

# 三元化合物 $\text{ZnCrS}_2$ 电子结构和半金属铁磁性的第一性原理研究\*

程志梅<sup>1)2)</sup> 王新强<sup>1)†</sup> 王 风<sup>3)</sup> 鲁丽娅<sup>1)</sup> 刘高斌<sup>1)</sup> 段壮芬<sup>1)</sup> 聂招秀<sup>1)</sup>

1) (重庆大学物理学院, 重庆 400044)

2) (重庆师范大学教育科学学院, 重庆 400047)

3) (重庆师范大学初等教育学院, 重庆 400700)

(2010年10月27日收到; 2010年11月21日收到修改稿)

以闪锌矿相的  $\text{ZnS } 2 \times 2 \times 1$  超原胞为基础, 通过将其中的 Zn 用 Cr 按 1:1 配比进行了 a 和 b 两种不同位置的替换构造出了三元化合物  $\text{ZnCrS}_2$  理论模型, 然后采用基于密度泛函理论 (DFT) 的平面波超软赝势 (PWPP) 方法分别计算了两种不同模型  $\text{ZnCrS}_2$  的电子结构和磁性性质. 结果表明, 两种模型的  $\text{ZnCrS}_2$  的铁磁态都比反铁磁态更稳定, 均是半金属铁磁体 (半金属能隙分别为 0.9631 eV 和 0.7556 eV), 其中 a 位替换不但具有较大的半金属能隙, 而且结构更稳定. 文中对 a 位替换结构的自旋极化电子态密度、能带结构、磁矩等进行了详细分析. 本文结果可望为实验研究提供指导和理论解释.

**关键词:**  $\text{ZnCrS}_2$ , 电子结构, 半金属铁磁性, 第一性原理

**PACS:** 63. 20. dk, 75. 50. Cc, 76. 50. +g, 71. 20. Lp

## 1. 引言

自旋电子学是一门磁学和微电子学相交叉的前沿学科, 它是利用电子的电荷与电子自旋来完成信息存贮与处理. 利用自旋电子学制造出的电子器件将会推动信息科学等高科技领域的飞速发展, 这种电子器件同传统电子器件比较, 它具有非易失性<sup>[1]</sup>、数据处理速度快、功耗低以及集成度高等优点<sup>[2]</sup>. 目前自旋电子学材料研究最多的当属稀磁半导体 (DMS)<sup>[3,4]</sup>, 因为它同时具有磁性和半导体特性, 并且利用电子的电荷与电子自旋自由度, 在理论和应用上都具有十分重要的意义. 但其至今没能得到广泛的应用, 原因之一是它的居里温度低于室温<sup>[5]</sup>, 另外是饱和磁化强度较低<sup>[6,7]</sup>, 加之这类材料的磁性原子的密度较小, 这就使得最终器件的尺度不能太小.

半金属 (half-metallic) 铁磁体是自旋电子学材料的另一发展方向, 它同时具有两种自旋行为: 自旋向上的费米面穿过导带, 表现出金属性, 自旋向

下的费米面处于导带和价带之间, 表现出半导体性质. 由于其有较高的居里温度和近 100% 的自旋极化率, 半金属铁磁体是一种具有极大应用潜能的自旋电子学材料<sup>[8,9]</sup>.

自 1983 年 Groot 等<sup>[8]</sup> 率先发现合金 NiMnSb 和 PtMnSb 具有半金属性后, 人们相继从理论和实验中发现了铁磁性金属氧化物  $\text{ScM}$  ( $M = \text{C}, \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}$ )<sup>[10]</sup>,  $\text{CrO}_2$ <sup>[11]</sup>,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ <sup>[12]</sup> 及二元闪锌矿 (ZB) 结构的过渡金属磷族化合物和硫族化合物  $\text{CrSb}$ <sup>[13]</sup>,  $\text{MnBi}$ <sup>[14]</sup>,  $\text{CrAs}$ <sup>[15,16]</sup>,  $\text{CrS}$ <sup>[17]</sup> 等具有半金属性, Li 等人<sup>[18]</sup> 还对原子无序性对 full-Heusler 合金  $\text{Co}_2\text{FeSi}$  的半金属特性的影响进行了研究.

