

应变调控下 $\text{Ti}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ 中的拓扑相变*徐诗琳^{1)2)#} 胡岳芳^{1)2)#} 袁丹文¹⁾²⁾ 陈巍^{3)4)†} 张薇^{1)2)3)‡}

1) (福建师范大学物理与能源学院, 福建省量子调控与新能源材料重点实验室, 福州 350117)

2) (福建省先进高场超导材料与工程协同创新中心, 福州 350117)

3) (福建师范大学碳中和研究院, 福州 350007)

4) (福建师范大学化学与材料学院, 福州 350007)

(2023 年 1 月 9 日收到; 2023 年 3 月 31 日收到修改稿)

拓扑电子材料因为具有非平庸的拓扑态, 所以会展现出许多奇异的物理性质. 本文通过第一性原理计算对应变调控下的烧绿石三元氧化物 $\text{Ti}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ 中的拓扑相变进行了研究. 首先分析了原子轨道投影能带, 发现体系费米能级附近 O 原子的 ($p_x + p_y$) 与 p_z 轨道发生了能带反转, 再构造了紧束缚模型计算得到体系的 Z_2 拓扑不变量确定了其拓扑非平庸性, 最后研究了表面态等拓扑性质. 研究发现未施加应变的 $\text{Ti}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ 是一个在费米能级处具有二次能带交叉点的半金属, 而平面内应变会破缺晶体对称性进而使体系发生拓扑相变. 当对体系施加-1%的压缩应变时, 它会转变为狄拉克半金属; 当对体系施加1%的拉伸应变时, 体系相变为拓扑绝缘体. 本研究对于在三维材料中调控拓扑相变有着较重要的指导意义, 并且为低能耗电子器件的设计提供了良好的材料平台.

关键词: 拓扑绝缘体, 拓扑相变, 狄拉克半金属**PACS:** 71.20.-b, 73.20.At, 73.43.Nq**DOI:** 10.7498/aps.72.20230043

1 引言

自 2006 年 Bernevig 等^[1]首次提出拓扑绝缘体可以在 HgTe/CdTe 量子阱中实现以来, 基于拓扑电子材料进行的物态调控逐渐成为凝聚态物理的研究热点之一. 其中, 拓扑绝缘体 (topological insulator, TI) 因其迷人的拓扑特性备受关注. TI 具有绝缘的体能隙和无能隙的表面态, 这种受时间反演对称性保护的表面态具有自旋-动量锁定的特点, 且因不具有背散射, 从而导致了鲁棒的电子传输性质, 这使得 TI 可应用于低能耗自旋电子器件^[2,3].

狄拉克半金属 (Dirac semimetal, DSM) 作为拓扑电子材料的另一分支, 同样表现出奇异的传输特性和优异的物理性质^[2,4]. 它具有受适当晶体对称性保护的孤立的四重简并节点, 且在动量空间中该简并点周围的能带存在线性色散关系. 该线性色散和自旋动量锁定关系使得 DSM 中的低能电子不受晶体无序和缺陷的影响, 进而导致较高的载流子迁移率^[5]. 这些拓扑相的发现极大地推动了凝聚态物理的发展. 截止目前, 已报道了多种可调控应变的 TI^[6-8] 和 DSM^[9,10] 材料, 然而对能够同时具有不同拓扑相材料的研究仍然较少, 因此有必要设计一种可调控拓扑相变的三维体系, 以实现不同的输运特性.

* 国家自然科学基金 (批准号: 11974076)、光合基金 A 类 (批准号: 202302019222)、福建省自然科学基金重点项目 (批准号: 2021J02012) 和福建师范大学碳中和研究院研究基金 (批准号: TZH2022-05) 资助的课题.

同等贡献作者.

