

«مقاله پژوهشی»

## مطالعه ساختار الکترونی و ویژگی‌های مغناطیسی ترکیب هسلر $\text{Co}_2\text{TaGa}$

سیدمجتبی علوی صدر<sup>1\*</sup>، زهره دادی گیو<sup>2</sup>

1. استادیار، فیزیک، گروه علوم پایه، دانشگاه صنعتی بیرجند، بیرجند، ایران

2. مربی، فیزیک، گروه علوم پایه، دانشگاه صنعتی بیرجند، بیرجند، ایران

تاریخ دریافت: 1399/05/04 تاریخ پذیرش: 1399/06/10

## The Study of the Electronic Structure and Magnetic Properties of $\text{Co}_2\text{TaGa}$ Heusler Compound

S. M. Alavisadr<sup>\*1</sup>, Z. Dadigiv<sup>2</sup>

1. Assistant Professor, Physics, Basic Sciences Department, Birjand University of Technology, Birjand, Iran

2. Instructor, Physics, Basic Sciences Department, Birjand University of Technology, Birjand, Iran

Received: 2020/07/25 Accepted: 2020/08/31

### Abstract

In the present work, by using the first-principles calculations within the density functional theory framework, the structural, electronic and magnetic properties of  $\text{AlCu}_2\text{Mn}$  and  $\text{CuHg}_2\text{Ti}$  crystal structures of the full-Heusler compound  $\text{Co}_2\text{TaGa}$  were studied. The results indicate that the ground state of this compound is  $\text{AlCu}_2\text{Mn}$ -Type with ferromagnetic order and a magnetic moment of  $2.00\mu_B$ . The results of electronic structure calculations show that the ground state has a half-metallic nature with an energy gap of  $0.48\text{eV}$  and 100% spin polarization. According to the results of this study, the  $\text{Co}_2\text{TaGa}$  Heusler compound can be recommended as a novel material for future aims in spintronic applications.

### Keywords

Half-Metal, Density Functional Theory, Electronic Structure, Magnetic Properties.

### چکیده

در مطالعه حاضر، ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و مغناطیسی ساختارهای بلوری  $\text{AlCu}_2\text{Mn}$  و  $\text{CuHg}_2\text{Ti}$  از ترکیب هسلر کامل  $\text{Co}_2\text{TaGa}$ ، با استفاده از محاسبات اصول اولیه در چارچوب نظریه تابعی چگالی مطالعه شدند. نتایج نشان می‌دهند که حالت پایه این ترکیب دارای ساختار بلوری از نوع  $\text{AlCu}_2\text{Mn}$  با نظم فرومغناطیسی و گشتاور مغناطیسی  $2.00\mu_B$  است. نتایج محاسبات ساختار الکترونی نشان می‌دهند که حالت پایه دارای خاصیت نیمه فلزی با گاف نواری  $0.48\text{eV}$  و قطبش اسپینی 100% است. بر اساس نتایج این پژوهش، ترکیب هسلر  $\text{Co}_2\text{TaGa}$  می‌تواند به عنوان ماده جدیدی برای اهداف اسپینترونیک آینده توصیه شود.

### واژگان کلیدی

نیمه فلز، نظریه تابعی چگالی، ساختار الکترونی، خواص مغناطیسی.

## مقدمه

منحصربه‌فرد مشاهده شده در این ترکیبات که مناسب کاربردهای مختلف آنها در نیمه فلزات، آلیاژهای حافظه‌دار شکلی مغناطیسی، ابررسانایی، اسپینترونیکی و ترموالکتریک است، سبب شده تا پژوهشگران، بسیار به آنها توجه کنند. [16, 17]. این ترکیبات به سه دسته نیم‌هسلر (XYZ)، هسلر کامل (X<sub>2</sub>YZ) و هسلر چهارتایی (XX'YZ) تقسیم‌بندی می‌شوند که در آنها X، X' و Y نماد فلزات واسطه و Z بیانگر عنصری از گروه 3، 4 یا 5 جدول تناوبی است. ترکیبات هسلر کامل از نظر ساختار بلوری می‌توانند در دو نوع AlCu<sub>2</sub>Mn (گروه فضایی Fm $\bar{3}$ m با شماره 225) و CuHg<sub>2</sub>Ti (گروه فضایی F4 $\bar{3}$ m با شماره 216) متبلور شوند. ساختار بلوری نوع اول، هسلر نرمال و ساختار بلوری نوع دوم، هسلر معکوس نیز خوانده می‌شود [2, 18]. در فاز بلوری نرمال، اتم‌های X در موقعیت (0,0,0) و (0,0,0,5) در موقعیت (0,0,0,5) و اتم Y در موقعیت (0,25, 0,25, 0,25) و اتم Z در موقعیت (0,75, 0,75, 0,75) قرار دارند [12]. اما در فاز بلوری معکوس، اتم‌های X در موقعیت (0,0,0) و (0,25, 0,25, 0,25) و اتم Y در موقعیت (0,5, 0,5, 0,5) و اتم Z در موقعیت (0,75, 0,75, 0,75) قرار دارند (شکل 1).

