

ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ЭЛЕКТРОННЫХ ЗОН И СПИНОВЫЕ СВОЙСТВА КОБАЛЬТСОДЕРЖАЩИХ СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА

В. Л. Шапошников, А. В. Кривошеева

Белорусский государственный университет информатики
и радиоэлектроники, г. Минск

Последние десятилетия интерметаллические соединения являются объектами пристального изучения благодаря своим свойствам, которые успешно используются в электронике. В частности, полуметалличность в ферромагнитных материалах используется для спинтроники, например, в спиновых инжекторах, магнитных туннельных переходах и в памяти с произвольным доступом [1, 2]. Полуметаллические ферромагнетики обладают 100% спиновой поляризацией из-за наличия энергетического зазора для одной из проекций спина на уровне Ферми и ее отсутствия в противоположном спиновом состоянии. В качестве полуметаллических ферромагнетиков отлично подходят сплавы Гейслера на основе кобальта благодаря высоким значениям магнитного момента и температуры Кюри [3]. Одним из наиболее перспективных является Co_2CrAl . Для него была показана возможность увеличения значений спиновой поляризации и температуры Кюри при частичной замене атомов хрома атомами железа [4].

Сплавы Гейслера представляют собой интерметаллические соединения, потенциально обладающие гибкими возможностями выбора компонентов и их расположения в узлах кристаллической решетки, что может обеспечить получение новых материалов с заданными свойствами. Для оценки этих

возможностей мы провели моделирование электронных и магнитных свойств трехкомпонентных Co_2XY и четырехкомпонентных $\text{Co}_2\text{XY}_{1-t}\text{Z}_t$ сплавов Гейслера, где Y и Z – атомы переходных металлов (Cr, Mn, Fe), а X – атомы III (Al, Ga) и IV групп (Si, Ge, Sn) периодической системы элементов Менделеева.

Моделирование зонных структур и магнитных свойств выполняли в рамках теории функционала плотности (программный код VASP [5]). Первоначально проводилась атомно-структурная оптимизация кристаллических решеток трехкомпонентных сплавов Гейслера Co_2XY , после чего осуществляли формирование сверхрешеток с частичным замещением одних атомов переходных металлов другими. При этом изменяли соотношения и позиции атомов переходных металлов.

В результате проведенных расчетов установлены энергетически стабильные конфигурации ряда соединений вида Co_2XY и $\text{Co}_2\text{XY}_{1-t}\text{Z}_t$, для которых определены параметры решетки, атомные позиции, а также полные магнитные моменты. Анализ полученных численных данных показывает, что постоянные решетки в трехкомпонентных соединениях Co_2XY изменяются от 0,5621 нм для Co_2FeSi до 0,5988 нм для Co_2FeSn . В рамках одной группы (в рядах Al–Ga или Si–Ge–Sn) с ростом номера элемента наблюдается увеличение значений постоянной решетки. Аналогичная тенденция наблюдается для четырехкомпонентных сплавов Гейслера $\text{Co}_2\text{XY}_{1-t}\text{Z}_t$.

Анализ полного магнитного момента сплавов Co_2XY показал его возрастание при переходе от элементов III группы (Al, Ga) к элементам IV (Si, Ge, Sn) в позиции Y. При этом в рамках одной группы в позиции Y магнитный момент при одном элементе X практически не меняется. Также наблюдается рост значений магнитного момента в ряду переходных металлов Cr–Mn–Fe в позиции X. Это может быть

связано с количеством валентных электронов в этих соединениях. Аналогичные зависимости наблюдались для четырехкомпонентных сплавов $\text{Co}_2\text{XY}_{1-Z}\text{Z}_1$.

На рис. 1 и 2 представлены энергетические диаграммы и полные плотности электронных состояний (ПЭС) трехкомпонентных сплавов Гейслера Co_2XY с разным стехиометрическим составом.

