

第一性原理研究 semi-Heusler 合金 CoCrTe 和 CoCrSb 的半金属性和磁性

姚仲瑜 孙丽 潘孟美 孙书娟

First-principle studies of half-metallicities and magnetisms of the semi-Heusler alloys CoCrTe and CoCrSb

Yao Zhong-Yu Sun Li Pan Meng-Mei Sun Shu-Juan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 127501 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.127501

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.127501>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I12>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

B,N 协同掺杂金刚石电子结构和光学性质的第一性原理研究

First-principle studies of the electronic structures and optical properties of diamond crystal co-doped with B and N

物理学报.2016, 65(8): 087101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.087101>

Cr,Mo,Ni 在 γ -Fe(C) 中的键合性质及对相结构稳定性的影响

The bond characters and phase stability effects of Cr Mo and Ni in bulk γ -Fe(C)

物理学报.2016, 65(3): 037101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.037101>

Y 掺杂 ZnO 最小光学带隙和吸收光谱的第一性原理研究

Optical bandgap and absorption spectra of Y doped ZnO studied by first-principle calculations

物理学报.2016, 65(3): 037103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.037103>

Heusler 合金 Mn_2NiGe 马氏体相变的带 Jahn-Teller 效应研究

A band Jahn-Teller effect in the martensitic phase transition of the Heusler alloy Mn_2NiGe

物理学报.2012, 61(20): 207503 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.207503>

包覆型纳米纤维吸收剂的电磁性能研究

Research on the electromagnetic properties of nano-fiber coating absorbent

物理学报.2012, 61(19): 197501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.197501>

第一性原理研究 semi-Heusler 合金 CoCrTe 和 CoCrSb 的半金属性和磁性*

姚仲瑜[†] 孙丽 潘孟美 孙书娟

(海南师范大学物理与电子工程学院, 海口 571158)

(2016年2月19日收到; 2016年4月5日收到修改稿)

采用第一性原理的全势能线性缀加平面波方法, 对 semi-Heusler 合金 CoCrTe 和 CoCrSb 的电子结构进行自旋极化计算. CoCrTe 和 CoCrSb 处于平衡晶格常数时是半金属性铁磁体, 其半金属隙分别为 0.28 和 0.22 eV, 晶胞总磁矩为 $3.00 \mu_B$ 和 $2.00 \mu_B$. CoCrTe 和 CoCrSb 的晶胞总磁矩主要来自于 Cr 原子磁矩. Co, Te 和 Sb 的原子磁矩较小, 它们的磁矩方向与 Cr 原子的磁矩方向相反. 使晶格常数在 $\pm 13\%$ 的范围内变化 (相对于平衡晶格常数), 并计算 CoCrTe 和 CoCrSb 的电子结构. 计算研究表明, CoCrTe 和 CoCrSb 的晶格常数变化分别在 $-11.4\% - 9.0\%$ 和 $-11.2\% - 2.0\%$ 时仍具有半金属性, 并且它们晶胞总磁矩稳定于 $3.00 \mu_B$ 和 $2.00 \mu_B$.

关键词: 第一性原理, 半金属, 电子结构, 磁性

PACS: 75.50.Cc, 71.15.Mb, 71.20.-b, 71.55.Ak

DOI: 10.7498/aps.65.127501

1 引言

半金属 (half metal) 是指一个自旋方向的电子具有金属性, 而另一个自旋方向的电子具有非金属性的材料. 半金属铁磁体是 de Groot 等^[1] 计算半-赫斯勒合金 (semi-Heusler alloy) NiMnSb 和 PtMnSb 的能带时首次发现的. 此后, 理论计算发现磁性氧化物 Fe_3O_4 ^[2] 和 CrO_2 ^[3], 过渡金属与氮族和硫族元素构成的闪锌矿结构化合物^[4-6], 半-赫斯勒合金^[7,8] 全-赫斯勒合金 (full-Heusler alloy) Co_2MnSi 和 Co_2MnGe ^[9,10] 岩盐 (rocksalt) 结构化合物等^[11,12] 具有半金属性. 在实验上, 铁磁性氧化物 Fe_3O_4 ^[13] 和 CrO_2 ^[14]、钙钛矿稀土锰氧化物 $La_{0.7}Sr_{0.3}MnO_3$ ^[15]、双钙钛矿结构的 Sr_2CrReO_6 ^[16], 四元合金 $Co_{50}Fe_{25-x}Mn_xSi$ ^[17] 和全-赫斯勒合金 Co_2MnSi 等^[18] 分别被实验证实具有半金属性质. 半金属是制作自旋电子学器件 (spintronic device) 如自旋二极管、自旋场效应管、

自旋节流阀 (spin valve)、自旋过滤器 (spin filter) 的重要材料^[19].

近年来, 半金属性半赫斯勒合金成为凝聚态领域的研究热点. 相对于其他结构的半金属材料, 半赫斯勒合金有以下优势: 1) 该结构的合金具有较高的居里温度 (T_C)^[20,21] (如 NiMnSb 的 $T_C = 930 \text{ K}$ ^[20]); 2) 它们的晶格结构与目前工业上广泛应用的重要二元半导体 (如 GaAs, ZnS 和 InP) 的晶格结构相似 (空间群都为 $F\bar{4}3m$, No. 216), 与二元半导体的晶格有较好的相容性, 有利于在二元半导体基底上外延生长出半金属性合金薄膜而制成自旋电子学器件. 基于第一性原理的计算, 2011 年 Chen 等^[22] 发现了无过渡金属元素半赫斯勒合金 GeKCa 和 SnKCa 具有半金属性, 半金属隙 (half-metallic gap, 即半金属材料的非金属能带中费米能与价带顶和费米能与导带底二间隔中的最小者) 分别为 0.28 和 0.27 eV. Zhang 等^[23] 计算发现半赫斯勒合金 NiCrP, NiCrSe 和 NiCrTe 是半金属

* 国家自然科学基金 (批准号: 11364014, 11364015) 和海南省自然科学基金 (批准号: 113005, 20165196) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: zyy@hainnu.edu.cn

