

# 晶格各向同性应变对闪锌矿结构 CrS 和 CrSe 的半金属性和磁性的影响\*

姚仲瑜<sup>1)†</sup> 傅 军<sup>1)</sup> 龚少华<sup>1)</sup> 张月胜<sup>2)</sup> 姚凯伦<sup>2)</sup>

1) (海南师范大学物理与电子工程学院, 海口 571158)

2) (华中科技大学物理学院, 武汉 430047)

(2011年2月25日收到; 2011年8月31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方法, 对闪锌矿结构 CrS 和 CrSe 的电子结构进行自旋极化计算. 闪锌矿相 CrS 和 CrSe 处于平衡晶格常数时为半金属性, 它们的分子自旋磁矩都为  $4.00\mu_B$ . 使晶体相对于平衡晶格在  $\pm 10\%$  的范围内发生各向同性应变, 并计算闪锌矿相 CrS 和 CrSe 的电子结构. 计算结果表明, 闪锌矿相 CrS 和 CrSe 相对于平衡晶格各向同性应变分别为  $-1\% - 10\%$  和  $-4\% - 10\%$  时仍然保持半金属铁磁性, 并且分子总磁矩都稳定于  $4.00\mu_B$ .

**关键词:** 各向同性应变, 电子结构, 半金属性, 磁性

**PACS:** 71.23.-k, 71.15.Mb, 71.20.-b, 75.50.Cc

## 1. 引言

半金属铁磁体是指一个电子自旋子能带(一般为自旋向上能带)是金属性的, 而另一个电子自旋子能带是半导体性或绝缘体性的铁磁性物质. 半金属铁磁性是 de Groot 等<sup>[1]</sup> 在 1983 年对半 Heusler 合金 NiMnSb 和 PtMnSb 进行能带计算时首次发现的. 自从 de Groot 发现半金属(half metal)以来, 已有不少化合物在理论上被预言具有半金属性质<sup>[2-9]</sup>, 文献[10, 11]也分别预言了闪锌矿结构 CrS 和全 Heusler 合金  $\text{Co}_2\text{MnP}$  的半金属铁磁性, 此外, 铁磁性氧化物  $\text{CrO}_2$ <sup>[12]</sup> 和  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ <sup>[13]</sup>、双钙钛矿结构  $\text{Sr}_2\text{CrReO}_6$ <sup>[14]</sup>、钙钛矿稀土锰氧化物  $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ <sup>[15, 16]</sup>、四元合金  $\text{Co}_{50}\text{Fe}_{25-x}\text{Mn}_x\text{Si}$ <sup>[17]</sup> 和半 Heusler 合金  $\text{Co}_2\text{MnSi}$  (叠层结构磁性隧道结  $\text{Co}_2\text{MnSi}/\text{Al-O}/\text{Co}_2\text{MnSi}$  的隧穿电阻高达 570%)<sup>[18]</sup> 分别在实验上被证实具有半金属性质.

闪锌矿结构 CrSe 和 CrS 具有半金属铁磁性. 理论计算表明, 闪锌矿结构的 CrSe 是半金属性铁磁体, 但是, 该结构的 CrSe 能态不是最低的. 计算结果

显示, 相对于砷化镍结构的 CrSe, 闪锌矿结构 CrSe 属于亚稳态, 该亚稳态比砷化镍结构的 CrSe 高  $0.31\text{ eV}$ <sup>[6]</sup>. 从以往生成闪锌矿结构 CrAs 超薄层<sup>[19]</sup> (闪锌矿结构 CrAs 的亚稳态能为  $0.93\text{ eV}$ <sup>[6]</sup>) 以及闪锌矿结构 CrSb 超薄多层结构<sup>[20]</sup> (闪锌矿结构 CrSb 的亚稳态能为  $1.0\text{ eV}$ <sup>[21]</sup>) 的实验可知, 要生成大块或高质量厚膜的闪锌矿相 CrSe 半金属铁磁体的可能性不大, 但是, 由于闪锌矿结构 CrSe 的亚稳态能仅为  $0.31\text{ eV}$ , 因此生长闪锌矿相 CrSe 半金属性铁磁体薄膜是完全有可能的. 运用平面波赝势方法的第一性原理计算, 发现闪锌矿相 CrS 是半金属铁磁体<sup>[10]</sup>, 它有望成为制作自旋电子学器件 (spintronic device) 的备选材料.

自旋电子学器件是目前凝聚态物理、半导体器件及材料领域的热点研究课题之一<sup>[22-24]</sup>. 它利用电子的“自旋”和“电荷”两种属性而不是像传统的电子器件只利用了电子的“电荷”属性来实现器件的功能. 由于过渡金属 Cr 的闪锌矿相半金属化合物具有较宽的非金属分能带 (通常为自旋向下电子能带) 带隙、与工业上广泛应用的二元化合物半导体的晶格空间群相同, 同时有较高的居里温度 (例如闪锌矿结构 CrAs<sup>[19]</sup> 和 CrSb<sup>[20, 25]</sup> 的实际居里温度

\* 国家自然科学基金 (批准号: 10574047, 10754048) 和海南省自然科学基金 (批准号: 110006) 资助的课题.

