

半 Heusler 型拓扑绝缘体 LaPtBi 能带调控的研究*

张小明¹⁾²⁾ 刘国栋¹⁾ 杜音²⁾ 刘恩克²⁾ 王文洪^{2)†} 吴光恒²⁾ 柳忠元³⁾

1) (河北工业大学材料学院, 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)

3) (燕山大学材料学院, 秦皇岛 066004)

(2011 年 9 月 20 日收到; 2011 年 10 月 28 日收到修改稿)

采用基于密度泛函理论的全势能线性缀加平面波的方法, 研究了化学替代和施加等体积单轴 (拉、压) 应力两种方式对半 Heusler 型拓扑绝缘体 LaPtBi 能带的影响. 计算结果表明, 通过在 LaPtBi 合金中用 Sc 元素替换 La, 或者用 Pd 替换 Pt, 都可以使得原本受立方对称性保护的 Γ_8 能带在费米能级附近打开一带隙; 而对于施加等体积单轴应力来扭曲立方晶格的方式, 在使得 Γ_8 能带打开的同时, 还可以实现对费米能级位置有规律地调控, 使 LaPtBi 合金最终成为真正意义上的体材料是绝缘性而表面是金属性的拓扑绝缘体.

关键词: 第一性原理计算, 拓扑绝缘体, 半 Heusler 合金

PACS: 31.15.Ar, 71.20.Be

1 引言

拓扑绝缘体是近几年才发现的一种量子态新材料, 一经发现就迅速引起了物理学、材料科学等领域科学家的极大兴趣, 是目前凝聚态物理中研究的一个热点方向. 与传统的绝缘体不同, 由于内部强烈的自旋-轨道相互作用, 使其产生了由时间反演对称性保护的可以导电的表面态^[1,2]. 然而, 它又完全不同于传统意义上的金属. 因为这种表面电子态完全是由材料体电子态的拓扑结构的对称性所决定, 在表面上呈现出的一种特殊导电机理, 与表面上的结构无关. 因此电子的传导不受体系中缺陷和杂质的影响, 是一种低能量耗散的输运方式. 可以预见, 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的影响.

到目前为止, 人们在多种体系中都发现了可以成为拓扑绝缘体的候选材料. 如以辉砷铋结构

为代表的热电材料体系中的 Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 和 Sb_2Te_3 ^[3]; TlBiTe_2 和 TlBiSe_2 等三元铋基硫属化合物^[4]; 反钙钛矿型氮化物 $M_3\text{NBi}$ ($M = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{和 Ba}$)^[5]; 以及黄铜矿家族化合物 I-III-VI₂ (I = Cu, Ag, Au; III = In, Tl; V = S, Se, Te), II-IV-V₂ (II = Zn, Cd, Hg; IV = Ge, Sn; V = As, Sb)^[6] 等. 近期, 德国和美国研究组^[7-9] 又成功预言了具有 18 个价电子的半 Heusler 合金中也存在大量潜在的拓扑绝缘体材料. 半 Heusler 合金是一种高度有序的金属间化合物, 具有面心立方的 MgAgAs 结构 (见图 1(a)), 其化学通式为 XYZ ^[10]. 其中 X, Y 可以是过渡族元素和镧系稀土元素, Z 则是 s-p 元素, 前人已经在半 Heusler 合金中发现了许多诱人的特性^[11,12]. 最近 Xiao 等人^[9] 通过对半 Heusler 合金 LaPtBi 拓扑不变量 Z_2 的计算, 证明了 LaPtBi 是一种拓扑绝缘体材料. 图 1(b) 便是半 Heusler 型拓扑绝缘体 LaPtBi 的能带图. 在强烈的自旋-轨道耦合作用下, 原本处于费米能级上方的二重简并的 Γ_6 能带发生翻转, 形成所谓的反带结构 ($\Gamma_6 < \Gamma_8$), 这便是其形成特殊表面态的一个

* 国家自然科学基金 (批准号: 51171207) 和国家基金委创新研究群体 (批准号: 51020161) 资助的课题.

† E-mail: wenhong.wang@iphy.ac.cn

必要条件. 然而我们看到, 对于立方的 LaPtBi 合金的能带来说, 由于受立方对称性保护的 Γ_8 能带并没有能够在费米面处打开一带隙, 即体材料的绝缘性遭到了破坏, 故而并不能称之为真正意义上的拓扑绝缘体.

