

## خواص الکترونی، اپتیکی و فاز توپولوژی نانولایه $\text{Li}_2\text{AgSn}$

زهرا عسکری پور\*، زهرا نوربخش

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه اصفهان، اصفهان، ایران

### چکیده

در این مقاله ویژگی‌های الکترونی، اپتیکی و فاز توپولوژی نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات براساس نظریه تابعی چگالی، به صورت پتانسیل کامل به روش امواج تخت بهبودیافته خطی به اضافه اوربیتال‌های موضعی و تقریب شیب تعمیم‌یافته انجام شده است. چگالی حالت‌های الکترونی این نانولایه با استفاده از این تقریب محاسبه شده است. ضریب خطی گرمای ویژه نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  مورد بررسی قرار گرفته است. با استفاده از عناصر  $XX$  و  $ZZ$  تانسور ثابت دی‌الکتریک، ضریب بازتاب، جذب، شکست، خاموشی و انرژی اتلافی این نانولایه محاسبه و مورد مطالعه قرار گرفته است. علاوه بر آن با استفاده از نمودار ساختار نواری، فاز توپولوژی این نانولایه مطالعه شده است.

**کلیدواژگان:** نظریه تابعی چگالی، فاز توپولوژی، ساختار نواری، چگالی حالت‌های تک لایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$ ، ثابت‌های اپتیکی.

### مقدمه

ترکیب‌ها در اسپین ترونیک و اهمیت و کاربرد نارسا‌های توپولوژیک سه‌بعدی، مطالعه ویژگی‌های فیزیکی و احتمال ایجاد فاز عایق توپولوژیکی را در این ترکیب جستجو می‌کنیم. لین و همکارانش [۲] در سال ۲۰۱۰ با محاسبه ساختار نواری ترکیب‌های  $\text{Li}_2\text{MX}$  که در آن  $(M=\text{Cu, Ag, Au})$  و  $(X=\text{Sb, Bi})$  است، دریافتند که این ترکیب‌ها نارسا‌های توپولوژیک سه‌بعدی‌اند. ساختارهای لایه‌ای ساختارهایی هستند که با یک خلاء مناسب و با ضخامت معینی از حالت‌های انبوهه، برش داده می‌شوند. این ساختارها به دلیل ضخامت کم، در برخی موارد منجر به تغییر ویژگی‌های فیزیکی، تراپردی، مکانیکی، مغناطیسی، الکتریکی و اپتیکی نیم‌رساناها و نارسا‌ها (به علت تغییر اندازه گاف نواری) خواهند شد. علت این امر حساسیت این ویژگی‌ها به ساختار سطح یا فصل مشترک سطح‌ها می‌باشد. این امر نانولایه‌ها را به مبحثی تبدیل کرده که

مطالعه فاز عایق‌های توپولوژیکی یکی از جدیدترین موضوعات مطرح در فیزیک ماده چگال است. عایق‌های توپولوژی حالت‌های کوانتومی خاصی از ماده را نشان می‌دهند، به صورتی که در حجم نارسا‌ها و در سطوح و لبه‌ها حالت‌های رسانش کامل از خود نشان می‌دهند؛ که ناشی از ترکیب تقارن وارونی زمان و جفت شدگی اسپین مدار می‌باشد. ایجاد حالت‌های رسانش کامل در این دسته از مواد باعث شده که مطالعه احتمال ایجاد فاز عایق توپولوژیکی در ترکیبات مختلف از اهمیت خاصی برخوردار شود. انبوهه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  دارای ساختار مکعبی مرکز سطحی با گروه فضایی  $F-43m$  است [۱]. مطالعات نظری و تجربی اندکی روی این ترکیب انجام شده است. این ترکیب از خانواده ترکیب‌های هویسلر<sup>۱</sup> بوده لذا به دلیل اهمیت این نوع

\* نویسنده مسئول: Zaskaripour@yahoo.com

<sup>۱</sup> این ترکیبات در یک جهت اسپینی رسانا و در جهت دیگر نارسا هستند.

هم از نظر بنیادی و هم از نظر عملی مورد توجه هستند. با برش انبوهه در جهات مختلف برای ایجاد نانولایه‌ها، نیروهای داخلی در غیاب اتم‌های همسایه حالت‌های سطحی، تغییرات زیادی نسبت به نیروهای داخلی یاخته اولیه دارند و ممکن است تعادل ساختار لایه‌ای ایجاد شده را از بین ببرند. در این حالت شرایط تعادلی جدید باعث می‌شود مکان اتم‌ها نسبت به حالت انبوهه تغییر کنند. هنگام برش نانولایه‌ها از انبوهه، تعدادی از پیوندهای اتمی در محل برش شکسته می‌شوند و اوربیتال‌هایی موسوم به اوربیتال‌هایی با پیوندهای آویزان<sup>۲</sup> [۳-۵] ایجاد می‌شوند که تنها توسط یک الکترون اشغال شده‌اند و نیمه‌پر هستند. در این حالت برای ایجاد تعادل و کاهش انرژی آزاد حالت‌های سطحی، الکترون‌ها از پیوندهای آویزان عناصر الکترون‌ده به سمت پیوندهای آویزان عناصر الکترون‌خواه کشیده می‌شوند تا با یک الکترون دیگر با اسپین مخالف جفت شوند و طبق اصل طرد پائولی اوربیتال‌های پر را ایجاد می‌کنند. اگر تمامی الکترون‌های پیوندهای آویزان نتوانند با الکترون‌های سطحی جفت شوند و نوار ظرفیت نانولایه‌ها اوربیتال‌های نیمه‌پر داشته باشند، نانولایه ویژگی رسانایی از خود نشان می‌دهد. همچنین در نانولایه‌های نیم‌رسانا، الکترون‌های سطح تمامی حالت‌های پیوندهای آویزان را پر می‌کنند و نوار ظرفیتشان کاملاً پر است [۴و۳]. عمدتاً نانولایه‌ها را به گونه‌ای می‌سازند که تعداد زیادی از اتم‌های آن، اتم‌های سطحی را تشکیل دهند؛ زیرا مساحت زیاد سطح نانولایه‌ها نسبت به حجم آنها کاربردهای زیادی از جمله ذخیره کردن گاز (که در آن مولکول‌ها روی سطح جذب سطحی

می‌شوند) یا کاتالیز کردن (که در آن واکنش‌هایی روی سطح کاتالیست روی می‌دهد)، دارد [۶و۷]. در این مقاله با هدف مشخص کردن ویژگی‌های الکترونی، ساختاری و اپتیکی نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  به انجام محاسبات می‌پردازیم و نتایج را با حالت انبوهه آن مقایسه می‌کنیم.

### روش انجام محاسبات

محاسبات این مقاله بر مبنای نظریه تابعی چگالی و با استفاده از نرم‌افزار وین [۸] نسخه ۲۰۱۴ انجام شده است که به صورت پتانسیل کامل با روش امواج تخت بهبودیافته خطی به اضافه اوربیتال‌های موضعی [۹] به حل دسته معادلات کان-شم می‌پردازد. برای محاسبه انرژی تبادلی همبستگی از تقریب GGA [۱۰] استفاده شده است. در این محاسبات با در نظر گرفتن فاصله نزدیک‌ترین همسایه‌ها در ساختار بلور و به دست آوردن حداقل نشت بار از کره‌های مافین‌تین، شعاع کره مافین‌تین را برای اتم‌های نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  محاسبه و نتایج در جدول ۱ آورده‌ایم.