† E-mail: yzy@hainnu.edu.cn

都超出 400 K), 因此, 它们常被认为是制作自旋电子学器件较好的备选材料<sup>[26]</sup>. 自旋电子学器件通常是在器件基底上经过外延生长单层或多层半金属薄膜制作而成. 由于半金属材料晶格与器件基底晶格间通常会存在晶格失配 (lattice mismatch) 现象, 这必将导致与器件基底接触的半金属表面膜层晶格发生畸变. 在晶体晶格发生形变的情况下, 半金属材料是否还能保持其原有的半金属性质? 这是一个在自旋电子学器件的研制过程中必然会提出的问题. 晶格的真实形变模式很多, 情况也比较复杂, 本文将晶格各向同性形变为模型计算研究闪锌矿结构 CrS 和 CrSe 的半金属性和磁性, 它能从一个侧面反映出晶格形变对这两种半金属的半金属性和磁性的影响.

## 2. 晶格结构模型与计算方法

闪锌矿晶体结构可看成是由两套面心立方 Bravais 格子沿着体对角线方向  $\langle 111 \rangle$  错开  $1/4$  对角线长度套构而成, 其空间群为  $F\bar{4}3m$  (空间群编号为 216). 闪锌矿相 CrS 晶体各原子的分数坐标分别是 Cr(0, 0, 0), S(1/4, 1/4, 1/4), 其空间结构如图 1 所示.

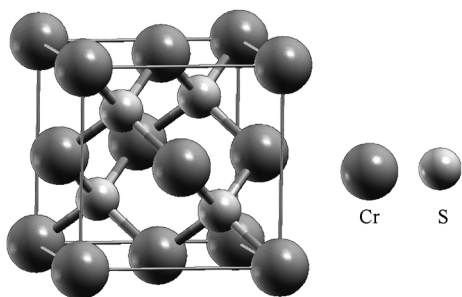


图 1 闪锌矿结构 CrS 的晶体结构

本文运用 Wien2K 程序<sup>[27]</sup> 计算闪锌矿相 CrS 和 CrSe 的电子结构. Wien2K 计算程序采用以 Kohn-Sham 密度泛函理论为基础的全势能线性缀加平面波方法. 该方法将晶胞划分为非重叠的糕模区和剩余的间隙空间区. 在糕模面内, 电荷密度和势能函数取球谐函数展开式, 基函数为原子径向函数和球谐函数的乘积; 在间隙区, 由于势场变化比较平缓, 电荷密度和势能函数采用平面波展式表示. 电子间的交换相关势采用 Perdew, Burke 和 Ernzerhof<sup>[28]</sup> 提出的广义梯度近似 PBE96 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  $12 \times 12 \times 12$ . Cr, S 和 Se 原子的糕模半径  $R_{MT}$  分别取为 2.0 a. u., 1.7 a. u. 和 2.0 a. u. (1 a. u. = 0.0529177 nm). 截断参数取为  $R_{MT}K_{max} = 8$ , 其中  $R_{MT}$  是分子中最小的糕模半径,  $K_{max}$  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为平均每个晶胞  $1 \times 10^{-4} e$ .

## 3. 计算结果及讨论

### 3.1. 闪锌矿结构 CrS 和 CrSe 半金属性的稳定性

对闪锌矿相 CrS 和 CrSe (平衡晶格常数  $a_0$  分别为 0.552 nm<sup>[10]</sup> 和 0.5833 nm<sup>[6]</sup>) 的电子结构进行自旋极化计算, 得到它们在平衡体积时的电子能带结构如图 2 所示, 图中的费米能位于 0 eV 处. 从图 2 可以看出闪锌矿相 CrS 和 CrSe 自旋向上电子的能带结构是金属性的, 而自旋向下电子的能带结构是非金属性的, 因此, 它们是半金属. 在自旋向下的电子能带中, 闪锌矿相 CrS 和 CrSe 的价带顶都位于第一布里渊区对称点  $L$ , 导带底则都位于  $X$  点, 价带顶和导带底明显错开. 闪锌矿相 CrS 和 CrSe 自旋向下电子能带的价带顶和导带底间有较宽的能带带隙.

为了研究晶格发生各向同性应变对闪锌矿结构 CrS 和 CrSe 半金属性的影响, 在保持晶体空间群结构不变的情况下改变其晶格常数, 在此情形下对它们的电子结构进行自旋极化计算. 我们用  $\Delta a/a_0$  ( $a_0$  为晶体平衡时的晶格常数,  $a$  为变化后的晶格常数,  $\Delta a = a - a_0$ ) 表示晶体相对于平衡晶格的各向同性应变, 并且在  $\Delta a/a_0$  为  $\pm 10\%$  的变化范围内计算闪锌矿结构 CrS 和 CrSe 的电子结构. 图 3 给出了闪锌矿结构 CrS 和 CrSe 晶格各向同性应变分别为  $\pm 10\%$  和  $0\%$  的电子态密度 (DOS) 分布. 从图 3 可以看出, 闪锌矿相 CrS 和 CrSe 在晶格各向同性应变为  $0\%$  和  $+10\%$  时是半金属性的, 而晶格应变变为  $-10\%$  时则是金属性的.