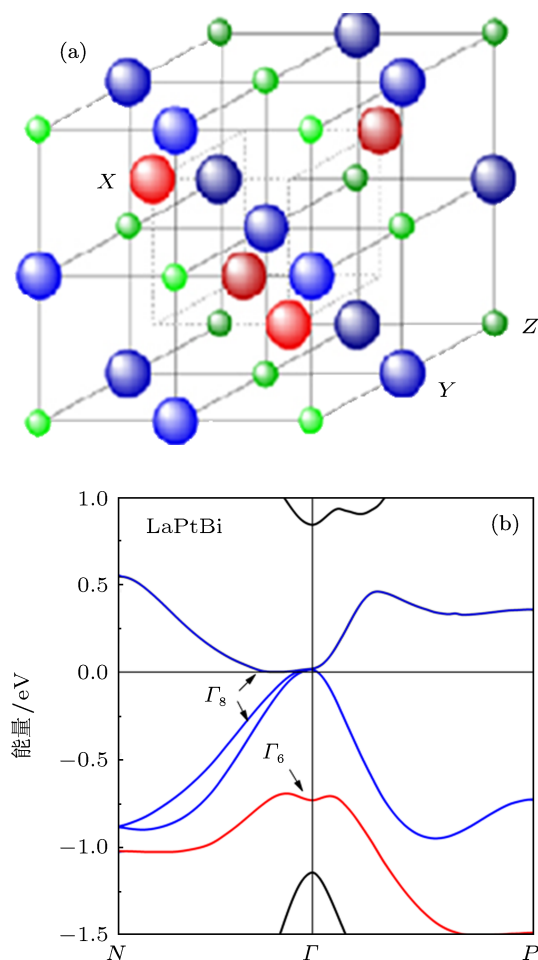


图 1 (a) 半 Heusler 合金晶体结构; (b) 半 Heusler 合金 LaPtBi 的能带结构

前人对半 Heusler 型拓扑绝缘体的理论研究大多针对上述提出的反键态条件 (用以产生金属性的表面态) 是否满足, 鲜有把研究重点集中在如何使拓扑绝缘体的体材料实现绝缘性的报道. 而获得半 Heusler 型拓扑绝缘体体材料的绝缘性需要破坏材料原有的立方对称性. 文献 [9] 简单提及施加单轴应力可以 LaPtBi 合金的 Γ_8 能带打开, 由于其工作重点不在于此并没有进行详尽地研究. 同时我们注意到, 半 Heusler 系列材料具有一个很吸引人的特征: 用同族的其他元素替换某种原子, 可以在不改变价电子浓度比的前提下改

变电负性和晶格常数. 所以我们考虑采用化学替代和施加等体积单轴 (拉、压) 应力两种方式来破坏半 Heusler 型拓扑绝缘体 LaPtBi 的立方对称性, 以期实现对其能带的调控: 一方面使得原本受立方对称性保护的 Γ_8 能带打开形成带隙; 另一方面, 调节费米能级的位置, 使其恰好落在打开的带隙之中. 这对于半 Heusler 型拓扑绝缘体材料的制备和新型拓扑绝缘体的探索都有着重要指导意义.

2 计算方法

本工作中所有成分的能带结构都采用 WIEN2K^[13] 计算程序软件包计算. 在 WIEN2K 程序计算中, 采用以 Kohn-Sham 密度泛函理论为基础的全势能线性缀加平面波 (full-potential linearized augmented plane wave, FP-LAPW)^[14] 方法. 该方法将晶胞划分为叠的 muffin-tin 球区和剩余的间隙空间区. 在 muffin-tin 球区内, 电荷密度和势能函数按球谐函数展开, 基函数为原子径向和球谐部分的乘积; 在间隙区, 由于势场变化比较平缓, 电荷密度、势函数和基函数则采用平面波展开. 并且在计算中考虑了自旋-轨道耦合^[15] 的作用. 交换-相关势采用局域自旋密度近似 (LSDA)^[16] 的方法处理. 波矢积分采用四面体网格法, 在第一布里渊区 k 点网格取 $12 \times 12 \times 12$. 取截断参数: $R_{\text{mt}} \times K_{\text{max}} = 8$, 其中, R_{mt} 是分子中最小的 muffin-tin 球半径, K_{max} 是平面波展式中的最大的倒格子矢量. 自洽计算的收敛精度取为 1×10^{-4} e/cell.

3 结果与讨论

3.1 化学替代

从图 1(b) 中我们看到 LaPtBi 合金的具有所谓的“反带”结构, 是其具有拓扑性质的一个直观反映, 然而它费米能级附近的 Γ_8 能带是受其半 Heusler 结构的立方对称性保护的, 使其体材料并未能具有绝缘体的性质. 这部分工作的目的便在于不破坏其“反带”结构的前提下, 通过化学替代的方式打破材料原有的立方对称性, 使它的 Γ_8 能带打开形成带隙. 为了避免改变体系本身能带翻转的特性, 最初的计算采用同样能够发生能带翻转的 ScPtBi 合金和 LaPtBi 合金之间进行化学

替代. 图 2(a), (b), (c), (d), (e) 分别为在 LaPtBi 合金用同族的 Sc 元素来替换 0%, 25%, 50%, 75%, 100% 的 La 元素的能带结构. 需要说明, 本工作中计算能带所采用的晶格常数通过能量优化得出. 以半 Heusler 合金 LaPtBi 为例, 优化得到的平衡晶格常数为 6.90 Å. 从图 2 中可以看到, LaPtBi 合金和 ScPtBi 合金的在费米能级附近的能带没有太大的差异, 根据 Oguchi^[17] 提出的理论, LaPtBi 合金费米能级附近 Γ 点的能带主要由 PtBi 组成的闪锌矿子晶格所决定, 而 La 作为该子晶格的填充元素只是对整个能带有额外的贡献, 并不会直接影响到我们所关注的 Γ_6 和 Γ_8 态, 这也是我们最初选取 Sc 元素替换 La 元素而不对 PtBi 元素进行替换的另一个重要原因. 正如我们期望的那样, 在整个替代的过程中, 这系列合金的 Γ_6 和 Γ_8 能带并没有发生太大的变化, 二重简并的 Γ_6 能带一直位于四重简并的 Γ_8 能带的下方. 也就是说, 这系列合金中能带翻转的特性一直保持着, 原本良好的金属表面态并不会随着替代的进行遭到破坏. 只

