

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ
И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

УДК 546.303

ПОЛУМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ ФЕРРОМАГНЕТИКИ,
СПИНОВЫЕ БЕСЩЕЛЕВЫЕ ПОЛУПРОВОДНИКИ
И ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ПОЛУМЕТАЛЛЫ НА ОСНОВЕ
СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА: ТЕОРИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТ

© 2021 г. В. В. Марченков^{a, b, *}, В. Ю. Ирхин^a

^aИнститут физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия

^bУральский федеральный университет, ул. Мира, 19, Екатеринбург, 620002 Россия

*e-mail: march@imp.uran.ru

Поступила в редакцию 03.08.2021 г.

После доработки 18.08.2021 г.

Принята к публикации 19.08.2021 г.

Представлен обзор теоретических и экспериментальных исследований электронной структуры, электронных и магнитных свойств различных систем сплавов Гейслера, находящихся в состояниях полуметаллического ферромагнетика, спинового бесщелевого полупроводника и топологического полуметалла. Эти вещества обладают необычными, весьма чувствительными к внешним воздействиям магнитными и электронными характеристиками, что связано с наличием в них энергетических щелей и экзотических возбуждений. Рассмотрены особенности поведения и эволюция электронной структуры и свойств в каждом из этих состояний, а также при переходе между ними. Возможность целенаправленно управлять свойствами таких материалов открывает перспективы для их практического применения.

Ключевые слова: сплавы Гейслера, полуметаллические ферромагнетики, спиновые бесщелевые полупроводники, топологические полуметаллы

DOI: 10.31857/S0015323021120068

ОГЛАВЛЕНИЕ

1. ВВЕДЕНИЕ.....	1221
2. СПЛАВЫ ГЕЙСЛЕРА. ТИПЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ.....	1222
3. ПРОСТЫЕ МОДЕЛИ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ, ПОЛУМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ, СПИНОВЫХ БЕСЩЕЛЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ПОЛУМЕТАЛЛОВ...1224	
4. ПОЛУМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ ФЕРРОМАГНЕТИКИ.....	1225
4.1. Приближение среднего поля и корреляционные эффекты. Учет неквазичастичных состояний.....	1225
4.2. Кинетические свойства.....	1227
4.3. Расчеты электронной зонной структуры.....	1228
4.4. Оптические свойства.....	1231
5. СПИНОВЫЕ БЕСЩЕЛЕВЫЕ ПОЛУПРОВОДНИКИ.....	1232
6. ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ПОЛУМЕТАЛЛЫ...1234	
7. ЭВОЛЮЦИЯ СОСТОЯНИЙ В СПЛАВАХ ГЕЙСЛЕРА.....	1238

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	1241
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	1242

1. ВВЕДЕНИЕ

Поиск, создание и всестороннее теоретическое и экспериментальное исследование новых магнитных материалов и наноструктур на их основе представляют большой интерес и актуальны для практики, поскольку эти системы могут быть использованы в современной микро- и нанoeлектронике, а также спинтронике. Сплавы Гейслера, находящиеся в состояниях полуметаллического ферромагнетика, спинового бесщелевого полупроводника и топологического полуметалла, относятся к таким материалам: в них можно реализовать высокую степень поляризации носителей тока по спину, а следовательно, создать спиновый ток.

В современной научной литературе имеется несколько обзоров, посвященных полуметаллическим ферромагнетикам (ПМФ), спиновым бесщелевым полупроводникам (СБП), топологическим полуметаллам (ТПМ), которые, в частности, реализуются в сплавах Гейслера (см., напр., [1–3]). Однако эти обзоры либо опубликованы более 10 лет

тому назад, либо посвящены описанию широкого спектра функциональных характеристик сплавов Гейслера, где состояниям ПМФ, СБП и ТПМ уделено недостаточное внимание. Поэтому цель данного обзора – обсудить современное состояние в области теоретического и экспериментального изучения гейслеровых сплавов в упомянутых состояниях.

Исследование полуметаллических ферромагнетиков как класса магнитных материалов началось с теоретического предсказания в 1983 г. Р. де Гроотом, выполнившим зонные расчеты соединения NiMnSb [4]. Основной особенностью ПМФ является наличие щели на уровне Ферми для электронных состояний с одной из проекций спина. В простом приближении среднего поля это означает 100%-спиновую поляризацию носителей тока, однако учет корреляционных эффектов и некогерентных состояний существенно усложняет физическую картину. Таким образом, экспериментальное подтверждение ПМФ-состояния оказывается не такой простой задачей. Здесь может помочь исследование кинетических свойств. В частности, в механизмах рассеяния доминируют двухмагнитные процессы, что приводит к аномальным температурным зависимостям кинетических свойств.

С точки зрения практических приложений, важно изучать системы, обладающие свойствами, близкими к классическим полупроводникам, которые хорошо исследованы, например, EuO, EuS, HgCr₂Se₄ и т.п. Аналогичными ПМФ-системами являются вырожденные ферромагнитные полупроводники. Недавно произошло определенное изменение терминологии: сейчас говорят о полуметаллическом ферромагнетизме в высококачественных монокристаллах легированного HgCr₂Se₄ (см., напр., [5]).

Близкими к ПМФ являются предсказанные в 2008 г. СБП-материалы [6]. В них также присутствует широкая ($\Delta E \sim 1$ эВ) энергетическая щель вблизи уровня Ферми для одной проекции спина носителей тока, а для носителей с противоположным направлением спина имеется нулевая щель, подобно тому, что наблюдается в классических бесщелевых полупроводниках [7].

В последние годы были обнаружены экзотические материалы с нетривиальной топологией – топологические полуметаллы, в которых возникают новые квантовые явления, в частности, связанные с “безмассовыми” фермионами дираковского типа. Экспериментально ТПМ-материалы в основном исследованы на примере дихалькогенидов переходных металлов MX_2 ($M = \text{Mo}, \text{W}, \text{V}$ и др.; $X = \text{Te}, \text{S}, \text{Se}$ и др.) [8], но к настоящему времени имеются первые публикации о наблюдении ТПМ-состояния и в сплавах Гейслера [9].

Поскольку многие сплавы Гейслера с общей формулой X_2YZ (X, Y – как правило, $3d$ -элементы, Z – s -, p -элементы таблицы Менделеева) относят-

ся к ПМФ, СБП и ТПМ-материалам [3, 6, 9–11], изучение электронной структуры и магнитного состояния таких сплавов весьма перспективно. При этом положение и ширина запрещенной зоны могут довольно сильно различаться в разных системах. Эти параметры можно варьировать путем изменения $3d$ -, s - и p -элементов в сплавах Гейслера X_2YZ , изменяя тем самым электронные свойства.

Обычно о возникновении ПМФ-, СБП- и ТПМ-состояний судят по результатам расчетов электронной зонной структуры и/или данным оптических измерений. Однако они должны проявляться и в поведении электронных транспортных свойств (электро- и магнитосопротивление, эффект Холла, термоэдс и др.) и магнитных характеристик. Поэтому, наряду с первопринципными расчетами мы анализируем корреляции между всеми этими свойствами.

В обзоре рассмотрены конкретные сплавы Гейслера. Экспериментальные и теоретические исследования в этом направлении позволяют описать эволюцию электронной структуры и свойств соединений Гейслера с единых позиций, понять особенности проявления состояний полуметаллического ферромагнетика, спинового бесщелевого полупроводника и топологического полуметалла, их общность и различия.

После общего краткого введения в физику и кристаллографию сплавов Гейслера (разд. 2) мы рассмотрим классы ПМФ-, СБП- и ТПМ-соединений (разд. 3–6). В разд. 7 мы проведем общее обсуждение возможной реализации таких состояний и переходов между ними в гейслеровых сплавах.

2. СПЛАВЫ ГЕЙСЛЕРА. ТИПЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

Немецким химиком Фрицем Гейслером (Fritz Heusler) в 1903 г. были открыты сплавы Гейслера [12] – в частности, соединение Cu₂MnAl, проявляющее сильные ферромагнитные свойства с высокой точкой Кюри (хотя каждый из элементов, его составляющих – Cu, Mn и Al, не является ферромагнетиком). С тех пор найдено около 1500 различных сплавов Гейслера, которые обладают многообразными функциональными свойствами (рис. 1). Среди них: соединения с эффектом памяти формы [13–15] и гигантским магнитокалорическим эффектом [15–17], термоэлектрики [18–20], сплавы с необычными тепловыми [20–22] и полупроводниковыми свойствами [19, 20, 23], сверхпроводники [3, 24, 25] и многие другие.

Сплавы Гейслера – интерметаллические соединения с химической формулой XYZ (половинные сплавы Гейслера), X_2YZ (полные сплавы Гейслера) и $XX'Z$ (четверные сплавы Гейслера). Эти



Рис. 1. Различные типы сплавов Гейслера и их функциональные свойства.

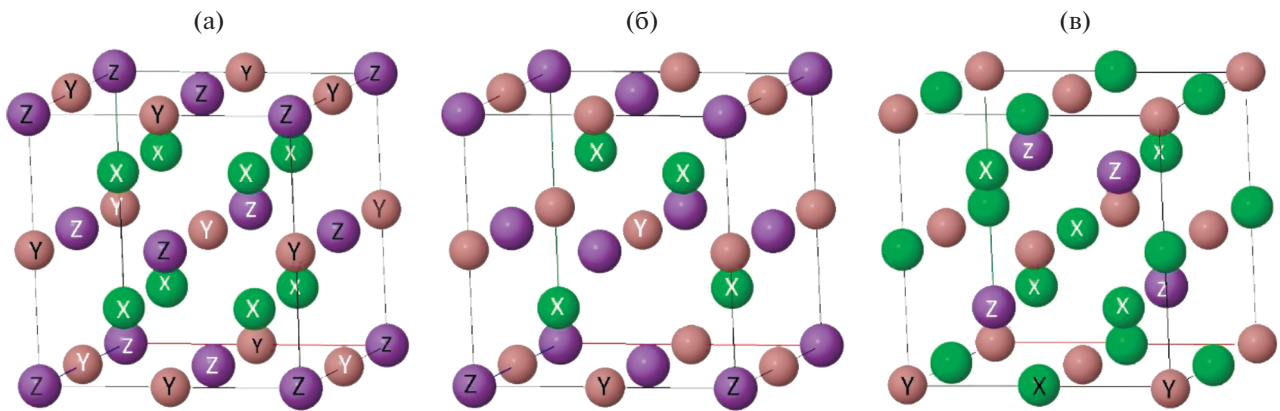


Рис. 2. Кристаллические ячейки соединений Гейслера: (а) полный сплав X_2YZ (структура $L2_1$), (б) половинный сплав XYZ (структура $C1_b$) и (в) инверсный сплав X_2YZ (структура X_4).

соединения формируются из многих комбинаций элементов, где X , X' и Y – как правило, переходные, редкоземельные или благородные металлы (например, Ni, Co, Pd, Cu, Pt, Au, Mn, Fe, Co, Ti, V, Zr, Nb, Hf и др.), Z – элементы IIIB-VB группы: Al, Ga, In, Si, Sn, Ge, Sb и др.

На рис. 2 схематически представлены кристаллические ячейки полного, половинного и инверсного сплавов Гейслера со структурой $L2_1$, $C1_b$ и X_4 соответственно.

Тройные интерметаллические соединения Гейслера с общей формулой X_2YZ при кристаллизации сначала упорядочиваются в высокотемпературную аустенитную фазу с ГЦК-решеткой, состоящей из 8 элементарных ячеек типа $B2$ (CsCl). В зависимости от элементного состава, образующего основную формулу соединения, и координат конкретных атомов, различают три вида упорядоченных сверхструктур. Большая часть соеди-

нений X_2YZ относится к так называемым полным сплавам Гейслера $L2_1$ (типа Cu_2MnAl) с пространственной группой $Fm\bar{3}m$ (рис. 2а).

Другая группа соединений, называемых половинными сплавами Гейслера с формулой XYZ , имеет структуру типа $C1_b$ (типа $MgAgAs$) (рис. 2б). В структуре $L2_1$ все четыре подрешетки в ГЦК-решетке заполнены атомами X , Y и Z , тогда как в структуре $C1_b$ некоторые из позиций пусты.

Третье семейство образуют соединения типа Hg_2CuTi , называемого инверсной структурой Гейслера X_4 . Имеет место сходство с основным структурным типом Гейслера $L2_1$ с формулой X_2YZ , но в инверсионном варианте атомный номер элемента Y выше, чем элемента X (рис. 2в).

Формирование структуры сплава Гейслера при затвердевании расплава возможно либо через полностью разупорядоченную фазу $A2$ ($A2 \rightarrow L2_1$),

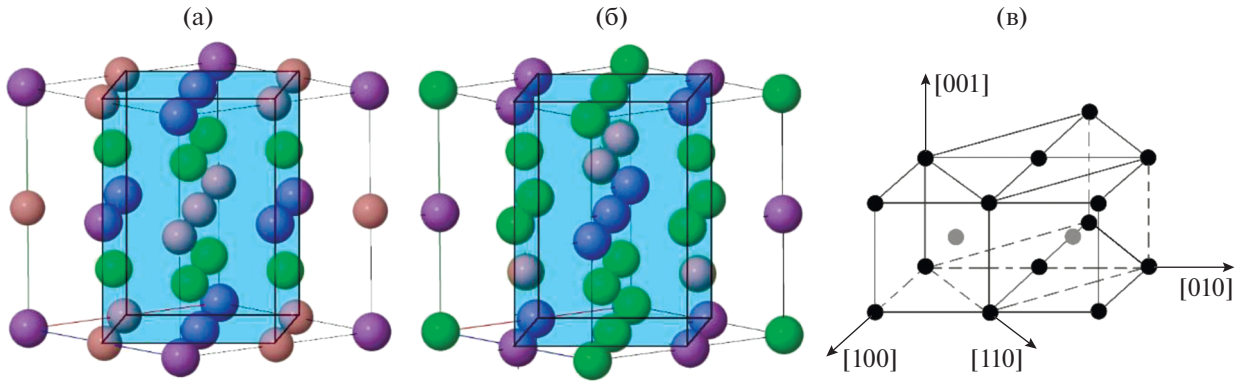


Рис. 3. Кристаллическая структура полного сплава Гейслера X_2YZ с типом решетки Cu_2MnAl (а) и инверсионного сплава Гейслера с решеткой типа Hg_2TiCu (б). Голубым цветом выделены тетрагональные ячейки. (в) Схематическое изображение структурного механизма перестройки кубической решетки в тетрагональную по Бейну.

либо через промежуточную частично упорядоченную фазу $B2$. При дальнейшем охлаждении или под действием нагрузки и магнитного поля сплавы могут испытывать мартенситные превращения с образованием низкосимметричных фаз — как модулированных (многослойных), так и немодулированных, например, тетрагональная структура ОЦТ $L1_0$ ($I4/mmm$), или же орторомбические, или моноклинные многослойные структуры типа $10M$, $14M$, $6O$, $3R$ и т.п. На рис. 3 представлены тетрагональные искажения аустенитной решетки для полного и инверсионного сплавов Гейслера.

Следует упомянуть, что структурным переходам из аустенита в мартенсит, наблюдаемым в ферромагнетиках, как и в других немагнитных метастабильных аустенитных сплавах, также предшествуют различные предпереходные предмартенситные явления: смягчение модулей упругости, формирование в решетке мягких фононных мод и аномальных по амплитуде атомных смещений, визуализируемых по данным нейтрографии, рентгеноструктурного фазового анализа, наблюдения твида и диффузного рассеяния в изображениях, полученных методом просвечивающей электронной микроскопии и т.п.

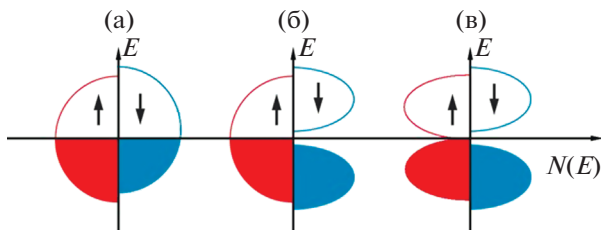


Рис. 4. Схематическое изображение плотности состояний ферромагнетика (а), полуметаллического ферромагнетика (б) и спинового бесщелевого полупроводника (в). Стрелками обозначены направления спинов для электронных состояний. В отличие от случая (б), в случае (в) плотность состояний на уровне Ферми равна нулю для обеих проекций спина.

3. ПРОСТЫЕ МОДЕЛИ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ, ПОЛУМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ, СПИНОВЫХ БЕСЩЕЛЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ПОЛУМЕТАЛЛОВ

Рассмотрим простые качественные модели обычных ферромагнетиков, полуметаллических ферромагнетиков, спиновых бесщелевых полупроводников и топологических полуметаллов. На рис. 4 схематически представлены соответствующие плотности состояний.

В ферромагнитном металле при $T = 0$ все электронные состояния ниже уровня Ферми E_F заняты, выше — свободны, а магнитное упорядочение приводит к небольшой поляризации носителей тока (рис. 4а). В случае полуметаллических ферромагнетиков и спиновых бесщелевых полупроводников имеются следующие особенности. Для ПМФ характерно наличие щели на уровне Ферми для электронных состояний со спином вниз, которая отсутствует для носителей со спином вверх (рис. 4б). В простой картине это означает 100%-ную поляризацию носителей тока по спину, однако в реальных системах ситуация гораздо более сложная и необходимо учитывать корреляционные эффекты и некогерентные состояния. Для СБП (рис. 4в), как и в случае ПМФ, имеется конечная щель для одной из проекций спина, для другой же проекции щель нулевая, подобно тому, как это наблюдается для классических бесщелевых полупроводников [7].

В топологических материалах (рис. 5) в результате сильного спин-орбитального взаимодействия, приводящего к инверсии зоны проводимости и валентной зоны, возникает нетривиальная топология электронной зонной структуры. К таким материалам относят топологические изоляторы, дираковские и вейлевские полуметаллы. В объеме топологических изоляторов имеется характерная энергетическая щель (рис. 5а) и “металли-

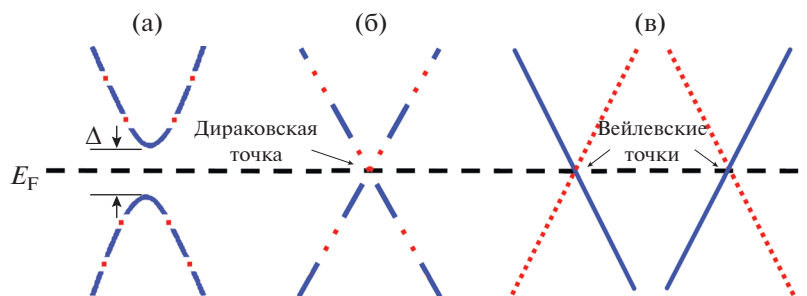


Рис. 5. Схематическое изображение зонной структуры (а) массивных дираковских со щелью Δ , (б) "безмассовых" дираковских и (в) вейлевских фермионов. Последниe возникают при распаде дираковской точки. Кривые и прямые, состоящие из сплошных и штриховых линий, представляют собой дважды вырожденные зоны, а только из сплошных или штриховых — невырожденные.