در میان ترکیبات هسلر کامل، ترکیبات بر پایه Co، به علت دمای کوری، گشتاور مغناطیسی و قطبش اسپینی بالا دارای اهمیت هستند؛ در نتیجه، مطالعات زیادی بر روی این دسته از مواد انجام شده است [19]. اخیراً، ساختار الکترونی و خواص مغناطیسی ترکیب هسلر CuHg<sub>2</sub>Ti به وسیله ببری و همکارانش [20] به صورت نظری مطالعه شده است. نتایج مطالعات آنها نشان می‌دهد این ماده، یک نیمه فلز با گشتاور مغناطیسی 2,00m<sub>B</sub>، گاف نواری 0,74 eV و قطبش اسپینی 100% است که مناسب اهداف اسپینترونیکی است. با جانشینی Ga در مکان Al، عنصری هم گروه با Al، اما با شعاع اتمی بزرگ‌تر، انتظار می‌رود به سبب افزایش حجم شبکه، پهنای گاف نواری کاهش یابد، در حالی که گشتاور مغناطیسی بدون تغییر باقی بماند.

بر این اساس، در این مقاله، ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و مغناطیسی ترکیب هسلر کامل CuHg<sub>2</sub>Ti به صورت نظری، با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافته به علاوه اوربیتال‌های جای‌گزیده، مطالعه شد. از آنجا که بیشتر پیشرفت‌های حاصل شده بر روی ترکیبات هسلر، با استفاده از محاسبات نظری حاصل شده است، استفاده از روش‌های

دانش اسپینترونیکی یا الکترونیک بر پایه اسپین، شامل مطالعه کنترل و دست‌کاری درجات آزادی اسپین در یک سیستم است که در آن علاوه بر بار الکترون، اسپین نیز به عنوان یک درجه آزادی بیشتر مورد استفاده قرار می‌گیرد [1]. همه قطعات در حوزه اسپینترونیکی نیازمند یک چشمه اسپین هستند. فلزات مغناطیسی به دلیل قطبش اسپینی کم (کمتر از 50%) برای این منظور مناسب نیستند؛ در نتیجه، از میان مواد مختلف، مواد نیمه فلز فرو یا فری مغناطیسی، به سبب قطبش اسپینی بالا، برای این اهداف مناسب‌تر هستند و در توسعه دانش اسپینترونیکی سهم عمده‌ای داشته‌اند [2-5].

پس از کشف مواد نیمه فلز، مطالعه بر روی این دسته از مواد، به سرعت افزایش یافت و به سبب کاربرد وسیعشان در قطعات اسپینترونیکی، تلاش‌های گسترده‌ای برای کشف مواد نیمه فلز جدیدتر صورت گرفت [6-10]. رفتار نیمه فلزی در انواع مختلفی از مواد مانند برخی اکسیدها (Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> و CrO<sub>2</sub>)، منگنیت‌ها (La<sub>0,7</sub>Sr<sub>0,3</sub>MnO<sub>3</sub>) و همچنین ترکیبات هسلر مشاهده شده است [6].

