

# 半Heusler型 $\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}$ ( $0 \leq x \leq 1$ )合金 能带反转结构的研究\*

王啸天<sup>1)2)</sup> 代学芳<sup>2)</sup> 贾红英<sup>2)</sup> 王立英<sup>2)</sup> 张小明<sup>3)</sup> 崔玉亭<sup>1)</sup>  
王文洪<sup>3)</sup> 吴光恒<sup>3)</sup> 刘国栋<sup>1)2)†</sup>

1) (重庆师范大学物理与电子工程学院, 重庆 400044)

2) (河北工业大学材料科学与工程学院, 天津 300130)

3) (中国科学院物理研究所, 磁学国家重点实验室, 北京 100190)

(2013年10月30日收到; 2013年11月27日收到修改稿)

采用第一性原理的计算方法, 研究了全部由轻元素构成的半Heusler型 $\text{NaAlGe}$ 合金中, 掺杂元素对合金拓扑能带结构的影响. 发现利用同族的Cs元素掺杂替换Na元素, 能够诱导 $\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}$ 合金的能带结构由原本正常带序( $0 \leq x < 0.125$ )转换为反转带序( $0.125 \leq x \leq 1$ ). 基于对这一现象的深入讨论, 我们提出在几乎没有自旋-轨道耦合作用的材料中, 掺杂元素(Cs)是通过其离子半径的不同, 进而影响晶格参数变化导致另外两种近邻原子间杂化作用发生变化, 来诱导拓扑反带结构形成的.

**关键词:** 第一性原理计算, 拓扑绝缘体, 半Heusler合金, 电子结构

**PACS:** 31.15.Ar, 70.20.Be

**DOI:** 10.7498/aps.63.053103

## 1 引言

拓扑绝缘体是由2006年提出的一种量子态新材料, 这类材料不同于传统意义上的金属和绝缘体, 它的体电子态是有能隙的绝缘体(或半导体), 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的表面电子态<sup>[1-4]</sup>. 正是由于拓扑绝缘体的这种独特性质使其在低能耗电子器件和容错量子计算等领域具有巨大的潜在应用价值.

继第一次提出拓扑绝缘体后, 时间反演不变的拓扑绝缘体从二维(2D)推广到三维体系(3D)<sup>[5-7]</sup>, 人们在多种材料体系中不断发现新的三维拓扑绝缘体, 如辉砷铋矿结构的 $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 和S-

$\text{b}_2\text{Te}_3$ 材料<sup>[1]</sup>; 许多具有18个价电子的半Heusler合金<sup>[8-11]</sup>; 黄铜矿家族化合物I-III-VI<sub>2</sub> (I = Cu, Ag, Au; III = In, Tl; VI = S, Se, Te), II-IV-V<sub>2</sub> (II = Zn, Cd, Hg; IV = Ge, Sn; V = As, Sb)<sup>[12]</sup>; 具有分层蜂窝晶格的化合物 $\text{Na}_2\text{IrO}_3$ <sup>[13]</sup>; 钙钛矿化合物 $\text{YBiO}_3$ 以及反钙钛矿型氮化物(( $\text{Ga}_3\text{N}$ )Bi和( $\text{Sr}_3\text{N}$ )Bi)<sup>[14]</sup>等. 过去人们一直认为自旋-轨道耦合作用是驱动能带反转进而形成拓扑绝缘体的决定因素, 只有重元素中才具有强的自旋-轨道耦合作用<sup>[1,2]</sup>. 因而, 到目前为止人们探索新的拓扑绝缘体大都围绕在由重金属元素参与组成的材料之中. 最近, 朱志勇等<sup>[15,16]</sup>报道仅含有轻元素的GaS和GaSe可以通过施加应力的方式形成拓扑反带结构, 他们认为自旋-轨道耦合作用不是驱动能带反转(或者说产生拓扑绝缘性)的主要原因. 然而, 在他们的工作中并没详细给出应变诱导能带反

\* 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: 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)、河北省高校百名优秀创新人才支持计划和河南省科技攻关计划项目(批准号: 102102210037)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: [gdlu1978@126.com](mailto:gdlu1978@126.com)

转的实质原因.

