

Research Paper

# Topological Phase Transition of InSb and InBi Under Nonhydrostatic Lattice Expansion<sup>1</sup>

Saba Ahmadvand<sup>2</sup> and Shirin Namjoo<sup>\*3</sup>

Received: 2024.03.11

Revised: 2024.05.23

Accepted: 2024.07.03

## Abstract

This study investigated the topological phase transition of InSb and InBi under a non-hydrostatic lattice using density functional theory and the WIEN2K code. The results of examining the band structure of InSb and InBi employing the mBJGGA exchange-correlation potential indicate that InSb is a semiconductor with a small band gap and normal band order at the  $\Gamma$  point. At the same time, InBi is a metal with band inversion at the Brillouin zone center. To transform these compounds into topological semiconductors, the lattice of these compounds is subjected to non-hydrostatic lattice expansion. Non-hydrostatic lattice expansion is applied in two ways. Firstly, the lattice constants are expanded in the ab plane while keeping the lattice constant along the c-axis constant. Then, the lattice constant is expanded along the c-axis while keeping the lattice constant in the ab plane constant. The calculations indicate that under the influence of both types of non-hydrostatic lattice expansion, with the breaking of cubic symmetry, a transition towards topological semiconductors occurs.

**Keywords:** *Density Functional Theory, Topological Semiconductors, Band Inversion, III-V Compounds, Non-hydrostatic Lattice Expansion.*

<sup>1</sup> <https://doi.org/10.22051/ijap.2024.46666.1397>

<sup>2</sup> M. Sc. Graduated, Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Lorestan University, Khorramabad, Lorestan, Iran. Email: saba.sa259@gmail.com

<sup>3</sup> Assistant Professor, Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Lorestan University, Khorramabad, Lorestan, Iran. (Corresponding Author) Email: namjoo.sh@lu.ac.ir

<https://jap.alzahra.ac.ir>



## گذار فاز توپولوژیکی InBi و InSb تحت کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه<sup>۱</sup>

صبا احمدوند<sup>۲</sup> و شیرین نامجو<sup>۳\*</sup>

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۱۲/۲۱

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۳/۰۳/۰۳

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۰۴/۱۳

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا

سال چهاردهم، پیاپی ۳۸، پاییز ۱۴۰۳

صص ۱۰۶ - ۱۲۱

### چکیده:

در این مطالعه گذار فاز توپولوژیکی  $InBi$  و  $InSb$  تحت کشش غیرهیدرواستاتیک با استفاده از نظریه تابعی چگالی و بسته محاسباتی  $WIEN2K$  مورد بررسی قرار گرفته است. نتیجه‌های بدست آمده از بررسی ساختار نواری  $InBi$  و  $InSb$  با به کارگیری پتانسیل تبادل - همبستگی  $mBJGGA$  نشان می‌دهد که  $InSb$  نیمه رسانایی با پهنای شکاف کوچک و نظم عادی نواری در نقطه  $\Gamma$  است. در حالی که  $InBi$  یک فلز است که در مرکز ناحیه نخست بریلوئن دارای وارونگی نواری است. به منظور تبدیل کردن این ترکیب‌ها به نیمه رساناهای توپولوژی، شبکه این ترکیب‌ها به دو صورت تحت کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه قرار می‌گیرند. نخست ثابت شبکه در صفحه  $ab$  بسط داده می‌شود و ثابت شبکه در امتداد محور  $c$  ثابت باقی می‌ماند و سپس ثابت شبکه در راستای محور  $c$  بسط داده می‌شود؛ اما در صفحه  $ab$  ثابت باقی می‌ماند. نتایج بدست آمده از محاسبات نشان می‌دهد که تحت تأثیر هر دو نوع بسط غیرهیدرواستاتیک شبکه با شکسته شدن تقارن مکعبی، در ترکیب‌های  $InBi$  و  $InSb$  گذار به سمت نیمه رسانای توپولوژی رخ می‌دهد.

**واژگان کلیدی:** نظریه تابعی چگالی، نیمه رساناهای توپولوژی، وارونگی نواری، ترکیبات  $III-V$ ، کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه.

<sup>۱</sup> <https://doi.org/10.22051/ijap.2024.46666.1397>

<sup>۲</sup> دانش‌آموخته کارشناسی ارشد، گروه آموزشی فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه لرستان، خرم‌آباد، لرستان، ایران. Email: saba.sa259@gmail.com

<sup>۳</sup> استادیار، گروه آموزشی فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه لرستان، خرم‌آباد، لرستان، ایران. (نویسنده مسئول) Email: namjoo.sh@lu.ac.ir



## ۱. مقدمه

جستجو و بررسی مواد توپولوژی و مطالعه ساختار الکترونی آن‌ها در سال‌های کنونی به‌عنوان یک موضوع جدید، بسیار جذاب و نوظهور در فیزیک ماده چگال پدیدار شده است [۱، ۲]. در نارسانا‌های توپولوژی جفت‌شدگی اسپین-مدار و تقارن وارونی زمانی با هم ترکیب می‌شوند و ویژگی‌های فیزیکی یکتایی را در این دسته از ترکیب‌ها ایجاد می‌کنند. نارسانا‌های توپولوژی دارای هر دو فاز رسانا و نارسانا به صورت همزمان در یک ماده هستند. آن‌ها در لایه‌های درونی نارسانا هستند، اما در لایه‌های سطحی رسانندگی قطبیده و محافظت شده‌ای از خود نشان می‌دهند که برای کاربرد در زمینه‌های اسپینترونیک و ترانزیستورهای بدون اتلاف نویدبخش هستند. حالت‌های سطحی در نارسانا‌های توپولوژی به دلیل وجود تقارن وارونی زمانی از هرگونه اختلالات موضعی محافظت می‌شوند. با توجه به ویژگی‌های یگانه‌ای که در سطح نارسانا‌های توپولوژی مشاهده می‌شود، انتظار می‌رود که این دسته از ترکیب‌ها در بسیاری از زمینه‌های صنعتی به کار گرفته شوند. از آن‌جا که امروزه تلاش برای یافتن نارسانا‌های توپولوژی به دلیل این ویژگی‌های یگانه در حال افزایش است، بنابراین می‌توان به اهمیت فوق‌العاده زیاد تبدیل به مواد توپولوژی پی‌برد. بر اساس مطالعه پیشین صورت‌گرفته‌ی گروه نامجو و همکاران [۳]، InSb با ساختار مکعبی دارای نظم نواری عادی و شکاف نواری بسیار کوچک در حدود ۰/۱۲ الکترون‌ولت در مرکز ناحیه نخست بریلوئن می‌باشد.