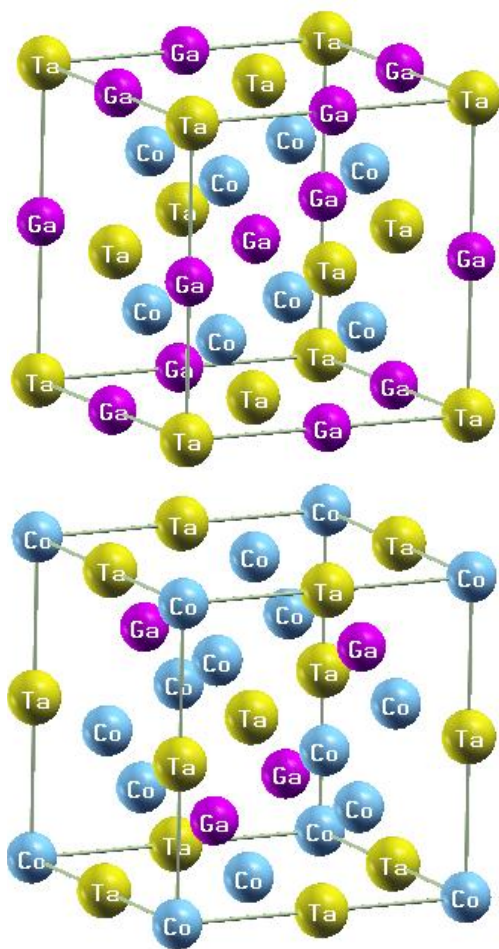
در مواد نیمه فلز، یک نوار اسپینی خصلت فلزی و نوار دیگر خصلت نیمه رسانایی از خود نشان می‌دهد؛ در نتیجه ماده در مجموع دارای خصلت نیمه فلزی است [11, 12]. به بیان دیگر، برای این دسته از مواد، چگالی حالت‌های الکترونی در تراز فرمی، N(E<sub>F</sub>)، تنها برای یک نوار اسپینی (بالا/پایین) برابر صفر است و این به مفهوم آن است که قطبش اسپینی P برای آنها برابر صفر است [13]:

$$P = \left| \frac{N_-(E_F) - N_+(E_F)}{N_-(E_F) + N_+(E_F)} \right| \cdot 100 \quad (1)$$

که در آن N<sub>-</sub>(E<sub>F</sub>) و N<sub>+</sub>(E<sub>F</sub>) به ترتیب چگالی حالت‌های الکترونی در تراز فرمی برای نوار اسپین پایین و بالا است.

ترکیبات هسلر که به خانواده مواد نیمه فلز تعلق دارند، به سبب قطبش اسپینی و دمای کوری بالا و همچنین تنوع فراوانشان، اهمیت دارند [14, 15]. فردریش هسلر این ترکیبات را در سال 1903 میلادی کشف کرد. ویژگی‌های

شکل مشاهده می‌شود، کمینه انرژی بر روی این نمودارها متناظر با حالت فرومغناطیسی برای ساختار نوع  $\text{AlCu}_2\text{Mn}$  است؛ در نتیجه، این ساختار بلوری از نظر انرژی مطلوب‌تر است و می‌توان آن را به عنوان حالت پایه برای ترکیب  $\text{Co}_2\text{TaGa}$  در نظر گرفت. ثابت شبکه تعادلی این حالت، از طریق برازش با معادله حالت مورناگون برابر  $a = 5,9645 \text{ \AA}$  محاسبه شد که بسیار نزدیک به ثابت شبکه ترکیب  $\text{Co}_2\text{TaAl}$  ( $5,96 \text{ \AA}$ ) است [20].



شکل 1. ساختار بلوری نوع  $\text{AlCu}_2\text{Mn}$  (شکل بالا) و  $\text{Co}_2\text{TaGa}$  (شکل پایین) برای ترکیب  $\text{Co}_2\text{TaGa}$

نظری در پیش‌بینی رفتار نیمه فلزی این مواد از لحاظ اقتصادی نیز مقرون به صرفه است.

### جزئیات روش محاسبات

محاسبات ساختار الکترونی با استفاده از کد محاسباتی WIEN2K، در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT)، انجام شد. این محاسبات از روش امواج تخت بهبود یافته خطی شده (FP-LAPW+lo) با پتانسیل کامل به علاوه اوربیتال‌های جای‌گرفته استفاده می‌کند که یکی از دقیق‌ترین روش‌های مطالعه ساختار نواری در جامدات است [21]. مقادیر شعاع کره مافین تین برای اتم‌های Co، Ta و Ga به ترتیب برابر  $2,25$ ،  $2,25$  و  $2,20$  بوهر انتخاب شدند. پارامترهای بهینه  $R_{mt} = 8\%$ ،  $K_{max} = 8$ ،  $G_{max} = 14$  و  $K\text{-point} = 3000$  با استفاده از ملاک هم‌گرایی همبستگی-تبادلی از تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA-PBE96) [22] استفاده شد.

