

Electronic, magnetic and optical properties of V_2ScX ($X = Ga, In$) Full-Heusler compounds

Ghasem Forozani^{*1}, Fateme Karami¹, Mahmood Moradi²

¹Department of Physics, Payame Noor University, P.O. Box 19395-3697, Tehran, Iran

²Department of Physics, Shiraz University, P.O. Box 71946-84334, Shiraz, Iran

Received: 11.02.2020 Revised: 26.07.2021 Accepted: 23.11.2021

Doi: [10.22055/jrmb.2022.17349](https://doi.org/10.22055/jrmb.2022.17349)

Abstract

Using the density functional theory and generalized gradient approximation, the electronic, magnetic and optical properties of V_2ScX ($X = Ga, In$) have been investigated. The results show that the V_2ScIn is a half-metallic ferromagnet and preserved its half-metallicity in the relatively larger lattice constants. This compound has half-metallic gap of 0.45 eV. V_2ScIn is suitable for spintronic applications. V_2ScGa compound shows metallic behavior. These full-Heusler compounds follow the Slater-Pauling rule and have the integer total magnetization. The Curie temperature of V_2ScGa and V_2ScIn were estimated to be 341 and 496 K respectively. The results of investigating the optical properties show that these compounds are good candidates to absorb waves.

Keywords: Full-Heusler compounds, Density functional theory, Optical properties, Spintronics

¹Corresponding Author: forozani@pnu.ac.ir

بررسی خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی ترکیبات تمام‌هوسلر

 $V_2ScX(X = Ga, In)$ قاسم فروزانی^{۱*}، فاطمه کرمی^۱، محمود مرادی^۲

گروه فیزیک، دانشگاه پیام‌نور، ص.پ. ۳۶۹۷-۱۹۳۹۵، تهران، ایران

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شیراز، ص.پ. ۸۴۳۳۴-۷۱۹۴۶ شیراز، ایران

دریافت: ۱۳۹۸/۱۱/۲۲ ویرایش نهایی: ۱۴۰۰/۰۵/۰۴ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۹/۰۲

Doi: [10.22055/jrmb.2022.17349](https://doi.org/10.22055/jrmb.2022.17349)

چکیده

با استفاده از نظریه تابعی چگالی و تقریب گرادیان تعمیم یافته، خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی ترکیبات تمام‌هوسلر V_2ScX ($X = Ga, In$) مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهند که V_2ScIn دارای گاف نیم‌فلزی به اندازه ۰.۴۵ الکترون‌ولت است و یک فرومغناطیس نیم‌فلز می‌باشد که خاصیت نیم‌فلزی خود را در بازه نسبتاً بزرگی از ثابت شبکه حفظ می‌کند. این ترکیب برای کاربردهای اسپینترونیک مناسب است. ترکیب V_2ScGa رفتار فلزی از خود نشان می‌دهد. این ترکیبات تمام‌هوسلر از رابطه اسلیتر-پائولینگ پیروی می‌کنند و دارای مغناطش کل صحیحی می‌باشند. دمای کوری برای ترکیبات V_2ScGa و V_2ScIn به ترتیب ۳۴۱ و ۴۹۶ کلوین تخمین زده شد. بعد از بررسی خواص اپتیکی این نتیجه حاصل شد که این ترکیبات می‌توانند گزینه مناسبی برای استفاده به‌عنوان جاذب امواج باشند.

کلیدواژگان: ترکیبات تمام‌هوسلر، نظریه تابعی چگالی، خواص اپتیکی، اسپینترونیک

مقدمه

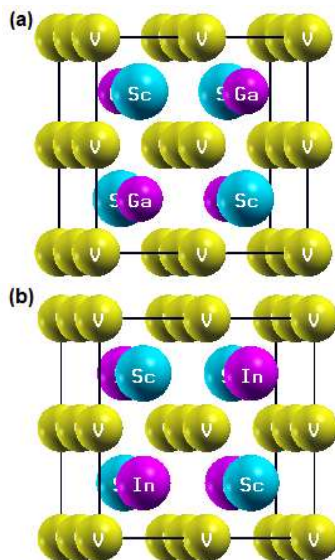
عایق‌ها رفتار می‌کنند، در نتیجه با مشاهده این رفتار می‌توان ترکیبات مورد نظر را به‌عنوان نیم‌فلز معرفی کرد. تمام‌هوسلرها به‌صورت فرمول کلی X_2YZ نشان داده می‌شوند و دارای ساختار $L2_1$ و گروه فضایی $F\bar{4}3m$ هستند. ساختار $L2_1$ شامل چهار شبکه fcc است که در راستای قطر اصلی در هم نفوذ کرده‌اند و هر یک از عناصر در یکی از این زیرشبکه‌های fcc قرار می‌گیرند. در این مقاله خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی ترکیبات تمام‌هوسلر $V_2ScX(X = Ga, In)$ با