Chadov等<sup>[8]</sup>曾报道,在重元素组成的直接带隙半导体中,为了使原本正常带序结构转变成反带结构,或者说使原本的平凡绝缘体,转变成具有拓扑性质的非平凡绝缘体,通常采用引入了原子序数较大的元素来替换相对较轻的元素,从而增强了系统的自旋-轨道耦合强度来实现其带序的转换<sup>[8,17-22]</sup>.然而,在轻元素组成的材料中,自旋-轨道耦合效应非常微弱.我们的前期工作表明,不计入自旋-轨道耦合作用,由同族不同元素参与形成的合金能够分别展现平凡绝缘体和非平凡绝缘体特性.这就给了我们一个提示,在轻元素组成的直接带隙半导体中,也应该能够通过同族元素掺杂的方式来诱导能带带序的转变.然而关于这方面的研究和探讨还比较少,特别是由于轻元素的自旋-轨道耦合作用几乎可以忽略不计,那么较重掺杂元素到底在合金中对能带反转起到怎样的作用?到目前为止,这一问题还未见报道.

在本文中,我们以具有8个价电子的半Heusler合金NaAlGe为研究目标,对其中的Na元素用同族Cs元素进行掺杂替换,研究其电子结构的变化,以期开发轻元素中潜在的拓扑绝缘体候选材料,并深入研究在轻元素组成的不计自旋-轨道耦合作用的合金中,掺杂对材料电子结构的影响以及驱动能带反转的真正原因,这对于今后新型拓扑绝缘体的探索和开发都有着重要意义.

## 2 计算方法

本工作中所有成分的能带结构和电子态密度都采用Materials Studio<sup>[23]</sup>软件自带的CASTEP模块,CASTEP(cambridge sequential total energy package)是一个基于密度泛函方法的第一性原理计算程序,交换关联泛函采用的是Perdew-Burke-Ernzerhof(PBE)广义梯度近似(GGA)<sup>[24,25]</sup>,核心电子和价电子之间的作用采用平面波超软赝势描述.计算使用统一的参数设置,在第一布里渊区 $k$ 点网格取 $8 \times 8 \times 8$ ,为使计算结果更加精确,其中本系列合金的平衡晶格参数均是通过能量优化得出.

半Heusler结构NaAlGe合金的结构原型是MgAgAs结构,空间群为F-43m(216),其原子在Wyckoff单胞中的占位:4a-Na(0,0,0),4b-Al(1/4,1/4,1/4),4c-Ge(1/2,1/2,1/2),文中计算掺杂方式是采用超晶胞方法.其超晶胞及掺杂原子占位如

图1所示,取 $1 \times 2 \times 1$ (24个原子)超晶胞体系,每个超晶胞包含8个Na,8个Al和8个Ge原子.掺杂时,分别由Cs原子逐步替换Na原子来实现掺杂.

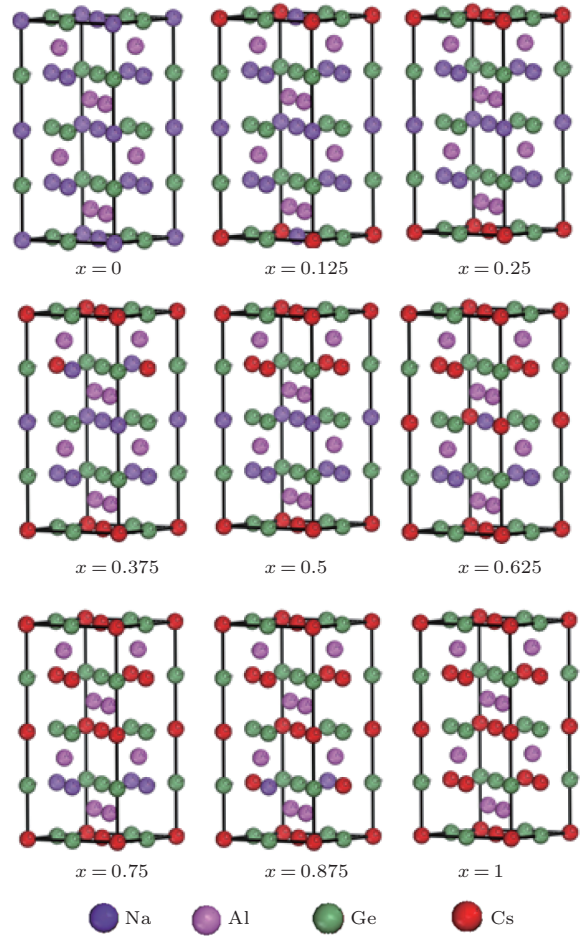


图1 (网刊彩色)  $\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}$  合金, Cs 掺杂量为  $x = 0, 0.125, 0.25, 0.375, 0.5, 0.625, 0.75, 0.875, 1$  时的超晶胞模型和元素掺杂位置

## 3 结果与讨论

我们通过晶格优化得到 $\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}$ 系列合金的平衡晶格参数.其中作为典型例子,我们给出了( $x = 0, 0.125, 0.5, 1$ )合金在其平衡晶格参数下,通过计算得到的能带结构图谱,如图2所示.在计算中我们未考虑自旋-轨道耦合作用(spin-orbit coupling).