性铁磁体. 当晶格常数变化(相对于平衡晶格常数)在 -3% — 2% , 0% — 3.7% 和 -1.5% — 3% 范围内时, 半赫斯勒合金 NiCrP, NiCrSe 和 NiCrTe 仍保持其半金属性质. Zhang 等^[24]的计算发现半赫斯勒合金 NiVAs 也是半金属. 2012年 Yao 等^[7]的计算结果显示 CoCrP 和 CoCrAs 是半金属铁磁体, 并且具有较大的半金属隙, 分别为 0.46 和 0.50 eV, 晶格常数变化在 -4.8% — 6.6% 和 -7.7% — 4.5% 范围内时保持其半金属性. 能带计算结果表明 CoMnSb^[25]和 FeMnSb^[26]也具有半金属性. 作为自旋电子学器件制作的关键性材料, 新的半金属材料的研究发现, 尤其是半金属性半赫斯勒合金的发现能为自旋电子学器件研制提供更多的材料选择. 本文采用第一性原理的全势能线性缀加平面波 (full-potential linearized augmented plane wave, FP_LAPW) 方法计算半赫斯勒合金 CoCrTe 和 CoCrSb 的电子结构, 研究它们的能带结构、电子态密度和磁矩分布, 揭示其半金属铁磁性. 与此同时, 在晶格常数变化的情况下研究它们的半金属性和磁性的稳定性.

2 结构模型与计算方法

半赫斯勒合金晶体结构由 3 个次面心结构套构而成, 其空间群为 $F\bar{4}3m$ (空间群编号 216). 半赫斯勒合金 CoCrTe 和 CoCrSb 晶格中各原子 Wyck-off 分数坐标位置分别是: Co 4c ($1/4, 1/4, 1/4$), Cr 4a ($1/2, 1/2, 1/2$), Te(Sb) 4b ($0, 0, 0$). 其空间结构图如图 1 所示.

本文用 WIEN2k^[27] 程序包计算半赫斯勒合金 CoCrTe 和 CoCrSb 的电子结构. WIEN2K 计算程序采用基于密度泛函理论为基础的 FP_LAPW 方法. 该方法以 muffin-tin 模型 (糕饼模型, 简称糕模) 将晶体晶胞空间划分为 2 个区域: 以原子核为中心的糕模球区域和剩余的空间间隙区. 在糕模球面内, 电荷密度和势能函数近似为球对称, 基函数取原子径向函数和球谐函数的乘积; 在间隙空间区, 由于势场变化相对比较平缓, 采用平面波展式表示电荷密度和势能函数. 波矢积分采用四面体网格法, 在本文的计算中第一布里渊区 k 点网格取 $13 \times 13 \times 13$. 电子间的交换-相关势采用 Perdew 等^[28] 提出的广义梯度近似 (generalized gradient approximation) 方法 PBE'96 处理. 取截断参数 $R_{\text{MT}} \times K_{\text{max}} = 9$, 其中, R_{MT} 是分子中最小的糕模球半径, K_{max} 是平面波展式中最大的

倒格子矢量. 自洽计算的收敛精度取 (电荷标准) 1×10^{-4} e/cell.

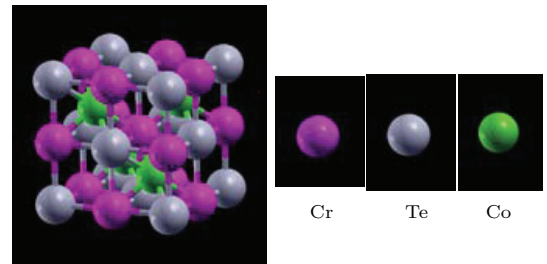


图 1 (网刊彩色) 半赫斯勒合金 CoCrTe 的晶体结构
Fig. 1. (color online) Crystal structure of the semi-Heusler alloy CoCrTe.

3 计算结果与讨论

3.1 半赫斯勒合金 CoCrTe 和 CoCrSb 的半金属性

为确定半赫斯勒合金 CoCrTe 和 CoCrSb 的平衡晶格常数, 本文取铁磁性、反铁磁性和顺磁性配置分别计算了 CoCrTe 和 CoCrSb 的化学式单位 (formula unit) 总能量随晶格常数的变化关系, 如图 2(a) 和图 2(b) 所示. 从图 2(a) 和图 2(b) 可以看出, CoCrTe 和 CoCrSb 在晶格平衡时为铁磁性, 平衡晶格常数分别为 0.586 和 0.580 nm. 本文用同样的方法计算了半赫斯勒合金 NiMnSb 铁磁性、反铁磁性和顺磁性配置的单位化学式总能量随晶格常数的变化关系, 如图 2(c) 所示. 计算结果显示, NiMnSb 具有铁磁性, 其晶格常数为 0.589 nm. NiMnSb 的 X 射线粉末散射法测得的晶格常数值为 0.5927 nm^[29], 中子散射法测得的晶格常数为 0.59130 nm^[30], NiMnSb 晶格常数的实验测量值与理论计算值之间的偏差在 0.63% 之内.

对处于晶格平衡常数的 CoCrTe 和 CoCrSb 进行电子结构的自旋极化计算, 能带结构如图 3 所示. 从图 3 中可看出, 在 CoCrTe 和 CoCrSb 自旋向上的能带中 (图 3(a) 和图 3(c)) 有能带穿过费米能 E_{F} (位于 0 eV 处), 因此, 它们自旋向上的能带具有金属性. 在它们自旋向下的能带结构 (图 3(b) 和图 3(c)) 中, 在费米能处都有一个明显的半导体带隙, 它们自旋向下的能带是非金属性的, 所以, CoCrTe 和 CoCrSb 是半金属. 在自旋向下的能带中, CoCrTe 和 CoCrSb 的价带顶都位于第一布里渊区的对称点 Γ 处, 导带底分别位于对称点 Δ 和 X . CoCrTe 自旋向下的非金属带隙比 CoCrSb 的稍宽一些.