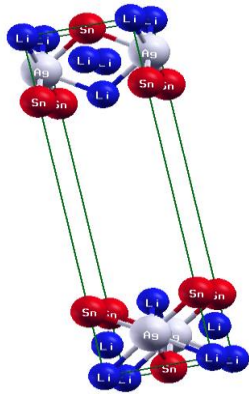
جدول ۱. شعاع کره مافین‌تین اتم‌های نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$

| نام اتم | شعاع کره مافین‌تین (a.u) |
|---------|--------------------------|
| Sn      | ۲٫۴۹                     |
| Ag      | ۲٫۵                      |
| Li      | ۲٫۵                      |

جدول ۱. شعاع کره مافین‌تین اتم‌های نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$

$R_{\text{MT}}K_{\text{max}}$  و  $G_{\text{MAX}}$  نانولایه به ترتیب برابر ۸٫۵ و  $(\sqrt{Ry} * bohr)$  و  $(\sqrt{Ry})$  ۱۶٫۵ به دست آمد، که در آن  $R_{\text{MT}}$  کوچک‌ترین شعاع کره مافین‌تین در بلور،  $K_{\text{MAX}}$  اندازه بیشینه بردار موج شبکه وارون و  $G_{\text{MAX}}$  بردار موج قطع در بسط پتانسیل و چگالی بار در ناحیه بین جایگاهی است. تعداد نقاط بهینه در فضای وارون ۸۰۰

2. Dangling bond



شکل ۱. یاخته یک نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$

یاخته یک نانولایه دارای ساختار مکعبی ساده و گروه فضایی  $P-4m2$  است. ثابت شبکه این نانولایه در راستای  $x$  و  $y$  برابر  $8.808 \text{ \AA}$  و در راستای  $z$  برابر  $32.457 \text{ \AA}$  بوهر است که ضخامت نانولایه  $12.4 \text{ \AA}$  آنگستروم است. این نانولایه از دو واحد اتمی  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  (با ساختار  $\text{fcc}$ ) تشکیل شده است. موقعیت اتم‌های نانولایه به صورت زیر است:

جدول ۲. موقعیت اتم‌های نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$

|     | X   | Y   | Z    |
|-----|-----|-----|------|
| Sn1 | ۰   | ۰   | ۰٫۱۹ |
|     | ۰   | ۰   | ۰٫۸۰ |
| Sn2 | ۰٫۵ | ۰٫۵ | ۰    |
| Ag1 | ۰   | ۰٫۵ | ۰٫۹۷ |
|     | ۰٫۵ | ۰   | ۰٫۹۰ |
| Li1 | ۰   | ۰   | ۰    |
| Li2 | ۰٫۵ | ۰٫۵ | ۰٫۰۸ |
|     | ۰٫۵ | ۰٫۵ | ۰٫۱۹ |
| Li3 | ۰   | ۰٫۵ | ۰٫۹۰ |
|     | ۰٫۵ | ۰   | ۰٫۹۴ |

در محاسبات بخش اپتیک به دلیل حساسیت زیاد کمیت‌های مورد محاسبه به تعداد نقاط در فضای وارون  $K$ ، تعداد نقاط را افزایش دادیم. بدین منظور با استفاده از همگرایی بخش موهومی ثابت دی‌الکتریک، تعداد نقاط در فضای وارون نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  برابر  $1200$  (معادل  $135$  نقطه) در نظر گرفته شده است. در محاسبات این بخش نیز اثر جفت‌شدگی اسپین مدار

(معادل  $56$  نقطه کاهش ناپذیر) و یک شبکه  $(3 \times 14 \times 14)$  انتخاب شده است.

برای بررسی ویژگی‌های فیزیکی ساختار چندلایه‌ای، وجود خلاء مناسب الزامی است. ضخامت خلاء مناسب وابستگی زیادی به ضخامت لایه نازک و موقعیت اتم‌ها درون لایه نازک ندارد. مقدار خلاء باید به گونه‌ای باشد که از برهم‌کنش اتم‌های این نانولایه با اتم‌های نانولایه مجاور جلوگیری کند. برای این نانولایه خلاء  $20$  بوهر را لحاظ کرده‌ایم. از این میزان خلاء به بعد، تقریباً لایه‌ها برهم‌کنش ندارند. افزایش بیشتر مقدار خلاء تأثیری بر انرژی کل و چگالی حالت‌های الکترونی ندارد ولی بر حجم محاسبات (به دلیل بزرگ شدن حجم ابریاخته) می‌افزاید.

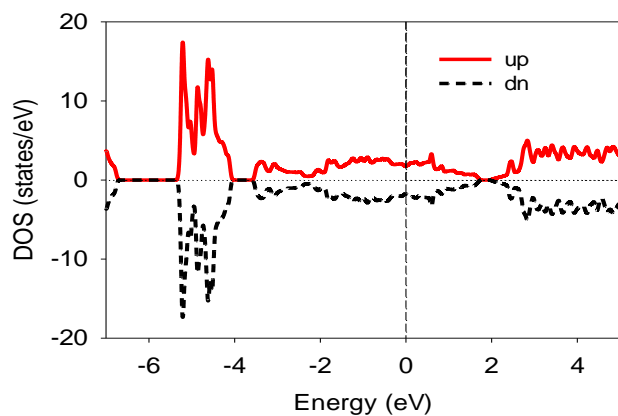
نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  دارای دو نوع لایه مختلف  $\text{Sn-Li}$  و  $\text{Ag-Li}$  است. با قرار دادن لایه‌های مختلف  $\text{Sn-Li}$  و  $\text{Ag-Li}$  (روی سطح، نانولایه را در راستای  $(0,0,1)$ ) برش داده و سپس آنها را با ضخامت  $12.4$  و  $13.1$  آنگستروم در همین راستا رشد دادیم. در ساخت این نانولایه، حالت‌های سطحی‌ای انتخاب می‌شود که نانولایه پایدارتری ایجاد کند. بدین منظور انرژی هم‌دوسی نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  در هر دو حالت سطحی ممکن محاسبه شد و مشاهده شد هنگامی که لایه اتمی  $\text{Sn-Li}$  روی سطح آن قرار دارد مقدار انرژی کمتر و در نتیجه این نانولایه پایدارتر است. یاخته یک نانولایه به صورت زیر است:

لحاظ شده است و پتانسیل مربوط به آن را در حل معادله‌های کان شم وارد کرده‌ایم. به دلیل شکست تقارن نانولایه در راستای  $Z$ ، علاوه بر مؤلفه  $XX$  مؤلفه  $ZZ$  تانسور ثابت‌های اپتیکی را نیز در محاسبات آورده‌ایم.