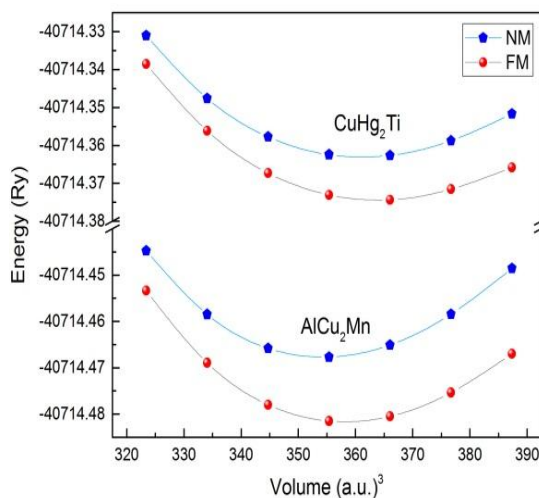
### یافته‌ها

برای به دست آوردن حالت پایه ترکیب  $\text{CuHg}_2\text{Ti}$  ابتدا هر دو نوع ساختار بلوری محتمل  $\text{AlCu}_2\text{Mn}$  و  $\text{CuHg}_2\text{Ti}$  با استفاده از اطلاعات بلورشناسی ارائه شده در مراجع مختلف شبیه‌سازی شدند (شکل 1).

برای شروع محاسبات، از ثابت شبکه تعادلی ترکیب  $\text{Co}_2\text{TaAl}$  [20] استفاده شد. در ادامه برای به دست آوردن ثابت شبکه تعادلی ترکیب  $\text{Co}_2\text{TaGa}$ ، نیاز است تا مقادیر انرژی کل ترکیب برای هر یک از دو ساختار بلوری محتمل به صورت جداگانه از طریق افزایش و کاهش در حجم شبکه بلوری محاسبه گردد. سپس از طریق برازش با معادله حالت مورناگون [23] مقادیر ثابت شبکه تعادلی و انرژی متناظر با آن، به همراه سایر کمیت‌های مرتبط با ساختار بلوری محاسبه گردید.

شکل 2 تغییرات انرژی کل بلور را به صورت تابعی از حجم شبکه، در دو حالت مغناطیسی (FM) و غیرمغناطیسی (NM) برای هر یک از دو ساختار بلوری  $\text{AlCu}_2\text{Mn}$  و  $\text{CuHg}_2\text{Ti}$  نشان می‌دهد. چنان که در

برای ترکیب  $\text{Co}_2\text{TaGa}$  مقدار  
 $Z_i = 2 \times 9 + 5 + 3 = 26$  در نتیجه انتظار می‌رود  
 $M^{\text{tot}} = 26 - 24 = 2$  مگنتون بوهر باشد. با توجه به  
 نتایج جدول 1، گشتاور مغناطیسی کل برای حالت پایه  
 (فاز  $\text{AlCu}_2\text{Mn}$ ) برابر  $200m_B$  برآورد شد. چنان که  
 ملاحظه می‌شود این نتیجه در توافق بسیار خوب با قانون  
 اسلاتر - پائولی است. با توجه به نتایج جدول 1، سهم  
 عمده در گشتاور مغناطیسی کل این ترکیب، متعلق به  
 اتم‌های Co است و چون جهت گشتاور مغناطیسی آنها  
 هم‌جهت است، ماده در مجموع دارای نظم فرو  
 مغناطیسی است.



شکل 2. تغییرات انرژی بر حسب حجم در حالت‌های مغناطیسی و غیر مغناطیسی برای ترکیب  $\text{Co}_2\text{TaGa}$  با ساختارهای بلوری نوع  $\text{CuHg}_2\text{Ti}$  و  $\text{AlCu}_2\text{Mn}$

جدول 1. مقادیر پارامتر شبکه تعادلی a، انرژی همدوسی و تشکیل، تفاوت انرژی بین حالت مغناطیسی و غیرمغناطیسی، گشتاور کل و جزئی در حالت مغناطیسی برای ترکیب  $\text{Co}_2\text{TaGa}$  در ساختارهای بلوری نوع  $\text{AlCu}_2\text{Mn}$  و  $\text{CuHg}_2\text{Ti}$

کمیت‌ها	ساختار	
	$\text{AlCu}_2\text{Mn}$	$\text{CuHg}_2\text{Ti}$
a (Å)	5,9645	5,9966
$E_c$ (eV)	- 23,32	- 21,86
$E_f$ (eV)	- 1,79	- 0,33
DE (eV)	- 0,19	- 0,15
$M^{\text{tot}} (m_B)$	200	1,63
$M^{\text{Co}(1)} (m_B)$	104	0,55
$M^{\text{Co}(2)} (m_B)$	104	1,26
$M^{\text{Ta}} (m_B)$	- 0,02	- 0,11
$M^{\text{Ga}} (m_B)$	+0,01	+0,01