برخی از ترکیبات تمام‌هوسلر^۱ [۸-۱] و نیم‌هوسلر^۲ [۹-۱۲] به دلیل دارا بودن خواص نیم‌فلزی و دمای کوری^۳ بالا مورد توجه محققان قرار گرفته‌اند. این ترکیبات در حالت فرومغناطیس نیم‌فلز به دلیل اینکه قطبش اسپینی کامل (۱۰۰٪) دارند در ابزار اسپینترونیک^۴ [۱۳، ۱۴] و همچنین شیرهای اسپینی^۵ [۱۵-۱۸] کاربرد دارند. قطبش اسپینی کامل وقتی حاصل می‌شود که این ترکیبات در سطح فرمی، در یک جهت اسپینی رفتار فلزی و در جهت دیگر اسپینی مانند

* نویسنده مسئول: forozani@pnu.ac.ir

¹ Full-Heusler² Half-Heusler³ Curie temperature⁴ Spintronic device⁵ Spin valves

ساختار بلوری این دو ترکیب در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱. ساختار بلوری برای V_2ScGa (a) و V_2ScIn (b).

انرژی همبستگی^۳ یکی از ملاک‌های تشخیص ساختار پایدار برای ترکیبات هویسلر است. اگر مقدار این کمیت برای ترکیب‌های مورد نظر عددی مثبت باشد، می‌توان گفت که این ترکیب‌ها ساختاری پایدار دارند و همچنین امکان ساخت آزمایشگاهی آنها نیز وجود دارد. انرژی همبستگی با استفاده از رابطه زیر محاسبه می‌شود [۲۰]

$$E_{coh} = (2E_{atom}^V + E_{atom}^{Sc} + E_{atom}^X) - E_{total}^{V_2ScX} \quad (1)$$

در این رابطه E_{atom} انرژی کل اتم منزوی و E_{total} انرژی کل ترکیب تمام هویسلر است. انرژی همبستگی ترکیبات تمام‌هویسلر V_2ScX ($X=Ga, In$) در جدول ۲ آورده شده است. این مقادیر مثبت هستند، بنابراین ترکیب‌های مورد نظر ساختاری پایدار دارند و امکان ساخت آزمایشگاهی آنها نیز وجود دارد.

به‌منظور بررسی خواص الکترونی ترکیبات تمام‌هویسلر V_2ScX ($X=Ga, In$)، ساختار نواری^۴ و چگالی

استفاده از نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار می‌گیرد.

روش محاسبات

محاسبات با استفاده از بسته محاسباتی کوآنتوم اسپرسو [۱۹] انجام شده است. در این محاسبات از تقریب گرادیان تعمیم یافته^۱ (GGA) برای تابع تبادل-همبستگی و همچنین از شبه‌پتانسیل‌های فوق نرم pbe^2 استفاده شده است. انرژی قطع برای تابع موج ۶۰ ریدبرگ و برای چگالی بار ۴۸۰ ریدبرگ در نظر گرفته شده است. همچنین برای ساختن منطقه اول بریلوئن، تعداد نقاط به صورت $10 \times 10 \times 10$ در نظر گرفته شده است. آستانه همگرایی برای انرژی کل 10^{-5} اعمال شده است.

نتایج و بحث

خواص الکترونی

برای پیدا کردن ساختار بلوری پایدار برای ترکیبات تمام‌هویسلر V_2ScX ($X=Ga, In$)، دو ساختار متداول برای تمام‌هویسلرها از نظر انرژی با هم مقایسه شد و این نتیجه حاصل شد که ساختاری که در آن عنصر V در $(0, 0, 0)$ و $(0.5, 0.5, 0.5)$ ، عنصر Sc در $(0.25, 0.25, 0.25)$ و عنصر X در $(0.75, 0.75, 0.75)$ قرار دارند ساختار پایدارتری است. همچنین حالت‌های غیرمغناطیس، فرومغناطیس و آنتی‌فرومغناطیس نیز از نظر انرژی مورد بررسی قرار گرفتند و نتایج نشان دادند که این ترکیبات در حالت فرومغناطیس انرژی کل کمتری دارند و در نتیجه پایدارتر هستند. بقیه محاسبات روی این ساختار پایدار انجام شده است. مشخصات مربوط به این ساختار پایدار از جمله ثابت شبکه و مدول حجمی در جدول ۱ آورده شده است. همچنین

³ Cohesive energy

⁴ Band structure

¹ Generalized Gradient Approximation

² Perdew Burke Ernzerhof

همان‌طور که از مقایسه مقادیر مربوط به گشتاورهای مغناطیسی جزئی عناصر می‌توان فهمید، بیشترین سهم گشتاور مغناطیسی کل ناشی از عنصر V است.

