

Research Paper

Investigation of Topological Phase Transition of $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) Alloys from Dirac Semimetal to Weyl Semimetal using First-principles Approaches¹

Samira Sadat Nourizadeh² and Aminollah Vaez^{*3}

Received: 2022.11.02

Revised: 2023.03.17

Accepted: 2022.05.05

Abstract

Weyl semimetals show special quantum states of matter, which have nontrivial topological features and very interesting and unique applications in the spintronics industry. One method of making these materials is the use of alloying method. In this paper, the $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) alloys are constructed using the first-principles methods. After study of their stability, their structural, electronic, and topological properties have been studied. To study the structural and electronic properties of the alloys, the Wien2k package, based on density functional theory, has been used. Furthermore, the topological properties of the alloys have been calculated using the Wanniertools packages, based on the tight-binding method. Calculations show that the $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) alloys, in the absence of spin-orbit coupling, have crossing points with fourfold degeneracy and band inversion. Therefore, they are topological Dirac semimetal. Considering the spin-orbit coupling, it is seen that alloys with concentrations of $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75$ change to the normal semimetal by opening the band gap; but, the alloy with $x = 1$ concentration changes to the topological Weyl semimetal with 16 Weyl fermions couple. The full area of the first Brillouin zone (FBZ) was scanned to find the positions of the Weyl points. The results show that the Weyl points, with chirality of either +1 or -1, were scattered in the FBZ with the central symmetry, but all of them are far from the high-symmetry paths of FBZ. Furthermore, the surface state properties, like Fermi arcs, were calculated and studied for the $NbSb$ Weyl semimetal using the Wanniertools computational packages.

Keywords: *Topological Materials, Dirac Semimetal, Weyl Semimetal, Density Functional Theory, Tight-binding Method.*

¹ DOI: 10.22051/ijap.2023.42095.1305

² PhD Student, Faculty of Physics, University of Isfahan, Isfahan, Iran. Email: samirasadatnourizadeh@yahoo.com

³ Assistant Professor, Faculty of Physics, University of Isfahan, Isfahan, Iran. (Corresponding Author). Email: vaez@phys.ui.ac.ir

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



بررسی گذار فاز توپولوژی آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) از نیم فلز دیراک به نیم فلز وایل با استفاده از روش ابتدا به ساکن^۱

سمیرا سادات نوری زاده^۲ و امین الله واعظ^{۳*}

تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۰۸/۱۱

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۱/۱۲/۲۶

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۲/۱۵

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا

سال سیزدهم، پیاپی ۳۵، زمستان ۱۴۰۲

صص ۱۲۹ - ۱۴۳

چکیده:

نیم فلزهای وایل حالت‌های کوانتومی ویژه و بسیار جالبی از ماده را نشان می‌دهند که دارای ویژگی‌های توپولوژی غیربدهی بوده و کاربردهای یکتایی در صنعت اسپینترونیک دارند. یکی از روش‌های ساختن این مواد استفاده از روش آلیاژسازی است. در این مقاله آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) با استفاده از روش‌های ابتدا به ساکن ساخته شده‌اند و بعد از بررسی پایداری آن‌ها، ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و توپولوژی آن‌ها مورد مطالعه قرار گرفته است. برای بررسی ویژگی‌های ساختاری و الکترونی آلیاژها از برنامه محاسباتی وین، که بر اساس نظریه تابعی چگالی است، بهره گرفته شده است. همچنین، ویژگی‌های توپولوژی این آلیاژها با استفاده از برنامه محاسباتی واینرتولز، که بر اساس روش تنگ-بست است، محاسبه شده‌اند. محاسبه‌ها نشان دادند که آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) در نبود برهم‌کنش اسپین-مدار، دارای نقطه‌های برخوردی با تپه‌گنی چهارگانه و وارونی نواری هستند و در نتیجه نیم فلز توپولوژی دیراک می‌باشند. با در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپین-مدار، مشاهده شد که آلیاژهایی با غلظت‌های $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75$ با باز شدن شکاف انرژی تبدیل به نیم فلز معمولی می‌شوند؛ ولی آلیاژ با غلظت $x = 1$ به نیم فلز توپولوژی وایل با ۱۶ جفت فرمیون وایل تبدیل می‌شود. برای یافتن مکان نقطه‌های وایل کل منطقه اول بریلوئن جستجو شد. بررسی‌ها نشان داد که فرمیون‌های وایل با کایرالیته $+1$ یا -1 با تقارن مرکزی در منطقه اول بریلوئن پراکنده‌اند، ولی همگی دور از مسیرهای پرتقارن منطقه اول بریلوئن هستند. همچنین ویژگی حالت‌های سطحی، چون کمان‌های فرمی، برای نیم فلز وایل $NbSb$ با استفاده از برنامه محاسباتی واینرتولز محاسبه و بررسی شده است.

واژگان کلیدی: مواد توپولوژی، نیم فلز دیراک، نیم فلز وایل، نظریه تابعی چگالی، روش تنگ-بست.

^۱ DOI: 10.22051/ijap.2023.42095.1305

^۲ دانشجوی دکترا، دانشکده فیزیک، دانشگاه اصفهان، اصفهان. Email: samirasadatnourizadeh@yahoo.com

^۳ استادیار، دانشکده فیزیک، دانشگاه اصفهان، اصفهان. (نویسنده مسئول). Email: vaez@phys.ui.ac.ir



۱. مقدمه

مطالعه نیم فلزهای وایل، همانند گرافن و نارساها های توپولوژی، عصری جدید را در علم مواد و فیزیک ماده چگال به روی دانشمندان گشوده است [۱]. در حقیقت، نیم فلزهای وایل نیم فلزهایی با فاز توپولوژی غیربدیهی می باشند. در این نوع از نیم فلزها، برانگیختگی های کم انرژی، فرمیون های وایل می باشند [۲]. این فرمیون ها نقش اساسی و مهمی در توسعه نظریه میدان کوانتومی و الگوی استاندارد داشته اند [۳]. فرمیون های وایل نخستین بار توسط هرمان وایل^۱ در سال ۱۹۲۹ از ساده سازی معادله های دیراک استخراج شدند، ولی شاهد تجربی برای وجود آنها در سال ۲۰۱۵ در طبیعت مشاهده شد و در سال ۲۰۱۶ به این پژوهش ها جایزه نوبل فیزیک تعلق گرفت [۴، ۵]. ویژگی های توپولوژی در نیم فلزهای وایل سبب ایجاد ویژگی های متفاوتی از جمله مقاومت مغناطیسی منفی، نوسان های کوانتومی، نابهنجاری های کایرال، کمان های فرمی روی سطح و غیره می شود [۶]. این ویژگی نیم فلزهای وایل، منجر به ایجاد کاربردهای عملی گوناگونی از جمله کاربرد در رایانه های کوانتومی و در صنعت اسپینترونیک شده است [۷].

