

ORIGINAL ARTICLE

Mechanical Stability and Magneto Optic of CoRuVGa Heusler

Arisa Jazideh¹, Arash Boochani^{2*}, Borhan Arghavaninia³, Sahar Rezaee⁴

1 Ph.D. Student, Department of Physics, Kermanshah Branch, Islamic Azad University, Kermanshah, Iran.

2 Associate Professor, Department of Physics, Kermanshah Branch, Islamic Azad University, Kermanshah, Iran.

3 Associate Professor, Department of Physics, Kermanshah Branch, Islamic Azad University, Kermanshah, Iran.

4 Associate Professor, Department of Physics, Kermanshah Branch, Islamic Azad University, Kermanshah, Iran.

Correspondence

Arash Boochani

Email: arash_bch@yahoo.com

How to cite

Jazideh, A. Boochani, A. Borhan Arghavaninia, B. Rezaee, S. (2024). Mechanical Stability, Magneto Optic, of CoRuVGa Heusler, Optoelectronic, 6(4), 43-50.

ABSTRACT

The structural stability, electronic, magneto-optical properties of CoRuVGa have been studied using GGA approximations. The ferromagnetic phase with a magnetic moment of $2.69 \mu_B$ is more stable than the non-magnetic phase. This structure has elastic stability with Young's modulus and shear modulus of 186.1749 GPa and 5.0 GPa, respectively. Moreover, the phonon scattering diagram shows that this compound has dynamic stability. This structure has metallic behavior. Due to the ferromagnetic behavior of this compound, the Kerr angle in the visible and ultraviolet regions has a counter-clockwise rotation of 0.1 degrees.

KEYWORDS

DFT (Density Functional Theory), CoRuVGa Heusler, Phonon, MOKE (Magneto-Optical Kerr Effect).

فصلنامه علمی
اپتوالکترونیک

«مقاله پژوهشی»

بررسی پایداری مکانیکی و مگنتو اپتیکی ترکیبات چهار تایی CoRuVGa

آریسا جزیده¹، آرش بوچانی^{2*}، برهان ارغوانی نیا³، سحر رضایی⁴

چکیده

پایداری ساختاری، خواص الکترونیکی، مغناطیسی نوری CoRuVGa توسط تقریب‌های GGA و مطالعه شده است. فاز فرومغناطیسی با گشتاور مغناطیسی $2/69$ مگنتون بور پایدارتر از فاز غیر مغناطیسی است. این سازه دارای پایداری الاستیک با مدول یانگ و برشی به ترتیب $186,1749$ GPa و $5/0$ GPa است. علاوه بر این، نمودار پراکندگی فونون نشان می‌دهد که این ترکیب پایداری دینامیکی دارد. این ساختار دارای رفتار فلزی است. به دلیل رفتار فرومغناطیسی این ترکیب، زاویه کر در نواحی مرئی و فرابنفش دارای چرخش خلاف جهت عقربه‌های ساعت $0/1$ درجه است.

واژه‌های کلیدی

نظریه تابعی چگالی، ترکیبات چهار تایی، اثر کر.

- 1 دانشجوی دکترا، گروه فیزیک واحد کرمانشاه، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه، ایران.
- 2 دانشیار، گروه فیزیک واحد کرمانشاه، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه، ایران.
- 3 دانشیار، گروه فیزیک واحد کرمانشاه، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه، ایران.
- 4 دانشیار، گروه فیزیک واحد کرمانشاه، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه، ایران.

نویسنده مسئول:

آرش بوچانی

رایانامه: arash_bch@yahoo.com

استناد به این مقاله:

آریسا جزیده، آرش بوچانی، برهان ارغوانی نیا، سحر رضایی (1403). بررسی پایداری مکانیکی و مگنتو اپتیکی ترکیبات چهار تایی CoRuVGa. فصلنامه علمی اپتوالکترونیک، 50-43، (4)6.