یکی از ویژگی‌های مهم یک ترکیب تمام‌هویسلر دمای کوری آن است. اگر دمای کوری به اندازه کافی از دمای اتاق بالاتر باشد می‌توان نتیجه گرفت که ترکیب مورد نظر گزینه مناسبی برای استفاده در ساخت ابزار اسپینترونیک است. دمای کوری با استفاده از تقریب میدان میانگین^۴ و محاسبه اختلاف انرژی کل در حالت فرومغناطیس و آنتی‌فرومغناطیس تخمین زده شده است [۲۳]. دمای کوری برای ترکیبات V_2ScIn و V_2ScGa به ترتیب ۳۴۱ و ۴۹۶ کلوین تخمین زده شد. بنابراین یکی از ویژگی‌های قابل توجه این ترکیبات دارا بودن دمای کوری نسبتاً بالا است. بنابراین V_2ScIn قابل استفاده در اسپینترونیک است.

از آنجا که برای ساخت ابزار اسپینترونیک معمولاً ترکیبات نیم‌فلز را روی یک زیرلایه نیم‌رسانا بازنشانی می‌کنند، در نتیجه در این فرآیند احتمال تغییر ثابت شبکه تعادلی ترکیب نیم‌فلز وجود دارد، این تغییر ثابت شبکه ناشی از عدم تطابق ساختار شبکه ترکیب‌های نیم‌فلز و نیم‌رسانا می‌باشد. بنابراین ترکیب‌هایی که تحت یک تنش همچنان خاصیت نیم‌فلزی خود را حفظ کنند گزینه مناسبی برای ساخت ابزار اسپینترونیک خواهند بود. برای بررسی بیشتر ترکیبات تمام‌هویسلر V_2ScX ($X = Ga, In$)، این ترکیب‌ها را تحت تنش مورد بررسی قرار دادیم و این نتیجه حاصل شد که تحت تنش خاصیت نیم‌فلزی خود را در بازه نسبتاً بزرگی از ثابت شبکه حفظ می‌کنند. گشتاور مغناطیسی کل برحسب ثابت شبکه در شکل ۴ رسم شده است.

حالت‌های الکترونی^۱ کل به ترتیب در شکل‌های ۲ و ۳ نمایش داده شده است. همان‌طور که در شکل چگالی حالت‌های الکترونی کل قابل مشاهده است، V_2ScIn دارای گاف نیم‌فلزی است و نمودار ساختار نواری مربوط به آن نیز وجود این گاف را تأیید می‌کند. مقدار انرژی گاف نیم‌فلزی در جدول ۱ آورده شده است.

جدول ۱. ثابت شبکه تعادلی a_0 برحسب آنگستروم، انرژی گاف نیم‌فلزی E_{HM} برحسب الکترون‌ولت و مدول حجمی B_0 برحسب گیگاپاسکال برای ترکیبات V_2ScX ($X = Ga, In$).

V_2ScX	a_0	E_{HM}	B_0
V_2ScGa	۶٫۷۲	-	۷۲٫۳
V_2ScIn	۶٫۹۳	۰٫۴۵	۷۰٫۷

خواص مغناطیسی

ترکیبات تمام‌هویسلر V_2ScX ($X=Ga, In$) از قاعده اسلیتر-پاولینگ^۲ [۲۱، ۲۲] به صورت $M_{tot} = (Z_{tot} - 24)\mu_B$ پیروی می‌کنند و دارای مغناطش کل صحیحی می‌باشند. از آنجا که گشتاور مغناطیسی در اسپینترونیک موضوع مهمی است، بنابراین V_2ScIn می‌تواند گزینه مناسبی برای ساخت ابزار اسپینترونیک باشد. در این رابطه Z_{tot} تعداد کل الکترون‌های ظرفیت و μ_B مگنتون بور^۳ می‌باشد. مقادیر مربوط به گشتاور مغناطیسی کلی و جزئی در جدول ۲ لیست شده‌اند.

جدول ۲. گشتاور مغناطیسی کلی و جزئی برحسب μ_B و انرژی همبستگی برحسب الکترون‌ولت برای ترکیبات V_2ScX ($X = Ga, In$).