در بلورهایی که دارای تقارن وارونی زمانی یا تقارن وارونی مکانی هستند، فرمیون های وایل به صورت نقطه های ناشی از برخورد نوار رسانش و نوار ظرفیت در فضای اندازه حرکت ظاهر می شوند و به آنها گره های وایل گفته می شود [۸]. یکی از ویژگی های یکتای فرمیون های وایل، کایرالیته آنهاست. فرمیون های وایل همچون تک قطبی های مغناطیسی برای انحنای بری هستند و کایرالیته آنها همان علامت بارهای تک قطبی مغناطیسی است. کایرالیته گره های وایل به دلیل تقارن های بلوری و توپولوژی ساختار نواری محافظت می شوند [۹]. حضور فرمیون های وایل درون انبوهی ساختار بلوری منجر به ظهور حالت های سطحی یکتا در سطح ساختار مورد نظر می شود [۴]. این حالت های سطحی به صورت کمان هایی هستند که از تصویر گره های وایل درون انبوه روی سطح شروع و به تصویر گرهی وایل دیگری با کایرالیته مخالف روی سطح، پایان می یابند. با اعمال شرایط متفاوت، جفت گره های وایل با کایرالیته متفاوت می توانند از هم دور شوند و یا روی هم افتاده و تبدیل به گره دیراک شوند یا شکاف انرژی آنها باز شده و تبدیل به نیم فلز عادی شوند.

نخستین پیشنهاد نظری برای بررسی نیم فلز وایل، پژوهش روی ترکیب پیروکلر $Rn_2Ir_2O_7$ بود [۱۰]. نشان داده شد که این ساختار بلوری دارای ۲۴ جفت گره وایل درون انبوه و حالت های سطحی یکتا روی سطح مورد بررسی است. ساختار بلوری بعدی که به صورت نظری مورد بررسی

^۱ Herman Weyl



قرار گرفت، بلور $HgCr_2Se_4$ بود که دارای ساختار به نسبت ساده تر و فاز فرومغناطیس بود [۱۱]. این ساختار به دلیل تبهگنی چهارگانه در تقاطع ساختار نواری، تنها دارای یک جفت فرمیون وایل دوتایی بود. در ادامه ساختارهای بسیاری به عنوان نیم فلز وایل با روش های محاسباتی و نظری مورد بررسی قرار گرفتند، ولی نخستین دسته ترکیب هایی که به صورت تجربی بررسی شدند، ترکیب های NbP ، $NbAs$ ، TaP و $TaAs$ بودند که با روش طیف سنجی نورگسیل وابسته به زاویه^۱ در آزمایشگاه مشاهده شدند و جایزه نوبل فیزیک هم به کسانی که این بررسی را انجام داده بودند اهدا شد. در این ترکیب ها ۱۲ جفت فرمیون وایل درون انبوهه و کمان های فرمی حالت سطحی روی سطح ظاهر شدند [۴، ۱۲، ۱۳]. به دلیل ویژگی های متمایز نیم فلز های وایل و کاربردهای گوناگون این ترکیب ها، پژوهشگران همواره به دنبال معرفی و بررسی آلیاژهایی هستند که بتوانند ویژگی های نیم فلز وایل را از خود بروز دهند. از جمله آلیاژهایی که دارای ویژگی نیم فلز وایل هستند و تاکنون مورد بررسی قرار گرفته اند می توان به آلیاژهایی از جمله $Bi_{1-x}Sb_x$ ، $Ge_{1-x}Sn_x$ و $MgTa_{2-x}Nb_xN_3$ اشاره کرد [۱۴-۱۸]. به عنوان نمونه، در ترکیب $Bi_{1-x}Sb_x$ بعد از محاسبه ویژگی های ساختاری و الکترونی، ویژگی های توپولوژی آلیاژ با برنامه وانیرتولز محاسبه شده و نشان داده شده است که آلیاژ برای دو مقدار $x = 0.5$ و $x = 0.87$ دارای فاز توپولوژی نیم فلز وایل است [۱۵].

با توجه به اهمیت بالای ترکیب هایی با ویژگی فاز توپولوژی نیم فلز وایل در دسته ترکیب های $TaAs$ ، NbP ، $NbAs$ و TaP ، هدف این پژوهش یافتن ترکیب هایی است که دارای فاز توپولوژی غیربدیهی باشند. به این منظور آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) با پنج غلظت متفاوت برای نخستین بار معرفی شده و برای یافتن ویژگی های توپولوژی فاز نیم فلز وایل، مورد بررسی قرار گرفته اند. این آلیاژها می توانند نامزدهایی برای نیم فلز دیراک و نیم فلز وایل باشند. به منظور بررسی ویژگی های ساختاری، الکترونی و توپولوژی این آلیاژها از برنامه محاسباتی وین^۲ [۱۹] بر مبنای نظریه تابعی چگالی^۳ [۲۰]، برنامه محاسباتی وانیر^۴ [۲۱] بر مبنای تابع های وانیر^۵ [۲۲] و برنامه وانیرتولز^۶ [۲۳] بر مبنای روش تنگ-بست استفاده شده است. برنامه محاسباتی وانیر^۶ کد محاسباتی منبع باز بر پایه حالت های

¹ Angle-Resolved Photo Emission Spectroscopy (ARPES)

² Wien2k

³ Density functional theory

⁴ Wannier90

⁵ Wannier function

⁶ Wanniertools



بلاخ برای محاسبه‌ی توابع بیشینه جایگزیده وانیر است. برنامه وانیر تولز نیز، کد محاسباتی منبع بازی است که براساس توابع به دست آمده از خروجی برنامه وانیر ۹۰ محاسبات مربوط به ویژگی‌های توپولوژی در حالت‌های حجمی و حالت‌های سطحی را انجام می‌دهد. در ادامه‌ی این مقاله در بخش ۲ روش انجام محاسبات بیان شده است. نتیجه محاسبات ساختاری و الکترونی در بخش ۳-۱ و محاسبات توپولوژی ساختارها در بخش ۳-۲ بیان شده‌اند. در نهایت در بخش ۴ نتیجه گیری کلی از روند پژوهش انجام شده است.