† 通信作者. E-mail: chenwei@fjnu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: zhangw721@163.com

烧绿石氧化物可表示为 $A_2B_2O_6O'$ (A 可以是 Eu, Y, Nd 等稀土元素, B 可以是 Nb, Ir, Ta 等过渡金属元素)^[11,12]. 由于其组成的灵活性, 可以通过在晶格中引入多种元素来调控电子/空穴迁移率^[13], 因此烧绿石氧化物是探索拓扑相变的理想材料. 目前关于烧绿石氧化物中拓扑相的研究, 主要包括万贤纲等^[14]发现 $Y_2Ir_2O_7$ 的电子基态为外尔半金属, Sakata 等^[15]在实验上观测到外尔半金属候选材料 $Nd_2Ir_2O_7$ 的金属-绝缘体相转变, Hase 和 Yanagisawa^[16]提出了掺杂体系 $(In, Sn)_2(Nb, Zr)_2O_7$ 可能是强 TI 的候选材料, Das 等^[17]提出通过施加应变使 $Eu_2Ir_2O_7$ 的 Ir—O 键键长变小时, 体系可以实现 TI 相, 张薇等^[18]提出在铌酸钽 $Tl_2Nb_2O_{6+x}$ 中掺杂磁性元素后会出现磁性外尔半金属相等.

本文通过第一性原理计算, 提出了具有烧绿石结构的氧化物 $Tl_2Ta_2O_7$ ^[19,20]在施加应变后可以展现出多种拓扑非平庸相. 结果表明平面内压缩应变可以将它从具有二次能带交叉点 (quadratic contact point, QCP) 的半金属相转变为 DSM 相, 而平面内拉伸应变可以将它转变为强 TI 相. 因此, 本研究表明平面内应变可以在该材料中实现不同的拓扑电子态, 并且应变下的 $Tl_2Ta_2O_7$ 是潜在的低耗散量子器件的理想候选材料.

2 计算方法

本文通过 VASP(Vienna *ab initio* simulation package)^[21,22]软件, 使用投影缀加平面波 (projector augmented wave, PAW)^[23,24]方法, 进行了基于密度泛函理论的第一性原理计算. 在计算中选取 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 形式的广义梯度

近似 (generalized gradient approximation, GGA) 处理交换关联泛函^[25]; 平面波截断能为 350 eV; 晶体结构被充分弛豫直至每个原子所受最大残余力小于 0.001 eV/Å. Methfessel-Paxton 方法用于半金属体系的计算, 而高斯方法用于绝缘体系的计算, 二者展宽均为 0.01 eV; 自洽电子结构计算采用 $12 \times 12 \times 12$ 的 k 点网格对布里渊区进行采样; 将最局域 Wannier 函数 (maximally localized Wannier functions, MLWF)^[26,27]引入 WannierTools^[28], 构建了紧束缚模型用于计算体系的拓扑性质. 通过调控 $Tl_2Ta_2O_7$ 的晶格常数来施加沿 [001] 方向的单轴应变, 这种单轴应变是通过调整 a/c 比例且固定实验体积来模拟的. 这里, a 是沿 x 与 y 方向的晶格常数, c 是沿 z ([001]) 方向的晶格常数. 应变定义为 $\varepsilon = (a' - a_0)/a_0 \times 100\%$, 负号表示压缩, 正号表示拉伸, 其中 a_0 和 a' 分别是未施加应变和施加单轴应变时的晶格常数.

3 结果与讨论

3.1 晶体结构

如图 1(a) 所示, 理想的三元氧化物 $Tl_2Ta_2O_7$ 为烧绿石结构^[19,20]. 它的空间群为 $Fd\bar{3}m$ (No. 227; $Z = 2$), 其第一布里渊区如图 1(b) 所示. Tl 原子占据 $16d$ ($1/2, 1/2, 1/2$) 位置, Ta 原子占据 $16c$ ($0, 0, 0$) 位置. 有两种氧原子, 分别是在 $48f$ ($0.2925, 1/8, 1/8$) 位置的 O 和在 $8b$ ($3/8, 3/8, 3/8$) 位置的 O' . 4 个 Tl 原子形成四面体结构, 中心有一个 O' 原子. Ta 原子与位于 $48f$ 上的 6 个 O 原子构成 TaO_6 八面体. $Tl_2Ta_2O_7$ 经完全弛豫后的晶格常数为 $a_0 = 10.734$ Å.