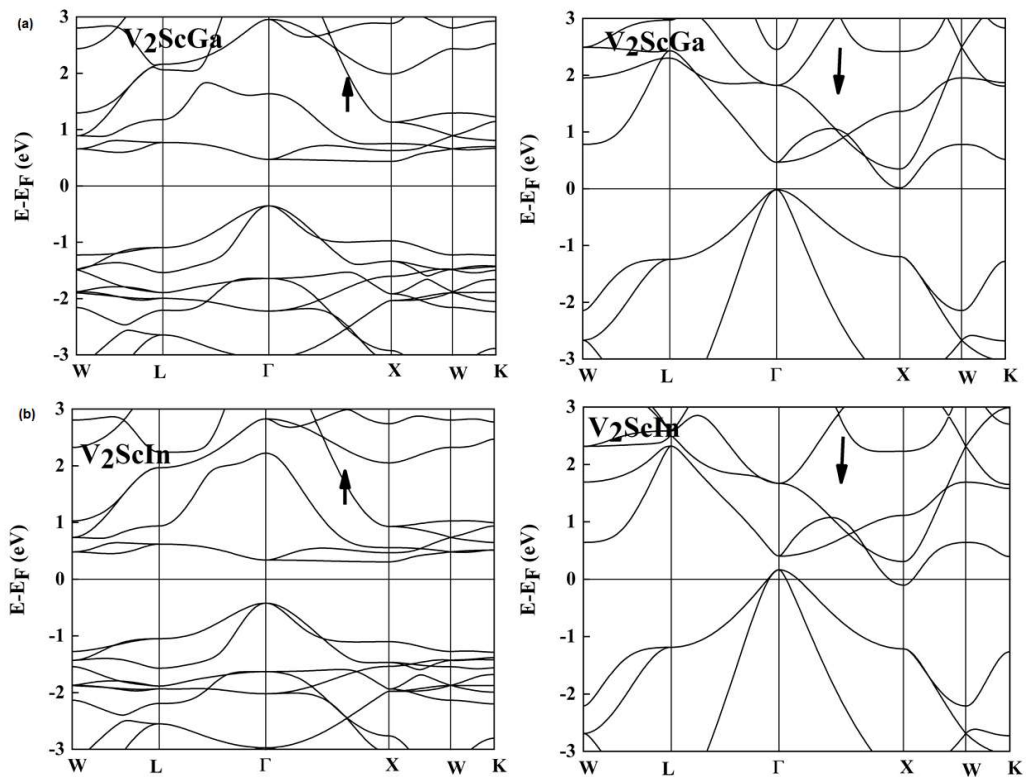
V_2ScX	M_{tot}	M_V	M_{Sc}	M_X	E_{coh}
V_2ScGa	۸٫۰۰	۳٫۷۱	۱٫۰۹	-۰٫۵۱	۱۳٫۹۳
V_2ScIn	۸٫۰۰	۳٫۷۴	۰٫۹۷	-۰٫۴۵	۱۳٫۴۵

³ Bohr magneton

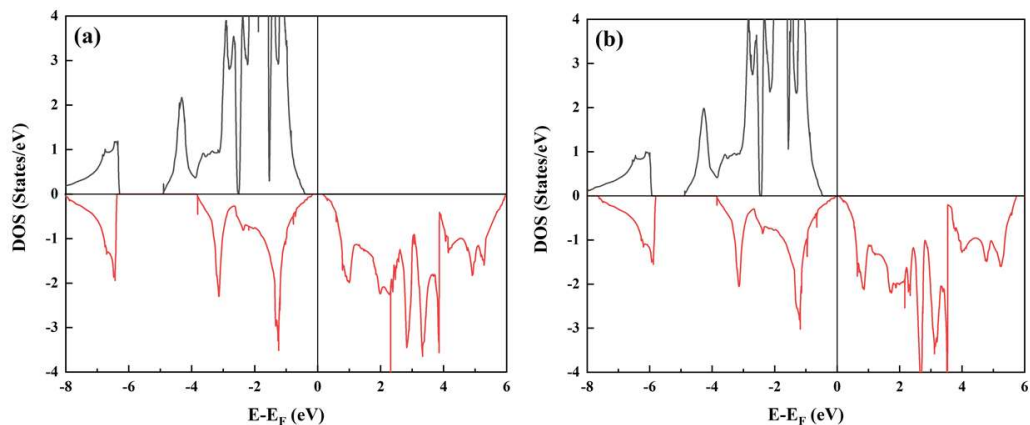
⁴ Mean field approximation

¹ Density of states (DOS)

² Slater-Pauling rule



شکل ۲. ساختار نواری برای ترکیبات تمام‌هویسلر V_2ScX ($X = Ga, In$). (a) برای ترکیب V_2ScGa و (b) برای ترکیب V_2ScIn . علامت \uparrow نشان دهنده اسپین اکثریت و علامت \downarrow نشان دهنده اسپین اقلیت است.