近年来的研究表明, 在 III-V 族宽禁带半导体中掺入过渡金属同样具有半金属性, 如 Mn 掺杂  $\text{GaN}$ <sup>[19]</sup>, Cr, Mn 掺杂  $\text{AlN}$ <sup>[20]</sup>. 基于 II-VI 族半导体的三元化合物半金属铁磁体也逐渐被发现. 王风等人<sup>[21]</sup> 的计算表明, 三元化合物  $\text{ZnVSe}_2$  是一种半金属铁磁性材料; Fukumura 等人<sup>[22]</sup> 在蓝宝石衬底上利用脉冲激光淀积技术成功制备了  $\text{ZnMnO}$ ; 实验及

\* 重庆市自然科学基金 (批准号: CSTC-2007BB4137) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: xqwang@cqu.edu.cn

理论计算表明  $Zn_{1-x}M_xTe$  ( $M = V, Cr; x = 0.25, 0.75$ )<sup>[23]</sup> 也具有半金属性. 然而对于 II-VI 半导体中禁带最宽半导体的 ZnS 基的三元化合物半金属铁磁性的研究还鲜见报道. 本工作是采用基于密度泛函理论 (DFT) 的平面波赝势方法 (PWP), 对基于 ZnS 的  $2 \times 2 \times 1$  超原胞通过替换构造出来的  $ZnCrS_2$  八原子体系进行几何结构优化, 研究它的电子结构和磁性, 研究结果表明  $ZnCrS_2$  为半金属铁磁体.

## 2. 理论模型及计算方法

### 2.1. 计算方法

本工作的计算是基于平面波基组的超软赝势从头算法, 利用广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 的 PBE 基组处理电子间的交换关联能. 对替换后的  $ZnCrS_2$  晶胞进行几何优化, 为确保计算速度和计算精度, 平面波截断能取 420 eV,  $K$  点网格的大小为  $2 \times 2 \times 5$ , 原子间相互作用收敛标准为 0.01 eV/nm, 单原子能量收敛标准为  $5.0 \times 10^{-6}$  eV/atom, 原子最大位移收敛标准为 0.0005 Å, 晶体内应力收敛标准为 0.02 GPa, 能量与性质计算时平面波截断能  $E_{cut}$  取为 450 eV. 参与计算的价态电子有 S:  $3s^2 3p^4$ ; Cr:  $3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$ ; Zn:  $3p^6 3d^{10} 4s^2$ .

### 2.2. 理论模型

ZnS 具有低温相立方闪锌矿 ( $\beta$ -ZnS) 和高温相六方纤锌矿 ( $\alpha$ -ZnS) 两种晶体结构, 当闪锌矿结构 ZnS 升温到 1020°C 时, 即向六方纤锌矿结构转变. 由于自然界中稳定存在的是闪锌矿结构, 故本文计算采用的是立方闪锌矿结构的 ZnS 为基础构建三元化合物. 为了研究不同位置替换对半金属带隙的影响, 比较铁磁态和反铁磁态的能量高低, 以判定体系的基态, 计算时以 ZnS 原胞为基础, 构建  $2 \times 2 \times 1$  超原胞, 每个超晶胞中包含 4 个 Zn 原子和 4 个 S 原子, 其晶格常数  $a = b = 0.764991$  nm,  $c = 0.382495$  nm,  $\alpha = \beta = \gamma = 60^\circ$ . 分别对超原胞不同位置的 Zn 原子用 Cr 原子进行替换, 替换后所得三元化合物空间结构如图 1 所示.