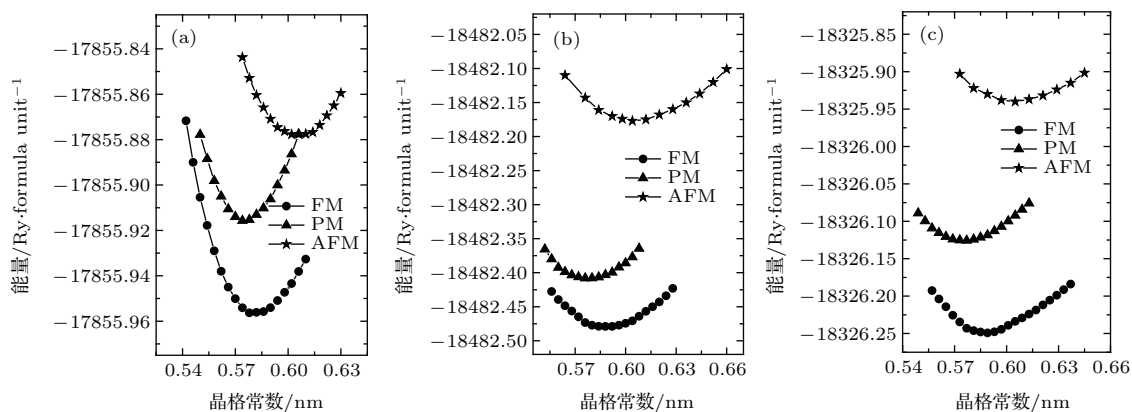


图2 CoCrTe, CoCrSb 和 NiMnSb 取铁磁性 (FM)、反铁磁性 (AFM) 和顺磁性 (PM) 的单位化学式总能量随晶格常数的变化关系 (a) CoCrSb; (b) CoCrTe; (c) NiMnSb

Fig. 2. Total energy per formula unit of ferromagnetic (FM), paramagnetic (PM) and antiferromagnetic (AFM) phases as functions of the lattice constant for CoCrTe, CoCrSb and NiMnSb: (a) CoCrSb; (b) CoCrTe; (c) NiMnSb.

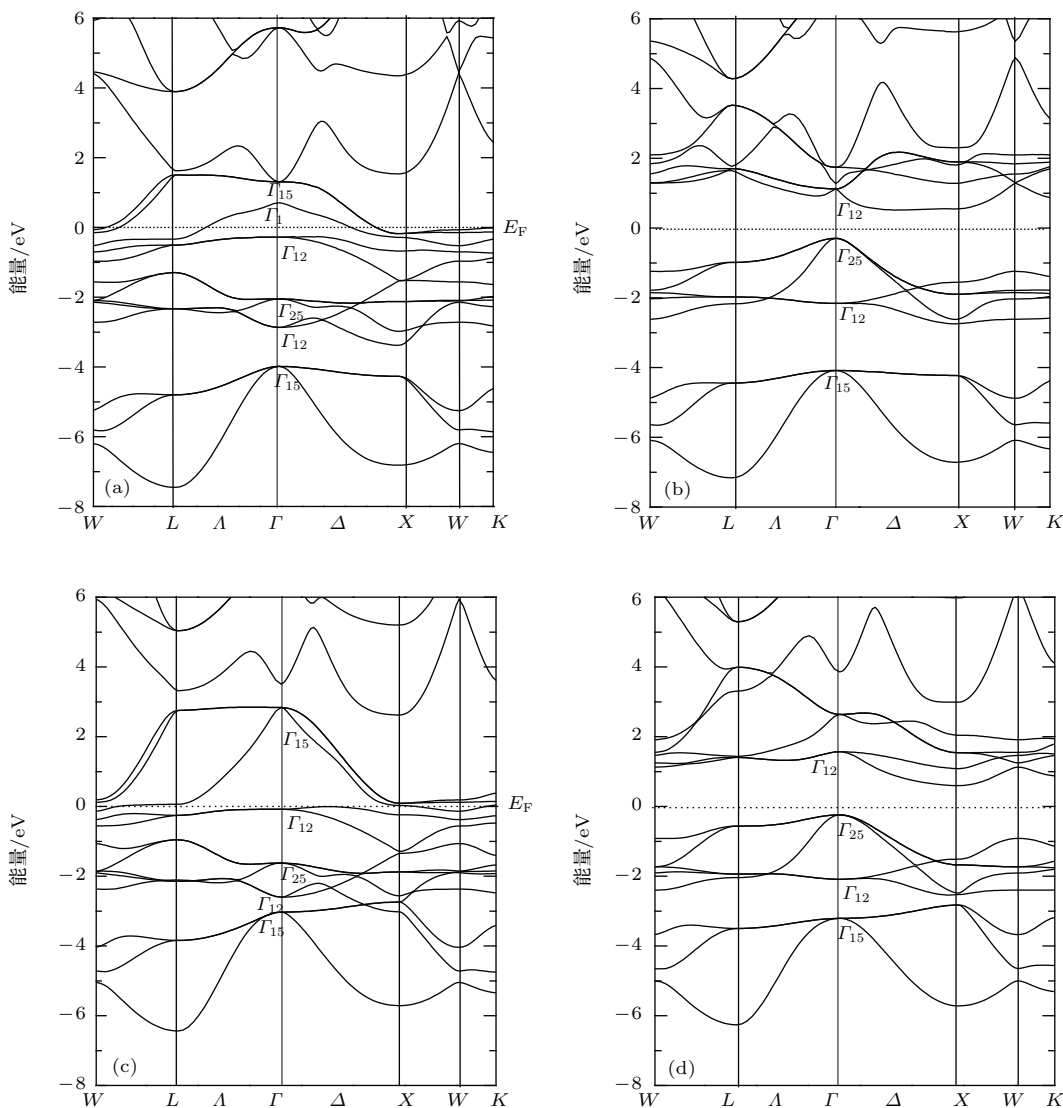


图3 CoCrTe 和 CoCrSb 的能带结构 (a) CoCrTe, 自旋向上; (b) CoCrTe, 自旋向下; (c) CoCrSb, 自旋向上; (d) CoCrSb, 自旋向下. 费米能 E_F 位于 0 eV

Fig. 3. Band structure of CoCrTe and CoCrSb: (a) CoCrTe, spin-up; (b) CoCrTe, spin-down; (c) CoCrSb, spin-up; (d) CoCrSb, spin-down. The Fermi level (E_F) is located at 0 eV.

