

CoTiSb 基体中 Ni 元素诱导的单自旋通道研究

常月华 盘如静 斯宇豪 林婷婷 毋志民 刘国栋 崔玉亭

Single spin channels in Ni-doped CoTiSb semiconductor

Chang Yue-Hua Pan Ru-Jing Si Yu-Hao Lin Ting-Ting Wu Zhi-Min Liu Guo-Dong Cui Yu-Ting

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 087102 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.087102

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.087102>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I8>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

强激光照射对 6H-SiC 晶体电子特性的影响

Effect of intense laser irradiation on the electronic properties of 6H-SiC

物理学报.2016, 65(10): 107101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.107101>

Mg-Y-Zn 合金三元金属间化合物的电子结构及其相稳定性的第一性原理研究

First-principles study of electronic structures and phase stabilities of ternary intermetallic compounds in the Mg-Y-Zn alloys

物理学报.2015, 64(18): 187102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.187102>

Ga₂ 基 Heusler 合金 Ga₂XCr(X = Mn Fe Co Ni Cu) 的四方畸变、电子结构、磁性及声子谱的第一性原理计算
First-principles investigations on tetragonal distortion electronic structure magnetism and phonon dispersion of Ga₂XCr (X = Mn Fe Co Ni Cu) Heusler alloys

物理学报.2015, 64(7): 077104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.077104>

N Fe La 三掺杂锐钛矿型 TiO₂ 能带调节的理论与实验研究

Theoretical and experimental studies on N Fe La co-doped anatase TiO₂ band adjustment

物理学报.2015, 64(1): 017101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.017101>

立方相 Na_{1/2}Bi_{1/2}TiO₃ 和 K_{1/2}Bi_{1/2}TiO₃ 的电子结构和结构不稳定性的第一性原理比较研究

Electronic structures and phase instabilities of cubic Na_{1/2}Bi_{1/2}TiO₃ and K_{1/2}Bi_{1/2}TiO₃: a first-principles comparative study

物理学报.2014, 63(16): 167101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.167101>

CoTiSb基体中Ni元素诱导的单自旋通道研究*

常月华¹⁾ 盘如静¹⁾ 斯宇豪¹⁾ 林婷婷²⁾ 毋志民¹⁾
刘国栋^{1)2)†} 崔玉亭^{1)‡}

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)

(2015年11月26日收到; 2016年3月9日收到修改稿)

沿半Heusler结构CoTiSb合金的[001]晶体学方向, 利用Ni元素连续替换一条原子链上的Ti, Sb原子, 在半导体性CoTiSb基体中设计了一系列均匀分布的Ni基单原子链阵列. 采用第一性原理方法, 研究了Ni基单原子链的电子结构和磁性质, 发现Ni-Sb单原子链具有高度自旋极化率和空穴导电特性, Ni-Ti及Ni-Ni单原子链具有100%的自旋极化率, 并且在CoTiSb基体中形成了以这种Ni基单原子链为中心的、尺寸非常小的单自旋纳米柱通道.

关键词: 半Heusler合金, 高自旋极化, 单原子链, 第一性原理计算

PACS: 71.20.-b, 71.20.Lp, 75.50.Cc

DOI: 10.7498/aps.65.087102

1 引言

在目前广泛应用的磁存储技术中, 人们利用磁致电阻原理读取每一个记录单元的存储信息, 利用外部磁场诱导记录单元磁化强度方向的变化来写入信息. 这样的读写原理, 使得目前磁存储设备的机械设计非常复杂, 容易出现故障. 如果每一个记录单元的读出或写入都可以通过直流电流来控制而不再需要外部磁场, 那么高密度非易失性存储器的设计将变得非常简单. 因此, 近年来, 直流电转换磁存储原理与设备引起了人们的广泛关注^[1-9]. 通常情况下, 直流电存储可以通过两种不同的物理机理来实现: 一种是当磁性体中通过一个很大的直流电流时, 在该直流电流周围会自发产生一个足够大的磁场使材料内部的磁畴发生重排^[4,10]; 另一种是当自旋极化电流通过一个纳米尺寸的铁磁体薄膜或者一个磁性纳米柱时, 它所产生的自旋角动量转移矩使电流在这个铁磁体薄膜或者是磁性纳米

柱中产生磁激发, 甚至能够引起铁磁薄膜磁化方向的翻转^[1-3,6,7,11-13]. 后者被称之为自旋角动量转移矩效应, 更适合于在微小的存储单元中实现.

