

Heusler型 $X_2\text{RuPb}$ ($X = \text{Lu}, \text{Y}$)合金的反带结构和拓扑绝缘性*

王啸天¹⁾ 代学芳¹⁾ 贾红英¹⁾ 王立英¹⁾ 刘然¹⁾ 李勇¹⁾ 刘笑闯¹⁾
 张小明²⁾ 王文洪²⁾ 吴光恒²⁾ 刘国栋^{1)†}

1)(河北工业大学材料科学与工程学院, 天津 300130)

2)(中国科学院物理研究所, 磁学国家重点实验室, 北京 100190)

(2013年7月26日收到; 2013年10月22日收到修改稿)

采用第一性原理的计算方法, 在不同条件下对 Heusler 型 $X_2\text{RuPb}$ ($X = \text{Lu}, \text{Y}$) 体系的电子结构展开研究. 计算结果表明, 这些合金在适当晶格变形或掺杂条件下, 能够具有真正的拓扑绝缘体特性. 杂化作用和自旋-轨道耦合作用都对材料产生“反带”结构发挥作用. 但是针对不同成分所构成的材料, 它们各自所起作用的程度有所不同, 二者可以相辅相成. 利用替换掺杂和四角变形双重调控方式可以更理想地进行“反带”结构调控进而获得理想的拓扑绝缘体, 这对于材料的实际制备具有重要意义.

关键词: 拓扑绝缘体, 自旋-轨道耦合作用, Heusler 合金, 第一性原理计算

PACS: 31.15.Ar, 70.20.Be

DOI: 10.7498/aps.63.023101

1 引言

不同于传统意义上的金属和绝缘体, 拓扑绝缘体是近几年才发现的一种量子态新材料, 其体电子态是有能隙的绝缘体, 而表面则是无能隙的金属态. 拓扑绝缘体的表面金属态由体电子态的拓扑结构对称性决定, 其表面会产生由时间反演对称性保护的无能隙表面电子态^[1-4]. 由于拓扑绝缘体材料的独特性质, 使其在低功耗电子器件和容错量子计算等领域具有潜在的重要应用价值, 它有可能对未来的信息技术产生革命性影响.

人们在多种体系中都发现了拓扑绝缘体^[3-24], 其中 Heusler 合金就是存在大量潜在拓扑绝缘体的体系之一. 拓扑绝缘体在其能带结构上的一个直观反映是具有“反带”结构 (Γ_6 位于 Γ_8 能带下方). 由于 Heusler 合金受到立方对称性的保护, “反带”结

构中的 Γ_8 能带在费米能级处是零能隙, 不是真正意义上的拓扑绝缘体. Xiao 等^[15]对半 Heusler 合金 LaPtBi 沿 [001] 方向施加 5% 的单轴应变, 能够打破体材料的这种零能隙特性, 但是他们并没有做详尽的研究. 随后 Zhang 等^[19]专门针对 Heusler 合金中打破 Γ_8 对称性获得真正拓扑绝缘体进行了研究讨论, 他们指出单轴应变是获得真正拓扑绝缘体的一个有效方法. 但是, 这主要是针对在平衡晶格参数下已具有“反带”结构的 Heusler 合金而言的. 文献^[17]也简单地提及了如何诱使直接带隙的普通半导体出现“反带”结构. 这些研究都主要集中于如何获得真正拓扑绝缘体, 而关于诱导能带翻转的原因没有进行深入系统的分析. 2010 年, Chadov 等^[17]发现很多原本为正常带序的普通绝缘体的成分, 可以通过改变自旋-轨道耦合作用的方式, 即引入原子序数较大的元素进行替换来实现能带的翻转. 自旋-轨道耦合作用似乎能够很好地

* 国家自然科学基金 (批准号: 51271071, 11074160)、教育部新世纪优秀人才支持计划 (批准号: NCET-10-0126)、河北省应用基础研究计划重点基础研究项目 (批准号: 12965136D)、河北省高等学校科学技术研究青年基金 (批准号: Q2012008) 和河北省高校百名优秀创新人才支持计划资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: gdlu1978@126.com

描述能带翻转的现象和原因,而近期的文章中指出通过调节原子间的杂化强度或者标量相对论的影响也可以引起能带的翻转^[21,22],这些理论的提出使我们能对能带翻转现象达到更深层次的认知.但是这些理论均过于单一地强调某一种因素是诱导能带翻转的必要条件,而忽视了另一种因素.

本文对Heusler型 $X_2\text{RuPb}$ ($X = \text{Lu}, \text{Y}$)合金在不同晶格参数下的电子结构和掺杂对材料电子结构的影响开展研究,开发真正的拓扑绝缘体.并以此为基础,深入讨论自旋-轨道耦合作用和原子间杂化作用对能带翻转的影响.