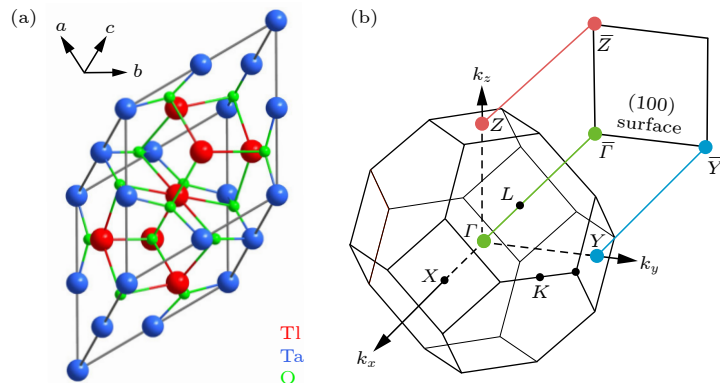


图 1 (a) $Tl_2Ta_2O_7$ 的原胞; (b) 体结构第一布里渊区及 (100) 表面布里渊区示意图

Fig. 1. (a) Primitive unit cell of $Tl_2Ta_2O_7$; (b) schematic of the bulk first Brillouin zone (BZ) and projected surface BZ for (100) surface.

考虑在 xy 面施加-1% 压缩应变和 1% 拉伸应变的情况, 此时空间群由 $Fd\bar{3}m$ (No. 227) 变为 $I4_1/amd$ (No. 141). 当在 xy 平面施加-1% 的压缩应变时, 晶格常数变为 $a = b = 0.99a_0$, $c = 1.02a_0$; 对体系的 xy 平面施加 1% 的拉伸应变时, 晶格常数变为 $a = b = 1.01a_0$, $c = 0.98a_0$. 应变的施加导致体系发生了有趣的拓扑相变, 具体将在后文讨论.

3.2 $Tl_2Ta_2O_7$ 的能带结构

为了研究应变对 $Tl_2Ta_2O_7$ 电子结构的影响, 首先探讨了没有施加应变时体系的能带结构. 在不考虑自旋-轨道耦合 (spin orbit coupling, SOC) 相互作用时, 能带结构如图 2(a) 黑色实线所示. 导带底 (conduction band minimum, CBM) 与价带顶 (valence band maximum, VBM) 交于 Γ 点, 且交点位于费米能级处, 放大图如图 2(b) 所示, 这说明此时 $Tl_2Ta_2O_7$ 是一个在 Γ 点处具有三重简并的 QCP 半金属. Γ 点的电子态主要源于 t_{2g} 轨道, 它由 Tl 的 d 轨道和 O 的 2p 轨道杂化而成. 在考虑 SOC 时, 能带结构如图 2(a) 红色虚线所示. Γ 点处的 QCP 分裂为一个双重简并的 Γ_7^+ 态和一个四重简并的 Γ_8^+ 态^[19,29], 如图 2(b) 所示, 其中 Γ_7^+ 高于 Γ_8^+ , 这表明此处有效 SOC 相互作用是负的^[30]. 接下

来计算了未施加应变体系在考虑 SOC 情况下的能带结构以及费米能级附近 O 的 p_x , p_y , p_z 轨道分辨能带, 如图 2(c) 所示. 可以看出, 未施加应变时, 体系的 CBM 与 VBM 在 Γ 点相交, 构成一个四重简并点, 对称性分析表明该简并点由 O_h 点群保护, 形成无能隙半金属态. 该简并点附近的导带主要由 O 的 (p_x+p_y) 轨道构成, 价带主要由 O 的 p_z 轨道构成. 此时, (p_x+p_y) 轨道高于 p_z 轨道, 体系处于正带结构.

当在 xy 平面施加-1% 的压缩应变并不考虑 SOC 时, Γ 点的点群由 O_h 转变为 D_{4h} , 使得如 d_{xz} 和 d_{yz} 这样的轨道向 z 方向延伸, 造成了它们与 d_{xy} 轨道具有不同的在位能. 此时在 $-Z \rightarrow \Gamma$ 和 $\Gamma \rightarrow Z$ 方向上分别出现了一个三重简并点, 对称性分析表明它们受到 C_{4v} 对称性的保护. 当考虑 SOC 时, 如图 2(d) 所示, 体系沿 $-Z \rightarrow \Gamma$ 方向出现了能带交叉点, 且该交叉点附近的能带具有线性色散的特点, 因此该交叉点是一个四重简并狄拉克点^[31,32], 该狄拉克点受到 C_{4v} 对称性的保护. 又因为体系具有空间反演对称性, 所以在 $\Gamma \rightarrow Z$ 方向也存在另一个等价的四重简并狄拉克点. 另外, 轨道分辨能带图 2(d) 显示 Γ 点附近 (p_x+p_y) 轨道 (红色圆圈) 能量低于 p_z 轨道 (绿色方块) 的能量, 相较于图 2(c) 的正带

