

## Електронна структура напівметалевого кристала CoFeMnSi, отримана з урахуванням сильних кореляцій 3d електронів

С.В. Сиротюк, В.М. Швед, І.Є. Лопатинський, Н.О. Щербань

Національний університет "Львівська політехніка", вул. С. Бандери, 12, 79013 Львів, Україна

(Одержано 11.01.2016, у відредагованій формі – 13.06.2016, опубліковано online 21.06.2016)

Розраховані електронні енергетичні спектри та густини електронних станів напівметалевого кристала CoFeMnSi без урахування сильних електронних кореляцій та з включенням останніх в розрахункову схему. Виявлено великий вплив сильних кореляцій 3d електронів на значення ширини забороненої зони кристала. Зроблені припущення щодо величини параметра змішування в обмінно-кореляційному функціоналі для металів та напівметалів. Зроблено висновок про важливість врахування сильних кореляцій у кристалах з перехідними елементами.

**Ключові слова:** Енергетичний спектр електронів, Густина електронних станів, Спінова поляризація, Сильна кореляція електронів, Магнітний момент.

DOI: [10.21272/jnep.8\(2\).02016](https://doi.org/10.21272/jnep.8(2).02016)

PACS numbers: 71.15.Ap, 71.20.Be, 71.27. + a

### 1. ВСТУП

Кристал CoFeMnSi належить до великого класу сплавів Гейслера. Ці матеріали привертають значну увагу дослідників з огляду на їх застосування чи можливе застосування у спіновій електроніці [1]. Спінова електроніка або спітроніка ґрунтується на управлінні спіновим ступенем вільності, тоді як традиційна електроніка управляє зарядами електронів і дірок у напівпровіднику. У праці [2] зроблений всеохопний огляд аспектів актуального і можливого практичного застосування сплавів Гейслера, з-поміж яких напівметалевий феромагнетизм, спінова калоритроніка, магнетокалоричний ефект, ефект пам'яті форми, важкі ферміони, системи Кондо, надпровідність, термоелектрика, квантовий спіновий ефект Холла і топологічні діелектрики, магнітні напівпровідники, спіновий ефект Зеебека, інжекція спіново поляризованих електронів, передавання спінового обертового моменту, перпендикулярна магнітна анізотропія, скомпенсовані феримагнетики, гігантський магнетоопір та тунельний магнетоопір.

Труднощі кількісної теорії електронного енергетичного спектру сплаву CoFeMnSi зумовлені тим, що у примітивній комірці є три перехідні d-елементи Mn, Fe, та Co. Їхні 3d електрони мають двоїсту природу. З одного боку вони не є глибокими внутрішніми електронами, а з іншого – не є й делокалізованими, як наприклад валентні електрони 4s<sup>2</sup>. Стани 3d зосереджені у вузьких за енергією смугах і є сильно гібридизованими зі станами s та p симетрії. Отже, в таких системах має місце сильна міжелектронна кореляція. Це означає, що звичайні підходи функціонала локальної електронної густини (LDA) [3, 4] та його вдосконалений варіант узагальненого градієнтного наближення (GGA) [5] не є адекватними для сильно скорельованих систем. Однак більшість праць, присвячених сплавам Гейслера з вмістом перехідних 3d елементів, виконана на основі методів LDA та GGA [6-9].

Урахування сильних кореляцій в системах з

електронами d симетрії приводить до помітно кращого зіставлення ширини забороненої зони  $E_g$  з експериментом. Одним із способів є використання параметра екранованої кулонової взаємодії  $U$  для d електронів, аналогічної до такої в моделі Хаббарда [10]. Цей підхід має назву LDA + U і якісно відповідає наближенню ефективного поля (mean field approximation). Він впроваджений у програму ABINIT, за допомогою якої ми виконали наші розрахунки. Однак метод LDA + U має деякі недоліки: 1) параметр  $U$  залежний від системи; 2) значення  $U$ , знайдені для вільних атомів Fe, Co та Mn, непридатні для застосування в кристалах як суттєво завищені; 3) для Fe, Co та Mn необхідно використовувати індивідуальні значення параметра  $U$ ; 4) для кожного перехідного елемента потрібно вводити в розрахункову схему матриці початкових заселеностей, до значень елементів яких чутливі результати розрахунків, тобто маємо проблему отримання єдиного розв'язку задачі про електронний енергетичний спектр кристала; 5) для кожного перехідного елемента необхідні значення інтегралів Слетера  $F_0$ ,  $F_2$  та  $F_4$ , які також є параметрами теорії.

Саме тому ми обрали відмінний від LDA + U метод гібридного функціонала обмінно-кореляційної енергії. Переходимо до опису розрахункової схеми на його основі.