شکل ۳. چگالی حالت‌های الکترونی کل، (a) برای ترکیب V_2ScGa و (b) برای ترکیب V_2ScIn . مقادیر منفی نشان دهنده اسپین اقلیت است.

ضرایب ذکر شده با استفاده از روابط زیر به دست می‌آیند

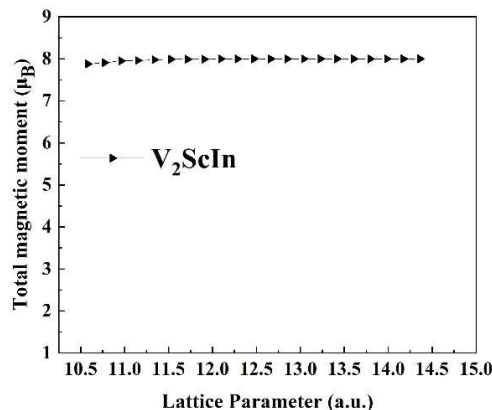
$$n(\omega) = \left[\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} + \varepsilon_1(\omega)}{2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad ۵$$

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

$$\alpha(\omega) = 2\omega \left[\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega)}{2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad ۷$$

$$R(\omega) = \left| \frac{(\varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega))^{\frac{1}{2}} - 1}{(\varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega))^{\frac{1}{2}} + 1} \right|^2 \quad ۸$$

همان‌طور که در شکل‌های ۵ و ۶ مشاهده می‌شود، ضریب شکست رفتاری مشابه قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک و ضریب خاموشی رفتاری مشابه قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک دارد. ضریب شکست جذر قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک است، از مقایسه قسمت a و b شکل ۵ و همچنین شکل ۶ نیز این مطلب مشخص است. با استفاده از رابطه ۵ ضریب شکست را برای V_2ScIn و V_2ScGa به ترتیب ۱۰/۴ و ۸/۶ تخمین زده‌ایم. ضریب خاموشی برای ترکیب V_2ScGa در انرژی حدود ۰/۶ الکترون‌ولت و برای ترکیب V_2ScIn در انرژی حدود ۰/۸ الکترون‌ولت یک قله قابل توجه دارد که نشان‌دهنده جذب بالا در این انرژی‌ها است. در شکل‌های ۵ و ۶ قسمت a مشاهده می‌کنیم که در یک بازه‌هایی از انرژی، قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک مقادیر منفی به خود می‌گیرد. از مقایسه این مقادیر منفی با شکل ۷ مشاهده می‌شود که در این نقاط، پیک جذب



شکل ۴. گشتاور مغناطیسی کل برحسب ثابت شبکه برای ترکیب تمام هویسلر V_2ScIn .

خواص اپتیکی

برای توصیف پاسخ ماده به میدان الکترومغناطیسی از تابع دی‌الکتریک استفاده می‌شود. تابع دی‌الکتریک $\varepsilon(\omega)$ از دو سهم حقیقی^۱ $\varepsilon_1(\omega)$ و موهومی^۲ $\varepsilon_2(\omega)$ تشکیل شده است. قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک، با استفاده از قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک و همچنین روابط کرامرز-کرونیک به دست می‌آید [۲۴].

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

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

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

قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک نسبی (نسبت به ثابت دی‌الکتریک خالص)، ضریب شکست^۳ $n(\omega)$ و ضریب خاموشی^۴ $k(\omega)$ برای ترکیبات V_2ScIn و V_2ScGa به ترتیب در شکل‌های ۵ و ۶ رسم شده‌اند. همچنین ضریب جذب $\alpha(\omega)$ و انعکاس $R(\omega)$ به ترتیب در شکل‌های ۷ و ۸ رسم شده‌اند.