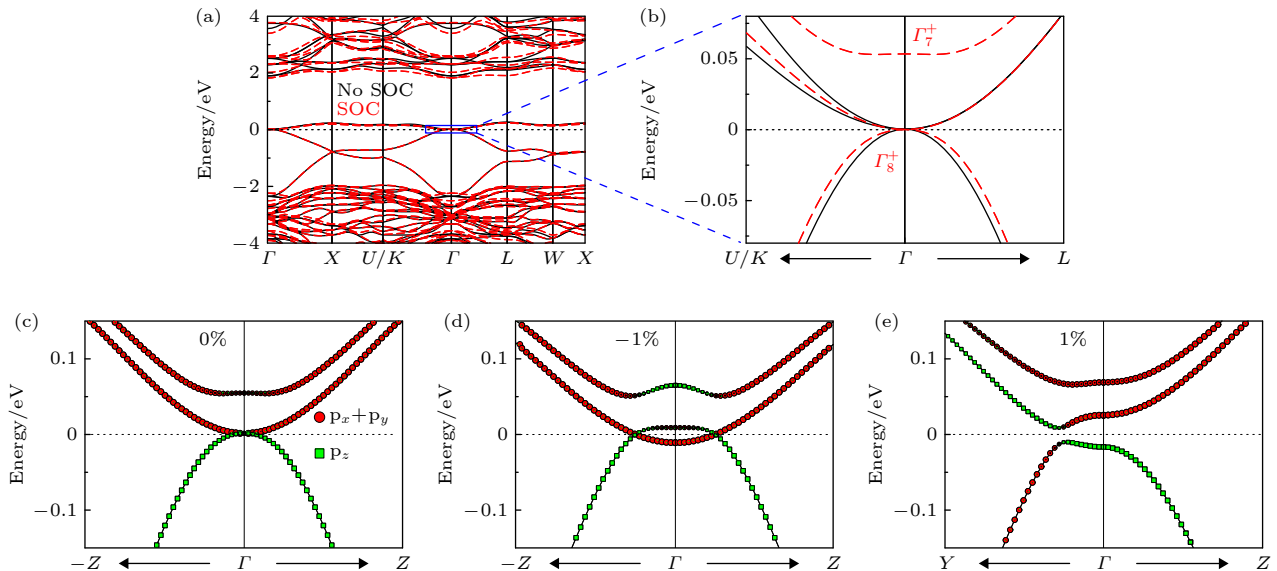


图 2 $Tl_2Ta_2O_7$ 的能带结构 (a) 未施加应变时, 不考虑 SOC (黑色实线) 和考虑 SOC (红色虚线) 时的能带结构; (b) Γ 点费米能级附近能带的放大图. SOC 相互作用下体系的轨道分辨能带图 (c) 未施加应变; (d) 应变为-1% (平面内压缩); (e) 应变为 1% (平面内拉伸)

Fig. 2. Band structures of $Tl_2Ta_2O_7$ system: (a) Non-SOC (black solid lines) and SOC (red dashed lines) band structures without strain; (b) the zoom-in band structure around Γ point near the Fermi level. SOC orbital-resolved band structure: (c) Without strain; (d) with strain of -1% (in-plane compression); (e) with strain of 1% (in-plane expansion).

结构, 可以得出这里的 (p_x+p_y) 轨道与 p_z 轨道反转形成反带结构^[33]. 因此-1% 压缩应变驱动体系从 QCP 半金属相转变到 DSM 相.

当在 xy 平面施加 1% 的拉伸应变且不考虑 SOC 时, 体系沿着 $Y \rightarrow \Gamma$ 方向出现了能带交叉点, 该交点受 C_{2v} 对称性的保护. 考虑 SOC 后, 如图 2(e) 所示, 体系沿 $Y \rightarrow \Gamma$ 方向的交点被打开. 当远离 Γ 点时, 体系的 p_z 轨道 (绿色方块) 高于 (p_x+p_y) 轨道 (红色圆圈), 而当接近 Γ 点时, p_z 轨道却变得低于 (p_x+p_y) 轨道, 形成反带结构^[7,34]. 所以, 1% 拉伸应变驱动半金属体系转变为全局能隙约为 19 meV

的强 TI.

