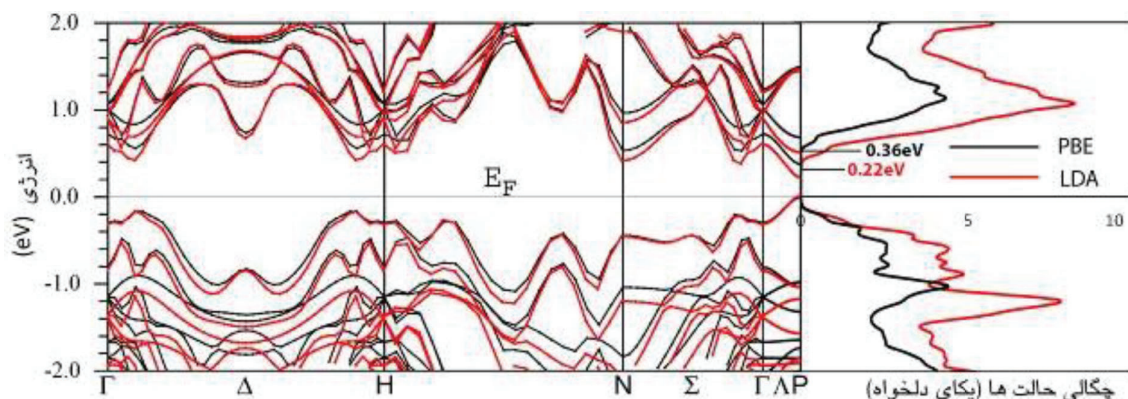
شکل ۲- نمودار انرژی بر حسب حجم بلور SnBi_2Te_4 با استفاده از تقریب‌های LDA و PBE.



راستای عمودی از گاف عبور می‌کند و نیازی به جذب یا گسیل فونون نمی‌باشد. گاف انرژی محاسبه شده در این تحقیق با نتایج تحقیقات دیگران در جدول (۳) مقایسه شده است. همچنین می‌توان سرعت گروه الکترون‌های بلاخ را نیز به دست آورد و با توجه به این که سرعت الکترون در هر حالت متناسب با شیب انرژی در فضای وارون است، لذا در نقاط کمینه یا بیشینه ساختار نوارهای انرژی سرعت برابر صفر خواهد بود. لذا می‌توان با مشاهده ساختار نوار یک ترکیب به پیش‌بینی نسبی حرکت و سرعت الکترون‌ها در یک نوار خاص دست یافت. همچنین از روی ساختار نوار می‌توان جرم مؤثر الکترون را نیز به دست آورد زیرا جرم مؤثر الکترون نسبت عکس با انحنای نوار انرژی دارد.

چگالی حالت‌های الکترون در یک نوار برابر است با: تعداد حالت‌های الکترون در یک بازه معین انرژی. این تابع در فرایندهای الکترونی به ویژه در پدیده‌های ترابردی بسیار مهم است. با استفاده از چگالی حالت‌های مربوط به الکترون‌های یک بلور می‌توان با رویکردی متفاوت، به مقدار گاف نوار دست یافت و یا مشارکت اتم‌ها و هر یک از اربیتال‌های آن‌ها را در ایجاد توزیع الکترونی مذکور مورد بررسی قرار داد.

با دست‌یابی به ساختار نوار یک ماده می‌توان بسیاری از ویژگی‌های آن ماده از قبیل رسانا، نیم‌رسانا و یا عایق بودن ترکیب و به نوع گاف از لحاظ مستقیم یا غیرمستقیم بودن را به دست آورد. علاوه بر آن می‌توان اتم‌ها و اربیتال‌هایی را که نقش اساسی‌تری در گذارهای احتمالی سامانه دارند، شناسایی نمود. ساختار نوار SnBi_2Te_4 در راستای مسیر تقارنی تعیین شده توسط نرم‌افزار Wien2k همراه با چگالی حالت‌های کلی بر حسب انرژی در بازه -2 تا 2 الکترون‌ولت در شکل (۳) نشان داده شده است. انرژی فرمی به عنوان مبدأ مقیاس انرژی انتخاب شده است. تراز فرمی درون گاف نوار و بسیار نزدیک به قله نوار ظرفیت قرار گرفته است. چگالی حالت‌های کلی و جزئی نیز به دست آمده و سهم اربیتال‌ها و اتم‌های مختلف در آن بررسی شده است. چگالی حالت‌ها بیان‌کننده توزیع الکترون در طیف انرژی است. اطلاعاتی مانند وجود و اندازه گاف انرژی را نیز می‌توان به کمک نمودار چگالی حالت‌ها پیدا کرد. با توجه به نمودار چگالی حالت‌های کلی در شکل (۳)، گاف انرژی 0.36 الکترون‌ولت و 0.22 الکترون‌ولت به ترتیب برای تقریب‌های PBE و LDA دیده می‌شود و یک گاف مستقیم است. به عبارتی در این حالت الکترون در



