



## Li (Na) AuS体系拓扑绝缘体材料的能带结构

许佳玲 贾利云 刘超 吴佺 赵领军 马丽 侯登录

## Band structure of topological insulator Li(Na)AuS

Xu Jia-Ling Jia Li-Yun Liu Chao Wu Quan Zhao Ling-Jun Ma Li Hou Deng-Lu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 027101 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20200885

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20200885>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 二维有机拓扑绝缘体的研究进展

Research progress of two-dimensional organic topological insulators

物理学报. 2018, 67(23): 238101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181711>

#### 非对称双轴张应变对锗能带的影响

First-principle study of effect of asymmetric biaxial tensile strain on band structure of Germanium

物理学报. 2017, 66(16): 167101 <https://doi.org/10.7498/aps.66.167101>

#### 强三维拓扑绝缘体与磁性拓扑绝缘体的角分辨光电子能谱学研究进展

Angle resolved photoemission spectroscopy studies on three dimensional strong topological insulators and magnetic topological insulators

物理学报. 2019, 68(22): 227901 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191450>

#### 基于蜂窝晶格声子晶体的双频带声拓扑绝缘体

Dual-band acoustic topological insulator based on honeycomb lattice sonic crystal

物理学报. 2019, 68(22): 224301 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190951>

#### 高性能太赫兹发射: 从拓扑绝缘体到拓扑自旋电子

High-performance THz emission: From topological insulator to topological spintronics

物理学报. 2020, 69(20): 200704 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200680>

#### 三维拓扑绝缘体antidot阵列结构中的磁致输运研究

Magnetotransport in antidot arrays of three-dimensional topological insulators

物理学报. 2018, 67(4): 047301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172346>

## Li(Na)AuS 体系拓扑绝缘体材料的能带结构\*

许佳玲<sup>1)</sup> 贾利云<sup>1)2)†</sup> 刘超<sup>1)</sup> 吴隼<sup>1)</sup> 赵领军<sup>1)</sup> 马丽<sup>2)</sup> 侯登录<sup>2)</sup>

1) (河北建筑工程学院数理系, 张家口 075000)

2) (河北师范大学物理学院, 石家庄 050016)

(2020年6月11日收到; 2020年9月6日收到修改稿)

在拓扑领域中发现可以通过大数据搜索拓扑绝缘体, 使得此领域对材料的探索转变为对材料性质的研究. 半 Heusler 合金体系是非平庸拓扑绝缘体材料的重要载体. 通过全势线性缀加平面波方法计算 Li(Na)AuS 体系拓扑绝缘体材料的能带结构. 采用各种关联泛函计算 LiAuS 的平衡晶格常数, 发现得到的能带图均为具有反带结构的拓扑绝缘体, 而且打开了自然带隙. 较小的单轴应力破坏立方结构后也破坏了此类拓扑绝缘体的自然带隙, 通过施加单轴拉应力直到四方结构的平衡位置时, 系统带隙值约为 0.2 eV, 这与立方结构平衡位置得到的带隙结果一致. 运用同族元素替代的手段, 实现了在保证材料拓扑绝缘体性质的同时, 不改变立方结构, 在体系的平衡晶格常数下使得材料的带隙打开, 从而提高了实验合成拓扑绝缘体材料的可行性.

关键词: 拓扑绝缘体, Heusler 合金, 第一性原理, 能带结构

PACS: 71.20.-b, 71.15.Mb, 73.20.At

DOI: 10.7498/aps.70.20200885

## 1 引言

拓扑绝缘体 HgTe 的发现引发了世界的轰动, 尤其是最近我国在拓扑绝缘体领域取得了重大发现, 预测了上千种可能的新型拓扑绝缘体材料, 这就使得对这一领域的研究方向由材料的探索转变为材料性质的研究<sup>[1,2]</sup>. 半 Heusler 化合物与闪锌矿结构的相似性注定了其非凡的使命, 大量的研究致力于在 Heusler 材料家族中寻找非平庸拓扑绝缘体材料<sup>[3-5]</sup>. 具有 18 个电子的三元半 Heusler 合金可以通过合适的应力作用打开带隙, 由此开启了一个三维拓扑绝缘体的新系列<sup>[6-8]</sup>. 由于第一原理计算已证实此结构体系拓扑  $Z_2$  不变量没有反对称性的量子本质, 加上这个系列材料如磁性和超导性等其他有趣的物理性质, 于是基于密度泛函理论的第一性原理计算方法将三元半 Heusler 化合物转变

为三维拓扑绝缘体成为研究热点<sup>[9,10]</sup>. 对于三维拓扑绝缘体半 Heusler 化合物的研究, 结合这些材料的磁性和超导性质, 在实验方面也成为了一个有巨大价值的研究平台<sup>[11,12]</sup>.

