

Dmitriev Andrey Nikolaevich

Taganrog Institute of Technology – Federal State-Owned Autonomy Educational Establishment of Higher Vocational Education “Southern Federal University”.

E-mail: a.dmitriev86@gmail.com.

17, Nekrasovsky Street, Rm. 101, Taganrog, 347900, Russia.

Phone: +79613138686

The Department of Micro- and Nanoelectronics; Postgraduate Student.

CherednichenkoDmitriy Ivanovich

E-mail: cheredni@fep.ti.sfedu.ru.

71, 1-ya Kotelnaya Street, Rm. 339, Taganrog, 347900, Russia.

Phone: 88634371940.

The Department of Micro- and Nanoelectronics; Cand. of Eng. Sc.; Associate Professor.

Muzykov Peter Genadievich

University of South Carolina.

E-mail: muzykovp@enr.sc.edu

301 South Main Street, Rm. 3A80, Columbia, SC 29208, USA.

Phone: 18037777025; Fax: 18037778045.

The Department of Electrical Engineering; Research Assistant Professor.

Tangali Sudarshan

E-mail: sudarsha@cec.sc.edu.

301 South Main Street, Rm. 3A79, Columbia, SC 29208, USA.

Phone: 18037775174; Fax: 18037778851.

The Department of Electrical Engineering; Chair the Department; Professor.

УДК 621.315

**А.А. Лаврентьев, Б.В. Габрельян, П.Н. Шкумат, Б.Б. Кулагин,
И.Я. Никифоров**

**ВЛИЯНИЕ АНТИФЕРРОМАГНИТНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ НА
ЭЛЕКТРОННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ МОНОСУЛЬФИДОВ
3D-ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ В AB INITIO РАСЧЕТАХ С УЧЕТОМ
ПРИБЛИЖЕНИЯ LDA+U**

Модифицированным методом LAPW+lo проведены расчеты электронно-энергетической структуры моносulfидов 3d-металлов с учетом антиферромагнитного упорядочения в различных кристаллографических слоях. Показано, что расщепление d-состояний переходного металла при учете антиферромагнитного упорядочения в слоях приводит к переходу части моносulfидов из металлического в полупроводниковое состояние. Для достижения близких к эксперименту значений E_g проводилась корректировка появившейся щели с помощью приближения LDA+U.

Моносulfиды; переход металл-диэлектрик; электронно-энергетическая структура; антиферромагнитное упорядочение; запрещенная зона.

A.A. Lavrent'ev, B.V. Gabrel'yan, P.N. Shkumat, B.B. Kulagin, I.Ya. Nikiforov

**THE INFLUENCE OF ANTIFERROMAGNETIC ORDERING ON
ELECTRONIC STRUCTURE OF 3D-TRANSITION METALS
MONOSULFIDES IN AB INITIO CALCULATIONS WITH LDA+U
CORRECTION**

The calculations of electronic structure of 3d-metal monosulfides with different crystallographic layers antiferromagnetic ordering were performed using LAPW+lo modified method. It was shown that the transition metal-semiconductor occurs in several monosulfides, caused by

the metal d-states splitting under antiferromagnetic ordering. To achieve the value of E_g close to the experimental one the LDA+U correction was applied.

Monosulfides; metal-insulator transition; electronic structure; antiferromagnetic ordering, energy gap.