مقدمه

چهارگانه هویسلر مبتنی بر عناصر گذار سه بعدی وجود دارد، اما فقط چند آلیاژ چهار هسته‌ای هویسلر چهار پایه (مبتنی بر Ru و Rh) به صورت آزمایشی مطالعه شده‌اند. اثر جایگزینی یکی از عناصر d^3 با یک عنصر d^4 در آلیاژهای چهارگانه هویسلر جالب است [17-20]. به عنوان مثال، $CoFeMnGe$ مشخص شد که آلیاژ دارای مقدار قابل توجهی اختلال DO_3 است و انتظار می‌رود جایگزینی Fe با یک عنصر $4d$ (Ru, Rh) باعث بهبود ساختار شود، زیرا هم $CoRuMnGe$ و هم $CoRhMnGe$ در ساختار $L2_1$ تبلور می‌یابند [21,22]. در کارهای دیگران اشاره‌ای به محاسبات MOKE نشده بود و ما علاقمند به بررسی آن شدیم و در دیگر کارها ارزیابی نشده است و برای نخستین بار به بحث و ویژگی‌های آن پرداخته‌ایم. در دستگاه‌های اسپینترونیک که بر اساس قطبش اسپین در سطح فرمی (EF) کار می‌کنند، می‌توان به عملکرد اضافی و مصرف انرژی کمتری دست یافت یکی از دسته‌بندی‌های پیشنهادی مواد برای دستگاه‌های الکترونیکی مبتنی بر چرخش آینده، ترکیبات هوسلر است. آلیاژهای هوسلر کامل خواص الکترونیکی فوق‌العاده‌ای را نشان می‌دهند که در آن رفتار فلزی برای یک کانال اسپین در حالی که خصوصیت نیمه‌رسانا برای کانال اسپین دیگر مشاهده می‌شود؛ بنابراین به فرومغناطیس‌های نیمه فلزی (HMF) معروفند وجود الکترون‌های رسانا در اطراف EF یکی از کانال‌های اسپینی منجر به قطبش اسپین بالا در انرژی فرمی ترکیبات هوسلر می‌شود. پلاریزاسیون اسپینی مرتبه 100 درصد در واقع برای کاربردهای اسپینترونیک امیدوارکننده است؛ زیرا می‌توان به جریان قطبی اسپینی بالا دست یافت علاوه بر ویژگی‌های الکترونیکی جذاب ذکر شده، دمای کوری بالا (TC) و گشتاورهای مغناطیسی بالا، معیارهای مهمی را برای کاربردهای تکنولوژیکی حفظ می‌کنند پس از کشف HMF در $NiMnSb$ علاقه شدیدی بر آلیاژهای هوسلر متمرکز شد که منجر به تولید خانواده بزرگی شد، از جمله آلیاژهای هوسلر مبتنی بر کبالت (Co) قطبش اسپین بالا و دمای کوری را نشان دادند [23].

روش محاسبات

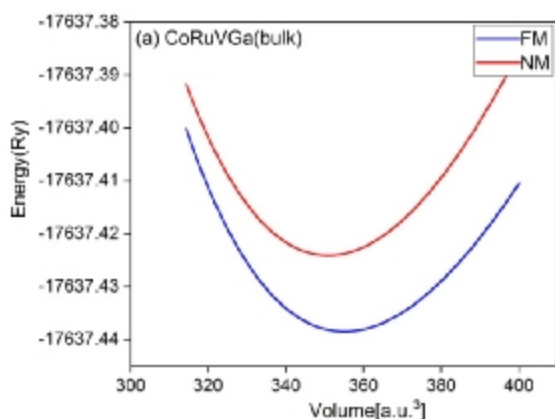
محاسبات اصول اولیه با استفاده از نظریه تابعی چگالی تئوری [24-26] (DFT) انجام می‌شود؛ که در آن مسئله بسیاری از تعامل الکترون‌ها و هسته‌ها معادلات کهن-شم، به یک معادله الکترون کاهش می‌یابد [27]. حل معادلات کهن-شم با استفاده از روش پتانسیل کامل امواج بهبودیافته خطی (FP-)

