

## Co<sub>2</sub>TiSn(001) 표면의 자성 및 반쪽금속성에 대한 제일원리연구

김영구<sup>1,2\*</sup> · 이재일<sup>1</sup>

<sup>1</sup>인하대학교 물리학과, 인천 남구 용현동 253, 402-751

<sup>2</sup>연변대학교 이학원 물리학과, 연길 133002, 중국

(2008년 7월 22일 받음, 2008년 8월 7일 최종수정본 받음)

Full-Heusler 화합물인 Co<sub>2</sub>TiSn(001) 표면의 전자구조, 자성 및 반쪽금속성을 일반가울기근사(GGA)를 채택한 총퍼텐셜선형보강평면파동(FLAPW)방법을 이용하여 이론적으로 연구하였다. Co<sub>2</sub>TiSn 화합물의 (001)방향에서 2가지 가능한 표면, 즉 Co 원자들로 끝나는 면(Co-term)과 TiSn 원자들로 끝나는 면(TiSn-term)을 고려하였다. 계산된 상태밀도로부터 Co-term의 표면에서는 반쪽금속성이 깨어졌지만 TiSn-term의 표면에서는 반쪽금속성이 유지됨을 알 수 있었다. Co-term의 경우 표면 Co 원자의 좌표수가 줄어들면서 Co 원자의 채워진 소수 스핀 *d*상태가 높은 에너지 영역으로 이동하여 페르미에너지에 걸치면서 반쪽금속성이 깨어진다. TiSn-term에서는 표면상태가 페르미에너지 바로 아래에 위치하면서 소수 스핀 띠간격이 가운데 층에 비하여 많이 줄어들었다. Co 원자의 자기모멘트는 Co-term의 표면에서는 내부 층에 비하여 약 10% 증가한 1.16  $\mu_B$ 의 값을 가지는 반면 TiSn-term의 표면 바로 아래층에서는 내부 층과 비슷한 값(1.03  $\mu_B$ )을 가졌다.

**주제어** : 반쪽금속성, Co<sub>2</sub>TiSn, Heusler 화합물, 전자구조

### I. 서 론

전자의 전하 제어에 기초한 기존의 전자소자가 한계를 보임에 따라 전자의 스핀을 이용하여 정보를 저장하고 전달하는 스핀트로닉스기술이 새로운 분야로 관심을 끌고 있다[1-3]. 스핀트로닉스소자의 개발을 위하여서는 자성체로부터 반도체로의 효율적인 스핀주입이 반드시 해결하여야 할 필수적인 요소로 여겨지고 있는데 페르미에너지에서 100%의 스핀 분극을 지닌 반쪽금속자성체가 현재 각광 받는 스핀주입물질로 떠오르고 있다.

반쪽금속자성체에서 한쪽 스핀의 전자상태는 금속성을 보이고 다른 한 쪽 스핀의 전자상태는 반도체의 특성을 나타내는데 이러한 특성은 de Groot 등에 의해 half-Heusler 화합물인 NiMnSb와 PtMnSb에서 augmented spherical wave방법에 의하여 최초로 발견되었다[4]. Half Heusler 화합물외에 많은 full-Heusler X<sub>2</sub>YZ(X, Y = 3d, 4d 전이금속; Z = III, IV족 원자) 화합물중에서도 반쪽금속성이 예측되었으며 이들은 실온보다 높은 큐리에온도, 큰 자기모멘트 및 zinc-blende와 비슷한 구조를 갖고 있어 반도체와 좋은 결합-접합이 기대되는 등 장점을 갖고 있기에 많은 연구가 진행되어 왔다[5-8]. Full Heusler X<sub>2</sub>YZ(X = Cr, Mn, Co, Fe; Y = 3d, 4d 전이금속; Z = III, IV족 원소)화합물은 L<sub>21</sub> 구조를 갖고 있으며 이때 X, Y, Z 원자들은 각각 8c(1/4, 1/4, 1/4), 4a(0, 0, 0), 4b(1/2, 1/2, 1/2)의 Wyckoff 위치에 있으며 이는 두