³ Refraction coefficient

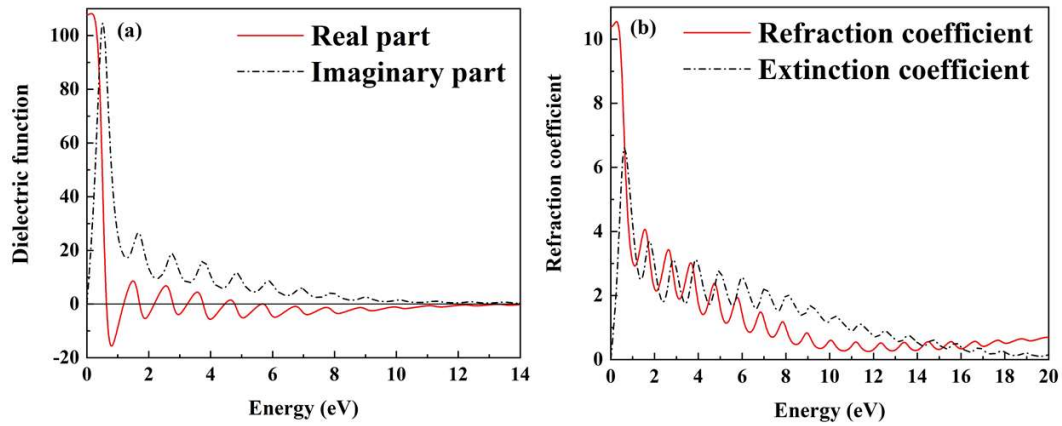
⁴ Extinction coefficient

¹ Real part

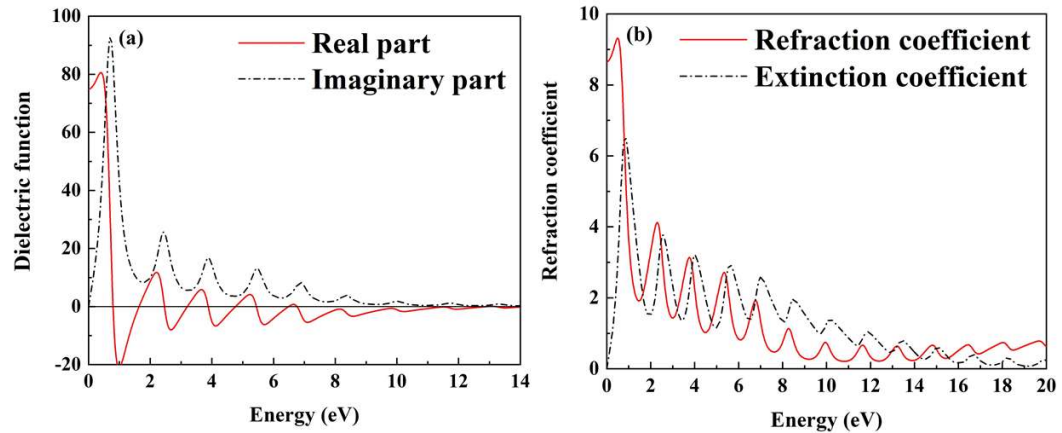
² Imaginary part

در شکل‌های ۵ و ۶ قسمت a قابل مشاهده است، قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک با یک قله قابل توجه در آغاز شروع می‌شوند که این می‌تواند نشان‌دهنده یک گذار بین‌نواری باشد.

وجود دارد. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که این ترکیبات برای استفاده به‌عنوان جاذب امواج مناسب هستند. قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک شامل گذارهای درون‌نواری^۱ و بین‌نواری^۲ است. همان‌طور که



شکل ۵. a: قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، b: ضریب شکست و ضریب خاموشی، برای ترکیب تمام‌هویسلر V_2ScGa .



شکل ۶. a: قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، b: ضریب شکست و ضریب خاموشی، برای ترکیب تمام‌هویسلر V_2ScIn .

² Intraband transition

¹ Interband transition

کوچکی مشاهده می‌شود که ناشی از گذارهای درون-نواری است چرا که در نمودارهای ضریب جذب و ضریب انعکاس فاصله نوسان‌ها برابر با گاف انرژی است. این نوسانات با دامنه کوچک همچنین در شکل‌های مربوط به قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، ضریب شکست و ضریب خاموشی مشاهده می‌شوند.