اکتشاف مواد جدید، به ویژه آلیاژهای هویسلر و شاخه‌های آنها همراه با ویژگی‌های قابل تنظیم توجه بسیاری از دانشمندان در سراسر جهان را به خود جلب کرده است. فناوری‌های مدرن از ابررسانایی گرفته تا تبدیل انرژی و ذخیره‌سازی داده‌ها تا سنسج بدون تماس معمولاً توسط آلیاژهای هویسلر تقویت می‌شوند. این دسته از مواد به دلیل ویژگی‌های چند بعدی مانند رابط‌های لایه نازک سازگار، دمای کوری زیاد، مقاومت مغناطیسی و غیره به‌عنوان حوزه تحقیقاتی پیشرو پدید آمدند [1,2]. جامعه علمی تحقیقات کافی برای پیش‌بینی مواد جدید انجام داد. با برخی از خواص از پیش تعریف شده مانند نیمه فلزی، قطبش اسپین بالا، یا گشتاورهای مغناطیسی انتگرال بزرگ، فرومغناطیس‌های نیمه فلزی (HMFs) دسته جدیدی از مواد را نشان می‌دهند که خواص نیمه هادی را در یک کانال اسپین (پایین) از خود نشان می‌دهند و در کانال چرخشی دیگر (بالا) به عنوان رسانا عمل می‌کنند. آنها کاربردهایی را در اسپینترونیک برای توسعه واحدهای اساسی کامپیوتر پیدا می‌کنند، از جمله دستگاه‌های ذخیره‌سازی داده، حسگرهای مغناطیسی، دستگاه‌های الکترونیکی با فناوری پیشرفته، شیرهای چرخشی و اتصالات تونلی [3]. پس از تحقق نظری مواد نیمه فلزی توسط de Groot در سال 1983 [4]، مطالعه مواد با خواص نیمه فلزی به یک رشته نوظهور در فیزیک تبدیل شده است. تلاش زیادی برای درک، پیش‌بینی و رشد مواد جدید نیمه فلزی انجام شده است. دلیل اصلی این تلاش استفاده بالقوه از نیمه فلزات برای کاربردهای دستگاه اسپینترونیک [5,6]، مانند حافظه دسترسی تصادفی مغناطیسی (MRAM) magnetic random access memory بوده است [7]. خانواده ترکیبات هویسلر با بیش از یک هزار عضو توجه بسیاری از محققین را به خود جلب کرده است. بروز ویژگی‌های فیزیکی متعدد از قبیل ویژگی نیم فلزی، ویژگی‌های مغناطیسی متنوع، اثر حافظه شکلی [8,9] اثر مغناطوگرمایی بزرگ [10-12] و مقاومت بزرگ [13,14] و از سوی دیگر سادگی فیزیک حاکم بر آنها دلیل توجه گسترده به این ترکیبات است مانند عملکرد ترموالکتریکی عالی [15,16].

در میان آلیاژهای چهارگانه هویسلر گزارش شده فقط چند مورد در ساختار نوع Y مرتب متبلور می‌شوند. کنترل بی‌نظمی و نقص در این دسته از مواد هنوز هم یک چالش بزرگ برای کاربردها است، زیرا بی‌نظمی تا حد زیادی بر قطب‌بندی چرخش تأثیر می‌گذارد. تعداد زیادی گزارش در مورد آلیاژهای

کرده‌ایم. این منحنی‌ها حاوی اطلاعات ارزشمندی در خصوص رفتار مکانیکی جسم در فازهای مغناطیسی و غیر شاهد وجود نقطه کمینه و حجم تعادلی برای آن هستند. توجه به این نکته مهم است که این ترکیب در فاز فرومغناطیس پایدارتر است چرا که انرژی حجم تعادلی آنها در این فاز بسیار کمتر از فاز غیر مغناطیس است. نکته‌ای که وجود دارد در حجم‌های کمتر از حجم تعادلی نمودارها به سمت همگرایی بیشتر رفته‌اند و در حالتی که بلور تحت استرس باشد در حجم‌های کوچک‌تر فاز غیر مغناطیسی و مغناطیسی جایشان عوض می‌شود و بلور در فاز غیر مغناطیسی می‌شود.

این نمودار حاوی اطلاعات مهمی است مانند ثابت شبکه بالک مدول مشتق بالک مدول و انرژی در نقطه کمینه که در جدول (1) لیست شده است. همان طور که از جدول (1) می‌بینیم ثابت شبکه‌ای که در حالت بالک محاسبه کردیم تطابق بسیار خوبی با دیگر کارها دارد؛ بنابراین این نشان می‌دهد که محاسبات انجام گرفته استاندارد هستند و قابل استناد است. بالک مدول نشان می‌دهد که در فاز مغناطیسی و چه غیر مغناطیسی سختی بلور بسیار بزرگ است و از استحکام لازم برای کاربردهای صنعتی برخوردار است. مشتق بالک مدول در هر دو فاز به خصوص در فاز غیر مغناطیسی نشان می‌دهد که ترکیب بین اتم‌ها از نوع یونی است. همچنین ممان مغناطیسی این ترکیب در فاز فرومغناطیس گویای میل مغناطیسی شدید این ترکیب در پاسخ‌دهی به میدان خارجی است. نکته مهم که در شکل (2) وجود دارد آن است که این ساختار در فاز فرومغناطیس پایدار و در فاز غیر مغناطیس شبه پایدار هستند.