2 计算方法

本文所有关于能带结构和电子态密度都采用WIEN2K^[25]计算程序软件包计算,其中平衡晶格常数通过能量优化得出. WIEN2K软件包采用全势能线性缀加平面波方法(full-potential linearized augmented planewave, FP-LAPW). 在计算中考虑了所有原子的自旋-轨道耦合作用,交换-相关势采用MBJLDA^[26]的方法来处理. MBJLDA是由修改后的贝克约翰逊(modified Becke-Johnson)交换势和局域密度近似(local density approximation, LDA)相关势所组成,其优势在于: MBJLDA与广义梯度近似(generalized gradient approximation)和局域密度近似相比具有更好的精确度,能更好地刻画费米能级附近能带细微的变化. 波矢积分采用四面体网格法,第一布里渊区 k 点网格选取了 $12 \times 12 \times 12$. 并选取 $R_{\text{mt}} \times K_{\text{max}} = 8$ (截断参数). 自洽计算收敛精度:电荷密度偏差的选取是 $< 0.01 \text{ me/a.u.}$;总能偏差不高于 0.1 mRy/原胞 .

3 结果与讨论

首先对Heusler型 $X_2\text{RuPb}$ ($X = \text{Lu}, \text{Y}$)合金的晶格参数进行了优化,给出了 $X_2\text{RuPb}$ ($X = \text{Lu}, \text{Y}$)合金总能与晶格参数的关系. 得到 Lu_2RuPb 合金的平衡晶格参数是 6.96 \AA , Y_2RuPb 合金的优化晶格参数为 7.08 \AA ,见图1. 其中 Y_2RuPb 的优化晶格参数和参考文献^[20]中报道的计算结果一致.

采用优化得到的平衡晶格参数,计算的 $X_2\text{RuPb}$ ($X = \text{Lu}, \text{Y}$)合金能带结构,如图2所示. 在计算中,考虑了Lu, Y, Ru, Pb元素的自旋-轨道耦合作用. 从图中可以看到,在 Y_2RuPb 合

金的能带结构中,价带顶和导带底都位于 Γ 点,并且费米能级落在一个宽为 0.17 eV 的能隙中. 表明材料是一种直接带隙半导体,这与前人的报道一致^[23,24]. 通过对比 Lu_2RuPb 和 Y_2RuPb 的能带结构可以清晰地看到, Lu_2RuPb 合金在费米能级处具有“反带”结构:二重简并的 Γ_6 能带位于费米能级和 Γ_8 能带的下方. Γ_8 能带为四重简并,分成两组分别位于费米能级以上和费米能级以下,这与已报道的具有拓扑绝缘性的Heusler合金的电子能带结构是相同的^[20],因此可以说明 Lu_2RuPb 可能是一种新的拓扑绝缘体. 而 Y_2RuPb 则具有普通绝缘体的能带结构: Γ_8 能带在 Γ_6 能带下方并没有发生翻转.

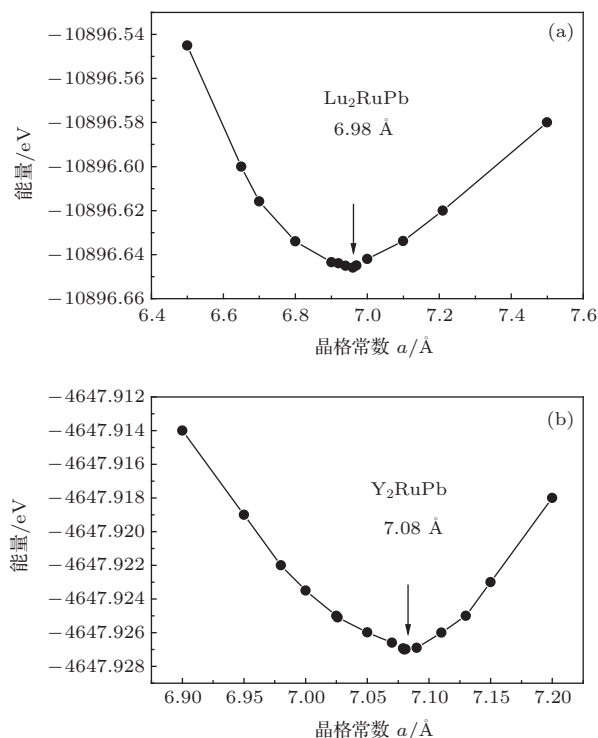


图1 Heusler型 $X_2\text{RuPb}$ ($X = \text{Lu}, \text{Y}$)合金的能量优化曲线

与所有已发现的具有Heusler或半Heusler结构的拓扑绝缘体一样, Lu_2RuPb 合金的费米能级并不是位于一个真正的能隙中,而是位于一个零能隙中. 这也就意味着在合金的体材料中并未实现真正的绝缘性. 张小明等^[18]和Xiao等^[15]指出,这是由于 Γ_8 能带受到立方对称性保护的结果. 对材料进行适当的四角变形(体积保持不变,进行单轴拉伸或者压缩),从而破坏材料的立方对称性,能够使位于费米能级以上和以下的两组简并 Γ_8 能带之间产生一定宽度的能隙,从而获得具有一定能隙宽度的拓扑绝缘体.