ческие" состояния на поверхности. В топологических дираковских и вейлевских полуметаллах в объеме также имеется щель, возникающая вследствие сильного спин-орбитального взаимодействия, за исключением точек пересечения зон — в точках Дирака (рис. 5б) и Вейля (рис. 5в) соответственно.

Вблизи этих точек дисперсия зон во всех трех направлениях импульсного пространства линейна, и низкоэнергетические возбуждения могут быть описаны гамильтонианами Дирака или Вейля.

В разд. 4–6 указанные классы материалов будут рассмотрены более подробно.

4. ПОЛУМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ ФЕРРОМАГНЕТИКИ

Случай "сильного" ферромагнетизма с большим значением спинового расщепления составляет противоположность слабым коллективизированным ферромагнетикам. Еще в теории Стонера рассматривали ферромагнитное решение, в котором спиновое расщепление велико, так что одна спиновая подзона пуста, а вторая — частично заполнена (решение Вольфарта, см., напр., [1, 2]). Считалось, что такая ситуация может соответствовать чистым ферромагнитным металлам группы железа, однако зонные расчеты опровергли это предположение.

В то же время зонные расчеты привели к открытию реальных магнетиков, которые подобны сильным стонеровским ферромагнетикам. Расчеты де Гроота и др. зонной структуры сплава Гейслера NiMnSb [4], PtMnSb [4, 27, 28] с кристаллической структурой $C1_b$ демонстрируют, что уровень Ферми для одной из проекций спина находится в энергетической щели. Так как эти системы для одной из проекций спина ведут как изоляторы, они и были названы "полуметаллическими ферромагнетиками". Позже подобная картина была получена для CoMnSb [29] и ферримагнитного FeMnSb [30]. Для CrMnSb было найдено состояние, названное "полуметаллическим антиферромагнетиком" [27]. Однако его следует рассматри-

вать, скорее, как скомпенсированный ферримагнетик; в случае сплавов Гейслера такие состояния будут обсуждаться в разд. 7.

Интерес к ПМФ был связан в первую очередь с их уникальными магнитооптическими свойствами [27, 28], которые тесно связаны с электронной структурой около уровня Ферми (отсутствие состояний с одной проекцией спина), что приводит к сильной асимметрии оптических переходов. В частности, магнитооптический эффект Керра наблюдали в сплаве PtMnSb, для которого этот эффект особенно велик из-за сильных релятивистских взаимодействий в атоме Pt.

До сих пор о наличии или отсутствии ПМФ-состояния обычно судят по результатам зонных расчетов плотности электронных состояний (см., напр., работы [31–33] и ссылки в них), когда для носителей со спином вверх имеется конечная плотность состояний, а для носителей со спином вниз возникает щель на E_F .

Экспериментально определить величину спиновой поляризации P можно с помощью одного из прямых методов — рентгеновской фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES). В работах [34, 35] с помощью этого метода были экспериментально исследованы тонкие пленки сплава Гейслера Co₂MnSi. Было показано, что P достигает величины около 93% даже в области комнатных температур [35].

4.1. Приближение среднего поля и корреляционные эффекты. Учет неквазичастичных состояний

Помимо качественного рассмотрения и расчетов зонной структуры, для обсуждаемых систем были развиты теоретические подходы, использующие модели с сильными межэлектронными корреляциями [1, 2]. Основными здесь являются однозонная модель Хаббарда, учитывающая внутризонное кулоновское взаимодействие, и двухзонная s - d -обменная модель, в которой рассматривается взаимодействие локализованных моментов с

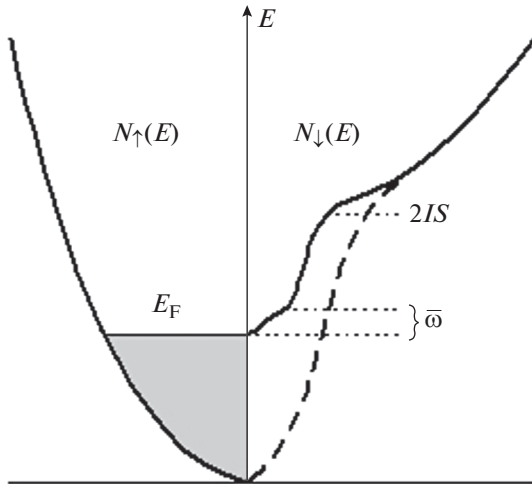


Рис. 6. Плотность состояний в s - d -модели ПМФ с параметром обмена $I > 0$, $2IS$ – спиновое расщепление, ω – характерная магнонная частота. Штриховая линия – “хвост” неквазичастичных состояний, пропорциональный $T^{3/2}$.

подвижными электронами проводимости. Гамильтониан последней имеет вид

$$H = \sum_{k\sigma} t_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_q J_q S_{-q} S_q - I \sum_{i\sigma\sigma'} (S_i \sigma_{\sigma\sigma'}) c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma'}, \quad (1)$$

где t_k – зонная энергия, $c_{i\sigma}$ и S_i – операторы электронов проводимости и локализованных спинов, σ – матрицы Паули, J_q – фурье-образы обменных интегралов между локализованными d -состояниями, I – параметр s - $d(f)$ -обменного взаимодействия.

Благодаря особой зонной структуре ПМФ важную роль в них играют неквазичастичные (НКЧ) состояния, возникающие вблизи уровня Ферми из-за эффектов электронных корреляций [2, 36, 37]. Эти состояния выходят за рамки теории среднего поля (в частности, теории Стонера), в которой имеется только две квазичастичные спин-расщепленные спиновые подзоны.

Появление НКЧ-состояний в запрещенной зоне вблизи уровня Ферми – один из наиболее интересных корреляционных эффектов, характерных для ПМФ. Происхождение этих состояний связано со спин-поляронными процессами: низкоэнергетические электронные возбуждения со спином вниз, запрещенные для ПМФ в стандартной одночастичной схеме, оказываются возможными как суперпозиция возбуждений электронов со спином вверх и виртуальных магновнов при $T = 0$ и реальных магновнов при конечных T (рис. 6). Формально они описываются мнимой частью электронной собственной энергии, которая определяется сверткой магнонной функции Грина и функции Грина носителей с противополо-

ложной проекцией спина. Таким образом, в энергетической щели могут возникать состояния с обеими проекциями спина.

При нулевой температуре плотность этих неквазичастичных состояний исчезает на уровне Ферми, но резко возрастает на масштабе энергий порядка характерной магнонной частоты ω . Однако при повышении температуры этот вклад в плотность состояний растет пропорционально отклонению средней проекции спина $\langle S_z \rangle$ от максимального значения S , т.е. согласно закону Блоха $T^{3/2}$ (а не экспоненциально, как было бы в теории среднего поля). Это оказывается важным для поведения спиновой поляризации электронов проводимости.

Неквазичастичные состояния впервые были теоретически рассмотрены Эдвардсом и Герцем [38] в рамках широкозонной модели Хаббарда для коллективизированных электронных ферромагнетиков. Позже было показано [39], что для узкозонной модели Хаббарда с бесконечным кулоновским отталкиванием весь спектральный вес для одной проекции спина принадлежит неквазичастичным состояниям, что имеет решающее значение для проблемы устойчивости сильного ферромагнетизма и для адекватного описания соответствующего спектра возбуждений.

Неквазичастичные состояния в s - d -обменной модели магнитных полупроводников рассматривали в работе [40]. Было показано, что в зависимости от знака s - d -обменного интеграла I эти состояния могут образовываться или только ниже энергии Ферми E_F , или только выше. Позже выяснилось, что полуметаллические ферромагнетики – естественные системы для теоретических и экспериментальных исследований таких состояний. В качестве примера весьма необычных свойств НКЧ-состояний отметим, что они могут вносить вклад в линейный по температуре член в электронной теплоемкости [41, 42], несмотря на то что их плотность на E_F обращается в нуль при $T = 0$.

Существование НКЧ-состояний на поверхности ПМФ было предсказано в [43]. Они могут быть обнаружены поверхностно-чувствительными методами, такими как ARPES [44] или методом спин-поляризованной сканирующей туннельной микроскопии [45]. Такие состояния могут быть важны при рассмотрении топологических мотивов, поскольку в топологических материалах поверхностные состояния играют принципиальную роль.

Плотность неквазичастичных состояний была рассчитана из первых принципов для NiMnSb [46]. Недавно ПМФ-поведение и наличие НКЧ-состояний было непосредственно обнаружено в SrO_2 с помощью объемно-чувствительной фотоэмиссионной спектроскопии с разрешением по спину [47]. В этой работе также была обнаружена существенная зависимость средней спиновой поляризации от температуры (около 100% при 40 К

и 40% при 300 К). При 100 К была обнаружена особая деполяризация на уровне Ферми, которая может быть связана с НКЧ-состояниями.

Неквазичастичные состояния вносят значительный вклад в магнитные и транспортные свойства [36]. Теоретическое исследование спинового транспорта в ПМФ при конечных температурах с учетом зонных неосновных спиновых состояний НКЧ было рассмотрено в работе [48], где была обнаружена спин-холловская проводимость, пропорциональная $T^{3/2}$.

4.2. Кинетические свойства

При простом рассмотрении ПМФ-проводник можно представить в виде системы двух параллельно соединенных проводников [49, 50]. Один из них представляет собой канал проводимости для носителей со спином вверх, второй – для носителей со спином вниз. При температурах, много меньших величины щели, работает только первый из этих проводящих каналов.

Спиновая поляризация P на уровне Ферми E_F материала определяется как

$$P = (N_{\uparrow}(E_F) - N_{\downarrow}(E_F)) / (N_{\uparrow}(E_F) + N_{\downarrow}(E_F)), \quad (2)$$

где $N_{\uparrow}(E_F)$ и $N_{\downarrow}(E_F)$ – плотности электронных состояний на уровне Ферми E_F со спином вверх и вниз соответственно. В ферромагнетиках или ферримагнетиках P имеет конечное значение ниже температуры Кюри T_C . В теории среднего поля для ПМФ с точностью до экспоненциально малых вкладов либо $N_{\uparrow}(E_F) = 0$, либо $N_{\downarrow}(E_F) = 0$, так что ниже T_C электроны на уровне Ферми практически полностью поляризованы ($P = 100\%$). Однако при учете эффектов электрон-магнетонного взаимодействия спиновая поляризация демонстрирует сложное температурное поведение (грубо говоря, как относительная намагниченность) благодаря вкладу неквазичастичных состояний [2, 36, 37] (см. также рис. 6).

При комнатной температуре высокая степень спиновой поляризации носителей тока может реализоваться в ПМФ-сплавах с высокими значениями температуры Кюри T_C . К таким материалам относятся соединения Гейслера на основе кобальта Co_2YZ , где и наблюдаются большие значения P [51, 52]. В частности, высокая степень спиновой поляризации при комнатной температуре была обнаружена в сплавах Co_2MnSi , Co_2FeSi , $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{Al}$ [35, 53–55].

В обычных ферромагнитных металлах магнитный вклад в сопротивление определяется одномагнетонными процессами:

$$\rho(T) \sim T^2 N_{\uparrow}(E_F) N_{\downarrow}(E_F) \exp(-T/T^*), \quad (3)$$

где $T^* \sim q_1^2 T_C$ – характерный масштаб для этих процессов, $q_1 \sim \Delta/v_F$, $\Delta = 2IS$ – спиновое расщепление (энергетическая щель). В полуметаллических ферромагнетиках этот вклад отсутствует, поскольку $N_{\downarrow}(E_F) = 0$. Процессы двухмагнетонного рассеяния [56] приводят к степенной температурной зависимости сопротивления $\rho(T) \sim T^n$, а также к отрицательному линейному магнитосопротивлению. При этом $n = 9/2$ при $T < T^{**}$ и $n = 7/2$ при $T > T^{**}$, здесь $T^{**} \sim q_2^2 T_C$. В простой однозонной модели ПМФ, где $E_F < \Delta$, имеем $q_2 \sim (\Delta/W)^{1/2}$ (W – ширина зоны). Вообще говоря, q_2 может быть достаточно малым при условии, что запрещенная зона намного меньше W , что типично для реальных ПМФ-систем [2, 56].

Важным признаком полуметаллического ферромагнетизма является необычное поведение скорости ядерной спин-решеточной релаксации $1/T_1$. Дело в том, что благодаря отсутствию плотности состояний на уровне Ферми для одной из проекций спина обычный линейный по температуре корринговский вклад, пропорциональный $T N_{\uparrow}(E_F) N_{\downarrow}(E_F)$, отсутствует. Таким образом, доминирующим должен быть вклад двухмагнетонных процессов, вычисление которого дает $1/T_1 \sim T^{5/2}$ [1].

Об экспериментальном наблюдении предсказанной в [56] зависимости $\rho(T) \sim T^{9/2}$ сообщили в работе [57], где изучали температурные зависимости электросопротивления сплавов Гейслера на основе Co_2FeSi с заменой половины атомов Si на Al, Ga, Ge, In и Sn. Авторы [57] показали, что в области низких температур до 50–80 К зависимости $\rho(T)$ изученных сплавов можно описать формулой $\rho(T) = \rho_0 + aT^2 + bT^{9/2}$, где ρ_0 – остаточное сопротивление, a и b – коэффициенты.

В работе [58], где измеряли температурные зависимости сопротивления $\rho(T)$ монокристалла Co_2FeSi в магнитных полях от 0 до 150 кЭ, было показано, что имеется три температурных интервала, в которых сопротивление по-разному зависит от температуры и магнитного поля (рис. 7): 1) ниже 30 К $\rho(T) \propto AT^n$ с $n \approx 2$ и коэффициентом $A \propto H^2$; 2) в интервале от 30 до 60 К $\rho(T) \propto CT^n$ с $n \approx 4$ и коэффициентом $C \propto -H$; 3) выше 65 К $\rho(T) \propto BT^n$ с $n \approx 2$ и коэффициентом $B \propto H^{-2}$.

Полученные экспериментальные результаты (рис. 7) показывают, что в интервале температур 30 К $< T < 60$ К наблюдается степенная температурная зависимость электросопротивления с большим показателем степени и линейным отрицательным магнитосопротивлением. По-видимому, это есть проявление процессов двухмагнетонного рассеяния: они являются основным механизмом рассеяния носителей тока, определяющим поведение электро- и магнитосопротивления сплава в этом температурном интервале.

Отрицательное линейное по полю магнитосопротивление наблюдали во многих ПМФ-системах (см., напр., [59–63]). На рис. 8 представлены полевые зависимости магнитосопротивления

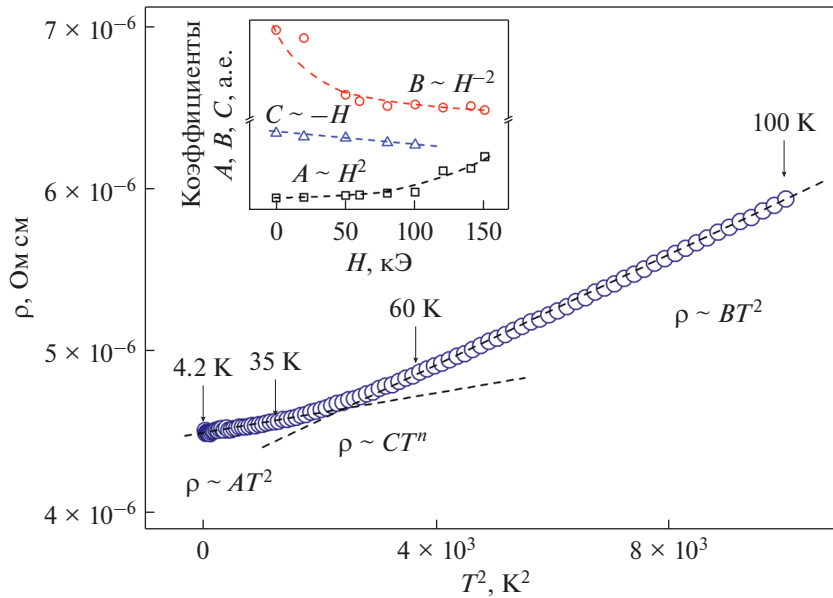


Рис. 7. Зависимости электросопротивления сплава Co_2FeSi от квадрата температуры. На вставке показаны полевые зависимости коэффициентов A , B и C .

$\Delta\rho/\rho_0$ сплавов X_2YZ , полученные с использованием данных [59–63]. Видно, что в сильных магнитных полях $\Delta\rho/\rho_0$ отрицательно и изменяется по закону, близкому к линейному по полю. Такое поведение может быть следствием двухмагнанных процес-

сов рассеяния [56], которые особенно хорошо проявляются в ПМФ при температурах, много меньших величины щели.

Авторы работы [53], где измеряли электросопротивление и исследовали гальваномагнитные свойства монокристалла Co_2FeSi , представили температурно-зависящую часть сопротивления в виде суммы вкладов от электрон-фононного ρ_{ph} и электрон-магннного ρ_M процессов рассеяния. Последний из них был записан в виде

$$\rho_M(T) = cT^2 e^{-\Delta/T}, \quad (4)$$

где c – параметр эффективности электрон-магннного рассеяния, Δ – величина щели в энергетических единицах. Путем подгонки параметров авторы смогли описать экспериментальную кривую и определить величину щели $\Delta = 103$ К, что соответствует энергии $k_B\Delta = 8.9$ мэВ. По утверждению самих авторов, величина щели намного меньше по сравнению с теоретическими расчетами (ее предсказанный размер больше, чем на порядок). Поэтому представляется более разумной трактовка, учитывающая двухмагннных процессы рассеяния, которые дают не экспоненциально малые, а степенные вклады в сопротивление.