شکل 2. نمودار انرژی بر حسب حجم در دو فاز مغناطیسی و غیر مغناطیسی

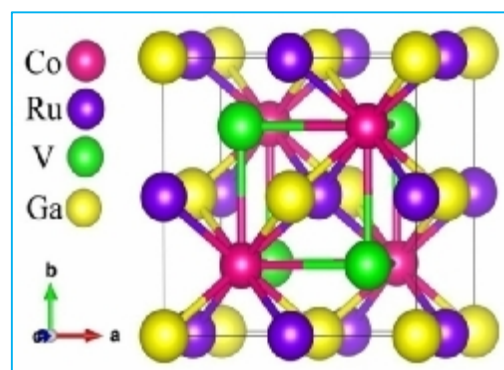
[28] انجام می‌شود که در بسته WIEN2k به کار رفته است [29]. تعویض پتانسیل همبستگی با استفاده از پارامتراسیون Perdew-Burke-Ernzerhof در تقریب گرادیان تعمیم یافته (PBE-GGA) محاسبه می‌شود [30]. محاسبات چرخش اسپینی برای هر دو حالت چرخش بالا و پایین انجام می‌شود. توابع موج در ناحیه بین برشی در امواج صفحه‌ای با برش $R_{kmax} = 8.0$ گسترش یافت. شعاع مافین قلع (RMT) برای همه اتم‌ها $2/20$ a.u. در نظر گرفته می‌شود. تعداد نقاط شبکه K در منطقه اول بریلوئن برابر با $(13 \times 13 \times 13)$ در منطقه غیر قابل کاهش Brillouin ساخته شده است پوزیشن اتم‌ها

$V(0.25 \ 0.25 \ 0.25)$, $Ru(0.5 \ 0.5 \ 0.5)$, $Co(0.75 \ 0.75 \ 0.75)$ $Ga(0.0 \ 0.0 \ 0.0)$

در ادامه محاسبات بررسی پایداری مکانیکی استاتیکی منحنی انرژی بر حسب حجم، ویژگی‌های الاستیکی و خواص الکترونیکی با نرم‌افزار wien2k انجام شده است. بررسی پایداری دینامیکی این ترکیب و ساختار نواری فونون با استفاده از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو انجام شده است و رفتار MOKE این ترکیبات با نرم‌افزار Exciting تحلیل شد.

نتایج و بحث

در شکل (1) ساختار بالکی ترکیب CoRuVGa نمایش داده شده است در حالت بالکی این ترکیب یک هویسلر چهارتایی با ساختاری متراکم است. هر اتم با همسایگانش Co با و Ru, V برقرار کرده است.



شکل 1. شکل ساختاری CoRuVGa

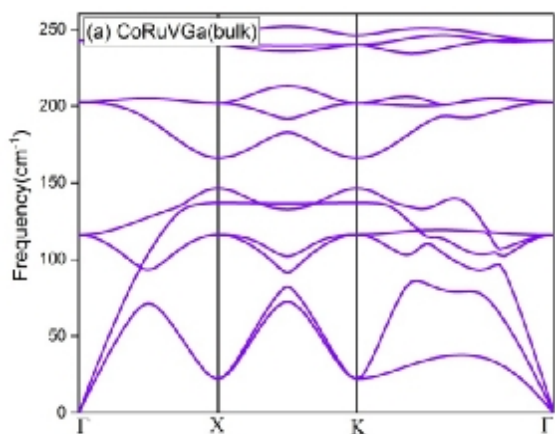
اولین و مهم‌ترین ابزار برای درک پایداری یک ترکیب کریستالی وجود نقطه ground state برای سلول واحد ترکیب است. بر این اساس تغییرات انرژی کل بلور بر حسب تغییرات حجم سلول واحد آن را با برازش (fitting) معادله بریش مورناگون در شکل (2) در دو حالت fm و nm رسم

به همین دلیل ضریب ناهمسانگردی الاستیکی در این ترکیب بسیار بالا است. این ساختار در راستاهای مختلف پاسخ‌های الاستیکی متقارن را از خود نشان می‌دهد دمای دمای بالای این ترکیب گواهی است بر ظرفیت گرمایی بالای این ساختار و می‌تواند انرژی گرمایی بالای را در خود ذخیره کند.