1996年, 文献^[1]在理论上预测了自旋角动量转移矩效应; 自1998年这一效应首次在实验上证实后^[11], 人们先后在铁磁薄膜、自旋阀和铁磁性隧道结中观察到了这种自旋转移矩效应^[2-5]. 最近, 王立英等^[14]构建了一种利用自旋转移矩效应实现直流电存储的超结构材料设计. 他们通过将Fe元素沿材料某个晶体学方向连续替换原子链上的原子, 形成Fe基单原子链的形式引入到半导体材料CoTiSb中, 并且将材料中自旋极化的磁性纳米柱的尺寸缩小到一个晶格大小, 这种方法能够有效地提高设备的存储密度. 本文利用相似的设计方法, 将Ni元素引入到半导体材料CoTiSb中, 利用第一性原理计算超胞的方法, 通过对电子结构和磁性质的研究, 设计了一系列存在于CoTiSb基体中的高自旋极化磁性纳米柱通道.

* 国家自然科学基金(批准号: 51271071)、重庆市基础与前沿研究项目重点项目(批准号: cstc2013jjB50001)、重庆市杰出青年项目(批准号: cstc2014jcyj50003)和河北省青年拔尖人才支持计划资助的课题.

† 通信作者. E-mail: gdlu1978@126.com

‡ 通信作者. E-mail: cycyt111@163.com

2 理论计算方法

采用基于密度泛函理论框架下的平面波赝势的第一性原理方法^[15], 计算了材料的电子结构和磁性质. 在计算中采用广义梯度近似和Perdew-Burker-Ernzerhof 方案^[16,17] 处理交换关联. 为确保计算结果足够准确, 计算时平面波截断能取为350 eV, 第一布里渊区 K 格点取为 $10 \times 10 \times 10$, 自洽循环收敛标准设定为 1×10^{-6} eV/atom. 晶格参数采用实验中测得的CoTiSb的晶格参数, 其数值为5.884 Å.

3 结果与讨论

图1(a)给出了半Heusler结构CoTiSb合金的超晶格结构. 半Heusler合金是一种高度有序的三元金属间化合物, 其空间群为 $F\bar{4}3m$. 就CoTiSb而言, 其半Heusler结构可以看成由三个面心立方亚晶格(分别由Co, Ti和Sb原子构成)沿空间对角线

的1/4套构而成. 单胞中的原子占位分别为: Co(0, 0, 0), Ti(0.25, 0.25, 0.25), Sb(0.75, 0.75, 0.75). 我们将Ni原子沿半Heusler结构CoTiSb[001]晶体学方向上的某一条原子链, 连续替换一种或两种原子, 形成Ni基单原子链, 从而构成以CoTiSb为基体的、含有Ni基单原子链的超结构. 我们利用超胞的方式来模拟计算构成的这种超结构. 本文考虑了三种不同的替换方式形成的超结构, 如图1(b)–(d)所示. 在图1(b)–(d)中, 我们选择 $2 \times 2 \times 2$ 个单胞构成一个基本超胞单元, 用Ni原子替换中心线Ti-Sb原子链上的原子. 图1(b)是利用Ni原子替换中心线Ti-Sb原子链上的Ti原子形成的以Ni-Sb原子链为中心的超结构(命名为Ni-Sb超胞); 图1(c)所示为用Ni原子替换Sb原子形成的以Ni-Ti原子链为中心的超结构(Ni-Ti超胞); 类似地, 图1(d)中给出了用Ni原子完全替换Ti和Sb原子形成的以Ni-Ni原子链为中心的超结构(Ni-Ni超胞). 我们以Ni基单原子链为中心, 来研究掺入的Ni原子对周围基体中各个原子的影响和整个超胞的能带结构及电子态密度分布的变化.