从图2我们可以发现,当 $0 \leq x < 0.125$ 时,在其合金的能带结构中,价带顶和导带底都位于 $\Gamma$ 点,费米能级落在一个能隙之中,表明材料是一个直接带隙半导体.另外,我们也能够看到 $\Gamma_8$ 能带在 $\Gamma_6$ 能带下方并没有发生反转,能带顺序为平庸绝缘体带序,并没有形成拓扑反带结构.与 $\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}$ 合金( $0 \leq x < 0.125$ )的能

带结构不同, 从图 2(b), (c) 和 (d), 我们可以清晰看到,  $\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}$  ( $0.125 \leq x \leq 1$ ) 合金在费米能级处具有反带结构: 即  $\Gamma_6$  能带位于费米能级和  $\Gamma_8$  能带的下方, 并且导带底和价带顶 (除  $\Gamma$  点) 都没有发生交叠, 这表明能带翻转在布里渊区里仅发生了一次, 这与人们报道的具有拓扑绝缘性质的半 Heusler 合金的电子能带结构是相同的 [8,9]. 这说明  $\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}$  ( $0.125 \leq x \leq 1$ ) 合金是一系列新的拓扑绝缘体候选材料. 能带反转强度  $E_{\text{BIS}} = E\Gamma_6 - E\Gamma_8$  ( $\Gamma_6$  能带底能量减去  $\Gamma_8$  能带顶能量) 是通常用来展示材料是否具有拓扑绝缘性 (即反带结构) 的一个简洁表征. 如果材料的能

带反转强度大于 0 (即  $E_{\text{BIS}} > 0$ ), 表明材料的能带顺序为平庸绝缘体的带序. 反之, 如果其小于 0, 则证明材料在费米能级处具有反带结构, 有望成为拓扑绝缘体的候选材料. 图 3(a) 给出了  $E_{\text{BIS}}$  随着 Cs 含量 ( $x$ ) 的变化趋势. 由图中我们可以看到  $\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}$  合金的能带翻转强度随着 Cs 含量 ( $x$ ) 的增加, 呈现不断下降的趋势, 至  $x = 0.125$  为零点, 继而  $\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}$  合金 ( $0.125 < x \leq 1$ ) 的能带翻转强度成为负值, 且随着 Cs 含量的增加, 负值进一步加大. 这表明随着 Cs 含量的增加, 材料发生了由平庸绝缘体向拓扑非平庸绝缘体的转变, 且随着 Cs 含量的增加, 其拓扑绝缘特性越来越稳定.