شکل ۳- ساختار نوار انبوهه (چپ) و چگالی حالت‌ها (راست) در بلور SnBi_2Te_4 محاسبه شده با دو تقریب LDA و PBE.

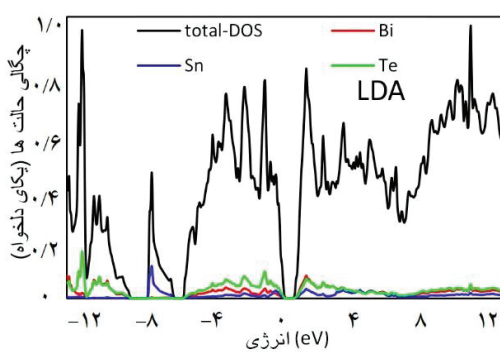
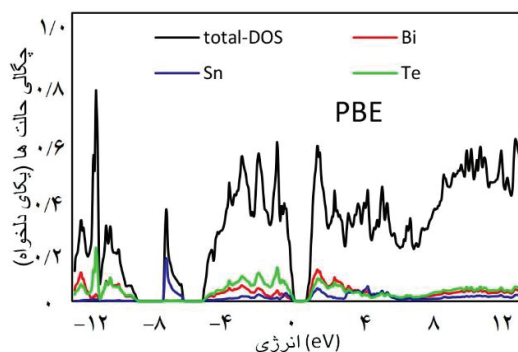
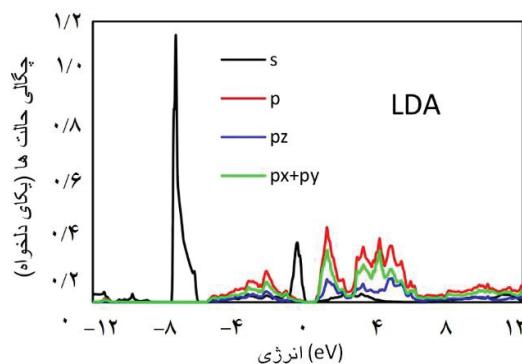
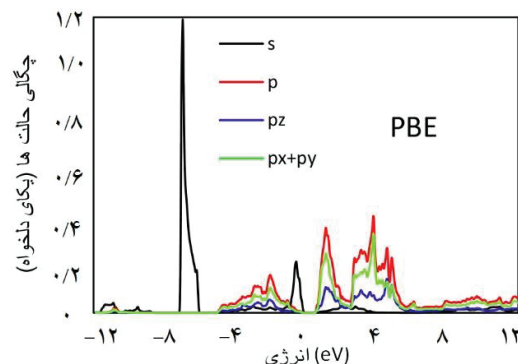


