

«مقاله پژوهشی»

بررسی ساختار الکترونی، خواص مغناطیسی و اپتیکی ترکیب تمام هویسلر Cr_2ScSb

فاطمه کرمی

دکتری، فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد خرم آباد، خرم آباد، ایران

تاریخ دریافت: ۱۳۹۸/۱۱/۲۰ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۹/۰۲/۰۵

Investigation of Electronic Structure, Magnetic and Optical Properties of Cr_2ScSb Full-Heusler Compound

F. Karami

Ph.D. of Physics, Islamic Azad University Khoramabad Branch, Khoramabad, Iran

Received: 2020/02/09 Accepted: 2020/04/24

Abstract

On the basis of density functional theory the electronic, magnetic and optical properties of the Cr_2ScSb full-Heusler compound have been investigated. This compound has half-metallic gap of 0.07 eV at equilibrium lattice constant, but there is no band gap in the band structure. Cr_2ScSb is stable in ferromagnet state. The total magnetic moment of Cr_2ScSb is 4 μ_B and follows the Slater-Pauling rule. The results of the investigation of optical properties shows that this compound is a good choice for use as an electromagnetic waves absorbent.

Keywords

Full-Heusler Compounds, Half-Metallic Properties, Optical Properties, Spintronic.

چکیده

بر پایه نظریه تابعی چگالی، خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی ترکیب تمام هویسلر Cr_2ScSb مورد بررسی قرار گرفته است. این ترکیب در ثابت شبکه تعادلی برای منحنی چگالی حالت‌ها یک گاف نیم فلزی به اندازه ۰/۰۷ الکترون ولت دارد اما در ساختار نواری گاف انرژی مشاهده نمی‌شود. این ترکیب در حالت فرومغناطیس پایدار است. Cr_2ScSb دارای مغناطش کل ۴ مگنتون بور است و از رابطه اسلیتر-پائولینگ پیروی می‌کند. بررسی خواص اپتیکی نشان می‌دهد که این ترکیب برای استفاده به عنوان جاذب امواج الکترومغناطیسی گزینه مناسبی است.

واژگان کلیدی

ترکیب تمام هویسلر، خاصیت نیم‌فلزی، خواص اپتیکی، اسپینترونیک.

مقدمه

X اندیس دو دارد؛ بنابراین دو تا از زیرشبکه‌ها به وسیله این عنصر اشغال شده است.

در دهه‌های گذشته، رشد فناوری‌های جدید به سوی ابعاد اتمی پیش رفته است. در این مسیر رشد و پیشرفت، کوچک کردن هرچه بیشتر ابزار و قطعات الکترونیکی همیشه مورد توجه بوده است، اما برای کوچک کردن این قطعات محدودیت‌هایی وجود دارد. مسیریایی که احتمالاً این محدودیت‌ها را مرتفع خواهند ساخت، خیلی متعدد نیستند و شامل نانوالکترونیک، اسپینترونیک، ابزار نیمه هادی و موارد دیگر می‌شود. همچنین، محاسبات کوانتومی و انرژی خورشیدی هم از مواردی هستند که توسعه آنها به توسعه فیزیک و علم مواد وابسته است.

دمای کوری یا دمای بحرانی معیاری است از اینکه اگر عملیات مورد نظر در دمای اتاق انجام شود، آیا مواد باز هم خاصیت نیم فلزی خود را حفظ می‌کنند یا اینکه تحت تاثیر دما این خاصیت خود را از دست می‌دهند. در دماهای پایین‌تر از دمای کوری مغناطش خود به خودی رخ می‌دهد؛ بنابراین با محاسبه دمای کوری در واقع دمای بحرانی به دست می‌آید که در دماهای کمتر از آن مغناطش خودبه خودی به وجود می‌آید. در دماهای بالاتر از دمای کوری خاصیت نیم فلزی از بین می‌رود [۲۶، ۲۷]. در این مقاله ساختار الکترونی، خواص مغناطیسی و ایتیکی ترکیب تمام هویسلر Cr_2ScSb مورد مطالعه قرار می‌گیرد و همچنین این ترکیب از نظر خاصیت نیم فلزی مورد بررسی قرار می‌گیرد. همچنین دمای کوری برای این ترکیب تخمین زده شده است.