جدول 2. ثابت‌های الاستیکی CoRuVGa

Materials	CoRuVGa
C ₁₁	313.2470
C ₁₂	136.6490
C ₄₄	779.1696
E	652.572
G	345.747
ν	0.056
B/G	0.5654
A	8.8242
θ_D	851.754

شکل (3) ساختار نواری فنونی ترکیب CoRuVGa در حالت را نشان می‌دهد. ساختار نواری فنون ابزاری سودمند جهت تشخیص پایداری ترکیب‌ها در دماهای بالاتر از صفر است. به طوری که این ترازهای کوانتاهای انرژی، ارتعاش‌های شبکه در منطقه اول بریلوئن را به ما می‌دهد. نکته‌ای که در نمودار دیده می‌شود آن است که تمام ترازها مثبت هستند که نشان دهنده پایداری ارتعاشی این شبکه بلوری است. در پنل (a) ساختار بالکی دو گاف فرکانسی مشاهده می‌شود که این به دلیل اتم‌های سنگین Ru و Ga در این ساختار نسبت به دیگر اتم‌ها است. همچنین در ناحیه آکوستیکی ترازهای آکوستیکی دارای گرادیان‌های بزرگی هستند که نشان می‌دهد انتقال انرژی گرمایی در این ترکیب به خوبی اتفاق می‌افتد و در فرکانس‌های بالاتر و اپتیکی شیب منحنی‌ها کاسته می‌شود.



شکل 3. پاشندگی فنونی در منطقه اول بریلوئن

جدول 1. ثابت شبکه، بالک مدول، ممان مغناطیسی CoRuVGa

Materials	CoRuVGa(FM)	CoRuVGa(NM)
a^0	5.95[21]	5.9450
$V[a.u^3]$	355.0797	350.9222
B(GPa)	186.1745	206.4382
B'	5.3317	4.1248
Energy(Ry)	-17637.43852	-17637.42413
μ (GGA)	2.69	---

الاستیک

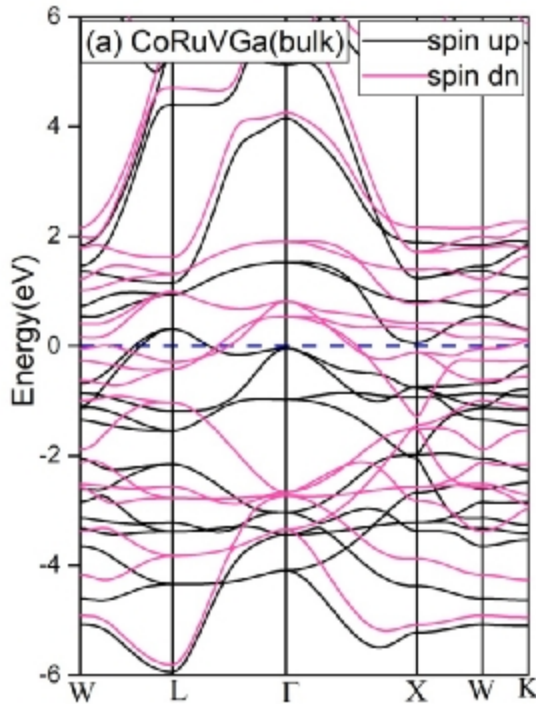
پایداری مکانیکی این ترکیب هویسلر از طریق محاسبه ثابت‌های الاستیک با رویکرد انرژی بررسی شده و نتایج در جدول (2) خلاصه شده است [31]. مشاهده می‌شود که در کریستال مکعب فقط سه جز components مستقل از C₁₁ C₄₄ (= C₅₅ = C₆₆) و C₁₂ (= C₁₃ = C₂₃)، (= C₂₂ = C₃₃) یافت می‌شود. برای پایداری کریستال مکعب، معیارهای زیر تأیید شد. مدول انبوه $(C_{11} + 2C_{12}) > 0$ ، مدول برشی $(C_{44}) > 0$ و مدول برشی چهار ضلعی $(C_{11} - C_{12}) > 0$.