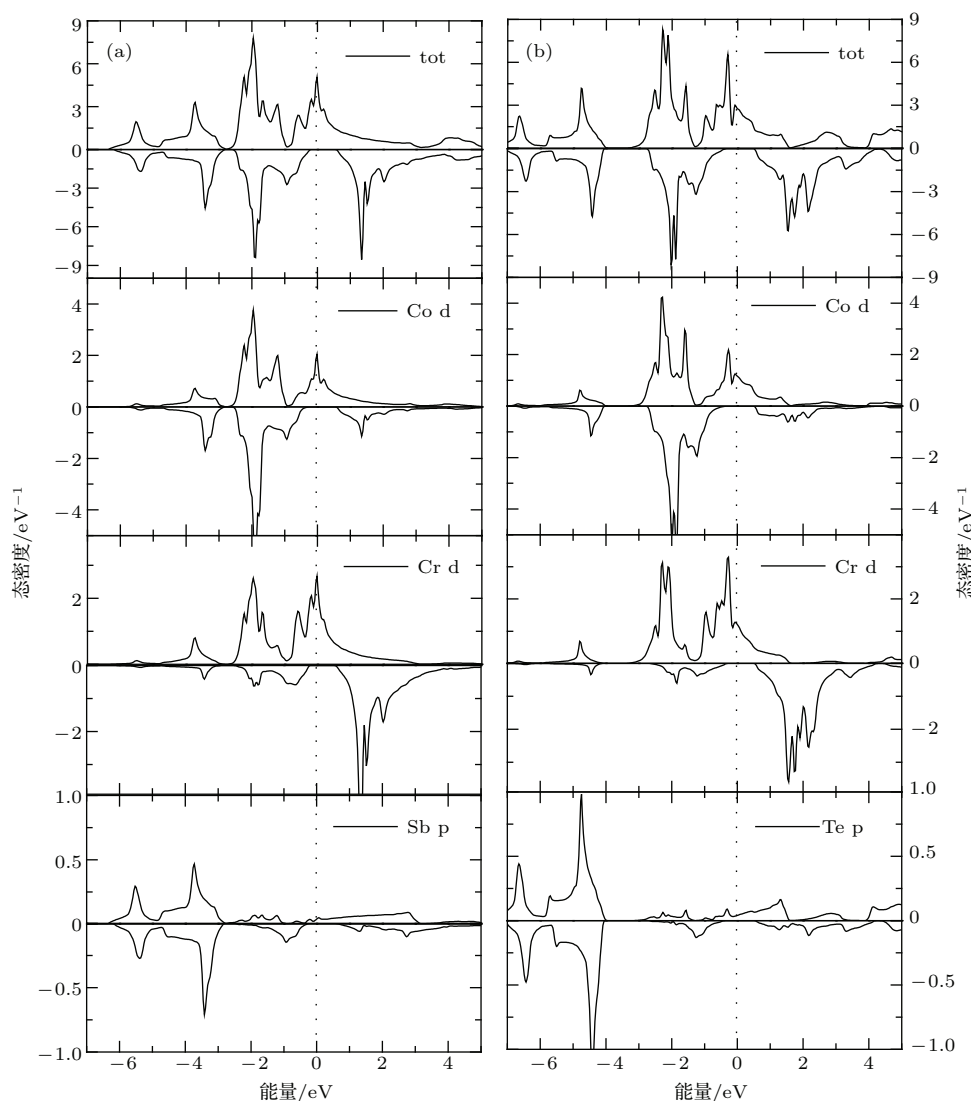


图4 CoCrTe和CoCrSb的DOS分布及各原子主要PDOS分布 (a) CoCrSb; (b) CoCrTe. 费米能位于0 eV
 Fig. 4. DOS of CoCrTe and CoCrSb and main PDOSs of Co, Cr, Te and Sb: (a) CoCrSb; (b) CoCrTe. The Fermi level is located at 0 eV.

图4给出了CoCrTe和CoCrSb的电子态密度(density of states, DOS)和各原子主要分波态密度(partial DOS, PDOS)分布图. 在图4(a)中我们注意到, Sb-p与Co-d和Cr-d在-3.3 eV附近有相似的PDOS峰(包括了自旋向上方向和自旋向下方向). 同样, 在图4(b)中, Te-p与Co-d和Cr-d在-4.5 eV附近也有相似的PDOS峰. 这是合金CoCrTe和CoCrSb内部存在p-d电子轨道杂化的典型特征. 同时, 我们还注意到, CoCrTe的p-d杂化电子态的能量(约-4.5 eV)明显低于CoCrSb p-d杂化电子态的能量(约-3.3 eV). 我们认为这与Te和Sb的电子组态以及它们在CoCrTe和CoCrSb中的p-d轨道杂化有关. Sb的价电子组态为 $5s^25p^3$, 它的p态有3个电子, 是半填满态(p态

的满次壳层为6电子); Te的价电子组态为 $5s^25p^4$, 有4个p电子. 在CoCrTe和CoCrSb中, Te和Sb的p轨道电子与Co和Cr的d轨道电子发生p-d轨道杂化, 杂化的结果使Te的p-d轨道杂化的电子态比Sb的p-d轨道杂化电子态更接近于p轨道电子填满次壳层的情形, 因此, Te的轨道杂化电子态更稳定, 能量也更低. 由此容易理解图3中费米能下方CoCrTe和CoCrSb有相似的能带结构, CoCrTe在费米能下方简并于 Γ 点的 Γ_{15} 能带明显低于CoCrSb费米能下方的 Γ_{15} 能带.

在图4(b)的Cr-d电子态中, 我们可以清楚地看到CoCrTe的Cr-d电子态在-0.15和1.7 eV处分别有自旋向上和自旋向下PDOS峰, 这两个PDOS峰形成了大的交换劈裂(exchange splitting). 由于

Cr-d 态与 Co-d 态的杂化以及 Cr-d 电子态与 Te-p 电子态的相互作用, 使 CoCrTe 自旋向下二重简并于 Γ_{12} 的能带及其附近能带被推至费米能以上(见图 3(b)), 形成了 CoCrTe 的费米能处自旋向下的能带带隙. CoCrSb 形成自旋向下能带带隙的情形与 CoCrTe 相似. 在图 4 自旋向下的 DOS 分布图中, CoCrTe 和 CoCrSb 的价带顶分别位于 -0.28 和 -0.22 eV, 导带底分别位于 0.48 和 0.55 eV. 因此, CoCrTe 和 CoCrSb 非金属能带带隙分别是 0.76 和 0.77 eV. 它们的半金属隙(half-metallic gap, 指半金属材料非金属能带中费米能至价带顶与费米能至导带底这二者间隔中的最小者)则分别为 0.28 和 0.22 eV.