روش محاسبات

در این مقاله محاسبات با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو [۲۸] و کد PWscf انجام شده است. برای تابع تبادل-همبستگی تقریب گرادیان تعمیم یافته^۶ (GGA) به کار برده شده است. شبه پتانسیل‌های مورد استفاده فوق نرم هستند. انرژی قطع برای تابع موج ۶۰ ریدبرگ و انرژی قطع برای چگالی بار ۴۸۰ ریدبرگ در نظر گرفته شده است. تعداد نقاط k به صورت $10 \times 10 \times 10$ برای ساختن منطقه اول بریلوئن در نظر گرفته شده است.

در سال‌های اخیر برخی از ترکیب‌های تمام هویسلر^۱ [۷-] و نیم هویسلر^۲ [۸-۱۰] مورد توجه محققان قرار گرفته‌اند. این ترکیب‌ها معمولاً به دلیل داشتن خواص نیم فلزی و دمای کوری^۳ بالا در ساخت ابزار اسپینترونیک^۴ [۱۱-۱۶] و همچنین شیرهای اسپینی^۵ [۱۷-۱۹] کاربرد دارند. عبارت اسپینترونیک ترکیبی از اسپین و الکترونیک است که از هر دو ویژگی بار و اسپین الکترون‌ها استفاده می‌کند و اطلاعات از طریق این دو ویژگی منتقل می‌شود. از مزیت‌های استفاده از ابزارهای اسپینترونیک، می‌توان به افزایش سرعت پردازش داده‌ها و کاهش توان مصرف الکترونیکی در مقایسه با ابزارهای نیم‌رسانای قدیمی اشاره کرد [۲۰-۲۳]. از فناوری اسپینترونیک در ساخت حسگرها، حافظه‌های غیرفرار، هدهای خواندنی و حافظه‌های جانبی کامپیوتر استفاده می‌شود [۲۴، ۲۵]. ترکیب‌های هویسلر در حالت فرومغناطیس برای کاربردهای اسپینترونیک مناسب هستند. این ترکیب‌ها مواد مغناطیسی هستند و برخی از آنها خواص نیم فلزی دارند، این خواص نیم فلزی ناشی از رفتار متفاوت در دو کانال اسپینی بالا و پایین است. ترکیب‌های فرومغناطیس نیم فلز دارای قطبش اسپینی کامل (۱۰۰٪) در سطح فرمی هستند. قطبش اسپینی کامل به این معنا است که ترکیب مورد نظر در سطح فرمی، در یک جهت اسپینی رفتار فلزی دارد و در جهت دیگر اسپینی مانند عایق‌ها رفتار می‌کند. فرمول کلی تمام هویسلرها به صورت X_2YZ است. این ترکیب‌ها دارای ساختار $L2_1$ هستند. در این ساختار X و Y از عناصر فلزات واسطه هستند و Z از دیگر گروه‌های اصلی جدول تناوبی است که معمولاً از گروه‌های سه، چهار و پنج جدول تناوبی هستند. ساختار ترکیب‌های تمام هویسلر از چهار زیرشبکه fcc که در راستای قطر اصلی در هم نفوذ کرده‌اند تشکیل شده است. هر کدام از این زیرشبکه‌ها به وسیله یکی از عناصر اشغال شده‌اند. البته از آنجا که عنصر

1. Full-Heusler
2. Half-Heusler
3. Curie Temperature
4. Spintronic Device
5. Spin Valves

6. Generalized Gradient Approximation

یافته‌ها

گاف نیم فلزی به اندازه ۰/۰۷ الکترون ولت است که مقدار آن در جدول ۱ نیز ارائه شده است. در شکل ۳ نمودار ساختار نواری رسم شده است. در نمودار ساختار نواری در حالت‌های با اسپین بالا نوارهای انرژی به مقدار بسیار کمی انرژی فرمی را قطع کرده‌اند و در حالت‌های با اسپین پایین نیز در سطح فرمی گافی مشاهده نمی‌شود؛ بنابراین در نمودار ساختار نواری، گاف انرژی مشاهده نمی‌شود. با توجه به اینکه در منحنی چگالی حالت‌ها یک گاف نیم فلزی مشاهده می‌شود و در نمودار ساختار نواری، نوارهای انرژی اسپین بالا به مقدار بسیار کمی انرژی فرمی را قطع می‌کنند، می‌توان نتیجه گرفت که این ترکیب بسیار نزدیک به نیم فلز است و ممکن است تحت تنش خاصیت نیم‌فلزی پیدا کند. محاسبه دمای کوری با استفاده از رابطه زیر انجام گرفته است [۲۹]:

$$T_c = \frac{\Delta E_{NM-FM}}{3k_B} \quad (1)$$

در این رابطه ΔE_{NM-FM} اختلاف انرژی بین حالت غیرمغناطیس و حالت فرومغناطیس است و k_B ثابت بولتزمن است. با استفاده از رابطه ۱، دمای کوری برای ترکیب Cr₂ScSb را حدود ۶۴۰ کلوین تخمین زده‌ایم. این دمای کوری که خیلی بالاتر از دمای اتاق است، برای ترکیب Cr₂ScSb، یک نقطه قوت است و این ترکیب برای ساخت ابزار اسپینترونیک می‌تواند به کار برده شود. این ترکیب دارای گشتاور مغناطیسی کل $4/00 \mu_B$ است که یک عدد صحیح است؛ بنابراین از قاعده اسلیتر-پائولینگ $M_{tot} = (Z_{tot} - 24)\mu_B$ پیروی می‌کند [۳۰، ۳۱]. در این رابطه Z_{tot} تعداد کل الکترون‌های ظرفیت و μ_B مگنتون بور است.

ابتدا باید ساختار پایدار برای ترکیب تمام هویسلر Cr₂ScSb را پیدا کنیم. به همین منظور دو ساختار معمول برای این ترکیب‌ها از نظر انرژی با هم مقایسه شد و ساختاری که انرژی کل کمتری داشت و در نتیجه پایدارتر بود، به عنوان ساختار پایدار در نظر گرفته شد. این ساختار پایدار به گونه‌ای است که در آن اتم‌های Cr در (0, 0, 0) و (0.5, 0.5, 0.5)، اتم Sc در (0.25, 0.25, 0.25) و اتم Sb در (0.75, 0.75, 0.75) قرار می‌گیرند. برای مشاهده مکان اتم‌ها، ساختار بلوری ترکیب Cr₂ScSb در شکل ۱ نشان داده شده است. برای پیدا کردن حالت مغناطیسی پایدار، این ترکیب را در سه حالت غیرمغناطیس، فرومغناطیس و پادفرومغناطیس، از نظر انرژی با هم مقایسه کردیم. نتایج نشان داد که ترکیب Cr₂ScSb در حالت فرومغناطیس نسبت به حالت غیرمغناطیس بسیار پایدارتر است و نسبت به حالت پادفرومغناطیس به مقدار کمی پایدارتر است؛ بنابراین بقیه محاسبات برای ساختار پایدار و در حالت فرومغناطیس انجام شده است. ثابت شبکه و مدول حجمی برای ساختار پایدار ترکیب Cr₂ScSb در جدول ۱ ارائه شده است.

جدول ۱. ثابت شبکه تعادلی a_0 ، انرژی گاف نیم فلزی E_{HM} و مدول حجمی B_0

	$a_0(\text{\AA})$	$E_{HM}(eV)$	$B_0(GPa)$
Cr ₂ ScSb	۶/۴۸	۰/۰۷	۹۱/۸

منحنی چگالی حالت‌های الکترونی کل در شکل ۲ رسم شده است. همان‌طور که دیده می‌شود در حالت اسپین بالا در انرژی فرمی هیچ حالت الکترونی وجود ندارد و در واقع یک گاف انرژی مشاهده می‌شود و رفتار فلزی دارد ولی در حالت اسپین پایین در انرژی فرمی چگالی حالت الکترونی وجود دارد و رفتاری شبیه نیم‌رساناها دارد. گاف نیم فلزی به صورت اختلاف انرژی بین انرژی فرمی و یکی از دو انتهای گاف انرژی که به انرژی فرمی نزدیک‌تر است، تعریف می‌شود؛ بنابراین این ترکیب دارای

دارد. قسمت حقیقی تابع دی الکتریک، با استفاده از قسمت موهومی آن و روابط کرامرز-کرونیک به دست می‌آید [۳۲]

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2(\omega) \quad (۲)$$

$$\varepsilon_1 = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega') d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (۳)$$