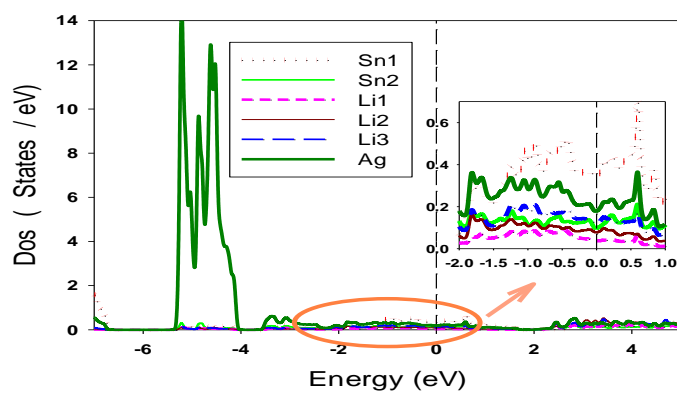
## نتایج و بحث

### خواص الکترونی

چگالی حالت‌های الکترونی یک بلور چگونگی توزیع الکترون‌ها را برحسب انرژی نشان می‌دهد. نمودار چگالی حالت‌های الکترونی کل، سهم هر یک از اتم‌ها و همچنین سهم اتم‌های روی سطح در چگالی حالت‌های الکترونی تشکیل‌دهنده نانولایه  $Li_2AgSn$  با استفاده از تقریب  $GGA$  محاسبه و نتایج حاصل از آن در شکل‌های ۲، ۳ و ۴ آورده شده است. در این نمودارها صفر انرژی بر انرژی فرمی منطبق شده است.



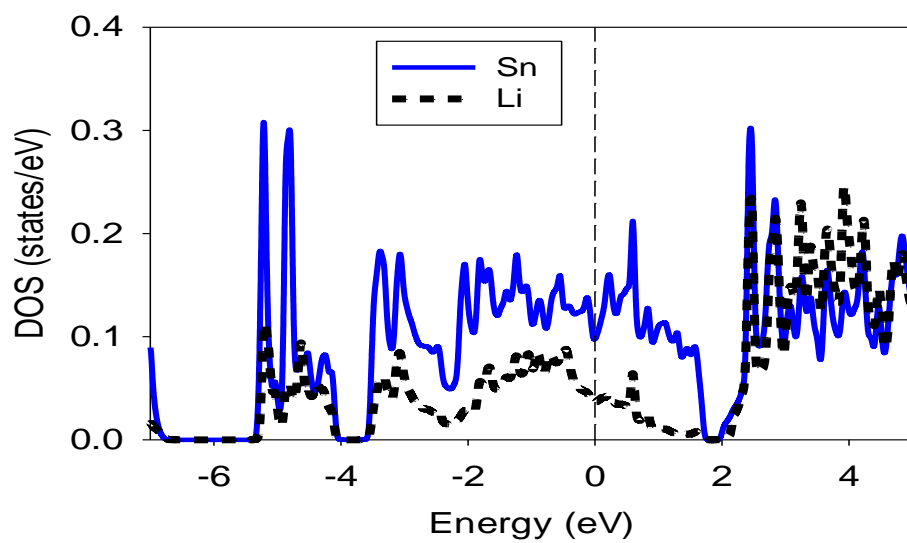
شکل ۲. نمودار چگالی حالت‌های الکترونی کل نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  با اسپین بالا و پایین.



شکل ۳. نمودار سهم اتم‌های نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  در چگالی حالت‌های الکترونی کل.

همانطور که از شکل ۲ مشخص است چگالی حالت‌های الکترونی انرژی فرمی را قطع می‌کند پس نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  مشابه حالت انبوه خود [۷] رسانا است. تقارن کامل چگالی حالت‌های الکترونی الکترون‌های با اسپین بالا و پایین، نشان می‌دهد که این نانولایه غیرمغناطیسی بوده بنابراین در ادامه چگالی حالت‌های الکترونی نانولایه را در فاز غیرمغناطیسی مورد بررسی قرار می‌دهیم.

با توجه به نمودار شکل ۳ در نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  ستیغ مربوط به انرژی ۴- تا  $0.3\text{eV}$ - مربوط به اتم  $\text{Ag}$  است.



شکل ۴. نمودار سهم اتم‌های روی سطح در چگالی حالت‌های الکترونی نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$ .

ساختار نواری از روی هم افتادن تابع موج اتمی اتم‌های یک بلور در فضای وارون ایجاد می‌شود و تمام ویژگی‌های الکترونی را می‌توان از ساختار نواری تشخیص داد. بهترین نظریه برای توجیه پیوند بین اتم‌ها نظریه نواری است. در این نظریه نوار پر را نوار ظرفیت و نوار خالی را نوار رسانش می‌گویند. در فلزات شکاف نواری بین نوار ظرفیت و رسانش صفر است. ترکیب‌هایی با این خصوصیت به دلیل اینکه الکترون در آنها به سادگی می‌تواند از نوار ظرفیت به نوار رسانش منتقل شود رسانا هستند. براساس این نظریه در مواد نارسانا گاف انرژی بین نوار ظرفیت و رسانش زیاد است و انتقال الکترون صورت نمی‌گیرد.

برای رسم نوارهای انرژی بلور لازم است معادله‌های تک‌ذره‌ای کان-شم را در تمام نقاط فضای وارون برای تمام نوارهای اشغال شده و تعدادی از نوارهای اشغال نشده، حل کرد. در عمل حل معادلات تک‌ذره‌ای در تمام فضای وارون امکان‌پذیر نیست پس این دسته معادلات در تعداد محدودی از نقاط شبکه وارون روی مسیره‌های تقارنی بلور حل می‌شوند [۵].

فاز توپولوژیکی [۲۵-۱۰] در آن دسته از مواد وجود دارد که جفت‌شدگی اسپین مدار و تقارن وارونی زمان [۲۶] به گونه‌ای ترکیب شوند که ترازهای کوانتومی اسپینی هال [۲۷-۳۰] بدون حضور میدان مغناطیسی (برخلاف ترازهای هال [۳۱] که نیازمند میدان مغناطیسی است) حضور دارند. نقطه  $\Gamma_6$  مربوط به توزیع الکترون‌ها با تقارن‌های s گونه و نقطه  $\Gamma_8$ ، مربوط به توزیع الکترون‌ها با تقارن‌های p گونه است. در ساختار نواری مواد با نظم نواری معمولی،  $\Gamma_6$  بالای  $\Gamma_8$  قرار می‌گیرد اما در مواردی این نظم وارونه می‌شود و تراز  $\Gamma_8$  بالای تراز  $\Gamma_6$  قرار می‌گیرد. در این وضعیت وارونی نوار انرژی رخ می‌دهد و یک رسانا یا نارسانا توپولوژی خواهیم داشت. در موادی با این خاصیت،

مطابق شکل ۴، اتم‌های روی سطح نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  سهم کمی در چگالی حالت‌های الکترونی اطراف انرژی فرمی دارند.