جدول 1، مقادیر کمیت‌های به دست آمده از این روش را به همراه انرژی همدوسی ( $E_c$ )، انرژی تشکیل ( $E_f$ ) و تفاوت انرژی بین حالت مغناطیسی و غیرمغناطیسی ( $DE = E_{\text{FM}} - E_{\text{NM}}$ ) ارائه می‌دهد. مقادیر منفی به دست آمده برای  $E_c$  و  $E_f$ ، بیانگر پایداری ترمودینامیکی و امکان شکل‌گیری و ساخت این ترکیب به صورت تجربی است. بزرگ‌تر بودن قدرمطلق  $E_c$  و  $E_f$  برای فاز بلوری  $\text{AlCu}_2\text{Mn}$  در مقایسه با  $\text{CuHg}_2\text{Ti}$ ، تایید کننده پایداری بیشتر فاز  $\text{AlCu}_2\text{Mn}$  است. با دانستن تفاوت انرژی بین حالت مغناطیسی و غیرمغناطیسی و با استفاده از مدل هایزنبرگ و رابطه  $T_C = DE / 3k_B$  [7]، دمای کوری این ترکیب برابر 738 K (بالتر از دمای اتاق) برآورد شد که استفاده از آن را در قطعات اسپینترونیک و مغناطوالکترونیک ممکن می‌سازد.

چنان‌که ملاحظه می‌شود، علاوه بر سهم اتم‌های کبالت در ترکیب، گشتاورهای مغناطیسی کوچکی نیز در مکان اتم‌های Ta و Ga وجود دارد که ناشی از قطبش اسپینی حاصل از هیبریدشدگی حالت‌های p این اتم‌ها، با حالت‌های 3d اتم‌های کبالت است. مقادیر صحیح  $200 m_B$  و غیرصحیح  $1,63 m_B$  برای گشتاور

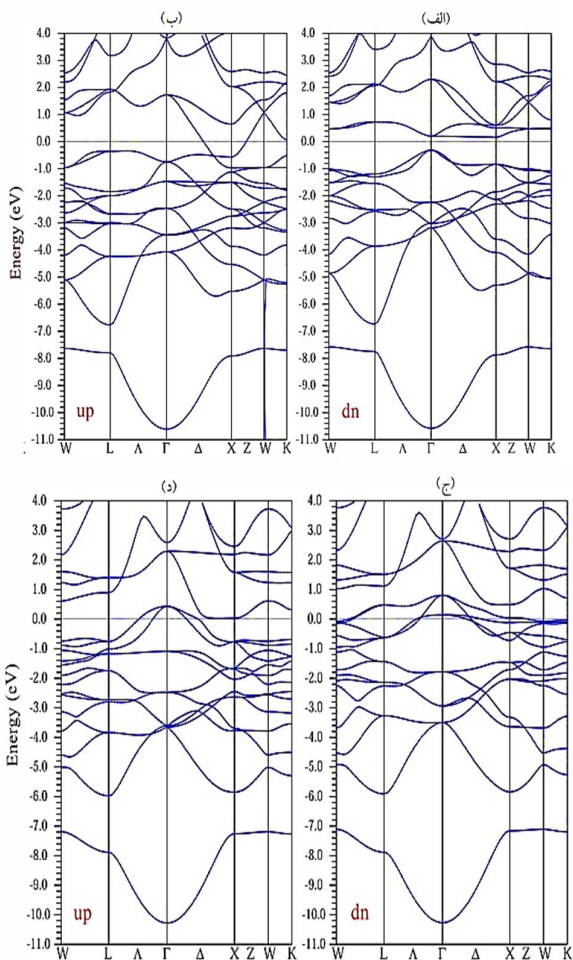
گشتاور مغناطیسی کل در ترکیبات هسلر کامل معمولاً یک عدد صحیح است که از رابطه  $M^{\text{tot}} = 24 - Z_i$  (بر حسب مگنتون بوهر) پیروی می‌کند که در آن  $Z_i$  تعداد کل الکترون‌های ظرفیت بر واحد فرمول است. این رابطه، قانون اسلاتر - پائولی [2] نامیده می‌شود.