为了进一步详细研究晶格各向同性应变对闪锌矿结构 CrS 和 CrSe 半金属性稳定性的影响, 以  $1\%$  的变化步长缓慢地改变晶格的各向同性应变  $\Delta a/a_0$  的值, 计算闪锌矿相 CrS 和 CrSe 的电子结构. 计算结果显示,  $\Delta a/a_0$  从  $-10\%$  变化到  $+10\%$  的过程中闪锌矿相 CrS 和 CrSe 自旋向上电子的能带

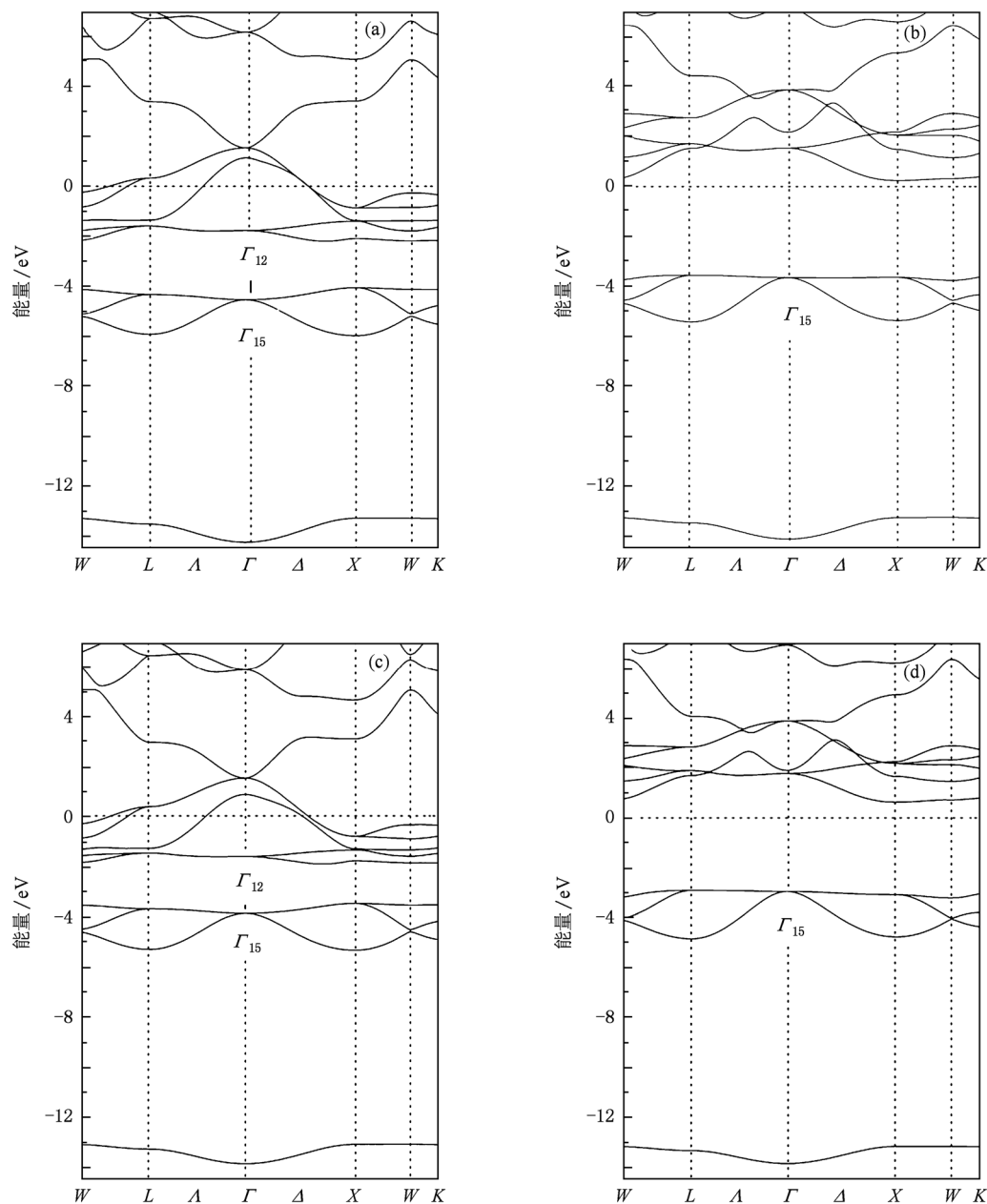


图2 闪锌矿相 CrS 和 CrSe 处于平衡晶格常数的电子能带结构 (a) 闪锌矿相 CrS, 自旋向上; (b) 闪锌矿相 CrS, 自旋向下; (c) 闪锌矿相 CrSe, 自旋向上; (d) 闪锌矿相 CrSe, 自旋向下

结构始终是金属性(在此未给出). 因此, 它们是否具有半金属性完全取决于自旋向下电子的能带性质. 为此, 在图 4 中我们给出了闪锌矿相 CrS 和 CrSe 费米能附近自旋向下电子的 DOS 空白区域随  $\Delta a/a_0$  的变化关系. 从图 4 可以看出, 当晶格各向同性应变分别为  $-1\% - 10\%$  和  $-4\% - 10\%$  时, 闪锌矿相 CrS 和 CrSe 的费米能位于自旋向下电子的 DOS 空白区内. 因此, 当它们分别在上述两个应变范围内是半金属性的.