$$B = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (1)$$

$$G = \frac{GV + GR}{2} \quad (2)$$

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (3)$$

ضرایب الاستیک ترکیب CoRuVGa در فاز بالک محاسبه شده است و دیگر پارامترهای مرتبط با آن نظیر شیر مدول، یانگ مدول، ضریب پواسون، ثابت ناهمسانگردی دمای دمای، نسبت بالک مدول به شیر مدول در جدول (2) لیست شده است. مشاهده می‌شود که ضریب الاستیکی ترکیب CoRuVGa عدد بسیار بزرگی است و قاعدتاً شرایط پایداری الاستیکی در آن دیده می‌شود، به خصوص این ترکیب در راستای قطر اصلی، کشسان بسیار بالای از خود نشان می‌دهد؛ که با ضریب C₄₄ مشخص شده است. همچنین یانگ مدول و شیر مدول نشان دهنده آن است که در مقابل کشش‌های سطحی و برشی بسیار مقاوم است. ضریب پواسون نشان می‌دهد که اگر مقداری کمتر از 0/25 باشد ترکیب آن یونی است؛ بنابراین با توجه به مقدار این ضریب در ساختار بالکی می‌توان نتیجه گرفت که در این ترکیب، پیوندها یونی هستند. نسبت B/G، داکتایل یا بریتایل بودن ساختار را نشان می‌دهد. به طوری که برای مقادیر بیشتر از 1/25 داکتایل و کمتر از آن بریتایل است؛ بنابراین ساختار بالکی CoRuVGa یک ترکیب بریتایل است. با توجه به تنوع اتم‌ها در سلول واحد این ترکیب همسانگردی الاستیکی نداریم.



شکل 5. ساختار نواری در دو اسپین بالا و پایین

اثر مگنتو اپتیکی کر (MOKE)

اخیرا برای تحقیق نیمه هادی‌ها با خواص فرومغناطیس بهبود یافته تحقیقات گسترده انجام شده است. تحقیق اصلی توسعه اسپینترونیک جدید است برای دستگاه‌هایی مانند دریچه‌های اسپین، دیودهای اسپین، حسگرها مغناطیسی، دستگاه‌های منطقی و سوئیچ‌های نوری فوق سریع. واکنش این مواد به نور در حضور میدان مغناطیسی تغییر می‌کند و ممکن است به عنوان دستگاه الکترو نوری استفاده شود. به این دلایل ما داریم اثر مگنتو اپتیک و خواص مغناطیسی را بررسی می‌کنیم. دلایل عمده برای استفاده از پدیده‌های مگنتو اپتیکی در وسایل تحقیقاتی-علمی، مشخصه‌یابی نمونه‌های مغناطیسی (دقت بالا در اندازه‌گیری نمونه مغناطیسی)، کم هزینه بودن دستگاه‌هایی که بر اساس این اثرات کار می‌کنند و همچنین توانایی پوشش ناحیه کوچکی از ماده مغناطیسی توسط نور هستند؛ دلیل دیگر کم خطر بودن میدان مغناطیسی است.

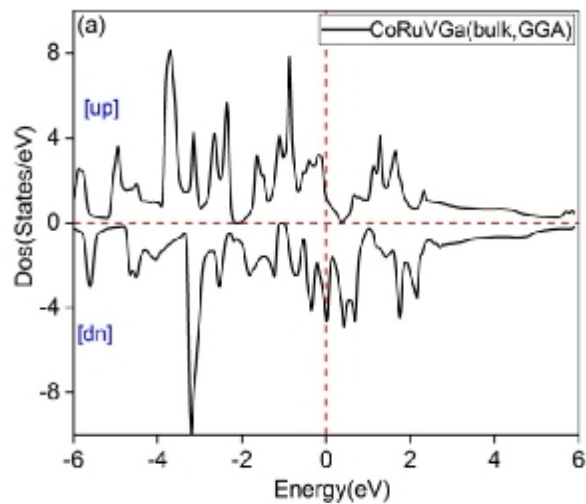
از آنجا که خواص نوری ناشی از چرخش اسپین - مدار هستند، این چرخش‌ها باعث می‌شود که ما در ترکیب بازتاب و انتقال داشته باشیم؛ که این باعث به وجود آمدن اثرهای مگنتو اپتیکی کر و فارده می‌شود. اثر کر magneto optic (MOKE) کیر ناشی از برهمکنش نور پلاریزه با حالت مغناطیسی سطح ماده است، که باعث چرخش و بیضی می‌شود. تغییر شدت حالت قطبش اولیه نور بر انعکاس نور از