图3给出了在体积不变的条件下沿[001]方向实施单轴压缩或拉伸(四角变形后) Lu₂RuPb合金的能带结构图。图中-2, -4, -6, -8分别表示对其施加2%, 4%, 6%, 8%的压缩应变, +2, +4, +6, +8则表示施加相应大小的拉伸应变。从图3中可以看到, 在我们研究的晶格变化范围内通过发生四角变形, 材料的能带结构与原来立方Lu₂RuPb合金相比, Γ_6 能带始终位于 Γ_8 能带的下方(“反带”结构特性并未发生改变)。然而, 随着应变的施加, 四角变形打破了原有晶格的立方对称性, 使得其对称性降低, 从而在费米能级处原来相互连接在一起的两组 Γ_8 能带逐渐打开形成能隙。尤其在施加2%—4%的压缩应变时, 费米能级正好落在两组 Γ_8 能带打开的能隙中。这表明, 此时Lu₂RuPb合金是一个真正的拓扑绝缘体, 这一点与LaPtBi的情况相类似^[19]。进一步增加压缩应变后, 位于 Γ_8 两组能带间的能隙随着压缩应变的增加而增大, 而费米能级逐渐向靠近价带的低能区域移动, 并与价带相交叉, 导致拓扑绝缘性丧失。另外, 我们发现在施加拉伸应变时(见图3(e)—(h)), 虽然 Γ_8 的两组能带间的能隙能够打开, 但由于费米能级下移, 导致价带与费米能级相交, 也使得拓扑绝缘特性丧失。这是由于在压缩或者拉伸晶格的时候, 材料中原子之间距离发生了变化, 进而影响到原子间的杂化作用, 这在一定程度上影响费米能级的位置, 造成 Γ_8 的两组能带间能隙虽然打开了, 但是费米能级并未落在能隙之中的情况^[18]。