باتوجه به کوچک بودن شکاف نواری در این ترکیب پیش‌بینی می‌شود که تحت کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه و شکسته شدن تقارن مکعبی بتوان در ساختار نواری این ترکیب وارونگی نواری ایجاد و سپس گذار به سمت عایق توپولوژی را مشاهده کرد. همچنین بر اساس مطالعه صورت گرفته روی ویژگی الکترونی InBi [۴]، این ترکیب با وجود وارونگی نواری در ساختار نواری خود، در فاز فلزی قرار دارد. با اعمال کشش غیرهیدرواستاتیک این امکان وجود دارد که ضمن حفظ شدن وارونگی نواری، در ساختار نواری آن شکاف ایجاد شود و گذار از فاز فلزی به عایق یا نیمه‌رسانای توپولوژی رخ دهد. بنابراین در این مطالعه به منظور مشاهده گذار فاز توپولوژی، شبکه ترکیب‌های InSb و InBi تحت کشش غیرهیدرواستاتیک قرار می‌گیرد. این نوع کشش به دو صورت به شبکه این ترکیب‌ها اعمال می‌شود. نخست ثابت شبکه در صفحه ab بسط داده می‌شود و ثابت شبکه در امتداد محور c ثابت باقی می‌ماند و سپس ثابت شبکه در راستای محور c بسط داده می‌شود؛ اما در صفحه ab ثابت باقی می‌ماند. در حقیقت، در این پژوهش اعمال کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه به عنوان ابزاری کارآمد برای هدایت شکاف نواری و القای گذار فاز

توپولوژیکی در InSb و InBi به کار گرفته می‌شود و این روش نوآورانه، در پیچه‌ای نو به سوی مهندسی مواد توپولوژی با ویژگی‌های دلخواه می‌گشاید و زمینه را برای اکتشافات جدید در این حوزه هموار می‌کند. با وجود اهمیت فراوان گذار به سمت مواد توپولوژی، تاکنون مطالعه‌ای در ارتباط با گذار فاز توپولوژیکی InBi تحت کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه انجام نگرفته است. همچنین مطالعه صورت گرفته در ارتباط با گذار فاز توپولوژیکی InSb محدود به نوع اول بسط (بسط در صفحه  $ab$ ) می‌باشد [۵] و در این مطالعه به تنظیم شکاف نواری با بسط غیرهیدرواستاتیک شبکه پرداخته نشده است. بنابراین با توجه به محدود بودن کارهای پژوهشی انجام شده در راستای گذار فاز توپولوژیکی InSb و InBi، با انجام این پژوهش می‌توان به درک عمیق‌تر و کامل‌تر از رفتار توپولوژیکی این ترکیبات تحت کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه دست یافت و زمینه را برای توسعه کاربردهای جدید در حوزه مواد توپولوژی فراهم ساخت.

## ۲. روش محاسبات

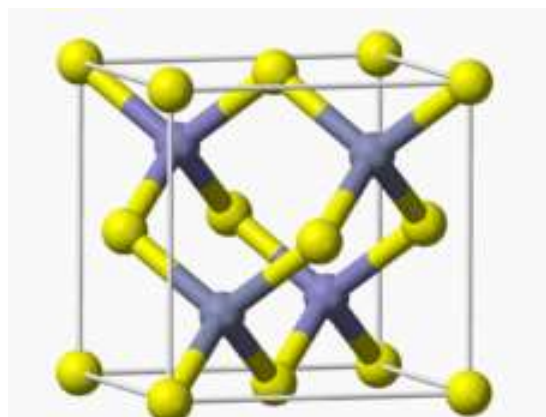
محاسبات بر پایه نظریه تابعی چگالی استوار است و از روش امواج تخت به‌ساخته خطی با پتانسیل کامل برای حل معادلات تک‌ذره کوهن-شم استفاده شده است [۶، ۷]. تمام محاسبات با استفاده از کد کامپیوتری Wien2k انجام گرفته است [۸]. کمیت  $RK_{max}$  (شعاع کوچک‌ترین کره موافین-تین و  $K_{max}$  بردار موج تخت برای بسط تابع موج برحسب امواج تخت در ناحیه بین جایگاهی است) برابر ۸ و بردار موج قطع برای بسط پتانسیل و چگالی بار در ناحیه بین جایگاهی  $G_{max}=12$  انتخاب شد. محاسبه‌ها در حضور برهم‌کنش اسپین-مدار انجام شده است. انتگرال فضای فاز برای محاسبه ویژگی‌های ساختاری با استفاده از ۳۰۰۰ نقطه  $k$  در منطقه نخست بریلون انجام شده است. از آنجا که برای محاسبه ساختار نواری به تعداد نقطه‌های  $k$  بیشتری نیاز است، بنابراین ۷۰۰۰ نقطه  $k$  به منظور مطالعه ساختار نواری این ترکیب‌ها در نظر گرفته شده است. برای مطالعه ساختار نواری از پتانسیل تبادل همبستگی mBJGGA<sup>۱</sup> استفاده شده است [۹]. در این مطالعه برای بررسی ویژگی‌های ساختاری تابعی تبادل همبستگی GGA (Wu-Cohen) به کار گرفته شده است [۱۰].

<sup>۱</sup> Modified Beck- Johnson exchange potential together with Local- Density Approximation



### ۳. نتایج

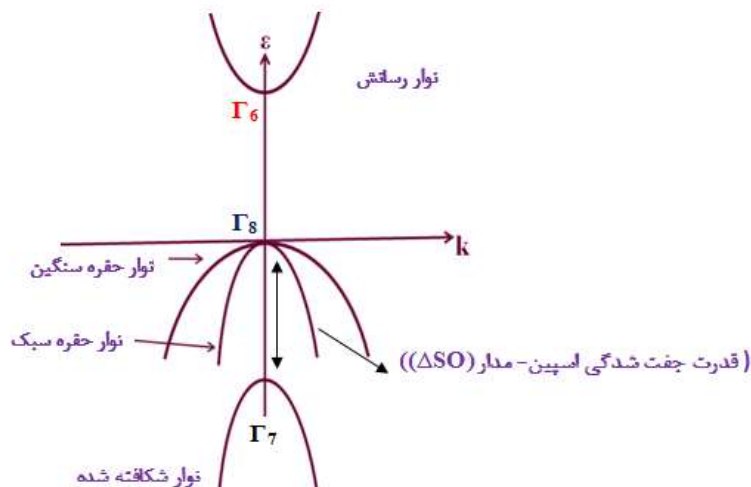
در این مطالعه ساختار سولفید روی برای ترکیب‌های  $\text{InSb}$  و  $\text{InBi}$  در نظر گرفته شده است. این ساختار در شکل (۱) نشان داده شده است.