ضریب خطی گرمای ویژه دارای دو سهم الکترونی و فونونی است که سهم الکترونی در دماهای پایین و سهم فونونی در دماهای بالا حائز اهمیت است زیرا سهم الکترونی متناسب با T و سهم فونونی متناسب با  $T^3$  است. با استفاده از مقدار DOS روی انرژی فرمی می‌توان ضریب خطی گرمای ویژه الکترونی را مطابق رابطه ۱ محاسبه کرد [۳]:

$$\gamma = \frac{\pi^2}{3} K_B^2 D(E_f) \quad 1$$

که در آن  $K_B$  ثابت بولتزمن و  $D(E_f)$  چگالی حالت‌ها روی انرژی فرمی است. نتایج حاصل از محاسبات نشان می‌دهد که ضریب خطی گرمای ویژه الکترون‌های این نانولایه برابر  $4.11 \text{ (mJ mol}^{-1} \text{ K}^{-2})$  می‌باشد که در مقایسه با حالت انبوهه  $(2.63 \text{ (mJ mol}^{-1} \text{ K}^{-2}))$  افزایش یافته است. در جدول ۲ سهم هر کدام از اتم‌های روی سطح در رسانندگی نانولایه آورده شده است. طبق این نتایج اتم Ag و Sn بیشترین سهم در خواص تراپدی این نانولایه را دارند. جدول ۲. ضریب خطی گرمای ویژه الکترونی کل نانولایه و سهم هر کدام از اتم‌های آن.

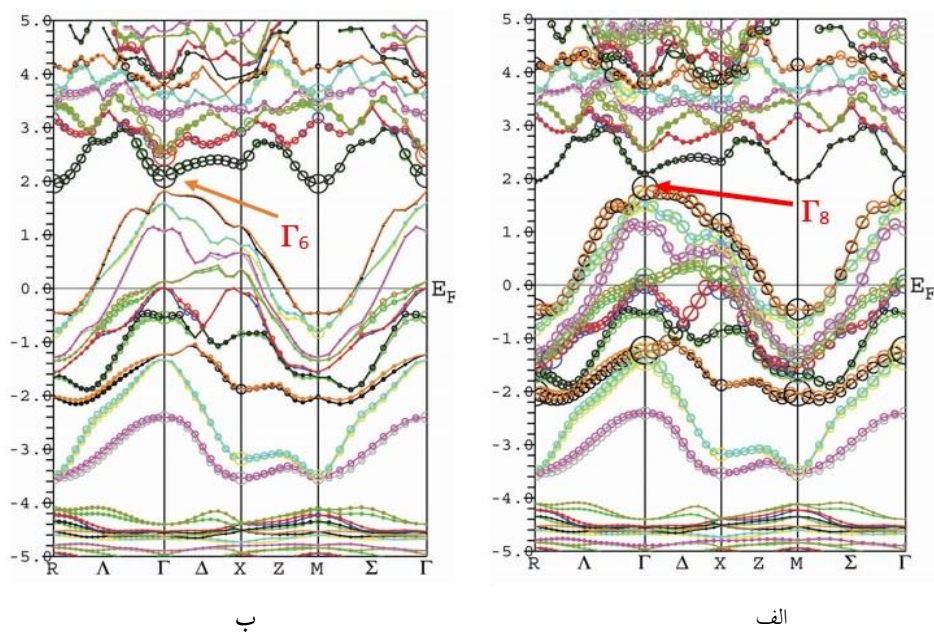
| نام اتم     | $(\text{mJ} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-2})$<br>$\gamma^2$ |
|-------------|---|
| Sn1         | ۰٫۸۴  |
| Sn2         | ۰٫۳۶  |
| Ag          | ۰٫۵۸  |
| Li1         | ۰٫۱۶  |
| Li2         | ۰٫۱۸  |
| Li3         | ۰٫۴۶  |
| کل نانولایه | ۴٫۱۱  |

اتم‌های Sn2 و Li1 نسبت به سایر اتم‌های Sn و Li، تأثیر کمی در ضریب خطی گرمای ویژه الکترونی دارند.

## ساختار نواری



جابجایی الکترون‌های سطح و لبه‌ها بدون اتلاف مانند یک رسانای کامل خواهد بود. برای بررسی فاز توپولوژی این نانولایه، ساختار نواری آن و چگونگی توزیع الکترونهای s و p روی نوارهای انرژی بررسی و نتایج آن در شکل ۵ نشان داده شده است.



شکل ۵. توزیع الکترون‌های الف (p) و ب (s) نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  روی نوارهای انرژی با استفاده از تقریب GGA.

گذارهای بین نواری خود به دو بخش گذار مستقیم و غیرمستقیم تقسیم می‌شود.

برای محاسبه بخش مربوط به گذارهای بین نواری مستقیم در بخش موهومی ثابت دی‌الکتریک ( $\epsilon_2(\omega)$ ) باید تمام گذارهای ممکن از حالت‌های اشغال شده به حالت‌های اشغال نشده را با هم جمع کرد. بخش حقیقی و موهومی ثابت دی‌الکتریک از دو رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega) \quad ۲$$

$$\epsilon_{2\alpha\beta}(\omega) = \frac{Ve^2}{2\pi m^2 \omega^2} \int d^3k \sum_m \langle c_k | p^\alpha | v_k \rangle$$

$$\langle v_k | p^\beta | c_k \rangle \delta(E_{ck} - E_{vk} - \omega) \quad ۳$$

$$\epsilon_1(\omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty d\omega' \frac{\omega' \epsilon_{2\alpha\beta}(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} \quad ۴$$

$$p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad ۵$$

که  $\omega$  فرکانس فوتون فرودی،  $\mathbf{p}$  عملگر تکانه،  $|c_k\rangle$  و  $|v_k\rangle$  تابع موج الکترون‌های نوار رسانش و ظرفیت با بردار موج  $\mathbf{k}$  اند و  $\mathbf{P}$  مقدار اصلی انتگرال است. جزئیات کامل عناصر ماتریس عملگر تکانه در مرجع ۳۲ آورده شده‌است. ریشه‌های  $\epsilon_1(\omega)$  شرط لازم برای پلاسمون‌های حجمی در ماده هستند ولی شرط کافی برای آنها وجود تابع اتلاف است. همچنین در نقاطی که  $\epsilon_1(\omega)$  منفی است امواج منتشر نمی‌شوند و فرآیندهای جذب و اتلاف صورت می‌گیرد.

ثابت دی‌الکتریک  $\epsilon(\omega, \mathbf{k})$  در حد  $\mathbf{k} \rightarrow 0$  [ $\epsilon(\omega, 0)$ ] پلاسمون‌های حجمی و سطحی و در حد  $\omega \rightarrow 0$  [ $\epsilon(0, \mathbf{k})$ ] استتار الکترواستاتیکی برهم‌کنش‌های الکترون-الکترون و الکترون-شبکه در بلورها را توصیف می‌کند. بخش حقیقی ثابت دی‌الکتریک بیانگر

با توجه به اینکه ساختار نواری این نانولایه انرژی فرمی را قطع کرده است بنابراین مشابه حالت انبوه‌اش [۷] خاصیت رسانندگی دارد؛ ولی میزان رسانندگی که به تعداد نقاط قطع شده توسط انرژی فرمی بستگی دارد، افزایش یافته است. بیشترین حضور الکترون‌ها برای نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  در بازه ۵- تا  $-4\text{eV}$  است. همچنین کمترین حضور الکترون در بازه‌های ۴- تا  $-3\text{eV}$  و ۷- تا  $-5\text{eV}$  است به طوری که در این بازه‌ها هیچ الکترونی وجود ندارد و گاف نواری داریم. با توجه به شکل ۵ نقطه  $\Gamma_6$  بالاتر از نقطه  $\Gamma_8$  قرار گرفته است پس این نانولایه مشابه حالت انبوه‌اش [۷] در این تقریب دارای نظم نواری معمولی است. قدرت وارونگی نواری [۱۳]  $\Delta = \Gamma_6 - \Gamma_8$  برای این نانولایه برابر  $0.259\text{ eV}$  است.