3.3 单轴应变下 $\text{Ti}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ 的拓扑性质

如 3.2 节所述, 在施加平面内压缩应变时, $\text{Ti}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ 是 DSM. 利用格林函数方法, 进一步使用 Wannier 函数构造了紧束缚哈密顿量计算其表面态. 图 3(a) 为 (100) 面 $\bar{Y} \rightarrow \bar{\Gamma} \rightarrow \bar{Z}$ 方向的表面态及其费米能级附近的放大图. 可以看出, 沿 $\bar{\Gamma} \rightarrow \bar{Z}$ 方向在费米能级附近出现了一个由体电子态相交而成的狄拉克点, 且在能隙中出现了分别在 \bar{Y} 点和 \bar{Z} 点相交的两支表面态. 一支表面态连接体能带

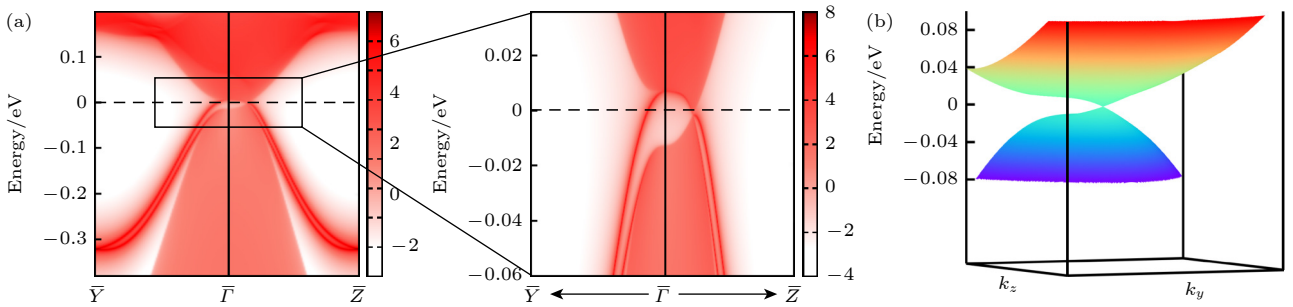


图 3 考虑 SOC 时, 施加-1% (平面内压缩) 应变的 $\text{Ti}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ (100) 表面的拓扑性质 (a) 狄拉克点和拓扑表面态 (右图为费米能级附近的放大图); (b) 狄拉克锥三维立体图

Fig. 3. Topological properties of $\text{Ti}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ with SOC on (100) surface under -1% (in-plane compression) strain: (a) Dirac point and topological surface states (The right panel shows the enlarged image near the Fermi level); (b) three-dimensional display of the Dirac cone.

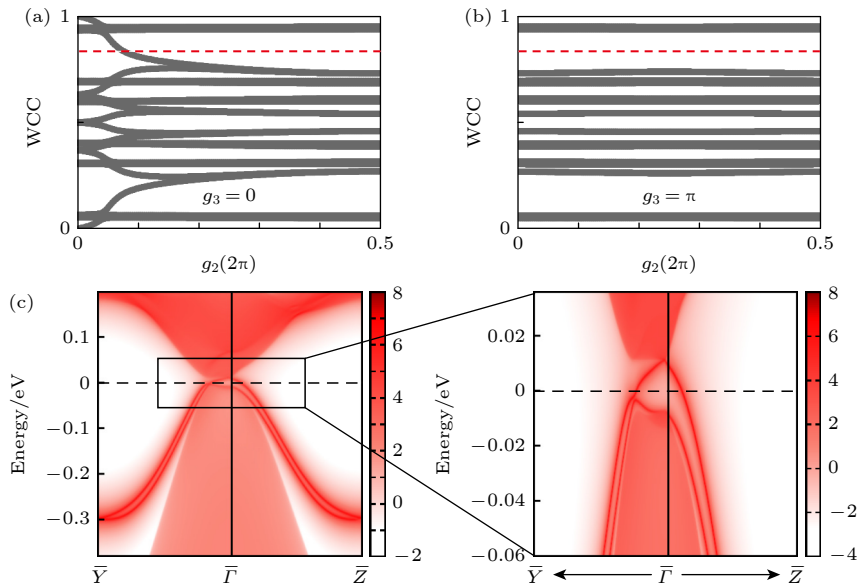


图 4 考虑 SOC 时, 施加 1% (平面内拉伸) 应变的 $\text{Ti}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ (100) 表面的拓扑性质 (a) $g_3 = 0$ 平面和 (b) $g_3 = \pi$ 平面 Wannier 电荷中心 (WCC) 的演化, $g_{1,2,3}$ 是原胞的倒格子基矢. Wannier 中心 (黑线) 与参考线 (红线) 在 $g_3 = 0$ 平面上相交 1 次, 而在 $g_3 = \pi$ 平面上相交 0 次. (c) 拓扑表面态及其费米能级附近的放大图