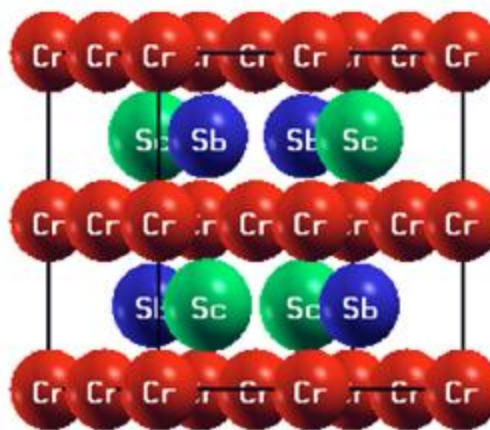
$$\begin{aligned} \varepsilon_2(\omega) &= \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} \sum \int \langle i|M|j \rangle^2 f_i(1-f_i) \times \delta(E_f \\ &- E_i - \omega) d^3k \end{aligned} \quad (۴)$$

قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک در شکل ۴ رسم شده است همچنین ضریب شکست $n(\omega)$ و ضریب خاموشی $k(\omega)$ برای ترکیب Cr_2ScSb در شکل ۵ رسم شده است. روابط ضریب شکست و ضریب خاموشی به صورت زیر هستند:

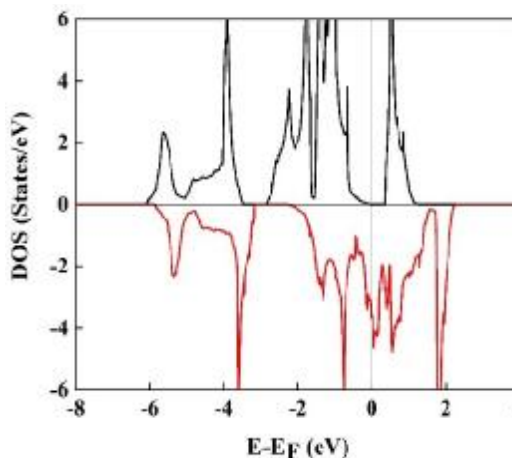
$$n(\omega) = \left[\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} + \varepsilon_1(\omega)}{2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (۵)$$

$$k(\omega) = \left[\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega)}{2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (۶)$$

3. Refraction Coefficient
4. Extinction Coefficient



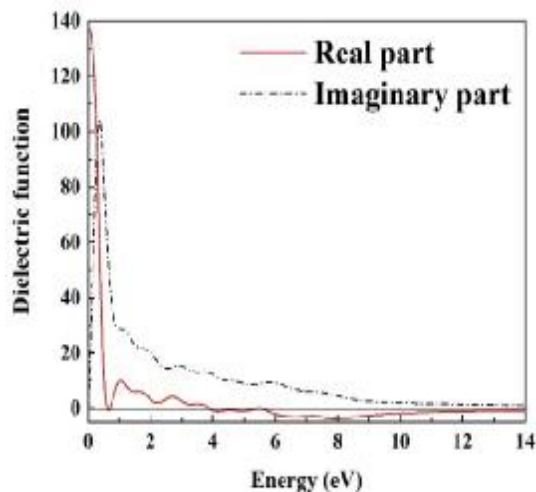
شکل ۱. ساختار بلوری ترکیب Cr_2ScSb



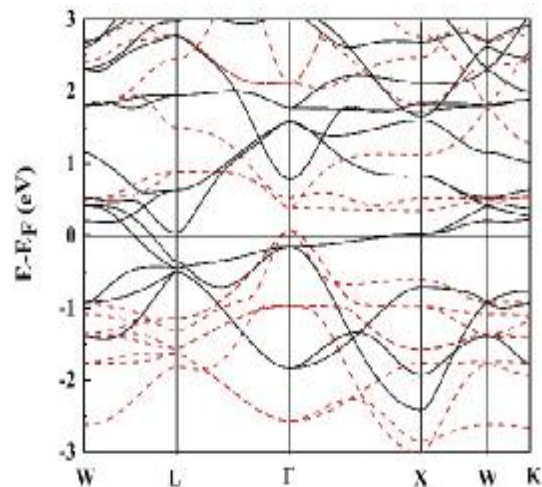
شکل ۲. چگالی حالت‌های الکترونی کل برای ترکیب Cr_2ScSb . مقادیر منفی نشان‌دهنده حالات با اسپین پایین است