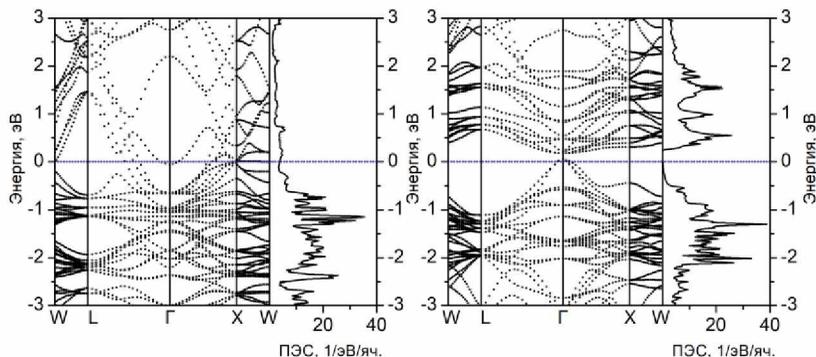


Рис. 1. Зонная структура и полные ПЭС $\text{Co}_2\text{Mn}_{0,75}\text{Ge}_{1,25}$ в спин-вверх (слева) и спин-вниз каналах (справа)

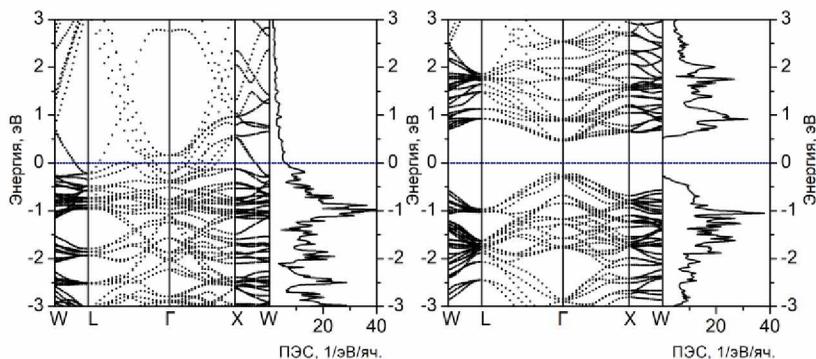


Рис. 2. Зонная структура и полные ПЭС $\text{Co}_2\text{Mn}_{1,25}\text{Ge}_{0,75}$ в спин-вверх (слева) и спин-вниз каналах (справа)

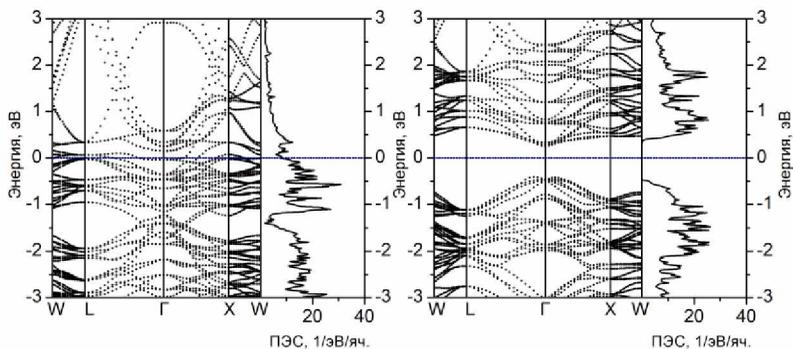


Рис. 3. Зонная структура и полные ПЭС $\text{Co}_2\text{CrMn}_{0,25}\text{Ge}_{0,75}$ в спин-вверх (слева) и спин-вниз каналах (справа)

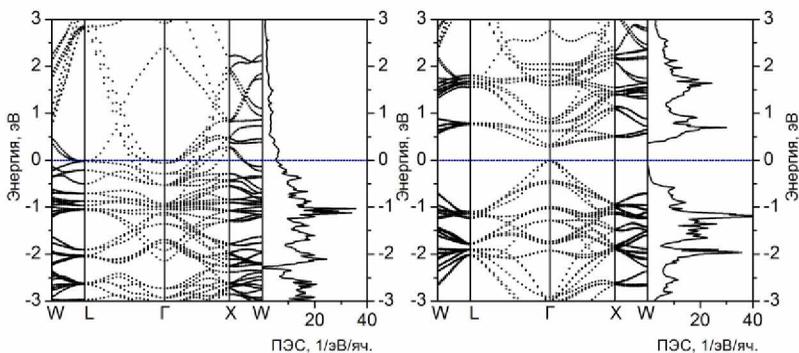


Рис. 4. Зонная структура и полные ПЭС $\text{Co}_2\text{Mn}_{0,75}\text{Cr}_{0,25}\text{Ge}$ в спин-вверх (слева) и спин-вниз каналах (справа)

Для сравнения на рис. 3–6 представлены данные, полученные для сплавов Гейслера $\text{Co}_2\text{XY}_{1-t}\text{Z}_t$.

Качественно зонные диаграммы для трех- и четырехкомпонентных сплавов Гейслера подобны, включая их изменения в ряду атомов из одной группы. Это можно объяснить тем, что соединения имеют одинаковую структуру и отличаются лишь входящими элементами, некоторые из которых имеют схожую электронную конфигурацию.