### 2. БАЗИС ПРОЕКЦІЙНИХ ПРИЄДНАНИХ ХВИЛЬ

Метод проекційних приєднаних хвиль (PAW, projector augmented waves) [11] поєднує риси псевдопотенціала і все електронного методу приєднаних плоских хвиль. Хвильова  $|\Psi_n\rangle$  та псевдохвильова  $|\tilde{\Psi}_n\rangle$  функції зв'язані між собою так:

$$|\psi_n(\mathbf{r})\rangle = |\tilde{\psi}_n(\mathbf{r})\rangle + \sum_i^{\alpha} \left( |\phi_i^{\alpha}(\mathbf{r})\rangle - |\tilde{\phi}_i^{\alpha}(\mathbf{r})\rangle \right) \times \langle \tilde{P}_i^{\alpha} | \tilde{\psi}_n \rangle \quad (1)$$

де  $|\phi_i^a(\mathbf{r})\rangle$  – атомна хвильова функція,  $|\tilde{\phi}_i^a(\mathbf{r})\rangle$  – псевдохвильова функція, а  $\langle \tilde{p}_i^a |$  – функція проєктор. Підсумування в (1) провадиться за сферами приєднання, які нумеруються індексом  $a$ , а індекс  $i = \{n, l, m\}$  відповідає квантовим числам – головному, орбітальному й магнітному, відповідно. З рівняння (1) бачимо, що

$$|\psi_n(\mathbf{r})\rangle = \tau |\tilde{\psi}_n(\mathbf{r})\rangle, \quad (2)$$

де оператор  $\tau$  перетворює псевдохвильову  $|\tilde{\psi}_n(\mathbf{r})\rangle$  у все електронну хвильову функцію  $|\psi_n(\mathbf{r})\rangle$ .

Явна форма оператора  $\tau$  впливає з рівняння (1):

$$\tau = 1 + \sum_i \sum_i \left( |\phi_i^a\rangle - |\tilde{\phi}_i^a\rangle \right) \langle \tilde{p}_i^a|. \quad (3)$$

Рівняння Кона-Шема

$$H|\Psi_n\rangle = |\Psi_n\rangle \varepsilon_n \quad (4)$$

з урахуванням (2) набуває наступного вигляду:

$$\tau^+ H \tau |\tilde{\Psi}_n\rangle = \tau^+ \tau |\tilde{\Psi}_n\rangle \varepsilon_n, \quad (5)$$

у якому шуканий спектр електронів  $\varepsilon_n$  такий, як і в рівнянні (4).

Електронна густина у методі PAW визначається трьома доданками [4]:

$$\rho(r) = \tilde{\rho}(r) + \sum_a (\rho^a(r) - \tilde{\rho}^a(r)), \quad (6)$$

Перший доданок – плавна псевдогустина  $\tilde{\rho}(r)$ , яка зображується за допомогою перетворення Фур'є

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_{n\mathbf{k}} f_{n\mathbf{k}} |\tilde{\Psi}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{G}} \tilde{\rho}(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}, \quad (7)$$

де  $f_{n\mathbf{k}}$  – числа заповнення одноелектронних станів,  $\mathbf{k}$  – вектор з першої зони Брилюєна,  $n$  – номери заселених електронами зон,  $\Omega$  – об'єм елементарної комірки,  $\mathbf{G}$  – вектор оберненої ґратки кристала.

Для все електронної функції формула (7) мала б такий вигляд:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{n\mathbf{k}} f_{n\mathbf{k}} |\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2 = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{G}} \rho(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}. \quad (8)$$

Між формулами (7) та (8) є дуже суттєва відмінність. Вона полягає у тому, що рівняння (7) потребує для розвинення ряду Фур'є  $\sim 10^3$  векторів  $\mathbf{G}$ , тоді як для досягнення однакової з рівнянням (7) точності розрахунку їх потрібно використати у (8)  $\sim 10^6$ . Отже, оперування все електронною функцією  $|\psi_n(\mathbf{r})\rangle$  у кристалі робить задачу (4) нездійсненною щодо розв'язання навіть на суперкомп'ю-

терах.

Наступні два доданки густини електронів всередині сфери приєднання визначаються за допомогою спроектованих коефіцієнтів заселення станів:

$$W_{ij}^a = \sum_{n\mathbf{k}} f_{n\mathbf{k}} \langle \tilde{\Psi}_{n\mathbf{k}} | \tilde{p}_i^a \rangle \langle \tilde{p}_j^a | \tilde{\Psi}_{n\mathbf{k}} \rangle, \quad (9)$$

а саме:

$$\rho^a(r) = \sum_{ij} W_{ij}^a \phi_i^{a*}(r) \phi_j^a(r), \quad (10)$$

$$\tilde{\rho}^a(r) = \sum_{ij} \tilde{W}_{ij}^a \tilde{\phi}_i^{a*}(r) \tilde{\phi}_j^a(r). \quad (11)$$

Ідея методу PAW полягає в перетворенні рівняння Шредингера до такого рівняння, у якому невідомою функцією стану є  $|\tilde{\Psi}_n\rangle$ . Якщо ж вона знайдена, то за допомогою (1) отримується все електронна функція стану  $|\Psi_n\rangle$ . Через останню знаходимо густина електронів та відповідний їй потенціал Хартрі.