按 a 位置 (如图 1(a) 所示) 替换后构建的三元化合物  $ZnCrS_2$  的空间群为  $R3M(160)$ , 对称性为  $C2V-5$ , 优化前其晶格常数为  $a = b = 0.764991$  nm,  $c =$

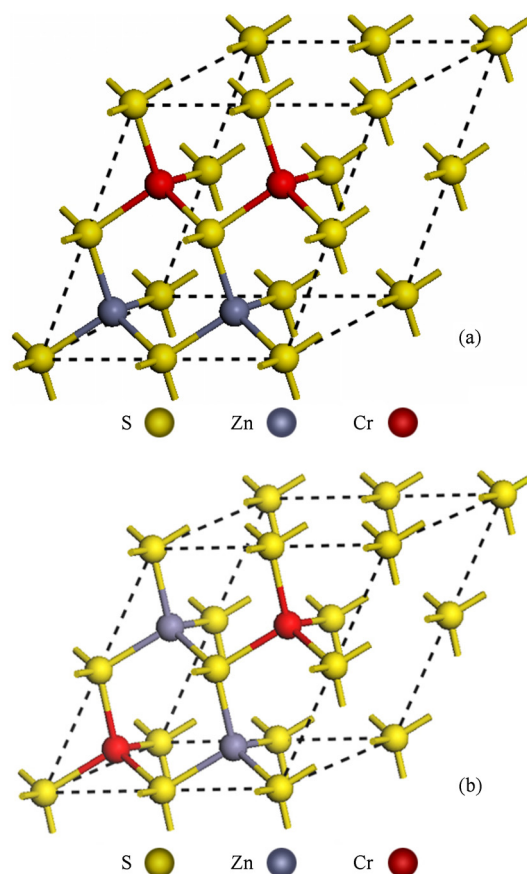


图1 三元化合物  $ZnCrS_2$  不同替换位置晶胞结构模型

0.382495 nm,  $\alpha = \beta = \gamma = 60^\circ$ , 优化后其晶格常数为  $a = 0.783969$  nm,  $b = 0.766787$  nm,  $c = 0.382875$  nm,  $\alpha = 59.8815^\circ$ ,  $\beta = 60.7470^\circ$ ,  $\gamma = 60.8435^\circ$ . 按 b 位置 (如图 1(b) 所示) 替换后构建的三元化合物  $ZnCrS_2$  的空间群为  $P-4M2(115)$ , 对称性为  $D2D-5$ , 优化后其晶格常数为  $a = b = 0.784726$  nm,  $c = 0.378911$  nm,  $\alpha = \beta = 61.0065^\circ$ ,  $\gamma = 57.7036^\circ$ .

## 3. 结果与讨论

### 3.1. ZnS 的能带结构和态密度

为便于分析三元化合物  $ZnCrS_2$  中 Cr 对 ZnS 体相电子结构等的影响, 首先计算出了 ZnS 原胞的能带结构, 结果如图 2 所示, 相应的总态密度和分波态密度如图 3 所示.

从图 2 中可看出, 纯 ZnS 晶体价带顶的导带底都位于布里渊区的  $G$  点, 是直接能隙半导体. 计算得出带隙值为 2.23 eV, 同实验值 3.68 eV 相比偏

小. 用密度泛函理论求解带隙时会比实验值偏小<sup>[24]</sup>, 这主要是由于理论本身过高地估计了 Zn 3d 电子与 S 3p 电子间的相互作用, 导致价带宽度变大, 带隙减小. 从图 3 中可看出, ZnS 的价带可分为两部分, 0—-5.20 eV 的上价带和 -5.5—-6.4 eV 的下价带. 从图 3 可得出上价带主要由 S 3p 态贡献; 下价带主要由高度局域的 Zn 3d 态贡献, 还有极少量的 S 3p 态. 对于导带部分, 主要来源于 Zn 4s 态和少量 Zn 3p 的 S 3p 态贡献.