شکل ۱ ساختار سولفید روی برای  $\text{InSb}$  و  $\text{InBi}$ ، دایره‌های زرد رنگ اتم‌های  $\text{In}$  و دایره‌های آبی رنگ اتم‌های  $\text{Sb}$  و  $\text{Bi}$  را نشان می‌دهند.

یاخته واحد در ساختار سولفید روی یک یاخته  $\text{fcc}$  است با یک پایه که در هر جایگاه شبکه آن دو اتم قرار گرفته است. موقعیت مکانی این دو اتم پایه عبارت از  $(0, 0, 0)$  و  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$  است. مقدار کمیت شبکه برای  $\text{InSb}$ ،  $\text{InBi}$  به ترتیب  $6/53$  آنگستروم و  $6/78$  آنگستروم بدست آمده است. مقادیر بدست آمده کمیت شبکه برای  $\text{InSb}$  و  $\text{InBi}$  در هماهنگی خوبی با مقدارهای تجربی  $6/479$  آنگستروم [۱۱] و  $6/62$  آنگستروم [۱۲] قرار دارد. بر پایه کمیت شبکه محاسبه شده، ساختار نواری  $\text{InSb}$  و  $\text{InBi}$  مورد بررسی قرار گرفته است. همانگونه که در شکل (۲) به صورت شماتیک نشان داده شده است، نوارهای انرژی برای ترکیبات  $\text{III-V}$  (ترکیب‌های  $\text{III-V}$  از دو عنصر تشکیل شده‌اند که یکی از آن‌ها مربوط به گروه سوم و دیگری مربوط به گروه پنجم جدول تناوبی است) با ساختار سولفید روی در مرکز ناحیه نخست بریلوئن دارای تقارن گروه نقطه‌ای  $\Gamma_8$  (نوار تبهگن چهارگانه آبی رنگ)،  $\Gamma_7$  (نوار ظرفیت مشکی رنگ با تبهگنی دوگانه) و  $\Gamma_6$  (نوار قرمز رنگ با تبهگنی دوگانه) هستند. دو نوار ظرفیت بالایی به نوارهای حفره‌های سنگین و حفره‌های سبک معروفند. نوار پایین تر به نوار شکافته معروف است که از جفت شدگی اسپین-مدار نتیجه می‌شود [۱۳]. همچنین نوار رسانش بالایی نیز تبهگن دوگانه است. ترتیب نواری‌ای که در بیشینه ترکیب‌های

III-V با ساختار سولفید روی (از انرژی بالا به سمت انرژی پایین) مشاهده می‌شود به صورت  $\Gamma_6$ ،  $\Gamma_8$ ،  $\Gamma_7$  است. چنین ترتیب نواری ای ترتیب نواری عادی نامیده می‌شود که در شکل (۲) نشان داده شده است.



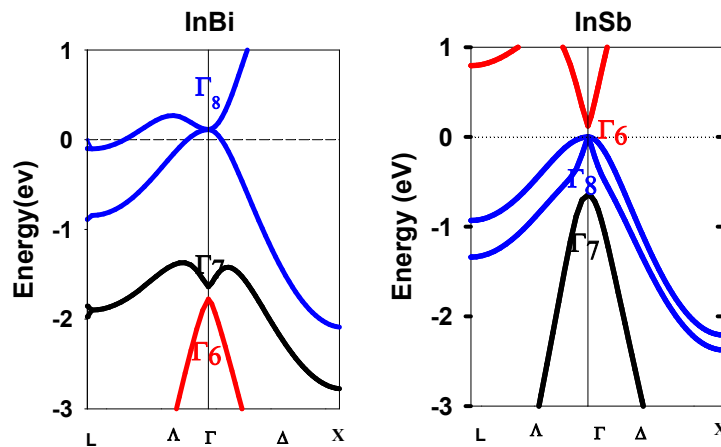
شکل ۲ ساختار نواری ترکیب‌های نیمه‌رسانای III-V نزدیک  $k=0$ ، شامل جفت شدگی اسپین-مدار [۱۳].

در ترکیب‌هایی که در آن‌ها برهم کنش اسپین-مدار بسیار قوی است، نوار  $\Gamma_8$  بالاتر از نوار  $\Gamma_6$  قرار می‌گیرد و بنابراین یک ترتیب نواری وارون شکل می‌گیرد. معیاری به صورت  $\Delta E = E(\Gamma_6) - E(\Gamma_8)$  برای مشخص کردن ترتیب نواری تعریف می‌شود. مقادیر مثبت  $\Delta E$  نشان دهنده ترتیب نواری عادی است، درحالی‌که مقادیر منفی  $\Delta E$  نشان از ترتیب نواری وارون دارند. InBi و InSb که در این مطالعه به آن‌ها پرداخته شده است، نمونه‌ای از ترکیبات III-V است که به ترتیب دارای ترتیب نواری عادی و وارون در مرکز ناحیه اول بریلوئن می‌باشند.

ترتیب نواری عادی برای InSb و همچنین ترتیب نواری وارون برای InBi در شکل (۳) نشان داده شده است. بر اساس شکل (۳)، InSb یک نیمه‌رسانا با ترتیب نواری عادی است، درحالی‌که InBi در فاز فلزی قرار دارند و در ساختار نواری آن وارونگی مشاهده می‌شود. وجود وارونگی نواری در ساختار نواری می‌تواند نشانه‌ای از برهم کنش قوی اسپین-مدار باشد. با محاسبه قدرت جفت شدگی اسپین-مدار به صورت تفاوت انرژی بین حالت‌های  $\Gamma_7$  و  $\Gamma_8$  یعنی  $\Delta SO = E(\Gamma_8) - E(\Gamma_7)$  در این ترکیب می‌توان به قوی بودن برهم کنش اسپین-مدار پی برد. در این مطالعه قدرت



جفت‌شدگی اسپین مدار برای InBi ۱/۸۸ الکترون‌ولت بدست آمده است که در مقایسه با مقدار مشابه در InSb که در مطالعه حاضر ۰/۶۴ الکترون‌ولت بدست آمده است، بسیار بزرگ و قابل توجه است. از این‌رو، بزرگ بودن قدرت جفت‌شدگی اسپین-مدار در InBi سبب بروز وارونگی نواری در ساختار نواری این ترکیب می‌شود. از آن‌جا که ترتیب نواری وارون در مرکز ناحیه اول بریلوئن می‌تواند نشانه‌ای محکم بر وجود فاز توپولوژیکی باشد. از این‌رو، InBi پتانسیل تبدیل شدن به یک عایق توپولوژی را دارد و اگر بتوان به روشی در ساختار نواری آن شکاف ایجاد کرد می‌توان گذار به سمت عایق توپولوژی را در این ترکیب مشاهده کرد. بر اساس مطالعه صورت گرفته توسط نامجو و همکاران [۳]، InSb نیمه‌رسانایی با شکاف نواری کوچک در حدود ۰/۱۲ الکترون‌ولت است، که اگرچه این ترکیب دارای شکاف نواری است اما بدون نظم نواری وارون است (دارای نظم نواری عادی است) و اگر بتوان ترتیب نواری عادی در ساختار نواری در مرکز ناحیه نخست بریلوئن را بر هم زد و وارونگی نواری در ساختار نواری آن ایجاد کرد می‌توان گذار فاز توپولوژیکی را در آن مشاهده کرد.