۲. روش محاسبات

آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) دارای ساختار سه میلی در گروه فضایی $1P_1$ هستند. برای بررسی ویژگی‌های ساختاری و الکترونی این آلیاژها از برنامه محاسباتی وین بر پایه نظریه‌ی تابعی چگالی استفاده شده است. در این برنامه محاسباتی، از روش حل موج‌های تخت بهبود یافته‌ی خطی با پتانسیل کامل^۱ که یکی از دقیق‌ترین روش‌های مطالعه‌ی ساختار نواری جامدها است، بهره گرفته شده است. برای بررسی ویژگی‌های ساختاری و الکترونی آلیاژها در این کد محاسباتی از تقریب شیب تعمیم یافته، برای تابعی تبادل - هم بستگی استفاده شده است [۲۴]. در تقریب شیب تعمیم یافته افزون بر چگالی، از شیب چگالی در نقطه‌ی مورد نظر هم استفاده می‌شود. در نتیجه، این تقریب روشی مناسب برای محاسبه‌ی ویژگی‌های فیزیکی بلورهاست. همچنین در کارهای انجام شده برای بررسی ویژگی‌های توپولوژی و ایل در دسته ترکیب‌های $NbAs$ ، که ساختاری مشابه با آلیاژهای بررسی شده در این مقاله دارد، از تقریب شیب تعمیم یافته استفاده شده است و نشان داده شده که محاسبه‌های مبتنی بر این تقریب سازگاری خوبی با داده‌های تجربی دارد [۴]. در تمام محاسبه‌ها، میزان همگرایی برای انرژی برابر با 10^{-5} (Ry) در نظر گرفته شده است. نخستین متغیر مهم در انجام این محاسبه‌ها، پارامتر $RMTK_{max}$ است، که در آن، RMT کوچک‌ترین شعاع کره‌ی مافین - تین اتم‌های ترکیب و K_{max} بیشینه بردار موج برای بسط تابع موج الکترون در ناحیه بین جایگاهی است. مقدار بهینه پارامتر $RMTK_{max}$ برابر با $10/5$ به دست آمد. کوچک‌ترین شعاع کره‌ی مافین - تین برای اتم‌های Nb ، Ta و Sb ، به ترتیب برابر با $2/35$ ، $2/37$ و $2/27$ آنگستروم به دست آمده‌اند. همچنین، مقدار بهینه‌ی بردار قطع بسط پتانسیل و چگالی بار در ناحیه بین جایگاهی، یعنی G_{max} ، مقدار $(Ry)^{1/2}$ ۱۳ به دست آمد. تعداد بهینه نقطه‌ها در فضای وارون، K_{point} ، هم

¹ Full-Potential Linearized Augmented Planewave (FP-LAPW)



برابر با مقدار $2 \times 6 \times 6$ به دست آمد. انرژی جداسازی حالت‌های مغزه از ظرفیت برابر با $(Ry) - 6$ انتخاب شده است. تمامی محاسبه‌ها برای بررسی ویژگی‌های الکترونی در بود و نبود برهم کنش اسپین - مدار انجام شده است.

با استفاده از خروجی‌های محاسبه‌های برنامه‌ی وین و استفاده از برنامه‌ی وین-تو-وانیر^۱ به عنوان پل ارتباطی، ورودی برنامه وانیو ۹۰، که برپایه‌ی تابع‌های وانیو بیشینه جایگزیده است، آماده شد. بدین منظور براساس داده‌های خروجی از برنامه محاسباتی وین، تابع‌های وانیو بیشینه جایگزیده‌ی مورد نیاز برای اوربیتال‌های $Sb-4p$ و $Nb-5d, Ta-5d$ ساخته شدند. ویژگی‌های توپولوژی آلایزهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) با استفاده از برنامه وانیو ۹۰ و برنامه محاسباتی وانیو تولز محاسبه شدند. برنامه محاسباتی وانیو تولز، برپایه روش محاسباتی تنگ-بست، با محاسبه‌ی ساختار نواری، سطح فرمی، چگالی حالت‌ها و بررسی ویژگی‌های حالت‌های سطحی امکان مطالعه روی ترکیب‌های نارسانا و رسانا با ویژگی توپولوژی غیربدیهی را دارد. در این برنامه‌ی محاسباتی با محاسبه‌ی مرکزهای بار وانیو، شاخص توپولوژی Z_2 ، یا عدد چرن، می‌توان نارسانا‌های توپولوژی را بررسی کرد. همچنین، با استفاده از الگوریتم جست‌وجوی گره‌های شکاف بسته و محاسبه‌ی شکاف انرژی می‌توان ویژگی‌های رسانا‌های توپولوژی از جمله مکان نقطه‌های وایل و دیراک و یا خط‌های گره‌ایی را بررسی کرد. ورودی برنامه وانیو تولز با استفاده از هامیلتونی تنگ-بست، محاسبه شده با برنامه وانیو ۹۰، تولید شد. در نهایت با اجرای برنامه وانیو تولز، ویژگی‌های توپولوژی آلایزها از جمله مکان و کاپرالیته نقطه‌های وایل، پاشندگی خطی نوار انرژی در نزدیکی این نقطه‌ها و حالت‌های سطحی بر اساس روش تابع گرین بررسی شدند [۲۵].

۳. نتایج

۳.۱ ویژگی‌های ساختاری و الکترونی

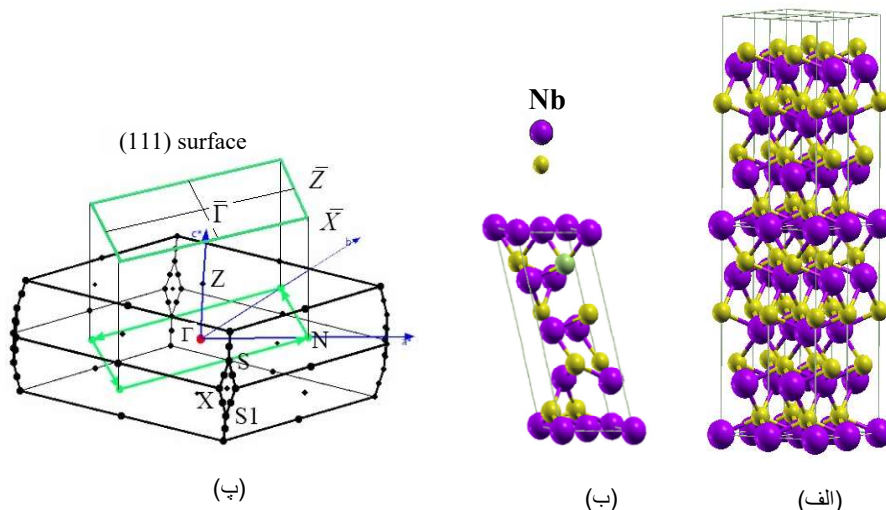
برای ساخت آلایزهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) ابریاخته‌ایی به ابعاد $2 \times 2 \times 2$ برابر یاخته‌ی یک‌ه‌ی ترکیب $TaSb$ با ساختار شبکه براوه‌ی چهارگوشی با گروه فضایی $I4_1md$ ساخته شد. این ابریاخته بعد از بهینه‌سازی به ساختار شبکه براوه‌ی سه‌میلی با گروه فضایی $1P_1$ تغییر پیدا کرد. ساختار سه‌میلی دارای کمترین تقارن در میان ۱۴ گروه فضایی براوه‌ی سه‌بعدی می‌باشد. این ساختار تنها دارای تقارن وارونی نسبت به مرکز است. برای آلایزهایی با غلظت‌های