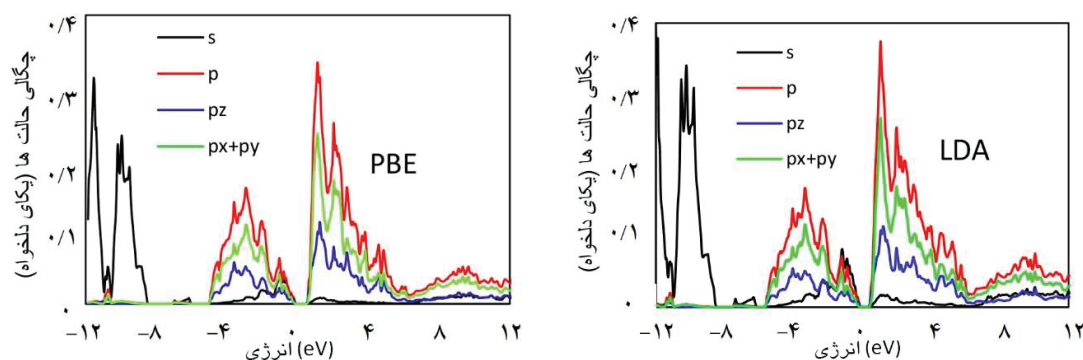
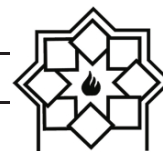
جدول ۳- گاف نواری محاسبه شده در این کار و مقایسه با نتایج دیگران

مرجع	گاف نواری (eV)	تقریب مورد استفاده
[۱۲]	۰/۴۸	LDA
[۷]	۰/۱	GGA-PBEsol
[۱۳]	۰/۰۱۵	GGA
این کار	۰/۳۶	GGA-PBE
این کار	۰/۲۲	LDA
[۶]	۰/۲۱	اندازه‌گیری تجربی

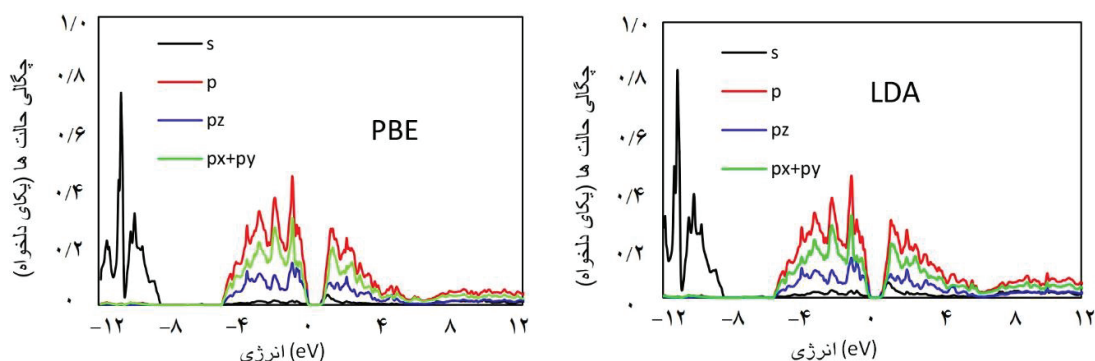
می‌شود. برای بررسی سهم‌های مختلف در این توزیع، چگالی حالت‌های جزئی اتم‌های مختلف ماده محاسبه شده و در شکل‌های (۵) تا (۷) رسم شده‌اند. دیده می‌شود که اربیتال‌های p و $px+py$ بیسموت و تلور و قلع سهم عمده در چگالی حالت‌های کل در پیرامون گاف انرژی دارند.

مطالعه دقیق‌تر چگالی حالت‌ها با بررسی سهم‌های اتم‌ها و اربیتال‌های مختلف در توزیع کل امکان‌پذیر است. در شکل (۴) سهم هر یک از اتم‌های تشکیل‌دهنده بلور در چگالی حالت‌های کل نشان داده شده است. در نزدیکی قله نواری ظرفیت و کف نواری رسانش، افزایش در چگالی حالت‌ها دیده

شکل ۴- چگالی حالت‌های کلی همراه با سهم هر اتم در چگالی کل با بلور SnBi_2Te_4 محاسبه شده با دو تقریب LDA و PBE.شکل ۵- چگالی حالت‌های جزئی اتم قلع در بلور SnBi_2Te_4 محاسبه شده دو تقریب LDA و PBE.

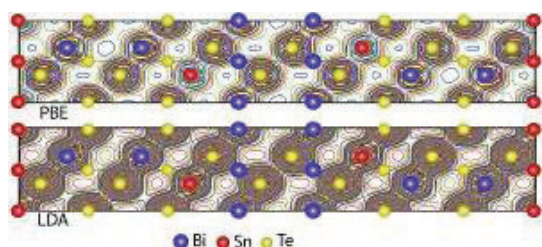


شکل ۶- چگالی حالت‌های جزئی اتم بیسموت در بلور SnBi_2Te_4 محاسبه شده با دو تقریب LDA و PBE.