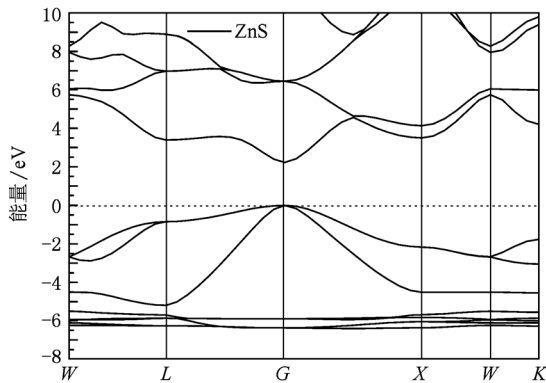


图 2 ZnS 能带结构

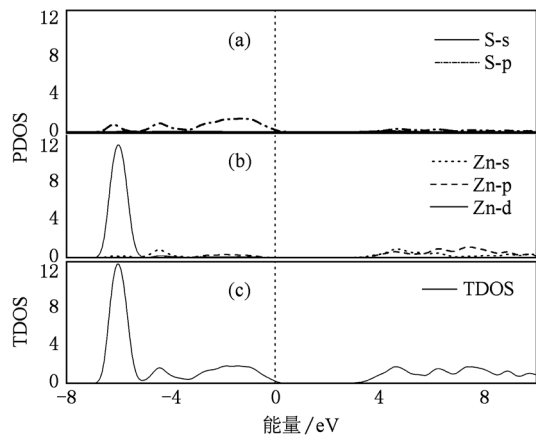


图 3 ZnS 态密度 (a) S 原子分态密度; (b) Zn 原子分态密度; (c) ZnS 总态密度

### 3.2. 三元化合物 ZnCrS<sub>2</sub> 的能带结构和态密度

表 1 是 a, b 两种不同替换位置的计算结果, 两种位置替换 ZnCrS<sub>2</sub> 的能带结构如图 4 和图 5 所示, 电子态密度及分态密度的计算结果分别如图 6 与图 7 所示.

我们分别对 Zn<sub>4</sub>S<sub>4</sub> 进行了如图 1(a), (b) 两种不同位置的替换, 两种不同位置替换后 ZnCrS<sub>2</sub> 的对称性分别为 C<sub>2v</sub>-5 与 D<sub>2d</sub>-5, 对两种不同位置替换的 ZnCrS<sub>2</sub> 优化后的晶格常数与优化前比较均有不同程度地增大, 这主要是由于引入的 Cr 原子半径大于 Zn 原子所致. 表 1 为不同替换位置计算结果, 从表 1 中可知, a 位置替换的铁磁态能量比反铁磁能量低 0.155 eV; b 位置替换的铁磁态能量比反铁磁能量低 0.131 eV. 显然, 铁磁态是更稳定的基态. 由表 1 还可得到 a 位置的铁磁态能量较 b 位置替换的能量低 0.129 eV. 故 a 位置较 b 位置更稳定.

如图 4, 图 5 所示, a, b 两种位置替换自旋向上电子能带图几乎相同, 自旋向下电子在费米面附近由于自旋极化作用, 能带图有一定变化, 其中导带尤为突出, 从能带图中可得出 b 位置替换 Cr d 态能带带宽较 a 位置替换大, 说明 b 位置替换后, 与 Cr 相邻的轨道间的重叠更大, 成键程度更大. 正是由于 Cr d 态能带展宽, 且向低能端移动, 半金属带隙较 a 更小.

如图 6、图 7, 两种位置替换 S 原子在费米面附近几乎无变化, b 位置替换由于自旋极化 Cr d 态 Zn s 态向低能端移动. 正因为 Cr d 态向低能端移动, 导致 b 位置替换半金属带隙更小 (0.7556 eV), 这同能带图分析出的结果一致.

根据能带图 (如图 4、图 5) 与态密度图 (如图 6、图 7) 可得到, a 位置替换的半金属带隙更大. 并且 a 位置替换是更稳定的基态. 因此, 我们将重点分析讨论 a 位置替换的计算结果.

表 1 三元化合物 ZnCrS<sub>2</sub> 两不同替换位置计算结果

位置	$g_h/eV$	$M_{tot}/\mu_B$	$M_{Cr}/\mu_B$	$M_{Zn}/\mu_B$	$M_S/\mu_B$	$E_{afm}/eV$	$E_{fm}/eV$
a	0.9631	8.0	4.32	0	-0.04/-0.28	-9472.089727921	-9472.2450298
b	0.7556	8.0	4.28	0.04	-0.16	-9471.985546122	-9472.1159768

注: 半金属带隙  $g_h$ , 总磁矩  $M_{tot}$ , 单个 Cr, Zn, S 原子磁矩  $M_{Cr}, M_{Zn}, M_S$  以及反铁磁态总能量  $E_{afm}$  和铁磁态总能量  $E_{fm}$ .