¹ Wien2Wannier



متفاوت درصد مناسبی از اتم‌های Ta با اتم‌های Nb جایگزین می‌شوند. به صورت نمونه، یاخته‌ی قراردادی $2 \times 2 \times 2$ و یاخته‌ی یک‌ه‌ی ابریاخته برای غلظت $x=1$ در شکل (۱-الف) و (۱-ب) نمایش داده شده است. برای بهینه‌سازی پارامترهای شبکه از برنامه‌ی محاسباتی سازگار با برنامه‌ی وین استفاده شده است که با روش بسیار دقیق تمام الکترونی با پتانسیل کامل در برنامه وین اجرا می‌شود. در این برنامه، ابتدا بهترین نسبت پارامترهای شبکه و انرژی متناسب با حجم، به دست آمده و سپس معادله حالت برای حجم‌ها و انرژی‌های گوناگون به دست می‌آید. در نهایت پارامترهای شبکه برای حجم بهینه محاسبه می‌شود.

در شروع محاسبه‌ها، به منظور یافتن ویژگی‌های ساختاری آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) انرژی کل سامانه را بر حسب تغییر حجم در ساختارهای مختلف کمینه کرده و با استفاده از کمینه نمودارهای انرژی-حجم، مقدار بهینه برای پارامترهای شبکه را به دست آوردیم (جدول ۱).



شکل ۱ الف) یاخته‌ی قراردادی $2 \times 2 \times 2$ برای آلیاژ $NbSb$ با ساختار چهارگوشی، ب) یاخته‌ی یک‌ه‌ی با ساختار سه‌میلی برای آلیاژ $NbSb$ ، پ) منطقه‌ی اول بریلوئن در فضای وارون همراه با نمایش نقاط پرتقارن و صفحه‌ی (۱۱۱) برای نمایش حالت‌های سطحی.

برای بررسی پایداری آلیاژها یکی از پارامترهایی که مورد بررسی قرار گرفت محاسبه‌ی انرژی تشکیل، E_f ، بود. انرژی تشکیل برای این آلیاژها، بجز $x=0$ و $x=1$ ، به صورت زیر تعریف می‌شود [۲۶]،



$$E_f(Nb_xTa_{1-x}Sb) = E_t(Nb_xTa_{1-x}Sb) - xE_t(NbSb) - (1-x)E_t(TaSb).$$

در این رابطه، $E_t(Nb_xTa_{1-x}Sb)$ انرژی کل آلیاژ برای غلظت x و $E_t(TaSb)$ و $E_t(NbSb)$ انرژی کل برای ترکیب های $TaSb$ و $NbSb$ است. مقدار انرژی تشکیل برای تمام غلظت های x محاسبه و دیده شد که مقدار آن برای تمام آلیاژها، منفی است. مقدار منفی انرژی تشکیل برای هر پنج غلظت x نشان می دهد که این آلیاژها پایدار هستند. انرژی تشکیل ترکیب $NbSb$ از سایر آلیاژها کمتر بود که نشان دهنده ی پایداری بیشتر این ترکیب نسبت به سایر آلیاژها است. این یافته با نتیجه ی ناشی از یافته های پژوهشگران پیشین در مورد پایداری این ترکیب سازگاری دارد [۲۷].

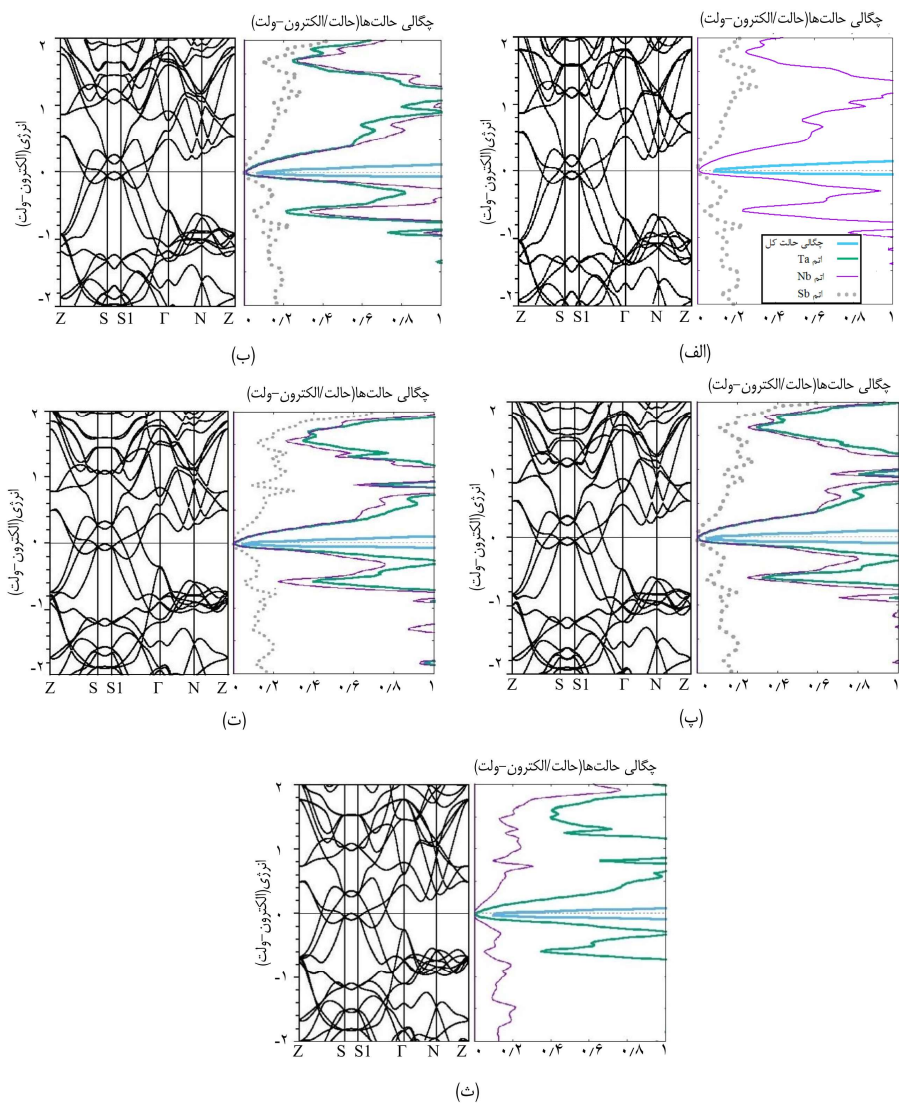
در ادامه محاسبه ها، برای بررسی ویژگی های الکترونی آلیاژها، نمودار چگالی حالت ها و ساختار نواری در مسیر پرتقارن منطقه ی اول بریلوئن (شکل ۱- پ) برای تمامی غلظت ها در نبود برهم کنش اسپین-مدار محاسبه شده و در شکل (۲) نمایش داده شدند. قطع شدن نوارهای انرژی به وسیله ی سطح فرمی و صفر نبودن چگالی حالت ها در انرژی فرمی نشان می دهد که تمام آلیاژهای مورد بررسی، دارای رفتار فلزی هستند. بررسی نمودارهای چگالی حالت ها برای غلظت های مختلف نشان می دهد که چگالی حالت ها در نزدیکی انرژی فرمی بیشتر ناشی از اوربیتال های $Ta-5d$ و $Nb-5d$ است. برای ساختارهای نواری در نبود برهم کنش اسپین-مدار برای هر پنج مقدار x در مسیر $ZSS\Gamma$ ، چهار نقطه ی تقاطع نواری مشاهده شدند که در نمودارهای شکل (۲) مشخص هستند. این نقطه های برخوردی ناشی از برخورد نوارهای رسانش و نوارهای ظرفیت هستند. به دلیل نبود برهم کنش اسپین-مدار، نوارهای رسانش و نوارهای ظرفیت دارای تبهگنی دوگانه هستند. از این رو، نقطه های برخوردی دارای تبهگنی چهارگانه می شوند. بررسی ویژگی های اوربیتالی نوارهای رسانش و نوارهای ظرفیت در مسیر پرتقارن مشخص شده، نشان می دهد که ویژگی وارونی نواری در کل محدوده ی SS_1 نیز وجود دارد. ویژگی وارونی نواری در ساختار نواری این آلیاژها بین اوربیتال های d_{xz} و d_{yz} یا d_{xz} و d_{yz} در اتم های Ta و Nb است. در این حالت ترتیب اوربیتالی نوارهای انرژی با حالت معمولی متفاوت است. هم چنین با بررسی ساختار نواری مشاهده می شود که در نزدیکی نقطه های برخوردی، نوارهای انرژی رفتار پاشندگی خطی از خود نشان می دهند.