Fig. 4. Topological properties of $\text{Ti}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ with SOC on (100) surface under 1% (in-plane expansion) strain. Evolution of the Wannier charge centers (WCC) in (a) $g_3 = 0$ plane and (b) $g_3 = \pi$ plane, where $g_{1,2,3}$ are reciprocal vectors of the primitive lattice. The WCC (black lines) cross the reference line (red line) once in the $g_3 = 0$ plane and zero times in the $g_3 = \pi$ plane. (c) Topological surface states. The right panel shows the enlarged image near the Fermi level.

的导带,另一支连接体能带的价带.该拓扑非平庸相的出现与前述能带反转结果相符.此外,还计算了狄拉克锥的三维立体图,如图 3(b) 所示.值得注意的是,在倒空间中,该狄拉克点附近的能带色散具有很强的各向异性,这将导致其与石墨烯中的狄拉克费米子有着显著不同的输运性质.

然后,对施加 1% 平面内拉伸应变时体系的拓扑性质进行了具体分析.具有时间反演不变性的材料,其能带的拓扑性质可以用 4 个独立 Z_2 拓扑指标 ($\nu_0; \nu_1, \nu_2, \nu_3$) 来描述.当 $\nu_0 = 1$ 时,材料是强拓扑绝缘体;如果 $\nu_0 = 0$,且 ν_1, ν_2, ν_3 中至少有一个不为 0,则相应的材料是弱拓扑绝缘体,在特殊表面上具有偶数个狄拉克锥;当 Z_2 拓扑不变量为 (0; 0, 0, 0),则为普通绝缘体^[35,36].由于在 1% 平面内拉伸应变下体系受时间反演对称性的保护,所以我们使用 Wilson loop^[37,38] 方法计算了 Z_2 拓扑指标来分析体系的拓扑性质. Wannier 电荷中心在 $g_3 = 0$ 和 $g_3 = \pi$ 平面内的演化如图 4(a) 和图 4(b) 所示,在 $g_3 = 0$ 平面上, Wannier 中心 (黑线) 与参考线 (红线) 存在一个交点,而 $g_3 = \pi$ 平面上没有交点,计算得到体系的 Z_2 拓扑不变量为 (1; 0, 0, 0),这说明此时体系由拓扑平庸相转变为强 TI 相.又如图 4(c) 所示,在 (100) 表面上,能隙内出现了连接价带和导带的受拓扑保护的无能隙表面狄拉克锥,其表面态具有低能耗散的特性^[39].

4 结 论

本文通过第一性原理计算,研究了单轴应变调控下 $\text{Ti}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ 的拓扑相变.计算结果表明,未施加应变时的 $\text{Ti}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ 在不考虑 SOC 相互作用时是一个在 Γ 点处具有 QCP 的半金属;考虑 SOC 后则是一个具有四重简并点的半金属.当对体系施加不同平面内应变且考虑 SOC 时,体系的轨道分辨能带以及表面态等拓扑性质被进一步详细计算.研究发现,当施加 -1% 平面内压缩应变时, $\text{Ti}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ 由 QCP 半金属相转变为 DSM 相;施加 1% 平面内拉伸应变时,体系相变为拥有 19 meV 全局能隙的 TI 相.该材料亦由于可能的平带有望具有强关联效应或者超导等特性.研究表明 $\text{Ti}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ 可用于新型可调控拓扑材料的设计,也在低功耗量子器件中具有潜在的应用价值.