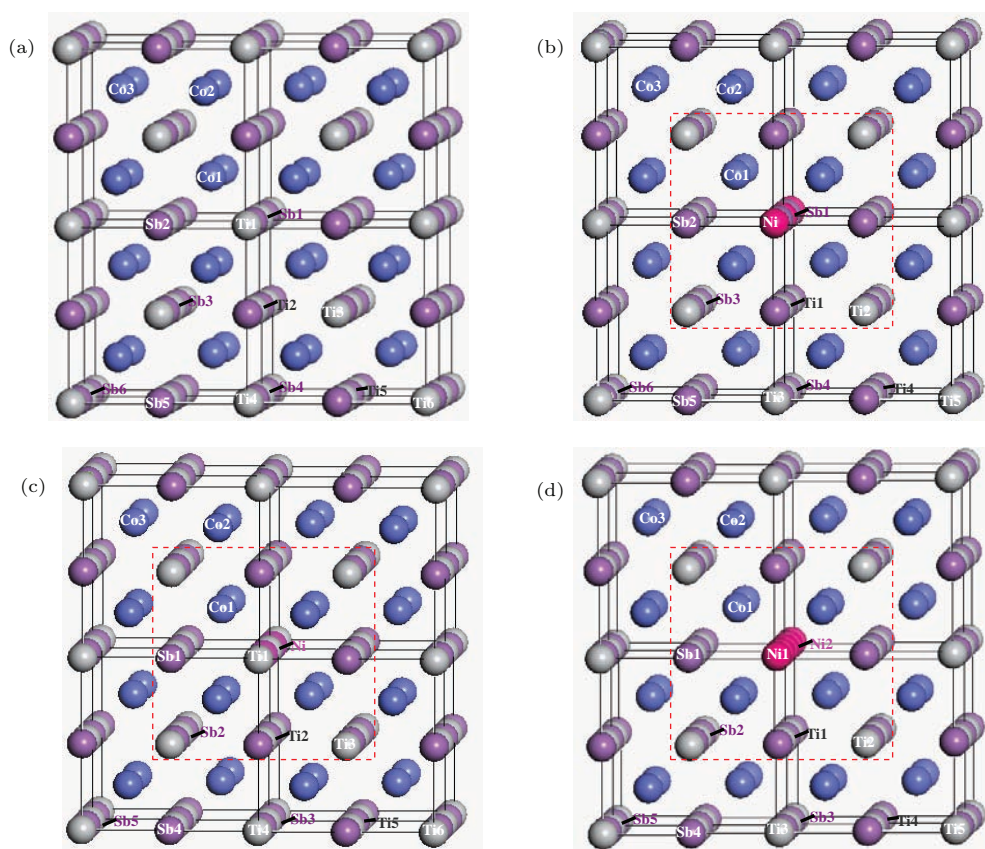


图1 (网刊彩色) (a) 半Heusler结构CoTiSb基体的结构; (b) Ni替换Ti形成的Ni-Sb超晶格结构; (c) Ni替换Sb形成的Ni-Ti超晶格结构; (d) Ni替换Ti和Sb形成的Ni-Ni超晶格结构

Fig. 1. (color online) (a) Supercell of half-Heusler CoTiSb; (b) Ni-Sb supercell by substituting Ni for Ti; (c) Ni-Ti supercell by substituting Ni for Sb; (d) Ni-Ni supercell by substituting Ni for Ti and Sb.

图2给出了计算得到的三种超胞的能带结构. 从图中可以看出, 这三种超胞的能带结构都发生了自旋劈裂, 说明Ni元素的掺杂使材料中产生了铁磁性. 从图2(a)(Ni-Sb超胞)给出的能带结构图中可以看出, CoTiSb基体的禁带分布大约为 $-0.5\sim 0.75$ eV. 在自旋向下能带中, Ni掺杂诱导的杂质带在基体禁带中的分布为 $-0.5\sim 0$ eV和 0.3 eV附近, 而分布在 $-0.5\sim 0$ eV能量范围内的两条能带具有较强的弥散性. 借助于图3(a)中各个原子的分态密度 (partial density of states, PDOS) 图可知, 这两条能带主要由Ni和Ti元素的3d轨道能态和Sb元素的5p轨道能态杂化而成, 具有很强的p态特征. 而位于 0.3 eV附近的三条能带主要是Ni, Co和Ti元素的3d轨道能态杂化形成的反键态, 突显了3d轨道能态的高局域化特征. 在自旋向上能带中, Ni掺杂诱导的杂质带在基体禁带中的

分布与在自旋向下能带中的分布不同. 最主要的差别是对应于自旋向下能带中位于 0.3 eV的反键态在自旋向上能带中位于 0 eV处. 借助于图3(a)中Ni原子的PDOS可以看出, Ni原子有着强烈的3d电子自旋劈裂, 这使得其自旋向上能带的能量分布范围要低于自旋向下能带的能量分布范围, 从而导致Ni和Co, Ti原子的3d电子之间杂化形成的反键态的能量分布在自旋向上能带低于在自旋向下能带中的能量分布. 在能带结构图谱和总态密度 (density of states, DOS) 图谱上可以观察到在自旋向下能带中, 费米面轻微地擦过杂质诱导的价带顶, 而在自旋向上能带中, 费米面和反键态峰值有一个交叉. 换句话说, 在Ni-Sb超胞情况下, 费米面上的传导电子具有很高的自旋极化率 (达到95%), 在自旋向下能带中, 其导电特征应该是p型