بخش الکترونی

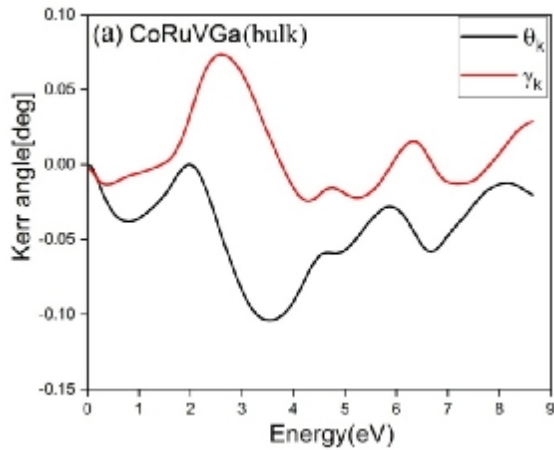
ویژگی‌های الکترونی مواد شامل DOS و Band structure حاوی اطلاعات مهمی است تمام ویژگی‌های اپتیکی ترمو الکتریکی و مغناطیسی از رفتار الکترونی مواد ناشی می‌شود. در شکل (4) منحنی‌های dos با تقریب GGA رسم شده است.

ملاحظه می‌شود ترکیب در دو اسپین بالا و پایین دارای ناهمسانگردی الکترونی است؛ بنابراین در سطح فرمی شاهد قطبیدگی اسپینی هستیم؛ پس این ترکیب دارای رفتار فرومغناطیس است. همان طور که در جدول (1) بیان شده است این ترکیب در حالت بالکی دارای ممان مغناطیسی $2/69$ مگنتونیور است. پیوستگی حالات الکترونیکی در اسپین بالا و پایین و قطع‌شدگی سطح فرمی در آن‌ها نشان دهنده رسانندگی بسیار خوب این ترکیب است.

در ادامه نمودار ساختار نواری در دو اسپین up و dn با تقریب‌های GGA بررسی شده است. شکل (5) ساختار نواری را نشان می‌دهد. ساختار نواری هر ترکیب شکل ترازهای انرژی را در راستاهای تقارنی در منطقه اول بریلون نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که در دو اسپین up و dn ترازهای انرژی به کرات سطح فرمی را قطع کردند؛ همچنین در هم‌تنیدگی شدید ترازها در سطح فرمی و شیب نمودارها تاکید بیشتری است که این نمودارها در تطابق کاملی با نمودار dos هستند.



شکل 4. چگالی حالات الکترونی



شکل 6. زاویه کر θ_k و فاراده γ_k بر حسب انرژی فوتونی

نتیجه گیری

با توجه به تئوری تابعی چگالی و تقریب GGA، پایداری مکانیکی، خواص الکترونیکی، رفتار مغناطیسی نوری و CoRuVGa بررسی شد. محاسبات تغییرات انرژی در برابر حجم نشان داد که این ترکیب در فاز FM پایداری استاتیکی دارد و پیوند بین اتم‌های آن بر اساس مقدار مشتق مدول حجم است. از طرفی نتایج الاستیسیته نشان داد که این سازه دارای پایداری الاستیک در برابر تنش و کرنش بوده. همچنین ساختار باند فونون آن نشان داد که تمام سطوح فونون مثبت است که نشان دهنده پایداری دینامیکی بود و البته شاهد شکاف فرکانسی بین 250cm^{-1} تا 300cm^{-1} بودیم. نمودارهای DOS نشان داد که این ترکیب دارای ویژگی فلزی بوده است. از محدوده مرئی تا انرژی 8 ولت، ما شاهد تغییر در رفتار زاویه کر از $-0/1$ تا $+0/05$ درجه هستیم که این پاسخ مغناطیسی به نور را فراهم می‌کند و این ترکیب کاندید مناسبی برای زیرلایه‌های مغناطیسی نوری است.

منابع

- [1] I. Galanakis, P. H. Dederichs, and N. Papanikolaou, Phys. Rev. B66, 174429 (2002).
- [2] S. V. Faleev, Y. Ferrante, J. Jeong, M. G. Samant, B. Jones, and S. S. P. Parkin, Phys. Rev. Appl.7, 034022 (2017).
- [3] K. S. Ahmad, and J-D.Chai. Journal of Applied Physics127(16), 165102 (2020).
- [4] R. De Groot, F. Mueller, P. Van Engen, K. Buschow, Phys. Rev. Lett.50(25), (1983) 2024.
- [5] K. G.Nezhad, A.Boochani, B. A.Nia, S.Rezaee, Indian Journal of Physics97(4), 1071(2023).
- [6] I. Žutić, J. Fabian, S.D. Sarma, Rev. Mod. Phys.76(2), 323 (2004).
- [7] J. de Boeck, G. Borghs, Phys. World12(4) (1999) 27.