برای بررسی خواص اپتیکی ترکیب Cr_2ScSb ، تابع دی الکتریک مورد بررسی قرار می‌گیرد. تابع دی الکتریک $\varepsilon(\omega)$ دو بخش حقیقی $\varepsilon_1(\omega)$ و موهومی $\varepsilon_2(\omega)$

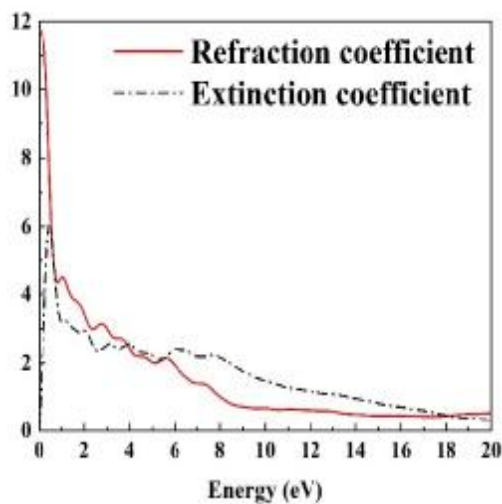
1. Real Part
2. Imaginary Part



شکل ۴. قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک برحسب انرژی



شکل ۳. نمودار ساختار نواری برای ترکیب Cr_2ScSb . خط چین قرمز نشان دهنده اسپین بالا و خط مشکی نشان دهنده اسپین پایین است



شکل ۵. ضریب شکست و ضریب خاموشی برحسب انرژی برای ترکیب تمام هویسلر Cr_2ScSb

برای محاسبه خواص اپتیکی، محاسبات غیرمغناطیسی انجام شده است. ضریب شکست جذر قسمت حقیقی تابع دی الکتریک است؛ بنابراین رفتاری شبیه به قسمت حقیقی تابع دی الکتریک دارد که این شباهت از مقایسه شکل ۴ و ۵ نیز پیداست. رفتار ضریب خاموشی نیز مشابه قسمت موهومی تابع دی الکتریک است.

در منحنی ضریب خاموشی یک قله در انرژی ۰/۵ الکترون ولت وجود دارد که نشان دهنده جذب بالا در این انرژی است. در شکل ۴ مشاهده می شود که در یک محدوده ای از انرژی، قسمت حقیقی تابع دی الکتریک منفی می شود، این می تواند نشان دهنده جذب بالا در این محدوده از انرژی باشد. در نتیجه این ترکیب می تواند یک جاذب تا اندازه ای خوب برای امواج باشد. در منحنی قسمت موهومی تابع دی الکتریک قله های ریز و درشتی مشاهده می شود که نشان دهنده گذارهای درون نواری و بین نواری است. قله بلندی که در ابتدای این منحنی است، نشان دهنده یک گذار بین نواری است.

بحث و نتیجه گیری

با استفاده از نظریه تابعی چگالی به بررسی خواص ساختاری، مغناطیسی و اپتیکی ترکیب تمام هویسلر Cr_2ScSb پرداختیم. نتایج به دست آمده نشان داد که

این ترکیب در ثابت شبکه تعادلی، یک گاف نیم‌فلزی 0.07 الکترون ولتی دارد. Cr_2ScSb دارای قطبش اسپینی صددرصد در سطح فرمی است. نمودار منحنی چگالی حالت‌های الکترونی به وضوح گویای این مطلب است. در ساختار نواری گاف انرژی مشاهده نشد. این ترکیب دارای گشتاور مغناطیسی کل صحیحی است و از قانون اسلیتر-پائولینگ پیروی می‌کند. دمای کوری الکترومغناطیسی باشد.