是较图 2(a) 和 (e), 三个掺杂成分的 Γ_8 能带上方出现了一些额外的能带, 主要是由于 Sc 原子、La 原子以及 Pt 原子之间的共价杂化作用以及材料晶格对称性的改变导致了能带的重构. 下面关注各图中的两对 Γ_8 能带 (小插图部分), 替换 25% Sc 元素的 La_{0.75}Sc_{0.25}PtBi 合金的 Γ_8 能带仍然交叠在一起, 较 LaPtBi 合金并没有发生太大的变化. 类似地, 替换进行 75% 的 La_{0.25}Sc_{0.75}PtBi 合金能带相应地与 LaPtBi 保持了较大的相似性. 然而, 当替换 50% Sc 元素时 (见图 2(c)), 可以清楚地看到, 两对 Γ_8 能带打开一带隙, 尽管只有微弱的 14 meV. 在此需要提及的是, 进行替换 25% 和替换 75% 时, 合金材料的空间群^[18] 由原来的 216 ($F\bar{4}3m$) 变为 215 ($P\bar{4}3m$), 对称性稍有下降; 而替换 50% 时生成结构的空群为 115 ($P\bar{4}m2$), 立方对称性遭到破坏的程度较为强烈. 这也恰恰解释了只有图 2(c) 的带隙打开, 而对于图 2(b) 和 (d) 的情况来说, 较小的对称性改变不足以使原本交叠得比较厉害的两对 Γ_8 能带打开.

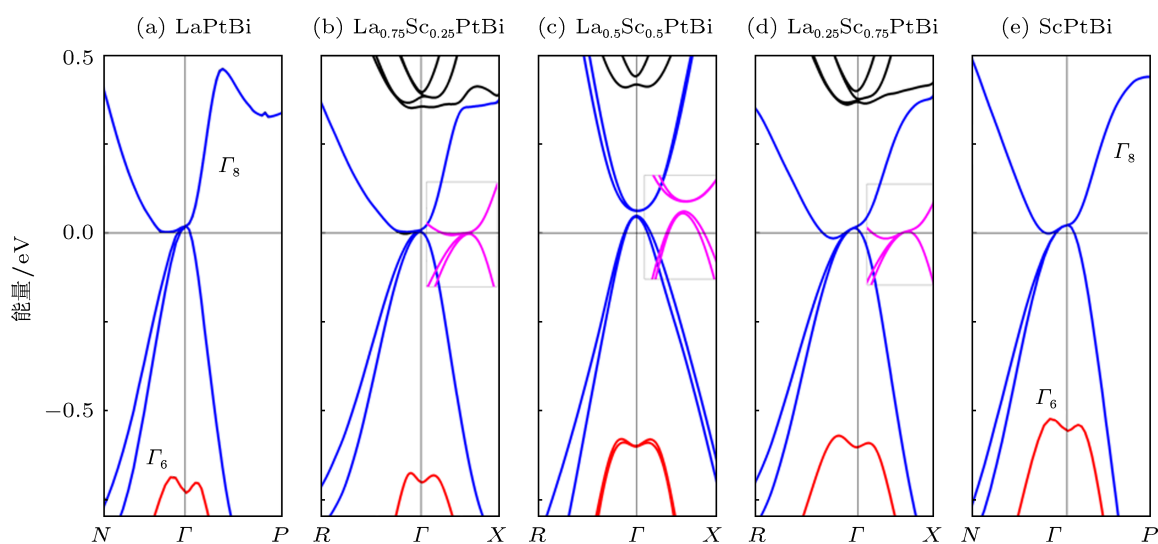


图 2 (a)—(e) 对 LaPtBi 合金用 Sc 元素逐渐替换 La 元素得到的各种成分的能带结构

为了探究改变 PtBi 闪锌矿子晶格对拓扑绝缘性的影响, 我们作了另一体系的化学替代. 图 3(a)—(e) 为 LaPtBi-LaPdBi 系列进行化学替代各成分的能带结构. 就两端成分而言, 同样选取了能够发生能带翻转却在费米能级处未出现带隙的 LaPtBi 合金; 而另外一端则选取了本身为良好的绝缘体却不

能发生能带翻转的 LaPdBi 成分, 像是这种绝缘体在文献 [7,8] 中被称为“平凡”绝缘体. 同样相互依次进行 25%, 50%, 75% 的替代. 从这些中间成分的能带结构 (图 3(b)—(d)) 中可以看到, 和前一系列化学替代成分相比, 不仅离费米能级较远部分的能带发生了能带重构现象, 由于改变了 PtBi 闪锌矿子

晶格,使得它们费米能级附近的 Γ_6 和 Γ_8 能带较两端成分发生了较大的变化,尤其是相对于“平凡”绝缘体 LaPdBi: 三种中间成分的 Γ_6 能带无一例外地都翻转到了蓝色的 Γ_8 能带的下方,即使是相对于 LaPdBi 只替换了 25% Pt 元素的 LaPt_{0.25}Pd_{0.75}Bi 成分,使得它与 LaPdBi 合金的能带发生了较大的变化.也就是说,通过化学替代,可以使原本为“平凡”绝缘体的成分,变为有望成为具有拓扑性质的“非平凡”绝缘体.然而,产生这种现象的根本原因在于:在 LaPdBi 中引入了原子序数较大的 Pt 来替换 Pd 元素,从而增强了系统的自旋-轨道耦合强度,使得原本位于费米能级上方的 Γ_6 能带