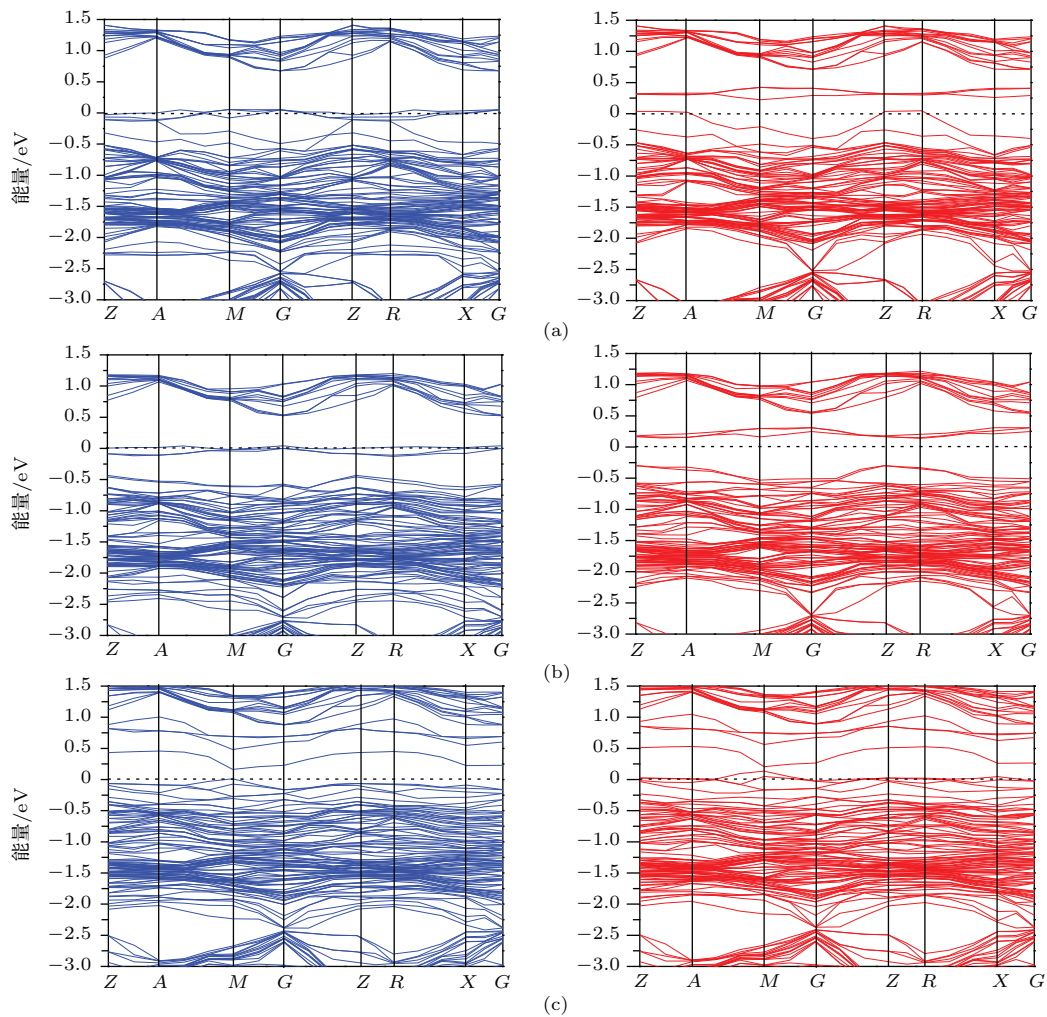


图2 含不同Ni基单原子链超胞的能带结构图 (a) Ni替换Ti原子形成的Ni-Sb超胞的能带结构图; (b) Ni替换Sb原子形成的Ni-Ti超胞的能带结构图; (c) Ni同时替换Ti和Sb原子形成的Ni-Ni超胞的能带结构图

Fig. 2. Band structures of supercells with different Ni-based single atomic chains: (a) Band structures of Ni-Sb supercell; (b) band structures of Ni-Ti supercell; (c) band structures of Ni-Ni supercell.

导电(空穴导电),而在自旋向上能带中,位于费米面处的能带具有很强的局域特性,其导电能力很弱.因此,Ni-Sb超胞具有高度自旋极化的空穴导电特性.

图4(a)给出了Ni-Sb超胞中心线原子链的最近邻、次近邻、第三近邻及第四近邻原子链上各个原子的PDOS图谱.从图中可以看出,中心线Ni-Sb原子链主要影响其最近邻和次近邻原子链上的原子,而对于第三近邻和第四近邻原子链上的

原子,Ni-Sb原子链几乎没有影响.也就是说,基体中距离Ni-Sb中心原子链较远的原子链上的原子仍保持了基体的半导体性质.图1(b)中的虚线框显示在Ni-Sb超胞中基体原子受Ni-Sb中心原子链影响的范围.这表明在CoTiSb基体中形成了一个以Ni-Sb原子链为中心的、宽度约为 a (a 为晶格常数)的导电纳米柱,这些纳米柱稀疏地分布在半导体CoTiSb的基体中,且具有高的自旋极化率和空穴导电特性.