4.3. Расчеты электронной зонной структуры

Исследования магнитных свойств сплавов Гейслера Co_2YZ показали, что в них хорошо выполняется правило Слэтера–Полинга [51], описывающее связь между числом валентных электронов и магнитным моментом (рис. 9). В принципе оно позволяет заранее предсказать полный магнитный момент таких сплавов.

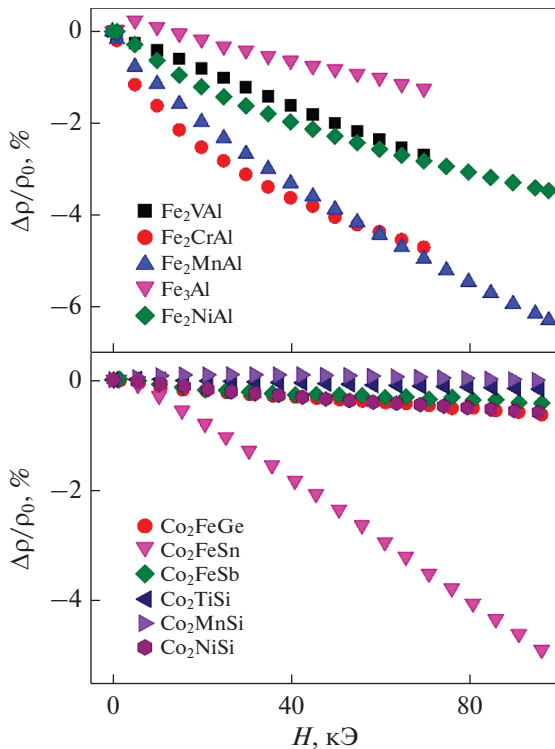


Рис. 8. Полевые зависимости магнитосопротивления $\Delta\rho/\rho_0$ сплавов Fe_2YAl , Co_2FeZ и Co_2YSi при $T = 4.2$ К.

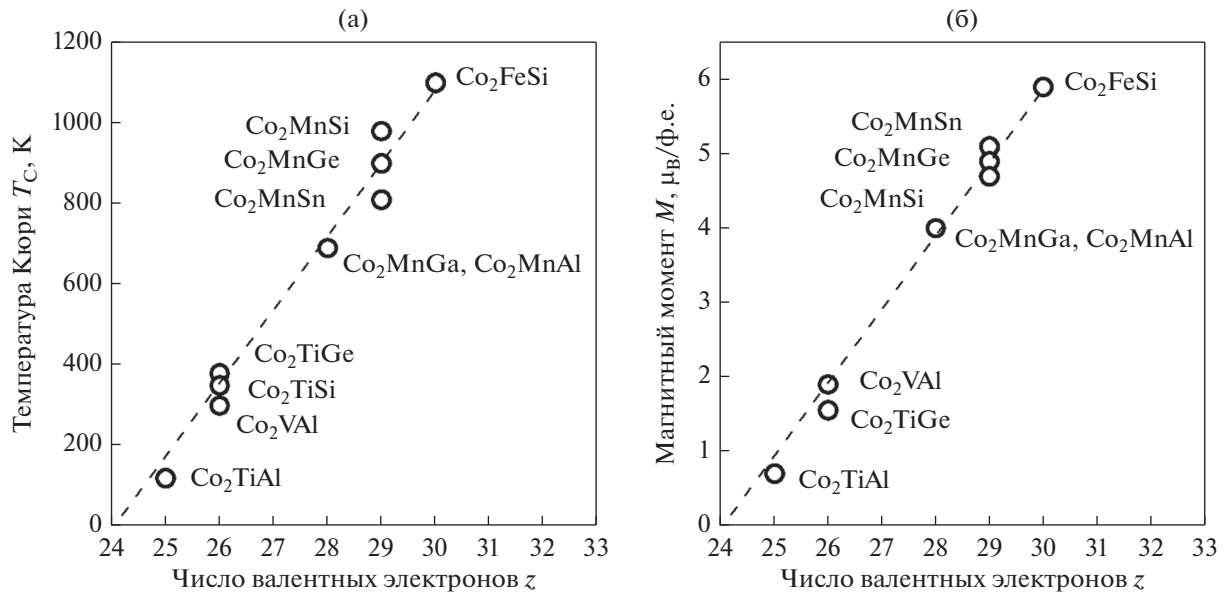


Рис. 9. Температура Кюри (а) и полный магнитный момент (б) некоторых сплавов Гейслера на основе кобальта в зависимости от полного числа валентных электронов.

В полуметаллических ферромагнетиках правило Слэтера–Полинга можно записать следующим образом [51]:

$$M = z - 24, \tag{5}$$

где M – магнитный момент на формульную единицу в магнетонах Бора, z – полное число валентных электронов.

Для сплавов Co_2YZ наблюдается близкая к линейной зависимость температуры Кюри T_C от числа валентных электронов (рис. 9а). Максимальное значение T_C имеет место в случае наибольшего числа валентных электронов. Как видно из рис. 9 (см. также [53]), сплав Co_2FeSi имеет максимальную температуру Кюри $T_C = 1100$ К и наибольший магнитный момент $5.97 \mu_B/\text{ф.е.}$ при 5 К.

Ситуация качественно различных состояний для спина вверх и для спина вниз, которая реализована в ПМФ, является нетривиальной для общей теории коллективизированного магнетизма [1]. Схема формирования “полуметаллического” состояния в сплавах Гейслера $XMnZ$ и X_2MnZ со структурами $C1_b$ и $L2_1$ может быть описана следующим образом [4, 28, 64, 65]. В пренебрежении гибридизацией атомных состояний X и Z , d -зона марганца характеризуется широкой энергетической щелью между связывающими и антисвязывающими состояниями. Из-за сильного внутриатомного (хундовского) обмена для ионов марганца в ферромагнитном состоянии подзоны со спинами вверх и вниз значительно раздвинуты. Одна из спиновых подзон близко подходит к p -зоне лиганда, и поэтому соответствующая щель частично или полностью размыта p - d -гибридизацией. Энергетическая щель в другой подзоне сохра-

няется и может совпасть при известных условиях с уровнем Ферми, что и дает ПМФ-состояние.

Для структуры $C1_b$ мы имеем истинную щель, а для структуры $L2_1$ – глубокую псевдощель. Это связано со значительным изменением в характере p - d -гибридизации (особенно между состояниями p - и t_{2g} -природы) в отсутствие центра инверсии, что имеет место для структуры $C1_b$. Таким образом, последняя структура более благоприятна для ПМФ-состояния. Согласно [66], подобные факторы ответственны за щель в парциальной плотности состояний для одной из позиций марганца ($Mn(I)$) в соединении Mn_4N , структура которого получается из структуры X_2MnZ удалением некоторых атомов. Качественно подобный механизм, который основывается на сильном обмене Хунда и гибридизации между d -состояниями хрома и p -состояниями кислорода, рассматривается в [67] для CrO_2 .

Стабильность ферромагнитного состояния является следствием различия в p - d -гибридизации для состояний с противоположными проекциями спина (см. обсуждение в [64]). Для описания такой ситуации Кюблер и др. [64] ввели термин “ковалентный магнетизм” и подчеркнули отличие картины спектра от модели Стонера, где плотности состояний с противоположными проекциями спина отличаются сдвигом на постоянную величину спинового расщепления.

В работах [43, 69–76] были выполнены расчеты электронной структуры различных систем тройных и четверных соединений Гейслера. Для большой группы ферро- и антиферромагнитных сплавов Гейслера из ряда X_2MnZ ($X = Co, Ni, Cu, Pt$) со структурой $L2_1$ расчеты показали, что со-

стояние, близкое к ПМФ ($N_j(E_F)$ практически равно нулю), имеет место в системах Co_2MnZ с $Z = \text{Al, Sn}$ [43] и $Z = \text{Ga, Si, Ge}$ [68].

В работе [69] выполнены зонные расчеты для 54 тройных соединений Гейслера X_2YZ , где X – $3d$ -переходный металл ($X = \text{Mn, Fe, Co}$; $Y = \text{Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag}$, $Z = \text{Al, Si}$). Было показано, что семь из них, а именно Mn_2NbAl , Mn_2ZrSi , Mn_2RhSi , Co_2ZrAl , Co_2NbAl , Co_2YSi и Co_2ZrSi являются ПМФ со 100%-ной поляризацией по спине, а для других пяти сплавов Mn_2TcAl , Mn_2RuAl , Mn_2NbSi , Mn_2RuSi , Fe_2NbSi может наблюдаться высокая спиновая поляризация (более 90%) со щелью для одного из направлений по спине вблизи уровня Ферми. Эти соединения были классифицированы в [69] как “почти ПМФ”, причем положение их уровней Ферми E_F изменяется путем приложения давления, так что уровень Ферми попадал в щель, приводя к ПМФ-состоянию.

Расчеты электронной структуры и магнитного момента половинных и полных сплавов Гейслера $X\text{MnSb}$ ($X = \text{Ni, Pd, Pt, Co, Rh, Ir, Fe}$) и Co_2MnZ ($Z = \text{Al, Ga, Si, Ge, Sn}$), соответственно, были проведены в [70], где показано, что электронные и магнитные свойства этих соединений во многом определяются наличием щели на уровне Ферми для электронных состояний со спином вниз. При этом наблюдается линейная зависимость полного магнитного момента M от числа валентных электронов z : для полугейслеровых сплавов $M = z - 18$, а для полных сплавов Гейслера $M = z - 24$, что может быть использовано для поиска и разработки новых ПМФ-сплавов с заранее заданными магнитными характеристиками.

Результаты расчетов электронной структуры и фазовой стабильности сплавов Гейслера Co_2YSi ($Y = \text{Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni}$) представлены в работе [71]. Расчеты показали, что сплавы Co_2TiSi , Co_2VSi и Co_2CrSi являются ПМФ-соединениями. При этом соединение Co_2CrSi имеет высокую плотность состояний на уровне Ферми для состояний со спином вверх и щель для состояний со спином вниз, а также высокую температуру Кюри $T_C = 747$ К. Это может приводить к 100% степени спиновой поляризации носителей тока даже в области комнатных температур. Однако, согласно расчетам [71], ПМФ-состояние в Co_2CrSi является метастабильным. В то же время соединения Co_2TiSi и Co_2VSi термодинамически стабильны, хотя в них наблюдается меньшая плотность состояний со спином вверх на E_F и меньшие значения T_C .

Известно, что атомный беспорядок может приводить к изменению типа структуры, появлению дополнительных структурных фаз и, как следствие, к уменьшению спиновой поляризации в ПМФ-сплавах. Для выяснения роли атомного беспорядка в ПМФ состоянии, в [72] были выполнены расчеты из первых принципов для 25 со-

ставов сплавов Гейслера на основе кобальта Co_2YZ ($Y = \text{Ti, V, Cr, Mn, Fe}$; $Z = \text{Al, Ga, Si, Ge, Sn}$). Было показано, что беспорядок в расположении атомов Co и Y коррелирует с полными зарядами валентных электронов вокруг атома Y , поскольку разница в зарядах валентных электронов между атомами Co и Y приводит к различной форме локального потенциала на каждом узле. Это означает, что соединения с титаном Co_2TiAl , Co_2TiGa , Co_2TiSi , Co_2TiGe и Co_2TiSn более удобны с практической точки зрения в плане предотвращения атомного беспорядка по сравнению со сплавами Co_2CrZ , Co_2MnZ , Co_2FeZ ($Z = \text{Al, Ga, Si, Ge, Sn}$).

Расчеты электронных и магнитных свойств четверных соединений Гейслера с химической формулой $XX'YZ$ (где X, X' и Y – атомы переходных металлов, Z – s - и p -элементы) со структурой LiMgPdSn проведены в работе [73]. При этом валентность X' должна быть ниже, чем валентность атомов X , а валентность элемента Y ниже, чем валентность как X , так и X' . Было изучено 60 соединений $XX'YZ$ ($X = \text{Co, Fe, Mn, Cr}$; $X' = \text{V, Cr, Mn, Fe}$; $Y = \text{Ti, V, Cr, Mn}$; $Z = \text{Al, Si, As}$) и установлено, что все из них подчиняются правилу Слэтера–Полинга. При этом 41 соединение находится в ПМФ-состоянии, 8 – в СБП-состоянии, 9 являются полупроводниками. Кроме того, соединения CoVTiAl и CrVTiAl можно отнести соответственно к ферромагнитным и антиферромагнитным полупроводникам с большими энергетическими щелями для обеих проекций спина. Высказано предположение, что все ПМФ- и СБП-соединения будут иметь высокие температуры Кюри, что делает их пригодными для использования в спинтронике и магнитоэлектронике.

Структурные, электронные и магнитные характеристики 18 четверных соединений Гейслера на основе кобальта CoX'YSi , где $X' = \text{Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag}$, а $Y = \text{Fe, Mn}$ исследованы с помощью первопринципных расчетов в [74]. Были предсказаны несколько новых полуметаллических ферромагнетиков CoNbMnSi , CoTcMnSi , CoRuMnSi , CoRhMnSi , CoZrFeSi и CoRhFeSi со спиновой поляризацией 90–100%, причем 3 из них – CoRuMnSi , CoRhMnSi и CoRhFeSi – имеют высокие температуры Кюри от 700 до 1000 К, а потому могут применяться в спинтронике при комнатной температуре.

В работе [75] выполнены расчеты и экспериментальные исследования сплава CoFeCrAl , имеющего кубическую структуру Гейслера $B2$ -типа. Расчеты электронной структуры предсказывают наличие ПМФ-состояния с энергией спинового расщепления 0.31 эВ, а также относительно большую степень спиновой поляризации носителей P . Эксперимент с использованием метода андреевской спектроскопии точечных контактов в области температур жидкого гелия дает значение $P = 0.67$, что доказывает справедливость прове-

денных расчетов, а линейная зависимость электросопротивления от температуры указывает на возможность достаточно высокой величины R и при более высоких температурах.

Согласно расчетам электронной структуры и магнитного момента четверных сплавов Гейслера CoFeCrP , CoFeCrAs и CoFeCrSb [76], все они являются полуметаллическими ферромагнетиками, с величинами щелей 1.0, 0.52 и 0.75 эВ соответственно. При этом полный магнитный момент, основной вклад в который вносят атомы Cr, равен $4\mu_B$ на формульную единицу и подчиняется правилу Слэтера–Полинга.

4.4. Оптические свойства

В экспериментах по изучению оптических свойств сплавов Гейслера была обнаружена интересная особенность. Если в обычных ферромагнитных сплавах Гейслера наблюдается так называемый “древеский подъем” – увеличение оптической проводимости $\sigma(\omega)$ при уменьшении энергии в инфракрасной (ИК) области, то в соединениях, проявляющих свойства ПМФ, такой подъем зачастую отсутствует [31–33].

В металлах и сплавах имеются два основных механизма, определяющих оптические свойства. В ИК области спектра основную роль играет механизм внутризонного (inraband, i.b.) ускорения электронов полем световой волны в пределах одной полосы [77]. Его вклад $\sigma_{i.b.}$ определяется параметрами электронов проводимости – плазменной частотой Ω и частотой релаксации γ – и уменьшается пропорционально квадрату частоты падающего света ω . Он описывается формулой Друде:

$$\sigma_{i.b.} = \frac{1}{4\pi} \frac{\Omega^2 \gamma}{(\omega^2 + \gamma^2)}. \quad (6)$$

В видимой и ультрафиолетовой области спектра доминирует второй механизм – межзонное (квантовое) поглощение света с перебросом электрона с полосы ниже уровня Ферми в полосу выше уровня Ферми. Межзонный вклад определяется структурой энергетических зон и несет информацию об электронных состояниях.

Начиная с 1996 г., во многих сплавах Гейслера было обнаружено отсутствие древесского подъема и высокий уровень межзонного поглощения в инфракрасной области спектра вплоть до границы исследованного частотного интервала [31–33, 78, 79]. Такое поведение оптических функций является аномальным для металлических систем и, как оказалось, коррелирует с аномальным поведением электросопротивления, а в ряде случаев согласуется с расчетами электронной структуры. Статическая проводимость при комнатной температуре имеет низкие значения, достижение которых в пределе $\omega \rightarrow 0$ нередко предполагает дальнейшее уменьшение оптической проводимости. Такое аномальное пове-

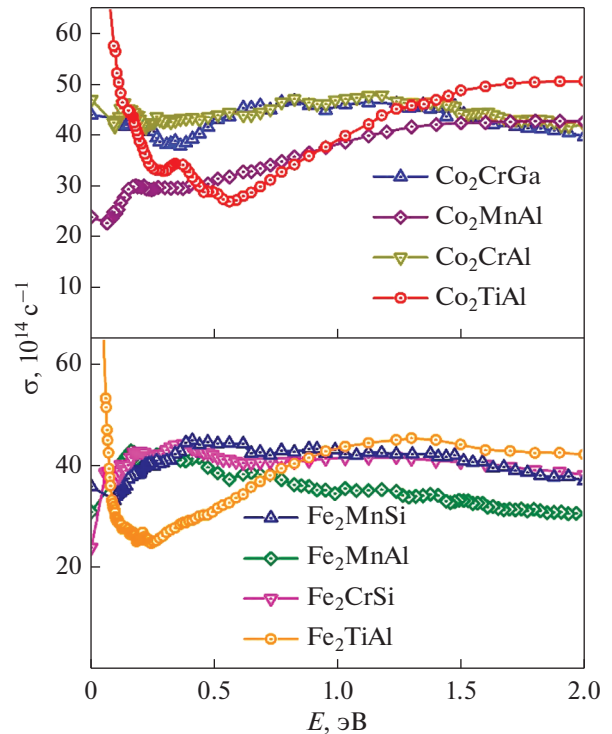


Рис. 10. Оптическая проводимость σ сплавов на основе Co и Fe по данным работы [32].

дение оптических свойств сплавов, по-видимому, связано с проявлением в оптических спектрах энергетической щели для одной из проекций спина.

На рис. 10 показана дисперсия оптической проводимости $\sigma(\omega)$ сплавов на основе Co и Fe в диапазоне энергий $E = 0.1 - 2.0$ эВ [32]. Видно, что дисперсия $\sigma(\omega)$ сплавов Co_2TiAl и Fe_2TiAl типична для металлов: в ИК-диапазоне наблюдается древесский подъем и имеются максимумы, обусловленные межзонным поглощением. Для других сплавов обнаружено аномальное поведение оптической проводимости в ИК-диапазоне, т.е. высокий уровень межзонного поглощения и отсутствие вклада Друде. Последнее указывает на низкие значения концентрации носителей заряда, а следовательно, низкие значения проводимости. Статическая проводимость σ_{st} , которая является пределом оптической проводимости при $\omega \rightarrow 0$, была также получена из измерений электросопротивления; она показана символами на оси ординат, согласие оказывается достаточно хорошим (рис. 10).