### خواص اپتیکی

پاسخ اپتیکی مواد به تابش الکترومغناطیسی توسط ثابت دی‌الکتریک بیان می‌شود و ویژگی‌های اپتیکی مواد را نشان می‌دهد. در تجزیه و تحلیل داده‌های اپتیکی مختلط، از تبدیلات کرامرز کرونینگ استفاده می‌شود چون این تبدیلات به ما این امکان را می‌دهد که بخش حقیقی پاسخ نوری را به کمک بخش موهومی در تمام بسامدها تعیین کنیم و برعکس. ثابت دی‌الکتریک حاوی اطلاعات فیزیکی زیادی است و پس از محاسبه آن می‌توان ثابت‌های دیگر از جمله تابع افت انرژی، ضریب جذب، ضریب بازتاب، ضریب شکست و خاموشی را محاسبه کرد. این ثابت به ساختار نواری الکترونی بلور بستگی دارد. در دهه‌های اخیر طیف‌نمایی اپتیکی به عنوان مهم‌ترین وسیله تجربی برای تعیین ساختار نواری گسترش یافته است. این ثابت از دو بخش مربوط به گذارهای درون‌نواری و بین‌نواری تشکیل شده‌است. در رساناها فقط بخش مربوط به گذارهای درون‌نواری مهم است. بخش مربوط به

با افزایش انرژی الکترون‌های لایه ظرفیت امکان این انتقال وجود دارد اما از یک انرژی به بعد هرچه انرژی موج الکترومغناطیس را افزایش دهیم انتقالی صورت نمی‌گیرد زیرا تأمین انرژی مورد نیاز الکترون‌ها برای انتقال از نوار ظرفیت به رسانش شرط لازم است، اما کافی نیست. براساس مدل الکترون آزاد، انرژی پلاسمون‌ها از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$E_P = \hbar \omega_p = \hbar \sqrt{\frac{ne^2}{m_0 \epsilon_0}} \quad ۸$$

که در آن  $n$  چگالی الکترون‌های آزاد و  $m_0$  جرم الکترون هستند.

جذب بر واحد طول یک محیط اپتیکی را ضریب جذب می‌گویند. خاصیتی از ماده است که میزان جذب نور توسط ماده را نشان می‌دهد. لبه جذب جایی از نمودار است که ماده شروع به جذب موج الکترومغناطیس می‌کند. یعنی اگر انرژی فوتون‌ها بیش از این مقدار باشد توسط ماده جذب می‌شود.

بیشینه بازتاب مربوط به محدوده‌ای است که در آن  $\epsilon_1 < 0$  باشد. در این نواحی فوتون‌های بیشتری بازتاب می‌شوند.

ضریب شکست نیز مانند ثابت دی‌الکتریک یک تابع مختلط بوده و از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$n(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) \quad ۹$$

که  $n(\omega)$  بخش حقیقی و  $k(\omega)$  بخش موهومی ضریب شکست (ضریب خاموشی) هستند. ضریب خاموشی، سنجشی از میزان جذب پرتوی الکترومغناطیس است. اگر موج الکترومغناطیس به راحتی از داخل ماده عبور کند ضریب خاموشی کمی دارد و اگر پرتویی به سختی داخل ماده نفوذ کند ماده دارای ضریب خاموشی بزرگی است [۳۳-۵-۳]:

پراکندگی و اتلاف در جسم است. بدین صورت که انرژی پراکنده شده موج الکترومغناطیس را به هنگام عبور از محیط نشان می‌دهد. کمینه‌های بخش حقیقی ثابت دی‌الکتریک محل نابودی فوتون‌ها و بیشینه‌های آن محل گذارهای اپتیکی را نشان می‌دهد.

طیف‌سنجی اتلاف انرژی الکترون روش توانمندی در تجزیه و تحلیل حالات اشغال شده بالای انرژی فرمی با تفکیک جزئی زیر نانومتر است. این طیف در بردارنده تحریک دسته جمعی الکترون‌های ظرفیت (پلاسمون‌ها) به داخل حالات اشغال نشده در نوار رسانش است. تابع اتلاف یکی از مهم‌ترین کمیت‌ها به منظور بررسی خواص بزرگ مقیاس و خرد مقیاس جامدات می‌باشد. تابع اتلاف متناسب با احتمال اتلاف انرژی  $E$  در واحد طول، برای یک الکترون در حال عبور از محیط است (کاهش انرژی یک الکترون پرسرعت به هنگام عبور از محیط را نشان می‌دهد). رابطه بین ثابت دی‌الکتریک و تابع اتلاف انرژی به صورت زیر است:

$$\text{loss spectrum} = \text{Im} \left[ \frac{-1}{\epsilon_{\alpha\beta}(\omega)} \right] = \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} \quad ۶$$

$$L_{\alpha\alpha}(\omega) = -\text{Im} \left( \frac{1}{\epsilon_{\alpha\alpha}(\omega)} \right) \quad ۷$$

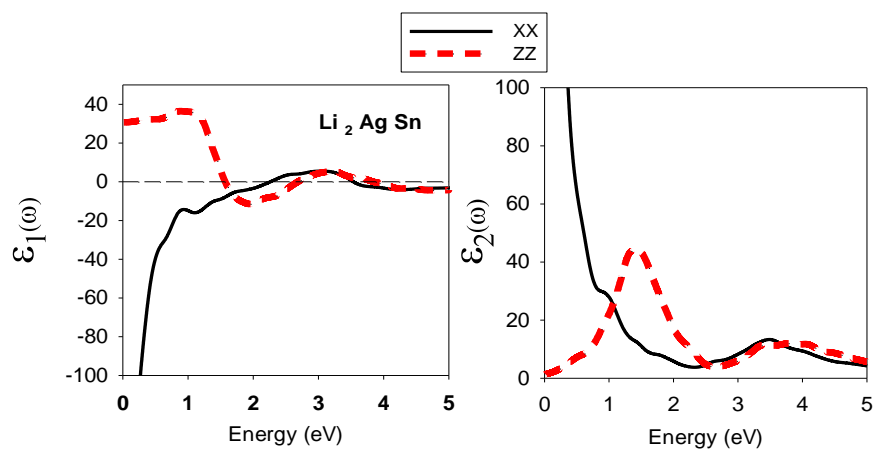
یعنی تابع اتلاف انرژی با بخش موهومی ثابت دی‌الکتریک رابطه عکس دارد.