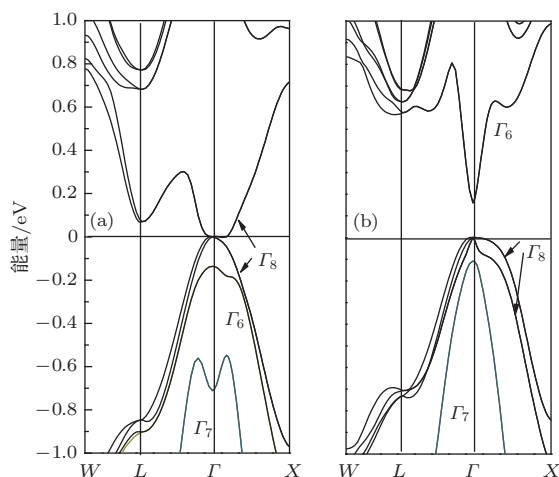


图2 Heusler合金Lu₂RuPb (a)和Y₂RuPb (b)在平衡晶格参数下的能带结构

Y₂RuPb合金在平衡晶格参数下表现出普通直接带隙绝缘体的特性, 这类直接带隙绝缘体经过一定的调控可能出现拓扑绝缘特性(在能带结构上

的直观反映是“反带”结构出现)。通过晶格变化或元素掺杂是改变此类绝缘体电子结构, 获得拓扑绝缘体的一个有效方法^[17,20]。

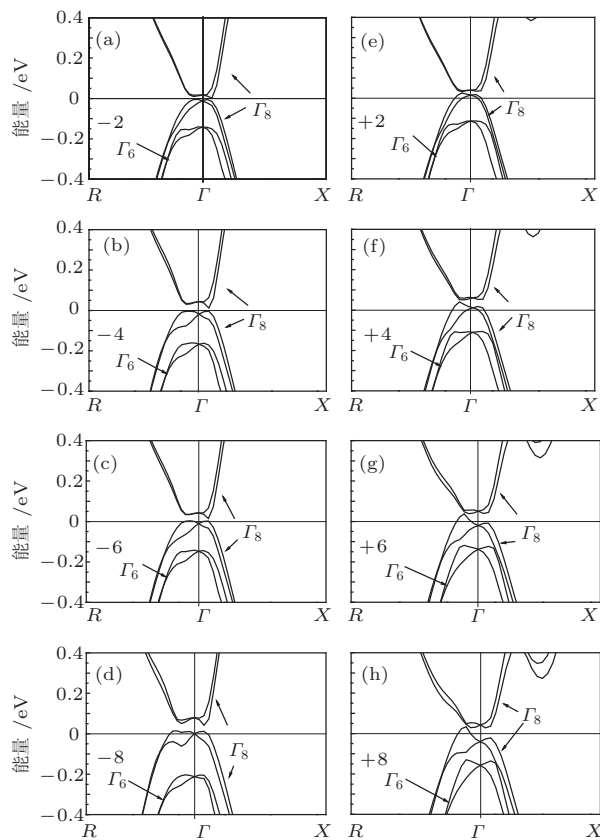


图3 对Heusler合金Lu₂RuPb沿[001]方向施加不同的等体积单轴压缩应变和拉伸应变的能带结构

我们首先研究了等轴应变对Y₂RuPb合金能带结构的影响, 图4为计算得出的能带结构图。在施加10%以内等轴压缩应变时, 合金能带结构变化不大, 并未出现能够反映拓扑绝缘特性的“反带”结构或者说施加等轴压缩应变没有能够诱导 Γ_6 和 Γ_8 之间的能带翻转。与此相反, 可以看到等轴拉伸应变使得 Γ_6 能带翻转到 Γ_8 能带下方, 诱导合金中产生了“反带”结构, 合金具有了拓扑绝缘性质(见图4(e)—(h))。进一步还发现随着等轴拉伸应变的增大, 虽然反带结构依然存在, 但是其价带形状更加不规则: 在 Γ 点之外, Γ_8 能带与费米能级有了明显的交叉, 导致拓扑绝缘特性丧失。

为了明确导致能带翻转的深层次原因, 在图5中比较了平衡晶格参数下和施加2%等轴拉伸应变下Y₂RuPb合金的态密度图谱。从图中可以看到, 由于晶格参数的增大, 使得电子的巡游性降低, 局域程度升高, 原子间杂化作用减弱。如此, 位于费米能级上方的能带向低能方向移动, 而费米

能级下方的能带则向高能方向移动. 也就是说, Γ_6 能带的能量在降低而 Γ_8 能带则在升高, 能带翻转强度(通常用 $E_{BIS} = E_{\Gamma_6} - E_{\Gamma_8}$ 表示) 逐渐加强, 最终在一定程度晶格膨胀下, Γ_6 能带和 Γ_8 能带出现翻转, 材料中形成“反带”结构[20].

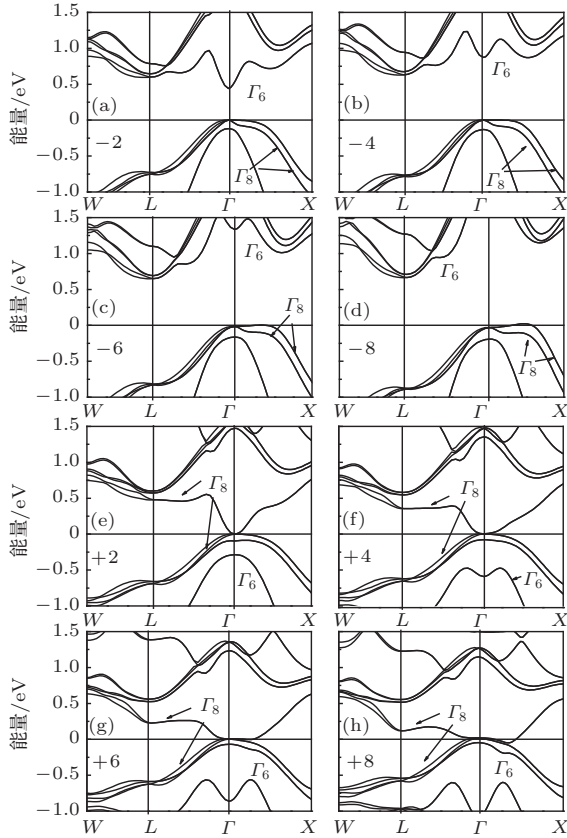


图4 等轴压缩应变和等轴拉伸应变下Heusler合金 Y_2RuPb 的能带结构 (-2, -4, -6, -8 表示施加 2%, 4%, 6%, 8% 的等轴压缩应变; +2, +4, +6, +8 分别表示对其施加相应大小的等轴拉伸应变)