جدول ۱ ثابت‌های شبکه a و c ، زاویه‌های α و γ بین آن‌ها و انرژی کل E_t برای یاخته‌ی یکه آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) با ساختار سه‌میلی.

نام ترکیب	$a(\text{Å})$	$c(\text{Å})$	α	γ	$E_t(eV)$
$TaSb$	۵/۲۰	۱۲/۶۹	$۱۰۱/۴۲^\circ$	۹۰°	-۳۵۳۷۵۶/۰۶
$Nb_{0.25}Ta_{0.75}Sb$	۵/۲۰	۱۲/۷۲	$۱۰۱/۴۲^\circ$	۹۰°	-۳۰۶۵۳۳/۵۶
$Nb_{0.5}Ta_{0.5}Sb$	۵/۲۱	۱۲/۷۰	$۱۰۱/۴۲^\circ$	۹۰°	-۲۵۹۳۱۱/۰۵
$Nb_{0.75}Ta_{0.25}Sb$	۵/۲۱	۱۲/۷۱	$۱۰۱/۴۲^\circ$	۹۰°	-۲۱۲۰۸۸/۵۴
$NbSb$	۵/۲۱	۱۲/۷۲	$۱۰۱/۴۲^\circ$	۹۰°	-۱۶۴۸۶۶/۰۳

با توجه به این که در تمام آلیاژها، اوربیتال‌های $Ta-5d$ و $Nb-5d$ تأثیر زیادی در نزدیکی انرژی فرمی دارند، برای بررسی دقیق‌تر ویژگی‌های الکترونی باید چگالی حالت‌های الکترونی و ساختار نواری در حضور برهم‌کنش اسپین-مدار هم محاسبه شود (شکل ۳). بعد از محاسبه ویژگی‌ها در حضور برهم‌کنش اسپین-مدار مشاهده شد که برای تمام پنج مقدار غلظت x ، چگالی حالت‌ها در حضور برهم‌کنش اسپین-مدار چون حالت بدون برهم‌کنش اسپین-مدار (شکل ۲) بیشتر تحت تأثیر اوربیتال‌های $Ta-5d$ و $Nb-5d$ هستند و اتم Sb در مقایسه با اتم‌های Ta و Nb تأثیر کمتری دارد. همچنین، قطع شدن نوارهای انرژی به وسیله‌ی سطح فرمی و صفر نبودن چگالی حالت‌ها در انرژی فرمی نشان می‌دهد که تمام آلیاژهای مورد بررسی در حضور برهم‌کنش اسپین-مدار دارای رفتار فلزی‌اند. در مورد ساختارهای نواری نیز اعمال برهم‌کنش اسپین-مدار سبب باز شدن شکاف در مسیر $ZSS\Gamma$ در غلظت‌های $x=0, 0/25, 0/5, 0/75$ شده است ولی در غلظت $x=1$ ساختار نواری هم‌چنان دارای شکاف بسته است. بررسی دقیق‌تر در کل منطقه‌ی اول بریلوئن هم نشان داد که تنها برای غلظت $x=1$ شکاف‌های بسته وجود دارد. به دلیل وجود برهم‌کنش اسپین-مدار نقطه‌های برخوردی دارای تبهگنی دوگانه می‌شوند، ولی بررسی ساختار نواری در نزدیکی نقطه‌های برخوردی نشان می‌دهد که نوارهای انرژی در نزدیکی این نقطه‌ها هم‌چنان دارای پاشندگی خطی هستند.