参考文献

- [1] Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S C 2006 *Science* **314** 1757
- [2] Wang H T, Zhao H H, Wen L G, Wu X J, Nie T X, Zhao W S 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 200704 (in Chinese) [王航天, 赵海慧, 温良恭, 吴晓君, 聂天晓, 赵巍胜 2020 物理学报 **69** 200704]
- [3] Tian W, Yu W, Shi J, Wang Y 2017 *Materials* **10** 814
- [4] Lü H, Wang Z, Cheng Q, Zhang W, Yu R 2021 *Phys. Rev. B* **103** L241115
- [5] Hu J, Xu S Y, Ni N, Mao Z 2019 *Annu. Rev. Mater. Res.* **49** 207
- [6] Zhang W, Wu Q, Yazyev O V, Weng H, Guo Z, Cheng W D, Chai G L 2018 *Phys. Rev. B* **98** 115411
- [7] Chen Z, Hu Y, Zhu Z, Zhang W 2020 *New J. Phys.* **22** 093055
- [8] Yuan D, Hu Y, Yang Y, Zhang W 2021 *Chin. Phys. Lett.* **38** 117301
- [9] Ferreira P P, Manesio A L R, Dorini T T, et al. 2021 *Phys. Rev. B* **103** 125134
- [10] Cao W, Tang P, Xu Y, Wu J, Gu B L, Duan W 2017 *Phys. Rev. B* **96** 115203
- [11] Jitta R R, Gundeboina R, Veldurthi N K, Guje R, Muga V 2015 *J. Chem. Technol. Biot.* **90** 1937
- [12] Kim M, Park J, Kang M, Kim J Y, Lee S W 2020 *ACS Cent. Sci.* **6** 880
- [13] Yang B J, Kim Y B 2010 *Phys. Rev. B* **82** 085111
- [14] Wan X, Turner A M, Vishwanath A, Savrasov S Y 2011 *Phys. Rev. B* **83** 205101
- [15] Sakata M, Kagayama T, Shimizu K, Matsuhira K, Takagi S, Wakeshima M, Hinatsu Y 2011 *Phys. Rev. B* **83** 041102(R)
- [16] Hase I, Yanagisawa T 2020 *Symmetry* **12** 1076
- [17] Das M, Bhowal S, Sannigrahi J, et al. 2022 *Phys. Rev. B* **105** 134421
- [18] Hu Y, Yue C, Yuan D, et al. 2022 *Sci. China Phys. Mech. Astron.* **65** 297211
- [19] Zhang W, Luo K, Chen Z, Zhu Z, Yu R, Fang C, Weng H 2019 *npj Comput. Mater.* **5** 105
- [20] Hase I, Yanagisawa T, Kawashima K 2019 *Nanomaterials* **9** 876
- [21] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Comput. Mater. Sci.* **6** 15
- [22] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [23] Blöchl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953
- [24] Kresse G, Joubert D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758
- [25] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [26] Marzari N, Vanderbilt D 1997 *Phys. Rev. B* **56** 12847
- [27] Souza I, Marzari N, Vanderbilt D 2001 *Phys. Rev. B* **65** 035109
- [28] Wu Q, Zhang S, Song H F, Troyer M, Soluyanov A A 2018 *Comput. Phys. Commun.* **224** 405
- [29] Du Y P, Liu H M, Wan X G 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 187201 (in Chinese) [杜永平, 刘慧美, 万贤纲 2015 物理学报 **64** 187201]
- [30] Sheng X L, Wang Z, Yu R, Weng H, Fang Z, Dai X 2014 *Phys. Rev. B* **90** 245308
- [31] Wang Z, Weng H, Wu Q, et al. 2013 *Phys. Rev. B* **88** 125427
- [32] Cvetkovic V, Vafek O 2013 *Phys. Rev. B* **88** 134510
- [33] Yakovkin I N, Petrova N V 2021 *Phys. Lett. A* **403** 127398
- [34] Liu M Y, Gong L, He Y, Cao C 2021 *Phys. Rev. B* **103** 075421
- [35] Yalameha S, Nourbakhsh Z, Vaez A 2018 *J. Magn. Magn. Mater.* **468** 279
- [36] Zhang Q, Cheng Y, Schwingenschlögl U 2013 *Phys. Rev. B* **88** 155317

[37] Yu R, Qi X, Bernevig A, Fang Z, Dai X 2011 *Phys. Rev. B* **84** 075119

[38] Grusdt F, Abanin D, Demler E 2014 *Phys. Rev. A* **89** 043621

[39] Qi X L, Zhang S C 2010 *Phys. Today* **63** 33

Topological phase transitions in $\text{Tl}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ under strain regulation*