개의 zinc-blende 구조를 지닌 XY와 XZ가 x축(혹은 y, z축) 방향을 따라 사출상수의 1/2 만큼 이동시킨 상태로 서로 끼워져 이루어진 구조로 볼 수 있다. Webster 등[9]의 실험에 의하면 Co<sub>2</sub>TiSn의 총자기모멘트는 (1.93 ± 0.07)  $\mu_B$ , 큐리에온도는 (359 ± 4) K로서 이는 Buschow 등의 실험결과와 일치한다[10]. Lee 등[11]은 제일원리적 전자구조계산으로부터 Co<sub>2</sub>TiSn 화합물이 0.48 eV 정도의 소수 스핀 띠간격을 지닌 반쪽금속자성체임을 보여주었으며 이때 계산된 총자기모멘트 값은 2.00  $\mu_B$ 였다. Kandpal 등[12]의 Co<sub>2</sub>TiSn에 대한 이론연구에 따르면 교환-상관포텐셜근사로 일반가울기근사(GGA)를 사용하였을 때는 Lee 등의 결과와 일치성을 보이지만 국소밀도근사(LDA)를 사용하였을 경우 총자기모멘트가 1.99  $\mu_B$ 로서 정수값(2.00  $\mu_B$ ) 보다 약간 작았다.

지금까지 반쪽금속물질의 스핀분극에 대한 실험적 측정은 이론적으로 예측된 100%보다 작은 값을 보여주고 있다. Soulen 등[13]의 Point-contact Andreev reflection 측정에 의하면 NiMnSb와 CrO<sub>2</sub>의 스핀분극률은 각각 58%와 90%인 것으로 나타났다. Pyrite 구조의 CoS<sub>2</sub>에 대한 실험에서도 이론적 예측보다 작은 56%의 스핀분극률이 관찰 되었다. 이러한 실험적 결과와 이론적 예측의 불일치는 표면의 생성과 원자들의 무질서도가 그 주요원인으로 꼽히고 있다[14, 15]. Hashemifar 등[16]의 Co<sub>2</sub>MnSi(001) 표면에 대한 제일원리적 방법을 이용한 전자구조연구에서도 순 Mn 원자로 끝나는 면에서만 반쪽금속성이 유지되는 외에 다른 표면들에서는 반쪽금속성이 모두 깨어짐을 보여주었다. 최근 Jin 등[17]은 FLAPW 방법으로 Co<sub>2</sub>MSi(001)(M = Ti, Cr) 표면의 전자구

\*Tel: 86-433-273-2596, E-mail: jinyingjiu@ybu.edu.cn

조를 계산하였으며 TiSi 원자들로 끝나는 Co<sub>2</sub>TiSi(001) 표면에서만 반쪽금속성이 계속하여 존재하는 반면 다른 표면들에서는 반쪽금속성이 모두 깨어짐을 보여주었다. Zinc-blende 구조를 가진 CrS(001) 표면에서는 Cr 원자로 끝나는 면과 S 원자로 끝나는 면에서 모두 반쪽금속성이 유지됨이 보고되었다[18]. 위의 연구결과들로부터 표면에서 반쪽금속성은 화합물의 결정구조, 원자구성 등 요소와 밀접한 관계가 있으며 반쪽금속자성체를 스핀트로닉스소자에 응용하기 위하여서는 반쪽금속자성체표면의 전자구조에 대한 포괄적인 이해가 필수적임을 알 수 있다.

본 논문에서는 full-Heusler 화합물인 Co<sub>2</sub>TiSn(001) 표면의 전자구조, 자성 및 반쪽금속성을 총포텐셜선형보강평면파동(FLAPW) 방법을 이용하여 연구하였다. 논문의 II절에서는 사용된 모형과 계산방법을 기술하였고 III절에서는 결과를 제시하고 논의를 하였으며 IV절에서 결론을 요약하였다.

### II. 모형과 계산방법

서로 다른 원자로 끝나는 Co<sub>2</sub>TiSn(001)면의 전자구조, 반쪽금속성 및 자성을 이론적으로 연구하기 위하여 Fig. 1에서 보여준 것처럼 두가지 계, 즉 (a) Co 원자들로 끝나는 면(Co-term)과 (b) TiSn원자들로 끝나는 면(TiSn-term)을 고려하였으며 이들은 각각 11층과 13층으로 이루어진 얇은 판으로 기술하였다. 2차원 살창상수는 실험값[9]에  $\sqrt{2}/2$ 를 곱한 8.115 a.u.로 하였고 층간거리는 실험값의 1/4에 해당하는 2.869 a.u.로 잡았다.