### 3.2. 闪锌矿结构 CrS 和 CrSe 的磁性及磁性的稳定性

对闪锌矿相 CrS 和 CrSe 的自旋磁矩计算显示, 处于平衡晶格时它们的分子总磁矩都是  $4.00 \mu_B$ , 其中 Cr 原子有 6 个价电子 ( $3d^5 4s^1$ ), S 原子有 6 个价电子 ( $3s^2 3p^4$ ), Se 原子有 6 个价电子 ( $4s^2 4p^4$ ). 对闪锌矿相 CrS 和 CrSe 各原子分波态密度 (PDOS) 的计算结果可知, 位于图 2(a), (b) 和图 2(c), (d) 底

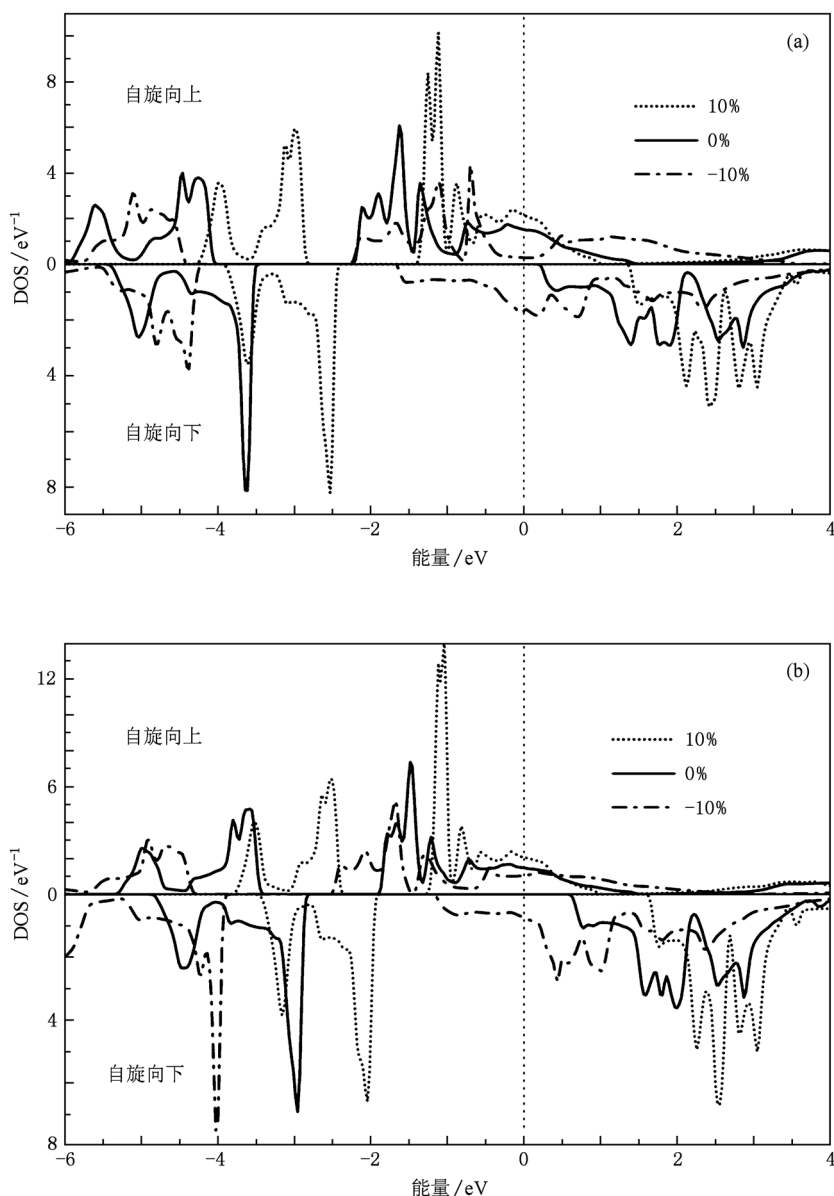


图3 闪锌矿结构 CrS 和 CrSe 晶体相对于平衡晶格的各向同性应变  $\Delta a/a_0$  为  $\pm 10\%$  和  $0\%$  的 DOS 分布 (a) 闪锌矿结构 CrS, (b) 闪锌矿结构 CrSe

部  $-14.4 \sim -13.0$  eV 间自旋向上和自旋向下的能带, 分别对应 S 原子的 3s 电子能态和 Se 原子的 4s 电子能态, 每个原子的该 s 电子轨道能容纳 2 个电子 (每个自旋方向容纳 1 个电子). 为便于对比分析, 图 5 中给出了闪锌矿相 CrS 和 CrSe 中的 S 原子 p, Se 原子 p 和 Cr 原子 d ( $d_{e_g}$  和  $d_{t_{2g}}$ ) 的 PDOS 分布. 在图 5 中, 闪锌矿相 CrS 和 CrSe 分别位于  $-6.0 \sim -3.5$  eV 和  $-5.5 \sim -2.7$  eV 区间出现了 p-d 杂化特征的 DOS 分布, p-d 杂化的结果使得每个自旋方向都形成了 3 个成键能带 (见图 2 对应的能