Обмінно-кореляційний гібридний функціонал PBE0 визначається рівнянням [12, 13]

$$E_{xc}^{PBE0}[\rho] = E_{xc}^{PBE}[\rho] + \alpha (E_x^{HF}[\Psi_{sel}] - E_x^{PBE}[\rho_{sel}]) \quad (12),$$

де  $E_{xc}^{PBE}[\rho]$  – обмінно-кореляційний функціонал нал в узагальненому градієнтному наближенні GGA [5],  $E_x^{HF}[\Psi_{sel}]$  – обмінна енергія в теорії Хартрі-Фока,  $\Psi_{sel}$  і  $\rho_{sel}$  – хвильова функція та електронна густина обраних електронів [13]. У формулі (1) коефіцієнт  $\alpha$  визначає ступінь змішування в обмінно-кореляційному функціоналі енергій, визначених у наближенні GGA ( $E_{xc}^{PBE}$ ) та Хартрі-Фока ( $E_x^{HF}$ ). Індекс  $sel = 3d$ , тобто обмінно-кореляційний функціонал (12) залежить від хвильових функцій  $\Psi_{sel}$  та густин електронів  $\rho_{sel}$  сильно скорельованих 3d електронів Co, Fe та Mn. Коефіцієнт  $\alpha$  – єдиний параметр теорії. Це особливо важлива обставина для розрахунку у кристалі з декількома перехідними 3d елементами в елементарній комірці.

### 3. ДЕТАЛІ РОЗРАХУНКІВ

Розрахунки електронних властивостей кристала CoFeMnSi були реалізовані за допомогою програми ABINIT. Для цього спочатку були згенеровані проєкційні приєднані хвилі (PAW) за допомогою програми *atomprw* [14, 15]. Отримані файли містять повний набір даних, необхідних для виконання розрахунків на основі рівнянь (1)-(12). Розрахунки PAW були виконані на основі таких наборів валентних орбіталей:  $3s^2 3p^6 3d^7 4s^2 4p^0$  для Co,  $3s^2 3p^6 3d^6 4s^2 4p^0$

для Fe,  $3s^2 3p^6 3d^5 4s^2 4p^0$  для Mn та  $2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$  для Si. Значення радіусів сфер приєднання були обрані 2.1, 2.1, 2.1 та 1.6 а.о. для Co, Fe, Mn та Si, відповідно. Інтегрування в зоні Брилюена виконувалось за допомогою сітки  $10 \times 10 \times 10$  [16]. Параметр ґратки кристала  $a = 5.655 \text{ \AA}$  – експериментальне значення [17].

Розрахунки електронних властивостей кристала  $\text{CoFeMnSi}$  виконані за допомогою програми ABINIT [18]. З метою досягнення збіжності результатів ми поступово збільшували кількість плоских хвиль у базисі. Максимальне значення модуля вектора оберненої ґратки отримувалось з максимальної кінетичної енергії  $|\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 = 84 \text{ Ry}$ . За цими плоскими хвилями провадився розклад в ряд хвильової функції в кристалі  $\Psi_n$  у рівнянні (5). Розвинення в ряди Фур'є густини електронів і потенціала кристалу провадилось значно більшому базисі, визначеному рівнянням  $|\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2 = 168 \text{ Ry}$ . Самоузгоджене розв'язання трансформованого рівняння Шредингера (5) виконувалось у 96 електронних зонах, кількість яких також була встановлена за допомогою числового експериментування з огляду на збіжність результатів розрахунку власних значень енергії, хвильових функцій, густини електронів, потенціалу кристала та його повної енергії зв'язку.

Обчислення виконані для двох значень коефіцієнта  $\alpha$  у формулі (12): 0.0 та 0.125. Якщо  $\alpha = 0$ , то сильні кореляції 3d електронів не враховуються. Відмінні від нуля значення  $\alpha$  дозволяють врахувати сильні кореляції. Автори праці [13] рекомендують  $\alpha = 0.25$ . Однак більші за 0.125 значення  $\alpha$  приводять у кристалі  $\text{CoFeMnSi}$  до порушення правила Слетера-Полінга [19, 20].

#### 4. АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

На рис. 1 наведені парціальні густини електронних станів кобальту, заліза й марганцю для двох орієнтацій спінового моменту. Зліва знаходяться густини станів, розраховані без урахування сильних кореляцій 3d електронів ( $\alpha = 0$ ), а справа – знайдені з урахуванням останніх ( $\alpha = 0.125$ ). Видно, що 3d електрони Co, Fe та Mn домінують у верхній частині валентної зони в інтервалі енергії завширшки приблизно 6 еВ. Стани Co, Fe та Mn симетрії p присутні у згаданому інтервалі енергії, однак поблизу стелі валентної зони їх практично немає. Очевидною є сильна гібридизація станів Co, Fe та Mn p та d симетрії, а також значна асиметрія парціальних густин електронних станів. Перекривання хвильових функцій валентної зони між собою та зі станами зони провідності може спричинювати чутливість ширини забороненої зони до включення в розрахункову схему сильних кореляцій 3d електронів.