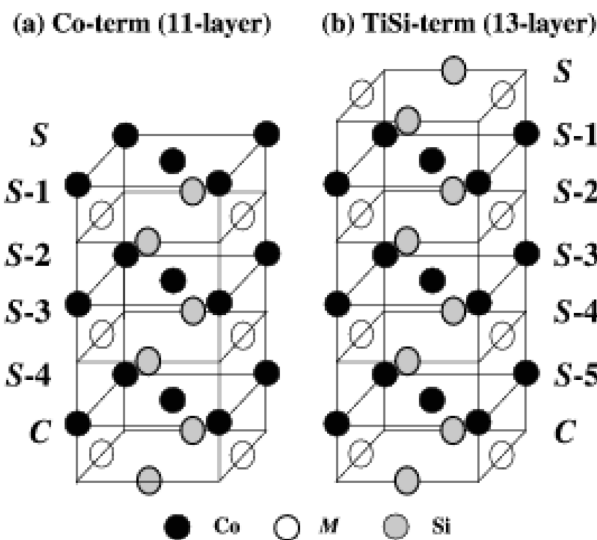


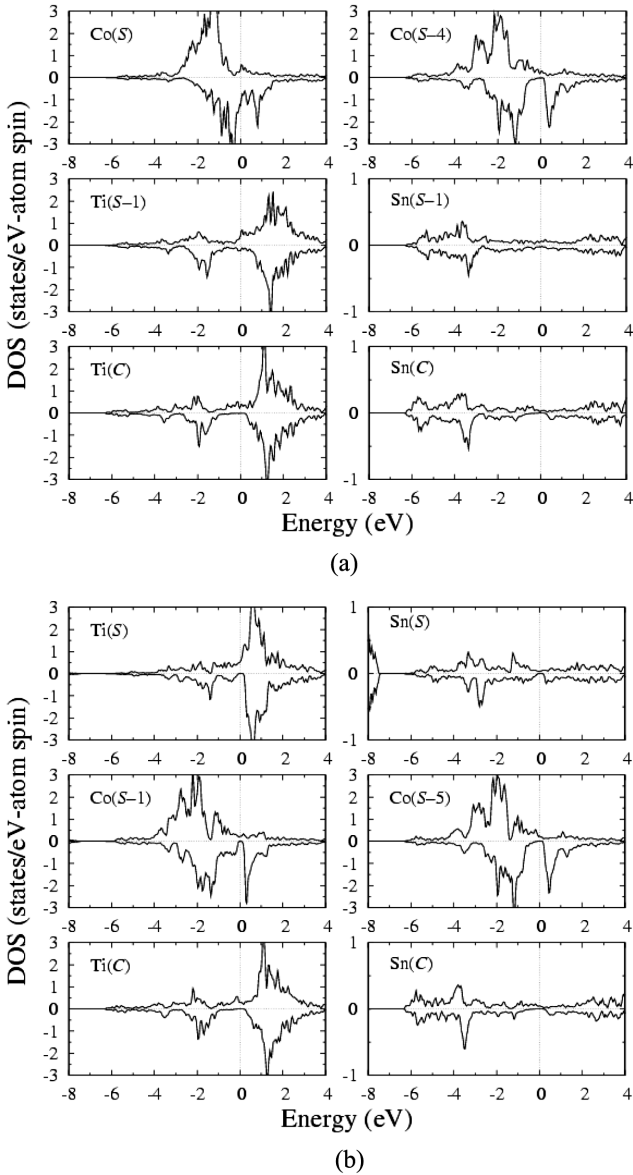
Fig. 1. Schematic illustration of the single slab models which consisted of eleven- and thirteen atomic layers for the Co-term and TiSi-term, respectively.

전자구조의 계산을 위해 단일 입자 방정식인 Kohn-Sham 방정식[19]을 일반기울기근사(Generalized Gradient Approximation: GGA)[20]를 이용한 QMD-FLAPW 방법[21]에 의하여 자체 증폭적으로 풀었다. 제1브릴루앙 영역내의 적분은 기약영역 내에서 21개의 **k**-점들에 대해서 에너지 고유값을 계산하였다. 매 **k**-점당 Co-term과 TiSn-term에서 각각 약 2300와 2700개의 기저함수를 사용하였다. 머핀-틴(Muffin-tin: MT) 구내의 전하와 퍼텐셜을 기술하기 위해 각운동량  $l \leq 8$  까지의 격자조화함수를 이용하였으며, MT구의 반지름은 Co 원자는 2.15 a.u., Ti와 Sn 원자는 2.40 a.u.로 선택하였다. 핵심전자는 완전히 상대론적으로 취급하였고 가전자는 준 상대론적으로 취급하였다[22]. 입력과 출력의 전하밀도와 스핀밀도의 계급-평균-계급값의 차이가  $1 \times 10^{-4}$  electrons/(a.u.)<sup>3</sup> 이하일 때 자체 증폭적 조건을 만족하는 것으로 간주하였다.