发生翻转.类似这种现象 Chadov 等人 [7] 也有过报道,同时他还给出了另外一种(变化晶格常数)来改变自旋-轨道耦合强度的方式.另外,观察图 3(b)—(d) 中的插图,和上面的 LaPtBi-ScPtBi 系列有所不同,当替换 25% 和 75% 时就可以使位于费米能级附近的 Γ_8 能带打开并形成一个小带隙.也就是说,在这一系列合金中,较小的晶格对称性破坏就足以使得 Γ_8 能带的带隙打开.然而仍旧是替换 50% 的 LaPt_{0.5}Pd_{0.5}Bi 成分的带隙打开得最为明显,也恰恰说明了能带打开的程度正是依赖于材料立方对称性遭到破坏的程度,这和前面的计算结果相符合.

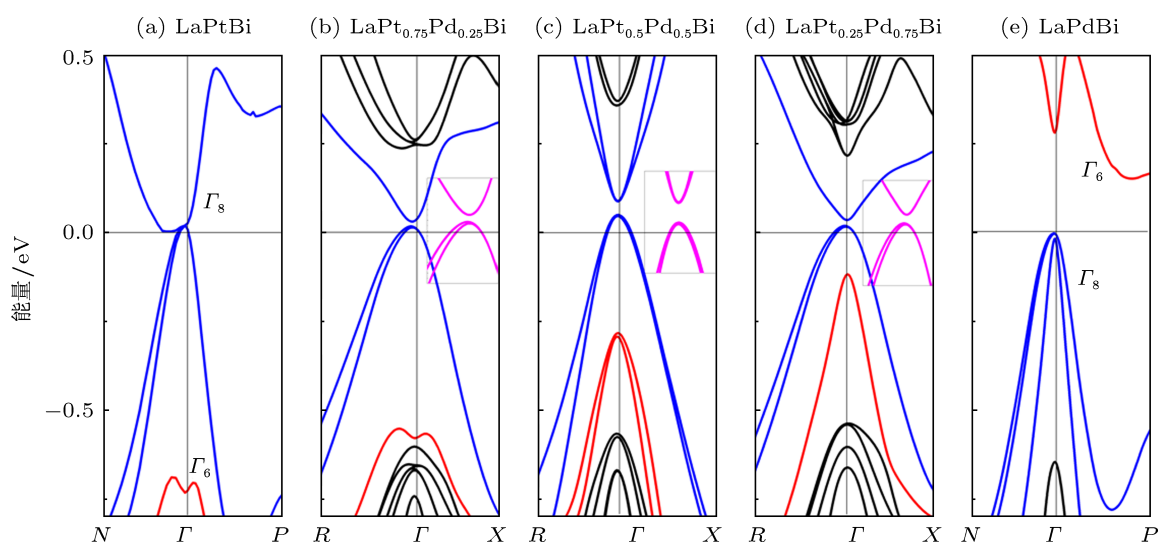


图 3 (a)—(e) 对 LaPtBi 合金用 Pd 元素逐渐替换 Pt 元素得到的各种成分的能带结构

还需要注意到,并不是所有对 Heusler 合金进行化学替代都能形成稳定的相.为了验证 LaPtBi-ScPtBi 和 LaPtBi-LaPdBi 系列合金是否有望在实际生长材料中实现,我们计算了各个成分的结合能.本工作中结合能的计算采用下面公式 [19]:

$$E_b = (E_{\text{tot}} - m_1 \times E_{X1} - m_2 \times E_{X2} - n_1 \times E_{Y1} - n_2 \times E_{Y2} - p \times E_Z) / (m_1 + m_2 + n_1 + n_2 + p),$$

其中 E_b 代表结合能, E_{tot} 表示合金体系总能量,而 E_{X1} , E_{X2} , E_{Y1} , E_{Y2} , E_Z 分别代表不同 X, Y, Z 元素各自形成单晶时的能量; m_1 , m_2 , n_1 , n_2 和 p 则为各元素在合金中的含量,为百分数表示.

图 4(a), (b) 为计算得到的两个化学替代体系的结合能.可以看出,每种成分的结合能均为负值,说明原子结合成合金后整个系统将具有更低的能量;同时,较未掺杂的成分,进行化学替代各成分具有更大的结合能:在两个系列合金中替换进行 50% 的成分的结合能大于 -6 eV,而替换 25% 和 75% 时结合能更大,均达到了 -12 eV 以上.可以看出采用化学替代来调节拓扑绝缘体 LaPtBi 的能带是合理的,而且从结合能的角度讲,在这些经过化学替代的各成分有望在实际中合成出来.