Моносulfиды 3d-металлов проявляют многообразие физических свойств, и наибольший интерес представляют их магнитные превращения и переход металл-диэлектрик (ПМД) [1], делающие их перспективными для спинтроники. Первостепенную роль в этих переходах играют 3d-электроны и степень заполнения 3d-оболочки, причем последнее и определяет различие наблюдаемых свойств. В настоящей работе модифицированным методом LAPW+U, реализованным в программе Wien2k [2], рассчитана электронно-энергетическая структура во всем ряду моносulfидов 3d-металлов от ScS до NiS, включая и расчеты в соединениях CuS и ZnS с заполненными 3d-оболочками. Расчеты проведены для высокосимметричных кристаллографических фаз исследуемых соединений: соединения ScS и MnS взяты для расчета в кубической структуре типа NaCl (пространственная группа Fm-3m), соединения TiS, VS, CrS, FeS, CoS, NiS в гексагональной структуре типа NiAs (пространственная группа P63/mmc), а ZnS имело кубическую структуру сфалерита (F-43m). И только соединение CuS рассчитано для своей сравнительно низкосимметричной гексагональной структуры, обладающей пространственной группой P63/mmc, совпадающей с пространственной группой структуры типа NiAs. Основное внимание в работе уделено влиянию антиферромагнитного упорядочения в различных кристаллографических плоскостях: (001) для структуры типа NiAs и (111) для структуры типа NaCl, приведенных на рис. 1. Показано, что в отсутствие антиферромагнитного упорядочения соединение MnS является проводящим материалом, что видно по положению уровня Ферми E_F на полной плотности состояний (DOS), приведенной в нижней части рис. 2,а. Антиферромагнитное упорядочение в слоях (001) не приводит к появлению запрещенной щели в MnS (на рис. 2,а этот расчет не показан), а лишь антиферромагнитное упорядочение в слоях (111) вызывает появление запрещенной щели E_g шириной около 1 эВ (рис. 2,а. Согласно экспериментальным данным [1], α -MnS является полупроводниковым антиферромагнетиком с $E_g \approx 2.6 \div 2.8$ эВ. Чтобы получить близкую к эксперименту запрещенную щель, было использовано приближение LDA+U [3], что позволило при $U \approx 6$ эВ достигнуть $E_g \approx 2.8$ эВ. Этот результат хорошо виден на полной DOS на рис. 2,а в верхней части рисунка.

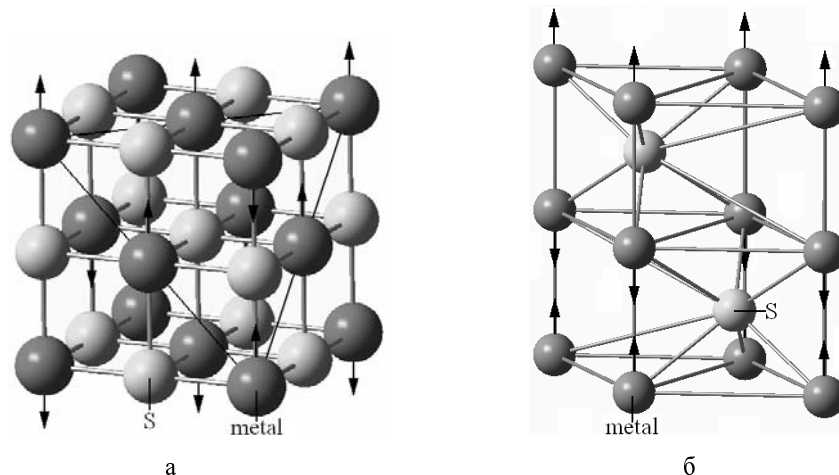


Рис. 1. Стрелками обозначены магнитные моменты в структуре типа (а) NaCl и (б) NiAs