图 4 所示, 三元化合物 ZnCrS<sub>2</sub> 在费米面附近出现自旋向上的电子态密度和自旋向下电子态密度

分布劈裂, 这表明体系中的电子通过交换相互作用出现了自旋有序排列. 自旋向上的电子跨过了费米

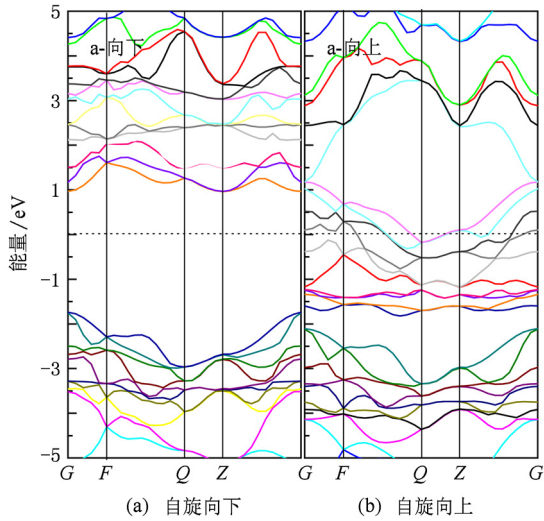


图4 ZnCrS<sub>2</sub>的能带结构(a位置替换)

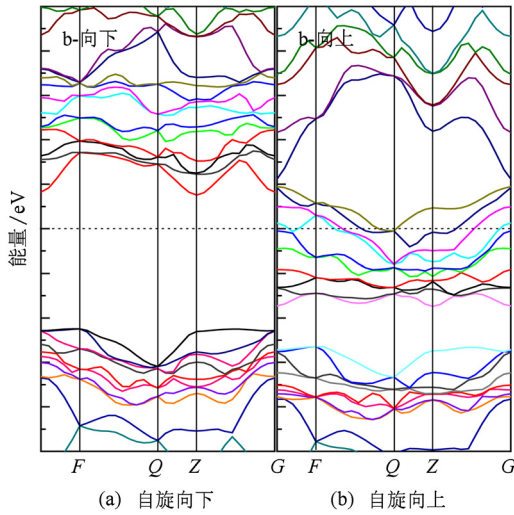


图5 ZnCrS<sub>2</sub>的能带结构(b位置替换)

面,如图4(b)所示,表现出金属性;而自旋向下时,在费米面处出现一能隙(如图4(a)所示),体系还表现出半导体特性. ZnCrS<sub>2</sub> 半金属带隙  $E_h = 0.9631$  eV,这个值高于  $Zn_xY_{1-x}Te$  ( $x = 0.25, 0.75$ ;  $Y = V, Cr, Mn$ )<sup>[25]</sup> 的半金属带隙值,ZnCrS<sub>2</sub> 有望成为具有更高的居里温度<sup>[25]</sup> 的半金属材料.

图6给出了 a 位置替换的 ZnCrS<sub>2</sub> 的态密度和分态密度. 从图6中可以得到:自旋向下部分导带主要分布在 0.7 eV 能量范围以上,由于磁性主要表现在费米面附近,因此我们主要讨论费米面附近电子分布. 在 0.7—4 eV 能量范围,主要来源于 Cr 3d 态和少量 Zn 4s 态、3p 态及极少量 S 的 3p 态、Cr 3p