В работе [32] были рассчитаны плотности состояний (DOS) для Co_2TiAl и Co_2CrAl . Анализ оптических и расчетных данных, а также электросопротивления с учетом существующих зонных расчетов [31, 80, 81] позволил авторам [32] заключить, что данные сплавы обладают аномальными оптическими свойствами, которые качественно объясняются следующим образом. Такие сплавы имеют высокую плотность d -состояний X - и Y -

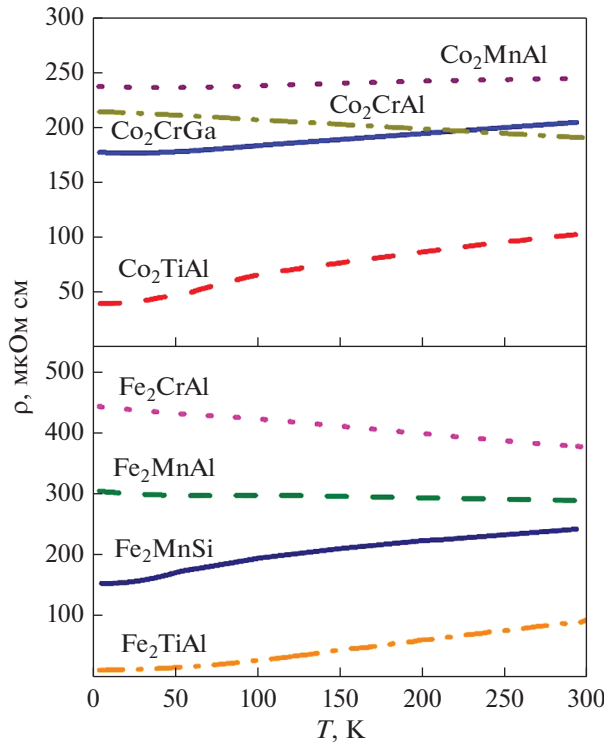


Рис. 11. Температурные зависимости электросопротивления ρ сплавов на основе Co и Fe по данным работы [32].

атомов на уровне Ферми и в его окрестности для электронных состояний со спином вверх. Эти электронные состояния дают основной вклад в межзонные переходы в ИК-диапазоне, а также вносят определенный вклад в статическую проводимость. При температурах меньше величины щели вероятность межзонных переходов для электронных состояний со спином вниз мала, поэтому вклад в статическую проводимость от них практически отсутствует.

На рис. 11 представлены температурные зависимости удельного сопротивления $\rho(T)$. В случае Fe_2TiAl и Co_2TiAl они типичны для металлов с остаточным сопротивлением 12 мкОм см и 40 мкОм см соответственно. Для Co_2CrGa и Fe_2MnSi сопротивление увеличивается с ростом температуры, проявляя металлическое поведение. Тем не менее их остаточное сопротивление намного выше: 177 мкОм см для Co_2CrGa и 154 мкОм см для Fe_2MnSi . Зависимость $\rho(T)$ для Co_2MnAl и Fe_2MnAl довольно слабая, а для Co_2CrAl и Fe_2CrAl сопротивление уменьшается с ростом температуры (рис. 11).

5. СПИНОВЫЕ БЕСЩЕЛЕВЫЕ ПОЛУПРОВОДНИКИ

Спиновые бесщелевые полупроводники (СБП) были предсказаны Вангом в 2008 г. [6]. СБП-материалы обладают необычной зонной структу-

рой: вблизи уровня Ферми для подсистемы электронов со спином вниз имеется энергетическая щель, а для носителей тока со спином вверх потолок валентной зоны касается дна зоны проводимости. В таких СБП-материалах можно реализовать: (1) 100%-спиновую поляризацию носителей заряда; (2) “разделение” спин-поляризованных электронов и дырок с помощью эффекта Холла; (3) контроль и управление уровнем Ферми посредством внешнего электрического поля; (4) регулирование типа (электроны или дырки) и концентрации спин-поляризованных носителей заряда. Для устройств спинтроники необходимы материалы с высокой степенью поляризации носителей тока и большим временем спиновой релаксации. Поэтому СБП-соединения с перечисленными выше свойствами (1–4) могут оказаться одними из наиболее подходящих материалов.

С теоретической точки зрения спиновые бесщелевые полупроводники близки к классу полуметаллических ферромагнетиков. В СБП также можно ожидать нетривиальных многоэлектронных эффектов, обусловленных взаимодействием электронных и спиновых степеней свободы, однако соответствующие теоретические подходы пока детально не разработаны.

В соединениях Гейслера СБП-состояние наблюдается, как правило, в т.н. инверсных гейслеровых сплавах со структурой X_A . В работе [11] сообщается об одном из первых экспериментальных наблюдений СБП-состояния в Mn_2CoAl с температурой Кюри 720 К и магнитным моментом $2\mu_B/\text{ф.е.}$ при 4.2 К. В интервале от 4.2 до 300 К его проводимость слабо зависит от температуры, относительно мала и составляет около 240 См/см при комнатной температуре, концентрация носителей тока $\sim 10^{17} \text{ см}^{-3}$, коэффициент Зеебека близок нулю. Почти одновременно с [11] были выполнены расчеты электронной зонной структуры четверных сплавов типа CoFeMnSi , CoFeCrAl , CoMnCrSi , CoFeVSi и FeMnCrSb и предсказана возможность реализации в них СБП-состояния [83].

В работе [84] проведены расчеты электронных и магнитных свойства сплавов Гейслера Mn_2CoAl и Mn_2CoGa – исходных и легированных путем замещения части атомов Al и Ga на Cr и Fe. Поскольку исходный сплав Mn_2CoAl относится к СБП-соединениям, а Mn_2CoGa – к ПМФ, то было интересно проследить за изменением электронной структуры и магнитного состояния в этих сплавах при легировании. Оказалось, что добавки Fe и Cr разрушают СБП природу в Mn_2CoAl , приводя к появлению делокализованных состояний в “бывшей” запрещенной зоне для состояний со спином вниз. В то же время небольшое легирование Mn_2CoGa приводит к более устойчивому ПМФ-состоянию, которое, однако, разрушается, если уровень легирования превышает определенную величину. Что касается магнитных свойств,

то полные магнитные моменты легированных соединений имеют более высокие значения, чем исходных сплавов.

В работе [85] методом функционала плотности были выполнены расчеты зонной структуры четверных сплавов Гейслера $XX'YZ$ (X, X' и Y – переходные металлы, $Z = \text{V, Al, Ga, In, Si, Ge, Sn, Pb, P, As, Sb, Bi}$) с целью поиска в них СБП-состояний. Используя эмпирическое правило о соединениях с 21, 26 или 28 валентными электронами, было показано, что существует 12000 возможных химических составов, из которых только 70 являются стабильными СБП. Вывод о стабильности этих соединений был сделан на основе оценки их термодинамической, механической и динамической устойчивости. Было показано, что среди 70 стабильных СБП-соединений можно реализовать все четыре типа СБП-состояний I–IV, предсказанных в работе [6]. В соединениях II типа могут наблюдаться уникальные транспортные свойства, в частности, анизотропное магнитосопротивление и аномальный эффект Нернста, что можно использовать в устройствах спинтроники.

Результаты исследований структуры, магнитных и электронных транспортных свойств четверного СБП-сплава Гейслера $\text{Co}_{1+x}\text{Fe}_{1-x}\text{CrGa}$ ($0 \leq x \leq 0.5$), обогащенного кобальтом, а также расчеты зонной структуры представлены в работе [86]. Особенностью этих сплавов является высокая температура Кюри и намагниченность, которые изменяются от 690 К ($x = 0$) до 870 К ($x = 0.5$) и от $2.1 \mu_{\text{B}}/\text{ф.е.}$ ($x = 0$) до $2.5 \mu_{\text{B}}/\text{ф.е.}$ ($x = 0.5$) соответственно. Из исследований температурной зависимости электросопротивления следует, что сплавы проявляют СБП-свойства до $x = 0.4$, а при $x = 0.5$ демонстрируют металлическое поведение как по величине, так и по виду зависимости от температуры. В отличие от обычных полупроводников, величина проводимости (сопротивления) в этих СБП-соединениях при 300 К находится в диапазоне от 2300 до 3300 См/см (от 300 до 430 мкОм см), что близко к показателям других СБП материалов, аномальное холловское сопротивление увеличивается от 38 См/см для $x = 0.1$ до 43 См/см для $x = 0.3$. Коэффициент Зеебека оказывается исчезающе малым ниже 300 К, что является еще одним признаком реализации СБП-состояния.

В работе [87] экспериментально изучены структура, электронный транспорт и магнитные свойства, проведены расчеты электронной структуры четверного сплава CoFeCrGa со структурой $L2_1$, в котором наблюдается химический беспорядок. Для намагниченности насыщения при $T = 8$ К выполняется правило Слэтера–Полинга, а температура Кюри превышает 400 К. Большая величина электросопротивления, малые значения концентрации носителей тока и их слабая зависимость от температуры также свидетельствуют о реализации СБП-состояния. Было показано, что под дав-

лением СБП-соединение CoFeCrGa может переходить в ПМФ-состояние, что объясняется особенностями его электронной структуры.

Магнитные и гальваномагнитные свойства тонких пленок сплава Гейслера $\text{Mn}_{2-x}\text{Co}_{1+x}\text{Al}$ ($0 \leq x \leq 1.75$) экспериментально исследованы в работе [88]. Из измерений намагниченности следует, что для пленок при $x = 1.75; 1.5; 1.25; 1$ наблюдается ферромагнитный порядок, а при $x = 0; 0.5$ и 0.75 – ферримагнитный. В пленках Mn_2CoAl наблюдается полупроводниковое поведение проводимости. В совокупности с малыми значениями аномальной холловской проводимости (около 3.4 См/см при 10 К) и линейным по полю положительным магнитосопротивлением это может свидетельствовать о СБП-состоянии, особенно в пленках при высокой концентрации Mn (малых значениях x). На основании полученных результатов авторы [88] делают вывод, что такие пленки могут быть полезны для применения в полупроводниковой спинтроники.

Экспериментальные исследования структуры, магнитных свойств, электронного транспорта, андреевского отражения и расчеты зонной структуры четверного эквивалентного сплава Гейслера CoFeMnSi выполнены в работе [89]. Этот сплав кристаллизуется в кубической структуре Гейслера (типа LiMgPdSn), имеет температуру Кюри 620 К и намагниченность насыщения $3.7 \mu_{\text{B}}/\text{ф.е.}$, поведение которой подчиняется правилу Слэтера–Полинга. Последнее, как отмечается в [89], является одним из необходимых условий для реализации СБП-состояния. Малые значения электропроводности (около 3000 См/см при $T = 300$ К) и концентрации носителей (около $5 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$ при $T = 300$ К) и их слабые зависимости от температуры интерпретируют как возникновение состояния спинового бесщелевого полупроводника. Аномальная холловская проводимость при этом равняется 162 См/см при 5 К. Используя методику андреевского отражения, авторами [89] была определена спиновая поляризация носителей тока $P = 0.64$.

В работе [90], где проведены первопринципные расчеты электронной структуры и магнитных свойств сплавов Гейслера Ti_2CoSi , Ti_2MnAl и Ti_2VAs , показано, что их магнитное состояние сильно зависит от структурного. Если эти соединения упорядочены в структуре X_A , то они проявляют СБП-свойства. При этом сплавы Ti_2MnAl и Ti_2VAs имеют нулевую намагниченность, что может свидетельствовать о возникновении состояния компенсированного ферримагнетизма. Если же все эти сплавы упорядочены в кубической структуре $L2_1$, то они являются металлами.

Краткий обзор работ, посвященных расчетам электронной структуры тройных инверсных соединений Гейслера X_2YZ (где X и Y – атомы переходных металлов, причем атом X обладает наименьшей валентностью) и четверных сплавов Гейслера $XX'YZ$

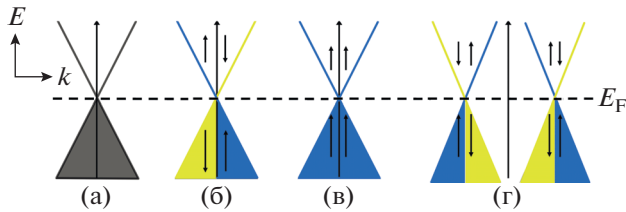


Рис. 12. Зонные структуры топологических систем: вырожденные по спину системы (а), поверхностные состояния топологических изоляторов (б), топологические дираковские состояния (в) и полуметаллы Вейля (г). Стрелками показаны направления спинов.

(со структурой типа LiMgPdSn), представлен в [91]. В зависимости от химического состава, вследствие существования трех магнитных подрешеток в них может возникать ферро-, ферри- или антиферромагнетизм. При этом наиболее перспективными для практического применения являются соединения с 18 валентными электронами, поскольку в них суммарная намагниченность нулевая, что приводит к минимальным потерям энергии. Некоторые из этих сплавов являются спиновыми бесщелевыми полупроводниками, а наибольший интерес из них представляет Mn_2CoAl , который, по-видимому, может быть использован в спинтронике.

В работе [92] проведены исследования оптических свойств сплава $\text{Mn}_{1,8}\text{Co}_{1,2}\text{Al}$, близкого по составу к спиновому бесщелевому полупроводнику Mn_2CoAl , а также расчеты электронной структуры. Было обнаружено аномальное поведение оптических свойств сплава. Положительные значения действительной части диэлектрической проницаемости ϵ_1 и отсутствие друдевского вклада в оптическую проводимость в ИК-области спектра вплоть до границы исследованного интервала указывают на ослабление металлических свойств сплава. Интенсивное межзонное поглощение в ИК-области указывает на сложную структуру зонного спектра и высокую плотность d -состояний в окрестности E_F . Эти особенности оптического спектра поглощения позволяют объяснить картину зонного спектра, характерную для спиновых бесщелевых полупроводников.

В работе [93] были исследованы микроструктура, магнитные и транспортные свойства сплава Гейслера Mn_2CoAl . Микроструктурный анализ показал, что основной фазой была не Mn_2CoAl , а $\text{Mn}_{1,8}\text{Co}_{1,4}\text{Al}_{0,8}$, которая имеет неупорядоченную инверсную X_4 -структуру с позициями атомов $\text{Mn}(A)$ и $\text{Al}(C)$, частично замещенными атомами Co и Mn соответственно. Расчеты электронной структуры этой фазы показали, что она находится в ПМФ-состоянии, в отличие от СБП-фазы Mn_2CoAl . В то же время большие величины электропроводности исследованных образцов, “полупроводниковый” вид их температурных зависимостей и низкие значения аномальной холловской

проводимости являются характерными чертами СБП-состояния. Как утверждает в [93], это может быть связано с локализацией носителей заряда из-за пересечения уровня Ферми $3d$ -состояниями Mn и $3d$ -состояниями Co в $\text{Mn}_{1,8}\text{Co}_{1,4}\text{Al}_{0,8}$.

Структура, магнитные и транспортные свойства четверного сплава CoFeMnSi подробно исследованы экспериментально в работе [94]. Намагниченность насыщения этого соединения составляет $3.49\mu_B/\text{ф.е.}$, температура Кюри $T_C = 763\text{ К}$. Большие значения электропроводности, которое убывает с ростом температуры, и практически не зависящая от температуры концентрация носителей тока $\sim 10^{20}\text{ см}^{-3}$ могут свидетельствовать о реализации в сплаве CoFeMnSi СБП-состояния.

6. ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ПОЛУМЕТАЛЛЫ

На рис. 12 схематично представлены зонные структуры различных топологических структур: топологических изоляторов, топологических дираковских и вейлевских полуметаллов.

Нетривиальная топология электронной зонной структуры возникает в материалах с сильным спин-орбитальным взаимодействием, которое приводит к инверсии зоны проводимости и валентной зоны. Топологические изоляторы [95–98] открыли класс материалов с нетривиальными топологическими свойствами, в который позднее также были включены топологические полуметаллы [95, 96, 99, 100].

Топологические изоляторы (ТИ) представляют собой класс узкощелевых материалов, в объеме которых имеется характерная энергетическая щель, а на поверхности — “металлические” состояния. Бесщелевые поверхностные состояния возникают из-за инверсии зон вследствие сильного спин-орбитального взаимодействия и защищены симметрией относительно обращения времени. Электроны в них являются фермионами Дирака с линейным законом дисперсии, а их спины жестко связаны с импульсом. Состояния ТИ наблюдали во многих материалах, включая HgTe с квантовыми ямами [101], Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 [102], некоторые сплавы Гейслера [103, 104].

Топологические вейлевские и дираковские полуметаллы обобщают классификацию топологических материалов. В таких материалах, как и в ТИ, зонная структура в объеме имеет щель, возникающую вследствие сильного спин-орбитального взаимодействия, за исключением точек пересечения зон в узлах Вейля или Дирака. Вблизи этих узлов дисперсия зон во всех трех направлениях импульсного пространства линейна, а низкоэнергетические возбуждения могут быть описаны гамма-милтонианами Вейля или Дирака.

Вейлевские полуметаллы характеризуются наличием в их объеме так называемых вейлевских фермионов, обладающих нулевой эффективной массой. Впервые существование безмассового фер-

миона было предсказано в 1929 г. Германом Вейлем. Однако экспериментально обнаружить такие квазичастицы удалось лишь сравнительно недавно в семействе TaAs [100], позже в Td–MoTe₂ [105], WTe₂ [106], а также в магнитных материалах на основе сплавов Гейслера [9, 107, 108]. Вейлевские узлы всегда появляются парами противоположной киральности, их можно рассматривать как монополи кривизны Берри в импульсном пространстве. Следствием нетривиальной топологии объемной зонной структуры в вейлевских полуметаллах являются уникальные топологически защищенные поверхностные состояния – ферми-дуги, которые соединяют проекции вейлевских узлов на поверхность. В отличие от вейлевских полуметаллов, дираковским полуметаллам не свойственна киральность: узел Дирака можно рассматривать как “сумму” двух узлов Вейля противоположной киральности. К полуметаллам Дирака относят, например, Cd₃As₂ [109] и Na₃Bi [110]. Различие электронной зонной структуры дираковских и вейлевских полуметаллов обусловлено симметрией. Условием существования вейлевского полуметалла является нарушение симметрии относительно инверсии либо обращения времени. Взаимодействие обоих этих факторов в кристалле приводит к появлению фазы дираковского полуметалла. При фазовом переходе от ТИ к нормальному изолятору в качестве промежуточной фазы можно получить дираковскую или вейлевскую фазу, что зависит от того, нарушена инверсионная симметрия или нет [111].