Рис. 2 представляє парціальні густини електронних станів кремнію. Зауважуємо, що парціальні густини s електронів з протилежними спіновими моментами в околі дна валентної зони, локалізованого в інтервалі приблизно від  $-11$  до  $-9$  еВ, майже симетричні. Це означає, що їхній внесок у

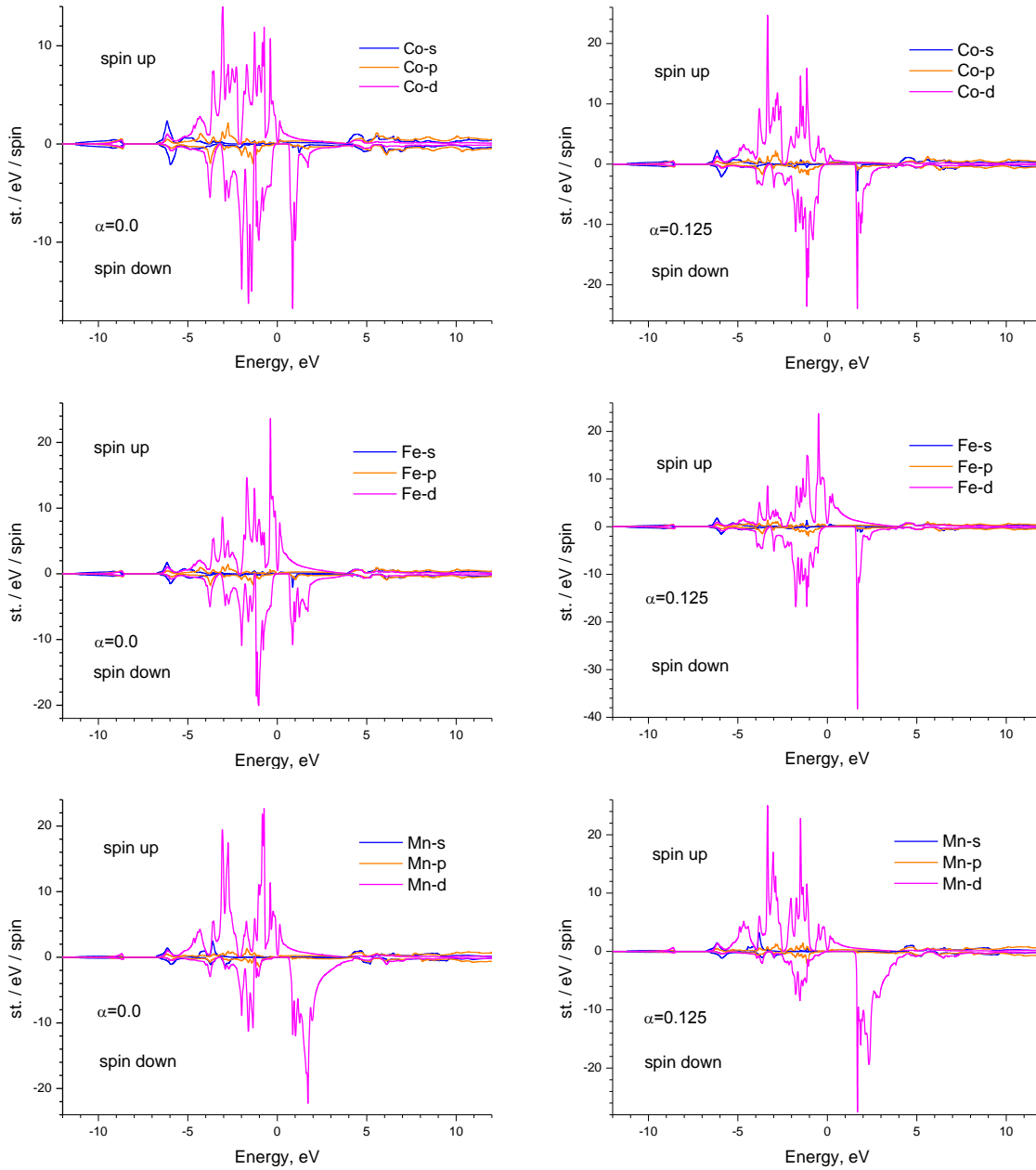
магнітний момент елементарної комірки незначний.

Те саме стосується s електронів у верхній частині валентної зони, у якій домінують p стани Si. Парціальні криві d симетрії Si приблизно симетричні у верхній частині валентної зони і тому їхній внесок у магнітний момент елементарної комірки мізерний. Для станів Si у валентній зоні характерна, як і для Mn, гібридизація станів s, p та d симетрії.