目前通过第一原理计算, 大量的半 Heusler 三元化合物已经被发现具有反带结构, 例如 LuPtSb, ScPtBi, YPdBi, ThPtPb, 都可以通过单轴应力成为三维拓扑绝缘体的备选材料<sup>[13]</sup>. 通常, 对于具有小带隙的半 Heusler 化合物, 可以通过施加静压应力改变带序, 以及利用单轴应力打开能隙的综合方法实现拓扑绝缘体相<sup>[3]</sup>. 姚裕贵研究组<sup>[10]</sup>发现: LaPtBi 在单轴应力下可以实现拓扑绝缘体相, 未形变的 LaPtBi 的电子结构作为原型系统显示出明显的能带翻转特征. 通过施加 [001] 方向的单轴应变可以实现三维拓扑绝缘体, 在保留翻转带序的同时可以打开带隙, 并且通过计算不具有反对称性的系统中的拓扑不变量  $Z_2$  证明 LaPtBi 是三维拓

\* 国家自然科学基金 (批准号: 51971087)、河北省自然科学基金 (批准号: A2018205144)、河北省科技支撑计划项目 (批准号: 15211036)、张家口市财政支持计划项目 (批准号: 1611070A) 和河北建筑工程学院博士基金 (批准号: B-201807) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: jliyun@126.com

扑绝缘体. 张小明等<sup>[14]</sup>又模拟了 LaPtBi 在等体积下施加不同单轴拉压应力来破坏立方对称性, 并实现了能带的调控, 还对未形变体积下的单轴应力也进行了详细的研究. 关于半 Heusler 型化合物的能带翻转机制在参考文献 [15] 中有较为详细的论述, 而且给出了一些设计的规则, 另外文中将 HgTe 一类反转带序称为  $\beta$  型填充四面体结构的拓扑半金属, 这一类结构已经有人进行了大量的理论和实验研究; 还有具有另一类反转带序的 Heusler 体系拓扑绝缘体被称为  $\alpha$  型填充四面体结构, 此类结构的材料预测目前研究较少, 实验研究几乎还没有开展.

Heusler 化合物研究始于由 4 个面心立方子晶格组成的  $L2_1$  结构, 基于相似的面心晶格, 4 个 Wyckoff 坐标分别为  $4a$  (0, 0, 0),  $4b$  (1/2, 1/2, 1/2),  $4c$  (1/4, 1/4, 1/4) 和  $4d$  (3/4, 3/4, 3/4). 4 个子晶格之中有一个没有被填充, 就是  $C1_b$  结构, 这种结构通常也称为半 Heusler 结构. 半 Heusler 化合物的化学式一般写为 XYZ, 空间群为  $216 (F\bar{4}3m)$ . 如果用 A, B, C 和 D 表示 4 个坐标位置, 可以把 4 个面心立方子晶格看成 4 个等效晶位, 用晶胞对角线连接起来, 半 Heusler 结构 C 位没有填充. 由于目前的 Heusler 化合物的组合方法一般是 X 和 Y 元素属于在化学元素周期表中的过渡金属元素, 但是, 随着材料模拟领域的发展以及实验技术的进步, 其他元素如碱金属等也被用于 Heusler 化合物的研究. 于是这就大大的扩展了 Heusler 化合物的种类, 也极大地增大了各种 Heusler 化合物的研究潜能. 2015 年林诗源等<sup>[16]</sup>采用赝势高通量方法计算了 2295 种半 Heusler 化合物, 并统计了 779 种拓扑绝缘体材料的能带反转强度和体结构带隙, 发现 LiAuS 和 NaAuS 体系是非常优异的拓扑绝缘体材料, 本部分工作主要参考采用赝势的 VASP 软件高通量计算结果, 根据扩展的元素种类用全势方法研究  $\alpha$  型填充四面体结构的拓扑绝缘体材料, 计算 Li(Na)AuS 体系拓扑绝缘体材料的能带结构, 由于 Heusler 化合物研究很少有人利用 S 放在主族元素所占的 Z 位置上, 用 S 作为主族元素, 采用贵金属 Au 占据 A 位, 为保证 18 个价电子, X 元素用比较活泼的碱金属进行替代, 研究此类拓扑绝缘体的特点, 对拓扑绝缘体的理论和实验研究具有参考价值.