فرمی  $E_F$  انتخاب شده است. با توجه به شکل، نوارهای اسپین بالا، برای هر دو فاز بلوری، تراز فرمی را قطع می‌کنند و تقریباً مشابه یکدیگر نیز هستند. این مطلب بیانگر آن است که نوار اسپین بالا خصلت فلزی از خود نشان می‌دهد. اما برای نوار اسپین پایین در فاز  $\text{AlCu}_2\text{Mn}$  وضعیت متفاوت است و گاف کوچکی به بزرگی  $0.48 \text{ eV}$  (غیرمستقیم در راستای  $G \rightarrow X$ ) اطراف  $E_F$  مشاهده می‌شود که بیانگر بروز خصلت نیمه فلزی در این فاز بلوری است. این مقدار، کوچک‌تر از گاف انرژی گزارش داده شده برای ترکیب  $\text{Co}_2\text{TaAl}$  ( $0.71 \text{ eV}$ ) است [4].

همچنین مقدار گاف اسپین - فلیپ  $D_{s-f}$  [17] برای حالت پایه ترکیب برابر  $0.32 \text{ eV}$  برآورد شد. گاف اسپین - فلیپ معیار مناسبی از وجود خاصیت نیم-فلزی در مواد است و به صورت کمترین انرژی لازم برای آن که الکترونی با اسپین پایین از لبه بالایی نوار ظرفیت، ضمن تغییر جهت اسپین اش، به تراز فرمی منتقل شود، نامیده می‌شود [24]؛ بنابراین، مقدار غیرصفر برای این کمیت بیانگر آن است که حالت پایه این ترکیب یک نیمه‌فلز واقعی است؛ در نتیجه انتظار می‌رود فاز  $\text{AlCu}_2\text{Mn}$  ترکیب  $\text{Co}_2\text{TaGa}$  (حالت پایه)، برای اهداف اسپینترونیک و مغناطوالکترونیک مناسب باشد.

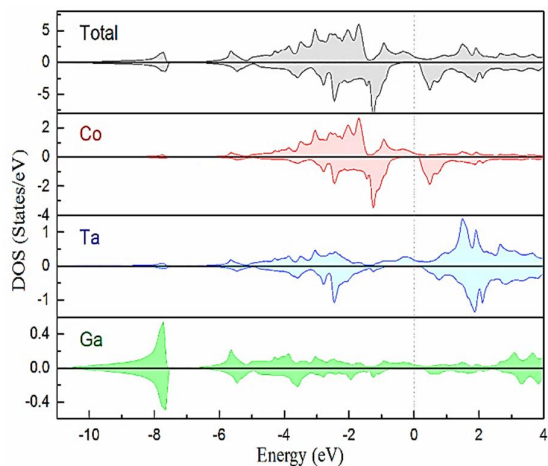
برای درک بهتر ساختار نواری  $\text{Co}_2\text{TaGa}$ ، نیاز به بررسی منحنی‌های چگالی حالت‌های الکترونی (DOS) ترکیب داریم که در ادامه، تنها منحنی‌های DOS حالت پایه (فاز  $\text{AlCu}_2\text{Mn}$ )، مطالعه می‌شوند. شکل 4، منحنی DOS کل را برای ترکیب  $\text{Co}_2\text{TaGa}$  و عناصر سازنده‌اش نمایش می‌دهد. در منحنی DOS کل ترکیب، حالت‌های بسیار جای‌گزیده‌ای که در گستره انرژی حدود  $7.5 - 11 \text{ eV}$  قرار دارند، مربوط به حالت‌های s اتم Ga هستند. حالت‌های کمتر جای‌گزیده که از طریق یک گاف انرژی از حالت‌های جای‌گزیده مذکور جدا شده‌اند و در گستره انرژی حدود تراز فرمی تا  $6 \text{ eV}$  - قرار دارند (نوار اسپین بالا)، بیشتر متعلق به حالت‌های d اتم‌های Co و Ta و همچنین حالت‌های p اتم Ga است که با یکدیگر هیبرید شده‌اند (اوربیتال‌های

مغناطیسی کل ترکیب  $\text{Co}_2\text{TaGa}$ ، به ترتیب برای ساختار بلوری نوع  $\text{AlCu}_2\text{Mn}$  و  $\text{CuHg}_2\text{Ti}$ ، بیانگر بروز خصلت نیمه فلزی و فلزی آنها است. این نتیجه از روی شکل ساختار نواری آنها (شکل 3) نیز قابل استنتاج است.