شکل ۳ ساختار نواری InSb و InBi با در نظر گرفتن برهمکنش اسپین - مدار.

مطابق مدل بستگی قوی انرژی حالت‌های  $\Gamma_6$ ,  $\Gamma_7$ ,  $\Gamma_8$  به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۴، ۱۵]:

$$E_{\Gamma_6} = \frac{\varepsilon_{s1} + \varepsilon_{s2}}{2} + \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{s1} - \varepsilon_{s2}}{2}\right)^2 + V_{ss}^2}, \quad (1)$$

$$E_{\Gamma_7} = \frac{\varepsilon_{p1} + \varepsilon_{p2}}{2} - \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{p1} - \varepsilon_{p2}}{2}\right)^2 + V_{pp}^2} - \lambda_{SO}, \quad (2)$$

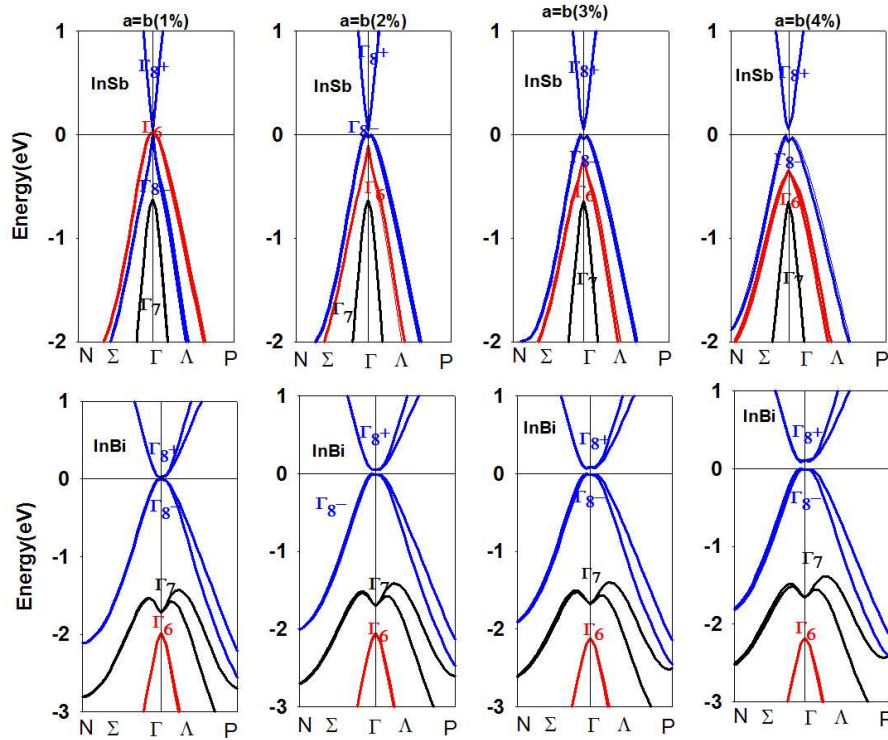
$$E_{\Gamma_8} = \frac{\varepsilon_{p1} + \varepsilon_{p2}}{2} - \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{p1} - \varepsilon_{p2}}{2}\right)^2 + V_{pp}^2} + \frac{1}{2} \lambda_{SO}, \quad (3)$$

انرژی حالت‌های  $\Gamma_6, \Gamma_7$  و  $\Gamma_8$  به انرژی اوربیتال‌های s و p مربوط به کاتیون‌ها و آنیون‌ها، پتانسیل‌های جفت‌شدگی پیوندهای ss و pp ( $v_{ss}$  و  $v_{pp}$ ) و همچنین قدرت جفت‌شدگی اسپین-ارپیت ( $\lambda_{so}$ ) وابسته است. در رابطه بالا،  $\varepsilon_{s1,2}$  و  $\varepsilon_{p1,2}$  به ترتیب انرژی اوربیتال‌های s و p مربوط به کاتیون‌ها و همچنین آنیون‌ها هستند. بر اساس روابط بالا، با تغییر قدرت جفت‌شدگی اسپین مدار ( $\lambda_{so}$ ) و همچنین پتانسیل‌های جفت‌شدگی ( $v_{pp}$  و  $v_{ss}$ )، انرژی حالت‌های  $\Gamma_6, \Gamma_7$  و  $\Gamma_8$  تغییر پیدا می‌کند. از آنجا که قدرت جفت‌شدگی اسپین-مدار یک ویژگی ذاتی است، بنابراین تغییر انرژی حالت‌های  $\Gamma_6, \Gamma_7$  و  $\Gamma_8$  تنها با تغییر پتانسیل‌های جفت‌شدگی ( $v_{pp}$  و  $v_{ss}$ ) امکان‌پذیر خواهد بود. یکی از راه‌های تغییر پتانسیل‌های جفت‌شدگی، تغییر ثابت شبکه است. از آنجا که افزایش ثابت شبکه منجر به کاهش پتانسیل‌های جفت‌شدگی و در نتیجه تغییر انرژی حالت‌های  $\Gamma_6, \Gamma_7$  و  $\Gamma_8$  می‌شود، بنابراین پیش‌بینی می‌شود که تحت تاثیر کشش شبکه و تغییر انرژی حالت‌های  $\Gamma_6, \Gamma_7$  و  $\Gamma_8$  گذار به سمت نارساناها و یا نیمه‌رساناهای توپولوژی رخ دهد. در این مطالعه کشش شبکه به صورت غیرهیدرواستاتیک اعمال شده است. هدف از اعمال کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه شکستن تقارن مکعبی و ایجاد شکاف نواری در ساختار نواری است. تبهگنی چهارگانه  $\Gamma_8$  به دلیل وجود تقارن مکعبی حفظ می‌شود. با اعمال بسط غیرهیدرواستاتیک این امکان وجود دارد که همزمان با ایجاد وارونگی نواری با شکسته شدن تقارن مکعبی، یک شکاف نواری در نقطه  $\Gamma$  ظاهر شود و بنابراین گذار به سمت نارساناهای توپولوژی رخ دهد. با توجه به کاربرد بسیار زیاد نارساناها توپولوژی، می‌توان به اهمیت بسیار زیاد گذار به سمت نارساناها توپولوژی پی برد. در ادامه بررسی نتایج بدست آمده از مطالعه ساختار نواری InSb و InBi تحت کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه انجام می‌شود. در این مطالعه، کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه به دو شیوه متفاوت اعمال می‌شود. نخست ثابت شبکه در صفحه ab بسط داده می‌شود و ثابت شبکه در امتداد محور c ثابت باقی





می ماند. سپس، ثابت شبکه در راستای محور  $c$  بسط داده می شود اما در صفحه  $ab$  ثابت باقی می ماند. در شکل (۴)، ساختار نواری  $\text{InSb}$  و  $\text{InBi}$  تحت نوع اول کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه (بسط ثابت شبکه در صفحه  $ab$  از ۱ تا ۴ درصد) آمده است.