## 2 计算方法

本工作中能带结构的计算是利用全势线性缀加平面波方法的 WIEN2k 来进行的. 交换关联泛函主要是采用了传统的局域自旋密度近似 (LSDA) 和修正的 Becke-Johnson 交换势 (MBJ). 在计算中均对重金属元素考虑了自旋轨道耦合的效果. 软件利用四面体网格法对于波矢进行积分, 选取 5000 个  $k$  点. 截断参数选取  $R_{\text{mt}} \times K_{\text{max}} = 9$ . 为了验证计算结果的可靠性, 采用 LSDA 和 MBJ 验证了拓扑绝缘体材料 LiAuS 的能带结构, 对比文献中的采用广义梯度近似 (GGA) 和杂化泛函 (HSE) 的计算结果.

## 3 结果和讨论

### 3.1 不同关联泛函 LiAuS 能带结构

通过计算发现 LiAuS 和 NaAuS 具有反带结构, 这个结论和文献 [15] 中采用 GW 近似方法得到的结果一致; 另外, 对于反带结构和反转强度的讨论, 文献 [16] 中进行了细致的讨论, 不再作为本文讨论的重点. 利用 GGA, LSDA 和 MBJ 三种关联泛函计算了 LiAuS. 各个化合物的平衡晶格常数都是通过能量优化得到的. 通过比较能量优化得到的晶格常数, 发现采用全势 GGA 泛函得到的平衡晶格常数为 0.602 nm, 稍大于 VASP 赝势软件 GGA 计算值的 0.599 nm, 而采用 LSDA 泛函优化得到的平衡晶格常数为 0.586 nm, 可见局域密度泛函得到的平衡晶格常数为最小. 通过各自平衡晶格常数计算得到的能带图结构均为具有反带结构的拓扑绝缘体结构, 且均打开了自然带隙, 结果和文献一致, 但是在带隙数值上 MBJ 并没有显现出优势. 对于 LaPtBi 材料一般在平衡状态为反带结构, 但是并没有带隙, 普遍认为具有此类反带结构的立方半 Heusler 化合物要想打开体能隙, 常用的方法就是施加等体积单轴应力, 施加拉应力可以增大带隙, 从而得到真正意义上的拓扑绝缘体材料, 这种方法的实质是通过破坏立方对称性的保护而打开带隙<sup>[17,18]</sup>. 图 1 表示对 LiAuS 在保证体积不变的基础上对  $c$  轴施加单轴应力得到的能量优化曲线, 由于施加拉应力可以增大带隙, 所以应力施加是以拉应力为主, 图中横坐标的 -10 表示施加 10% 的单

轴压应力, 而横坐标的正值均表示拉应力. 由图中可知, 当单轴拉力施加到约 41% 处能量最低, 此时破坏了立方对称性之后成为四方结构后空间群为  $119(I\bar{4}m2)$ , 且平衡晶格常数为  $a = 0.52477 \text{ nm}$ ,  $c/a = 1.41$  时系统又趋于平衡状态.

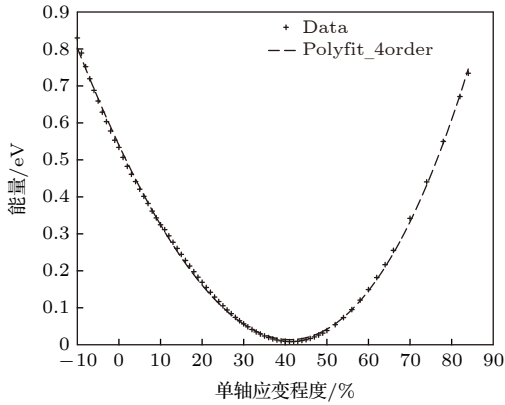


图 1 对 LiAuS 在保证体积不变的基础上对  $c$  轴施加单轴应力得到的能量优化曲线,  $c/a = 1.41$  时得到平衡晶格常数为  $a = 0.52477 \text{ nm}$

Fig. 1. Calculated total energies as functions of the uniaxial strain along [001] direction with constant volume for LiAuS, the equilibrium lattice constant is  $a = 0.52477 \text{ nm}$  and  $c/a = 1.41$ .