شکل 3. ساختارهای نواری اسپین پایین و بالا برای فازهای بلوری (الف) و (ب)  $\text{AlCu}_2\text{Mn}$ ، (ج) و (د)  $\text{CuHg}_2\text{Ti}$  در ترکیب  $\text{Co}_2\text{TaGa}$

شکل 3 ساختارهای نواری اسپین بالا و پایین را برای فازهای بلوری نوع  $\text{AlCu}_2\text{Mn}$  و  $\text{CuHg}_2\text{Ti}$  از ترکیب  $\text{Co}_2\text{TaGa}$  نشان می‌دهد. مبدا انرژی، سطح



شکل 4. منحنی DOS کل  $\text{Co}_2\text{TaGa}$  و اتم‌های سازنده‌اش در حالت پایه

بررسی ساختار نواری و چگالی حالت‌های الکترونی نشان داد که این ماده دارای خصلت نیمه فلزی با گاف انرژی غیرمستقیم حدود 0,48 eV در نوار اسپین پایین است که مناسب اهداف اسپینترونیک و مغناطوالکترونیک است.

(p-d). درجه اشغال این اوربیتال‌های p-d، بر پهنای گاف نواری در نوار اسپین پایین اطراف  $E_F$  تاثیرگذار است. علاوه براین، شکافتگی تبادلی قابل ملاحظه در منحنی DOS اتم Co، در مقایسه با اتم‌های Ta و Ga، منجر به گشتاور مغناطیسی نسبتاً بزرگ در مکان این اتم می‌شود. با توجه به این شکل، از آنجا که سهم غالب در حالت‌های اشغال شده (زیر تراز فرمی) اتم‌های Co و Ta به ترتیب مربوط به نوارهای اسپین بالا و پایین است، انتظار می‌رود که گشتاور مغناطیسی در مکان این اتم‌ها، به ترتیب مقادیری مثبت و منفی باشند که با نتایج جدول 1 همخوانی دارد.

### بحث و نتیجه گیری

مطالعه ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و مغناطیسی ترکیب هسلر کامل  $\text{Co}_2\text{TaGa}$  نشان می‌دهد که حالت پایه با ساختار بلوری  $\text{AlCu}_2\text{Mn}$  و ثابت شبکه  $a = 5,9645 \text{ \AA}$ ، دارای نظم فرو مغناطیس با گشتاور مغناطیسی  $2,00 m_B$  است.

### References

- [1] S.M. Zareii, H. Arabi and R. Sarhaddi, Effect of Si substitution on electronic structure and magnetic properties of Heusler compounds  $\text{Co}_2\text{TiAl}_{1-x}\text{Six}$ . *Physica B* 407 (2012) 3339-3346.
- [2] S. Kervan and N. Kervan, Half-metallic properties of the  $\text{CuHg}_2\text{Ti}$ -type  $\text{Mn}_2\text{ZnSi}$  full-Heusler compound. *Curr. Appl Phys.* 13 (2013) 80-83.
- [3] A.A. Mohammad Abadi, G. Forozani, S.M. Baizaei and A. Gharaati, Structural, electronic and magnetic properties of  $\text{CoZrIrSi}$  quaternary Heusler alloy: First-principles study. *Journal of Alloys and Compounds* (2019) 152449.
- [4] Z. Wenyong, J. Yunlong, S. Ralph, K. Parashu, L. Xingzhong, C. Tingyong, Z. Gejian, K. Dongrin, V. Shah and J.S. David,  $\text{Mn}_2\text{CrGa}$ -based Heusler alloys with low net moment and high spin polarization. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 51 (2018) 255001.
- [5] X.-P. Wei, X.-R. Hu, G.-Y. Mao, S.-B. Chu, T. Lei, L.-B. Hu and J.-B. Deng, Half-metallic ferrimagnetism in  $\text{Mn}_2\text{CuGe}$ . *J. Magn. Mater.* 322 (2010) 3204-3207.
- [6] S.A. Abbas Emami, A. Amirabadizadeh, Z. Nourbakhsh, S.M.