这部分工作主要集中在通过化学替代的方法来改变自旋-轨道耦合强度的同时,破坏半 Heusler 型拓扑绝缘体材料的立方对称性,从而使原本受保

护的 Γ_8 能带在费米能级附近打开形成带隙. 正如引言中提到的那样, 这些在先前的文献中虽有提及, 但都未能给出详尽的报道. 需要引起我们注意的是, 这里通过化学替代的方式是在保证材料能够发生能带翻转的前提下, 使得 Γ_8 能带的带隙打开, 离我

们实现拓扑绝缘体就更进一步了; 然而此时费米能级的位置却没有能够处于打开的带隙之中, 这样就破坏了体材料的绝缘性, 所以并没能实现真正意义上的表面是金属性而块体内部是绝缘性的拓扑绝缘体.

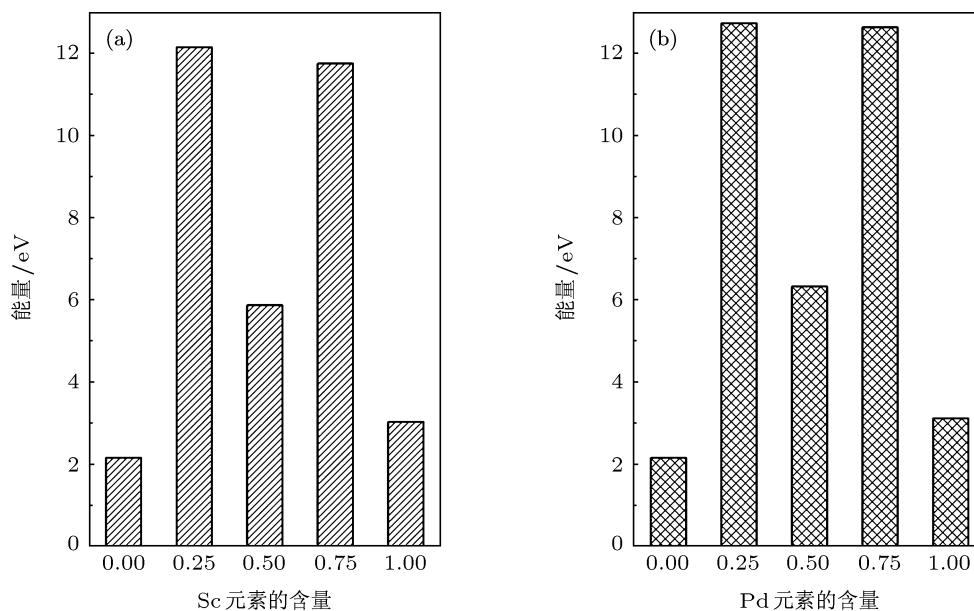


图4 对 LaPtBi 合金进行化学替代各成分的结合能 (a) La_{1-x}Sc_xPtBi ($x = 0.00, 0.25, 0.50, 1.00$) 系列合金; (b) LaPt_{1-x}Pd_xBi ($x = 0.00, 0.25, 0.50, 1.00$) 系列合金

3.2 施加单轴应力

图5表示对半 Heusler 合金 LaPtBi 在保证体积不变的基础上沿 [001] 方向施加不同的单轴拉应力和压应力, 考虑到实际材料生长, 只计算了 10% 以内单轴应力的能带变化. 图中的 -2, -4, -6, -8 分别表示对其施加 2%, 4%, 6%, 8% 的单轴压应力, +2, +4, +6, +8 则表示施加相应大小的单轴拉应力. 从图中可以看到, 无论是施加拉应力还是压应力, 各能带大体的形状与位置较立方的 LaPtBi 合金 (图 1(b)) 并没有发生太大的改变, 红色的 Γ_6 能带一直处于蓝色的 Γ_8 能带的下方, 能带翻转的特性一直保持着, 这是因为仅仅对材料施加较小单轴应力, 并没有改变元素的种类, 而且各原子的周围环境也没有发生较大的变化. 然而, 从施加 2% 的单轴 (压或拉) 应力开始, 材料的晶格由原来的立方对称性降低为四方对称性, 使得费米能级附近受保护的 Γ_8 能带明显打开形成带隙. 同时, 也正是由于晶格对称性的变化影响了 La 原

子和 Pt 的共价杂化作用, 费米能级出现的位置也发生了一定的变化. 对于压应力而言, 随着压应力的增大, 费米能级逐渐向着价带顶的方向移动, 当压应力为 6% 和 8% 时, 费米能级恰好位于 Γ_8 能带打开的带隙之中. 在这种情形下, 我们便达到了预期的效果: 在保证能带翻转的前提下, 破坏晶格对称性使得受保护的 Γ_8 能带形成一带隙, 同时调节费米能级到带隙之中, 从而得到了真正意义上的拓扑绝缘体. 然而施加同样大小的拉应力却未能得到同样的效果, 包括施加 2% 和 4% 的拉应力, 费米能级也不可避免地切到了 Γ_8 能带.

为了更加清晰展示出费米能级在 6% 和 8% 压应力附近的变化, 我们补充计算了对 LaPtBi 施以 5% 和 7% 的压应力的能带结构, 并同时 将 6% 和 8% 压应力的能带图放大集中在一起, 如图 6 所示. 从图中可以看出, 在压应力为 5% 时, 费米能级开始进入打开的能隙之中, 而后, 随着拉应力的增大, 向着高能级的方向移动, 直到施加 7% 的

压应力时, 费米能级大体位于打开的导带和价带中间; 当施加更大的拉应力 (图 6 中的施加 8% 压应力的情形) 后, 费米能级又开始向低能级方向移动. 从

而, 通过对半 Heusler 合金 LaPtBi 施加不同大小的等体积单轴压应力, 就可以对费米能级的位置进行有规律地调控.