### III. 결과 및 논의

Co<sub>2</sub>TiSn(001) 표면의 반쪽금속성을 이해하기 위하여 Fig. 2에 (a) Co-term, (b) TiSn-term에서의 층에 따른 원자별 스핀분극 된 상태밀도를 제시하였다. 소수 스핀 상태의 값에는 -1을 곱하였고 페르미에너지는 영으로 잡았다. 그림으로부터 두 계의 가운데층 Ti(C)와 Sn(C)원자들은 소수 스핀 상태에서 약 0.4 eV의 에너지띠 간격을 가지며 페르미에너지가 이 간격에 위치하여 반쪽금속성을 보여주고 있다. 상태밀도들의 전체적인 모양은 덩치상태에 대한 다른 계산결과와 잘 일치한다[13, 14]. Co<sub>2</sub>에 기반한 full-Heusler화합물에서 차인접한 Co원자들의 상호작용이 매우 중요한 역할을 하며 그들 지간의 상호작용에 의하여 생성된  $t_{1u}$ ,  $e_u$  상태사이의 간격에 의하여 소수 스핀의 에너지띠 간격이 결정된다[5].

Fig. 2(a)에 주어진 Co-term의 표면 Co 원자의 상태밀도를 살펴보면 페르미에너지가 소수 스핀의 큰 봉우리 바로 아래에 위치하여 이 표면에서 반쪽금속성이 깨어짐을 알 수 있다. 이는 표면이 생성되어 Co 원자의 좌표수가 줄어들면서(각각 두 개의 최인접한 Ti와 Sn, 하나의 차인접한 Co 원자를 잃는다) 소수 스핀의 채어져 있던 상태들이 높은 에너지영역으로 이동하기 때문이다. 또한 표면생성에 인한 따름힘에 의해 상태밀도들이 국소화면서 내부 층에서는 서로 조금씩 떨어져 있던 채워진 Co 원자 *d*-상태의 봉우리들이 표면에서는 서로 합쳐져서 페르미 에너지 아래에 다수와 소수 스핀 상태에서 각각 하나의 큰 봉우리가 형성되어 있음을 볼 수 있다. 표면에서 국소화된 다수 스핀과 소수 스핀사이의 스핀 분리도 내부 층에 비해 다소 증가되어 있으며 이는 표면에서 Co 원자의 자기모멘트가 증가함을 의미한다. 표면 바로 아래층의 Ti와 Sn 원자의 상태밀도에서도 가운데층에서는 존재하던 소수



**Fig. 2.** Spin polarized layer-projected atom-resolved density of states (in unit of states/eV atom spin) for (a) the Co-term and (b) the TiSn-term. The minority spins are factored by -1, and the Fermi levels are set to zero.

스핀의 띠 간격사이에 새로운 상태들이 나타나면서 반쪽금속성이 깨어지는데 이는 Ti *d*, Sn *sp*-상태와 표면의 Co *d*-상태사이의 혼성이 증가하였기 때문이다.

TiSn-term의 경우 표면 Ti와 Sn 원자들은 각각 4개의 최인접한 Co 원자와 표면아래층의 Co 원자는 하나의 최인접한 Co 원자를 잃는다. 따라서 표면아래층 Co 원자의 표면 바깥쪽을 향한  $d_{3z^2-r^2}$  상태가 떨어진 결합이 되어 표면의 Sn *sp*-와 Ti *d*-상태와 혼성을 이루어 표면상태를 형성하며 이 표면상태가 페르미에너지 바로 아래에 위치하여 TiSn-term의 표면에서 반쪽금속성이 유지된다. 표면생성은 표면원자들의 다