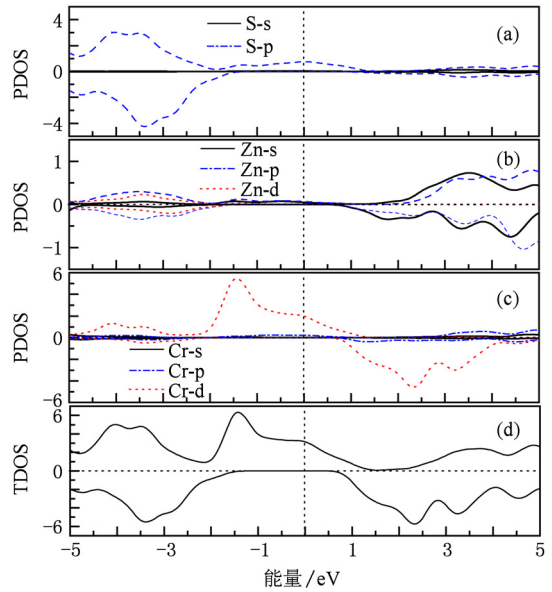


图6 三元化合物 ZnCrS<sub>2</sub> 电子态密度(a位置替换) (a) S 原子分态密度;(b) Zn 原子分态密度;(c) Cr 原子分态密度;(d) ZnCrS<sub>2</sub> 总态密度

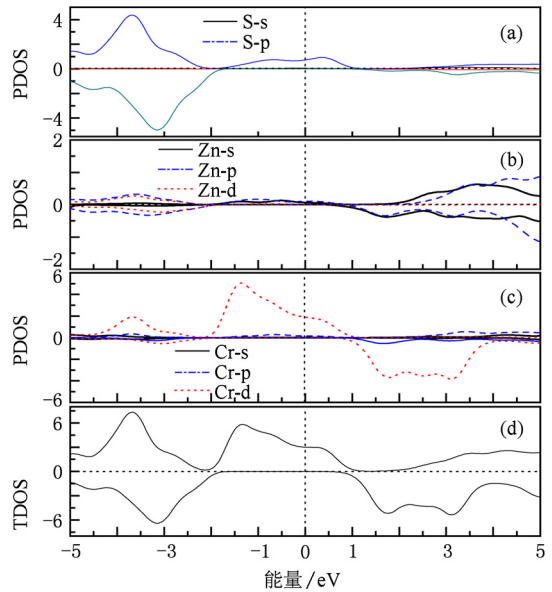


图7 三元化合物 ZnCrS<sub>2</sub> 电子态密度(b位置替换) (a) S 原子分态密度;(b) Zn 原子分态密度;(c) Cr 原子分态密度;(d) ZnCrS<sub>2</sub> 总态密度

态和电子的贡献;在 4—5.0 eV 能量范围,主要来源于 Zn 3p 态的贡献,少量来自 Cr 3p 态、Zn s 态和 S 3p 态的贡献,Cr 3d 和 s 态亦有少量贡献. 与纯 ZnS 相比,替换后三元化合物的态密度出现了显著的变化,出现了自旋分布劈裂,在费米面只有一种自

旋行为. 在  $-5$ — $-1.3$  eV 能量范围是上价带, 其主要是 S 3p 电子贡献和少量 Cr 的 3d 态贡献. 在  $-3.4$  eV 处电子态密度来自于 S 3p 态和 Cr 3d 态, 二者形状极其相似, 由此可以判断, S 原子与 Cr 原子存在杂化作用.

同样从图 6 中可以得到: 自旋向上跨过费米面的电子主要由 Cr 3d 电子贡献, 有少量 S 3p 电子及极少量的 Cr 3p 电子贡献.  $-5.0$ — $-4.8$  eV 能量范围, 主要由 S 3p 和 Zn 4s 电子贡献,  $-4.8$ — $-2.0$  eV 能量范围, 主要由 S 3p 和极少量的 Cr 3d 电子贡献, Zn 4s 3p 态电子有少量的贡献,  $-2.0$ — $1.5$  eV 能量范围, 主要由 Cr 3d 和 S 3p 电子贡献, 在  $2.0$ — $5.0$  eV 能量范围, 主要由 Cr 3p 电子、S 3p, Zn 4s 3p 态电子贡献, 也有少量的 Cr 4s 态电子贡献. 在  $-4.0$  eV,  $-3.4$  eV 和费米面处 S 3p 态和 Cr 3d 态存在极其相似的峰值, 由此可知它们之间存在杂化作用.