**شکل ۴** ساختار نواری  $\text{InSb}$  و  $\text{InBi}$  با استفاده از تابعی  $m\text{BJGGA}$  تحت کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه (بسط ثابت شبکه در صفحه  $ab$  از ۱ تا ۴ درصد و ثابت نگه داشتن ثابت شبکه در راستای محور  $c$ ).

با توجه به شکل (۴)، تحت تأثیر کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه به دلیل شکسته شدن تقارن مکعبی، تبهگنی چهارگانه  $\Gamma_8$  از بین می رود و در مرکز ناحیه نخست بریلوئن نوار تبهگن چهارگانه  $\Gamma_8$  به نوارهای تبهگن دوگانه  $\Gamma_8^+$  (انرژی بالاتر) و  $\Gamma_8^-$  (انرژی پائین تر) شکافته می شود و یک شکاف نواری بین نوارهای تبهگن دوگانه  $\Gamma_8^+$  و نوارهای تبهگن دوگانه  $\Gamma_8^-$  ایجاد می شود. در این دستگاهها با تقارن چهارگوشی، قدرت وارونی نواری به صورت تفاوت انرژی بین نوار تبهگن دوگانه  $\Gamma_6$  و همچنین نوار تبهگن دوگانه  $\Gamma_8^+$  در مرکز ناحیه نخست بریلوئن به صورت  $E(\Gamma_6) - E(\Gamma_8^+)$

تعریف می‌شود. ترکیب‌ها با ترتیب نواری عادی دارای قدرت وارونی نواری مثبت و ترکیب‌ها با ترتیب نواری وارون دارای قدرت وارونی نواری منفی هستند. در شکل (۴) (ردیف اول) ساختار نواری InSb تحت کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه از ۱ تا ۴ درصد نشان داده شده است. تحت تأثیر کشش شبکه، افزون بر ایجاد شکاف نواری در ساختار نواری InSb در نقطه  $\Gamma$  که به دلیل شکسته شدن تقارن مکعبی ایجاد می‌شود، وارونگی نواری نیز در این نقطه ایجاد می‌شود. به‌ازای ۱ درصد بسط غیرهیدرواستاتیک شبکه، قدرت وارونی نواری منفی است؛ چرا که نوارهای تبهگن دوگانه  $\Gamma_8^+$  بالاتر از نوار دوگانه  $\Gamma_6$  قرار می‌گیرد. این روند به‌ازای درصدهای بالاتر بسط شبکه نیز حفظ می‌شود. هم‌زمان با ایجاد وارونی نواری در ساختار نواری تحت کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه، یک شکاف نواری در نقطه  $\Gamma$  باز می‌شود که میزان این شکاف با افزایش بسط شبکه افزایش می‌یابد.

میزان شکاف نواری باز شده در نقطه  $\Gamma$  در جدول (۱) آمده است. از آن جا که وجود وارونگی نواری در نقاط با تقارن بالا از جمله نقطه  $\Gamma$ ، می‌تواند نشانه‌ای قوی از وجود فاز توپولوژی در یک ماده باشد، بنابراین در InSb تحت کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه از ۱ تا ۴ درصد، گذار از نیمه‌رسانای معمول با نظم نواری عادی در نقطه  $\Gamma$  به سمت نیمه‌رسانای توپولوژی با نظم نواری وارون در نقطه  $\Gamma$  رخ می‌دهد. نتایج بدست آمده از محاسبات به‌ازای ۲ تا ۴ درصد کشش غیرهیدرواستاتیک با نتایج مطالعه پیشین [۵]، که در راستای گذار فاز توپولوژیکی InAs، InSb و آلایژهای سه‌تایی آن‌ها با استفاده از تابعی GGA (Wu- Cohen) انجام شده است، در هماهنگی بسیار خوبی قرار دارد. هر دو مطالعه از ۲ تا ۴ درصد گذار به سمت نیمه‌رسانای توپولوژی را پیش‌بینی می‌کنند؛ اما در یک درصد بسط، پیش‌بینی‌های متفاوتی از گذار فاز توپولوژی دارند. دلیل تفاوتی که در مشاهده گذار فاز توپولوژی در یک درصد بسط بروز پیدا می‌کند، استفاده از شیوه متفاوت کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه در صفحه ab است. در مطالعه پیشین ثابت شبکه در صفحه ab بسط داده شده است و ثابت شبکه در راستای محور c با به‌کارگیری تابعی (Wu- Cohen) GGA بهینه شده است، در صورتی که مطالعه حاضر بدون بهینه کردن پارامتر شبکه c انجام شده است. در مطالعه پیشین صورت گرفته روی این ترکیب وابستگی شکاف نواری باز شده در نقطه  $\Gamma$  به کشش غیرهیدرواستاتیک مورد بررسی قرار نگرفته است؛ بنابراین مرجعی برای مقایسه میزان شکاف نواری باز شده در ساختار نواری InSb حین گذار به سمت نیمه‌رسانای توپولوژی (نتایج موجود در جدول (۱)) وجود ندارد.



در مورد InBi (شکل (۴) ردیف پایین) تحت کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه از ۱ تا ۴ درصد، افزون بر حفظ شدن وارونگی نواری در نقطه  $\Gamma$  یک شکاف نواری در این نقطه ایجاد می‌شود که همانند InSb میزان این شکاف با افزایش بسط شبکه افزایش می‌یابد. بنابراین InBi که در شبکه تعادلی در فاز فلزی قرار دارد تحت کشش غیرهیدرواستاتیک به یک نیمه‌رسانای توپولوژی تبدیل می‌شود که میزان شکاف نواری آن رفته‌رفته با افزایش بسط غیرهیدرواستاتیک شبکه افزایش می‌یابد.