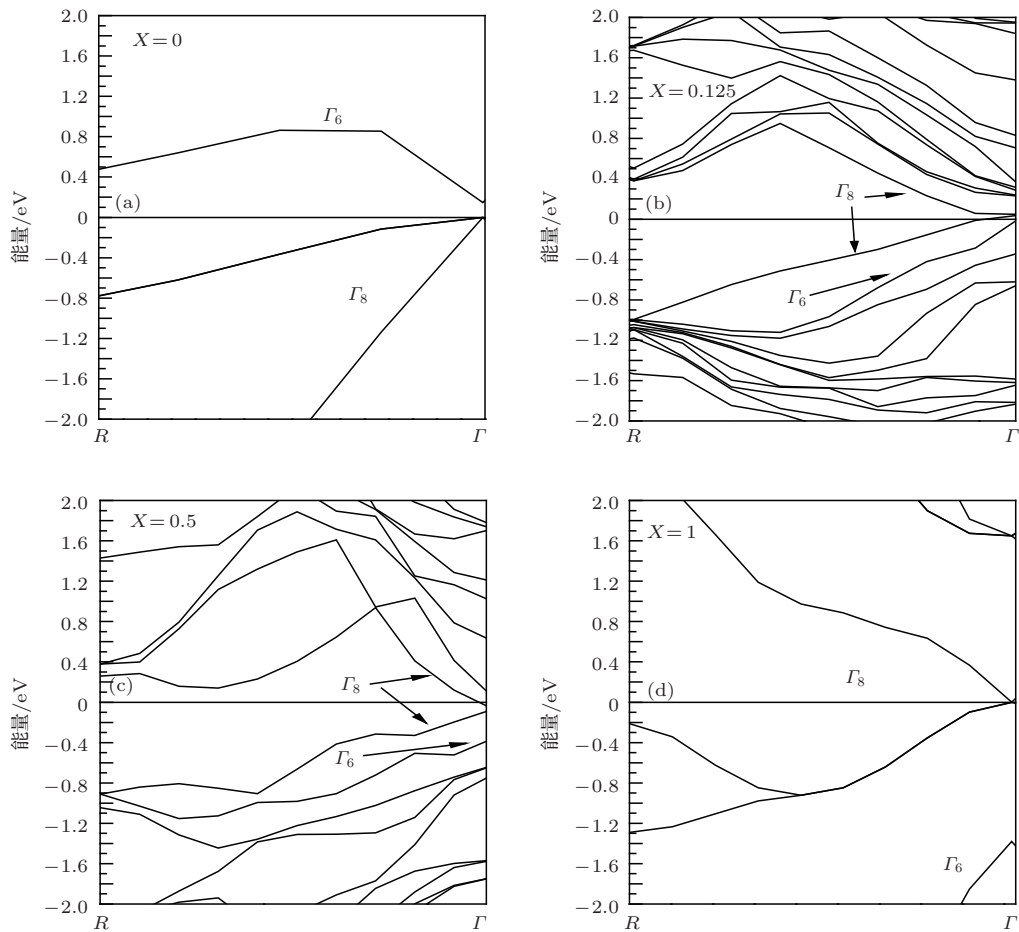


图 2  $\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}$  ( $x = 0, 0.125, 0.5, 1$ ) 合金在平衡晶格参数下的能带结构

需要强调的是, 我们发现的这一系列  $\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}$  ( $0.125 \leq x \leq 1$ ) 材料与之前所有已发现的具有半 Heusler 结构的拓扑绝缘体不同, 这些合金均是由主族元素构成, 不含任何过渡族元素和镧系及锕系稀土元素. 我们所研究合金的平均原子序数小于 40, 而几乎所有以前发现的半 Heusler 结构拓扑绝缘体的平均原子序数都大于 60.

这一结果的出现是与 Chadov 等 [8] 提出的观点不一致的. Chadov 等早前提出半 Heusler 合金可能是一个存在拓扑绝缘体的体系, 同时指出拓扑绝缘性的来源与组成材料原子的自旋-轨道耦合强度密切相关. 因此, 之后人们的搜索领域大都集中在具有强自旋-轨道耦合作用的重元素组成的半 Heusler 合金上. 而我们的这一发现说明, 在不考虑自旋-轨道

耦合作用的半Heusler合金中, 仍旧能够呈现拓扑绝缘性. 并且更为值得注意的是, 在我们发现的这些 $\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}$ 合金 ( $0.125 \leq x \leq 1$ ) 中, 在不计入自旋-轨道耦合作用时其最大的能带翻转强度达到了 $-1.379$  eV(如图3). 越大的能带翻转强度意味着拓扑性质越为稳定, 而在之前被预测的平均原子序数大于60的拓扑绝缘体中, 在强自旋-轨道耦合作用下, 也很少发现具有如此大能带翻转强度的材料.

基于上述结果, 我们不得不面对这样一个问题: 在 $\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}$ 合金 ( $0.125 \leq x \leq 1$ ) 中, 或者进一步扩展考虑范围, 在几乎没有自旋-轨道耦合作用的轻元素占据主导位置的材料中, 反带结构产生的诱因到底是什么? 较重的Cs元素的掺入到底引起合金内部的怎样变化进而促使了能带的反转? 为了回答这个问题, 让我们首先关注平衡晶格参数下CsAlGe合金和NaAlGe合金的电荷密度图谱, 如图4所示. 图中由蓝到红颜色的变化表征了合金内部原子之间电子共价杂化程度的增强. 从图中我们可以看到由于第一主族元素Na, Cs强烈

的金属性, 使得它们与Al, Ge原子之间几乎不存在共价杂化作用, 主要显现的是离子键的作用. 而在Al, Ge之间, 存在着大量的红色区域, 表明了较强共价杂化作用的存在. 如此, 我们可以认为在费米面附近参与翻转的能带主要由Al-Ge原子之间的作用所决定(s电子提供的 $\Gamma_6$ 能带和p电子所提供的 $\Gamma_8$ 能带). 进一步仔细对比这两个合金的电荷密度图谱, 我们可以看到在CsAlGe合金中, Al-Ge的共价作用要弱于NaAlGe合金(CsAlGe合金的电荷密度图中Al-Ge相互作用的红色区域明显小于NaAlGe合金), 正是这一点导致了反带结构的发生. 相应的我们在图5给出了这两个合金的态密度图谱, 从图谱上看, Cs合金中价电子的巡游性的确较低, 局域程度较高, 原子间杂化作用较弱. 并且我们还能够观察到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. 结合图2中的能带结构图谱, 我们能够知道 $\Gamma_6$ 能带的能量在降低而 $\Gamma_8$ 能带则在升高, 能带翻转强度加强, 最终 $\Gamma_6$ 能带和 $\Gamma_8$ 能带出现翻转, 材料中形成反带结构.