为确定  $\text{ZnCrS}_2$  的基态, 我们分别计算了八原子体系晶胞的铁磁态和反铁磁态构型的总能量.  $\text{ZnCrS}_2$  体系铁磁态的总能量为  $-9472.231$  eV, 反铁磁态的总能量为  $-9472.064$  eV. 铁磁态的总能量比反铁磁态的总能量更低, 计算结果表明三元化合物  $\text{ZnCrS}_2$  的铁磁态是更稳定的基态.

### 3.3. 三元化合物 $\text{ZnCrS}_2$ 的磁性

从表 1 中可得到:  $\text{ZnCrS}_2$  具有磁性, 模型中单个 Cr 原子的磁矩是  $4.32 \mu_B$ , 单个 S 原子的磁矩是  $-0.16 \mu_B$ , 单个 Zn 原子的磁矩为 0. 替换前 ZnS 中

Zn 原子和 S 原子都不表现出磁性. 由此可知三元化合物  $\text{ZnCrS}_2$  的磁性是由于引入 Cr 原子后产生自旋极化状态, Cr 3d 在费米面附近发生交换劈裂来实现的.

综合前面的讨论,  $\text{ZnCrS}_2$  电子结构中呈现出自旋向上和自旋向下电子态密度分布, 表现出半金属性; 计算中得到系统总磁矩为玻尔磁矩的 8 倍.  $\text{ZnCrS}_2$  满足半金属的两个基本特征, 因此三元化合物  $\text{ZnCrS}_2$  整体上呈半金属性质. 且有望成为具有更高的居里温度的半金属材料. 这类材料的磁性原子的密度较大, 磁性强, 这就使得最终器件的尺度有望较稀磁更小.

## 4. 结 论

本文采用基于密度泛函理论 (DFT) 的平面波超软赝势 (PWPP) 方法, 结合广义梯度近似 (GGA), 计算了三元化合物  $\text{ZnCrS}_2$  的能带结构、电子态密度, 研究了电子结构和半金属性. 通过计算发现, a 位置替换的半金属能隙 ( $0.9631$  eV) 较 b 位置替换 ( $0.7556$  eV) 高, 可望得到更高的居里温度; a 位置替换铁磁总能量 ( $-9472.245$  eV) 较 b 位置替换 ( $-9472.116$  eV) 低, a 位置替换铁磁态属更稳定的基态. 三元化合物  $\text{ZnCrS}_2$  能产生自旋极化状态, 具有近 100% 的自旋极化率. 能带结构和态密度及总磁矩为  $8.0 \mu_B$  都显示出半金属特征. 其磁性主要是 Cr 原子的 3d 电子在费米面附近发生交换劈裂. 本文结果可望为实验研究提供指导和理论解释.

- [1] Gershenfeld N A, Chuang I L 1997 *Science* **275** 350
- [2] Wolf S A, Awschalom D D, Buhrman R A, Daughton J M, von Molnár S, Roukes M L, Chtchelkanova A Y, Treger D M 2001 *Science* **294** 1488
- [3] Xing H Y, Fan G H, Zhang Y, Zhao D G 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 3324 (in Chinese) [邢海英、范广涵、章勇、赵德刚 2009 物理学报 **58** 3324]
- [4] Lin Z, Guo Z Y, Bi Y J, Dong Y C 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1917 (in Chinese) [林竹、郭志友、毕艳军、董玉成 2009 物理学报 **58** 1917]
- [5] Dietl T, Ohno H, Matsukura F, Cibert J, Ferrand D 2000 *Science* **287** 1019
- [6] Liu Y H, Zhang L S 1994 *Prog. in Phys.* **1** 82 (in Chinese) [刘宜华、张连生 1994 物理学进展 **1** 82]
- [7] Oiwa A, Slupinski T, Munekata H 2001 *Appl. Phys. Lett.* **78** 518
- [8] de Groot R A, Mueller F M 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 2024
- [9] Kobayashi K I, Kimura T, Sawada H, Terakura K, Tokura Y 1998 *Nature* **395** 677
- [10] Xing Y 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** (in Chinese) [邢月 2010 物理学报 **59** in press]
- [11] Lewis S P, Allen P B, Sasaki T. 1997 *Phys. Rev. B* **55** 10253
- [12] Jedema F J, Filip A T, van Wees B J 2001 *Nature* **410** 345
- [13] Liu B G 2003 *Phys. Rev. B* **67** 172411
- [14] Xu Y Q, Liu B G, Pettifor D G 2002 *Phys. Rev. B* **66** 184435
- [15] Kinaga H A, Manago T, Shirai M 2000 *Jpn. J. Appl. Phys.* Part 2 **39** L1118
- [16] Mizuguchi M, Akinaga H, Manago T, Ono K, Oshima M, Shirai M, Yuri M, Lin H J, Hsieh H H, Chen C T 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 7917
- [17] Yao K L, Gao G Y, Liu Z L, Zhu L 2005 *Solid State Commun.*