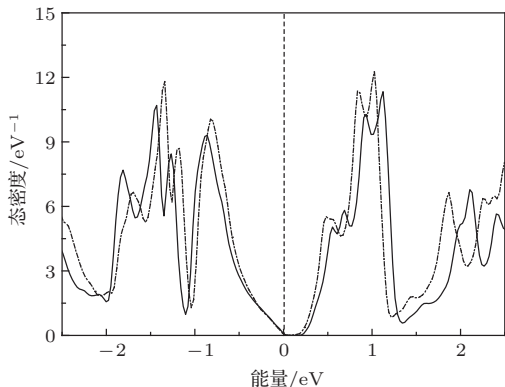


图5 Y_2RuPb 合金在平衡晶格参数(实线)和施加 2% 等轴拉伸应变后(虚线)的总带密度

为了进一步说明晶格常数变化所引起的杂化作用改变对能带翻转的影响, 我们对 Lu_2RuPb 合

金进行了等轴应变后电子结构变化的研究. 如上所述, 在平衡晶格参数下 Lu_2RuPb 合金具有“反带”结构. 图 6 给出了几个典型的在等轴应变作用下 Lu_2RuPb 合金的电子能带结构. 我们发现当施加的等轴压缩应变小于 2% 时, Lu_2RuPb 合金还保持着原有的“反带”结构. 但是, Γ_8 能带和 Γ_6 能带在能量分布上都产生了一定的变化. 当施加等轴压缩应变大于 (等于) 2% 时, “反带”结构则转化为普通绝缘体的能带特征, 并且随着压缩应变的增大, Γ_6 能带能量明显升高. 而施加等轴拉伸应变并不能使 Lu_2RuPb 合金变成普通绝缘体, 而是保持了原本的“反带”结构, 但是 Γ_8 能带形状发生剧烈变化, Γ 点之外的其他位置与费米能级交叉, 材料的拓扑绝缘性将丧失.

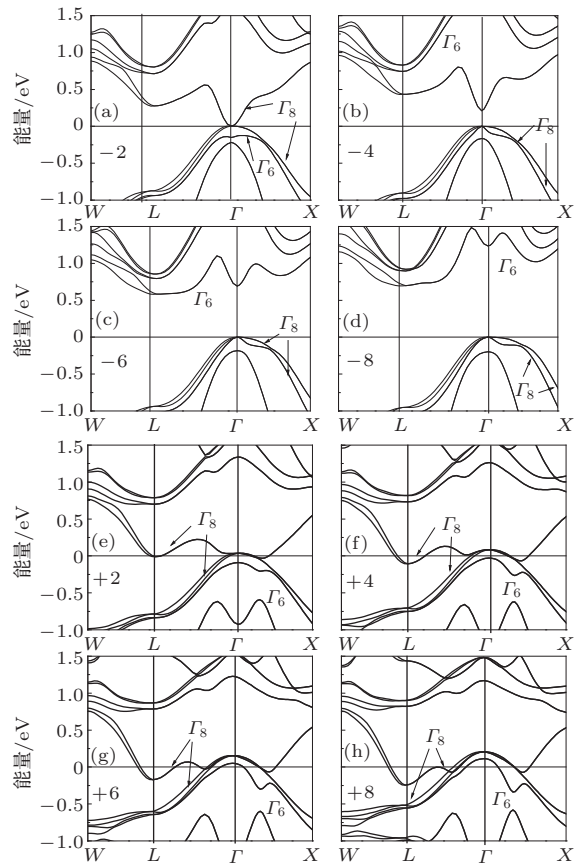


图6 Heusler合金 Lu_2RuPb 在施加等轴压缩应变和的等轴拉伸应变下典型的能带结构 (-2, -4, -6, -8 分别表示对其施加 2%, 4%, 6%, 8% 的等轴压缩应变, +2, +4, +6, +8 则表示施加相应大小的等轴拉伸应变)

通过上述对 Y_2RuPb 和 Lu_2RuPb 合金在施加等轴应变后电子结构变化的分析, 可以看出, 在这两种合金中晶格参数的变化对材料拓扑绝缘性转变有着举足轻重的影响. 施加等轴拉伸应变时往往有利于拓扑“反带”结构的形成, 而施加等轴压缩

应变往往促使“反带”结构向正常带序过渡。而自旋-轨道耦合作用则对此显得十分微弱,在其单独作用下并不能导致“反带”和正常带序之间的相互转换。这些表明“反带”结构的形成是材料中原子之间的杂化作用所主导的。这与Zhu等^[22]的报道一致,他们提出“反带”结构的形成由晶格变化所引起的杂化作用独自完成,可以完全忽略自旋-轨道耦合作用。然而,应该注意,自旋-轨道耦合作用诱导“反带”结构的形成已经在很多报道中被证实^[2,6]。Chadov等^[17]指出,在恒定晶格常数下,单独缩放自旋-轨道耦合强度的比例可以诱导普通绝缘体向拓扑绝缘体转变^[17]。