همان‌گونه که در جدول (۱) آمده است، شکاف نواری با افزایش بسط غیرهیدرواستاتیک افزایش می‌یابد و از مقداری در حدود  $0.030$  الکترون - ولت در حالت یک درصد بسط به مقداری در حدود  $0.12$  الکترون‌ولت در حالت ۴ درصد بسط می‌رسد. متأسفانه هیچ‌گونه نتیجه تجربی و یا محاسباتی در ارتباط با گذار فاز توپولوژیکی InBi و همچنین میزان شکاف نواری باز شده در ساختار نواری InBi برای مقایسه با مطالعه حاضر وجود ندارد.

**جدول ۱** میزان شکاف نواری باز شده در نقطه  $\Gamma$  بصورت  $(E_{\Gamma 8^+} - E_{\Gamma 8^-})$  برای InSb و InBi تحت کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه (با بسط شبکه در صفحه ab از ۱ تا ۴ درصد و ثابت نگه داشتن ثابت شبکه در راستای

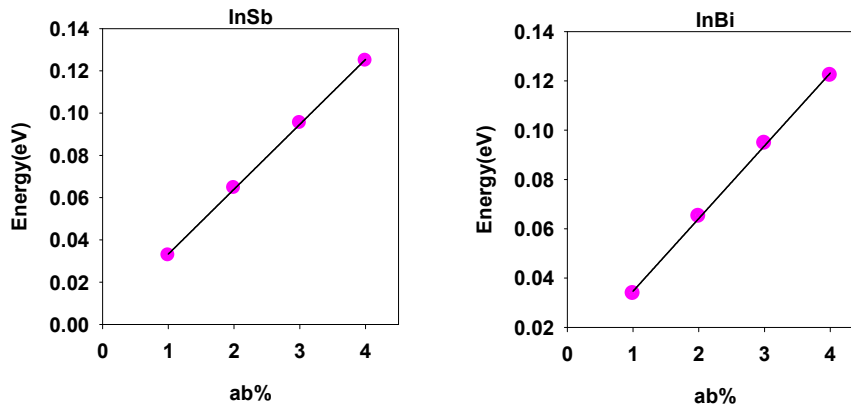
محور c).

ت ترکیب	بسط شبکه (درصد)	$(E_{\Gamma 8^+} - E_{\Gamma 8^-})$ (eV)
InSb	۱	۰/۰۳۲۷
InSb	۲	۰/۰۶۴۶
InSb	۳	۰/۰۹۵۳
InSb	۴	۰/۱۲۴۸
InBi	۱	۰/۰۳۳۷
InBi	۲	۰/۰۶۵۱
InBi	۳	۰/۰۹۴۷
InBi	۴	۰/۱۲۲۱

هنگامی که نقطه‌های مشخص کننده شکاف نواری باز شده در نقطه  $\Gamma$  به‌ازای درصدهای مختلف بسط شبکه با معادلات مرتبه نخست برآزش داده می‌شود، مشاهده می‌شود میزان انحراف این نقاط از این معادله خطی بسیار ناچیز است. از این رو، شکاف نواری باز شده در ساختار نواری InSb،

InBi تحت کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه به صورت خطی افزایش می‌یابد. این امر به خوبی در شکل (۵) نشان داده شده است. مقادیر قدرت وارونی نواری بر حسب کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه نیز در جدول (۲) آمده است.

$$(E(\Gamma_8^+) - E(\Gamma_8^-)) \text{ (eV)}$$



شکل ۵ شکاف نواری باز شده در نقطه  $\Gamma$  برای InBi و InSb به صورت تابعی از بسط غیرهیدرواستاتیک شبکه (بسط ثابت شبکه در صفحه ab از ۱ درصد تا ۴ درصد و ثابت نگه داشتن ثابت شبکه در راستای محور c). نقاط مشخص کننده شکاف نواری باز شده در نقطه  $\Gamma$  برای InBi و InSb به ترتیب با معادلات مرتبه نخست  $E_g = 0.003 + 0.03x$  و  $E_g = 0.005 + 0.03x$  برازش داده شده‌اند.

جدول ۲ قدرت وارونی نواری به صورت  $(E_{\Gamma_6} - E_{\Gamma_8^+})$  برای InBi و InSb تحت کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه (بسط شبکه در صفحه ab از ۱ تا ۴ درصد و ثابت نگه داشتن ثابت شبکه در راستای محور c).

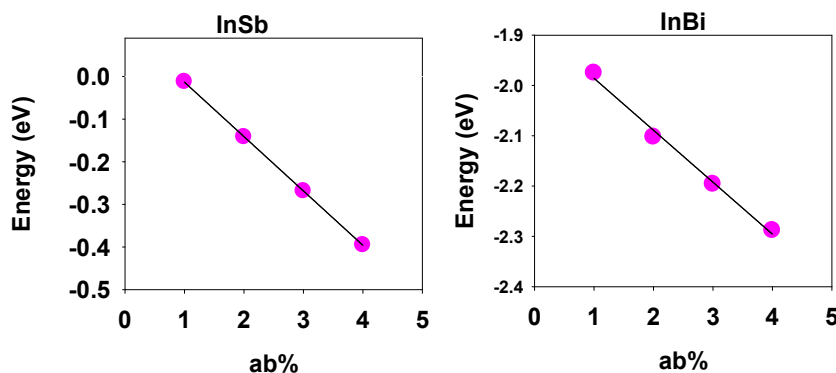
ترکیب	بسط شبکه (درصد)	$(E_{\Gamma_6} - E_{\Gamma_8^+})$ (eV)
InSb	۱	-۰/۱۲۵
InSb	۲	-۰/۱۴۲
InSb	۳	-۰/۲۷
InSb	۴	-۰/۴
InBi	۱	-۱/۹۸
InBi	۲	-۲/۱
InBi	۳	-۲/۲
InBi	۴	-۲/۲۹



همان گونه که در جدول (۲) نشان داده شده است، به ازای یک درصد بسط شبکه قدرت وارونی نواری برای InSb و InBi منفی می شود و این روال به ازای درصدهای بیشتر بسط شبکه نیز مشاهده می شود. قدرت وارونگی نواری برای InSb از ۰/۱۲۵- الکترون ولت در حالت یک درصد بسط به ۰/۴- الکترون ولت در حالت ۴ درصد بسط می رسد. در حالی که برای InBi قدرت وارونی نواری از ۱/۹۸- الکترون ولت در حالت یک درصد بسط به ۲/۲۹- الکترون ولت در حالت ۴ درصد بسط می رسد.