量区间), 它们分别三重简并于电子自旋向上和自旋向下能带结构中的  $\Gamma_{15}$  处. 这些能带的位置较低, 相应的轨道是完全填满的, 分别能容纳 6 个电子 (每个自旋方向容纳 3 个电子). 对应于图 2 和图 5 中闪锌矿相 CrS 和 CrSe 自旋向上电子能带的  $-2.2 \sim -1.4$  eV 和  $-1.8 \sim -1.3$  eV 区间, 我们注意到分别有两个受 p-d 杂化效应影响很小的 Cr  $d_{t_{2g}}$  (即  $d_{xy, yz, zx}$ ) 平偏窄带. 这两个能带二重简并于图 2 中的  $\Gamma_{12}$ , 它们完全位于费米能的下方, 被 2 个自旋向上的电子完全填满, 它们对分子总磁矩的贡

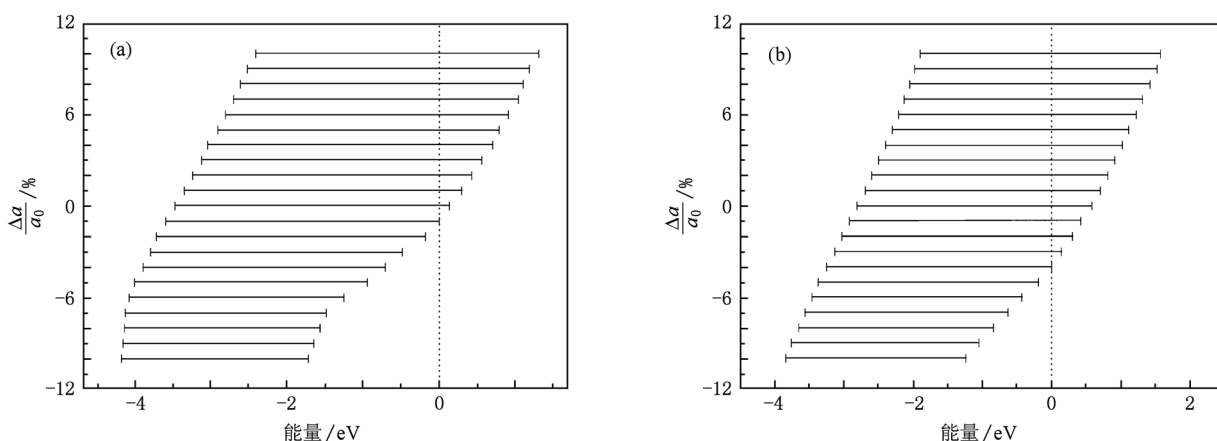


图4 闪锌矿相 CrS 和 CrSe 费米能附近自旋向下电子的 DOS 空白区域(用水平实线段表示)随晶格各向同性应变  $\Delta a/a_0$  的变化关系 (a) 闪锌矿相 CrS, (b) 闪锌矿相 CrSe

献为  $2\mu_B$ ; 闪锌矿相 CrS 和 CrSe 各自剩余的 2 个电子分别填充于图 2 中费米能下方电子自旋向上的能带中, 它们对总磁矩的贡献均为  $2\mu_B$ . 这样, 闪锌矿相 CrS 和 CrSe 的分子总磁矩为  $4\mu_B$ , 这与计算结果完全相符. 它们的整数总磁矩符合关系式<sup>[29, 30]</sup>

$$M = (Z - 8)\mu_B,$$

其中  $M$  为分子总磁矩, 单位为  $\mu_B$ ;  $Z$  为分子中各原子价电子总数之和.

在晶格平衡时, Wien2k 的电子结构计算给出了闪锌矿相 CrS 和 CrSe 各原子所处糕模原子球的自旋磁矩. 在闪锌矿相 CrS 中, Cr 和 S 原子球的自旋磁矩(球面内电子自旋向上磁矩与自旋向下磁矩