为了进一步论证自旋-轨道耦合作用在 X_2RuPb ($X = Lu, Y$)合金中对“反带”结构形成的作用,采用同族元素替换的方式来增强自旋-轨道耦合作用。我们知道,原子序数越大,其自旋轨道耦合作用越强。以 Y_2RuPb 合金为目标,利用同族重元素Os替换Ru来进行研究。其典型替换掺杂后合金的能带结构见图7。上面已经给出在平衡晶格参数下, Y_2RuPb 合金不具有“反带”结构。从图7中可以看到,当Os替换25% Ru(原子比)以上时, Γ_6 能带无一例外地都翻转到了 Γ_8 能带的下方,材料具有了“反带”结构。将 Y_2RuPb 和 $Y_2Ru_{0.75}Os_{0.25}Pb$ 的总态密度进行了对比,如图8所示。从图中可以发现,虽然整体原子间的杂化作用有所变化,但主要的变化发生在远离费米能级的低能区域,掺杂前后在费米能级附近的电子态密度并没有发生太大的变化,因此,Os替换中引起的杂化作用变化对能带翻转所起的作用并不明显。如此,产生“反带”现象的主导原因只能是由于原子序数较大的Os元素带来的更强的自旋-轨道耦合。另外需要提及的是,当合金中50%的Ru被Os元素替换时(见图7(c)),“反带”结构中分别位于费米能级上下两侧的两组 Γ_8 能带打开形成带隙,而替换25%和75%的Os元素时均未有能隙产生。这一类似现象也在半Heusler型拓扑绝缘体 $XPtBi$ ($X = Sc, La$)系列相互掺杂的研究中观察到^[18]。其产生原因是在25%,75%的Os掺杂后,材料的空间群由原来的225($Fm\bar{3}m$)变为215($P43m$),对称性稍有下降;而替换50%的Os时生成结构的对称性为115($P4m2$),立方对称性遭到破坏的程度较为强烈,导致了能隙的打开,这也与文献^[18]提出的 Γ_8 能带简并度受立方对称性保护的结论相一致^[18]。

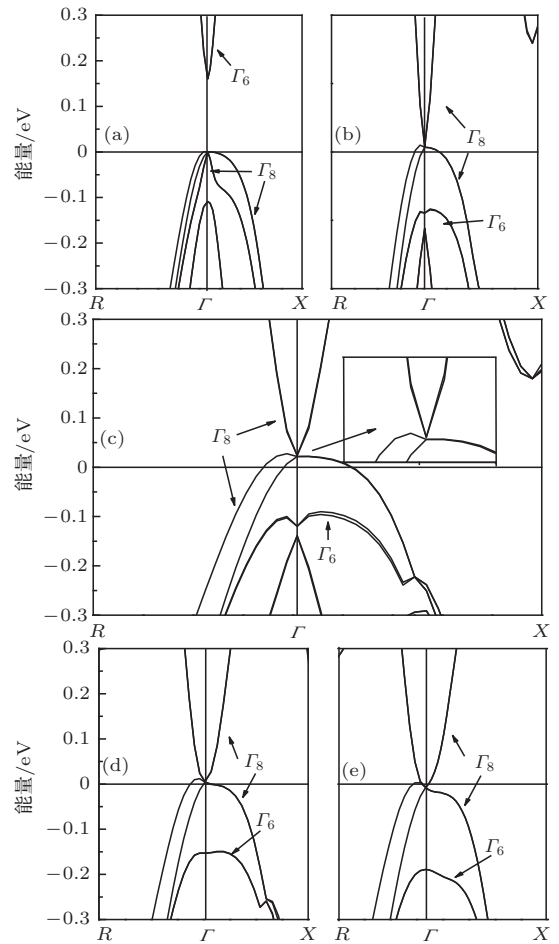


图7 (a)–(e) 对用Os元素Heusler合金 Y_2RuPb 逐渐替换Ru元素得到的各种成分的能带结构 (a) Y_2RuPb ; (b) $Y_2Ru_{0.75}Os_{0.25}Pb$; (c) $Y_2Ru_{0.5}Os_{0.5}Pb$; (d) $Y_2Ru_{0.25}Os_{0.75}Pb$ 和(e) Y_2OsPb (图(c)中小图为 $Y_2Ru_{0.5}Os_{0.5}Pb$ 成分的 Γ_8 能带在费米能级附近的局部放大)