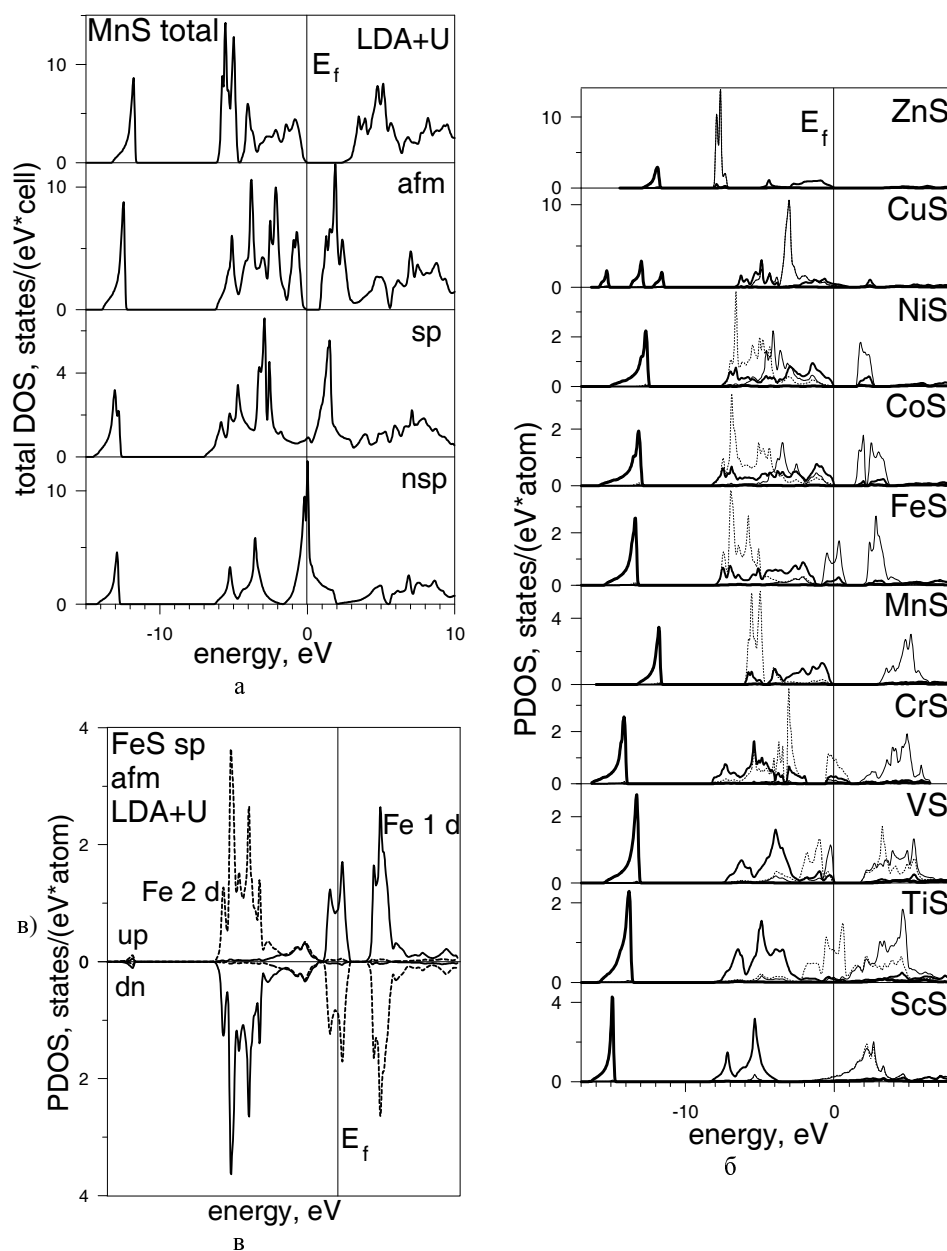


Рис. 2. Рассчитанные плотности электронных состояний (E_f – энергия Ферми)

Для сравнения на рис. 2,б приведены результаты расчетов DOS всех исследованных моносulfидов, а именно, парциальные плотности $3d$ -состояний переходных металлов (пунктирные и тонкие линии) и p -состояний серы и s -состояний серы (толстые сплошные линии). В качестве примера на рис. 2,в показаны плотности d -состояний в FeS для двух атомов железа из соседних плоскостей (001) с различным направлением результирующего магнитного момента, приводящим в целом к антиферромагнитному состоянию кристалла. Результирующие магнитные моменты на атомах $3d$ -переходных металлов даны в таблице вместе с полученными зна-

чениями ширин запрещенных зон E_g , muffin-tin радиусами сфер (R_{MT}), общим числом \vec{k} -точек в зоне Бриллюэна (BZ) и числом \vec{k} -точек в неприводимой части зоны Бриллюэна (IBZ), а также вычислительным параметром $R_{MT} \cdot k_{max}$, определяющим величину базиса разложения по плоским волнам.

Результаты исследования показали, что расщепление d -состояний переходного металла с разными направлениями вверх и вниз при учете антиферромагнитного упорядочения в слоях приводит к появлению запрещенной щели в плотности электронных состояний и переходу моносульфидов (VS, MnS, NiS, CoS) из металлического в полупроводниковое состояние.