Xu Shi-Lin^{1)2)#} Hu Yue-Fang^{1)2)#} Yuan Dan-Wen¹⁾²⁾

Chen Wei^{3)4)†} Zhang Wei^{1)2)3)‡}

1) (Fujian Provincial Key Laboratory of Quantum Manipulation and New Energy Materials, College of Physics and Energy, Fujian Normal University, Fuzhou 350117, China)

2) (Fujian Provincial Collaborative Innovation Center for Advanced High-Field Superconducting Materials and Engineering, Fuzhou 350117, China)

3) (Academy of Carbon Neutrality of Fujian Normal University, Fuzhou 350007, China)

4) (College of Chemistry and Materials Science, Fujian Normal University, Fuzhou 350007, China)

(Received 9 January 2023; revised manuscript received 31 March 2023)

Abstract

Topological electronic materials exhibit many novel physical properties, such as low dissipation transport and high carrier mobility. These extraordinary properties originate from their non-trivial topological electronic structures in momentum space. In recent years, topological phase transitions based on topological electronic materials have gradually become one of the hot topics in condensed matter physics. Using first-principles calculations, we explore the topological phase transitions driven by in-plane strain in ternary pyrochlore oxide $\text{Tl}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$. Firstly, we analyze the atomic-orbital-resolved band structure and find that the O (p_x+p_y) and p_z orbitals of the system near the Fermi level have band inversion, indicating the emergence of topological phase transitions in the system. Then the tight-binding models are constructed to calculate the Z_2 topological invariants, which can determine the topologically non-trivial feature of the system. Finally, topological properties such as surface states and a three-dimensional Dirac cone are studied. It is found that $\text{Tl}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ without strain is a semimetal with a quadratic band touching point at Fermi level, while the in-plane strain can drive the topological phase transition via breaking crystalline symmetries. When the system is under the -1% in-plane compression strain and without considering the spin orbit coupling (SOC), the application of strain results in two triply degenerate nodal points formed in the $-Z$ to Γ direction and Γ to Z direction, respectively. When the SOC is included, there are two fourfold degenerate Dirac points on the $-Z$ to Γ path and Γ to Z path, respectively. Thus, the -1% in-plane compression strain makes the system transit from the quadratic contact point semimetal to a Dirac semimetal. When 1% in-plane expansion strain is applied and the SOC is neglected, there exists one band intersection along $Y \rightarrow \Gamma$. When the SOC is taken into consideration, the gap is opened. Therefore, the 1% in-plane expansion strain drives $\text{Tl}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ into a strong topological insulator. In addition, the system is also expected to have strong correlation effect and superconductivity due to the possible flat band. This work can guide the study of topological phase transitions in three-dimensional materials and provide a good material platform for the design of low-dissipation electronic devices.

Keywords: topological insulator, topological phase transition, Dirac semimetal

PACS: 71.20.-b, 73.20.At, 73.43.Nq

DOI: 10.7498/aps.72.20230043

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11974076), the GH Fund A (Grant No. 202302019222), the Key Project of Natural Science Foundation of Fujian Province, China (Grant No. 2021J02012), and the Research Foundation of the Academy of Carbon Neutrality of Fujian Normal University, China (Grant No. TZH2022-05).

These authors contributed equally.

† Corresponding author. E-mail: chenwei@fjnu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: zhangw721@163.com

应变调控下 $\text{Tl}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ 中的拓扑相变

徐诗琳 胡岳芳 袁丹文 陈巍 张薇

Topological phase transitions in $\text{Tl}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ under strain regulation

Xu Shi-Lin Hu Yue-Fang Yuan Dan-Wen Chen Wei Zhang Wei

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 127102 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230043

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230043>

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

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>

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>

基于复合蜂窝结构的宽带周期与非周期声拓扑绝缘体

Broadband periodic and aperiodic acoustic topological insulator based on composite honeycomb structure

物理学报. 2020, 69(2): 024302 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191454>

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>

拓扑绝缘体中的超快电荷自旋动力学

Ultrafast charge and spin dynamics on topological insulators

物理学报. 2019, 68(22): 227202 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191433>

二维介电光子晶体中的赝自旋态与拓扑相变

Pseudospin states and topological phase transitions in two-dimensional photonic crystals made of dielectric materials

物理学报. 2020, 69(9): 094206 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191962>