Узлы Вейля могут приводить к необычным транспортным свойствам, в том числе к гигантскому аномальному эффекту Холла (АЭХ). Соответствующий собственный (внутренний) вклад в последний рассчитывается путем интегрирования по всей зоне Бриллюэна кривизны Берри, которая является эквивалентом магнитного поля в импульсном пространстве. В частности, для вейлевского полуметалла с двумя узлами Вейля аномальная холловская проводимость пропорциональна расстоянию между этими узлами [9]. С этой точки зрения АЭХ в трехмерных вейлевских полуметаллах [9, 99] можно связать с квантовым АЭХ в двумерной ситуации (см. также обсуждение в [112]).

Большой АЭХ был обнаружен в полугейслеровском антиферромагнетике GdPtBi [113]. Авторам [114] удалось вырастить объемный монокристалл ТПМ-сплава Co₂MnGa и выполнить исследование его электронной структуры и магнитного состояния с помощью ARPES-спектроскопии, метода функционала плотности, измерений электропроводности, эффекта Холла и намагниченности. В результате было обнаружено, что в сплаве Co₂MnGa возникает топологическая фаза: линии топологических узлов пересекают уровень Ферми и возникают поверхностные состояния, расположенные вдоль линий узлов в зоне Бриллюэна у

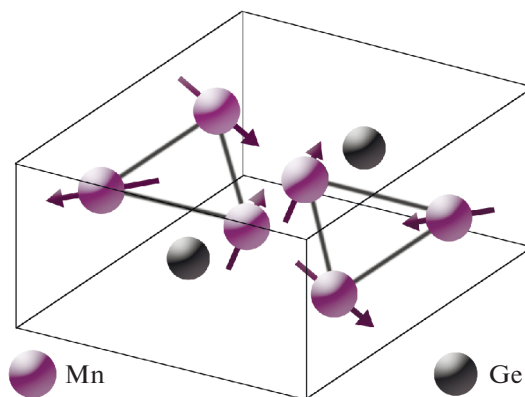


Рис. 13. Структура $D0_{19}$ соединения Mn_3Ge (использованы данные работы [116]). Стрелки показывают направление магнитных моментов атомов Mn.

поверхности. Экспериментальные исследования объема и поверхности монокристалла Co₂MnGa позволяют сделать вывод о реализации первого топологического трехмерного магнетика и, как утверждают авторы [114], вообще первого топологического магнитного металла. Наличием линий топологических узлов можно объяснить очень большую аномальную холловскую проводимость, которую наблюдали в Co₂MnGa. Их обнаружение позволило авторам предложить метод создания сильно поляризованных по спину носителей тока.

В соединениях Mn_3Ge и Mn_3Sn с искаженной структурой Гейслера $D0_{19}$ в плоскости ab формируется решетка атомов Mn треугольного типа – сильно фрустрированная решетка кагоме [115, 116] (рис. 13).

В киральных антиферромагнитных соединениях Mn_3X ($X = Ge, Sn, Ga, Ir, Rh, Pt$) были обнаружены сильный анизотропный аномальный эффект Холла и спиновый эффект Холла [117]. Отметим, что соединение Co₃Sn₂S₂ с решеткой кагоме и нетривиальными топологическими свойствами также является представителем полуметаллических ферромагнетиков [112, 118].

Различные соединения Гейслера на основе тяжелых элементов с сильным спин-орбитальным взаимодействием (COB), их электронная структура и свойства рассмотрены в обзоре [9]. Показано, что совокупность особенностей симметрии, деталей COB и магнитной структуры позволяет реализовать благодаря возникновению кривизны Берри широкий спектр топологических фаз, включая топологические изоляторы и полуметаллы. В таких соединениях могут возникать точки Вейля и линии узлов, которыми можно управлять с помощью различных внешних воздействий. Это приводит к ряду экзотических свойств, таких как аномалии киральности, большой аномальный спиновый и топологический эффекты Холла. Вследствие неколлинеарной магнитной структуры и кривизны Берри может возникать ненулевой аномальный

эффект Холла, который впервые наблюдали в антиферромагнетиках Mn_3Sn и Mn_3Ge . Наряду с особенностями кривизны Берри в k -пространстве, в соединениях Гейслера с неколлинеарными магнитными структурами также могут возникать топологические состояния в виде магнитных антискирмионов в реальном пространстве. В обзоре [9] говорится о прямом воздействии на кривизну Берри, а следовательно, и о возможности целенаправленного управления электронной и магнитной структурой и свойствами таких соединений.

В работе [107] предсказано новое семейство вейлевских систем на основе сплавов Гейслера Co_2YSn ($Y = Ti, V, Zr, Nb, Hf$). В таких центросимметричных материалах имеется только два вейлевских узла на уровне Ферми (минимальное возможное количество), которые защищены вращательной симметрией вдоль магнитной оси и разделены большим расстоянием в зоне Бриллюэна. Также в данной работе были рассчитаны соответствующие ферми-дуги. Полученные результаты могут способствовать пониманию магнитных эффектов в полуметаллах Вейля.

Расчеты электронной структуры для ПМФ-сплавов Гейслера с целью изучения стабильности точек Вейля выполнены в работе [119] на примере Co_2TiAl . Количество точек Вейля и их координаты в k -пространстве контролировали с помощью ориентации намагниченности. Такая альтернативная степень свободы, которая отсутствует в других топологических материалах (например, в “обычных” полуметаллах Вейля), предполагает новые функциональные возможности, характерные для полуметаллических ферромагнетиков.

В работе [120] выполнены расчеты электронной структуры инверсного гейслерового сплава Ti_2MnAl и предсказана реализация в нем состояния магнитного полуметалла Вейля. Сплав Ti_2MnAl выбран потому, что это компенсированный ферромагнетик с температурой Кюри выше 650 К и концентрацией носителей тока около $2 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Несмотря на нулевой суммарный магнитный момент, в нем наблюдается большой собственный аномальный эффект Холла (АЭХ) с соответствующей проводимостью около 300 См/см, что является следствием перераспределения кривизны Берри от точек Вейля, которые находятся всего в 14 мэВ от уровня Ферми и изолированы от тривиальных зон. В [120] показано, что в отличие от антиферромагнетиков Mn_3X ($X = Ge, Sn, Ga, Ir, Rh$ и Pt), где АЭХ появляется вследствие неколлинеарной магнитной структуры, в Ti_2MnAl АЭХ возникает непосредственно из точек Вейля и топологически защищен. По сравнению с ферромагнитными соединениями Гейслера на основе Co , ввиду отсутствия зеркальной симметрии в инверсной структуре Гейслера узлы Вейля в Ti_2MnAl возникают не из линий узлов. Поскольку магнитная структура нарушает вращательную симметрию, узлы Вейля

стабильны и в отсутствие спин-орбитального взаимодействия. Это один из первых примеров ТПМ-материала с точками Вейля и большим аномальным эффектом Холла, где суммарный магнитный момент равен нулю.

Расчеты электронной структуры, экспериментальные исследования магнитных, электрических и термоэлектрических свойств монокристаллического ферромагнитного ТПМ Co_2MnGa выполнены в работе [121]. Обнаружено большое значение аномальной термоэдс Нернста — около 6 мкВ/К в поле 1 Тл при комнатной температуре, что примерно в 7 раз превышает любое значение, когда-либо наблюдавшееся для обычного ферромагнетика. Такое высокое значение аномального эффекта Нернста (АЭХ) возникает из-за большой суммарной кривизны Берри вблизи уровня Ферми, связанной с линиями узлов и точками Вейля, хотя обычно АЭХ пропорционален величине намагниченности.

Известно, что некоторые из соединений Гейслера на основе кобальта, к которым, в частности, относится сплав Co_2TiSn , представляют собой полуметаллические ферромагнетики с точками Вейля. В отсутствие T -симметрии относительно обращения времени эти системы обладают кривизной Берри в импульсном пространстве, которая может приводить к аномалиям в электронном транспорте. С этой целью были проведены расчеты электронной структуры и измерения электро- и магнитосопротивления, эффекта Холла и намагниченности на эпитаксиальных пленках Co_2TiSn [122]. Результаты теоретического анализа показали, что кривизна Берри играет большую роль в формировании аномального эффекта Холла, а полученное расхождение между теорией и экспериментом связано с механизмами боковых прыжков и косоугольного рассеяния. Показано [122], что собственный вклад в аномальный эффект Холла возникает из-за линий узлов, частично разорванных вследствие понижения симметрии, вызванного отсутствием T -симметрии.

В расчетной работе [123] изучали роль химического беспорядка в эволюции точек Вейля в магнитном ТПМ $Co_2Ti_{1-x}V_xSn$ ($0 \leq x \leq 1$). Были выполнены расчеты электронной структуры, магнитного момента и аномальной холловской проводимости с использованием первопринципного подхода для отслеживания эволюции линий узлов Вейля. При увеличении концентрации ванадия до $x = 0.5$ линия узлов перемещается на уровень Ферми. Расчет плотности состояний показывает ТПМ-поведение для всех исследованных составов. Магнитный момент на атоме Co с ростом концентрации V увеличивается до максимального значения при $x = 0.4$, а затем начинает уменьшаться, в то время как общий момент постоянно растет. Расчеты демонстрируют, что при замене почти половины Ti на V собственная аномальная холловская прово-

димность увеличивается почти в два раза по сравнению с нелегированным составом. Сделан вывод, что состав, близкий к $\text{Co}_2\text{Ti}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{Sn}$, должен быть идеальным для экспериментального изучения вейлевских ТПМ.

Эксперименты по измерению инверсного спинового эффекта Холла в соединении Гейслера Co_2MnGa , которое является ферромагнитным ТПМ Вейля, были проведены при комнатной температуре, используя метод инъекции спина в структурах типа “спиновый клапан” [124]. Значение угла θ_{SH} спинового эффекта Холла оказалось одним из самых высоких для ферромагнетиков: $\theta_{\text{SH}} = -0.19 \pm 0.04$. Кроме того, в этом случае не выполняется принцип Онзагера, что отчасти может быть объяснено различными величинами холловской проводимости для носителей со спином вверх и вниз.

Для получения новой информации о нетривиальной топологии блоховских состояний, приводящей к аномальным вкладам в транспортные коэффициенты, в [125] было предложено исследовать недиагональные компоненты соответствующих тензоров проводимости и теплопроводности. В качестве объекта исследований был также выбран ферромагнитный ТПМ Вейля Co_2MnGa , проведены измерения его магнитных, электрических, гальваномагнитных, тепловых и термоэлектрических свойств. Было показано, что закон Видемана–Франца, связывающий электрические и тепловые коэффициенты, выполняется в широком температурном интервале от гелиевых температур до комнатных. Авторы [125] утверждают, что аномальный эффект Холла имеет внутреннее происхождение, а спектр Берри вблизи уровня Ферми не имеет особенностей и является гладким. Из данных по аномальному эффекту Нернста была получена величина и температурная зависимость аномальной термоэлектрической проводимости α_{ij}^A и показано, что ее отношение к аномальной холловской проводимости α_{ij}^A приближается при комнатной температуре к отношению констант k_B/e .

Топологические особенности могут проявляться и в магнитном состоянии ТПМ-материалов, приводя к необычным магнитным характеристикам, в частности, к неколлинеарной магнитной модуляции узлов Вейля. В [126], где выполнены расчеты электронной структуры и магнитных свойств тетрагонального ферромагнитного соединения Mn_3Ga , сообщается о возникновении топологически нетривиальных линий узлов в отсутствие спин-орбитального взаимодействия (СОВ), которые защищены как зеркальной, так и вращательной C_{4z} симметрией. Показано, что при наличии СОВ дважды вырожденные нетривиальные точки пересечения эволюционируют в C_{4z} -защищенные узлы Вейля с киральным зарядом ± 2 . Двойные уз-

лы Вейля разделяются на пары узлов Вейля с зарядом -1 , что и определяется магнитной ориентацией в неколлинеарной ферримагнитной структуре.

В [127] также сообщается о том, что намагничивание топологического полуметалла Вейля может приводить к возникновению аномальных транспортных свойств вследствие его топологической природы. Авторы [127] использовали ARPES-спектроскопию и расчеты электронной структуры, а также измеряли электронный транспорт и магнитные свойства ферромагнитных пленок Co_2MnGa . Им удалось визуализировать спин-поляризованный конус Вейля и наблюдать бездисперсионные поверхностные состояния. Было обнаружено, что в области комнатных температур аномальные проводимости Холла и Нернста возрастают при приближении индуцированного намагничиванием массивного конуса Вейля к уровню Ферми до тех пор, пока аномальная термоэдс Нернста не достигнет величины $6.2\mu\text{В}/\text{К}$. Обнаруженная взаимосвязь между топологическим квантовым состоянием и остаточной намагниченностью позволила сделать вывод о том, что пленки Co_2MnGa могут быть использованы для создания высокоэффективных устройств измерения теплового потока и магнитного поля, работающих при комнатной температуре и в нулевом магнитном поле.

Зонная структура сплава Гейслера Co_2MnGe исследована в [128] с помощью ARPES-спектроскопии, а полученные данные сравнивали с результатами расчетов из первых принципов. Были идентифицированы широкая полоса с параболической дисперсией в центре зоны Бриллюэна и несколько основных спиновых полос с высокой спиновой поляризацией, пересекающих уровень Ферми вблизи ее границы. Данные ARPES-спектроскопии подтверждают отсутствие вклада неосновных спиновых полос на поверхности Ферми, что означает возникновение ТПМ-состояния. Кроме того, были идентифицированы два топологических конуса Вейля с точками пересечения полос вблизи точки X. Авторы [128] заключают, что в Co_2MnGe возникает ТПМ-состояние, которое должно приводить к большим аномальным эффектам Холла и Нернста.

В работе [129] представлен систематический анализ экспериментальных данных по аномальному эффекту Холла (АЭХ) в Co_2TiZ ($Z = \text{Si}$ и Ge) с целью понять роль кривизны Берри в формировании АЭХ. Установлено, что аномальное сопротивление Холла в зависимости от электросопротивления изменяется по закону, близкому к квадратичному, для обоих соединений. Детальный анализ показывает, что вклад в аномальную холловскую проводимость от внутреннего механизма Карплюса–Латтинджера, связанного с фазой Берри, преобладает над внешними вкладами от механизмов асимметричного рассеяния и боковых прыжков.

Таким образом, изучение топологических явлений в гейслеровых сплавах только начинается, и оно кажется весьма перспективным: здесь в сочетании с большой спонтанной намагниченностью возможна реализация ряда физически интересных и практически важных эффектов.

7. ЭВОЛЮЦИЯ СОСТОЯНИЙ В СПЛАВАХ ГЕЙСЛЕРА

На практике строго реализовать состояния полуметаллического ферромагнетика, спинового бесщелевого полупроводника и топологического полуметалла не просто, поэтому нередко при интерпретации экспериментов возникают неоднозначные ситуации. При этом особенности электронной структуры (плотности электронных состояний вблизи уровня Ферми), а следовательно, и физических свойств, очень сильно изменяются при варьировании Y - и Z -компонент в соединениях Гейслера X_2YZ (см., напр., [59–63, 130–140]). В таких случаях могут наблюдаться переходы от обычного (магнитного и немагнитного) металлического и полупроводникового состояний в состояние полуметаллического ферромагнетика, затем в состояние спинового бесщелевого полупроводника, топологического полуметалла и обратно. Поскольку обычно Y – это $3d$ -переходные металлы, а Z – элементы III-V группы таблицы Менделеева, то изменения в плотности электронных состояний вблизи уровня Ферми, а следовательно, и в физических свойствах, проявляются по-разному при варьировании компонент.

В результате изучения электронного транспорта и магнитных свойств в сплавах X_2YZ ($X = \text{Mn, Fe, Co}$; $Y = \text{Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni}$; $Z = \text{Al, Si, Ga, Ge, In, Sn, Sb}$) было обнаружено, что при варьировании компонент Y и Z системы могут варьироваться от обычных металлов до полуметаллических систем и, возможно, спиновых бесщелевых полупроводников [59–63, 137–140].

В частности, в сплавах системы Co_2FeZ при изменении Z -компоненты наблюдаются малые значения остаточного сопротивления ρ_0 и металлический тип температурных зависимостей $\rho(T)$ [58, 61, 137]. При этом все сплавы являются ферромагнетиками с относительно высокими значениями намагниченности и температур Кюри, а аномальный коэффициент Холла R_S , как правило, на несколько порядков превышает нормальный коэффициент Холла R_0 . Концентрации носителей заряда типичны для металлов; вклад в сопротивление пропорционален T^n , $7/2 < n < 9/2$, что может свидетельствовать о двухмагнанных процессах рассеяния; Таким образом, помимо свойств обычных ферромагнетиков проявляются и свойства ПМФ.

В сплавах Fe_2YAl [59] при изменении Y -компоненты наблюдали как относительно небольшие (Fe_2TiAl , Fe_3Al , Fe_2NiAl), так и огромные (Fe_2VAl)

значения остаточного сопротивления, наряду с “металлическим” поведением $\rho(T)$ и наличием широких температурных областей с отрицательным температурным коэффициентом сопротивления (TCR). Магнитное состояние сплавов варьируется от парамагнетизма или слабого коллективизированного магнетизма (Fe_2TiAl , Fe_2VAl) до “хорошего” ферромагнетизма (Fe_3Al , Fe_2NiAl); концентрации носителей варьируются от “полупроводниковых” значений (Fe_2VAl) до значений, характерных для “плохих” металлов (Fe_2TiAl , Fe_3Al , Fe_2NiAl). Помимо свойств обычного ферромагнитного металла, проявляются также свойства полуметаллического ферромагнетика. Сплав Fe_2VAl демонстрирует почти полупроводниковые свойства. Согласно [18, 20], эта система демонстрирует переход из полупроводникового в металлическое состояние с возникновением ферромагнитного порядка. Таким образом, в сплавах системы Fe_2YAl особенности энергетического спектра электронов вблизи уровня Ферми играют важную роль в электронном транспорте.