این ترکیب در ثابت شبکه تعادلی، یک گاف نیم‌فلزی 0.07 الکترون ولتی دارد. Cr_2ScSb دارای قطبش اسپینی صددرصد در سطح فرمی است. نمودار منحنی چگالی حالت‌های الکترونی به وضوح گویای این مطلب است. در ساختار نواری گاف انرژی مشاهده نشد. این ترکیب دارای گشتاور مغناطیسی کل صحیحی است و از قانون اسلیتر-پائولینگ پیروی می‌کند. دمای کوری

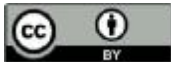
منابع

- [1] N. Kervan, S. Kervan, Half-metallic properties in the Fe_2TiP full-Heusler compound, *Intermetallics* 37 (2013) 88-91.
- [2] O. Canko, F. Taşkın, M. Atılgan, N. Kervan, S. Kervan, Magnetism and halfmetallicity in the Fe_2ZrP Heusler alloy, *J. Supercond. Nov. Magn.* 29 (2016) 1-6.
- [3] X.D. Xu, Z.X. Chen et al. Microstructure, magnetic and transport properties of a Mn_2CoAl Heusler compound, *Acta Materialia* 176 (2019) 33-42.
- [4] Rai, D.P., Thapa, R.K. (2014). Study of electronic, magnetic, optical and elastic properties of Cu_2MnAl a gapless full Heusler compound. *J. Alloys. Compd.* 612, 355–360.
- [5] A. Birsan, V. Kuncser, First principle investigations of the structural, electronic and magnetic properties of predicted new zirconium based full-Heusler compounds, Zr_2MnZ ($Z=\text{Al}$, Ga and In), *J. Mang. Mang. Mat.* 406 (2016) 282–288.
- [6] I. Asfour, H. Rached, S. Benalia, D. Rached, Investigation of electronic structure, magnetic properties and thermal properties of the new half-metallic ferromagnetic full-Heusler alloys $\text{Cr}_2\text{GdSi}_{1-x}\text{Gex}$: an ab-initio study, *J. Alloys. Compd.* 676 (2016) 440–451.
- [7] F. Bagverdi, F. Ahmadian, First principles study of half-metallic ferromagnetism of the full-Heusler compounds RbSrX_2 ($X = \text{C}$, N , and O), *J. Supercond. Nov. Magn.* 28 (2015) 2773–2781.
- [8] Huang, W., Wang, X., Chen, X., Lu, W., Damewood, L., Fong, C.Y. (2015). Structural and electronic properties of half-Heusler alloys PtXBi (with $X=\text{Mn}$, Fe , Co and Ni) calculated from first principles. *J. Magn. Magn. Mat.* 377, 252–258.
- [9] Lakdja, A., Rozale, H., Chahed, A., Benhelal, O. (2015). Ferromagnetism in the half-Heusler XC_3Ba compounds from first-principles calculations ($X = \text{C}$, Si , and Ge). *J. Alloys. Compd.* 564, 8–12.
- [10] Behbahani, M.A., Moradi, M., Rostami, M., Davatolhagh, S. (2016). First principle study of structural, electronic and magnetic properties of half-Heusler IrCrZ ($Z=\text{Ge}$, As , Sn and Sb) compounds. *J. Phys. Chem. Solids* 92, 85–93.
- [11] Checca, N.R., Caraballo-Vivas, R.J., Torrão, R., Rossi, A., Reis, M.S. (2017). Phase composition and growth mechanisms of half-metal Heusler alloy produced by pulsed laser deposition: from core-shell nanoparticles to amorphous random clusters. *Mater. Chem. Phys.* 196, 103–108.
- [12] Balke, B., Fecher, G., Felser, C. (2013). *New Heusler compounds and Their Properties*, in: C. Felser, G.H.