3.2 半赫斯勒合金 CoCrTe 和 CoCrSb 的磁性

合金 CoCrTe 和 CoCrSb 的磁矩计算显示, 处于晶格平衡时它们的晶胞(单位化学式)总磁矩分别为 $3.00 \mu_B$ 和 $2.00 \mu_B$, 各原子磁矩(指原子中电

子的净自旋磁矩. 自旋向上电子的自旋磁矩定义为正, 自旋向下电子的自旋磁矩为负)分别列于表 1 中. 两合金的晶胞总磁矩主要来源于 Cr 原子磁矩. Co, Te 和 Sb 的原子磁矩(负值表示原子内部自旋向下电子的自旋磁矩大于自旋向上电子的自旋磁矩)较弱, 而且它们的磁矩方向与 Cr 原子的磁矩方向相反. 因此, 合金 CoCrTe 和 CoCrSb 是铁磁性的.

表 1 合金 CoCrTe 和 CoCrSb 的晶胞总磁矩 (M_{tot}) 和各原子磁矩 (M_{atom}). 其中 $X = Te, Sb$.

Table 1. The total magnetic moment per formula unit (M_{tot}) and atomic magnetic moment (M_{atom}) of CoCrTe and CoCrSb. $X = Te, Sb$.

合金	晶胞总磁矩 M_{tot}/μ_B	原子磁矩 M_{atom}/μ_B		
		Co	Cr	X
CoCrTe	3.00	-0.23	3.06	-0.04
CoCrSb	2.00	-0.36	2.37	-0.06

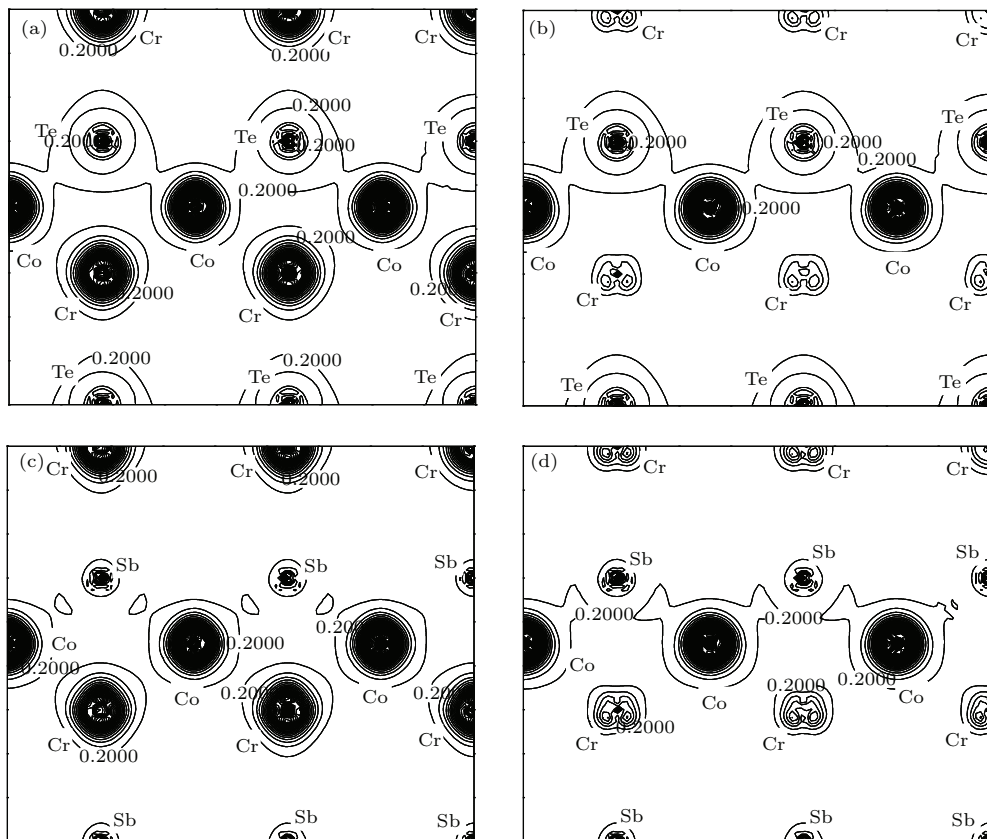


图 5 合金 CoCrTe 和 CoCrSb 在 (110) 面上各原子自旋极化电子密度分布, 电荷密度等值线间隔均为 $0.200 e/\text{\AA}^2$ (a) CoCrTe, 自旋向上; (b) CoCrTe, 自旋向下; (c) CoCrSb, 自旋向上; (d) CoCrSb, 自旋向下

Fig. 5. Spin-polarized electron density of CoCrTe and CoCrSb onto the (110) plane (step $0.200 e/\text{\AA}^2$): (a) CoCrTe, spin-up; (b) CoCrTe, spin-down; (c) CoCrSb, spin-up; (d) CoCrSb, spin-down.

合金 CoCrTe 和 CoCrSb 各原子磁矩计算结果可以由费米能附近各原子的 PDOS 分布给出定性解释. 图 4 中, 费米能下方的电子态为电子占据态. 从 Co, Te 和 Sb 的 PDOS 分布可以看出, Co, Te 和 Sb 原子费米能下方的自旋向上的电子态与自旋向下的电子态大致相当, 原子内部自旋向上电子的自旋磁矩与自旋向下电子的自旋磁矩相互抵消, 它们的原子磁矩(原子内电子的净自旋磁矩)较弱. 对于 Cr 原子, 其 Cr-d 的 PDOS 在费米能附近形成了自旋向上和自旋向下的大劈裂, 使费米能下方自旋向下的电子态(电子占据态)较少, 从而使自旋向上的电子占据态明显比自旋向下的电子占据态多, 因而形成了较强的原子磁矩.

为进一步认识和理解 CoCrTe 和 CoCrSb 的磁矩在晶格中的分布, 图 5 给出了 CoCrTe 和 CoCrSb 在 (110) 面上自旋极化的电子密度分布. 在图 5 中, Cr 原子实外自旋向上的电子密度明显大于自旋向下的电子密度, 因此, Cr 原子有较强的磁矩; Te 和 Sb 原子实外自旋向上和自旋向下的电子密度均较低, 它们的原子磁矩较弱; Co 原子实外自旋向上和自旋向下的电子密度都较大并且大致相当, 在 Co 原子内部自旋向上电子的自旋磁矩与自旋向下电子的自旋磁矩相互抵消, 其磁矩也较弱.