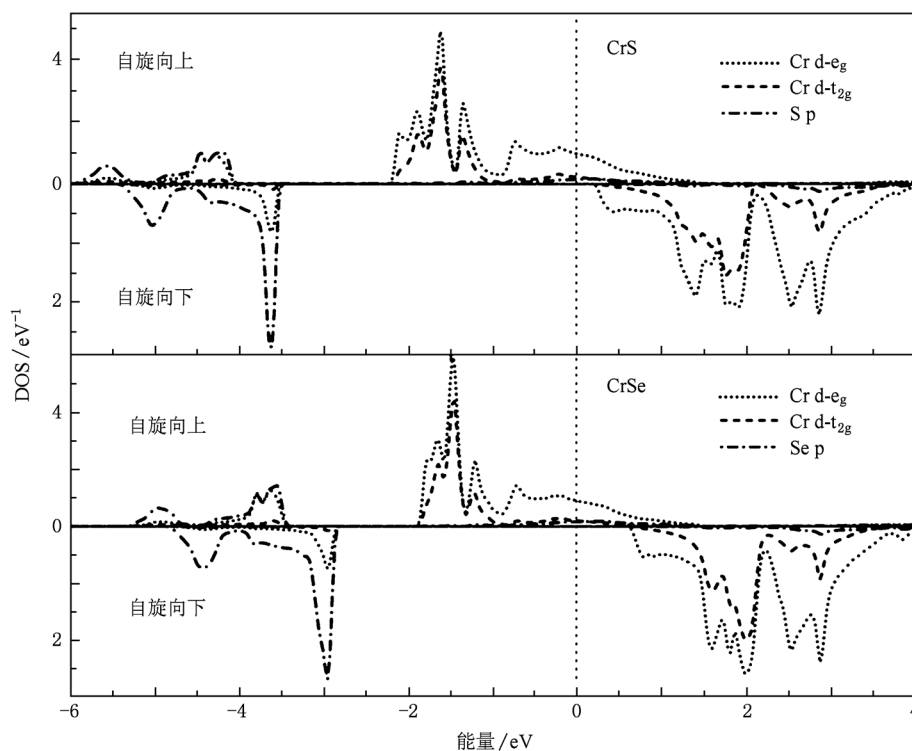


图5 闪锌矿相 CrS 和 CrSe 各原子主要的 PDOS 分布

之差)分别为  $3.29\mu_B$  和  $-0.06\mu_B$  (负值表示自旋向下);在闪锌矿相 CrSe 中,Cr 和 Se 原子球的自旋磁矩分别为  $3.33\mu_B$  和  $-0.11\mu_B$ . 为了进一步描绘自旋磁矩分布情况,图 6 给出了闪锌矿相 CrS 和 CrSe (110)面上的电子自旋密度分布. 很明显,自旋向上的磁矩主要局域于 Cr 原子上,并且自旋向上的磁矩较强. S 和 Se 原子及其附近分别有相对较弱的自旋

向上和自旋向下的电子分布,它们的密度大致相当,这样 S 和 Se 原子所表现出的磁矩是比较微弱的. 综合以上的磁矩计算结果可知,闪锌矿相 CrS 和 CrSe 的分子总磁矩主要由 Cr 原子磁矩贡献,S 和 Se 原子的自旋磁矩(方向向下)与 Cr 原子的自旋磁矩方向相反,对总磁矩的贡献很小. 因此,闪锌矿相 CrS 和 CrSe 是自旋极化铁磁性的.