В сплавах Mn_2YAl [62, 138] при изменении Y -компоненты наблюдается относительно большое остаточное сопротивление ρ_0 , за исключением сплавов Mn_2VAl и Mn_2NiAl , для которых наблюдается “металлическое” поведение $\rho(T)$. Для других соединений этой системы есть области с отрицательным температурным коэффициентом сопротивления. В отличие от расчетов электронной структуры [141], магнитные измерения для систем Mn_2CrAl , Mn_3Al и Mn_2FeAl дают нулевую полную намагниченность, что может указывать на компенсированный ферримагнетизм.

Рисунок 14 (по данным работ [139, 140]) демонстрирует корреляции между остаточным сопротивлением ρ_0 , намагниченностью насыщения M_s и коэффициентом спиновой поляризации носителей тока P для системы Co_2YSi ($Y = \text{Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni}$), т.е. при изменении числа валентных электронов z от 26 для Co_2TiSi до 32 для Co_2NiSi . Видно, что величина ρ_0 возрастает вблизи $z = 28$, в то время как для намагниченности M_s в этой точке наблюдается минимум. Согласно [139, 140], в сплавах Co_2MnSi и Co_2FeSi могут возникать ПМФ- и СБП-состояния с реализацией высокой степени поляризации носителей заряда. Как видно из рис. 14, именно для этих сплавов наблюдаются максимальные значения намагниченности и минимальные величины остаточного сопротивления. В работах [139, 140] это объясняется тем, что в данных соединениях преимущественно имеются “металлические” носители тока со спином вверх, обеспечивающие металлический тип проводимости и большой магнитный момент, что в конечном итоге и должно приводить к высокой спиновой поляризации P носителей заряда. Из представленных на рисунке зависимостей [140]

видно, что для сплавов Co_2MnSi и Co_2FeSi действительно наблюдаются достаточно высокие значения P .

Обнаруженные аномалии могут указывать на особенности энергетического спектра электронов: появление состояний полуметаллического ферромагнетика или спинового бесщелевого полупроводника.

В работе [144] сообщается о нулевом магнитном моменте в тонких пленках сплава Гейслера Mn_3Al , что объяснялось состоянием компенсированного ферримагнетика (КФИМ). От антиферромагнитного (АФМ) такое состояние отличается тем, что кристаллографические позиции марганца различны. В [62] также наблюдали нулевой магнитный момент в литом сплаве Mn_3Al , и предположили, что это может быть проявлением компенсированного ферримагнетизма.

О наблюдении КФИМ-состояния сообщается в работе [145], где экспериментально исследовали намагниченность, электро- и магнитосопротивление сплавов Гейслера $\text{Mn}_{2-x}\text{Ru}_{1+x}\text{Ga}$ ($x = 0.2, 0.5$). Было показано, что сплав $\text{Mn}_{1.5}\text{Ru}_{1.5}\text{Ga}$ демонстрирует исчезающе малый магнитный момент при низких температурах, что можно объяснить антипараллельным расположением моментов атомов Mn в двух неэквивалентных узлах, т.е. реализацией КФИМ-состояния.

В работе [146] представлены результаты зонных расчетов и экспериментальные данные для оптических свойств сплава $\text{Co}_2\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Al}$, т.е. при переходе от “обычного” ферромагнетика Co_2FeAl к полуметаллическому ферромагнитному Co_2CrAl . Было показано, что в сплаве Co_2FeAl поведение оптических свойств типично для металлов – имеется участок друдевского поглощения на кривой $\sigma(\omega)$ в ИК-области спектра и основная полоса поглощения в видимой и ультрафиолетовой области. В сплавах $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.4}\text{Fe}_{0.6}\text{Al}$, $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{Al}$, Co_2CrAl поведение оптических свойств является аномальным – отсутствует участок друдевского подъема на кривой $\sigma(\omega)$ в ИК-области спектра. Различное поведение оптических свойств подтверждает существенно различный характер электронных состояний зон со спинами по направлению намагниченности, особенно вблизи уровня Ферми. Положение последнего в области высокой плотности d -состояний для $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.4}\text{Fe}_{0.6}\text{Al}$, $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{Al}$, Co_2CrAl обуславливает высокий уровень межзонного поглощения в ИК-области, низкие значения эффективной концентрации носителей тока и слабое внутризонное поглощение. Напротив, в сплаве Co_2FeAl на уровень Ферми выходят sp -состояния, что обуславливает высокий уровень внутризонного поглощения, большие значения статической проводимости и слабый вклад от межзонного поглощения в ИК-области.

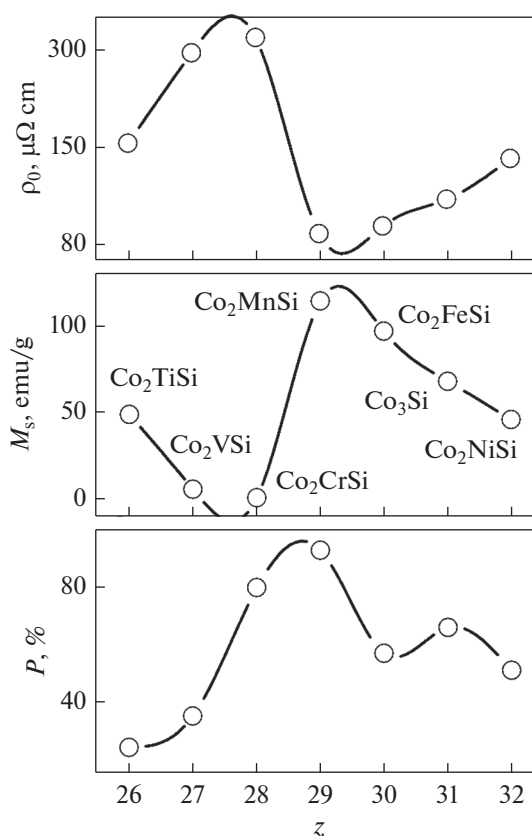


Рис. 14. Зависимости остаточного сопротивления ρ_0 и намагниченности насыщения M_s , определенные экспериментально при $T = 4.2$ К, а также поляризации носителей тока P для сплавов Co_2YSi . Значения коэффициента P взяты из работ [35, 71, 142, 143].

На возможность переключения между двумя состояниями – ПМФ и обычным металлическим – указано в расчетной работе [147], где выполнены расчеты электронной структуры и проведен анализ фазовой стабильности ферромагнитного сплава Гейслера Mn_2ScSi . Показано, что в сплаве могут существовать две фазы – ПМФ-фаза, в слабом поле занимающая малый объем в кристаллической решетке, и металлическая ФМ-фаза большого объема. Если решетка остается кубической, то между этими двумя состояниями могут возникать переходы, вызванные трехосным сжатием и расширением, а также внешним магнитным полем.

Электросопротивление и гальваномагнитные свойства монокристаллов полугейслерова соединения LuPtSb экспериментально исследованы в работе [148]. Величина электросопротивления, вид его температурной зависимости, а также значения концентрации носителей тока указывают на то, что при температурах ниже 150 К соединения LuPtSb является бесщелевым полупроводником p -типа. Об этом также свидетельствуют слабо зависящее от температуры положительное магнитосопротивление, достигающее 109%, и подвижность носителей до $2950 \text{ cm}^2/\text{V s}$. Кроме того,

Таблица 1. Характеристики полных систем сплавов Гейслера Mn_2YAl , Fe_2YAl , Co_2YSi , Co_2FeZ (Y – переходный металл, Z – s -, p -элемент): магнитное и электронное состояние, остаточное сопротивление ρ_0 , намагниченность насыщения M_s , величина спиновой поляризации P

Состав	Состояние	ρ_0 , мкОм см (эксп.)	M_s , э.м.е./г (эксп.)	P , %
Mn_2YAl				
Mn_2TiAl	–	305 [62]	0.2 [62]	75 [150] расч.
Mn_2VAl	ФМ [62] эксп.	122 [62]	59 [62]	–
Mn_2CrAl	–	250 [62]	–	92 [150] расч.
Mn_3Al	Компенсированный ферримагнетик [62, 144] эксп.	251 [62]	–	55 [150] расч.
Mn_2FeAl	Фрустрированный АФМ [155] эксп.	242 [62]	–	86 [141] расч.
Mn_2CoAl	СБП [11] эксп.	444 [11]	18 [62]	100 [141] расч.
Mn_2NiAl	ФМ	84 [62]	1.2 [62]	52 [150] расч.
Fe_2YAl				
Fe_2TiAl	ФМ	12 [138]	3.5 [138]	88 [150] расч.
Fe_2VAl	Полупроводник [23] эксп.	2020 [138]	–	0 [150] расч.
Fe_2CrAl	ФМ	443 [138]	17 [138]	95 [150] расч.
Fe_2MnAl	ПМФ [153] расч.	263 [138]	31 [138]	–
Fe_3Al	ФМ [154] расч.	53 [138]	164 [138]	54 [150] расч.
Co_2YSi				
Co_2TiSi	ПМФ [71] расч.	155 [139]	49 [139]	24 [71] расч.
Co_2VSi	ПМФ [71] расч.	294 [139]	6 [139]	35 [71] расч.
Co_2CrSi	ПМФ [71] расч.	318 [139]	1 [139]	80 [71] расч.
Co_2MnSi	ПМФ [35] эксп.	16 [139]	114 [139]	93 [35] эксп.
Co_2FeSi	ПМФ [143] расч.	27 [139]	97 [139]	57 [143] расч.
Co_3Si	ФМ	69 [139]	68 [139]	66 [142] расч.
Co_2NiSi	ФМ	131 [139]	46 [139]	51 [142] расч.
Co_2FeZ				
Co_2FeAl	ПМФ [151] расч.	50 [138]	150 [138]	75 [150] расч. 100 [151] расч.
Co_2FeGa	ФМ	9 [138]	146 [138]	–
Co_2FeGe	ПМФ [154] расч.	14 [138]	164 [138]	–
Co_2FeIn	ФМ	2 [138]	224 [138]	–
Co_2FeSn	ФМ	20 [138]	97 [138]	–
Co_2FeSb	ФМ	9 [138]	99 [138]	–

вследствие сильной спин-орбитальной связи при температурах ниже 150 К возникают эффекты слабой антилокализации. При более высоких температурах (>150 К) реализуется переход от полупроводникового к металлическому состоянию.

Работа [149] посвящена поиску и экспериментальному исследованию топологического эффекта Холла в тонких пленках СБП-сплава Гейслера Mn_2CoAl , покрытых тонким слоем Pd. Используя сильную зависимость аномального эффекта Холла от толщины и температуры, авторам удалось обнаружить и детально изучить топологический эффект Холла при температурах от 3 до 280 К. На-

личие этого эффекта свидетельствует о существовании скирмионов – топологически нетривиальных некомпланарных спиновых текстур. Используя новый метод, учитывающий полевые петли сопротивления Холла, было продемонстрировано сосуществование скирмионов противоположной полярности.

В обзоре [9] соединения Гейслера (в том числе спиновые бесщелевые полупроводники и магнитно-компенсированные ферримагнетики) и их свойства рассматриваются с топологической точки зрения. Обсуждаются связь между топологией и свойствами симметрии, неколлинеарный порядок

в ферромагнитных и антиферромагнитных соединениях, аномальный эффект Холла и магнитные антискирмионы.

В табл. 1 собраны характеристики различных систем полных сплавов Гейслера, которые проявляют свойства обычных магнетиков, полуметаллических ферромагнетиков и спиновых бесщелевых полупроводников. Согласно имеющимся литературным данным, для них указано ферромагнитное (ФМ), полуметаллическое ферромагнитное (ПМФ) или спиновое бесщелевое полупроводниковое (СБП) состояние, а также остаточное сопротивление, намагниченность насыщения и величина спиновой поляризации.

Приведенные примеры ярко демонстрируют многообразие свойств систем на основе гейслеровых сплавов, которые отражают ряд активно развивающихся направлений современной физики конденсированного состояния и квантового магнетизма.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как мы видели, сплавы Гейслера, открытые более 100 лет тому назад и насчитывающие около 1500 различных соединений, обладают многочисленными необычными характеристиками и функциональными свойствами. Особенно важное значение имеет возможность реализации состояний полуметаллического ферромагнетика (ПМФ), спинового бесщелевого полупроводника (СБП) и топологического полуметалла (ТПМ).

Для полуметаллических ферромагнитных сплавов Гейслера характерно наличие щели на уровне Ферми для электронных состояний со спином вниз и ее отсутствие для носителей со спином вверх. Поведение электронного транспорта в таких системах можно описать в модели с двумя каналами проводимости. Тогда при температурах, много меньших величин щели, проводимости в основном определяется одним каналом проводимости, т.е. носителями заряда со спином вверх, поскольку носители с противоположным направлением спина оказываются “вымороженными”. В сплавах с высокими значениями температуры Кюри, например, Co_2FeSi и Co_2MnSi , у которых T_C достигает 1100 К, даже при комнатной температуре “работает” лишь один канал проводимости и степень поляризации носителей тока высока. В то же время неквазичастичные состояния с противоположной проекцией спина, имеющие малую подвижность, могут давать вклад в спектральные, магнитные и термодинамические свойства, а также косвенно проявляться в процессах рассеяния. Особенно важны они при рассмотрении проблемы спиновой поляризации.

Спиновые бесщелевые полупроводники (СБП) — это новые квантовые материалы с уникальной спин-поляризованной зонной структу-

рой. В отличие от обычных полупроводников или полуметаллических ферромагнетиков, они имеют конечную запрещенную зону для носителей с одним направлением спина и нулевую или близкую к нулевой щель для носителей с противоположным направлением. Они представляют собой подходящие материалы для устройств спинтроники. Основные преимущества СБП: 1) высокая температура Кюри; 2) минимальная энергия, необходимая для перехода носителей заряда из валентной зоны в зону проводимости; 3) более низкая по сравнению с ПМФ концентрация носителей тока, а следовательно, и возможность более простого управления такими носителями. Первое экспериментальное наблюдение СБП-состояния было осуществлено в 2013 г. в инверсном сплаве Гейслера Mn_2CoAl . Уникальные особенности зонной структуры СБП-материалов проявляются в их кинетических свойствах: наблюдаются относительно большая величина и слабая температурная зависимость электросопротивления, сравнительно небольшая концентрация носителей тока, очень малый коэффициент Зеебека, линейное низкотемпературное магнитосопротивление и т.д.

Соединения Гейслера, относящиеся к классу топологических систем, проявляют экзотические свойства, в том числе топологических изоляторов, полуметаллов Вейля различного типа и т.д. Кроме того, в них могут возникать магнитные скирмионы. При этом сплавы Гейслера в перспективе могут стать объектами, на которых можно проводить модельные расчеты и эксперименты для понимания взаимосвязи между топологией, кристаллической структурой, различными магнитными и электронными характеристиками. Возможность достаточно легко настраивать зонную структуру топологических соединений Гейслера, а следовательно, изменять плотность носителей тока и холловскую проводимость, позволяет надеяться на практические применения, например, на реализацию квантового аномального эффекта Холла при комнатной температуре.

Необходимо подчеркнуть, что в реальных сплавах сложно строго разделить ПМФ-, СБП- и/или ТПМ-состояния. Кроме того, в зависимости от состава сплава и внешних параметров возможны переходы между этими состояниями и обычными полупроводниковыми и магнитными фазами. Все это открывает дальнейшие возможности для тонкого управления физическими свойствами.

Авторы считают своим приятным долгом поблагодарить своих коллег и соавторов М.И. Качнельсона, Ю.Н. Скрябина, Н.Г. Бебенина, Е.И. Шредер, А.В. Лукоянова, Ю.А. Перевозчикову, В.Г. Пушина, Е.Б. Марченкову за ценные обсуждения, а также А.Н. Доможирову, А.А. Семянникову, П.С. Коренистова, С.М. Емельянову за помощь при оформлении обзора.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки РФ (тема “Спин”, № АААА-