شاخص‌ترین ستیغ به عنوان ستیغ پلاسمونی شناخته می‌شود که بیانگر برانگیختگی‌های جمعی چگالی بار الکترونی در بلور است. ستیغ متناظر با  $\epsilon_1=0$  مربوط به پلاسمون حجمی است. قله‌های تابع اتلاف هر کدام مربوط به یک گذار است. جایی که تابع اتلاف بیشینه مقدار خود را دارد، شدت گذار بین نوازی کمینه است. به بیان ساده‌تر، تابع اتلاف نشانگر تعداد الکترون‌هایی است که از نوار ظرفیت به نوار رسانش منتقل می‌شوند.

$$n_{ij}(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon_{ij}(\omega)| + \operatorname{Re} \varepsilon_{ij}(\omega)}{2}} \quad 10$$

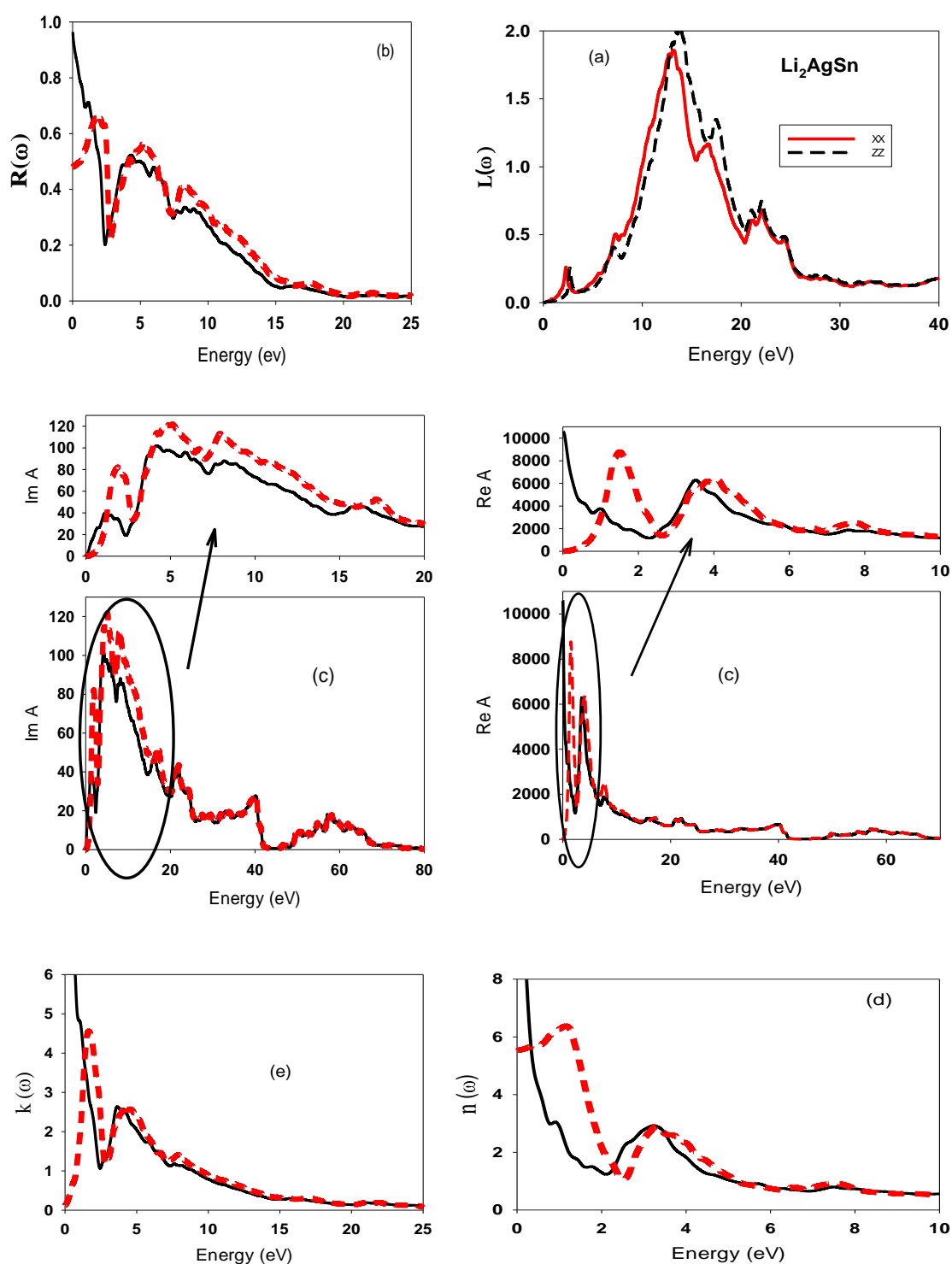
$$k_{ij}(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon_{ij}(\omega)| - \operatorname{Re} \varepsilon_{ij}(\omega)}{2}} \quad 11$$

بخش حقیقی و موهومی مؤلفه  $XX$  و  $ZZ$  تانسور ثابت دی‌الکتریک برحسب انرژی و با استفاده از تقریب  $GGA$  در شکل ۶ رسم شده است.



شکل ۶. بخش حقیقی و موهومی مؤلفه  $XX$  و  $ZZ$  تانسور ثابت دی‌الکتریک نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  برحسب انرژی با استفاده از تقریب  $GGA$ .

بخش حقیقی تانسور ثابت دی‌الکتریک ( $\epsilon_1(\omega)$ ) برای انرژی فوتون کمتر از  $1\text{eV}$  نشان داده شده است زیرا بالاتر از این انرژی،  $\epsilon_1(\omega)$  به یک میل می‌کند. مؤلفه  $xx$  و  $zz$  ثابت دی‌الکتریک استاتیک  $\epsilon^{xx}(0)$  نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  به ترتیب  $30.7$  و  $30.6$  است. بیشینه بخش حقیقی مؤلفه  $xx$  و  $zz$  تانسور ثابت دی‌الکتریک به ترتیب در انرژی  $2.8\text{eV}$  و  $1\text{eV}$  اتفاق می‌افتد. بیش‌ترین گذار الکترونی درون‌نواری و بین‌نواری در راستای  $zz$  در نزدیکی انرژی صفر است. مؤلفه‌های  $xx$  و  $zz$  این تانسور در بازه صفر تا  $2.2\text{eV}$  و  $1.5$  تا  $2.7\text{eV}$  منفی است. بعد از انرژی  $3.6\text{eV}$  بخش حقیقی هر دو مؤلفه تانسور ثابت دی‌الکتریک منفی است. مطابق نمودار ۶ در انرژی صفر بخش موهومی مؤلفه  $xx$  و  $zz$  تانسور دی‌الکتریک  $\epsilon^{xx}_2(0)$  نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  برابر  $5792.6$  و  $1.4$  است. با استفاده از این مقادیر و  $\epsilon_1(0)$  می‌توان ضریب شکست استاتیک این نانولایه را با استفاده از فرمول ۱۰ به دست آورد. مؤلفه‌های  $xx$  و  $zz$  تانسور ضریب شکست استاتیک،  $n^{xx}(0)$  به ترتیب برابر  $51.89$  و  $5.47$  به دست می‌آید. با افزایش انرژی مؤلفه  $xx$  این تانسور تا انرژی  $3\text{eV}$  کاهش سپس تا انرژی  $3.5\text{eV}$  کمی افزایش و مجدداً برای انرژی‌های بالاتر از  $4\text{eV}$  کاهش می‌یابد. مؤلفه  $zz$  این تانسور،  $\epsilon^{zz}_2(\omega)$ ، در انرژی‌های کم تقریباً مانند مؤلفه  $xx$  عمل می‌کند و  $\epsilon_1(\omega)$  از صفر شروع و با افزایش انرژی فوتون افزایش می‌یابد و بعد از انرژی  $1.4\text{eV}$  شاهد کاهش  $\epsilon_2(\omega)$  هستیم. روند تغییرات هر دو مؤلفه این تانسور بعد از انرژی  $2.4\text{eV}$  یکسان است. بیشینه مقدار مؤلفه  $zz$  تانسور  $\epsilon_2(\omega)$  در انرژی  $1.4\text{eV}$  و مؤلفه  $xx$  آن در انرژی صفر اتفاق می‌افتد. در شکل ۷ نمودار ثابت‌های اپتیکی این نانولایه را با استفاده از تقریب  $GGA$  آورده‌ایم.