合金 CoCrTe 和 CoCrSb 的晶胞整数总磁矩(单位为 μ_B)符合半金属性半赫斯勒合金磁矩关系式^[31]

$$M_t = (Z_t - 18) \mu_B, \quad (1)$$

其中 M_t 为晶胞总磁矩(单位为 μ_B); Z_t 为化学式中各原子的价电子数总和 (Co: $3d^7 4s^2$, Cr: $3d^5 4s^1$, Te: $5s^2 5p^4$ 和 Sb: $5s^2 5p^3$, 原子的价电子数分别为 9, 6, 6 和 5). 所以, 半赫斯勒合金 CoCrTe 和 CoCrSb 是半金属性铁磁体.

3.3 晶格常数变化下 CoCrTe 和 CoCrSb 的半金属性和磁性的稳定性

在不改变晶格空间群的情况下, 使半赫斯勒合金 CoCrTe 和 CoCrSb 的晶格常数相对于平衡晶格变化 $\pm 10\%$, 即 $\Delta a/a_0 = \pm 10\%$, 其中 $\Delta a = a - a_0$, a 为变化后的晶格常数, a_0 为平衡晶格常数. 计算 CoCrTe 和 CoCrSb 相应的电子结构, 电子态密度分布如图 6. 在图 6 中, 当 $\Delta a/a_0 = -10\%$ 时, CoCrTe 和 CoCrSb 仍保持半金属性; 当 $\Delta a/a_0 = +10\%$ 时, CoCrTe 和 CoCrSb 自旋向上和自旋向下的电子态都是金属性的, 因此, 它们具有金属性.

为了进一步详细研究 CoCrTe 和 CoCrSb 的半金属性随晶格常数的变化关系, 在 $\Delta a/a_0 = \pm 13\%$ 范围内每次以 $\Delta a = 0.04 \text{ nm}$ 缓慢改变晶格常数, 计算对应的电子结构. 计算结果显示, $\Delta a/a_0$ 从 -13% 变化到 $+13\%$ 的过程中, CoCrTe 和 CoCrSb 自旋向上的电子态始终是金属性的(未在此处给出), 因此, 它们是否仍保持半金属性完全取决于自旋向下电子态的性质. 为此, 图 7 给出了 CoCrTe 和 CoCrSb 费米能附近自旋向下电子的 DOS 空白区(以横线表示空白区宽度)随晶格常数的变化关系. 在图 7 中, 我们注意到图 7(b) 中 CoCrSb 自旋向下的 DOS 空白区随晶格常数的变化图与文献^[7]中的 CoCrP 和 CoCrAs 自旋向下的 DOS 空白区随晶格常数的变化图形相类似. 我们认为, 这主要因为 Sb, P 和 As 原子有类似的电子组态(分别为: $5s^2 5p^3$, $3s^2 3p^3$ 和 $4s^2 4p^3$), 在合金 CoCrSb, CoCrP 和 CoCrAs 中有相近的 p-d 轨道杂化, 因而具有近似的性质. 在图 7 中, CoCrTe 与 CoCrSb 自旋向下 DOS 空白区随晶格常数的变化情形有较大差异, 主要原因在于两合金内部 p-d 电子轨道杂化的差别. 从图 7 可以看出, 当晶格常数在 $0.519\text{--}0.640 \text{ nm}$ 和 $0.515\text{--}0.592 \text{ nm}$ 区域变化时, CoCrTe 和 CoCrSb 的费米能位于自旋向下 DOS 空白区内, 此时它们自旋向下的电子具有非金属性. 因此, 晶格常数在以上范围内变化, 即晶格常数(相对于平衡晶格)变化在 $-11.4\%\text{--}9.0\%$ 和 $-11.2\%\text{--}2.0\%$ 范围内 CoCrTe 和 CoCrSb 具有半金属性. 当晶格常数的变化超出上述范围时, 费米能位于 DOS 空白区之外(见图 7), 自旋向下的电子态变为金属性, 此时 CoCrTe 和 CoCrSb 的半金属性消失, 转变为金属性.

在晶格常数变化的情况下, CoCrTe 半金属性的稳定性 ($-11.4\%\text{--}9.0\%$) 好于 CoCrP ($-4.8\%\text{--}6.6\%$) 和 CoCrAs ($-7.7\%\text{--}4.5\%$)^[7], 也优于 NiCrTe ($-3\%\text{--}2\%$), NiCrSe ($0\%\text{--}3.7\%$), NiCrP ($-1.5\%\text{--}3\%$)^[23] 和 NiMnSb ($-2\%\text{--}3\%$)^[32] 半金属性的稳定性.

使 $\Delta a/a_0$ 的变化在 $-13\%\text{--}+13\%$, 计算 CoCrTe 和 CoCrSb 的晶胞总磁矩. 晶胞总磁矩随晶格常数变化关系在图 8 中给出. 计算结果显示, 晶格常数变化在 $-11.4\%\text{--}9.0\%$ 和 $-11.2\%\text{--}2.0\%$ 范围内 CoCrTe 和 CoCrSb 的晶胞总磁矩分别稳定于 $3.00 \mu_B$ 和 $2.00 \mu_B$. 以上晶格常数变化范围与 CoCrTe 和 CoCrSb 保持其半金属性的范围相一致.