- Fecher (Eds.), Springer, Berlin, 15–43 Spintronic.
- [13] Abdullahi, Y.Z., Yoon, T.L., Halim, M.M., Hashim, M.R., Lim, T.L. (2018). First-principles investigation of graphitic carbon nitride monolayer with embedded Fe atom. *Surf. Sci.* 667, 112–120.
- [14] Torosyan, G., Keller, S., Scheuer, L., Beigang, R., Papaioannou, E.T. (2018). Optimized spintronic terahertz emitters based on epitaxial grown Fe/Pt layer structures. *Sci. Rep.* 8, 1311.
- [15] J. Jalilian, Comment on ‘Study of electronic, magnetic, optical and elastic properties of Cu_2MnAl a gapless full Heusler compound, *J. Alloys. Compd.* 626 (2015) 277–279.
- [16] Khandy, S.A., Islam, I., Gupta, D. C., Laref, A. (2019). Full Heusler alloys (Co_2TaSi and Co_2TaGe) as potential spintronic materials with tunable band profiles. *J. of Solid State Chemistry* 270, 173-179.
- [17] M. Moradi, N. Taheri, M. Rostami, Structural, electronic, magnetic and vibrational properties of half-Heusler NaZrZ ($Z = \text{P, As, Sb}$) compounds, *Physics Letters A* 382 (2018) 3004-3011.
- [18] Watts, S.M., Wirth, S., Von Molnar, S., Barry, A., Coey, J.M.D. (2000). Evidence for two-band magnetotransport in halfmetallic chromium dioxide. *Phys. Rev. B* 61, 9621–9628.
- [19] Kim, T.W., Jeon, H.C., Kang, T.W., Lee, H.S., Lee, J.Y., Jin, S. (2006). Microstructural and magnetic properties of zinc-blende MnAs films with half metallic characteristics grown on GaAs (100) substrates. *Appl. Phys. Lett.* 021915, 88.
- [20] Shekhar, C., Ouardi, S., Fecher, G.H., Nayak, A.K., Felser, C., Ikenaga, E. (2012). Electronic structure and linear magnetoresistance of the gapless topological insulator PtLuSb . *Appl. Phys. Lett.* 100, 252109.
- [21] Jourdan, M., Minár, J., Braun, J., Kronenberg, A., Chadov, S., Balke, B., Ebert, H. (2014). Direct observation of half-metallicity in the Heusler compound Co_2MnSi . *Nat. Commun.* 5, 3974.
- [22] Parkin, S. S. P. et al. (1999). Exchange-biased magnetic tunnel junctions and application to nonvolatile magnetic random access memory (invited). *Appl. Phys.* 85, 5828.
- [23] Jain, R., Lakshmi, N., Jain, V.K., Jain, V., Chandra, A.R., Venugopalan, K. (2018). Electronic structure, magnetic and optical properties of Co_2TiZ ($Z = \text{B, Al, Ga, In}$) Heusler alloys. *J. Magn. Magn Mater.* 448, 278.
- [24] Zutic, I., Fabian, J. and Das Sarma, S. (2004). Spintronics: Fundamentals and applications. *Rev. Mod. Phys.* 76, 323.
- [25] Jain, V. K., Lakshmi, N., Jain, R., Jain, V., Chandra, A. R., Venugopalan, K. (2017). Electronic structure, magnetic and optical properties of quaternary $\text{Fe}_{2-x}\text{Co}_x\text{MnAl}$ Heusler alloys. *J. Magn. Magn Mater* 52, 6800–6811.
- [26] Gao, G.Y., Yao, K.L., Sasioglu, E., Sandratskii, L.M., Liu, Z.L., Jiang, J.L. (2007). Half-metallic ferromagnetism in zinc-blende CaC , SrC , and BaC from first principles. *Phys. Rev. B.* 75, 174442–174448.
- [27] Gao, G.Y., Yao, K.L., Song, M.H., Liu, Z. L. (2011). Half-metallic ferromagnetism in rocksalt and zinc-blende MS ($M = \text{Li, Na and K}$): a first-principles study. *J. Magn. Magn. Mater.* 323, 2652–2657.
- [28] M. Safavi, M. Moradi, M. Rostami, Structural, Electronic and Magnetic Properties of NaKZ ($Z = \text{N, P, As, and Sb}$) Half-Heusler Compounds: a First-Principles study, *J. Superconduct. Nov. Magn.* 30 (2016) 989-997.
- [29] K. Sato, et al. Exchange interactions in diluted magnetic semiconductors, *J. Phys. Condens. Matter* 16 (2004) S5491–S5497.

- [30] J. C. Slater, The Ferromagnetism of Nickel. II. Temperature Effects, *Phys. Rev.* 49 (1936) 931-937.
- [31] L. Pauling, The Nature of the Intermolecular Forces in Metals, *Phys. Rev.* 54 (1938) 899-904.
- [32] A. Delin, O. Eriksson, R. Ahuja, B. Johansson, M.S.S. Brooks, T. Gasche, S. Auluck, and J.M. Wills, Optical properties of the group-IVB refractory metal compounds, *Phys. Rev. B* 54 (1996) 1673-1681.

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>)