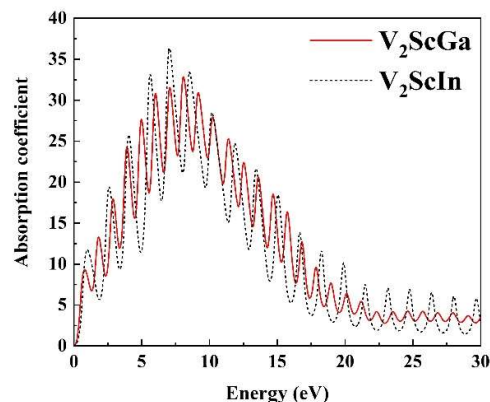
نتیجه‌گیری

خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی ترکیبات تمام‌هوسلر V_2ScX ($X = Ga, In$) با استفاده از نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار گرفتند. نتایج نشان دادند که ترکیب V_2ScGa در هر دو کانال اسپینی رفتار فلزی نشان می‌دهد و در نتیجه یک فلز است. V_2ScIn یک فرومغناطیس نیم‌فلز است که خاصیت نیم‌فلزی خود را در بازه نسبتاً بزرگی از ثابت شبکه حفظ می‌کند. V_2ScIn از قانون اسلیتر-پائولینگ پیروی می‌کند و دارای دمای کوری نسبتاً بالای ۴۹۶ کلوین است، بنابراین گزینه مناسبی برای استفاده در ابزار اسپینترونیک است. در بررسی خواص اپتیکی ضریب شکست برای V_2ScGa و V_2ScIn به ترتیب برابر با ۱۰/۴ و ۸/۶ تخمین زده شد. همچنین با توجه به وجود یک قله قابل توجه در انرژی‌های پایین، می‌توان به این نتیجه رسید که در این انرژی‌ها این ترکیبات جاذب‌های خوبی هستند.

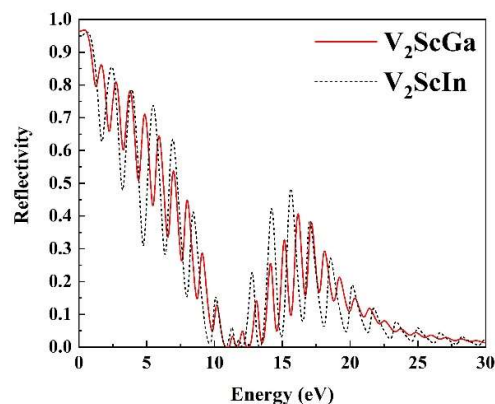
مرجع‌ها

[1] N. Kervan, S. Kervan, Half-metallic properties in the Fe_2TiP full-Heusler compound, *Intermetallics* 37 (2013) 88-91. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2013.02.005>

[2] O. Canko, F. Taskin, M. Atis, N. Kervan, S. Kervan, Magnetism and halfmetallicity in



شکل ۷. ضریب جذب برای ترکیبات تمام‌هوسلر V_2ScX ($X = Ga, In$).



شکل ۸. ضریب انعکاس برای ترکیبات تمام‌هوسلر V_2ScX ($X = Ga, In$).

با توجه به شکل ۷ مشاهده می‌شود که برای هر دو ترکیب V_2ScGa و V_2ScIn در بازه انرژی بین ۵ تا ۱۵ الکترون‌ولت جذب بالایی وجود دارد. اما برای انرژی‌های بیشتر از ۱۵ الکترون‌ولت، ضریب جذب کاهش می‌یابد. ضریب انعکاس که در شکل ۸ نشان داده شده است، در ابتدا مقادیر بالایی دارد و به تدریج کاهش می‌یابد به طوری که در انرژی‌های حدود ۱۰ تا ۱۵ الکترون‌ولت کمترین مقدار خود را دارد. از مقایسه شکل‌های ۷ و ۸ متوجه می‌شویم که در بازه‌های انرژی که جذب بالایی وجود دارد ضریب انعکاس بسیار کوچک است و همچنین اگر ضریب جذب کوچک باشد ضریب انعکاس بزرگ خواهد بود. در شکل‌های ۷ و ۸، در کل بازه انرژی مورد بررسی، نوسان‌های

<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2014.12.039>

[8] M. Ilkhani, Half-metallic behavior, thermodynamic stability and thermoelectric performance of new CoXMnSi (X=Rh, Tc) quaternary Heuslers, *Journal of many body systems* **11** (2021) 13-27.
<https://doi.org/10.22055/jrmb.2021.17055>

[9] M. Moradi, N. Taheri, M. Rostami, Structural, electronic, magnetic and vibrational properties of half-Heusler NaZrZ (Z = P, As, Sb) compounds, *Physics Letters A* **382** (2018) 3004-3011.
<https://doi.org/10.1016/j.physleta.2018.07.008>

[10] M. Safavi, M. Moradi, M. Rostami, Structural, Electronic and Magnetic Properties of NaKZ (Z=N, P, As, and Sb) Half-Heusler Compounds: a First-Principles study, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* **30** (2016) 989-997.
<https://doi.org/10.1007/s10948-016-3865-8>

[11] A. Lakdja, H. Rozale, A. Chahed, O. Benhelal, Ferromagnetism in the half-Heusler XC₃Ba compounds from first-principles calculations (X = C, Si, and Ge), *Journal of Alloys and Compounds* **564** (2015) 8–12.
<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2013.02.026>

[12] W. Huang, X. Wang, X. Chen, W. Lu, L. Damewood, C.Y. Fong, Structural and electronic properties of half-Heusler alloys PtXBi (with X=Mn, Fe, Co and Ni) calculated from first principles, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **377** (2015) 252–258.
<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2014.10.068>

[13] S.A. Khandy, D.C. Gupta, Electronic structure, magnetism and thermoelectricity

the Fe₂ZrP Heusler alloy, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* **29** (2016) 1-6.