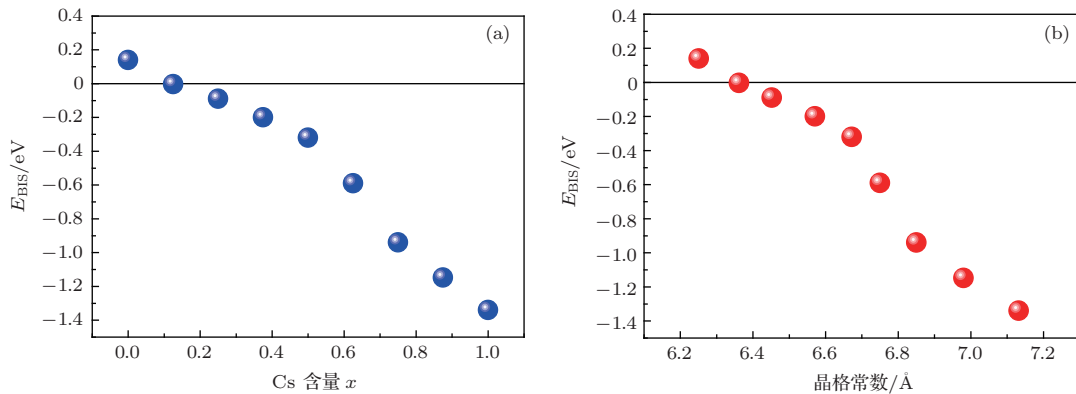


图3  $\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}$  ( $x = 0, 0.125, 0.25, 0.375, 0.5, 0.625, 0.75, 0.875, 1$ ) 合金在平衡晶格常数下的能带翻转强度 ( $E_{\text{BIS}}$ )

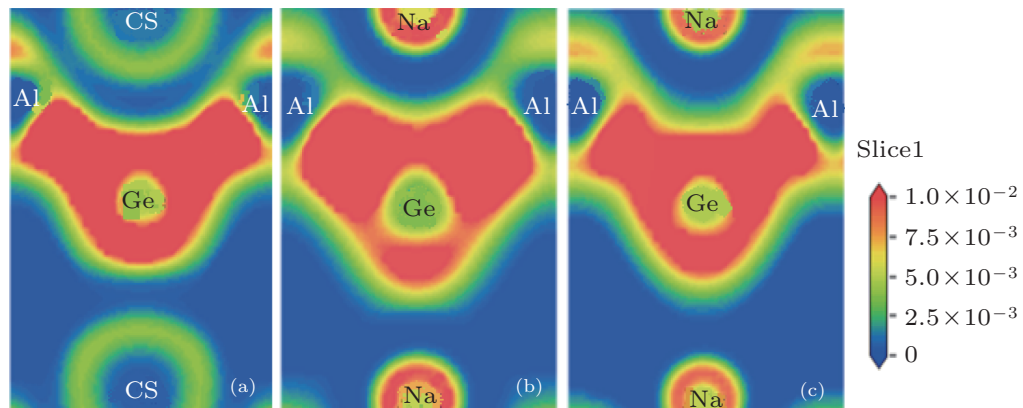


图4 (网刊彩色) (a) 是平衡晶格常数时CsAlGe合金的电荷密度; (b) 是平衡晶格常数时NaAlGe合金的电荷密度; (c) 是NaAlGe合金膨胀10%时的电荷密度

进一步分析,那么是什么原因导致了Al-Ge的共价作用在CsAlGe和NaAlGe合金中强弱不同呢?答案是显然的,Cs和Na元素离子半径的不同导致了这两种合金拥有不同的平衡晶格参数,进而引起Al-Ge原子之间距离的变化,这必然引起杂化作用的不同.因此,在 $\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}$ 合金( $0 \leq x \leq 1$ )中,随着 $x$ 的数值不断增大(Cs元素的掺杂量不断增大),合金整体的平衡晶格参数不断增加,原子间杂化作用不断减弱,能带翻转强度 $E_{\text{BIS}} = E\Gamma_6 - E\Gamma_8$ 越来越趋于负值(如图3(b)),使得 $\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}$ 合金的能带顺序由原本为正常带序( $0 \leq x < 0.125$ )转换为反转带序( $0.125 \leq x \leq 1$ ).