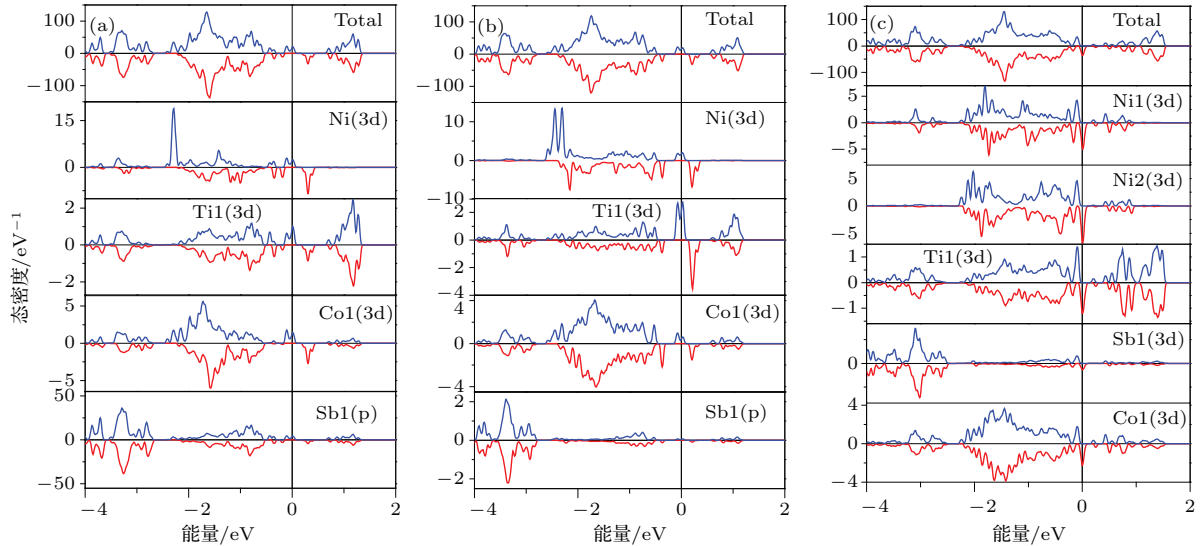


图3 (网刊彩色) 含不同Ni基单原子链超胞的总态密度和各原子的分态密度图 (a) Ni-Sb超胞的总态密度和各原子的分态密度图; (b) Ni-Ti超胞的总态密度和各原子的分态密度图; (c) Ni-Ni超胞的总态密度和各原子的分态密度图

Fig. 3. (color online) The total and partial DOS of supercells with different Ni-based single atomic chains: (a) The total and partial DOS of Ni-Sb supercell; (b) the total and partial DOS of Ni-Ti supercell; (c) the total and partial DOS of Ni-Ni supercell.

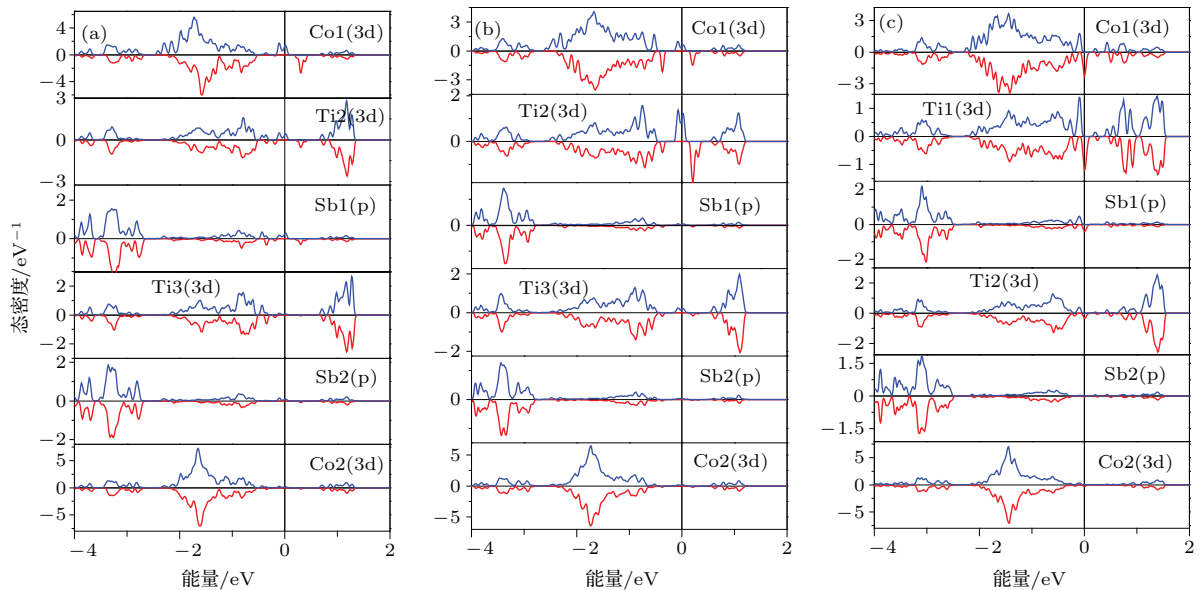


图4 (网刊彩色) Ni-Sb (a), Ni-Ti (b) 和 Ni-Ni (c) 单原子链最近邻、次近邻、第三近邻和第四近邻原子链上各个原子的PDOS图

Fig. 4. (color online) The PDOS of atoms in the nearest, the second nearest, the third nearest and the forth nearest atomic chains of Ni-Sb (a), Ni-Ti (b) and Ni-Ni (c) single atomic chain.