- Baizae and S.M. Alavi Sadr, Study of the Structural, Electronic, Magnetic, and Optical Properties of  $\text{Mn}_2\text{ZrGa}$  Full-Heusler Alloy: First-Principles Calculations. *J. Supercond. Novel Magn.* 31 (2018) 127-134.
- [7] K. Shakeel Ahmad and C.G. Dinesh, DFT investigations on mechanical stability, electronic structure and magnetism in  $\text{Co}_2\text{TaZ}$  ( $Z = \text{Al}, \text{Ga}, \text{In}$ ) heusler alloys. *Semicond. Sci. Technol.* 32 (2017) 125019.
- [8] X.-H. Kang and J.-M. Zhang, The structural, electronic and magnetic properties of a novel quaternary Heusler alloy  $\text{TiZrCoSn}$ . *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 105 (2017) 9-15.
- [9] A. Anjami, A. Boochani, S.M. Elahi and H. Akbari, Ab-initio study of mechanical, half-metallic and optical properties of  $\text{Mn}_2\text{ZrX}$  ( $X=\text{Ge}, \text{Si}$ ) compounds. *Results Phys.* 7 (2017) 3522-3529.
- [10] A. Afaq, S. M B and A. Bakar, First-Principles study for structural, elastic and mechanical properties of  $\text{CuCoMnZ}$  ( $Z=\text{Si}, \text{Sn}, \text{Sb}$ ) Heusler alloys. *Materials Research Express* 6 (2018) 026522.
- [11] (!!! INVALID CITATION !!! [2, 10])
- [12] X.-P. Wei, X.-R. Hu, B. Liu, Y. Lei, H. Deng, M.-K. Yang and J.-B. Deng, Electronic structure and magnetism in full-Heusler compound  $\text{Mn}_2\text{ZnGe}$ . *J. Magn. Magn. Mater.* 323 (2011) 1606-1610.
- [13] J.-X. Wang, Z.B. Chen and Y.C. Gao, Phase stability, magnetic, electronic, half-metallic and mechanical properties of a new equiatomic quaternary Heusler compound  $\text{ZrRhTiIn}$ : A first-principles investigation. *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 116 (2018) 72-78.
- [14] A. Amirabadizadeh, S.A. Abbas Emami, Z. Nourbakhsh, S.M. Alavi Sadr and S.M. Baizae, The Effect of Substitution of As for Ga on the Topological Phase and Structural, Electronic and Magnetic Properties of  $\text{Mn}_2\text{ZrGa}$  Heusler Alloy. *J. Supercond. Novel Magn.* 30 (2016) 1035-1049.
- [15] A. Amirabadizadeh, S.A.A. Emami, Z. Nourbakhsh, S.M.A. Sadr and S.M. Baizae, The Structural, Electronic, Magnetic, and Optical Properties of  $\text{Mn}_2\text{ZrGa}_{1-x}\text{Ge}_x$  Heusler Alloys: First-Principles Calculations. *J. Supercond. Novel Magn.* 31 (2017) 1515-1525.
- [16] B.G. Yalcin, Ground state properties and thermoelectric behavior of  $\text{Ru}_2\text{VZ}$  ( $Z=\text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}$ ) half-metallic ferromagnetic full-Heusler compounds. *J. Magn. Magn. Mater.* 408 (2016) 137-146.
- [17] A. Abada, K. Amara, S. Hiadsi and B. Amrani, First principles study of a new half-metallic ferrimagnets  $\text{Mn}_2$ -based full Heusler compounds:  $\text{Mn}_2\text{ZrSi}$  and  $\text{Mn}_2\text{ZrGe}$ . *J. Magn. Magn. Mater.* 388 (2015) 59-67.
- [18] K. Seema and R. Kumar, Electronic structure and magnetic properties of quaternary Heusler alloy  $\text{Co}_2\text{CrGa}_{1-x}\text{Ge}_x$  ( $x=0-1$ ). *J. Magn. Magn. Mater.* 377 (2015) 70-76.
- [19] X. Zhu, Y. Dai and C. Luo, Electronic and magnetic properties of  $\text{Co}_2\text{Fe}(\text{Ga}_{1-x}\text{Six})$  and  $\text{Co}_2\text{Fe}(\text{Al}_{1-y}\text{Si}_y)$  Heusler alloys with high Curie temperature. *J. Magn. Magn. Mater.* 398 (2016) 7-12.
- [20] S. Berri, Electronic structure and magnetic properties of  $\text{Co}_2\text{TaAl}$  from ab initio calculations. *J. Sci.: Adv. Mater. Devices* 1 (2016) 286-289.
- [21] K. Schwarz, P. Blaha and G.K.H. Madsen, Electronic structure calculations of solids using the WIEN2k package for material sciences. *Comput. Phys. Commun.* 147 (2002) 71-76.

- [22] J.P. Perdew, K. Burke and M. Ernzerhof, Generalized Gradient Approximation Made Simple. Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 3865-3868.
- [23] F.D. Murnaghan, The Compressibility of Media under Extreme Pressures. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America 30 (1944) 244-247.
- [24] X.T. Wang, T.T. Lin, H. Rozale, X.F. Dai and G.D. Liu, Robust half-metallic properties in inverse Heusler alloys composed of 4d transition metal elements: Zr<sub>2</sub>RhZ (Z=Al, Ga, In). J. Magn. Mater. 402 (2016) 190-195.

#### COPYRIGHTS



© 2022 by the authors. Licensee PNU, Tehran, Iran. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY4.0) (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0>)