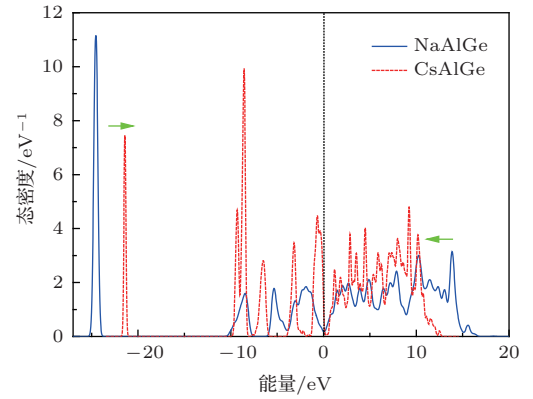


图5 (网刊彩色) CsAlGe合金(虚线)和NaAlGe(实线)在平衡晶格参数的总态密度

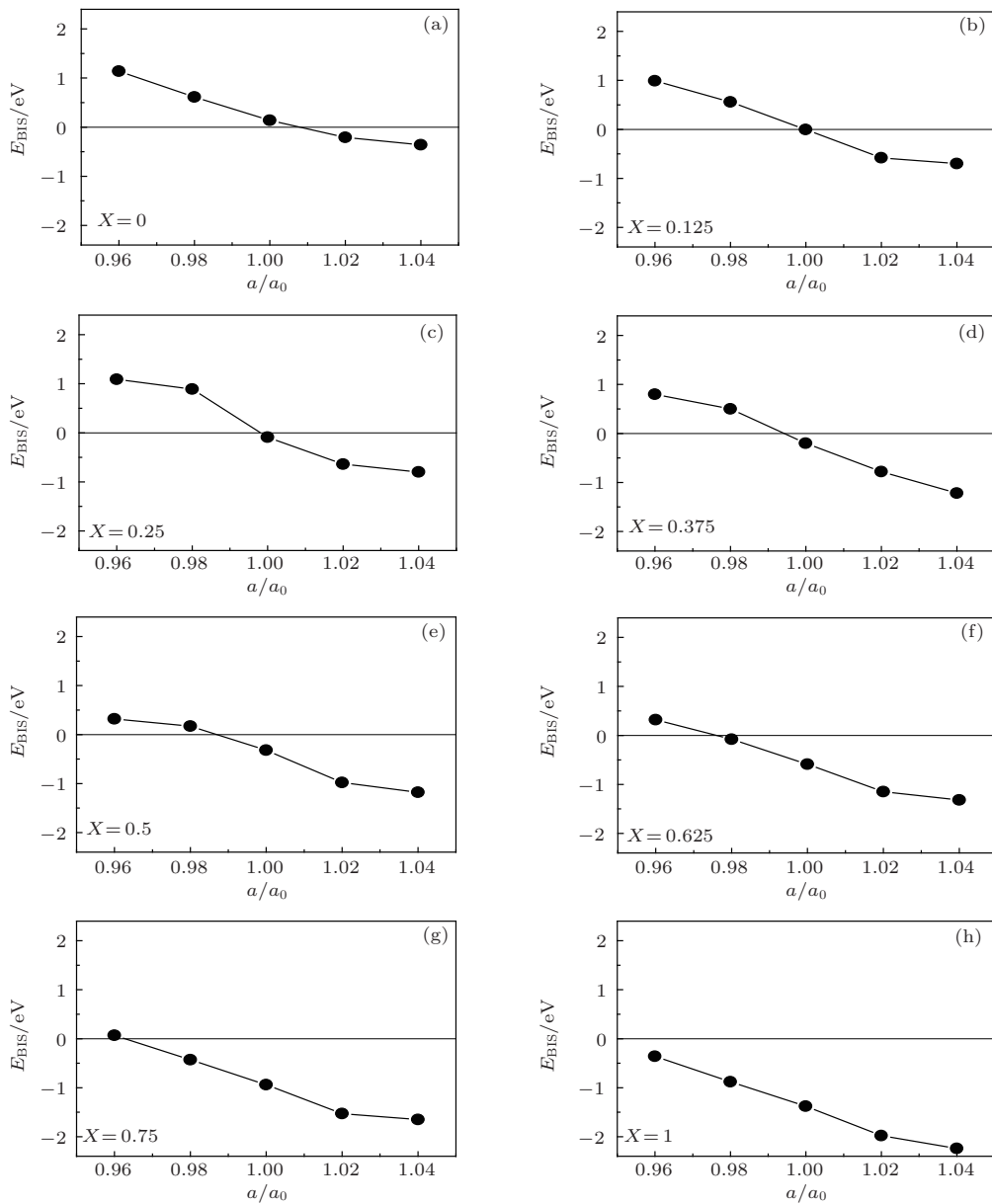


图6  $\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}$  ( $x = 0, 0.125, 0.25, 0.375, 0.5, 0.625, 0.75, 1$ ) 合金受到静水压应变后的能带翻转强度的变化