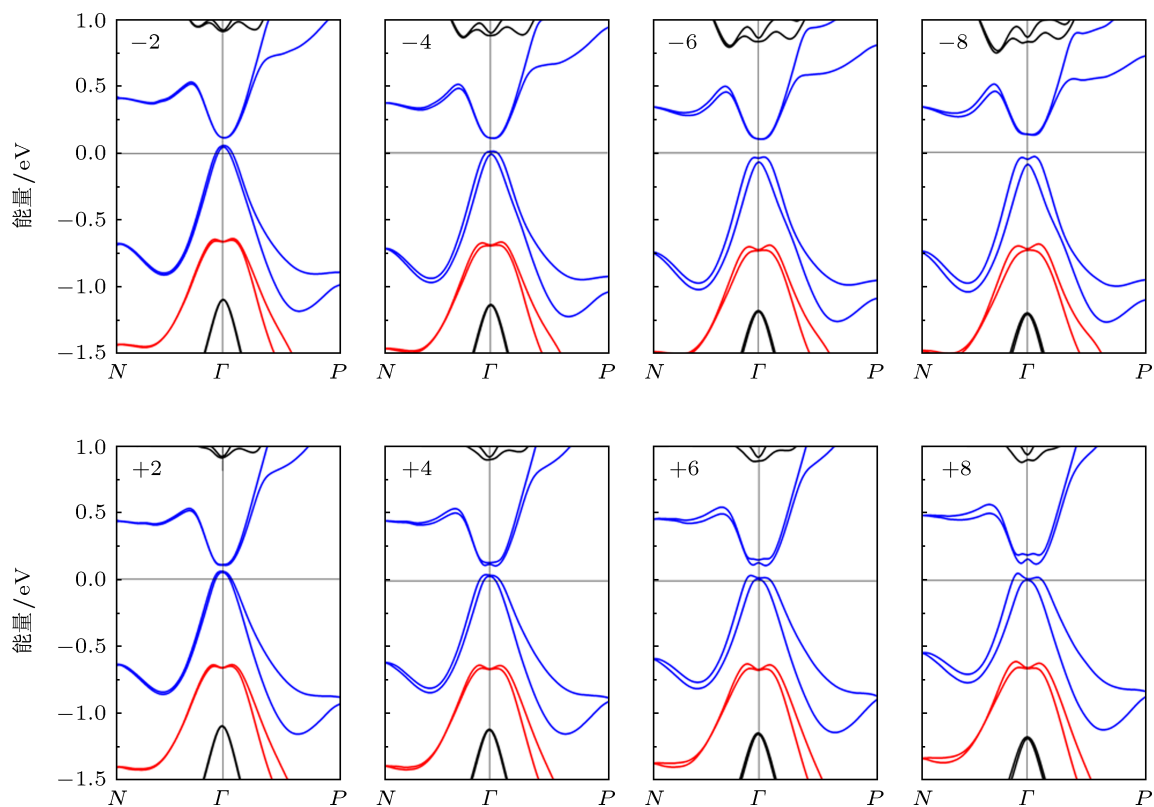


图 5 对 LaPtBi 合金沿 [001] 方向施加不同的等体积单轴压应力和拉应力的能带结构

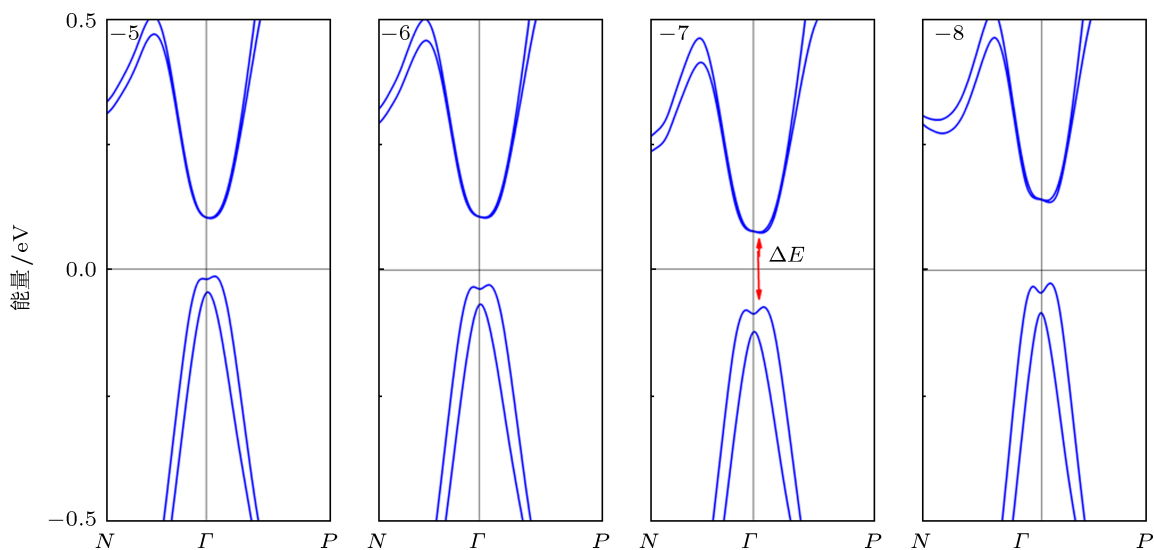


图 6 对 LaPtBi 合金沿 [001] 方向分别施加 5%, 6%, 7%, 8% 的等体积压应力的能带结构

进一步讨论等体积单轴应力对 LaPtBi 能带的影响. 图 7(a) 直观地给出了费米能级在不同的单轴应力下出现的位置. 其中横坐标的 0 点代表未施以单轴应力的情况. 图中实心 and 空心圆点分别代表在不同应力下 Γ 点处导带底和价带顶的能量位置. 可以很直观地看到, 无论施加多大的单轴拉应力 (图 7(a) 中的横轴 0 点的右方), 费米能级一直位于价带顶的下方; 而对于压应力情况, 费米能级在 5% 拉应力时开始进入导带和价带中间, 这正是前文所提到的. 另外, 需要注意的是, Γ 方向上导带底和价带顶的能量差便是由单轴应力诱导打开

的体能隙的大小, 在此我们用 ΔE 来表示, 其中立方 LaPtBi 的 ΔE 为 0. 