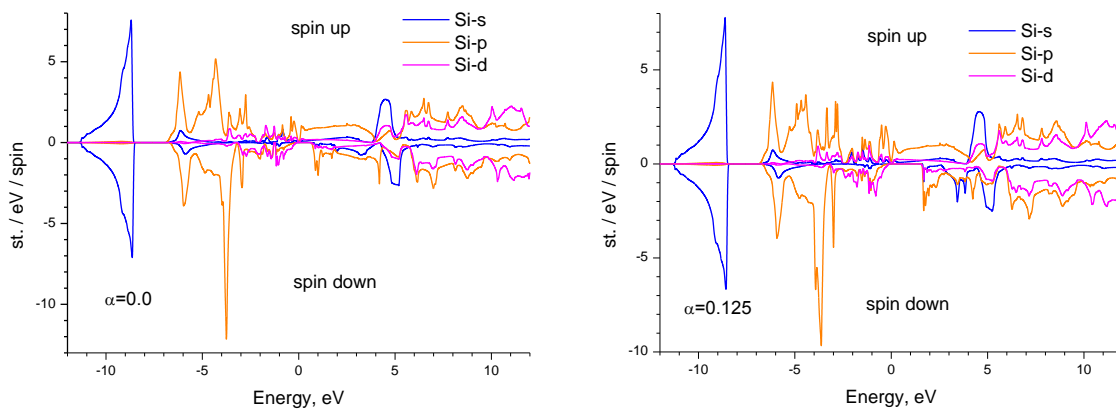
Переходимо до аналізу повної густини електронних станів кристала  $\text{CoFeMnSi}$ , зображеної на рис. 2. Бачимо, що для спіна вгору щільна в околі енергії Фермі відсутня, тобто маємо метал. Навпаки, для протилежної орієнтації спінів є щільна в енергетичному спектрі електронів, тобто маємо напівпровідник. Симетричні частини парціальних густин станів відповідають головно s електронам. Валентній зоні характерна сильна гібридизація станів s, p та d симетрії Co, Fe, Mn та Si. Значення непрямої міжзонної щільності  $\Gamma - X$  для електронів зі спіном вниз, за нехтування сильними кореляціями d електронів, дорівнює 0.61 еВ. Воно добре зіставляється з отриманим у праці [21] значенням 0.62 еВ. Магнітний момент елементарної комірки дорівнює  $4 \mu_B$ , де  $\mu_B$  – магнетон Бора. Значення магнітного моменту відповідає правилу Слетера-Полінга. Наведемо детальне пояснення застосування цього дуже важливого для напівметалів правила до кристала  $\text{CoFeMnSi}$ . Виходимо з того, що елементарна комірка містить чотири атоми. Кобальт з конфігурацією  $3d^7 4s^2$  має дев'ять валентних електронів, залізо ( $3d^6 4s^2$ ) – вісім, марганець ( $3d^5 4s^2$ ) – сім, кремній ( $3s^2 3p^2$ ) – чотири. Повне число валентних електронів  $Z_t = 28$ . Отже, для повного сплаву Гейслера, яким і є  $\text{CoFeMnSi}$ , очікуване значення магнітного моменту елементарної комірки  $M_t = Z_t - 24 = 4$  магнетони Бора. Подробиці виведення й застосування цього правила для повних і половинних сплавів Гейслера наведені в праці [22]. Правило Слетера-Полінга (Slater-Pauling) є містком між електронними і магнітними властивостями напівметалевих сполук Гейслера. За його допомогою можна прогнозувати магнітні моменти інших матеріалів. Наприклад, для  $\text{Co}_2\text{MnSi}$   $M_t = 5$ , для  $\text{Co}_2\text{FeSi}$   $M_t = 6$  магнетонів Бора, відповідно.

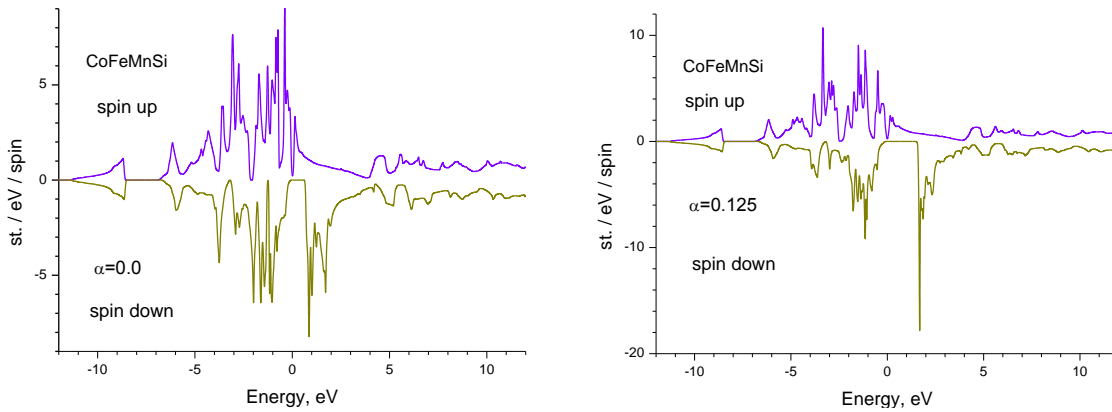
Цікавими є отримані поляризовані за спіном парціальні густини електронних станів кремнію, представлені на рис. 2. Зауважуємо значну асиметрію кривих густини станів для електронів p симетрії. Остання зумовлена сильною гібридизацією хвильових функцій кремнію зі станами Co, Fe та Mn. Наслідком такого перемішування є помітні складові d симетрії в густині станів Si, які в чистому кристалі кремнію нехтовно малі.