<https://doi.org/10.1007/s10948-016-3576-1>

[3] X.D. Xu, Z.X. Chen et al. Microstructure, magnetic and transport properties of a Mn₂CoAl Heusler compound, *Acta Materialia* **176** (2019) 33-42.
<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.06.047>

[4] A. Birsan, V. Kuncser, First principle investigations of the structural, electronic and magnetic properties of predicted new zirconium based full-Heusler compounds, Zr₂MnZ (Z=Al, Ga and In), *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **406** (2016) 282–288.

<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2016.01.032>

[5] 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 Cr₂GdSi_{1-x}Ge_x: an ab-initio study, *Journal of Alloys and Compounds* **676** (2016) 440– 451.

<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2016.03.075>

[6] F. Bagverdi, F. Ahmadian, First principles study of half-metallic ferromagnetism of the full-Heusler compounds RbSrX₂ (X= C, N, and O), *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* **28** (2015) 2773–2781.
<https://doi.org/10.1007/s10948-015-3094-6>

[7] J. Jalilian, Comment on Study of electronic, magnetic, optical and elastic properties of Cu₂MnAl a gapless full Heusler compound, *Journal of Alloys and Compounds* **626** (2015) 277–279.

- materials, *Journal of Physics: Condensed Matter* **21** (2009) 395502.
<https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>
- [20] X.P. Wei, Y.D. Chu, X.W. Sun, J.B. Deng, Y.Z. Xing, Stability, electronic, magnetic and pressure effect of half-Heusler alloys CNaCa and SiNaCa: a first-principles study, *Superlattices Microstructures* **74** (2014) 70–77.
<https://doi.org/10.1016/j.spmi.2014.06.018>
- [21] J.C. Slater, The Ferromagnetism of Nickel. II. Temperature Effects, *Physical Review journals* **49** (1936) 931-937.
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.49.931>
- [22] L. Pauling, The Nature of the Interatomic Forces in Metals, *Physical Review journals* **54** (1938) 899-904.
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.54.899>
- [23] K. Sato, et al. Exchange interactions in diluted magnetic semiconductors, *Journal of Physics: Condensed Matter* **16** (2004) S5491–S5497.
<https://doi.org/10.1088/0953-8984/16/48/003>
- [24] A. Delin, O. Eriksson, R. Ahuja, B. Johansson, M.S.S. Brooks, T. Gasche, S. Auluck, J.M. Wills, Optical properties of the group-IVB refractory metal compounds, *Physical Review B* **54** (1996) 1673-1681.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.1673>
- in layered perovskites: Sr₂SnMnO₆ and Sr₂SnFeO₆, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **441** (2017) 166-173.
<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2017.05.058>
- [14] S.A. Khandy, I. Islam, D.C. Gupta, A. Laref, Full Heusler alloys (Co₂TaSi and Co₂TaGe) as potential spintronic materials with tunable band profiles, *Journal of Solid State Chemistry* **270** (2019) 173-179.
<https://doi.org/10.1016/j.jssc.2018.11.011>
- [15] S. Li, C. Cheng, K. Meng, C. Chen, Excitation fluence dependence of spin-wave dynamics and intrinsic Gilbert damping in epitaxial Co₂FeAl film, *Japanese Journal of Applied Physics* **58** (2019) 040903.
<https://doi.org/10.7567/1347-4065/ab07eb>
- [16] M. Urdampilleta, S. Klyatskaya, J. Cleuziou, et al. Supramolecular spin valves, *Nature Materials* **10** (2011) 502-506.
<https://doi.org/10.1038/nmat3050>
- [17] A. Bsiesy, Spin injection into semiconductors: towards a semiconductor-based spintronic device, *Comptes Rendus Physique* **6** (2005) 1022-1026.
<https://doi.org/10.1016/j.crhy.2005.11.003>
- [18] R.A.P. Ribeiro, A. Camilo, S.R. De Lazaro, Electronic structure and magnetism of new ilmenite compounds for spintronic devices: FeBO₃ (B = Ti, Hf, Zr, Si, Ge, Sn), *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **394** (2015) 463–469.
<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2015.05.096>
- [19] P. Giannozzi et al., QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of