채워진 상태와 비어있는 상태에 서로 다른 효과를 주고 있다. 즉 가운데 층 Sn의 -6.5~-3.0 eV 상태와 Ti의 -3.5~-1.5 eV 사이의 채워진 상태들은 국소화되면서 높은 에너지 영역으로 약 0.5 eV 정도 이동하는 반면 가운데 층 Ti 원자의 0.5~2.0 eV 사이에 있던 다수와 소수 스핀 *d*-상태들은 표면에서 국소화되면서 낮은 에너지 영역으로 이동하여 소수 스핀 상태의 에너지 간격이 가운데층(~0.4 eV)에 비하여 상당히 줄어든 약 0.2 eV의 값을 가진다. Co<sub>2</sub>TiSi(*T*=Cr, Mn) 화합물의 Mn(Cr), Si 원자들로 끝나는 (001) 표면에서 표면상태가 바로 페르미에너지에 걸쳐서 반쪽금속성이 깨어지는 반면 TiSi 원자들로 끝나는 Co<sub>2</sub>TiSi(001) 표면에서는 본 논문의 경우와 마찬가지로 표면상태가 페르미 에너지에 바로 아래에 위치하여 반쪽금속성이 유지된다[16, 17].

표면에서의 전자구조와 자성을 정량적으로 살펴보기 위해 Table I에서는 Co-term과 TiSn-term에서 각층 원자의 MT 구 내에서 궤도각운동량과 스핀에 따라 나는 전자수와 자기모멘트값을 정리하였다. Co와 Ti 원자들의 *d*-상태전자수에 대해서는  $d_{xy}$ ,  $d_{yz+zx}$ ,  $d_{x^2-y^2}$ ,  $d_{3z^2-r^2}$  궤도로 분해하여 제시하였다. 두 계의 경우 모두 표면원자들의 *p*-전자수가 감소함을 볼 수 있는데 이는 *p*-전자들이 표면에서 진공영역으로 이동하여 돌연적인 표면생성에 의한 영향을 가려주기 때문이다.

Co-term의 경우 표면에서 Co 원자의 자기모멘트는 내부 층의 원자에 비하여 약 10% 정도 증가한 1.16  $\mu_B$ 의 값을 가졌는데 이는 표면에서 증가된 스핀 분리와 부합된다. Co(S) 원자의 *d*-전자수를 살펴보면 표면에서 대칭성이 줄어들면서 Co(S) *d*-궤도들이 재혼성을 이루고 밀층의 Ti(S-1) *d*-궤도와 혼성하여 전자수의 분포가 내부 층과는 다른 양상을 보이고 있다. 특히 소수 스핀  $d_{3z^2-r^2}$  전자수가 다른 *d*-궤도들보다 내부 층의 것과 비하여 많이 감소하여 있음을 볼 수 있고 이 궤도가 표면에서 자기모멘트의 증가에 가장 큰 기여를 하고 있음을 알 수 있었다. 이는  $d_{3z^2-r^2}$  상태가 표면 바깥쪽을 직접 향하고 있어 표면영향을 가장 많이 받는 것과 연관된다. 반면 Co(S)원자  $d_{xy}$ -상태의 자기모멘트는 Co(S-4)의 경우보다 0.15  $\mu_B$ 만큼 감소하였다. 표면층 Co *d*-상태와의 증가된 혼성으로 인하여 표면밀층 Ti원자의 자기모멘트값도 가운데 층에 비하여 많이 증가하였음을 알 수 있으며  $d_{yz+zx}$ -상태가 이에 주요한 기여를 하고 있다. 내부층 Co(S-4) 원자는 1.03  $\mu_B$ 의 값을 가지며 이는 Webster 등[9]의 실험값(1.03 ± 0.1  $\mu_B$ )과 잘 일치한다.

TiSn-term에서 표면밀층 Co원자의 자기모멘트(1.03  $\mu_B$ )는 내부 층의 값(1.06  $\mu_B$ )과 비슷하지만 소수 스핀  $d_{3z^2-r^2}$  전자수가 내부 층의 것에 비하여 0.14만큼 증가 되어 만약 상태밀도와 연관 지어 고려하면  $d_{3z^2-r^2}$ -상태가 표면상태의 형성에 참여함을 간접적으로 보여주고 있다. Ti(S)의 자기모멘트는 가

**Table I.** *l*-Decomposed majority and minority spin electrons inside the MT spheres, and magnetic moments (in unit of  $\mu_B$ ) for the Co-term and TiSn-term.