A18-118020290104-2 и “Квант”, № АААА-А18-118020190095-4) и при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-12-50004, а также Правительства РФ (постановление № 211, контракт № 02.А03.21.0006).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ирхин В.Ю., Кацнельсон М.И. Полуметаллические ферромагнетики // УФН. 1994. Т. 164. № 7. С. 705–724.
2. Katsnelson M.I., Irkhin V.Yu., Chioncel L., Lichtenstein A.I., De Groot R.A. Half-metallic ferromagnets: from band structure to many-body effects // Rev. Mod. Phys. 2008. V. 80. № 2. P. 315–378.
3. Graf T., Felser C., Parkin S.S.P. Simple rules for the understanding of Heusler compounds // Prog. Solid State Chem. 2011. V. 39. P. 1.
4. De Groot R.A., Mueller F.M., Mueller P.G., van Engen P.G., Bushow K.H.J. New class of materials - half-metallic ferromagnets // Phys. Rev. Lett. 1983. V. 50. P. 2024–2027.
5. Guan T., Lin C.J., Yang C.L., Shi Y.G., Ren C., Li Y.Q., Weng H.M., Dai X., Fang Z. Evidence for half-metallicity in n-type HgCr_2Se_4 // Phys. Rev. Lett. 2015. V. 115. P. 087002.
6. Wang X.L. Proposal for a new class of materials: spin gapless semiconductors // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 100. P. 156404.
7. Tsidilkovski I.M., Harus G.I., Shelushinina N.G. Impurity states and electron transport in gapless semiconductors // Adv. Phys. 1985. V. 34. P. 43–174.
8. Чернозатонский Л.А., Артюх А.А. Квазидвумерные дихалькогениды переходных металлов: структура, синтез, свойства и применение // УФН. 2018. V. 188. P. 3–30.
9. Manna K., Sun Y., Muechler L., Kübler J., Felser C. Heusler, Weyl and Berry // Nature Mater. 2018. V. 3. P. 244–256.
10. Wang X.L. Dirac spin-gapless semiconductors: promising platforms for massless and dissipationless spintronics and new (quantum) anomalous spin Hall effects // Natl. Sci. Rev. 2017. V. 4. P. 252–257.
11. Ouardi S., Fecher G.H., Felser C., Kübler J. Realization of spin gapless semiconductors: the Heusler compound Mn_2CoAl // Phys. Rev. Lett. 2013. V. 110. P. 100401.
12. Heusler F. Ueber magnetische Manganlegierungen [German] // Verh. Dtsch. Phys. Ges. 1903. V. 5. 219 p.
13. Васильев А.Н., Бучельников В.Д., Такаги Т., Ховайло В.В., Эстрин Э.И. Ферромагнетики с памятью формы // УФН. 2003. V. 173. P. 577–608.
14. Entel P., Buchelnikov V.D., Khovailo V.V., Zayak A.T., Adeagbo W.A., Gruner M.E., Herper H.C., Wassermann E.F. Modelling the phase diagram of magnetic shape memory Heusler alloys // J. Phys. D: Appl. Phys. 2006. V. 39. P. 865–889.
15. Planes A., Manosa L., Acet M. Magnetocaloric effect and its relation to shape-memory properties in ferromagnetic Heusler alloys // J. Phys. Condens. Matter. 2009. V. 21. № 23. P. 233201.
16. Buchelnikov V.D., Taskaev S.V., Aliev A.M., Batdalov A.B., Gamzatov A.M., Korolyov A.V., Kourou N.I., Pushin V.G., Koledov V.V., Khovailo V.V. Magnetocaloric effect in $\text{Ni}_{1.19}\text{Mn}_{0.81}\text{Ga}$ Heusler alloys // Int. J. Appl. Electrom. 2006. V. 23. P. 65–69.
17. Gutfleisch O., Gottschall T., Fries M., Benke D., Radulov I., Skokov K.P., Wende H., Gruner M., Acet M., Entel P. Mastering hysteresis in magnetocaloric materials // Philos. Trans. R. Soc. A. 2016. V. 374. P. 20150308.
18. Nishino Y., Kato M., Asano S., Soda K., Hayasaki M., Mizutani U. Semiconductorlike behavior of electrical resistivity in Heusler-type Fe_2VAl compound // Phys. Rev. Lett. 1997. V. 79. P. 1909.
19. Nishino Y. Thermoelectric energy conversion. theories and mechanisms, materials, devices, and applications. Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials, 2021. P. 143–156.
20. Okulov V.I., Lonchakov A.T., Marchenkov V.V. Semiconductor-like behavior of electric transport in Fe–V–Al-based metallic alloys and their uncommon magnetic properties // Phys. Met. Metallogr. 2018. V. 119. P. 1325–1328.
21. Подгорных С.М., Свяжин А.Д., Шредер Е.И., Марченков В.В., Дякина В.П. Низкотемпературные электронные свойства сплавов гейслера Fe_2VAl и Fe_2CrAl : влияние отжига // ЖЭТФ. 2007. Т. 132. С. 52–56.
22. Лончаков А.Т., Марченков В.В., Окулов В.И., Окулова К.А., Говоркова Т.Е., Подгорных С.М. Новые проявления псевдощелевого состояния и спинового рассеяния электронов в низкотемпературных тепловых свойствах сплавов железо–ванадий–алюминий почти стехиометрического состава // ФНТ. 2015. Т. 41. С. 196–201.
23. Окулов В.И., Архипов В.Е., Говоркова Т.Е., Королев А.В., Марченков В.В., Окулова К.А., Шредер Е.И., Вебер Х.В. К экспериментальному обоснованию аномальной электронной плотности состояний в полупроводниковых сплавах железо–ванадий–алюминий // ФНТ. 2007. Т. 33. С. 907–915.
24. Jamer M.E., Wilfong B., Buchelnikov V.D. et al. Superconducting and antiferromagnetic properties of dual-phase V_3Ga // Appl. Phys. Lett. 2020. V. 117. P. 062401.
25. Gornicka K., Kuderowicz G., Carnicom E.M. et al. Soft-mode enhanced type-I superconductivity in LiPd_2Ge // Phys. Rev. B. 2020. V. 102. P. 024507.
26. Lv B.Q., Qian T., Ding H. Experimental perspective on three-dimensional topological semimetals // Rev. Mod. Phys. 2021. V. 93. P. 025002.
27. De Groot R.A., Mueller F.M., van Engen P.G., Bushow K.H.J. Half-metallic ferromagnets and their magneto-optical properties // J. Appl. Phys. 1984. V. 55. № 6. P. 2151.
28. De Groot R.A., Buschow K.H.J. Recent developments in half-metallic magnetism // J. Magn. Magn. Mater. 1986. V. 54–57. P. 1377–1380.
29. Kuebler J. First principle theory of metallic magnetism // Physica B + C. 1984. V. 127. P. 257–263.
30. De Groot R.A., von der Kraan A.M., K.H.J. Buschow. FeMnSb : A half-metallic ferrimagnet // J. Magn. Magn. Mater. 1986. V. 61. P. 330–336.
31. Shreder E., Streltsov S.V., Svyazhin A., Makhnev A., Marchenkov V.V., Lukoyanov A., Weber H.W. Evolution of the electronic structure and physical properties of Fe_2MeAl ($\text{Me} = \text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}$) Heusler alloys // J. Phys. Condens. Matter. 2008. V. 20. P. 045212.

32. *Fomina K.A., Marchenkov V.V., Shreder E.I., Weber H.W.* Electrical and optical properties of X_2YZ ($X = \text{Co}, \text{Fe}$; $Y = \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Ti}$; $Z = \text{Ga}, \text{Al}, \text{Si}$) Heusler alloys // *Solid State Phenom.* 2011. V. 168–169. P. 545–548.
33. *Шредер Е.И., Махнев А.А., Лукоянов А.В., Суреш К.Г.* Оптические свойства и электронная структура сплавов Гейслера Co_2TiGe и Co_2TiSn // *ФММ.* 2017. Т. 118. С. 1012–1016.
34. *Lidig C. et al.* Surface resonance of thin films of the Heusler half-metal Co_2MnSi probed by soft x-ray angular resolved photoemission spectroscopy // *Phys. Rev. B.* 2019. V. 99. P. 174432.
35. *Jourdan M. et al.* Direct observation of half-metallicity in the Heusler compound Co_2MnSi // *Nat. Commun.* 2014. V. 5. P. 3974.
36. *Irkhin V.Yu., Katsnelson M.I., Lichtenstein A.I.* Non-quasiparticle effects in half-metallic ferromagnets // *J. Phys. Condens. Matter.* 2007. V. 19. P. 315201.
37. *Irkhin V.Yu.* Non-quasiparticle states in a half-metallic ferromagnet with antiferromagnetic $s-d(f)$ interaction // *J. Phys. Condens. Matter.* 2015. V. 27. P. 155602.
38. *Edwards D.M., Hertz J.A.* Electron-magnon interactions in itinerant ferromagnetism. II. Strong ferromagnetism // *J. Phys. F.* 1973. V. 3. P. 2191.
39. *Ирхин В.Ю., Кацнельсон М.И.* Носители тока в узкозонном хаббардовском ферромагнетике в спин-волновой области температур // *ФТТ.* 1983. Т. 25. С. 3383–3388.
40. *Auslender M.I., Irkhin V.Yu.* Electron states in the s - f -exchange model of a ferromagnetic semiconductor in the spin-wave region. II. Degenerate semiconductors // *J. Phys. C: Solid State Phys.* 1985. V. 18. P. 3533–3546.
41. *Irkhin V.Yu., Katsnelson M.I.* Ground state and electron-magnon interaction in an itinerant ferromagnet: half-metallic ferromagnets // *J. Phys.: Condens. Matter.* 1990. V. 2. P. 7151.
42. *Irkhin V.Yu., Katsnelson M.I., Trefilov A.V.* On the reconstruction of the conduction electron spectrum in metal-oxide superconductors owing to the interaction with coherent atomic displacements // *Physica C.* 1989. V. 160. P. 397–410.
43. *Katsnelson M.I., Edwards D.M.* Correlation effects at the surface of an itinerant electron ferromagnet // *J. Phys.: Condens. Matter.* 1992. V. 4. P. 3289.
44. *Kevan S.D.* Angle-Resolved Photoemission: Theory and Current Applications. Elsevier, Amsterdam, 1992. 615 p.
45. *Wiesendanger R., Guentherodt H.-J., Guentherodt G., Cambino R.J., Ruf R.* Observation of vacuum tunneling of spin-polarized electrons with the scanning tunneling microscope // *Phys. Rev. Lett.* 1990. V. 65. P. 247.
46. *Chioncel L., Katsnelson M.I., de Groot R.A., Lichtenstein A.I.* Nonquasiparticle states in the half-metallic ferromagnet NiMnSb // *Phys. Rev. B.* 2003. V. 68. P. 144425.
47. *Fujiwara H. et al.* Observation of intrinsic half-metallic behavior of $\text{CrO}_2(100)$ epitaxial films by bulk-sensitive spin-resolved PES // *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 2017. V. 220. P. 46.
48. *Ohnuma Y., Matsuo M., Maekawa S.* Spin transport in half-metallic ferromagnets // *Phys. Rev. B.* 2016. V. 94. P. 184405.
49. *Kourov N.I., Marchenkov V.V., Korolev A.V., Belozeroва K.A., Weber H.W.* Peculiarities of the electronic transport in Co_2CrAl and Co_2CrGa half-metallic ferromagnets // *Curr. Appl. Phys.* 2015. V. 15. P. 839.
50. *Коуров Н.И., Марченков В.В., Пушкин В.Г., Белозерова К.А.* Особенности электрических свойств ферромагнитных сплавов Гейслера Ni_2MnGa и Co_2CrGa // *ЖЭТФ.* 2013. Т. 144. С. 141–146.
51. *Felser C., Fecher G.H.* Spintronics: from Materials to Devices. New York, USA: Springer, 2013. 369 p.
52. *Felser C., Hillebrands B.* New materials with high spin polarization: half-metallic Heusler compounds // *J. of Physics D: Appl. Physics.* 2007. V. 40. № 6. P. E01.
53. *Bombor D., Blum C.G.F., Volkonskiy O., Rodan S., Wurmehl S., Hess C., Büchner B.* Half-metallic ferromagnetism with unexpectedly small spin splitting in the Heusler compound Co_2FeSi // *Phys. Rev. Lett.* 2013. V. 110. P. 066601.
54. *Block T., Felser C., Jakob G. et al.* Large negative magnetoresistance effects in $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{Al}$ // *J. Solid State Chem.* 2003. V. 176. № 2. P. 646–651.
55. *Felser C., Heitkamp B., Kronast F. et al.* Investigation of a novel material for magnetoelectronics: $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{Al}$ // *J. Phys. Condens. Matter.* 2003. V. 15. № 41. P. 7019–7027.
56. *Irkhin V., Katsnelson M.* Temperature dependences of resistivity and magnetoresistivity for half-metallic ferromagnets // *Eur. Phys. J. B.* 2002. V. 30. P. 481–486.
57. *Srinivas K., Manivel Raja M., Kamat S.V.* Effect of partial substitution of silicon by other sp -valent elements on structure, magnetic properties and electrical resistivity of Co_2FeSi Heusler alloys // *J. Alloys Compd.* 2015. V. 619. P. 177–185.
58. *Marchenkov V.V., Kourov N.I., Irkhin V.Yu.* Half-metallic ferromagnets and spin gapless semiconductors // *Phys. Met. Metallogr.* 2018. V. 119. P. 1321–1324.
59. *Коуров Н.И., Марченков В.В., Белозерова К.А., Вебер Н.В.* Гальваномагнитные свойства сплавов Гейслера Fe_2YZ ($Y = \text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Ni}$; $Z = \text{Al}, \text{Si}$) // *ЖЭТФ.* 2015. Т. 148. № 5. С. 966.
60. *Коуров Н.И., Марченков В.В., Перевозчикова Ю.А., Вебер Н.В.* Гальваномагнитные свойства сплавов Гейслера Co_2YAl ($Y = \text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Ni}$) // *ФТТ.* 2017. Т. 59. С. 63.
61. *Коуров Н.И., Марченков В.В., Перевозчикова Ю.А., Еистерер М.* Гальваномагнитные свойства сплавов Гейслера Co_2FeZ ($Z = \text{Al}, \text{Si}, \text{Ga}, \text{Ge}, \text{In}, \text{Sn}, \text{Sb}$) // *ФТТ.* 2017. Т. 59. С. 2330.
62. *Марченков В.В., Ирхин В.Ю., Перевозчикова Ю.А., Терентьев П.Б., Семянникова А.А., Марченкова Е.Б., Еистерер М.* Кинетические свойства и полуметаллический магнетизм в сплавах Гейслера Mn_2YAl // *ЖЭТФ.* 2019. Т. 155. № 6. С. 1083.
63. *Marchenkov V.V., Perevozchikova Yu.A., Semiannikova A.A., Korenistov P.S., Marchenkova E.B., Domozhirova A.N.* Features of the electroresistivity, magnetic and galvanomagnetic characteristics in Co_2MeSi Heusler alloys // *Low Temp. Phys.* 2021. V. 47. P. 61.
64. *Kuebler J., Williams J.R. and Sommers C.B.* Formation and coupling of magnetic moments in Heusler alloys // *Phys. Rev. B.* 1983. V. 28. P. 1745.
65. *Halilov S.V., Kulatov E.T.* Electron and magneto-optical properties of half-metallic ferromagnets and uranium monochalcogenide // *J. Phys.: Cond. Mat.* 1991.

- V. 3. P. 6363–6374; Zh. Eksp. Theor. Fiz. 1989. V. 98. P. 1778.
66. *Matar S., Mohn P., Demazeau G., Siberchicot B.* The calculated electronic and magnetic structures of Fe_4N and Mn_4N // J. Phys. France. 1988. V. 49. P. 1761–1768.
 67. *Schwarz K.* CrO_2 predicted as a half-metallic ferromagnet // J. Phys. F. 1986. V. 16. P. L211.
 68. *Fujii S., Sugimura S., Ishida S. and Asano S.* Hyperfine fields and electronic structures of the Heusler alloys Co_2MnX ($X = \text{Al, Ga, Si, Ge, Sn}$) // J. Phys.: Cond. Mat. 1990. V. 2. P. 8583.
 69. *Ghosh S., Ghosh S.* Systematic understanding of half-metallicity of ternary compounds in Heusler and Inverse Heusler structures with 3d and 4d elements // Phys. Scr. 2019. V. 94. P. 125001.
 70. *Galanakis I., Mavropoulos P., Dederichs P.H.* Electronic structure and Slater-Pauling behaviour in half-metallic Heusler alloys calculated from first principles // Phys. D: Appl. Phys. 2006. V. 39. P. 765.
 71. *Chen X.Q., Podloucky R., Rogl P.* Ab initio prediction of half-metallic properties for the ferromagnetic Heusler alloys Co_2MSi ($M = \text{Ti, V, Cr}$) // J. Appl. Phys. 2006. V. 100. P. 113901.
 72. *Miura Y., Shirai M., Nagao K.* Ab initio study on stability of half-metallic Co-based full-Heusler alloys // J. Appl. Phys. 2006. V. 99. P. 08J112.
 73. *Ozdogan K., Sasioglu E., Galanakis I.* Slater-Pauling behavior in LiMgPdSn-type multifunctional quaternary Heusler materials: Half-metallicity, spin-gapless and magnetic semiconductors // J. Appl. Phys. 2013. V. 113. P. 193903.
 74. *Kundu A., Ghosh S., Banerjee R., Ghosh S., Sanyal B.* New quaternary half-metallic ferromagnets with large Curie temperatures // Sci. Rep. 2017. V. 7. P. 1803.
 75. *Bainsla L., Mallick A.I., Coelho A.A., Nigam A.K., Varaprasad B.S.D.Ch.S., Takahashi Y.K., Alam A., Suresh K.G., Hono K.* High spin polarization and spin splitting in equiatomic quaternary CoFeCrAl Heusler alloy // J. Magn. Magn. Mater. 2015. V. 394. P. 82.
 76. *Bahnes A., Boukortt A., Abbassa H., Aimouch D.E., Hayn R., Zaoui A.* Half-metallic ferromagnets behavior of a new quaternary Heusler alloys CoFeCrZ ($Z = \text{P, As and Sb}$): Ab-initio study // J. Alloys Compd. 2018. V. 731. P. 1208.
 77. *Соколов А.В.* Оптические свойства металлов. М.: ГИФМЛ, 1961. 464 с.
 78. *Kirillova M.M., Makhnev A.A., Shreder E.I., Dyakina V.P., Gorina N.B.* Interband Optical Absorption and Plasma Effects in Half-Metallic XMnY Ferromagnets // Phys. Stat. Sol. (b). 1995. V. 187. P. 231–240.
 79. *Шредер Е.И., Свяжсин А.Д., Белозерова К.А.* Оптические свойства сплавов Гейслера Co_2FeSi , Co_2FeAl , Co_2CrAl , Co_2CrGa // ФММ. 2013. Т. 114. № 5. С. 982–987.
 80. *Kandpal H.C., Fecher G.H., Felser C.* Calculated electronic and magnetic properties of the half-metallic, transition metal based Heusler compounds // J. Physics D: Appl. Phys. 2007. V. 40. P. 1507–1523.
 81. *Galanakis I., Mavropoulos Ph.* Spin-polarization and electronic properties of half-metallic Heusler alloys calculated from first principles // J. Phys.: Cond. Mat. 2007. V. 19. P. 315213.
 82. *Feng W., Fu X., Wan C., Yuan Zh., Han X., Van Quang N., Cho S.* Spin gapless semiconductor like Ti_2MnAl film as a new candidate for spintronics application // Phys. Status Solidi RRL. 2015. V. 9. P. 641.
 83. *Xu G.Z., Liu E.K., Du Y., Li G.J., Liu G.D., Wang W.H., Wu G.H.* A new spin gapless semiconductors family: Quaternary Heusler compounds // EPL. 2013. V. 102. P. 17007.
 84. *Dhakal R., Nepal S., Ray R.B., Paudel R., Kaphle G.C.* Effect of doping on SGS and weak half-metallic properties of inverse Heusler Alloys // J. Magn. Magn. Mater. 2020. V. 503. P. 166588.
 85. *Gao Q., Opahle I., Zhang H.* High-throughput screening for spin-gapless semiconductors in quaternary Heusler compounds // Phys. Rev. Materials. 2019. V. 3. P. 024410.
 86. *Rani D., Enamullah, Bainsla L., Suresh K.G., Alam A.* Spin-gapless semiconducting nature of Co-rich $\text{Co}_{1+x}\text{Fe}_{1-x}\text{CrGa}$ // Phys. Rev. B. 2019. V. 99. P. 104429.
 87. *Bainsla L., Mallick A.I., Manivel Raja M., Coelho A.A., Nigam A.K., Johnson D.D., Alam A., Suresh K.G.* Origin of spin gapless semiconductor behavior in CoFeCrGa : Theory and Experiment // Phys. Rev. B. 2015. V. 92. P. 045201.
 88. *Barwal V., Behera N., Husain S., Gupta N.K., Hait S., Pandey L., Mishra V., Chaudhary S.* Spin gapless semiconducting behavior in inverse Heusler $\text{Mn}_{2-x}\text{Co}_{1+x}\text{Al}$ ($0 \leq x \leq 1.75$) thin films // J. Magn. Magn. Mater. 2021. V. 518. P. 167404.
 89. *Bainsla L., Mallick A.I., Manivel Raja M., Nigam A.K., Varaprasad B.S.D.Ch.S., Takahashi Y.K., Alam A., Suresh K.G., Hono K.* Spin gapless semiconducting behavior in equiatomic quaternary CoFeMnSi Heusler alloy // Phys. Rev. B. 2015. V. 91. P. 104408.
 90. *Özdoğan K., Galanakis I.* Stability of spin-gapless semiconducting behavior in Ti_2CoSi , Ti_2MnAl , and Ti_2VAs Heusler compounds // Phys. Rev. Mater. 2021. V. 5. P. 024409.
 91. *Galanakis I., Özdoğan K., Şaşıoğlu E.* Spin-filter and spin-gapless semiconductors: The case of Heusler compounds // AIP Adv. 2016. V. 6. P. 055606.
 92. *Шредер Е.И., Махнев А.А., Лукоянов А.В., Марченков В.В.* Электронная структура и оптические свойства сплава $\text{Mn}_{1.8}\text{Co}_{1.2}\text{Al}$ и состояние спинового бесщелевого полупроводника // ФММ. 2018. Т. 119. № 11. С. 1127–1131.
 93. *Xu X.D., Chen Z.X., Sakuraba Y. et al.* Microstructure, magnetic and transport properties of a Mn_2CoAl Heusler compound // Acta Mater. 2019. V. 176. P. 33–42.
 94. *Fu H., Li Y., Ma L. et al.* Structures, magnetism and transport properties of the potential spin-gapless semiconductor CoFeMnSi alloy // J. Magn. Magn. Mater. 2019. V. 473. P. 16–20.
 95. *Narang P., Garcia C.A.C., Felser C.* The topology of electronic band structures // Nat. Mater. 2021. V. 20. P. 293–300.
 96. *Yan B., Felser C.* Topological Materials: Weyl Semimetals // Annu. Rev. Condens. Matter Phys. 2017. V. 8. P. 337.
 97. *Qi X.-L., Zhang S.-C.* Topological insulators and superconductors // Rev. Mod. Phys. 2011. V. 83. P. 1057.
 98. *Hasan M.Z., Kane C.L.* Colloquium: Topological insulators // Rev. Mod. Phys. 2010. V. 82. P. 3045.