133 301

- [18] Li G N, Jin Y J, Lee J I 2010 *Chin. Phys. B* **19** 097102
- [19] Jungwirth T, Sinova J, Masek J, Kucera J, MacDonald A H 2006 *Rev. Mod. Phys.* **78** 809
- [20] Shi L J, Liu B G 2007 *Phys. Rev. B* **76** 115201
- [21] Wang F, Wang X Q, Nie Z X, Cheng Z M, Liu G B 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** (in Chinese) [王 风、王新强、聂招秀、程志梅、刘高斌 2011 物理学报 **60**] (已接受)
- [22] Fukumura T, Jin Z, Kawasaki M, Shono T, Hasegawa T, Koshihara S, Koinuma H 2001 *Appl. Phys. Lett.* **78** 958
- [23] Liu Y, Liu B G 2006 *J. Magn. Magn. Mater.* **307** 245
- [24] Milman V, Warren M C 2001 *Journal of Physics: Condensed Matter J. Phys.-Condens. Mat.* **13** 241
- [25] Liu B G 2005 *Lect. Notes Phys.* **676** 267

## First-principles study on electronic structure and half-metallic ferromagnetism of ternary compound $\text{ZnCrS}_2^*$

Cheng Zhi-Mei<sup>1)2)</sup> Wang Xin-Qiang<sup>1)†</sup> Wang Feng<sup>3)</sup> Lu Li-Ya<sup>1)</sup> Liu Gao-Bin<sup>1)</sup>  
Duan Zhuang-Fen<sup>1)</sup> Nie Zhao-Xiu<sup>1)</sup>

1) (College of Physics, Chongqing University, Chongqing 400044, China)

2) (College of Education Sciences, Chongqing Normal University, Chongqing 400047, China)

3) (College of Elementary Education, Chongqing Normal University, Chongqing 400700, China)

(Received 27 October 2010; revised manuscript received 21 November 2010)

### Abstract

The model of the ternary compound  $\text{ZnCrS}_2$  is constructed by replacing the Zn atoms in the zinc-blend phase ZnS with Cr at two different positions a and b in a ratio of 1:1. Then the electronic and the magnetic properties of  $\text{ZnCrS}_2$  are investigated by using the plane wave pseudopotential (PWPP) method with the density functional theory (DFT). The results show that both kinds of  $\text{ZnCrS}_2$  are more stable in the ferromagnetic state than in the anti-ferromagnetic state, and are half-metallic ferromagnets with half-metallic band gaps of 0.964 eV and 0.755 eV, respectively. The comparison of two different models reveals that  $\text{ZnCrS}_2$  in a-position replacement is more stable and also has a larger half-metallic band gap. Furthermore, the spin-polarized electronic density of states, the band structure and the magnetic moment of  $\text{ZnCrS}_2$  are analyzed in detail. The present results should be useful for the future experimental study.

**Keywords:**  $\text{ZnCrS}_2$ , electronic structure, half-metallic ferromagnetism, first-principles

**PACS:** 63.20.dk, 75.50.Cc, 76.50.+g, 71.20.Lp

\* Project supported by the Natural Science Foundation of Chongqing (Grant No. CSTC-2007BB4137).

† Corresponding author. E-mail: xqwang@cqu.edu.cn