图 7(b) 便为在不同的等体积单轴应力下 ΔE 的变化, 从中可以看出, 施加单轴应力使得 Γ_8 带隙打开非常有效, 其中施以 8% 的单轴压应力诱导打开的体能隙可以高达 0.18 eV. 而且不论是单轴拉应力还是压应力, 随着应力的增大, LaPtBi 晶格扭曲的程度逐渐增大, ΔE 都呈现了出近似线性增大的特点. 而且通过从图 7(b) 中的各条能量等高线比较同样大小的拉应力和压应力情况对 ΔE 的影响, 发现单轴压应力对于使得 Γ_8 能带打开的效率较拉应力更高.

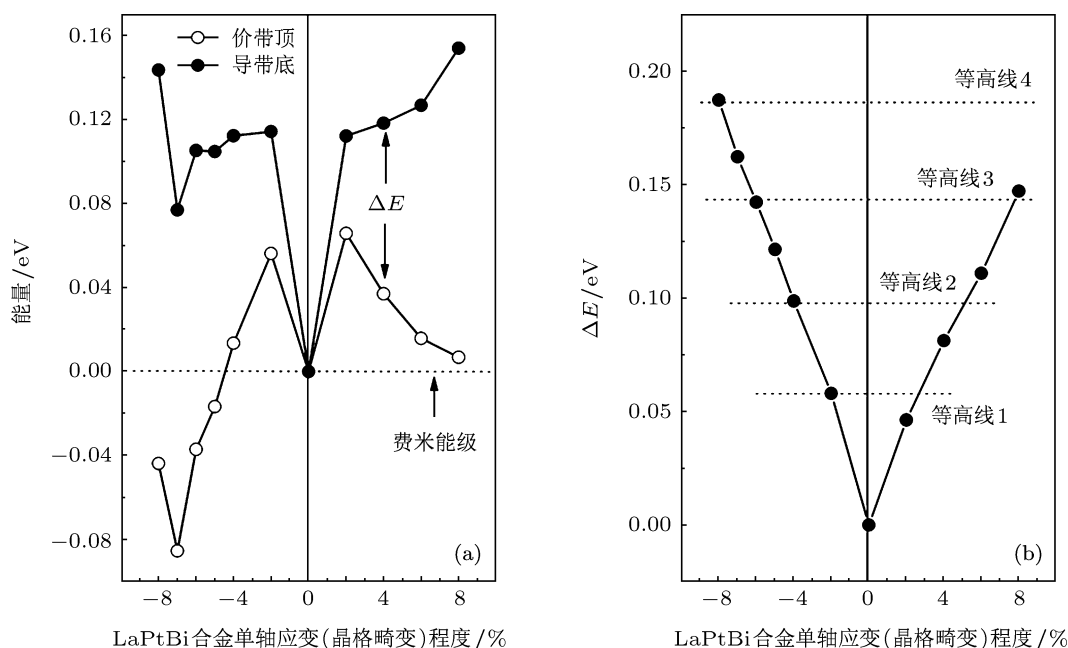


图 7 (a), (b) 分别为 LaPtBi 合金的费米能级位置和 ΔE 随单轴应变程度变化情况

在保持等体积的前提下, 通过施加单轴应力, 无论是对 LaPtBi 合金的体能隙还是费米能级的位置都可以得到调节, 最终成功实现了真正意义上的拓扑绝缘体. 然而, 实际生长材料的过程中, 在单轴应力下不一定能够保持晶格的等体积变化. 对于松弛体积施以单轴应力情况我们也进行过详细讨论和报道 [20]. 发现从能量最低原理的角度讲, 松弛体积的单轴应力对于实际材料的生长更为合理, 但仍可以通过施加一定大小的单轴压应力使得 LaPtBi 合金费米能级的位置位于 Γ_8 能带打开的带隙之中,

正和本工作中的现象一致.