Повні густини електронних станів зображені на рис. 2. Видно, що для спінів вгору міжзонна щільна відсутня. Якісно "металеві" криві мають подібну структуру. Однак для спінів униз спостерігаємо значні відмінності "напівпровідникових" кривих,



**Рис. 1** – Парціальні густини електронних станів Co, Fe та Mn у кристалі CoFeMnSi для різних орієнтацій спіна, знайдені без урахування сильних кореляцій 3d електронів ( $\alpha = 0$ ), а також з урахуванням останніх ( $\alpha = 0.125$ ). Енергія Фермі обрана за початок відліку





**Рис. 2** – Парціальні густини електронних станів Si та повні густини електронних станів у кристалі CoFeMnSi для різних орієнтацій спіна, знайдені без урахування сильних кореляцій 3d електронів ( $\alpha=0$ ), а також з урахуванням останніх ( $\alpha=0.125$ ). Енергія Фермі обрана за початок відліку

отриманих без сильних кореляцій 3d електронів та з урахуванням останніх. Магнітний момент елементарної комірки за значень  $\alpha=0.0$  та  $\alpha=0.125$  однаковий і дорівнює  $4 \mu_B$ . Природа міжзонної щілини також не змінилась:  $\Gamma-X$ . Однак тепер її значення  $E_g=1.51$  eV, тобто воно приблизно в 2.5 разів перевищує наведену вище  $E_g=0.61$  eV.

Ми виконали також подібні до наведених тут розрахунки з рекомендованим значенням  $\alpha=0.25$  у формулі (12). Отримані результати виявились такими:  $E_g=1.62$  eV,  $M_t=6.52 \mu_B$ . Якщо значення ширини забороненої зони змінилось на 0.11 eV, то відбулась значна перебудова енергетичного спектру електронів зі спіном вниз, тобто непряма щілина  $\Gamma-X$  змінилась і стала прямою  $X-X$ . Отримане значення магнітного моменту суттєво перевищує  $4 \mu_B$ , тобто не виконується правило Слетера-Полінга. Отже, рекомендоване значення  $\alpha=0.25$  для напівметалів виявилось завищеним.

Задля експерименту ми виконали розрахунок магнітного моменту чистого ОЦК Fe. Виявилось, що експериментальне значення магнітного моменту  $2.22 \mu_B$  отримується зі значенням параметра  $\alpha=0.02$ .

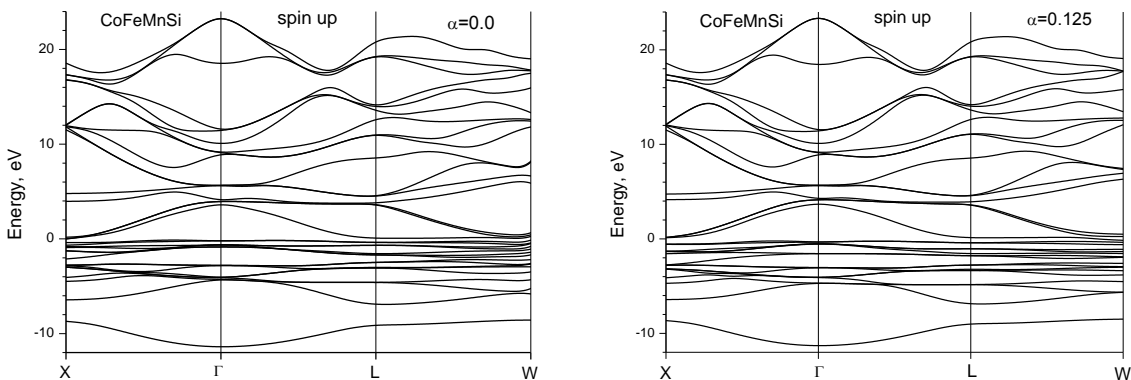
Отже, можна припустити, що для чистих перехідних d металів значення параметра  $\alpha \leq 0.05$ , для