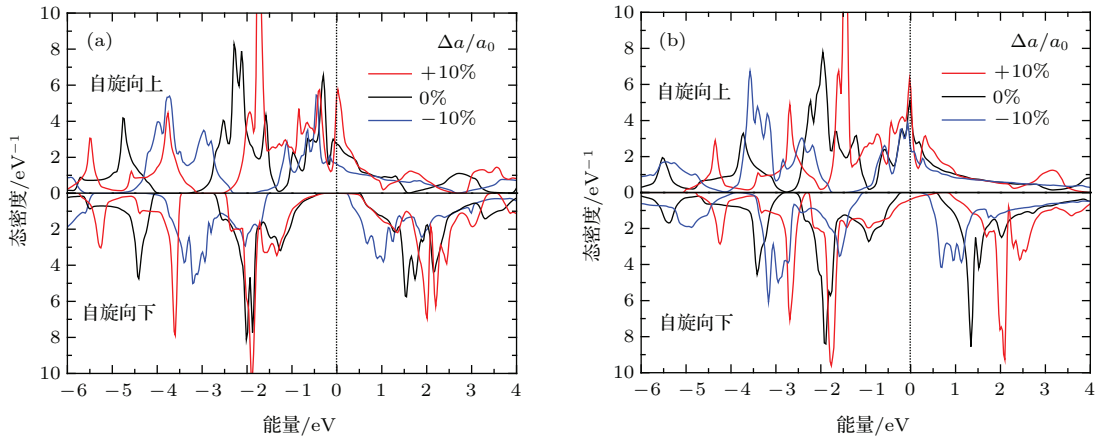


图6 (网刊彩色) CoCrTe和CoCrSb相对于平衡晶格常数变化 a/a_0 为 $\pm 10\%$ 的DOS分布 (a) CoCrTe; (b) CoCrSb
Fig. 6. (color online) DOS of CoCrTe and CoCrSb for $\Delta a/a_0 = \pm 10\%$: (a) CoCrTe; (b) CoCrSb.

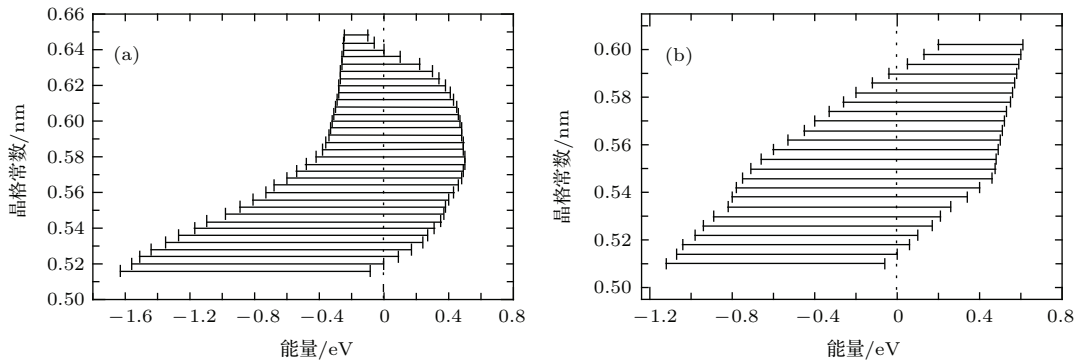


图7 CoCrTe和CoCrSb费米能附近自旋向下DOS空白区(用横线表示)随晶格常数变化关系 (a) CoCrTe; (b) CoCrSb
Fig. 7. The gaps in the spin-down DOS of CoCrTe and CoCrSb at different lattice constants: (a) CoCrTe; (b) CoCrSb. Horizontal error bar represents the gap around Fermi level in the spin-down DOS.

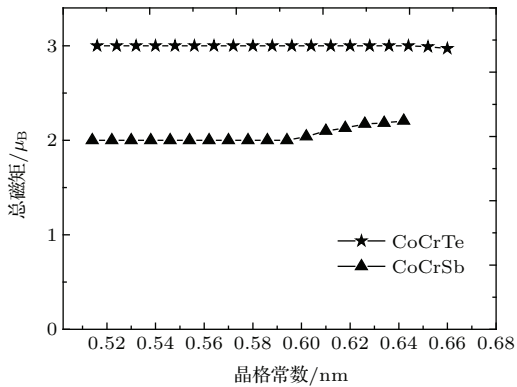


图8 CoCrTe和CoCrSb总磁矩随晶格常数的变化关系
Fig. 8. Total magnetic moment as function of lattice constant for CoCrTe and CoCrSb.

分别为0.28和0.22 eV, 晶胞总磁矩分别是 $3.00 \mu_B$ 和 $2.00 \mu_B$. CoCrTe和CoCrSb的晶胞磁矩主要源自Cr原子磁矩. Co, Te和Sb原子的磁矩较小, 并且磁矩方向与Cr原子的磁矩方向相反. 在保持晶格的空间群不变的情况下, 使晶格常数在 $\pm 13\%$ 范围变化(相对于平衡晶格常数)并计算CoCrTe和CoCrSb电子结构. 计算结果表明, 当晶格常数变化在 $-11.4\% - 9.0\%$ 和 $-11.2\% - 2.0\%$ 内CoCrTe和CoCrSb仍具有半金属性, 并且它们的晶胞总磁矩稳定于 $3.00 \mu_B$ 和 $2.00 \mu_B$. CoCrTe和CoCrSb有望成为制作自旋电子学器件的备选材料.

4 结 论

采用第一性原理的全势能线性缀加平面波(FP-LAPW)方法, 计算半赫斯勒合金CoCrTe和CoCrSb电子结构. 处于晶格平衡的半赫斯勒合金CoCrTe和CoCrSb是半金属性铁磁体, 半金属隙

参考文献

- [1] de Groot R A, Mueller F M, van Engen P G, Buschow K H J 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 2024
- [2] Yanase A, Siratori K 1984 *J. Phys. Soc. Jpn.* **53** 312
- [3] Schwarz K 1986 *J. Phys. F: Met. Phys.* **16** L211