Co-term							
	<i>s</i> ( $\uparrow/\downarrow$ )	<i>p</i> ( $\uparrow/\downarrow$ )	<i>d</i> ( $\uparrow/\downarrow$ )				<i>M</i>
			<i>xy</i>	<i>yz + zx</i>	$x^2 - y^2$	$3z^2 - r^2$	
Co(S)	0.15/0.14	0.07/0.08	0.79/0.50	1.66/1.49	0.82/0.71	0.87/0.27	1.16
Ti(S-1)	0.11/0.13	0.13/0.15	0.10/0.13	0.39/0.57	0.20/0.28	0.09/0.15	-0.39
Sn(S-1)	0.44/0.44	0.49/0.50	-	-	-	-	-0.01
Co(S-4)	0.16/0.14	0.14/0.14	0.86/0.42	1.58/1.48	0.78/0.74	0.85/0.42	1.03
Ti(C)	0.12/0.12	0.14/0.15	0.11/0.11	0.49/0.51	0.25/0.26	0.11/0.11	-0.05
Sn(C)	0.44/0.43	0.52/0.50	-	-	-	-	-0.01
TiSn-term							
Ti(S)	0.10/0.10	0.09/0.09	0.20/0.13	0.44/0.44	0.21/0.25	0.12/0.14	0.01
Sn(S)	0.47/0.47	0.47/0.46	-	-	-	-	0.01
Co(S-1)	0.16/0.15	0.14/0.14	0.87/0.40	1.56/1.40	0.77/0.71	0.85/0.56	1.03
Co(S-5)	0.16/0.14	0.14/0.14	0.86/0.41	1.58/1.48	0.79/0.74	0.86/0.42	1.06
Ti(C)	0.12/0.12	0.14/0.15	0.11/0.11	0.49/0.51	0.24/0.26	0.11/0.11	-0.04
Sn(C)	0.44/0.43	0.52/0.50	-	-	-	-	0.01

운데 층 음의 값(-0.04  $\mu_B$ )과는 다른 양의 값(+0.01  $\mu_B$ )을 가지며 이는 표면층 Ti와 표면밑층 Co 원자의 *d*-궤도들이 재혼성에 의하여 Ti(S)  $d_{xy}$ -상태에 의한 스핀 분리가 양의 값으로 커졌기 때문이다.

#### IV. 결 론

본 논문에서는 일반기울기근사(GGA)를 채택한 총포텐셜선형보강평면파동(FLAPW) 방법을 이용하여 full-Heusler  $\text{Co}_2\text{TiSn}$  화합물의 (001) 표면의 전자구조, 자성 및 반쪽금속성을 이론적으로 연구하였다.  $\text{Co}_2\text{TiSn}$  화합물의 (001)방향에서 2가지 가능한 표면, 즉 Co 원자들로 끝나는 면(Co-term)과 TiSn 원자들로 끝나는 면(TiSn-term)을 고려하였다. 계산된 상태밀도로부터 Co-term의 경우 표면 Co 원자의 좌표수가 줄어들면서 Co 원자의 채워진 소수 스핀 *d*-상태가 높은 에너지 영역으로 이동하여 페르미에너지에 걸치면서 반쪽금속속성이 깨어지는 반면 TiSn-term에서는 표면아래층 Co 원자의 표면 바깥쪽을 향한  $d_{3z^2-r^2}$  상태와 표면의 Sn *sp*-, Ti *d*-상태사이의 혼성으로 인하여 형성된 표면상태가 페르미에너지 바로 아래에 위치하면서 반쪽금속속성이 유지된다. 또한 가운데 층 Ti 원자의 비어 있던 소수 스핀 *d*-상태들이 TiSn-term의 표면에서 국소화되고 낮은 에너지 영역으로 이동하여 표면에서 소수 스핀 상태의 에너지 띠 간격이 가운데층(-0.4 eV)에 비하여 상당히 줄어든 약 0.2 eV의 값을 가진다. Co-term의 표면에서 Co 원자의 자기모멘트는 내부 층에 비하여 약 10% 증가한 1.16  $\mu_B$ 의 값을 가지는 반면 TiSn-term의 표면 바로 아래층에서는 내부 층과 비슷한 값(1.03  $\mu_B$ )을 가졌다.

#### 감사의 글

이 연구는 중국국가자연과학기금의 Grant No. 10664005의 지원에 의해 수행되었습니다.