Таблица 1

Результаты расчетов магнитных моментов атомов 3d-металлов, E_g и некоторые параметры расчета в исследованных моносульфидах

Соед.	Магнитные моменты 3d-атомов в параллельных плоскостях, μ_B		E_g	R_{MT} (Me)	$R_{MT}(S)$	Число \vec{k} -точек		$R_{MT} \cdot k_{max}$
	↑	↓				в BZ	в IBZ клине	
ScS	0,02661	-0,02661		2,5987	2,3051	3000	280	7
TiS	1,33261	-1,3208		2,4749	2,2613	3000	266	7
VS	0,93987	-0,93926	1,55	2,2466	2,2081	3000	293	7
CrS	3,50517	-3,51305		2,3069	2,2098	3000	261	7
MnS	4,68193	-4,68193	2,6	2,5669	2,3840	3000	280	7
FeS	3,51094	-3,53255		2,3506	2,2844	3000	293	7
CoS	2,43148	-2,4317	1,1	2,2023	2,2126	3000	261	7
NiS	1,43957	-1,43956	1,4	2,2471	2,2696	3000	261	7
CuS	без afm			2,1325	1,9486	3000	183	7
ZnS	без afm		3,45	2,0980	2,1400	3000	172	7

Дальнейшая корректировка величины появившейся щели, сделанная в приближении LDA+U с учетом сильного обменно-корреляционного взаимодействия 3d-электронов переходного металла, позволила получить близкие к эксперименту значения E_g .

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Лосева Г.В., Овчинникова С.Г., Петраковский Г.А. Переход металл-диэлектрик в сульфиды 3d-металлов. – Новосибирск: Наука, 1993. – 144 с.
2. Blaha P., Schwarz K., Madsen G.K.H., Kvasnicka D., Luitz J. WIEN2k, an augmented plane wave + local orbitals program for calculating crystal properties. –Karlheinz Schwarz, Austria, Techn. Universität Wien, (2001) ISBN 3-9501031-1-2.
3. Anisimov V.I., Solovyev I.V., Korotin M.A., Czyzyk M.T., Sawatzky G.A. Phys. Rev. B 48, 16929 (1993).

Статью рекомендовал к опубликованию д.ф.-м.н., профессор М.Ф. Куприянов.

Лаврентьев Анатолий Александрович

Донской государственный технический университет.

E-mail: alavrentyev@dstu.edu.ru.

344010, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1.

Тел.: 88632712367; +79286014539.

Кафедра электротехники и электроники; заведующий кафедрой; д.ф.-м.н.; профессор.

Габрельян Борис Витальевич

Тел.: 88632404321.

Кафедра программного обеспечения вычислительной техники и автоматизированных систем; к.ф.-м.н.; доцент.

Шкумат Петр Николаевич

Тел.: +79081992702.

Кафедра электротехники и электроники; ассистент.

Кулагин Борис Борисович

Тел.: 88632533069; +79044425970.

Кафедра электротехники и электроники; ассистент.

Никифоров Игорь Яковлевич

E-mail: iyanikiforov@mail.ru.

Тел.: 88632925813.

Кафедра физики; д.ф.-м.н.; профессор.

Lavrentyev Anatoly Aleksandrovich

Don State Technical University.

E-mail: alavrentyev@dstu.edu.ru.

1, Gagarin sq., Rostov-on-Don, 344010, Russia.

Phone: +78632712367; +79286014539.

The Department of Electrical Engineering and Electronics; Head of the Department; Dr. of Phis.-Math. Sc.; Professor.

Gabrelyan Boris Vitalievich

Phone: +78632404321.

The Department of Computational Technique and Automated System Software; Cand. of Phis.-Math. Sc.; Associate Professor.

Shkumat Petr Nikolaevich

Phone: +79081992702.

The Department of Electrical Engineering and Electronics; Assistant.

Kulagin Boris Borisovich

Phone: 88632533069; +79044425970.

The Department of Electrical Engineering and Electronics; Assistant.

Nikiforov Igor Yakovlevich

E-mail: iyanikiforov@mail.ru.

Phone: +78632925813.

The Department of Physics; Dr. of Phis.-Math. Sc.; Professor.