研究认为有必要对碱金属系列半 Heusler 化合物的拓扑绝缘体进行计算和分析, 另外由于全势的 WIEN2k 软件包的 MBJ 是原生的, 因此采用 LSDA 和 MBJ 两种关联泛函计算此系列的能带进行比较. 图 2 给出了利用 WIEN2k 软件分别采用 LSDA 和 MBJ 两种关联泛函计算得到的对 LiAuS 施加 1% 的单轴拉力得到的能带结构图, 可以发现

较小的单轴应力破坏立方结构后也破坏了此类拓扑绝缘体的自然带隙, 通过计算得到施加较小的拉力和压力均会使系统由拓扑绝缘体转变为拓扑金属.

图 3 给出了单轴应力下平衡状态下采用 LSDA 和 MBJ 两种关联泛函计算得到的 LiAuS 的能带结构图. 从图 3 可以看出, 通过施加单轴拉应力直到四方结构的平衡位置时, 系统带隙的值为 0.2 eV 左右, 这与立方结构平衡位置得到的带隙结果一致. 一般情况下, 计算半导体和绝缘体材料, 利用 GGA 方法计算得到的能带带隙要比 MBJ 的要小, 也就是通常所说的 GGA 会低估带隙, 发现在此系列的拓扑绝缘体带隙计算中, 每种关联泛函得到的带隙是一致的, 所以证实这是材料本身的属性. 但是, 在结果中通过 MBJ 泛函计算得到的能带图中, 费米能级明显穿过了价带. 通过计算发现, 在此体系的半 Heusler 化合物中, MBJ 泛函在拓扑绝缘体的计算中并没有明显优势. 而在 LSDA 计算得到的能带图中, 在拉力作用下, Au 的部分 s 轨道明显能量下降, 在局域密度近似当中尤其明显, 拉力为 84% 严重破坏立方对称性时, 带隙值仍然约为 0.2 eV.

### 3.2 Li(Na)AuS 体系的化学替代

从前面的计算中可以看出, 等体积的单轴拉应力作用下破坏了立方对称性从而打开了拓扑绝缘体的能隙, 但是在实际材料的制备过程中, 等体积的单轴拉应力的实现存在困难. 对于 Heusler 化合物

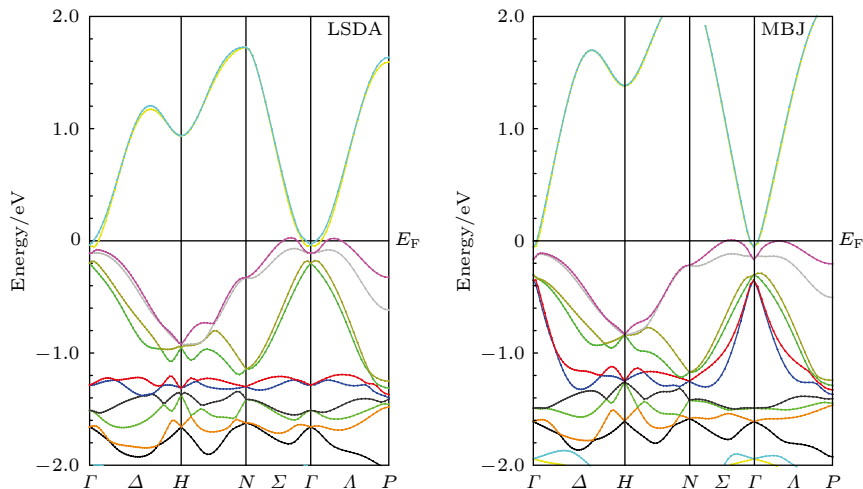


图 2 施加 1% 拉应力后破坏立方结构的能带结构, 左图为 LSDA 计算能带图, 右图为 MBJ 计算得到的能带图

Fig. 2. Band structure of the LiAuS compound with 1% uniaxial tensile stress, on the left with LSDA, and on the right with MBJ.