شکل ۷- چگالی حالت‌های جزئی اتم تلور در بلور SnBi_2Te_4 محاسبه شده با دو تقریب LDA و PBE.

بیشتر و در چه نقاطی تراکم الکترون کمتر است. نمودار چگالی ابر الکترونی برای بلور SnBi_2Te_4 در صفحه (۱۱۱) در شکل (۸) نشان داده شده است.

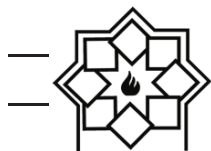


شکل ۸- نمودار گرافیکی چگالی ابر الکترونی بلور SnBi_2Te_4 در صفحه (۱۱۱) محاسبه شده با تقریب‌های LDA و PBE.

طبق مقیاس الکترونگاتیوی ارائه شده توسط پائولینگ که بیانگر رابطه میان خصلت یونی پیوندها و اختلاف

۳-۳- چگالی ابر الکترونی

چگالی ابر الکترونی توصف روشنی از خصوصیات فضایی ساختار الکترونی به وسیله چگالی الکترونی است. چگالی ابر الکترونی چگونگی توزیع بار در اطراف اتم‌های تشکیل‌دهنده یک بلور را نشان می‌دهد و این توزیع می‌تواند نوع پیوند میان اتم‌ها و ضعیف یا قوی بودن پیوند میان اتم‌ها را مشخص کند. تراکم زیاد الکترون بین دو اتم نشان‌دهنده قوی بودن پیوند بین آن‌ها است و تراکم کمتر الکترون بین دو اتم پیوند ضعیف‌تری را بین آن‌ها نشان می‌دهد. نمودار چگالی بار نشان‌دهنده تراکم الکترون‌ها در مکان‌های گوناگون است و از روی آن می‌توان دریافت در چه نقاطی تراکم الکترون



- Henk, A. Ernst, L. Patthey, A. Eich, A. A. Khajetoorians, J. Hagemeister, 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.*, vol. 3, no. 365, 2012.
- [6]. Kuznetsova. L, Kuznetsov. V and Rowe. D, "Thermoelectric properties and crystal structure of ternary compounds in the Ge(Sn,Pb)Te-Bi₂Te₃ systems," *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 61, pp. 1269-1274, 2000.
- [7]. 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 SnBi₂Te₄ at high pressure," *J. Al. Com.*, vol. 685, p. 962e970, 2016.
- [8]. 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 SnBi₂Te₄ nanoplates," *Nano Res.*, vol. 11, no. 2, p. 696-706, 2017.
- [9]. Kuropatwa. B. A, Assoud. A and Kleinke. H, "Effects of Cation Site Substitutions on the Thermoelectric Performance of Layered SnBi₂Te₄ utilizing the Trier Elements Ga, In, and Tl," *ZAAC*, vol. 639, no. 14, pp. 2411-2420, 2013.
- [10]. Tao. X, Jund. P, Viennois. R and Tedenac. J, "Physical Properties of Thallium-Tellurium Based Thermoelectric Compounds Using First-Principles Simulations," *J. Phys. Chem. A*, vol. 115, no. 31, p. 8761-8766, 2011.
- [11]. Larson. P and Mahanti. S. D, "Electronic structure of CsBi₄Te₆: A high-performance thermoelectric at low temperatures," *Phys. Rev. B*, vol. 65, no. 045205, 2002.
- [12]. Kuropatwa. B. A, Kleinke. H and Anorg. Z, "Thermoelectric Properties of Stoichiometric Compounds in the الکترون گاتیوی عناصر است در می یابیم که ترکیب دارای خصوصیات نسبی هر دو نوع پیوند یونی و کووالانسی است.
- ### ۴- نتیجه گیری
- محاسبه ها با استفاده از روش FP-LAPW در چارچوب نظریه تابعی چگالی انجام شده است. نتایج حاصل از محاسبات ثابت های شبکه، مدول حجمی و تراکم پذیری ترکیب در توافق مناسبی با نتایج تجربی بودند. نتایج حاصل از بررسی خواص ساختاری، به تراکم پذیری کم و سختی زیاد ترکیب SnBi₂Te₄ دلالت دارند. محاسبات ساختار الکترونی وجود یک گاف مستقیم به اندازه ۰/۳۶ الکترون ولت را نشان می دهد و این گاف در نمودار چگالی حالت ها نیز دیده می شود. همچنین تراکم ابر الکترونی بیان گر آن است که پیوند میان اتم های بیسموت و تلور کووالانسی و میان اتم های قلع و تلور از نوع یونی است.
- ### مراجع
- [1]. Kane. C. L and Mele. E. J, "Quantum spin hall effect in graphene," *Phys. Rev. Lett*, vol. 95, no. 226801, pp. 1-4, 2005.
- [2]. Roy. R, "Topological phases and the quantum spin hall effect in three dimensions," *Phys. Rev.*, vol. 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*, vol. 15, no. 12, pp. 7976-7981, 2015.
- [4]. Rowe. D, CRC Handbook of Thermoelectrics, New York: CRC Press Inc., 1995.
- [5]. Eremeev. S. V, Landolt. G, Menshchikova. T. V, B. Slomski, Y. M. Koroteev, Z. S. Aliev, M. B. Babanly, J.