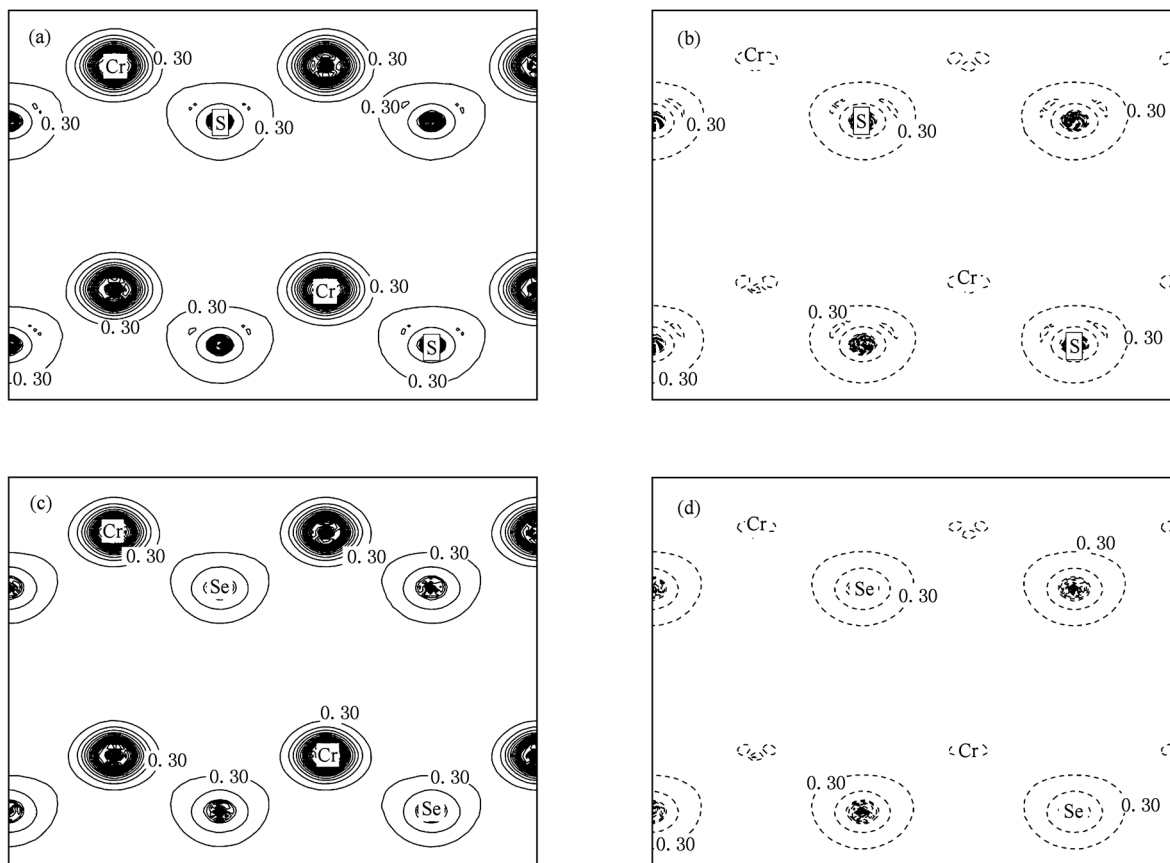


图 6 闪锌矿结构 CrS 和 CrSe 在(110)面上各原子的自旋电荷密度分布. 自旋向上电荷密度等值线用实线表示,自旋向下电荷密度等值线用虚线表示,等值线间隔都为  $0.30\mu_B/A^2$ . (a) 闪锌矿结构 CrS,自旋向上;(b) 闪锌矿结构 CrS,自旋向下;(c) 闪锌矿结构 CrSe,自旋向上;(d) 闪锌矿结构 CrSe,自旋向下

仍然以 1% 的变化步长改变晶格的各向同性应变  $\Delta a/a_0$  并计算闪锌矿相 CrS 和 CrSe 的总磁矩,计算结果在图 7 中给出. 在晶格的各向同性应变分为  $-1\%—10\%$  和  $-4\%—10\%$  时,闪锌矿相 CrS 和 CrSe 的分子总磁矩始终稳定于  $4.00\mu_B$ . 与此同时,自旋电荷密度分布的计算结果表明(未给出)在以上应变范围内闪锌矿相 CrS 和 CrSe 保持其自旋极化的铁磁性.

在本文的晶格应变变化范围内,当闪锌矿相 CrS 和 CrSe 的费米能位于自旋向下电子的能带

带隙中(即位于自旋向下电子的 DOS 空白区域内),电子填充轨道能态的数量关系不会发生变化,因此闪锌矿相 CrS 和 CrSe 的分子总磁矩稳定于  $4.00\mu_B$  的晶格应变范围与半金属性稳定的晶格应变范围是对应一致的. 综合以上分析结果可知,闪锌矿相 CrS 和 CrSe 相对于平衡晶格的各向同性应变分别在  $-1\%—10\%$  和  $-4\%—10\%$  范围内具有稳定的半金属铁磁性. 对于晶格的体膨胀而言,闪锌矿相 CrS 和 CrSe 的半金属铁磁性具有较好的稳定性.

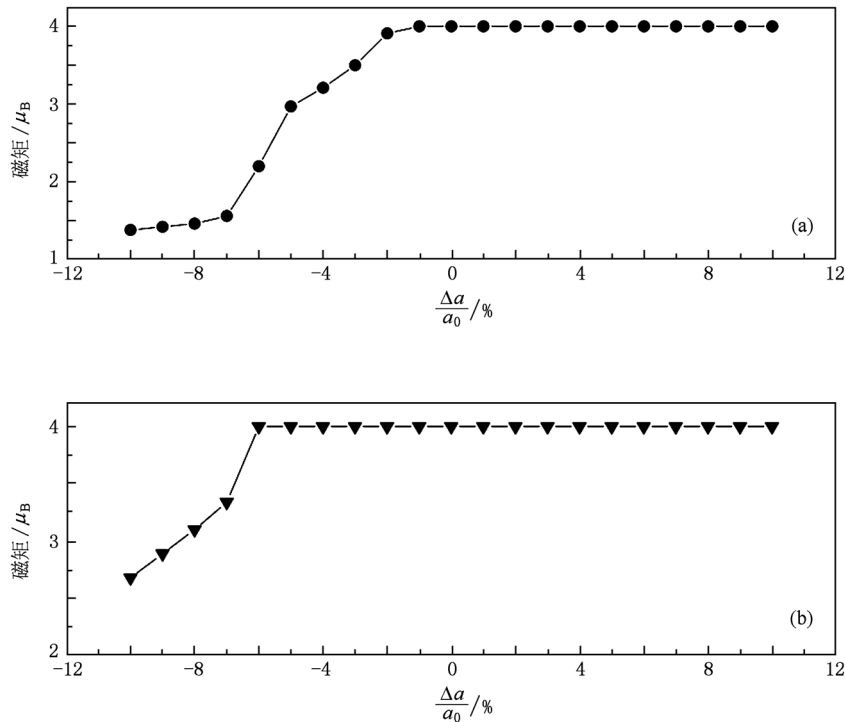


图7 闪锌矿相 CrS 和 CrSe 的总磁矩随相对于平衡晶格的各项同性应变的变化 (a) 闪锌矿相 CrS, (b) 闪锌矿相 CrSe

#### 4. 结 论

基于密度泛函理论的全势能线性缀加平面波方法, 计算了闪锌矿相 CrS 和 CrSe 的电子结构. 闪锌矿相 CrS 和 CrSe 处于平衡晶格常数时是半金属铁磁体, 分子总磁矩都为  $4.00\mu_B$ . 使晶体相对于平

衡晶格在  $\pm 10\%$  的范围内发生各项同性应变, 对闪锌矿相 CrS 和 CrSe 的电子结构进行了计算. 计算结果表明, 当相对平衡晶格的各项同性应变分别在  $-1\% - 10\%$  和  $-4\% - 10\%$  范围内, 闪锌矿相 CrS 和 CrSe 仍然具有半金属铁磁性, 而且它们的分子总磁矩都稳定于  $4.00\mu_B$ .