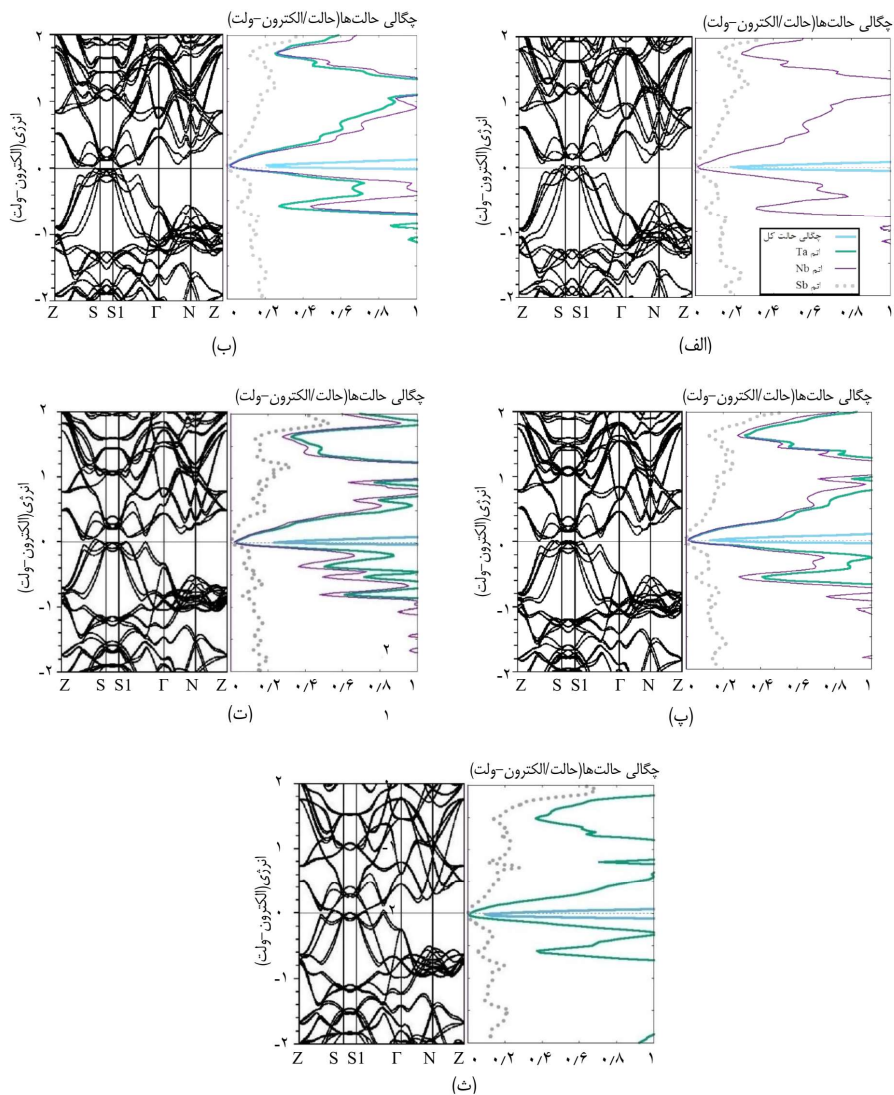




شکل ۲ ساختار نواری و نمودار چگالی حالت‌ها برای آلیاژهای

$Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) در نبود برهم کنش اسپین-مدار برای (الف) $\alpha=0$

(ب) $\alpha=0.25$ (پ) $\alpha=0.5$ (ت) $\alpha=0.75$ (ث) $\alpha=1$.



شکل ۳ ساختار نواری و نمودار چگالی حالت‌ها برای آلیاژهای

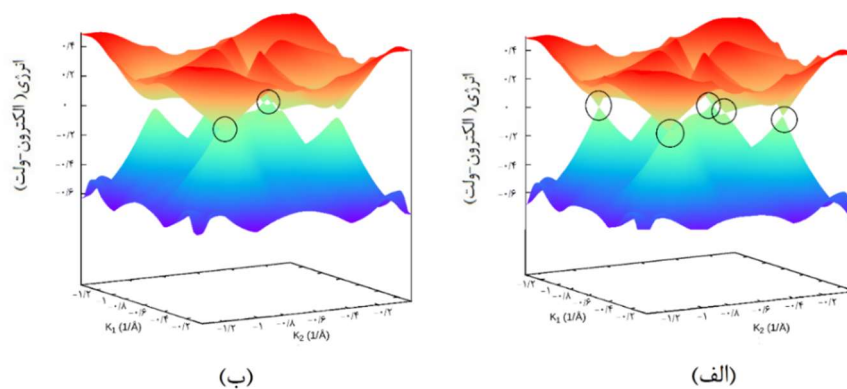
$Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) در حضور برهم کنش اسپین-مدار برای (الف) $x=0$

(ب) $x=0.25$ (پ) $x=0.5$ (ت) $x=0.75$ (ث) $x=1$.



۲.۳ ویژگی‌های توپولوژی

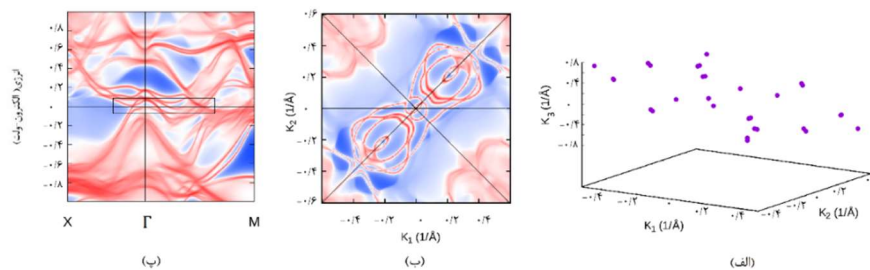
آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) به دلیل ساختار بلوری و گروه فضایی خود، دارای تقارن وارونی مکانی نیستند. همان‌گونه که در بررسی ساختار الکترونی این آلیاژها مشاهده شد، ساختار نواری این آلیاژها دارای ویژگی وارونی ناشی از اوربیتال‌های d_{z^2} و d_{xz} یا d_{yz} در اتم‌های Ta و Nb در کل مسیر SS_1 است. همچنین، این آلیاژها دارای تعدادی نقطه برخوردی در نزدیکی انرژی فرمی با ویژگی پاشندگی خطی و تبهگنی چندگانه هستند. این نقطه‌های برخوردی ناشی از برخورد نوارهای انرژی با اوربیتال‌های d_{z^2} و d_{xz} یا d_{yz} هستند که سبب ایجاد تبهگنی چهارگانه در نقطه‌ی برخورد می‌شوند. این آلیاژها در نبود برهم‌کنش اسپین-مدار، نامزد مناسبی برای فاز نیم‌فلز توپولوژی دیراک هستند. ساختار نواری سه بعدی این آلیاژها، که با برنامه‌ی محاسباتی واینر تولز محاسبه و رسم شده‌است، در نبود برهم‌کنش اسپین-مدار مخروط‌های دیراک و در رأس آن‌ها حضور فرمیون‌های دیراک را نمایش می‌دهد (شکل ۴-الف).



شکل ۴ ساختار نواری سه بعدی رسم شده برای آلیاژ $NbSb$ (الف) در نبود برهم‌کنش اسپین-مدار، (ب) در حضور برهم‌کنش اسپین-مدار. نقطه‌های مشخص شده با دایره در شکل (الف) نشان دهنده‌ی فرمیون‌های دیراک و در شکل (ب) نشان دهنده‌ی جفت فرمیون‌های وایل هستند.