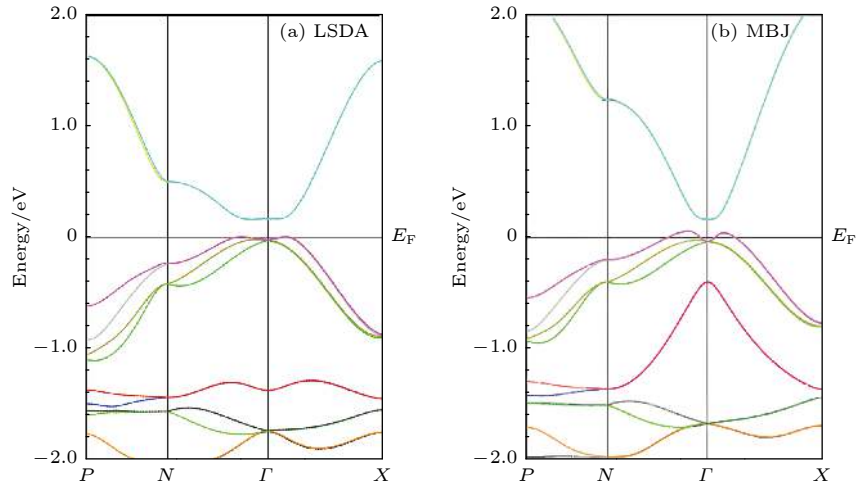


图 3 四方结构平衡晶格常数 ( $a = 0.52477$  nm,  $c/a = 1.41$ ) 下的能带结构 (a) LSDA 计算能带图; (b) MBJ 计算得到的能带图  
 Fig. 3. Band structure of the tetragonal structure LiAuS compound with the equilibrium lattice constant ( $a = 0.52477$  nm and  $c/a = 1.41$ ): (a) LSDA; (b) MBJ.