- [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] 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
- [4] Galanakis I 2004 *J. Phys. : Condens. Matter* **16** 3089
- [5] Schwarz K 1986 *J. Phys. F* **16** L211
- [6] Xie W H, Xu Y Q, Liu B G 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 037204
- [7] Ozdogan K, Galanakis I, Sasioglu E, Aktas B 2006 *J. Phys. : Condens. Matter* **18** 2905
- [8] Galanakis I, Dederichs P H, Papanikolaou N 2002 *Phys. Rev. B* **66** 134428
- [9] Kobayashi K I, Kimura T, Sawada H, Terakura K, Tokura Y 1998 *Nature* **395** 677
- [10] Yao K L, Gao G Y, Liu Z L, Zhu L 2005 *Solid State Commun.* **133** 301
- [11] Yao Z, Gong S, Fu J, Zhang Y S, Yao K L 2010 *Solid State Commun.* **150** 2239
- [12] Watts S M, Wirth S, von Molnar S, Barry A, Coey J M D 2000 *Phys. Rev. B* **61** 9621
- [13] Soeya S, Hayakawa J, Takahashi H, Ito K, Yamamoto C, Kida A, Asano H, Matsui M 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 823
- [14] Kato H, Okuda T, Okimoto Y, Tomioka Y, Takenoya Y, Ohkubo A, Kawasaki M, Tokuraa Y 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 328
- [15] Soulen R J Jr, 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] Yu D B, Feng J F, Du Y S, Han X F, Yan H, Ying Q M, Zhang G C 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4903 (in Chinese) [于敦波、丰家峰、杜永胜、韩秀峰、严辉、应启明、张国成 2005 物理学报 **54** 4903]

- [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] Akinga H, Manago T, Shirai M 2000 *Jpn. J. Appl. Phys.* **39** L1118
- [20] Zhao J H, Matsukura F, Takamura K, Abe E, Chiba D, Ohno H 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 2776
- [21] Liu B G 2003 *Phys. Rev. B* **67** 172411
- [22] Wolf S A, Awsclom D D, Buhrman R A, Daughton J M, von Molnar S, Roukes M L, Chitchekanova A Y, Treger D M 2001 *Science* **294** 1488
- [23] Zntic I, Fabian J, Sarma S D 2004 *Rev. Mod. Phys.* **76** 323
- [24] Naber W J M, Faez S, Gvan der Wie W 2007 *J. Phys. D* **40** R205
- [25] Deng J J, Zhao J H, Bi J F, Niu Z C, Yang F H, Wu X G, Zheng H Z 2006 *J. Appl. Phys.* **99** 093902
- [26] Mavropoulos P, Galanakis I 2007 *J. Phys. : Condens. Matter* **19** 315221
- [27] Blaha P, Schwarz K, Soarntin P, Trickey S B 1990 *Comput. Phys. Commun.* **59** 399
- [28] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [29] Galanakis I, Mavropoulos P 2003 *Phys. Rev. B* **67** 104417
- [30] Sasioglu E, Galanakis I, Sandratskii L M, Bruno P 2005 *J. Phys. : Condens. Matter* **17** 3915

## Influence of lattice uniform strain on half-metallicity and magnetism of zinc-blende CrS and CrSe \*

Yao Zhong-Yu<sup>1)†</sup> Fu Jun<sup>1)</sup> Gong Shao-Hua<sup>1)</sup> Zhang Yue-Sheng<sup>2)</sup> Yao Kai-Lun<sup>2)</sup>

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

2) (School of Physics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430047, China)

(Received 25 February 2011; revised manuscript received 31 August 2011)

### Abstract

Using the full-potential linearized augmented plane wave method based on the density functional theory, spin-polarized calculations of electronic structure for the zinc-blende CrS and CrSe are performed. Zinc-blende CrS and CrSe at their respective equilibrium lattice constants are half-metallic with the same total magnetic moment of  $4.00\mu_B$ . The electronic structures of zinc-blende CrS and CrSe are calculated under uniform strains from  $-10\%$  to  $+10\%$  relative to the equilibrium lattice constant. The calculated results indicate that zinc-blende CrS and CrSe can maintain half-metallic ferromagnetism and keep the same total magnetic moment of  $4.00\mu_B$  from  $-1\%$  to  $10\%$  and from  $-4\%$  to  $10\%$  uniform strain, respectively.

**Keywords:** uniform strain, electronic structure, half-metallicity, magnetism

**PACS:** 71.23.-k, 71.15.Mb, 71.20.-b, 75.50.Cc

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10574047, 10754048) and the Natural Science Foundation of Hainan Province, China (Grant No. 110006).

† E-mail: zzy@hainnu.edu.cn