图2(b)是利用Ni替换Sb原子形成的Ni-Ti超胞的能带结构. 从图中可以看到, 在自旋向下能带中, 费米面落入一个宽度约为0.4 eV的带隙中, 显示出半导体特性; 而在自旋向上能带中, 费米面穿过了一些杂质能带, 显示出金属特性. 这说明Ni替换Sb原子形成的Ni-Ti超胞的电子在费米面上具有100%的自旋极化率. 因此, 该超胞具有典型的半金属特性. 相应地, 我们在图4(b)中给出了Ni-Ti中心原子链的最近邻、次近邻、第三近邻及第四近邻原子链上各个原子的PDOS图谱. 从图中可以看到, 与Ni-Sb超胞的情况相同, Ni-Ti原子链主要影响其最近邻和次近邻原子链上的原子. 同样地, 我们也在图1(b)中用虚线框标出了在Ni-Ti超胞中基体原子受Ni-Ti中心原子链影响的范围. 这表明Ni替换Sb原子在CoTiSb基体中形成了一个以Ni-Ti原子链为中心的、宽度约为 a (a 为晶格常数)的单自旋纳米柱通道.

对比Ni-Sb(图2(a))和Ni-Ti超胞(图2(b))的能带结构图谱, 可以发现这两个超胞的能带结构较为相似, 都是在基体的禁带中分布了五条Ni原子诱导的杂质能带, 由Ni, Co和Ti原子的3d轨道能态杂化而产生的反键态都具有很强的d电子局域化特征, 且都位于0.3 eV处. 二者主要的不同在于分布在0—0.5 eV范围内的两条能带的特征和能量分布. 如上面我们提到的, 在Ni-Sb超胞中, 这两条能带是由Sb元素的5p电子和其他过渡族元素的3d电子杂化而成, 具有很强的p电子的能量分布弥散特性. 而在Ni-Ti超胞中, 由于我们利用Ni原子替换了Sb原子, 因此, Sb元素的5p电子和其他过渡族元素的3d电子杂化几乎不再发生. 这一点能够从图3(b)中给出的Ni-Ti超胞各个原子的PDOS中得到确认. 正是由于Sb元素5p电子的缺失, 导致了在Ni-Ti超胞中位于0—0.5 eV范围内的两条能带的弥散性剧烈减弱, 3d轨道的局域特性突显出来, 进而导致三条反键态的能带和这两条能带之间产生更大的能隙, 而由于能隙的增大, 使费米面正好落入到能隙之中. 类似的情况也发生在自旋向上能带中, 这也导致了0—0.55 eV之间能隙的形成, 只不过费米面仍旧落在了反键态上, 说明这个能隙的产生并没有对费米面附近的电子分布产生影响. 因此, Ni-Ti超胞表现出了100%自旋极化的真正半金属特性. 而以Ni-Ti为中心的原子链的纳米柱也成了真正意义上的单自旋纳米柱通道. 基于上述分析, 我们也可以清晰地看出主族元素(这

里是Sb元素)对Heusler合金中半金属能隙的重要影响.

图2(c)是Ni同时替换Ti和Sb原子形成的Ni-Ni超胞的能带结构. 从图中可以看到, Ni-Ni超胞与其他两个超胞的能带结构有着很大的不同, 具体表现为三个特征: 1) 分布在基体禁带中(−0.5—0.75 eV)的杂质诱导的能带共有十条, 比Ni-Sb和Ni-Ti超胞中的多出一倍, 这是由于在Ni-Ni超胞中多出了一倍的杂质Ni原子所导致的必然结果; 2) 单条能带主要体现3d电子的强局域化特征, 这一点类似于Ni-Ti超胞而不同于Ni-Sb超胞的情况, 从图3(c)中给出的各个原子的PDOS图谱上可以看出, 这是由于在Ni-Ni超胞中Sb元素提供5p电子的缺失所导致的; 3) 十条能带趋向于单独、均匀地分布在基体禁带中, 借助于图3(c)中给出的Ni原子的PDOS图谱可知, 在整个能量范围内替换Ti和Sb原子的Ni原子之间发生了强烈的杂化, 从而导致了Ni原子的自旋劈裂削弱和3d电子形成的杂化轨道在更宽能量范围内的分布.