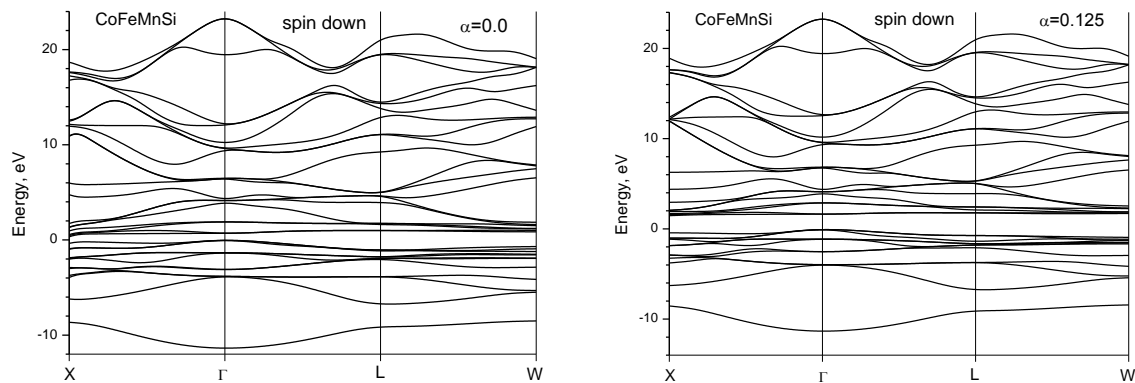
напівметалів  $\alpha \approx 0.1$ .

Електронні енергетичні спектри зі спіном вгору (рис. 3) виявляють відсутність міжзонної щілини для обидвох значень  $\alpha=0$  та  $\alpha=0.125$ . Відповідні зонні криві зліва й справа майже однакові. Ситуація з зонними кривими для спіна вниз приблизно така сама, але лише для енергій електронів, помітно віддалених від рівня Фермі. Поблизу енергії Фермі виникає невелика міжзонна щілина ( $\alpha=0$ ) та значно більша ( $\alpha=0.125$ ).

### 5. ВИСНОВКИ.

За допомогою програми ABINIT зроблені розрахунки поляризованого за спіном електронного енергетичного спектру кристала CoFeMnSi. Встановлено, що цей матеріал є напівметалом. Тобто, для одного значення спіна він метал, а для іншого – напівпровідник. Виявлена значна чутливість значення ширини забороненої зони до урахування в розрахунковій схемі сильних кореляцій 3d електронів. Включення сильних кореляцій було зроблене за допомогою обмінно-кореляційного функціонала PBE0. Позитивним випробуванням для нього стали аналогічні розрахунки електронної структури кристала CdO [23], який за умови  $\alpha=0$  у формулі (12) є металом з  $E_g < 0$ , а з  $\alpha=0.25$  – напівпровідником, пряма й непряма щілини якого добре





**Рис.3** – Електронні енергетичні спектри у кристалі CoFeMnSi для різних орієнтацій спіна за відсутності сильних кореляцій 3d електронів ( $\alpha = 0$ ) та з урахуванням останніх ( $\alpha = 0.125$ ). Енергія Фермі обрана за початок відліку

добре зіставляються з експериментальними значеннями. Можна припустити, що у мало вивчених матеріалах, які містять d(f) елементи, розрахунки електронної структури у формалізмі LDA, GGA можуть приводити до помилкової ширини забороненої зони, або навіть до від'ємного її значення. Тому включення сильних кореляцій є особливо важливим для таких об'єктів. Розглянутий тут CoFeMnSi є напівметалом, перспективним для застосування у спіновій електроніці. Знайдена нами ширина забороненої зони слугує бар'єром для електронів зі спіном униз, який є вищим, ніж у кристалі Si та приблизно таким, як у GaAs.

Повна енергія зв'язку елементарної комірки CoFeMnSi без урахування сильних кореляцій дорівнює -477.9123 Ha, а включення останніх спричинює її підвищення до -477.3908 Ha. Різниця цих енергій, отриманих після 51 ітерації самоузгодження, дорівнює 14.19 eV. Отже, сильні кореляції усувають са-

модію, яка є джерелом помилок визначення  $E_g$  у напівпровідниках і діелектриках.

Сильні кореляції й гібридизація є двома важливими аспектами проблеми кількісного опису електронної структури матеріалу з d(f) елементами. Якщо включення кореляцій приводить до значної зміни ширини забороненої зони, то перекривання хвильових функцій валентної зони між собою та зі станами зони провідності є також великим. Такий збіг сильних кореляцій та гібридизації й спостерігаємо в матеріалі CoFeMnSi. Однак може реалізуватись ситуація, коли включення сильних кореляцій змінює лише енергетичне положення d(f) електронів, а міжзонні щілини залишаються практично незмінними. В такому разі можна робити висновок про слабе перекривання (гібридизацію).

### Электронная структура полуметаллического кристалла CoFeMnSi, полученная с учетом сильных корреляций 3d электронов

С.В. Сиротюк, В.М. Швед, И.Е. Лопатинский, Н.А. Щербань

Национальный университет "Львовская политехника", ул. С. Бандеры, 12, 79013 Львов, Украина

Рассчитаны электронные энергетические спектры и плотности электронных состояний полуметаллического кристалла CoFeMnSi без учета сильных электронных корреляций и с включением последних в расчетную схему. Выявлено большое влияние сильных корреляций 3d электронов на значение ширины запрещенной зоны кристалла. Сделаны предположения относительно величины параметра смешивания в обменно-корреляционном функционале для металлов и полуметаллов. Сделан вывод о важности учета сильных корреляций в кристаллах с переходными элементами.