正如上文中所述, 我们可以得到在半Heusler结构中, 占据(0, 0, 0)晶位的Cs或Na原子并没有对杂化作用作出直接贡献, 也就是说它们并没有与占据(0.5, 0.5, 0.5)和(0.25, 0.25, 0.25)的(Al-Ge)原子发生直接的共价杂化作用. 占据(0, 0, 0)晶位的元素只作为填充元素来影响着整个合金的晶格参数变化和提供相应数目的价电子. 进而通过晶格参数的变化间接影响占据(0.5, 0.5, 0.5)和(0.25, 0.25, 0.25)原子的共价杂化程度. 也就是说, 在我们研究的 $\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}$ ( $0 \leq x \leq 1$ )合金中, 费米能级附近 $\Gamma$ 点主要由占据(0.5, 0.5, 0.5)和(0.25, 0.25, 0.25)晶位的Al-Ge原子组成的闪锌矿晶格所决定, 而占据(0, 0, 0)晶位的第一主族元素仅作为晶格结构的支撑和价电子的提供者, 并不会直接影响我们关注的 $\Gamma_6$ 和 $\Gamma_8$ 态.

为了进一步阐明和证实掺杂元素仅是通过改变材料晶格参数引起能带翻转而不是其他原因. 我们在图6给出了几个典型 $\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}$ 合金( $x = 0, 0.125, 0.25, 0.375, 0.5, 0.625, 0.75, 1$ )在静水压应变情况下,  $E_{\text{BIS}}$ 的变化情况. 从图中我们可以发现当施加静水压应变时, 这一系列合金的能带翻转强度都会发生相似的改变: 即施加静水压拉伸应变后材料趋向于形成反带结构. 这也就意味着施加静水压拉伸应变时能够获得拓扑绝缘体, 这与我们掺杂Cs增大晶格参数获得拓扑绝缘体的效果是一样的. 进一步, 我们在图4(c)给出了 $\text{NaAlGe}$ 合金在比平衡晶格参数膨胀10%时的电荷密度图谱, 在此条件下, 材料已经拥有反带结构. 通过与平衡晶格下的 $\text{NaAlGe}$ 合金的电荷密度图谱的对比, 我们也能够清晰发现施加静水压拉伸应变后, Al原子和Ge原子相互作用的区域(图中的红色区域)变小, 更相似于Cs合金的电荷密度图谱. 因此, 我们可以进一步证实通过调控晶格大小诱导拓扑性质产生的根本原因是内部杂化作用减弱的影响. 这一现象也有利的证明了掺杂元素是通过改变晶格参数引起能带反转的观点.

## 4 结 论

具有半Heusler结构的 $\text{NaAlGe}$ 合金是直接带隙半导体, 我们系统研究了同族Cs元素掺杂替换Na元素, 对合金能带拓扑性的影响. 我们发现随着Cs含量的增加, 合金趋向于形成反带结构. 当Cs含量超过12.5%时, 合金(即

$\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}$ ( $0.125 \leq x \leq 1$ ))中开始出现反带结构, 成为拓扑绝缘体. 通过系统研究, 我们得出结论: 轻元素化合物 $\text{NaAlGe}$ 在重元素Cs的掺杂下可以形成拓扑反带结构, 但是形成反带的原因并不是由于重元素Cs提供了更大的自旋-轨道耦合相互作用, 而是由于Cs离子半径较大而引起合金晶格参数增大, 进而导致材料中原子间的共价杂化作用变弱造成的. 合金中仅Al-Ge近邻原子间存在明显的共价杂化作用, 这一点决定了费米能级附近拓扑带序的变化. Cs和Na元素不参与原子间的共价杂化, 它们依赖各自的离子半径和所带价电子为材料晶格结构提供支撑和提供相应数量的价电子. 我们考虑的这一观点应该能够适用于其他轻元素组成的新型拓扑绝缘体, 这为今后新型轻元素组成的拓扑绝缘体的探索和开发提供了新的方向和思路.