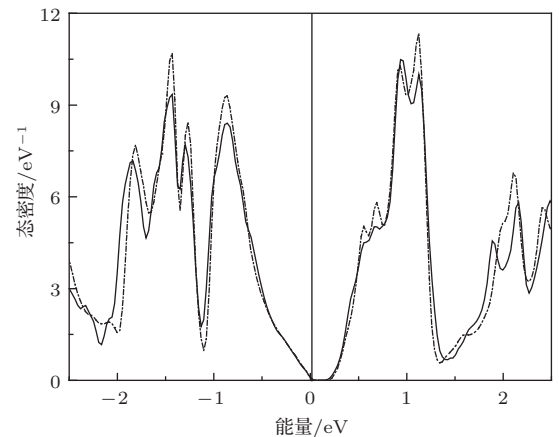


图8 为对Heusler合金 Y_2RuPb 用25% Os元素替换Ru元素(实线)和未对Heusler合金 Y_2RuPb 施加任何化学替代(虚线)的总带密度

进一步,通过上述结构还发现,单独施加等轴压缩应变或者单独进行Os替换掺杂 Y_2RuPb 合金,虽然都能够诱导 Γ_6 - Γ_8 之间能带翻转,出现“反

带”结构,然而,在这些条件下,费米能级的位置却没有能够处于打开的带隙之间,也就是说并没有真正实现材料的拓扑绝缘性转变.因而,我们考虑替换掺杂和晶格四角变形共同影响材料电子结构的变化情况.图9给出了25% Os 元素替换后, $Y_2Ru_{0.75}Os_{0.25}Pb$ 合金在沿 [001] 方向施加 2% 压缩应变后材料的能带结构.从图中可以清晰地看到,费米能级位于翻转的 Γ_8 能带所打开的导带和价带中间.也就是说在替换掺杂和单轴应变双重作用下,无论是对 Y_2RuPb 合金的能带翻转,还是体能隙和费米能级的位置都得到了很好的调节,最终成功实现了普通向“反带”绝缘体的转化.需要提及的是,在材料实际制备过程中,等轴拉伸或者等轴压缩往往难以实现.然而,等体积四角变形和少量替换掺杂则是相对容易实现的,这在材料的实际制备中具有重要意义.

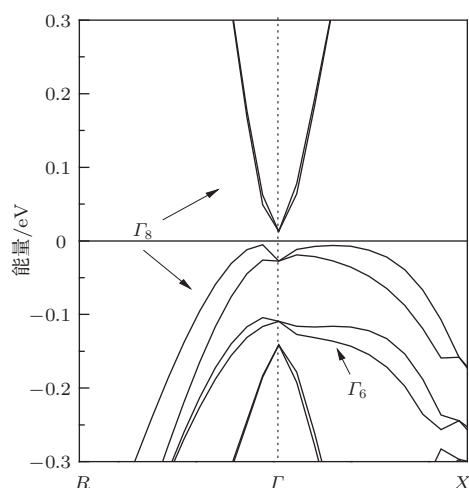


图9 $Y_2Ru_{0.75}Os_{0.25}Pb$ 合金沿 [001] 方向施加 2% 压缩应变后的能带结构

4 结 论

通过第一性原理计算的方法,我们发现在平衡晶格参数下,Heusler 结构的 Lu_2RuPb 合金在费米能级附近具有“反带”结构.在晶格发生四角畸变后(施加 2%—4% 的压缩应变时),费米能级正好落在 Γ_8 两组能带打开的能隙中,成为真正的拓扑绝缘体.另外,还发现通过 Os 替换掺杂和四角变形双重作用,能够诱导直接带隙半导体 Y_2RuPb 合金具有真正的拓扑绝缘性.通过对“反带”结构形成原因的分析,我们得出结论:通过改变合金中原子间的杂化作用(变化晶格参数)或通过掺杂增强原子的自旋-轨道耦合作用都能够诱导反带结构的产生;

杂化作用和自旋-轨道耦合都在材料产生“反带”结构上发挥作用,只不过针对不同成分所构成的材料,它们各自所起到的作用程度有所不同,二者可以相辅相成,这在实际应用中非常有利;不能单一地强调哪个因素是诱导能带翻转的必要条件,而忽视另外一个因素;在材料中通过掺杂改变自旋-轨道耦合,从而能够减小畸变量,也能够调整费米面位置从而实现真正的拓扑绝缘体;四角畸变是制备薄膜中常见的现象,通过掺杂协调畸变后能带翻转和调整费米面是一个好的途径.利用替换掺杂和四角变形双重调控方式可以更理想地进行能带调控进而获得理想的拓扑绝缘体,这对于材料的实际制备也具有重要意义.