- [4] Galanakis I, Mavropoulos P 2003 *Phys. Rev. B* **67** 104417
- [5] Yao K L, Gao G Y, Liu Z L, Zhu L 2005 *Solid State Commun.* **133** 301
- [6] Xie W H, Xu Y Q, Liu B G, Pettifor D G 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 037204
- [7] Yao Z, Zhang Y S, Yao K L 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 062402
- [8] Zhang M, Dai X, Hu H, Liu G, Cui Y, Liu Z, Chen J, Wang J, Wu G 2003 *J. Phys. Condens. Matter* **15** 7891
- [9] Galanakis I, Mavropoulos P 2007 *J. Phys.: Condens. Matter* **19** 315213
- [10] Picizzio S, Continenza A, Freeman A J 2002 *Phys. Rev. B* **66** 094421
- [11] Droghetti A, Baadji N, Sanvito S 2009 *Phys. Rev. B* **80** 235310
- [12] Gao G Y, Yao K L 2012 *J. Appl. Phys.* **111** 113703
- [13] Soeya S, Hayakawa J, Takahashi H, Ito K, Yamamoto C, Kida A, Asano H, Matsui M 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 823
- [14] Watts S M, Wirth S, von Molnar S, Barry A, Coey J M D 2000 *Phys. Rev. B* **61** 9621
- [15] Soulen Jr. R J, Byers J M, Osofsky M S, Nadgorny B, Ambrose T, Cheng S F, Broussard P R, Tanaka C T, Nowak J, Moodera J S, Barry A, Coey J M D 1998 *Science* **282** 85
- [16] Kato H, Okuda T, Okimoto Y, Tomioka Y, Takenoya Y, Ohkubo A, Kawasaki M, Tokuraa Y 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 328
- [17] Zhao J J, Qi X, Liu E K, Zhu W, Qian J F, Li G J, Wang W H, Wu G H 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 047108 (in Chinese) [赵晶晶, 祁欣, 刘恩克, 朱伟, 钱金凤, 李贵江, 王文洪, 吴光恒 2011 物理学报 **60** 047108]
- [18] Sakuraba Y, Hattori M, Oogane M, Ando Y, Kato H, Sakuma A, Miyazaki T, Kubota H 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 192508
- [19] Wolf S A, Awschalom D D, Buhrman R A, Daughton J M, von Molnar S, Roukes M L, Chtchel-kanova A Y, Treger D M 2001 *Science* **294** 1488
- [20] Webster P J, Ziebeck K R A 1988 *Alloys and Compounds of d-Elements with Main Group Elements* (Berlin: Springer) pp75–184
- [21] Ziebeck K R A, Neumann K U 2001 *Magnetic Properties of Metals* (Berlin: Springer) pp64–414
- [22] Chen J, Gao G Y, Yao K L, Song M H 2011 *J. Alloys Compd.* **509** 10172
- [23] Zhang M, Dai X, Hu H, Liu G, Cui Y, Liu Z, Chen J, Wang J, Wu G 2003 *J. Phys. Condens. Matter* **15** 7891
- [24] Zhang M, Liu Z H, Hu H N, Liu G D, Cui Y T, Wu G H, Bruck E, de Boer F R, Li Y X 2004 *J. Appl. Phys.* **95** 7219
- [25] Kubler J 1984 *Physica B+C* **127** 257
- [26] de Groot R A, van der Kraan A M, Buschow K H J 1986 *J. Magn. Magn. Mater.* **61** 330
- [27] Blaha P, Schwarz K, Madsen G K H, Kvasnicka D, Luitz J 1990 *Comput. Phys. Commun.* **59** 399
- [28] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [29] Otto M J, van Woerden R A M, van der Valk P J, Wijngaard J, van Bruggen C F, Haas C, Buschow K H J 1989 *J. Phys. Condens. Matter* **1** 2341
- [30] Helmholtz R B, de Groot R A, Mueller F M, van Engen P G, Buschow K H J 1984 *J. Magn. Magn. Mater.* **43** 249
- [31] Galanakis I, Dederichs P H, Papanikolaou N 2002 *Phys. Rev. B* **66** 134428
- [32] Block T, Carey M J, Gurney B A, Jepsen O 2004 *Phys. Rev. B* **70** 205114

First-principle studies of half-metallicities and magnetisms of the semi-Heusler alloys CoCrTe and CoCrSb*

Yao Zhong-Yu[†] Sun Li Pan Meng-Mei Sun Shu-Juan

(School of Physics and Electronic Engineering, Hainan Normal University, Haikou 571158, China)

(Received 19 February 2016; revised manuscript received 5 April 2016)

Abstract

Half-metallic ferromagnet, in which the electrons with one spin band are metallic and the electrons with another spin band are semiconducting, is believed to be the most promising spin-injector material for spintronic devices, such as spin valves, spin filters, spin diodes, and magnetic tunnel junctions. The main advantages of half-metallic Heusler alloy over other half-metallic systems are their relatively high Curie temperatures and structural similarity to important binary semiconductors that are widely utilized in the industry. Thus far, half-metallicity has been predicted theoretically or confirmed experimentally in a limited number of Heusler alloys. Exploring new half-metallic Heusler alloys is necessary. In this study, the full-potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method under density functional theory is utilized to investigate the electronic structures and magnetisms of semi-Heusler alloys CoCrTe and CoCrSb. In the calculations, the generalized gradient approximation (GGA) in the scheme of Perdew-Bueke-Ernzerhof is adopted to treat the exchange-correlation potential. The cutoff parameter is set to be $R_{\text{mt}} \times K_{\text{max}} = 9$, where R_{mt} is the smallest atomic sphere radius and K_{max} is the maximum value of the reciprocal lattice vector. Meshes ($13 \times 13 \times 13$ k -points) are used in the first Brillouin zone integration. Self-consistent calculations are considered to be convergent only when the integrated charge difference between the last two iterations is less than 1×10^{-4} e/cell. Spin-polarized calculations of the electronic structure for the semi-Heusler alloys CoCrTe and CoCrSb are performed. The calculations reveal that CoCrTe and CoCrSb at their equilibrium lattice constants are half-metallic ferromagnets with half-metallic gaps of 0.28 and 0.22 eV and total magnetic moments of 3.00 and 2.00 μ_B per formula unit, respectively. The calculated integer total magnetic moments (in μ_B) are consistent with the Slater-Pauling rule, $M_t = Z_t - 18$, where Z_t denotes the total number of valence electrons and M_t means the total magnetic moment (in μ_B) per formula unit. Moreover, the spin moment of the Cr atom is obviously larger than those of the Co, Te, and Sb atoms. Co, Te and Sb are all antiferromagnetically coupled to Cr for CoCrTe and CoCrSb. The electronic structures of CoCrTe and CoCrSb are also calculated as their lattice constants change from -13% to $+13\%$ relative to the equilibrium lattice constant. The calculated results indicate that CoCrTe and CoCrSb can maintain their half-metallicities and retain their total magnetic moments of 3.00 and 2.00 μ_B per formula unit even as their lattice constants change from -11.4% to 9.0% and from -11.2% to 2.0% , respectively. The semi-Heusler alloys CoCrTe and CoCrSb should be useful in spintronics and other applications.

Keywords: first principle, half metal, electronic structure, magnetism

PACS: 75.50.Cc, 71.15.Mb, 71.20.-b, 71.55.Ak

DOI: 10.7498/aps.65.127501

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11364014, 11364015) and the Natural Science Foundation of Hainan Province, China (Grant Nos. 113005, 20165196).

[†] Corresponding author. E-mail: zyz@hainnu.edu.cn