شکل ۷. مؤلفه xx و zz تانسور (a) انرژی اتلافی، (b) ضریب بازتاب، (c) جذب، (d) شکست و (e) خاموشی نانولایه  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  برحسب انرژی با استفاده از تقریب GGA.



تئوری این تانسور با استفاده از رابطه ۱۰ برابر  $۵۴/۶۸$  و  $۰/۱۲۵$  است. با افزایش انرژی شاهد کاهش ضریب شکست هستیم. بیشینه مؤلفه  $xx$  تانسور ضریب شکست (محل‌های شکست اپتیکی) در انرژی صفر و مؤلفه  $zz$  آن در انرژی  $۰/۲eV$  است. روند تغییرات دو مؤلفه این تانسور بعد از انرژی  $۰/۶eV$  یکسان است. مؤلفه  $zz$  در بازه صفر تا  $۰/۲eV$  و  $۲/۲$  تا  $۳/۲eV$  و مؤلفه  $xx$  این تانسور در بازه  $۰/۲$  تا  $۲/۲eV$  و  $۳/۲$  تا  $۵eV$  نسبت به مؤلفه دیگر مقدار کمتری دارد. مؤلفه‌های  $xx$  و  $zz$  تانسور ضریب خاموشی استاتیک به ترتیب  $۵۵/۲$  و  $۰/۱۲$  هستند. با افزایش انرژی بعد از انرژی صفر مؤلفه  $zz$  نانولایه افزایش و مؤلفه  $xx$  آن کاهش می‌یابد. این تفاوت‌ها فقط تا انرژی  $۱/۵ eV$  ادامه دارد و پس از این انرژی‌ها هر دو مؤلفه به یک صورت رفتار می‌کنند. تفاوت دو مؤلفه  $xx$  و  $zz$  نانولایه بسیار ناچیز است.

### نتیجه‌گیری

در این تحقیق با استفاده از روش‌های ابتدا به ساکن مبتنی بر نظریه تابعی چگالی و حل معادلات کان-شم خواص الکترونی و فاز توپولوژی نانولایه  $Li_2AgSn$  با استفاده از تقریب  $GGA$  و همچنین با در نظر گرفتن برهم کنش اسپین مدار مورد بررسی قرار گرفت. این نانولایه رسانای غیرمغناطیسی است. سهم اتم‌های سطح نانولایه در خواص الکترونی آن بررسی شد. همچنین ضریب خطی گرمای ویژه الکترونی کل این نانولایه برابر  $(۴/۱۱ \text{ mJ mol}^{-1} \text{ K}^{-2})$  می‌باشد. نظم نواری این نانولایه مورد بررسی قرار گرفت و مشابه حالت انبوه‌اش رسانای توپولوژی نبوده و دارای نظم نواری معمولی است. قدرت وارونگی نواری آن  $۰/۲۵۹ eV$  است. ویژگی‌های اپتیکی نانولایه را مورد بررسی قرار دادیم و نانولایه در انرژی‌های کم و در محدوده طیف مرئی و فروسرخ بازتابندگی و جذب بالا و در نتیجه

همان‌طور که از شکل ۷ مشاهده می‌کنید مؤلفه‌های  $xx$  و  $zz$  تانسور انرژی اتلافی این نانولایه رفتار تقریباً یکسانی دارند. انرژی اتلافی نانولایه از مقدار صفر شروع شده و با افزایش انرژی میزان اتلاف انرژی الکترون‌ها افزایش و پس از رسیدن به بیشینه شروع به کاهش می‌کند. این نانولایه دارای شش ستیغ در انرژی‌های  $۲/۲eV$ ،  $۶/۹$ ،  $۱۳/۷$ ،  $۱۷/۶$ ،  $۲۲/۶$  و  $۴۰/۱$  است. در بین این ستیغ‌ها بزرگ‌ترین ستیغ در انرژی  $۱۳/۷eV$  است. نانولایه بعد از انرژی  $۴۲eV$  دارای انرژی اتلاف صفر است. مؤلفه‌های  $xx$  و  $zz$  تانسور ضریب بازتاب استاتیک نانولایه  $Li_2AgSn$  به ترتیب  $۹۶$  و  $۴۸$  درصد است. بعد از انرژی  $۱/۵eV$  هر دو مؤلفه این تانسور دارای روند یکسانی هستند با این تفاوت که مؤلفه  $zz$  کمی بازتابندگی قوی‌تری نسبت به مؤلفه  $xx$  دارد. با افزایش انرژی ضریب بازتاب کاهش می‌یابد به طوری که بازتابندگی بعد از انرژی  $۲۰eV$  صفر است و مؤلفه‌های  $xx$  و  $zz$  تانسور ضریب جذب استاتیک نانولایه  $Li_2AgSn$  به ترتیب  $۱۰۶۰۴$  و  $۲/۵۷$  است. مؤلفه‌های  $xx$  و  $zz$  تانسور ضریب جذب نانولایه فقط در انرژی‌های کم و ناحیه فروسرخ طیف موج الکترومغناطیس متفاوت‌اند. در سایر انرژی‌ها جذب در هر دو راستا تقریباً یکسان است. حداکثر مقدار جذب در نانولایه  $Li_2AgSn$  در انرژی‌های کم (زیر  $۲ev$ ) است. در انرژی‌های پایین (کمتر از  $۲ev$ ) نانولایه را می‌توان به عنوان لایه جاذب به کار برد. با توجه به نتایج می‌توان گفت که نانولایه در انرژی‌های کم بازتابندگی و جذب بالا و در نتیجه عبور کمی دارند و در انرژی‌های بالا (بیشتر از  $۲۰ev$ ) تمام پرتو فرودی به نانولایه بدون جذب و بازتاب از آن عبور می‌کند. نانولایه  $Li_2AgSn$  در بازه انرژی بالاتر از  $۴۰eV$  جذب ناچیزی دارد. مؤلفه‌های  $xx$  و  $zz$  تانسور ضریب شکست استاتیک،  $(n_0(\omega))$ ، نانولایه  $Li_2AgSn$  مطابق با نمودار شکل  $d-۷$  برابر  $۵۲/۴$  و  $۵/۴۷$  و مؤلفه‌های

Simple, *Physical Review Letters* 77 (1996) 3865-3870.

[11] Y. Binghai, Z. Shou Cheng, Topological Materials, *Reported On Progress In Physics* 75 (2012).

[12] Z. Shou Cheng, Viewpoint: Topological States Of Quantum Matter, *Physics* 1 (2008).

[13] T.D. Stanescu, V. Galitski, C.W. Clark, J.Y. Vaishnav, S.D. Sarma, Topological Insulator and Metals in Atomic Optical Lattice, *Physical Review A* 9 (2009).