参考文献

- [1] Zhang H J, Liu C Q, Qi X L, Dai X, Fang Z, Zhang S C 2009 *Nature Phys.* **5** 438
- [2] Qi X L, Zhang S C 2010 *Phys. Today* **63** 33
- [3] Moore J E 2010 *Nature* **464** 194
- [4] Hasan M Z, Kane C L 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 3045
- [5] Hsieh D, Qian D, Wray L, Xia Y, Hor Y S, Cava R J, Hasan M J 2008 *Nature* **452** 970
- [6] Zhang H J, Liu C X, Qi X L, Dai X, Fang Z, Zhang S C 2009 *Nature Phys.* **5** 438
- [7] Xia Y, Qian D, Hsieh D, Wray L, Pal A, Lin H, Bansil A, Grauer D, Hor Y S, Cava R J, Hasan M Z 2009 *Nature Phys.* **5** 398
- [8] Chen Y L, Analytis J G, Chu J H, Liu Z K, Mo S K, Qi X L, Zhang H J, Lu D H, Dai X, Fang Z, Zhang S C, Fisher I R, Hussain R, Shen Z X 2009 *Science* **325** 178
- [9] Moore J E, Balents L 2007 *Phys. Rev. B* **75** 121306
- [10] Roy R 2009 *Phys. Rev. B* **79** 195322
- [11] Al-Sawai W, Lin H, Markiewicz R S, Wray L A, Xia Y, Xu S Y, Hasan M Z, Bansil A 2010 *Phys. Rev. B* **82** 125208
- [12] Kuroda K, Kimura A, Eremnev S V, Ueda Y, Tanijuchi M 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 14680
- [13] Feng W X, Xiao D, Ding J, Yao Y G 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 016402
- [14] Sun Y, Chen X Q, Li D Z, Cesare F, Yunoki S, Li Y Y, Sun Z F 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 016402
- [15] Xiao D, Yao Y G, Feng W X, Zhu W G, Chen X Q, Zhang Z Y 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 096404
- [16] Lin H, Wray L A, Xia Y, Xu S, Jia S, Cava R J, Bansil A, Hasan M Z 2010 *Nat. Mater.* **9** 546
- [17] Chadov S, Qi X L, Kubler J, Fecher G H, Felser C, Zhang S C 2010 *Nat. Mater.* **9** 541
- [18] Zhang X M, Liu G D, Du Y, Liu E K, Wang W H, Wu G H, Liu Z Y 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 123101 (in Chinese)[张小明, 刘国栋, 杜音, 刘恩克, 王文洪, 吴光恒, 柳宗元 2012 物理学报 **61** 123101]

- [19] Zhang X M, Wang W H, Liu E K, Liu G D, Liu Z Y, Wu G H 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 071901
- [20] Zhang X M, Liu E K, Liu Z Y, Liu G D, Wu G H, Wang W H 2013 *Comput. Mater. Sci.* **70** 145
- [21] Zhu Z Y, Cheng Y C, Schwingenschlöggl U 2012 *Phys. Rev. B* **85** 235401
- [22] Zhu Z Y, Cheng Y C, Schwingenschlöggl U 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 266805
- [23] Li Q Q, Hao Q Y, Li Y, Liu G D 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 017103 (in Chinese) [李倩倩, 郝秋燕, 李英, 刘国栋 2013 物理学报 **62** 017103]
- [24] Chen D, Xiao H Y, Jia W, Chen H, Zhou H G, Li Y, Ding K N, Zhang Y F 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 127103 (in Chinese) [陈懂, 肖河阳, 加伟, 陈虹, 周和根, 李奕, 丁开宁, 章永凡 2012 物理学报 **61** 127103]
- [25] Blaha P, Schwarz K, Madsen G, Kvaniscka D, Luitz J 2011 *WIEN2k An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties* (Vienna, Austria: Vienna University of Technology)
- [26] Feng W X, Zhu W G, Weitering H H, Malcolm Stocks G, Yao Y G, Xiao D 2012 *Phys. Rev. B* **85** 195114

The band inversion and topological insulating state of Heusler alloys: $X_2\text{RuPb}$ ($X = \text{Lu}, \text{Y}$)^{*}

Wang Xiao-Tian¹⁾ Dai Xue-Fang¹⁾ Jia Hong-Ying¹⁾ Wang Li-Ying¹⁾ Liu Ran¹⁾
 Li Yong¹⁾ Liu Xiao-Chuang¹⁾ Zhang Xiao-Ming²⁾ Wang Wen-Hong²⁾
 Wu Guang-Heng²⁾ Liu Guo-Dong^{1)†}

1) (School of Material Sciences and Engineering, Hebei University of Technology, Tianjin 300130, China)

2) (Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

(Received 26 July 2013; revised manuscript received 22 October 2013)

Abstract

The electronic structures of Heusler alloys $X_2\text{RuPb}$ ($X = \text{Lu}, \text{Y}$) under different conditions are investigated using the first-principles calculations. It is found that the alloys become the real topological insulators under a proper lattice deformation or doping. The spin-orbital coupling and the interatomic hybridization effect reinforce each other to perform the band inversion in $X_2\text{RuPb}$ ($X = \text{Lu}, \text{Y}$) compounds and they play roles to different degrees for the materials with different compositions. The ideal topological insulators are easier to obtain using simultaneously lattice deformation and doping artifices, which is available in practical material preparation.

Keywords: topological insulator, spin-orbit coupling, heusler compound, first-principles calculations

PACS: 31.15.Ar, 70.20.Be

DOI: 10.7498/aps.63.023101

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51271071, 11074160), the Ministry of Education Program for New Century Excellent Talents, China (Grant No. NCET-10-0126), the Key Basic Research Program of Applied Basic Research Program of Hebei Province, China (Grant No. 12965136D), Hebei Province Higher Education Science and Technology Research Foundation for Youth Scholars, China (Grant No. Q2012008) and 100 Excellent Innovative Talents Program of Hebei Province, China.

† Corresponding author. E-mail: gdlu1978@126.com