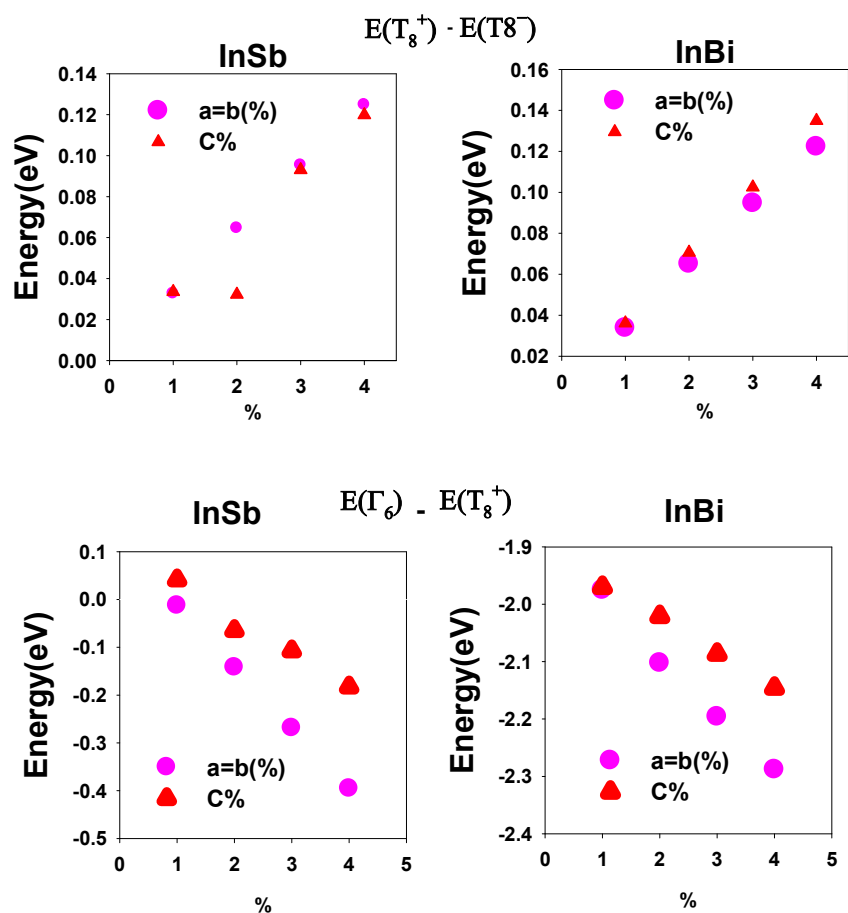
نمودار تغییرات قدرت وارونی نواری بر حسب بسط غیرهیدرواستاتیک شبکه در شکل (۶) نشان داده شده است. بر اساس این شکل، گرچه قدرت وارونی نواری برای InSb و InBi دارای مقادیر متفاوتی است؛ اما رفتار آن بر حسب بسط شبکه یکسان است و در حقیقت برای هر دو ترکیب قدرت وارونی نواری با افزایش بسط غیرهیدرواستاتیک شبکه به صورت خطی کاهش می یابد. این رفتار در هماهنگی بسیار خوبی با مطالعه پیشین، [۵]، که به بررسی گذار فاز توپولوژیکی InSb تحت کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه با بسط ثابت شبکه در صفحه ab و بهینه کردن ثابت شبکه در راستای محور c پرداخته است، قرار دارد. در این مطالعه نیز قدرت وارونی نواری با افزایش بسط شبکه به صورت خطی کاهش می یابد. نقاط مشخص کننده قدرت وارونی نواری بر حسب بسط غیرهیدرواستاتیک شبکه برای InSb و InBi به خوبی با معادلات مرتبه نخست  $+0/1 - 0/13X$  و  $\Delta E = -0/189 - 0/1X$  برآزش داده شده اند.

$$(E(\Gamma_6) - E(\Gamma_8^+)) \text{ (eV)}$$



**شکل ۶** قدرت وارونی نواری برای InSb, InBi به صورت تابعی از بسط غیرهیدرواستاتیک شبکه (بسط ثابت شبکه در صفحه ab از ۱ تا ۴ درصد و ثابت نگه داشتن ثابت شبکه در راستای محور c). نقاط مشخص کننده قدرت وارونی نواری بر حسب بسط غیرهیدرواستاتیک شبکه برای InSb و InBi به خوبی با معادلات مرتبه نخست  $+0/1 - 0/13X$  و  $\Delta E = -0/189 - 0/1X$  برآزش داده شده اند.

شبکه ترکیب‌های InBi و InSb تحت نوع دوم کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه (بسط در راستای محور C) نیز قرار گرفته است. از آنجا که نتایج بدست آمده با تفاوت‌های جزئی بسیار مشابه نتایج بدست آمده تحت نوع اول کشش غیرهیدرواستاتیک (بسط در صفحه ab) است، به همین منظور در ادامه تنها مقایسه شکاف نواری باز شده در نقطه  $\Gamma$  و همچنین قدرت وارونی نواری در دو نوع بسط انجام می‌شود (شکل ۷).



**شکل ۷** شکاف نواری باز شده در نقطه  $\Gamma$  به صورت  $\Gamma_6^+ - \Gamma_8^-$  (ردیف بالا) و قدرت وارونی نواری به صورت  $\Gamma_6 - \Gamma_8^+$  (ردیف پایین) برای InBi و InSb به صورت تابعی از نوع اول بسط غیرهیدرواستاتیک شبکه (بسط ثابت شبکه به صورت یکسان در راستای محورهای a و b از ۱ تا ۴ درصد (دایره‌های صورتی رنگ)) و نوع دوم بسط غیرهیدرواستاتیک شبکه (بسط ثابت شبکه در راستای محور C از ۱ تا ۴ درصد (مثلث‌های قرمز رنگ)).



مقادیر پیش‌بینی شده شکاف نواری باز شده در نقطه  $\Gamma$  برای InBi در هر دو نوع از بسط شبکه بسیار به هم نزدیک هستند. برای InSb به‌ازای درصدهای ۱، ۳ و ۴ مقادیر پیش‌بینی شده شکاف نواری در هر دو بسط بسیار به هم نزدیک هستند. اما در ۲ درصد بسط، مقدار شکاف پیش‌بینی شده در نوع اول بسط شبکه (دایره‌های صورتی رنگ) بزرگ‌تر از مقدار پیش‌بینی شده در نوع دوم بسط (مثلث‌های قرمز رنگ) است. مقایسه قدرت وارونی نواری در دو نوع بسط شبکه نشان می‌دهد که در نوع دوم بسط شبکه (بسط ثابت شبکه C) برای هر دو ترکیب قدرت وارونی نواری بزرگ‌تر از مقادیر مشابه در نوع اول بسط شبکه است. برای InBi در هر دو نوع از بسط شبکه، قدرت وارونی نواری به‌ازای یک درصد بسط شبکه منفی می‌شود و این روال به‌ازای درصدهای بیشتر نیز حفظ می‌شود. از این‌رو، هر دو بسط پیش‌بینی یکسانی از گذار فاز توپولوژیکی این ترکیب دارند. در حقیقت هر دو نوع بسط برای InBi گذار به سمت نیمه‌رسانای توپولوژی را از ۱ درصد بسط پیش‌بینی می‌کنند. برای InSb گذار به سمت نیمه‌رسانای توپولوژی در ۱ درصد بسط شبکه در نوع اول بسط غیرهیدرواستاتیک (بسط در صفحه ab) رخ می‌دهد (به دلیل منفی شدن قدرت وارونی نواری در ۱ درصد بسط) درحالی‌که در نوع دوم بسط شبکه (بسط C) گذار در ۲ درصد بسط رخ می‌دهد (به دلیل منفی شدن قدرت وارونی نواری در ۲ درصد بسط).