**Ключевые слова:** Энергетический спектр электронов, Плотность электронных состояний, Спиновая поляризация, Сильная корреляция электронов, Магнитный момент, Спиновая электроника.

## Electronic Structure of the Half-metallic Crystal CoFeMnSi, Obtained by Taking into Account the Strong Correlations of 3d Electrons

S.V. Syrotyuk, V.M. Shved, I.Ye. Lopatynskiy, N.O. Shcherban

National University "Lviv Polytechnic", 12, S. Bandera st., 79013 Lviv, Ukraine

The electron energy spectra and the electron density of states of the half-metal crystal CoFeMnSi have been calculated without strong electron correlations and with the inclusion of them in the calculation scheme. A significant influence of strong electron correlations of 3d electrons on the band gap value of the crystal was revealed. The assumptions about the values of the mixing parameter in the exchange-correlation functional for metals and semimetals have been done. The conclusion about the importance of taking into account the strong correlations in crystals, containing the transition elements, was done.

**Keywords:** The energy spectrum of the electrons, Density of electronic states, Spin polarization, Strong electron correlations, Magnetic moment, Spin electronics.

### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. A.M. Pohorilyi, S.M. Ryabchenko, O.I. Tolstolytkin, *УФЖ* **6**, 37 (2010) (A.M. Pohorilyi, S.M. Ryabchenko, O.I. Tolstolytkin, *Ukr. J. Phys.* **6**, 37 (2010)).
2. T. Graf, C. Felser, S.S.P. Parkin, *Prog. Solid State Chem.* **39**, 1 (2011).
3. W. Kohn, L.J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, A1133 (1965).
4. R.M. Martin, *Lect. Notes. Phys.* (Cambridge University Press: 2004).
5. J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
6. H. Mehnane, B. Bekkouche, S. Kacimi, A. Hallouche, M. Djermouni, A. Zaoui, *Superlattice Microst.* **51**, 772 (2012).
7. G.Z. Xu, E.K. Liu, Y. Du, G.J. Li, G.D. Liu, W.H. Wang, G.H. Wu, *Europhys. Lett.* **102**, 17007 (2013).
8. K. Özdoğan, E. Sasioglu, I. Galanakis, *J. Appl. Phys.* **113**, 193903 (2013).
9. Selçuk Kervan, Nazmiye Kervan, *J. Supercond. Nov. Magn.* **29** No 2, 409 (2015).
10. V.I. Anisimov, I.V. Solovyev, M.A. Korotin, M.T. Czyzyk, G.A. Sawatzky, *Phys. Rev. B* **48**, 16929 (1993).
11. P.E. Blöchl, *Phys. Rev. B* **50**, 17953 (1994).
12. M. Ernzerhof, G.E. Scuseria, *J. Chem. Phys.* **110**, 5029 (1999).
13. E. Tran, P. Blaha, K. Schwarz, P. Novak, *Phys. Rev. B* **74**, 155108 (2006).
14. N.A.W. Holzwarth, A.R. Tackett, G.E. Matthews, *Comput. Phys. Commun.* **135**, 329 (2001).
15. A.R. Tackett, N.A.W. Holzwarth, G.E. Matthews, *Comput. Phys. Commun.* **135**, 348 (2001).
16. H.J. Monkhorst, J.D. Pack, *Phys. Rev. B* **13**, 5188 (1976).
17. V. Alijani, S. Ouardi, G.H. Fecher, J. Winterlik, S.S. Naghavi, X. Kozina, G. Stryganyuk, C. Felser, *Phys. Rev. B* **84**, 224416 (2011).
18. X. Gonze, B. Amadon, P.-M. Anglade, J.-M. Beuken, F. Bottin, P. Boulanger, F. Bruneval, D. Caliste, R. Caracas, M. Cote, T. Deutsch, L. Genovese, Ph. Ghosez, M. Giantomassi, S. Goedecker, D.R. Hamann, P. Hermet, F. Jollet, G. Jomard, S. Leroux, M. Mancini, S. Mazevet, M.J.T. Oliveira, G. Onida, Y. Pouillon, T. Rangel, G.-M. Rignanese, D. Sangalli, R. Shaltaf, M. Torrent, M.J. Verstraete, G. Zerah, J.W. Zwanziger, *Comput. Phys. Commun.* **180**, 2582 (2009).
19. J.C. Slater, *Phys. Rev.* **49**, 931 (1936).
20. L. Pauling, *Phys. Rev.* **54**, 899 (1938).
21. Lakhan Bainsla, A.I. Mallick, M. Manivel Raja, A.K. Nigam, B.S.D.Ch.S. Varaprasad, Y.K. Takahashi, Aftab Alam, K.G. Suresh, K. Hono, *Phys. Rev. B* **91**, 104408 (2015).
22. I. Galanakis, P.H. Dederichs, N. Papanikolaou, *Phys. Rev. B* **66**, 134428 (2002).
23. Stepan Syrotyuk, Vira Shved, *Solid State Phenom.* **200**, 123 (2013).