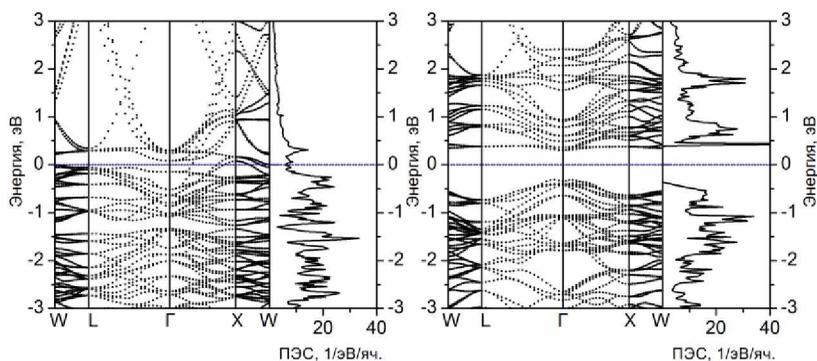


Рис. 5. Зонная структура и полные ПЭС $\text{Co}_2\text{CrFe}_{0,25}\text{Sn}_{0,75}$ в спин-вверх (слева) и спин-вниз каналах (справа)

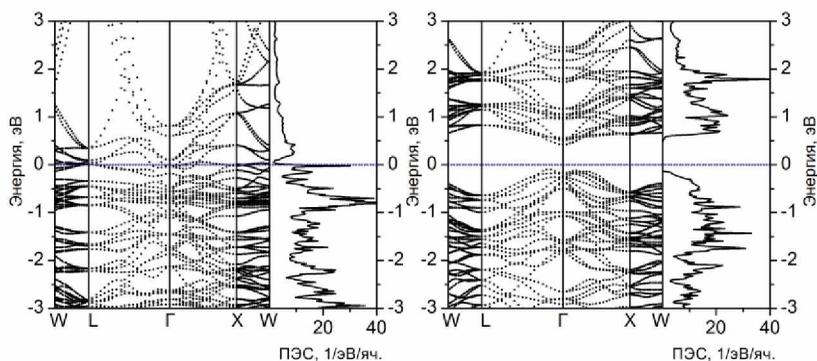


Рис. 6. Зонная структура и полные ПЭС $\text{Co}_2\text{MnCr}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}$ в спин-вверх (слева) и спин-вниз каналах (справа)

Установлено, что в то время как одни соединения являются полуметаллами, т. е. проявляют полупроводниковые свойства в одном спиновом канале и металлические в другом (Co_2CrFeSn , Co_2CrMnGe и Co_2MnCrSi), другие (Co_2CrFeAl) являются металлическими в обоих спиновых каналах. При этом не было обнаружено соединений, демонстрирующих полупроводниковое поведение в обоих спиновых каналах. У ряда исследованных сплавов (таких как Co_2CrMnAl ,

Co_2MnCrGe , Co_2MnCrSi , Co_2CrMnSn , Co_2MnCrGa), в которых атомы железа не находятся в позиции Y, значения спиновой поляризации достигают 100%.

Полученные данные могут быть использованы при выборе состава сплавов Гейслера для создания новых спинтронных элементов обработки информации.

Работа выполнена в рамках проекта № Т23МЭ-016 Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (БРФФИ).

Литература

1. Heusler Alloys. Properties, Growth, Applications / C. Felser, A. Hirohata (Ed.): Springer Series in Materials Science. – 2016. – V. 222.

2. Kundu A. New quaternary half-metallic ferromagnets with large Curie temperatures / A. Kundu [et al.] // Sci. Rep. – 2017. – Vol. 7, No 1803. – P. 1–15.

3. Srivastava Y. Structure and magnetic properties of $\text{Co}_2(\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{Al}$, ($0 \leq x \leq 1$) Heusler alloys prepared by mechanical alloying / Y. Srivastava [et al.] // J. Magnetism and Magnetic Materials. – 2017. – V. 433. – P. 141–147.

4. Gonçalves J. N. Volume dependence of magnetic properties in $\text{Co}_2\text{Cr}_{1-x}\text{Y}_x\text{Ga}$ (Y=Ti-Ni) Heusler alloys: A first-principles study / J. N. Gonçalves [et al.] // J. Magnetism and Magnetic Materials. – 2017. – V. 428. – P. 362–367.

5. Kresse G. Efficient interactive schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller / Phys. Rev. B. – 1996. – Vol. 54, No 16. – P. 11169–11186.