#### ۴. نتیجه‌گیری

این مطالعه باهدف بررسی تأثیر کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه بر گذار فاز توپولوژیکی و شکاف نواری ترکیب‌های InBi و InSb با استفاده از روش امواج تخت به‌ساخته خطی با پتانسیل کامل، در چارچوب نظریه تابعی چگالی، انجام شده است. کشش غیرهیدرواستاتیک به دو شیوه متفاوت به شبکه ترکیب‌های InBi و InSb اعمال شده است. با توجه به نتایج بدست آمده تحت هر دو نوع کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه با ایجاد شدن شکاف نواری در ساختار نواری، گذار به سمت نیمه‌رساناهای توپولوژی رخ می‌دهد و این شکاف نواری رفته‌رفته با افزایش بسط شبکه افزایش می‌یابد. هر دو بسط پیش‌بینی یکسانی از گذار فاز توپولوژی InBi و همچنین مقدار شکاف نواری باز شده در ساختار نواری آن در نقطه  $\Gamma$  دارند. برای InSb در نوع اول بسط غیرهیدرواستاتیک (بسط در صفحه ab) گذار به سمت نیمه‌رسانای توپولوژی در ۱ درصد بسط شبکه رخ می‌دهد، درحالی‌که در نوع دوم بسط شبکه (بسط C) گذار در ۲ درصد رخ می‌دهد. به‌ازای درصدهای بیشتر بسط شبکه در هر دو نوع از بسط، شکاف نواری باز شده در نقطه  $\Gamma$  رفته‌رفته افزایش می‌یابد و میزان شکاف نواری در درصدهای بالاتر (۳ و ۴ درصد) بسیار مشابه است.

نتایج بدست آمده از این مطالعه نشان می دهد که کشش غیرهیدرواستاتیک شبکه می تواند ابزاری مؤثر برای کنترل گذار فاز توپولوژیکی و شکاف نواری در ترکیب های InBi و InSb باشد. در حقیقت این مطالعه با ارائه روشی نوآورانه برای کنترل گذار فاز توپولوژیکی و شکاف نواری، دریچه ای جدید به سوی توسعه مواد نیمه رسانای جدید با ویژگی های قابل تنظیم و کارایی بالا می گشاید و فرصتی را برای کاوش های تجربی در ارتباط با بررسی ویژگی های حالت های سطحی توپولوژیکی در ترکیبات بیان شده فراهم می کند که می تواند در کاربردهای عملی بسیار حائز اهمیت باشد.

## ۵. تقدیر و تشکر

از دانشکده علوم پایه و گروه فیزیک دانشگاه لرستان که امکانات انجام این کار پژوهشی را فراهم آورده اند بسیار سپاسگزاریم.

## منابع

- [1] Bradlyn, B., Cano, J., Wang, Z., Vergniory, M.G., Felser, C., Cava, R.J. and Bernevig, B.A., "Beyond Dirac and Weyl fermions: Unconventional quasiparticles in conventional crystals", *Science* 353(6299), aaf5037, 2016. <https://doi.org/10.1126/science.aaf5037>
- [2] Hasan, M.Z. and Kane, C.L., "Colloquium: topological insulators", *Reviews of modern physics* 82, 4 (3045), 2010. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.3045>
- [3] Namjoo, S., Rozatian, A.S., Jabbari, I. and Puschnig, P., "Optical study of narrow band gap InAs x Sb 1- x (x= 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) alloys", *Physical Review B* 91, 20 (205205), 2015. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.205205>
- [4] Ahmadvand, S., Namjoo, S., Ganji, M. and Dadsetani, M., "Structural and electronic properties of InSb1-xBix (x= 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1)", *Journal of Research on Many-body Systems* 13(4), 69-81, 2024. (in Persian) <https://doi.org/10.22055/JRMBS.2024.18899>
- [5] Namjoo, S., Rozatian, A.S. and Jabbari, I., "Influence of lattice expansion on the topological band order of InAsxSb1- x (x= 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) alloys", *Journal of Alloys and Compounds* 628, 458-463, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2014.12.131>
- [6] Singh, D.J. and Nordstrom, L., "Planewaves, Pseudopotentials, and the LAPW method", *Springer Science & Business Media*, 2006.
- [7] Blügel, S. and Bihlmayer, G., "Full-potential linearized augmented planewave method", *Computational nanoscience: do it yourself* 31, 85-129, 2006.
- [8] Blaha, P., Schwarz, K., Madsen, G.K., Kvasnicka, D. and Luitz, J., "wien2k", *An augmented plane wave+ local orbitals program for calculating crystal properties* 60, 1, 2001.
- [9] Tran, F. and Blaha, P., "Accurate band gaps of semiconductors and insulators with a semilocal exchange-correlation potential", *Physical review letters* 102(22), 226401, 2009. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.226401>





- [10] Wu, Zhigang, and Ronald E. Cohen. "More accurate generalized gradient approximation for solids", *Physical Review B* 73(23), 235116, 2006. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.235116>
- [11] Madelung, O., "Semiconductors: data handbook", *Springer Science & Business Media*, 2004.
- [12] Rajpalke, M.K., Linhart, W.M., Yu, K.M., Birkett, M., Alaria, J., Bomphrey, J.J., Sallis, S., Piper, L.F.J., Jones, T.S., Ashwin, M.J. and Veal, T.D., "Bi-induced band gap reduction in epitaxial InSbBi alloys", *Applied Physics Letters* 105(21), 2014. <https://doi.org/10.1063/1.4902442>
- [13] Peyghambarian, N., Koch, S.W. and Mysyrowicz, A., "Introduction to semiconductor optics", *Prentice-Hall, Inc., Upper Saddle River, NJ, USA*, 1993.
- [14] Slater, J.C. and Koster, G.F., "Simplified LCAO method for the periodic potential problem", *Physical review* 94(6), 1498, 1954. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.94.1498>
- [15] Chadi, D.J., "Spin-orbit splitting in crystalline and compositionally disordered semiconductors." *Physical Review B* 16(2), 790, 1977. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.16.790>



This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).