برای بررسی دقیق‌تر ویژگی‌های توپولوژی آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) تأثیر برهم‌کنش اسپین-مدار روی سامانه بررسی شده‌است. در این آلیاژها همان‌گونه که در ساختار نواری در حضور برهم‌کنش اسپین-مدار نیز مشخص است، در حالت‌های $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75$ فرمیون‌های دیراک با اعمال برهم‌کنش اسپین-مدار شکاف دار می‌شوند و فاز توپولوژی نیم‌فلز دیراک به فاز نیم‌فلز معمولی تبدیل می‌شوند.

اگرچه در حالت $x = 1$ شرایط متفاوت است. ساختار نواری سه بعدی که با استفاده از برنامه‌ی محاسباتی وانیرتولز و داده‌های برنامه‌ی وین برای این حالت ترسیم شده است، حضور جفت نقطه‌های برخوردی در نزدیکی انرژی فرمی را نمایش می‌دهد (شکل ۴-ب). در این حالت با اعمال برهم کنش اسپین-مدار آلیاژ با فاز توپولوژی نیم فلز دیراک به فاز توپولوژی نیم فلز وایل گذار فاز پیدا می‌کند. برای اطمینان از فاز نیم فلز توپولوژی وایل در غلظت $x = 1$ باید ناوردای توپولوژی را در نقطه‌های برخوردی بررسی کرد. این آلیاژ به دلیل گروه فضایی $1P_1$ بدون گروه‌های تقارنی و تنها دارای تقارن مرکزی است به همین دلیل ناوردهای توپولوژی چون پارته یا ناوردای توپولوژی آینه‌ایی و غیره برای بررسی آن قابل استفاده نیستند. ناوردای توپولوژی که با توجه به گروه فضایی این آلیاژها می‌توان مورد بررسی قرار داد، کایرالیته در نقطه‌های برخوردی است. با کمک برنامه‌ی محاسباتی وانیرتولز با مشخص شدن مکان دقیق فرمیون‌های وایل و محاسبه‌ی مرکزهای بار وانیر و حلقه‌های ویلسون، کایرالیته مربوط به این نقطه‌های برخوردی محاسبه شدند. محاسبه‌ها نشان دادند که کایرالیته نقطه‌های برخوردی $+1$ یا -1 هستند. فرمیون‌های وایل با کایرالیته $+1$ نمایان گر چشمه و با کایرالیته -1 نمایان گر چاهک برای انحنای بری هستند. مکان دقیق فرمیون‌های وایل در ترکیب $NbSb$ در شکل (۵-الف) نشان داده شده‌اند. تعداد این فرمیون‌ها ۱۶ جفت است و از آنجایی که آلیاژ مورد بررسی تنها دارای تقارن مرکزی است، بنابراین فرمیون‌های وایل در مکان \vec{k} با کایرالیته مشخص دارای تصویری در مکان $-\vec{k}$ با همان کایرالیته هستند.



شکل ۵ ویژگی‌های توپولوژی آلیاژ $NbSb$: (الف) مکان فرمیون‌های وایل درون منطقه‌ی اول بریلوئن، (ب) طیف حالت‌های سطحی برای سطح (۱۱۱) و (پ) ساختار نواری حالت سطحی برای سطح (۱۱۱).

از دیگر ویژگی‌های یکتای مرتبط با فاز توپولوژی نیم فلز وایل که در این مقاله بررسی شدند، حضور حالت‌های سطحی کمان فرمی روی سطح است. حضور نقطه‌های وایل با کایرالیته‌های مخالف



درون انبوهه سبب ایجاد کمان‌های فرمی حالت سطحی می‌شوند. برای بررسی حالت‌های سطحی، سطح (۱۱۱) در نظر گرفته شده است (شکل ۱-پ). تصویر نقطه‌های وایل روی این صفحه با کمان فرمی به هم متصل می‌شوند (شکل ۵-ب). در حقیقت فرمیون‌های وایل با کایرالیته‌های مخالف در ابتدا و انتهای کمان‌های فرمی قرار گرفته‌اند (شکل ۵-ب). از طرفی نقطه‌های وایل در ساختار نواری حالت سطحی، به شکل نقطه‌های برخورد نوارهای انرژی در نقطه‌ی Γ و اطراف آن مشخص می‌شوند (شکل ۵-پ). بررسی حضور کمان فرمی در نمودارهای طیف حالت سطحی و برخوردهای موجود در نوارهای انرژی حالت‌های سطحی، حضور نقطه‌های وایل درون انبوهه و وجود فاز توپولوژی نیم‌فلز وایل را در آلیاژ $NbSb$ تایید می‌کند.

۴. نتیجه‌گیری

در نیم‌فلزهای توپولوژی وایل حالت‌های کوانتومی دارای ویژگی‌های توپولوژی غیر بدیهی‌اند و کاربردهای قابل توجه‌ایی در صنعت اسپینترونیک دارند. به این منظور، مطالعه ترکیب‌هایی با فاز نیم‌فلز توپولوژی وایل می‌تواند اهمیت زیادی در فیزیک ماده چگال داشته باشد. بر این اساس با ساختن ترکیب‌ها با روش آلیاژسازی و مطالعه‌ی ویژگی‌های الکترونی و توپولوژی آن‌ها، می‌توان ساختارهایی را یافت که دارای این ویژگی یکتا و متمایز باشند. در این پژوهش آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) برای نخستین بار بررسی شدند. بخش اول این بررسی با استفاده از برنامه‌ی محاسباتی وین، که بر اساس روش تابعی چگالی است، انجام شدند. در این بخش بعد از محاسبه انرژی تشکیل و بررسی پایداری آلیاژها، ویژگی‌های ساختاری، چون پارامتر شبکه تعادلی و الکترونی و همچنین، چگالی حالت‌ها و ساختار نواری، آن‌ها مورد مطالعه قرار گرفته است. در بخش بعدی، ویژگی‌های توپولوژی این آلیاژها با استفاده از برنامه‌های وانیر ۹۰ و وانیرتولز، که بر اساس رهیافت تابع‌های وانیر و روش تنگ‌بست هستند، محاسبه شدند. نتیجه محاسبه‌های ساختار نواری و برنامه‌های وانیر ۹۰ و وانیرتولز نشان دادند که آلیاژهای $Nb_xTa_{1-x}Sb$ ($x = 0, 0.25, 0.50, 0.75, 1$) در نبود برهم‌کنش اسپین-مدار دارای ویژگی نیم‌فلز دیراک هستند. با اعمال برهم‌کنش اسپین-مدار نیم‌فلزهای دیراک در غلظت‌های ۰/۷۵، ۰/۵، ۰/۲۵، $x = ۰$ به نیم‌فلزهای معمولی و در غلظت $x = ۱$ به نیم‌فلز وایل تغییر فاز می‌دهند. در حالت $x = ۱$ با بررسی کل منطقه‌ی اول بریلوئن مشاهده شد که آلیاژ دارای ۱۶ جفت فرمیون وایل با کایرالیته ۱+ و ۱- است. مکان تمام این نقطه‌های وایل محاسبه و نشان داده شد که همگی دور از

مسیرهای پر تقارن منطقه اول بریلوئن هستند. همچنین طیف حالت‌های سطحی و کمان‌های فرمی آلیاژ با غلظت $x = 1$ روی سطح (۱۱۱) محاسبه و رسم شدند.