- of Media under Extreme Pressures," *PNAS*, vol. 30, no. 9, pp. 244-247, 1944.
- [23]. Fox. M, Optical Properties of Solids, Oxford: Oxford University Press, 2001.
- (SnTe)_x(Bi₂Te₃)_y System," *Allg. Chem.*, vol. 638, no. 15, pp. 2640-2647, 2012.
- [13]. Vergniory. M, Menshchikova. T, Silkin. I, Y. Koroteev, S. Eremeev and E. Chulkov, "Electronic and spin structure of a family of Sn-based ternary topological insulators," *Phys. Rev.*, vol. Kuznetsova B 92, no. 045134, 2015.
- [14]. Bruno. F, R. S. Gabriel, Marcio. C, Adalberto. F and Caio. L, "Structural and electronic properties of realistic two-dimensional amorphous topological insulators," arXiv: 2010. 14239v1 [cond-mat.mtrl-sci] 27 Oct2020.
- [15]. Rongione. E, Fragkos. S and et al., "Ultrafast spin-charge conversion at SnBi₂Te₄/Co topological insulator interfaces probed by terahertz emission spectroscopy," arXiv: 2203.08756v1 [cond-mat.mtrl-sci] 16 Mars 2022.
- [16]. 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.
- [17]. Wimmer. E, Krakauer. H, Weinert. M and Freeman. A. J, "Full-potential self-consistent linearized-augmented-plane-wave method," *Phys. Rev. B*, vol. 24, pp. 864-875, 1981.
- [18]. Hohenberg. P and Kohn. W, "Inhomogeneous electron gas," *Phys. Rev. B*, vol. 136, pp. 864-871, 1964.
- [19]. Kohn. W and Sham. L. J, "Self-consistent equations including exchange and correlation effects," *Phys. Rev. A*, vol. 140, pp. 1133-1138, 1965.
- [20]. Perdew. J. P, Burke. K and Ernzerhof. M, "Generalized gradient approximation made Simple," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 77, pp. 3865-3868, 1996.
- [21]. 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 SnTeBi₂Te₃ systems," *C. R. Acad. Sci. Chem.*, vol. 3, no. 1, pp. 51-58, 2000.
- [22]. Murnaghan. F. D, "The Compressibility

Ab-initio Calculation of Structural and Electronic Properties of Topological Insulator SnBi_2Te_4

Hamdollah Salehi*, Naser Ebrahimi

Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University, of Ahvaz, Ahvaz, Iran

* salehi_h@scu.ac.ir

Abstract: We report the electronic, structural and optical properties of topological insulator SnBi_2Te_4 calculated by means of linear augmented plane waves with full potential (FP-LAPW) within the framework of density functional theory (DFT) implemented in Wien2k code. Bulk band gaps of 0.36 eV and 0.22 eV are predicted by using PBE and LDA approximations, respectively. These gaps indicated that SnBi_2Te_4 is potentially suitable for room temperature electronics applications. The results are in accordance with other works.

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