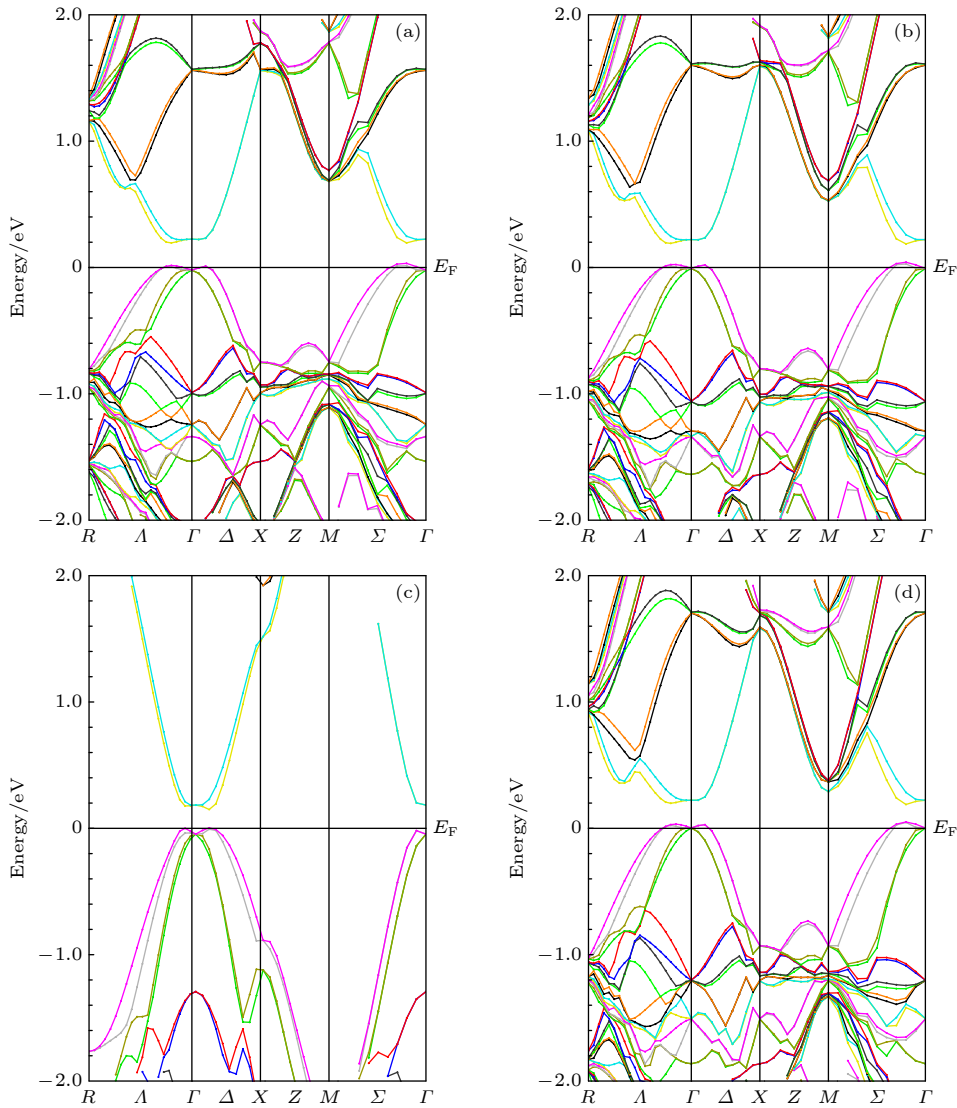


图 4 掺杂结构在各自平衡晶格常数下的能带结构 (a)  $\text{Li}_{0.125}\text{Na}_{0.875}\text{AuS}$ ; (b)  $\text{Li}_{0.375}\text{Na}_{0.625}\text{AuS}$ ; (c)  $\text{Li}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{AuS}$ ; (d)  $\text{Li}_{0.875}\text{Na}_{0.125}\text{AuS}$   
 Fig. 4. Band structure of the  $\text{Li}_x\text{Na}_{1-x}\text{AuS}$  compound with the equilibrium lattice constant: (a)  $\text{Li}_{0.125}\text{Na}_{0.875}\text{AuS}$ ; (b)  $\text{Li}_{0.375}\text{Na}_{0.625}\text{AuS}$ ; (c)  $\text{Li}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{AuS}$ ; (d)  $\text{Li}_{0.875}\text{Na}_{0.125}\text{AuS}$ .

体系, 在实验上通过对某个原子同族的元素替换进行掺杂是比较常用的手段, 在保证价电子浓度不变的前提下, 通过掺杂可以改变晶格常数、电负性, 甚至实现半金属性, 还可以找到具有相变的新材料<sup>[19]</sup>. 实验上采用化学掺杂在 Heusler 化合物中获得成功的例子数不胜数, 由于化学掺杂也是对体系立方对称性的破坏, 因此运用同族元素替代的手段, 期望在保证材料拓扑绝缘体性质的同时, 不改变立方结构, 在体系的平衡晶格常数下使得材料的带隙打开, 从而提高实验合成拓扑绝缘体材料的可行性<sup>[20–22]</sup>.

选取上文论述中两种本身都具有反带结构的材料, 观察 Li 和 Na 相互取代过程中是否能够打开带隙, 依次采用 LSDA 计算了相互替代比例为 12.5%, 25.0%, 37.5%, 50.0%, 62.5%, 75.0% 和 87.5% 的超胞结构的能带. 首先进行扩胞形成  $2 \times 2 \times 1$  超胞结构, 原子替换依据原有的套嵌结构由外侧立方顶角位置开始依次更换, 对于不同替代比例相应的超胞结构首先进行能量优化获得平衡晶格常数, 然后利用各自的平衡体积进行能带计算, 并且考虑自旋轨道耦合, 其他计算参数与前面的计算一致. 相互替代时没有考虑无序状态, 只研究由于掺杂引起体系立方对称性的破坏对能隙稳定性的影响. 如图 4 所示, 结果发现  $\text{Li}_{0.125}\text{Na}_{0.875}\text{AuS}$ ,  $\text{Li}_{0.375}\text{Na}_{0.625}\text{AuS}$ ,  $\text{Li}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{AuS}$ ,  $\text{Li}_{0.625}\text{Na}_{0.375}\text{AuS}$ ,  $\text{Li}_{0.875}\text{Na}_{0.125}\text{AuS}$  都可以在平衡位置打开能隙, 而且在费米面位置处导带底和价带顶的能带十分稳定, 均为直接带隙, 带隙值约为 0.2 eV 左右. 进行替换后, 化合物材料的空间群由原来的  $216(F\bar{4}3m)$  变为  $111(P\bar{4}2m)$ , 对称性稍有下降; 而替换 50% 时生成结构的空间群为  $115(P\bar{4}m2)$ , 立方对称性遭到破坏的程度较为强烈, 不同比例下由于进行元素替代导致的对称性变化引起了能带图沿着高对称线能带的简并度的不同, 另外由于样品对应的平衡晶格常数不同, 也使能带图出现微小变化. 本文得到的大量研究结果可以对半 Heusler 合金结构拓扑绝缘体的进一步理论研究和实验研究提供依据.