منابع

- [1] Hasan. M. Z, Kane. C. L, "Colloquium: topological insulators", *Reviews of Modern Physics*, **82**, 3045-3067, 2010.
- [2] Weyl. H, "Elektron und gravitation. I", *Zeitschrift für Physik*, **56**, 330-352, 1929.
- [3] Gross. F, "Relativistic quantum mechanics and field theory", *John Wiley & Sons*, 119-169, 2008.
- [4] Sun. Y, Wu. S.C, Yan. B, "Topological surface states and Fermi arcs of the noncentrosymmetric Weyl semimetals TaAs, TaP, NbAs, and NbP", *Physical Review B*, **92**, 335304-335328, 2015.
- [5] Xu. S.Y, Alidous. N. t, Belopolski. I, Yuan. Z, Bian. G, Chang. T. R, Zheng. H, Strocov. V.N, Sanchez. D.S, Chang. G, "Discovery of a Weyl fermion state with Fermi arcs in niobium arsenide", *Nature Physics*, **11**, 748-754, 2015.
- [6] Chang. G, Wieder. B.J, Schindler. F, Sanchez. D.S, Belopolski. I, Huang. S. M, Singh. B, Wu. D, Chang. T. R, Neupert. T, Xu. S. Y, Lin. H, Hasan. M.Z, "Topological quantum properties of chiral crystals", *Nature Materials*, **17**, 978-985, 2018.
- [7] Wang. X, Zhang. M, "Layered topological semimetals for spintronics, in: Spintronic 2D Materials", *Elsevier*, **1**, 273-298, 2020.
- [8] Yan. B, Felser. C, "Topological materials: Weyl semimetals", *Annual Review of Condensed Matter Physics*, **8**, 337-354, 2017.
- [9] Chang. G, Wieder. B.J, Schindler. F, Sanchez. D.S, Belopolski. I, Huang. S.M, Singh. B, Wu. D, Chang. T. R, Neupert. T, Xu. S.Y, Lin. H, Hasan. M.Z, "Topological quantum properties of chiral crystals", *Nature Materials*, **17**, 978-985, 2018.
- [10] Wan. X, Turner. A.M, Vishwanath. A, Savrasov. S.Y, "Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates", *Physical Review B*, **83**, 205101-205110, 2011.
- [11] Xu. G, Weng. H, Wang. Z, Dai. X, Fang. Z, "Chern semimetal and the quantized anomalous Hall effect in HgCr_2Se_4 ", *Physical Review Letters*, **107**, 186806-186824, 2011.
- [12] Weng. H, Fang. C, Fang. Z, Bernevig. B.A, Dai. X, "Weyl Semimetal Phase in Noncentrosymmetric Transition-Metal Monophosphides", *Physical Review X*, **5**, 011029-011039, 2015
- [13] Lv. B, Weng. H, Fu. B, Wang. X.P, Miao. H, Ma. J, Richard. P, Huang. X, Zhao. L, Chen. G, "Experimental discovery of Weyl semimetal TaAs", *Physical Review X*, **5**, 217601-217606, 2015.
- [14] Dai. T, Li. Y, Zhao. L, Zhao. X, Zhong. J, Meng. L, "Alloying Driven Multifold Fermion-to-Weyl Semimetal Transition in $\text{CoSi}_{1-x}\text{A}_x$ (A= Ge, Sn)", *Physica Status Solidi (RRL)-Rapid Research Letters*, **16**, 2200115-2200123, 2022.
- [15] Su. Y.H, Shi. W, Felser. C, Sun. Y, "Topological Weyl semimetals in $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ alloys", *Physical Review B*, **97**, 155431-155439, 2018.
- [16] Huang. H, Jin. K. H, Liu. F, "Alloy engineering of topological semimetal phase transition in $\text{MgTa}_{2-x}\text{Nb}_x\text{N}_3$ ", *Physical Review Letters*, **120**, 136403-136410, 2018.
- [17] Kong. X, Li. L, Peeters. F.M, "Topological Dirac semimetal phase in Ge_xSn_y alloys", *Applied Physics Letters*, **112**, 251601-251609, 2018.



- [18] Kumar. P, Nagpal. V, Patnaik. S, "Chiral anomaly induced negative magnetoresistance and weak anti-localization in Weyl semimetal $Bi_{0.97}Sb_{0.03}$ alloy", *Journal of Physics: Condensed Matter*, **34**, 055601-055608, 2021.
- [19] Blaha. P, Schwarz. K, Tran. F, Laskowski. R, Madsen. G.K, Marks. L.D, "WIEN2k: An APW+ lo program for calculating the properties of solids", *The Journal of Chemical Physics*, **152**, 074101-074113, 2020.
- [20] Hohenberg. P, Kohn. W, "Density functional theory (DFT)", *Physical Review*, **136**, 864-871, 1964.
- [21] Mostofi. A.A, Yates. J.R, Lee. Y.S, Souza. I, Vanderbilt. D, Marzari. N, "wannier90: A tool for obtaining maximally-localised Wannier functions", *Computer Physics Communications*, **178**, 685-699, 2008.
- [22] Marzari. N, Mostofi. A.A, Yates. J.R, Souza. I, Vanderbilt. D, "Maximally localized Wannier functions: Theory and applications", *Reviews of Modern Physics*, **84**, 1419-1476, 2012.
- [23] Wu. Q, Zhang. S, Song. H.F, Troyer. M, Soluyanov. A.A, "WannierTools: An open-source software package for novel topological materials", *Computer Physics Communications*, **224**, 405-416, 2018.
- [24] Perdew. J.P, Burke. K, Ernzerhof. M, "Generalized gradient approximation made simple", *Physical Review Letters*, **77**, 3865-3868, 1996.
- [25] Smidstrup. S, Stradi. D, Wellendorff. J, Khomyakov. P.A, Vej-Hansen. U.G, Lee M.E, Ghosh. T, Jónsson. E, Jónsson. H, Stokbro. K, "First-principles Green's-function method for surface calculations: A pseudopotential localized basis set approach", *Physical Review B*, **96**, 195309-195326, 2017.
- [26] Brown. T.E, LeMay. H.E, Bursten. B.E, Murphy. C.J, Woodward. P.M, "Chemistry", *The central science*, **15**, Pearson Prentice Hall, 2021.
- [27] Lomnytska. Y.F, Kuz'ma. Y.B, "The Nb-Sb system", *Journal of Alloys and Compounds*, **413**, 114-117, 2006.



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/>).