[14] S.Q. Shen, Topological Insulators: Dirac Equation in Condensed Matters, *Springer science & Business Media* 174 (2013).

[15] M.C. Rechtsman, J.M. Zuener, Y. Lumer, Y. Plotnik, F. Dreisow, S. Nolte, M. Segev, A. Szameit, Photonic Floquet Topological Insulators, *Nature* 496 (2013).

[16] A.R. Mellnik, J.S. Lee, A. Richardella, J.L. Grab, P.J. Mintun, M.H. Fischer, A. Vaezi, A. Manchon, E-A. Kim, N. Samarth, Spin-transfer torque generated by a topological insulator, *Nature* 511 (2014).

[17] Y.L. Chen, J.G. Analytis, J.H. Chu, Z.K. Liu, S.K. Mo, X.L. Qi, H.J. Zhang, D.H. Lu, Xi. Dai, Z. Fang, Experimental realization of a three-dimensional topological insulator, *Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>*, *Science* 325 (2009) 178-181.

[18] H. Zhang, C.X. Liu, X.L. Qi, Xi. Dai, Z. Fang, S.C. Zhang, Topological insulators in *Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>*, *Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>* and *Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>* with a single Dirac cone on the surface, *Nature Physics* 5 (2009) 438-442.

[19] W.K. Tse, A.H. MacDonald, Giant magneto-optical Kerr effect and universal Faraday Effect in thin-film topological insulators, *Physical Review Letters* 105 (2010).

[20] Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, L. Wray, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, DHYS. Grauer, Y.S. Hor, R.J. Cava, Observation of a large-gap topological insulator class with a single Dirac cone on the surface, *Nature Physics* 5 (2009) 398-402.

عبور کمی دارد و در انرژی‌های بالا و در محدوده فرابنفش تمام پرتو فرودی به نانولایه بدون جذب و بازتاب از آن عبور می‌کند.

## منابع

[1] A.W. Weiss, H. Pauly, H. The crystal structure of the ternary intermetallic phases *Li<sub>2</sub>E X* (E= Cu, Ag, Au; X= Al, Ga, In, Tl, Si, Ge, Sn, Pb, Sb, Bi), *Zeitschrift fuer Metallkunde* 59 (1968) 47-58.

[2] H. Lin, L. Wray, Y. Xia, S.-Y. Xu, S. Jia, R. Cava, A. Bansil, and M. Hasan, Single-Dirac-cone *Z<sub>2</sub>* topological insulator phases in distorted *Li<sub>2</sub>AgSb*-class and related quantum critical Li-based spin-orbit compounds, *arXiv preprint arXiv:1004.0999* (2010).

[3] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, Solid states physics, Saunders College Publishing, Orlando, Florida, (1976).

[4] G. Grosso, G. Pastori Parravicini, Solid States Physics, San Diego: Academic Press, (2000).

[5] P. Phillips, Advanced Solid States Physics, Cambridge University Press, (2012).

[6] A. Kazempour, S.J. Hashemifar, H. Akbarzadeh, Structural properties of narrow hexagonal *MnAs* nanowires: Role of edge atoms, *Physical Review B* 79, 195420 (2009).

[۷] ز. عسکری‌پور، ز. نوربخش، م. نریمانی، خواص الکترونی و فاز توپولوژی ترکیب *Li<sub>2</sub>AgSn*. کنفرانس فیزیک ایران، دانشگاه فردوسی مشهد، (۱۳۹۴).

[8] P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, An Augmented Plan Waves +Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, *WIEN2K Package*, (2014).

[9] D.D. Koelling, G.O. Arbman, Use of energy derivative of the radial solution in an augmented plane wave method: application to copper, *Journal of Physics F: Metal Physics* 5 (1975) 2041-2055.

[10] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized Gradient Approximation Made

- [32] C. Ambrosch-Draxl, J.O. Sofo, Linear optical properties of solids within the full-potential Linearized augmented plane wave method, *Computer Physics Communications*, 175 1, (2008) 1-14.
- [33] F. Wooten, *Optical properties of solids*. Academic press, (2013).
- [21] D. Hsieh, Y. Xia, D. Qian, L. Wray, F. Meier, J.H. Dil, J. Osterwalder, L. Patthey, A.V. Fedorov, H. Lin, Observation of time-reversal-protected single-Dirac cone topological insulator states in Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> and Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, *Physical Review Letters* 103 (2009).
- [22] J.E. Moore, L. Balents, Topological invariant of time-reversal-invariant band structures, *Physical Review B* 75 (2007).
- [23] L.H. Frandsen, Y. Elesin, L.F. Frellsen, M. Mitrovic, Y. Ding, O. Sigmund, K. Yvind, Topological optimized mode conversion in a photonic crystal waveguide fabricated in silicon-on-insulator material, *Optics Express* 22 (2014) 8525-8532.
- [24] Z. Nourbakhsh, Three dimensional topological insulators of LuPdBi<sub>x</sub>Sb<sub>1-x</sub> alloys, *Journal of Alloys and Compounds* 549 (2013), 51-56.
- [25] N. Taghizadeh, G. Rashedi, Z.Nourbakhsh, M. Farahi, Three dimensional topological insulators of CuAu<sub>1-x</sub>InTe<sub>2</sub> alloys, *Journal of Alloys and Compounds* 593 (2014), 235-241.
- [26] Z. Zhu, Y. Cheng, U. Schwingenschlogl, Band inversion mechanism in topological insulators: A guideline for materials, *Physical Review B* 85 (2012).
- [27] C. Lin, T. Hughes, X.L. Qi, K. Wang, S.C. Zhang, Quantum spin Hall effect in inverted Type-II semiconductors, *Physical Review Letters* 100 (2008).
- [28] B.A. Bernevig, T.L. Hughes, S.C. Zhang, Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells, *Science* 311 (2006) 1757-1761.
- [29] M.A. Cazalilla, H. Ochoa, F. Guinea, Quantum spin Hall effect in two-dimensional crystals of transition-metal dichalcogenides, *Physical Review Letters* 113 (2014).
- [30] B. Hartmut, The quantum spin Hall effect, *Journal of Applied Physics* 109 (2011).
- [31] J. Maciejko, T.L. Hughes, S.C. Zhang, The Quantum Spin Hall effect, *Annual Review of Condensed Matter Physics* 2 (2011) 31-53.

# Electronic, optical properties and topological phase of $\text{Li}_2\text{AgSn}$ nanolayer

Zahra Askarypour\*, Zahra Nourbakhsh

Department of Physics, Faculty of Science, University of Isfahan, Isfahan, Iran

## Abstract

In this paper, the electronic properties and topological phase of  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  nanolayer are investigated. The calculation is done based on the density functional theory within generalized gradient approximation (GGA) using full potential Linearized Augmented Plane Waves plus local orbitals. The electron density of states of this nanolayer is calculated using GGA approximation. The linear electron specific heat coefficient of  $\text{Li}_2\text{AgSn}$  nanolayer is calculated. The xx and zz components of dielectric constant, reflection, absorption, refraction, extinction coefficients and energy loss function of this nanolayer are investigated. The topological phase and band order of this nanolayer are investigated by using the band structure.

**Keywords:** Density Functional Theory, Topological Phase, Band Structure, Thin Film, Optical Constants.

---

\* Corresponding Author: zaskaripour@yahoo.com