## 4 结 论

通过全势线性缀加平面波方法计算  $\text{Li}(\text{Na})\text{AuS}$  体系拓扑绝缘体材料的能带结构, 通过比较能量优化得到的晶格常数, 发现采用全势 GGA 泛函得到

的平衡晶格常数大于赝势计算值, 局域自旋密度 LSDA 泛函得到的平衡晶格常数为最小. 通过各自平衡晶格常数计算得到的能带图结构均为具有反带结构的拓扑绝缘体结构, 而且均打开了自然带隙, 但是在带隙数值上 MBJ 并没有显现出优势. 较小的单轴应力破坏立方结构后也破坏了此类拓扑绝缘体的自然带隙, 通过施加单轴拉应力直到四方结构的平衡位置时, 系统带隙值约为 0.2 eV, 这与立方结构平衡位置得到的带隙结果一致. 由于化学掺杂也是对体系立方对称性的破坏, 运用同族元素替代的手段, 实现了在保证材料拓扑绝缘体性质的同时, 不改变立方结构, 在体系的平衡晶格常数下使得材料的带隙打开.

感谢河北工业大学材料科学与工程学院张小明老师的指导和帮助.

## 参考文献

- [1] Tang F, Po H C, Vishwanath A, Wan X 2019 *Nature* **566** 486
- [2] Zhang T, Jiang Y, Song Z, Huang H, He Y, Fang Z, Weng H, Fang C 2019 *Nature* **566** 475
- [3] Feng W, Xiao D, Zhang Y, Yao Y 2010 *Phys. Rev. B* **82** 235121
- [4] Zhang X 2018 *Chin. Phys. B* **27** 127101
- [5] Shi F, Si M S, Xie J, Mi K, Xiao C, Luo Q 2017 *J. Appl. Phys.* **122** 215701
- [6] Zhang X M, Xu G Z, Du Y, Liu E K, Liu Z Y, Wang W H, Wu G H 2014 *J. Appl. Phys.* **115** 083704
- [7] Chadov S, Qi X, Kübler J, Fecher G H, Felser C, Zhang S C 2010 *Nat. Mater.* **9** 541
- [8] Lin H, Wray L A, Xia Y, Xu S, Cava R J, Bansil A, Hasan M Z 2010 *Nat. Mater.* **9** 546
- [9] Yang H, Yu J, Parkin S S P, Felser C, Liu C X, Yan B 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 136401
- [10] Xiao D, Yao Y G, Feng W, Wen J, Zhu W, Chen X Q, Stocks G M, Zhang Z 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 096404
- [11] Xu G, Wang W, Zhang X, Du Y, Liu E, Wang S, Wu G, Liu Z, Zhang X X 2014 *Sci. Rep.* **4** 5709
- [12] Zhang W, Du Y, Xu G, Zhang X, Liu E, Liu Z, Shi Y, Chen J, Wu G, Zhang X X 2013 *Sci. Rep.* **3** 2181
- [13] Zhang X M, Xu G Z, Liu E K, Liu Z Y, Wang W H, Wu G H 2015 *J. Appl. Phys.* **117** 045706
- [14] Zhang X M, Wang W H, Liu E K, Liu G D, Liu Z Y, Wu G H 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 071901
- [15] Vidal J, Zhang X, Stevanović V, Luo J W, Zunger A 2012 *Phys. Rev. B* **86** 075316
- [16] Lin S Y, Chen M, Yang X B, Zhao Y J, Wu S C, Felser C, Yan B 2015 *Phys. Rev. B* **91** 094107
- [17] Ding G, Gao G Y, Yu L, Ni Y, Yao K 2016 *J. Appl. Phys.* **119** 025105
- [18] Barman C K, Alam A 2018 *Phys. Rev. B* **97** 075302
- [19] Wang G, Wei J 2016 *Comput. Mater. Sci.* **124** 311
- [20] 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]
- [21] Wang X T, Dai X F, Jia H Y, Wang L Y, Zhang X M, Cui Y T, Wang W H, Wu G H, Liu G D 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 053103 (in Chinese) [王啸天, 代学芳, 贾红英, 王立英, 张小明,