在Ni-Ni超胞的自旋向上和自旋向下能带中, 分布在基体禁带中的Ni原子诱导的杂质能带的特征和能量分布较为相似. 较弱的Ni原子的自旋劈裂导致费米面在自旋向上能带位于一个约0.2 eV的直接能隙中, 而在自旋向下能带中, 费米面与杂质元素诱导的反键态(主要由Ni和Co原子的3d电子构成, 这也可以从图3(c)的PDOS中清晰地看出)峰值有一个金属性交叉. 这说明在Ni-Ni超胞费米面上的电子显示出具有100%自旋极化率的半金属性质, 只不过与另外两个超胞不同的是其带隙存在于自旋向上能带中. 同样地, 图4(c)给出了Ni-Ni中心线原子链最近邻、次近邻、第三近邻及第四近邻原子链上各个原子的PDOS图谱, 我们也在图1(d)中利用虚线框标出了在Ni-Ni超胞中, 基体原子受Ni-Ni原子链影响的范围, 具体分析与其他两个超胞类似, 不再赘述. Ni替换Ti和Sb原子同样在CoTiSb基体中形成了一个以Ni-Ni原子链为中心的、宽度约为 a (a 为晶格常数)的单自旋纳米柱通道.

为了更清楚地观察超胞中各个原子对磁性的贡献情况以及掺入的Ni原子对周围原子的影响, 我们给出了三种超胞的总磁矩及各个原子磁矩, 如表1所列. 从表1中可以看出, 三种超胞的总磁矩均为整数, 这也是半金属材料的一个特征. 还可以看出三种超胞中的杂质Ni原子对超胞总磁矩做出

了主要贡献. 在 Ni-Sb 和 Ni-Ti 超胞中, Ni 原子的磁矩分别为 $0.8 \mu_B$ 和 $0.84 \mu_B$. 在 Ni-Ni 超胞中, 我们可以看到占据不同位置的两个 Ni 原子磁矩分别为 $0.16 \mu_B$ 和 $0.2 \mu_B$. 在 Ni-Sb 超胞中, 由表 1 可知, 与 Ni 原子最近邻的 Sb 原子磁矩为 $0.06 \mu_B$, 次近邻的 Ti 原子磁矩与 Ni 原子磁矩呈反平行排列, 与其次近邻的 Ti 原子磁矩大小为 $-0.04 \mu_B$. 在 Ni-Ti 超胞中, Ni 原子与其次近邻的 Ti 原子具有较强的铁磁相互作用, Ti1 原子的磁矩大小为 $0.28 \mu_B$, 与其最近邻的 Co1 原子之间具有反铁磁相互作用. 在 Ni-Ni 超胞中, Ni 原子与其最近邻的 Co1 原子之间有较强的铁磁交换作用. 从表 1 中还可以看出, Ni-Sb, Ni-Ti 和 Ni-Ni 超胞的中心原子链只对其最近邻和次近邻原子链上的原子磁矩有影响, 而对于第三近邻、第四近邻原子链上的原子影响较小, 几乎可以忽略不计, 这与我们在 PDOS 图谱上所观察到的现象一致.

表 1 计算得到的 Ni-Ti, Ni-Sb 和 Ni-Ni 超胞的总磁矩及各个原子磁矩

Table 1. The calculated magnetic moments (M) for Ni, Co, Ti, Sb and the complete supercell (total) of Ni-Sb, Ni-Ti and Ni-Ni supercells.

	$M(\text{Ni-Sb})/\mu_B$	$M(\text{Ni-Ti})/\mu_B$	$M(\text{Ni-Ni})/\mu_B$
Total	2.0	2.0	1.0
Ni1	0.8	0.84	0.16
Ni2	—	—	0.2
Co1	0.34	-0.1	0.1
Co2	0	0	0
Co3	0	0	0
Ti1	-0.04	0.28	0.04
Ti2	-0.04	0.16	0.02
Ti3	-0.02	0.16	-0.02
Ti4	-0.02	0.04	-0.02
Ti5	—	0	—
Sb1	0.06	0	0.02
Sb2	0.02	0	0
Sb3	0	0	0
Sb4	0	0	0
Sb5	0	0	0

4 总 结

利用 Ni 原子替换半导体 CoTiSb 中的 Ti, Sb 原子, 在半导体性 CoTiSb 基体中构建了稀疏分布的 Ni-Sb, Ni-Ti 及 Ni-Ni 单原子链. 以这些单原子链为中心在 CoTiSb 基体中形成了接近晶格宽度的纳米柱导电通道. 其中, 以 Ni-Ti 和 Ni-Ni 单原子链为中心的纳米柱导电通道展现出了 100% 自旋极化的半金属特性, 而以 Ni-Sb 单原子链为中心的纳米

柱导电通道展现出了 95% 的高自旋极化率特性. 在实际生长中, 这些以 Ni 基单原子链为中心的纳米柱的长度是可以根据所制备的薄膜的厚度而自由调节的. 由于这些纳米柱具有极高的自旋极化率, 因此非常有利于实现直流电转换磁存储, 是实现直流电存储的候选材料. 我们的研究也给实验提供了一个很好的理论依据. 进一步, 还需要指出, 在参考文献 [14] 中, 并未提出利用过渡族元素连续替换 Ti 和 Sb 形成 Ni-Ni 单原子链的情况, 从我们的结果可以看出, 在这种情况下材料可以呈现 100% 的自旋极化率. 事实上, 这种连续替换可以看作一条 Ni 原子链的插入, 这在实际制备中更加容易实现. 另外, 已经有报道发现 Fe 掺杂后的稀磁性 CoTiSb 材料具有高于 700 K 的居里温度 [18], 这使我们更加期待 Ni 掺杂后的 CoTiSb 材料同样具有很高的居里温度.