## 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] Fu L, Kane C L, Mele E J 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 106803
- [6] Hsieh D, Qian D, Wray L, Xia Y, Hor Y S, Cava R J, Hasan M Z 2008 *Nature* **452** 970
- [7] Hsieh D, Xia Y, Wray L, Qian D, Pal A, Dil J H, Osterwalder J, Meier F, Bihlmayer G, Kane C L, Hor Y S, Cava R J, Hasan M Z 2009 *Science* **323** 919
- [8] Chadov S, Qi X L, Kubler J, Fecher G H, Felser C, Zhang S C 2010 *Nat. Mater.* **9** 541
- [9] Lin H, Wray, Xia Y, Xu S, Jia S, Cava R J, Bansil A, Hasan M Z 2010 *Nat. Mater.* **9** 546
- [10] 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
- [11] Xiao D, Yao Y G, Feng W X, Zhu W G, Chen X Q, Zhang Z Y 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 096404
- [12] Feng W X, Xiao D, Ding J, Yao Y G 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 016402
- [13] Comin I R, Levy G, Ludbrook B, Zhu Z H, Veenstra C N, Rosen J A, Yogesh Singh, Gegenwart P, Stricker D, Hancock J N, van der Marel D, Elfmov I S, Damascelli A 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 266406
- [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] Zhu Z Y, Cheng Y C, SchwingenschlÖgl U 2012 *Phys. Rev. B* **85** 235401
- [16] Zhu Z Y, Cheng Y C, SchwingenschlÖgl U 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 266805

- [17] 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]
- [18] Zhang X M, Liu E K, Liu Z Y, Liu G D, Wu G H and Wang W H 2013 *Comput Mater Sci* **70** 145
- [19] Qi X L, Zhang S C 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 1057
- [20] Wang X T, Dai X F, Jia H Y, Wang L Y, Liu R, Li Y, Liu X C, Zhang X M, Wang W H, Wu G H, Liu G D 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 023101 (in Chinese)[王啸天, 代学芳, 贾红英, 王立英, 刘然, 李勇, 刘笑闯, 张小明, 王文洪, 吴光恒, 刘国栋 2014 物理学报 **63** 023101]
- [21] Zhang X M, Wang W H, Liu E K, Liu G D, Liu Z Y, Wu G H 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 071901
- [22] Nourbakhsh Z 2013 *Journal of Alloys and Compounds* **549** 51
- [23] Segall M D, Lindan P J D, Probert M J, Pickard C J, Hasnip P J, Clark S J, Payne M C 2002 *J. Phys. : Condens. Matter* **14** 2717
- [24] Guo Z H, Yan X H, Xiao Y 2010 *Phys. Lett. A* **374** 1534
- [25] Florence A J, Bardin J, Johnston B, Shankland N, Griffin T A N, Shankland K 2009 *Z. Kristallogr.* **30** 215

## Band inversion in half Heusler-type

$$\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}(0 \leq x \leq 1)^*$$

Wang Xiao-Tian<sup>1)2)</sup> Dai Xue-Fang<sup>2)</sup> Jia Hong-Ying<sup>2)</sup> Wang Li-Ying<sup>2)</sup>  
 Zhang Xiao-Ming<sup>3)</sup> Cui Yu-Ting<sup>1)</sup> Wang Wen-Hong<sup>3)</sup>  
 Wu Guang-Heng<sup>3)</sup> Liu Guo-Dong<sup>1)2)†</sup>

1) (School of physics and electronic engineering, Chongqing normal university, Chongqing 400044, China)

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

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

( Received 30 October 2013; revised manuscript received 27 November 2013 )

### Abstract

The influences of doping whit congeners on the band topology in half Heusler-type of NaAlGe alloys are investigated using the first-principles calculations. It is found that the  $\text{Na}_{1-x}\text{Cs}_x\text{AlGe}$  alloys with a normal band order are converted into topological nontrivial phases when  $x$  is up to 0.125. We argue that it is the degree of hybridization between Al and Ge determine the band order at the Fermi level. The Na or Cs only plays a role of the valence electron contributor and influences the lattice parameter.

**Keywords:** first-principles calculations, topological insulator, half Heusler compound, electronic structure

**PACS:** 31.15.Ar, 70.20.Be

**DOI:** 10.7498/aps.63.053103

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51271071, 11074160), the Ministry of Education Program for New Century Excellent Talents of China (Grant No. NCET-10-0126), 100 Excellent Innovative Talents Program of Hebei Province and Henan Province Science and Technology Research Project (Grant No. 102102210037).

† Corresponding author. E-mail: [gdlu1978@126.com](mailto:gdlu1978@126.com)