崔玉亭, 王文洪, 吴光恒, 刘国栋 2014 物理学报 63 053103]  
 [22] Wang X T, Dai X F, Jia H Y, W 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]

## Band structure of topological insulator Li(Na)AuS\*

Xu Jia-Ling<sup>1)</sup> Jia Li-Yun<sup>1)2)†</sup> Liu Chao<sup>1)</sup> Wu Quan<sup>1)</sup>  
 Zhao Ling-Jun<sup>1)</sup> Ma Li<sup>2)</sup> Hou Deng-Lu<sup>2)</sup>

1) (*Department of Mathematics and Physics, Hebei Institute of Architecture Civil Engineering, Zhangjiakou 075000, China*)

2) (*College of Physics, Hebei Normal University, Shijiazhuang 050016, China*)

( Received 11 June 2020; revised manuscript received 6 September 2020 )

### Abstract

Half-Heusler semiconductors exhibit similar properties: the differences among their properties lie only in the fact that in ternary compositions the zinc-blende binary substructure does not provide the required 18 electrons, but this is improved by adding an extra transition metal, which restores the electronic balance. Half-Heusler ternary compound with 18 valence electrons under an appropriate uniaxial strain is a topological insulating phase. Most importantly, it is proposed that in the half-Heusler family, the topological insulator should allow the incorporating of superconductivity and magnetism. Using the first-principle full-potential linearized augmented wave method we study the band structure of a series of Li(Na)AuS topological insulators. The electronic and magnetic properties of Heusler alloys are investigated by the WIEN2k package. The exchange-correlations are treated within the generalized gradient approximation of PerdewBurke and Ernzerhof (GGA), the local spin density approximation (LSDA), by using the modified Becke-Johnson exchange potential and the correlation potential of the local-density approximation (MBJ). Spin-orbit coupling is treated by means of the second variational procedure with the scalar-relativistic calculation as basis. We first determine the equilibrium lattice constants by calculating the total energy. The theoretical lattice constant of LiAuS full-potential GGA is 6.02 Å, which is somewhat greater than the result of pseudopotential(5.99 Å). The calculated equilibrium lattice parameter is 5.86 Å for LSDA. Most of the half-Heusler compounds have band inversion, and open the nature band gaps, but the gap of MBJ is not very good. Smaller uniaxial stress damages the cubic structure and also such a natural band gap of topological insulators. By applying uniaxial tensile stress until the equilibrium position is reached in all directions of the structure, the system band gap value is about 0.2 eV, which is consistent with the result obtained from the band gap of cubic structure equilibrium position. When uniaxial tensile stress is 41%, the system turns into a tetragonal structure, the equilibrium lattice constant is  $a = 5.2477$  Å and  $c/a = 1.41$ . We use the method of substitution of homologous elements to ensure the properties of topological insulator of materials without changing the cubic structure, and open the bandgap of materials under the equilibrium lattice constant of the system, thereby improving the feasibility of experimental synthesis of topological insulator materials. Our results for the doping suggest that epitaxial strain encountered during experiment can result in electronic topological transition. We hope that the results presented here conduce to further experimental investigation of the electronic topological transition in half-Heusler compounds.

**Keywords:** topological insulators, Heusler alloys, first principle, band structure

**PACS:** 71.20.-b, 71.15.Mb, 73.20.At

**DOI:** 10.7498/aps.70.20200885

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51971087), the Hebei Natural Science Foundation, China (Grant No. A2018205144), the Support Program of Scientific and Technological Research Project of Hebei, China (Grant No. 15211036), the Financial Support from the Science and Technology Plan Projects of Zhangjiakou City, China (Grant No.1611070A), and the Ph. D. Programs Foundation of Hebei Institute of Architecture Civil Engineering, China (Grant No. B-201807).

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