4 结论

运用第一性原理计算, 研究了化学替代及等体积单轴 (拉、压) 应力来实现对半 Heusler 型拓扑绝缘体 LaPtBi 能带的调控. 研究发现, 对于两端成分为 LaPtBi 和 ScPtBi 的系统来说, 当 La 和 Sc 相互替换 50% 时, 在保证能带翻转的前提下, Γ_8 能带打开微弱的带隙; 而对于 LaPtBi-LaPdBi 系列的化学

替代, 相互替代 25%, 50%, 75% 都可以使得上面所说的带隙打开, 但仍是替代 50% 时打开的幅度最大, 原因是进行 50% 的替代对立方晶格对称性破坏的程度最大; 同时通过计算得到各成分的结合能为负值, 说明从实际生长材料角度讲这两个系列的化学替代有望在实验中实现. 而通过施加等体积单轴应力来使得立方晶格扭曲的方式, 也可以使 LaPtBi 的能带在费米面附近明显地打开一能隙. 计算结果表明, 在 10% 的范围内, 无论是施加单轴拉应力还是

压应力, 其诱导打开体能隙 (ΔE) 的大小随着应力的增大而呈现近似线性增大的现象, 而单轴压应力对于使得 T_8 能带打开的效率较同样大小的拉应力更高. 通过这种方式不仅可以改变 ΔE 的大小, 而且还可以实现对费米能级的位置有规律地调节: 当施加 5%—8% 的单轴压应力时, 费米能级恰好位于打开的体能隙之中, 从而实现了真正意义上的拓扑绝缘体. 这对于半 Heusler 型拓扑绝缘体材料的制备和新型拓扑绝缘体探索的都有重要的指导意义.

- [1] Fu L, Kane C L 2007 *Phys. Rev. B* **76** 045302
- [2] Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S C 2006 *Science* **314** 1757
- [3] Zhang H J, Liu C Q, Qi X L, Dai X, Fang Z, Zhang S C 2009 *Nature Phys.* **5** 438
- [4] Kuroda K, Kimura A, Eremnev S V, Ueda Y, Tanijuchi M 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 14680
- [5] Feng W X, Xiao D, Ding J, Yao Y G 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 016402
- [6] Sun Y, Chen X Q, Li D Z, Cesare F, Yunoki S, Li Y Y, Sun Z F 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 016402
- [7] Chadov S, Qi X L, Kubler J, Fecher G, Felser C 2010 *Nature Mater.* **9** 541
- [8] Lin H, Wray A, Xia Y Q, Xu S Y, Jia S, Hasan M Z 2010 *Nature Mater.* **9** 546
- [9] Xiao D, Yao Y G, Feng W X, Zhu W G, Chen X Q, Zhang Z Y 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 096404
- [10] Heusler F 1903 *Deut. Phys. Ges.* **5** 219
- [11] Wen L W, Wang Y M, Pei H X, Ding J 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 047110 (in Chinese) [文黎巍, 王玉梅, 裴慧霞, 丁俊 2011 物理学报 **60** 047110]
- [12] Xie W J, Tang X F, Zhang Q J 2007 *Chin. Phys.* **16** 3549
- [13] Blaha P, Schwarz K, Soarntin P 1990 *Comput Phys. Commun* **59** 39
- [14] SiHanlumuayang Y, Ohodnicki P R, Laughlin D E, McHenry M E 2006 *J. Appl. Phys.* **99** 08F101
- [15] Singh D J 1994 *Planwaves, Pseudopotentials ang the LAPW method* (Boston: Kluwer Academic)
- [16] Perdew J P, Wang Y 1992 *Phys. Rev. B* **45** 13244
- [17] Tamio Oguchi 2001 *Phys. Rev. B* **63** 125115
- [18] Huang K, Han R Q 1988 *Solid State Physics* (Beijing: Higher Education Press) p36 (in Chinese) [黄昆, 韩汝琦 1988 固体物理 (北京: 高等教育出版社) 第 36 页]
- [19] Gutsev G L, Andrews L, Bauschlicher C W 2003 *Theor. Chem. Acc.* **109** 298
- [20] Zhang X M, Wang W H, Liu E K, Liu G D, Liu Z Y, Wu G H 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 071901

Investigation on regulating the topological electronic structure of the half-Heusler compound LaPtBi*

Zhang Xiao-Ming¹⁾²⁾ Liu Guo-Dong¹⁾ Du Yin²⁾ Liu En-Ke²⁾ Wang Wen-Hong^{2)†}
Wu Guang-Heng²⁾ Liu Zhong-Yuan³⁾

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

2) (State Key Laboratory of Magnetism, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

3) (State Key Laboratory of Metastable Material Sciences, Yansan University Technology, Qinhuangdao 066004, China)

(Received 20 September 2011; revised manuscript received 28 October 2011)

Abstract

Using the full-potential linearized augmented plane-wave method based on the density functional theory, we investigate the influences of chemical substitution and uniaxial strain on the topological electronic structure of the half-Heusler compound LaPtBi. It is shown that the Γ_8 band which is protected by the cubic symmetry of the $C1_b$ structure can open and form a gap by substituting Sc element for La or Pd for Pt in LaPtBi compound. However, in the case of distorting cubic lattice by using a uniaxial strain, not only the gap mentioned above appears, but also the Fermi level can be tuned regularly. Thus the LaPtBi compound becomes a real topological insulator.

Keywords: first-principles calculation, topological insulators, half-Heusler compounds

PACS: 31.15.Ar, 71.20.Be

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51171207), and the National Foundation for Innovative Research Groups (Grant No. 51020161).

† E-mail: wenhong.wang@iphy.ac.cn