99. *Armitage N.P., Mele E.J., Vishwanath A.* Weyl and Dirac semimetals in three-dimensional solids // *Rev. Mod. Phys.* 2018. V. 90. P. 015001.
100. *Xu S.Y., Belopolski I., Alidoust N., Neupane M., Bian G., Zhang C., Sankar R., Chang G., Yuan Z., Lee C.-C., Huang S.-M., Zheng H., Ma J., Sanchez D.S., Wang B., Bansil A., Chou F., Shibaev P.P., Lin H., Jia S., Hasan M.Z.* Discovery of a Weyl fermion semimetal and topological Fermi arcs // *Science*. 2015. V. 349. P. 613.
101. *Bernevig B.A., Hughes T.L., Zhang S.-C.* Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells // *Science*. 2006. V. 314. P. 1757–1761.
102. *Zhang H., Liu C.-X., Qi X.-L., Dai X., Fang Z., Zhang S.-C.* Topological insulators in Bi₂Se₃, Bi₂Te₃ and Sb₂Te₃ with a single Dirac cone on the surface // *Nat. Phys.* 2009. V. 5. P. 438.
103. *Chadov S., Qi X., Kübler J., Fecher G.H., Felser C., Zhang S.C.* Tunable multifunctional topological insulators in ternary Heusler compounds // *Nat. Mater.* 2010. V. 9. P. 541–545.
104. *Lin H., Wray L.A., Xia Y., Xu S., Jia S., Cava R.J., Bansil A., Hasan M.Z.* Half-Heusler ternary compounds as new multifunctional experimental platforms for topological quantum phenomena // *Nat. Mater.* 2010. V. 9. P. 546–549.
105. *Deng K., Wan G., Deng P., Zhang K., Ding S., Wang E., Yan M., Huang H., Zhang H., Xu Z., Denlinger J., Fedorov A., Yang H., Duan W., Yao H., Wu Y., Fan S., Zhang H., Chen X., Zhou S.* Experimental observation of topological Fermi arcs in type-II Weyl semimetal MoTe₂ // *Nat. Phys.* 2016. V. 12. P. 1105.
106. *Wu Y., Mou D., Jo N.H., Sun K., Huang L., Bud'ko S.L., Canfield P.C., Kaminski A.* Observation of Fermi arcs in the type-II Weyl semimetal candidate WTe₂ // *Phys. Rev. B*. 2016. V. 95. P. 121113(R).
107. *Wang Z. et al.* Time-reversal-breaking Weyl fermions in magnetic Heusler alloys // *Phys. Rev. Lett.* 2016. V. 117. P. 236401.
108. *Kübler J., Felser C.* Weyl points in the ferromagnetic Heusler compound Co₂MnAl // *Europhys. Lett.* 2016. V. 114. P. 47005.
109. *Wang Z., Weng H., Wu Q., Dai X., and Fang Z.* Three-dimensional Dirac semimetal and quantum transport in Cd₃As₂ // *Phys. Rev. B*. 2013. V. 88. P. 125427.
110. *Liu Z.K. et al.* Discovery of a three-dimensional topological Dirac semimetal, Na₃Bi // *Science*. 2014. V. 343. P. 864–867.
111. *Liu J., Vanderbilt D.* Weyl semimetals from noncentrosymmetric topological insulators // *Phys. Rev. B*. 2014. V. 90. P. 155316.
112. *Ирхин В.Ю., Скрябин Ю.Н.* Электронные состояния и аномальный эффект Холла в сильнокоррелированных топологических системах // *ЖЭТФ*. 2021. T. 160. C. 139–148.
113. *Suzuki T., Chisnell R., Devarakonda A. et al.* Large anomalous Hall effect in a half-Heusler antiferromagnet // *Nat. Phys.* 2016. V. 12. P. 1119–1123.
114. *Belopolski I., Manna K., Sanchez D.S. et al.* Discovery of topological Weyl fermion lines and drumhead surface states in a room temperature magnet // *Science*. 2019. V. 365. P. 1278.
115. *Yang H., Sun Y., Zhang Y. et al.* Topological Weyl semimetals in the chiral antiferromagnetic materials Mn₃Ge and Mn₃Sn // *New J. Phys.* 2017. V. 19. P. 015008.
116. *Ogasawara T., Kim J.-Y., Ando Y., Hirohata A.* Structural and antiferromagnetic characterization of non-collinear D0₁₉ Mn₃Ge polycrystalline film // *J. Magn. Magn. Mater.* 2019. V. 473. P. 7.
117. *Zhang Y., Sun Y., Yang H. et al.* Strong anisotropic anomalous Hall effect and spin Hall effect in the chiral antiferromagnetic compounds Mn₃X (X = Ge, Sn, Ga, Ir, Rh, and Pt). *Phys. Rev. B*. 2017. V. 95. P. 075128.
118. *Yanagi Y., Ikeda J., Fujiwara K. et al.* First-principles investigation of magnetic and transport properties in hole-doped shandite compounds Co₃In_xSn_{2-x}S₂ // *Phys. Rev. B*. 2021. V. 103. P. 205112.
119. *Chadov S., Wu S.C., Felser C., Galanakis I.* Stability of Weyl points in magnetic half-metallic Heusler compounds // *Phys. Rev. B*. 2017. V. 96. P. 024435.
120. *Shi W., Muechler L., Manna. K.* Prediction of a magnetic Weyl semimetal without spin-orbit coupling and strong anomalous Hall effect in the Heusler compensated ferrimagnet Ti₂MnAl // *Phys. Rev. B*. 2018. V. 97. P. 060406.
121. *Guin S.N., Manna K., Noky J. et al.* Anomalous Nernst effect beyond the magnetization scaling relation in the ferromagnetic Heusler compound Co₂MnGa // *NPG Asia Mater.* 2019. V. 11. P. 16.
122. *Ernst B., Sahoo R., Sun Y. et al.* Anomalous Hall effect and the role of Berry curvature in Co₂TiSn Heusler films // *Phys. Rev. B*. 2019. V. 100. P. 054445.
123. *Chaudhary P., Dubey K.K., Shukla G.K. et al.* Role of chemical disorder in tuning the Weyl points in vanadium doped Co₂TiSn // arXiv:2102.13389v1 [cond-mat.mtrl-sci] 26 Feb 2021.
124. *Leiva L., Granville S., Zhang Y. et al.* Giant spin Hall angle in the Heusler alloy Weyl ferromagnet Co₂MnGa // *Phys. Rev. B*. 2021. V. 103. P. L041114.
125. *Xu L., Li X., Ding L. et al.* Anomalous transverse response of Co₂MnGa and univalence of the room-temperature αA_{ij}/σA_{ij} ratio across topological magnets // *Phys. Rev. B*. 2020. V. 101. P. 180404.
126. *Huang C.-Y., Aramberrí H., Lin H. et al.* Noncollinear magnetic modulation of Weyl nodes in ferrimagnetic Mn₃Ga // *Phys. Rev. B*. 2020. V. 102. P. 094403.
127. *Sumida K., Sakuraba Y., Masuda K. et al.* Spin-polarized Weyl cones and giant anomalous Nernst effect in ferromagnetic Heusler films // *Commun. Mater.* 2020. V. 1. P. 89.
128. *Kono T., Kakoki M., Yoshikawa T. et al.* Visualizing half-metallic bulk band structure with multiple Weyl cones of the Heusler ferromagnet // *Phys. Rev. Lett.* 2020. V. 125. P. 216403.
129. *Roy S., Singha R., Ghosh A. et al.* Anomalous Hall effect in half-metallic Heusler compound Co₂TiX (X = Si, Ge) // *Phys. Rev. B*. 2020. V. 102. P. 085147.
130. *Amrich O., Monir M. El A., Baltach H., Omran S.B., Sun X.-W., Wang X., Al-Douri Y., Bouhemadou A., Khenata R.* Half-metallic ferrimagnetic characteristics of Co₂YZ (Z = P, As, Sb, and Bi) new full-Heusler alloys: a DFT study // *J. Supercond. Nov. Magn.* 2018. V. 3. № 1. P. 241–250.
131. *Jain R., Lakshmi N., Jain V.K., Jain V., Chandra A.R., Venugopalan K.* Electronic structure, magnetic and optical properties of Co₂TiZ (Z = B, Al, Ga, In) Heusler alloys // *J. Magn. Magn. Mater.* 2018. V. 448. P. 278–286.

132. *Sukhender, Mohan L., Kumar S., Sharma D., Verm A.S.* Structural, electronic, optical and magnetic properties of Co_2CrZ ($Z = \text{Al, Bi, Ge, Si}$) Heusler compounds // *East Eur. J. Phys.* 2020. V. 2. P. 69–80.
133. *Li Y., Qin L., Huang S.Y., Zhang X.M., Li L.W.* Electronic structure, magnetic properties and martensitic transformation of Ga_2MnTM ($\text{TM} = \text{Sc, Y, Lu}$) Heusler alloys // *J. Magn. Magn. Mater.* 2021. V. 529. P. 167891.
134. *Shakil M., Mushtaq S., Zeba I., Gillani S.S.A., Khan M.I., Arshad H., Rafique M.* Structural, electronic, magnetic and thermoelectric properties of full Heusler alloys Co_2YZ ($Z = \text{S, Ge, Se}$): A first principles calculation // *Physica B: Condens. Matter.* 2021. V. 602. P. 412558.
135. *Mubarak A.A., Saad S., Hamioud F., Al-Elaimi M.* Structural, thermo-elastic, electro-magnetic and thermoelectric attributes of quaternary CoNbMnX ($X = \text{Al, Si}$) Heusler alloys // *Solid State Sci.* 2021. V. 111. P. 106397.
136. *El Krimi Y., Masrour R., Jabar A.* A comparative study of structural electronic and magnetic properties of full-Heuslers Co_2MnZ ($Z = \text{Al, Ge and Sn}$) // *J. Mol. Struct.* 2020. V. 1220. P. 128707.
137. *Marchenkov V.V., Perevozchikova Yu.A., Kourov N.I., Irkhin V.Yu., Eisterer M., Gao T.* Peculiarities of the electronic transport in half-metallic Co-based Heusler alloys // *J. Magn. Magn. Mater.* 2018. V. 459. P. 211.
138. *Marchenkov V.V., Irkhin V.Y., Perevozchikova Y.A.* Peculiarities of electronic transport and magnetic state in half-metallic ferromagnetic and spin gapless semiconducting Heusler alloys // *Phys. Met. Metallogr.* 2019. V. 120. P. 1325–1332.
139. *Перевозчикова Ю.А., Семянникова А.А., Доможирова А.Н., Терентьев П.Б., Марченкова Е.Б., Патраков Е.И., Еистерер М., Коренистов П.С., Марченков В.В.* Экспериментальное наблюдение аномалий электрических, магнитных и гальваномагнитных свойств сплавов Гейслера на основе кобальта при изменении содержания переходных элементов // *ФНТ.* 2019. Т. 45. № 7. С. 921–927.
140. *Semiannikova A.A., Perevozchikova Yu.A., Irkhin V.Yu., Marchenkova E.B., Korenistov P.S., Marchenkov V.V.* Electronic, magnetic and galvanomagnetic properties of Co-based Heusler alloys: possible states of a half-metallic ferromagnet and spin gapless semiconductor // *AIP Adv.* 2021. V. 11. P. 15139–15143.
141. *Luo H., Zhu Z., Ma L. et al.* Effect of site preference of 3d atoms on the electronic structure and half-metallicity of Heusler alloy Mn_2YAl // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2008. V. 41. P. 055010.
142. *Faleev S.V., Ferrante Y., Jeong J., Samant M.G., Jones B., Parkin S.S.P.* Heusler compounds with perpendicular magnetic anisotropy and large tunneling magnetoresistance // *Phys. Rev.* 2017. V. 1. P. 024402.
143. *Makinistian L., Faiz M.M., Panguluri R.P., Balke B., Wurmehl S., Felser C. et al.* On the half-metallicity of Co_2FeSi Heusler alloy: an experimental and ab initio study // *Phys. Rev. B.* 2013. V. 87. P. 220402.
144. *Jamer M.E., Wang Y.J., Stephen G.M. et al.* Compensated ferrimagnetism in the zero-moment Heusler alloy Mn_3Al // *Phys. Rev. Appl.* 2017. V. 7. P. 064036.
145. *Chatterjee S., Dutta P., Singha P., Giri S., Banerjee A.* Emergence of compensated ferrimagnetic state in $\text{Mn}_{2-x}\text{Ru}_{1+x}\text{Ga}$ ($x = 0.2, 0.5$) alloys // *J. Magn. Magn. Mater.* 2021. V. 532. P. 167956.
146. *Шредер Е.И., Лукоянов А.В., Марченков В.В.* Оптические свойства и электронная структура сплавов $\text{Co}_2\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Al}$ ($x = 0, 0.4, 0.6, 1.0$) // *ФТТ.* 2016. Т. 58. № 1. С. 158–162.
147. *Buchelnikov V.D., Sokolovskiy V.V., Miroshkina O.N., Baigutlin D.R., Zagrebin M.A., Barbiellini B., Lähderanta E.* Prediction of a Heusler alloy with switchable metal-to-half-metal behavior // *Phys. Rev. B.* 2021. V. 103. P. 054414.
148. *Hou Z.P., Wang Y., Xu G.Z., Zhang X.M., Liu E.K., Wang W.Q., Liu Z.Y., Xi X.K., Wang W.H., Wu G.H.* Transition from semiconducting to metallic-like conducting and weak antilocalization effect in single crystals of LuPtSb // *Appl. Phys. Lett.* 2015. V. 10. P. 102102.
149. *Ludbrook B.M., Dubuis G., Puichaud A.H., Ruck B.J., Granville S.* Nucleation and annihilation of skyrmions in Mn_2CoAl observed through the topological Hall effect // *Sci. Rep.* 2017. V. 7. P. 13620.
150. *Ghosh S.* Insights into the half-metallicity in Heusler compounds with 3d and 4d transition metal elements // PhD Thesis, Indian Institute of Technology Guwahati, Asam, India, 2019.
151. *Ahmad A., Srivastava S.K., Das A.K.* Phase stability and the effect of lattice distortions on electronic properties and half-metallic ferromagnetism of Co_2FeAl Heusler alloy: an ab initio study // *J. Phys. Condens. Matter.* 2020. V. 32. P. 415606.
152. *Adebambo P.O., Adetunji B.I., Olowofela J.A., Oguntuase J.A., Adebayo G.A.* Prediction of metallic and half-metallic structure and elastic properties of $\text{Fe}_2\text{Ti}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Al}$ Heusler alloys // *Physica B: Condens. Matter.* 2016. V. 485. P. 103–109.
153. *Azar S.M., Hamad B.A., Khalifeh J.M.* Structural, electronic and magnetic properties of $\text{Fe}_{3-x}\text{Mn}_x\text{ZFe}_{3-x}\text{Mn}_x$ ($Z = \text{Al, Ge, Sb}$) Heusler alloys // *J. Magn. Magn. Mater.* 2012. V. 324. P. 1776–1785.
154. *Uvarov N.V., Kudryavtsev Y.V., Kravets A.F., Vovk A.Ya., Borges R.P., Godinho M., Korenivski V.* Electronic structure, optical and magnetic properties of Co_2FeGe Heusler alloy films // *J. Appl. Phys.* 2012. V. 112. P. 063909.
155. *Dash S., Lukoyanov A.V., Nancy N., Mishra D., Rasi U.P.M., Gangineni R.B., Vasundhara M., Patra M.* Structural stability and magnetic properties of Mn_2FeAl alloy with a β -Mn structure // *J. Magn. Magn. Mater.* 2020. V. 513. P. 167205.