#### 참고문헌

- [1] G. Prinz and K. Hathaway, *Physics Today*, **48**, 24 (1995).
- [2] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnar, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, and D. M. Treger, *Science*, **294**, 1488 (2001).
- [3] I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.*, **76**, 323 (2004).
- [4] R. A. de Groot, F. M. Mueller, P. G. van Engen, and K. H. J. Buschow, *Phys. Rev. Lett.*, **50**, 2024 (1983).
- [5] I. Galanakis, Ph. Mavropoulos, and P. H. Dederichs, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **39**, 765 (2006).
- [6] H. C. Kandpal, G. H. Fecher, and C. Felser, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **40**, 1507 (2007).
- [7] I. Galanakis, K. Ozdogan, E. Sasioglu, and B. Aktas, *Phys. Rev. B*, **75**, 092407 (2007).
- [8] Y. J. Jin and J. I. Lee, *J. Korean Phys. Soc.*, **51**, 155 (2007).
- [9] P. J. Webster and K. R. Ziebeck, *J. Phys. Chem. Solids*, **34**, 1647 (1973).
- [10] P. G. van Engen, K. H. J. Buschow, and M. Erman, *J. Magn. Magn. Mater.*, **30**, 374 (1983).
- [11] S. C. Lee, T. D. Lee, P. Blaha, and K. Schwarz, *J. Appl. Phys.*, **97**, 10C307 (2005).
- [12] H. C. Kandpal, V. Ksenofontov, M. Wojcik, R. Seshadri, and C. Felser, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **40**, 1587 (2007).
- [13] R. J. Soulen Jr., J. M. Byers, M. S. Osofsky, B. Nadgorny, T.

- Ambrose, S. F. Cheng, P. R. Broussard, C. T. Tanaka, J. Nowak, J. S. Moodera, A. Barry, and J. M. D. Coey, *Science*, **282**, 85 (1998).
- [14] D. Orgassa, H. Fujiwara, T. C. Schulthess, and W. H. Butler, *Phys. Rev. B*, **60**, 13237 (1999).
- [15] G. A. de Wijs and R. A. de Groot, *Phys. Rev. B*, **64**, 020402 (2001).
- [16] S. J. Hashemifar, P. Kratzer, and M. Scheffler, *Phys. Rev. Lett.*, **94**, 096402 (2005).
- [17] Y. J. Jin and J. I. Lee, *Phys. Stat. Sol. (a)* accepted (2008).
- [18] Y. Byun and J. I. Lee, *J. of Kor. Mag. Soc.*, **15**(5), 257 (2005).
- [19] W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.*, **140**, A1133 (1965).
- [20] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 3865 (1996); *ibid.* **78**, 1396(E) (1997).
- [21] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B*, **24**, 864 (1981), and references therein; M. Weinert, E. Wimmer, and A. J. Freeman, *ibid.*, **26**, 4571 (1982).
- [22] D. D. Koelling and B. N. Harmon, *J. Phys. C*, **10**, 3107 (1977).

## Magnetism and Half-metallicity of Co<sub>2</sub>TiSn(001) Surfaces: A First-principles Study

Y. J. Jin<sup>1,2\*</sup> and J. I. Lee<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Department of Physics, Inha University, Incheon 402-751, Korea*

<sup>2</sup>*Department of Physics, College of Science, Yanbian University, Yanji, Jilin 133002, China*

(Received 22 July 2008, in final form 7 August 2008)

The electronic structures, magnetism, and half-metallicity of the full-Heusler Co<sub>2</sub>TiSn (001) surfaces have been investigated by using the all-electron full-potential linearized augmented plane wave method within the generalized gradient approximation. We have considered both of the Co atoms terminated (Co-term) and the TiSn atoms terminated (TiSn-term) surfaces. From the calculated density of states, we found that the half-metallicity was destroyed at the surface of the Co-term, while the half-metallicity was retained at the TiSn-term. For the surface of the Co-term, due to the reduced coordination number the occupied minority *d*-states were shifted to high energy regions and that cross the Fermi level, thus destroy the surface half-metallicity. On the other hand the surface states at the surface of the TiSn-term were located just below the Fermi level, which reduces the minority spin-gap with respect to that of the center layer. The calculated magnetic moment of the surface Co atom for the Co-term was increased by 10 % to 1.16  $\mu_B$  with respect to that of the inner-layers, while the magnetic moment of the subsurface Co atom in the TiSn-term has almost same value of the inner-layers (1.03  $\mu_B$ ).

**Keywords** : half-metallicity, Co<sub>2</sub>TiSn, Heusler compound, electronic structures