参考文献

- [1] Slonczewski J C 1996 *Magn. Magn. Mater.* **159** L1
- [2] Tsoi M, Jansen A G M, Bass J 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 4281
- [3] Sun J Z 1999 *Magn. Magn. Mater.* **202** 157
- [4] Bussman K, Prinz G A, Cheng S F 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 2476
- [5] Albert F J, Katine J A, Buhrman R A 2000 *Appl. Phys. Lett.* **77** 3809
- [6] Myers E B, Ralph D C, Katine J A 1999 *Science* **285** 867
- [7] Katine J A, Albert F J, Buhrman R A 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 3139
- [8] Jiang Y 2008 *Prog. Phys.* **28** 215 (in Chinese) [姜勇 2008 物理学进展 **28** 215]
- [9] Jin W, Wan Z M, Liu Y W 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 017502 (in Chinese) [金伟, 万振茂, 刘要稳 2011 物理学报 **60** 017502]
- [10] Katine J A, Albert F J, Buhrman R A 2000 *Appl. Phys. Lett.* **76** 354
- [11] Berger L 1996 *Phys. Rev. B* **54** 9353
- [12] Bazaliy Ya B, Jones B A, Zhang S C 1998 *Phys. Rev. B* **57** R3213
- [13] Weintal X, Myers E B, Brouwer P W 2000 *Phys. Rev. B* **62** 12317
- [14] Wang L Y, Dai X F, Wang X T, Li P P, Xia Q L, Zhang Y, Cui Y T, Liu G D 2015 *Sup. Mic.* **86** 493
- [15] Segall M D, Lindan P J D, Probert M J 2002 *J. Phys. Matter* **14** 2717
- [16] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [17] Perdew J P, Chevary J A, Vosko S H 1992 *Phys. Rev. B* **46** 6671
- [18] Skaftouros S, Özdoğan K, Şaşıoğlu E, Galanakis I 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 022402

Single spin channels in Ni-doped CoTiSb semiconductor*

Chang Yue-Hua¹⁾ Pan Ru-Jing¹⁾ Si Yu-Hao¹⁾ Lin Ting-Ting²⁾ Wu Zhi-Min¹⁾
 Liu Guo-Dong^{1)2)†} Cui Yu-Ting^{1)‡}

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)

(Received 26 November 2015; revised manuscript received 9 March 2016)

Abstract

Since the spin-transfer effect was predicted in 1996, the direct-current-switched magnetic storage has received much attention. A slender nanopillar with high spin-polarized ratio of the conductive electrons is the most favorable for realizing the direct-current-switched magnetic memory. Wang et al. (*Sup. Mic.* 2015 **86** 493) showed a supercell idea used to design the nanopillar array in a semiconductor matrix. Based on this idea, in this paper, the Ni-based single atomic chains are designed in the semiconductive CoTiSb matrix by continuously substituting Ni for Ti, Sb, or Ti-Sb in the [001] crystallographic direction. These single atomic chains are uniformly distributed in the matrix. We investigate the electronic structures and magnetic properties of CoTiSb supercells with the Ni-based single atomic chains by using the first-principle calculations. The calculation results show that the single atomic chains of Ni-Sb (achieved by substituting Ni for Ti) have a high spin polarization and hole conduction properties. The single atomic chain of Ni-Ti (achieved by substituting Ni for Sb) and Ni-Ni single atomic chain (achieved by substituting Ni for Ti and Sb) both have a 100% spin polarization ration at the Fermi level. The Ni-based single atomic chain has an effect on the electronic structures of other atoms surrounding it in about a lattice length and forms a nanopillar with the center of the Ni-based single atomic chain. We predict that CoTiSb matrixes with the Ni-Ti and Ni-Ni single atomic chains will be good candidates for the direct-current-switched magnetic storage.

Keywords: half Heusler alloy, high spin polarization, single atomic chain, first-principles calculations

PACS: 71.20.-b, 71.20.Lp, 75.50.Cc

DOI: 10.7498/aps.65.087102

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51271071), the Basic and Frontier Research Project of Chongqing City, China (Grant No. cstc2013jjB50001), the Chongqing City Funds for Distinguished Young Scientists, China (Grant No. cstc2014jcyj50003), and the Program for Top Young Talents of Hebei Province, China.

† Corresponding author. E-mail: gdlu1978@126.com

‡ Corresponding author. E-mail: cytcyt111@163.com