سطح ماده چرخش و بیضی بودن از دوشکستگی و مغناطیسی سرچشمه می‌گیرد. اثرات دو رنگی از حالت قطبی شدن نور که بستگی به مغناطش، حالت قطبش و برش دارد. مسیر پراکنده نور عمق اطلاعات MOKE است که معمولاً در محدوده چند 10 نانومتر است [32].

تانسور هدایت نوری برای اثر کر به صورت زیر است. البته این رابطه برای سیستم‌های مکعبی معتبر است و میدان در راستای z است [34,33].

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

برای محاسبه اثر مگنتو اپتیکی کر از رابطه زیر استفاده

می‌کنیم:

$$\theta_k(\omega) + i\gamma_k(\omega) = \frac{-\sigma_{xy}(\omega)}{\sigma_{xx}(\omega) \sqrt{1 + \frac{4\pi i}{\omega} \sigma_{xx}(\omega)}}$$

که در اینجا θ_k و γ_k به ترتیب زاویه چرخش کر و زاویه چرخش بیضی، ω فرکانس امواج الکترومغناطیسی است. در شکل (6) دو پارامتر زاویه کر و زاویه فاراده که در واقع بخش‌های حقیقی و موهومی اثر مگنتو اپتیکی هستند و تحت انرژی فوتون تابیده شده به بلور رسم کردیم. مشاهده می‌شود که در ناحیه مرئی 3.5eV در ساختار بالکی این ترکیب شاهد یک چرخش پادساعتگرد مولفه میدان الکتریکی فوتون به اندازه $-0/1$ درجه است. نمودار γ_k نشان می‌دهد اصلی‌ترین انرژی برای قطبیدگی نور در ناحیه مرئی رخ می‌دهد.

[8] R.Kainuma, et al, Nature439, 957 (2006).

[9] T.Krenke, et al., Phys. Rev. B75, 104414 (2007).

[10] T.Krenke, E.Duman, M.Acet, E. F. Wassermann, X.Moya, L.Mañoso, and A. Planes, Nature Materials,4, 450 (2005).

[11] Z. D. Han, D. H. Wang, C. L. Zhang, S. L. Tang, B. X.Gu, and Y. W. Du. Appl. Phys. Lett.89, 182507 (2006).

[12] V. K. Sharma, M. K.Chattopadhyay, and S. B. Roy, J. Phys. D40, 1869 (2007).

[13] S. Y. Yu, Z. H. Liu, G. D. Liu, J. L. Chen, Z. X. Cao, G. H. Wu, B. Zhang, and X. X. Zhang, Appl. Phys. Lett.89, 162503 (2006).

- [14] V. K. Sharma, M. K. Chattopadhyay, K. H. B. Shaeb, A. Chouhan, and S. B. Roy, *Appl. Phys. Lett.* 89, 222509 (2006).
- [15] C. Uher, J. Yang, S. Hu, D. T. Morelli, & G. P. Meisner, *Phys. Rev. B*, 59(13), 8615(1999).
- [16] S. Sakurada, & N. Shutoh, *Appl. Phys. Lett.* 86(8), 082105(2005).
- [17] Rezazadeh H, Hantehzadeh M, Boochani A. Investigation of the Electronic, Magnetic and Optical Properties of PtFeBi Half-Heusler and Its (001) Surfaces by Density Functional Theory Method. *Biquarterly Journal of Optoelectronic*. 2021 Aug 23;3(2):97-104.
- [18] Rezazadeh H, Hantehzadeh M, Boochani A. Surface effect on electronic, Magnetic and optical properties of PtCoBi Half-Heusler: a dft Study. *Archives of Metallurgy and Materials*. 2022; 67(1):155-66
- [19] Rezazadeh H, Hantehzadeh M, Boochani A. Surface Effect on Electronic, Magnetic and Optical Properties of PtMnBi Half-Heusler: A DFT Study. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2022 Aug; 16(4):548-61.
- [20] Rezazadeh H. Investigation of the elastic, mechanical, electronic, magnetic and optical properties of NbBiCs half-Heusler by density functional theory method. *Biquarterly Journal of Optoelectronic*. 2022 Aug 23;4(2):57-64.
- [21] D. Rani, L. Bainsla, K.G. Suresh, A. Alam, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 492, 165662 (2019).
- [22] S. Mondal, et al, *Phys. Rev. B*, 98, 205130 (2018).
- [23] Ilkhani, Mansoure, Mahboubeh Yeganeh, Arash Boochani, and Arash Yari. "Electronic structure and magnetic properties of the CoFeMnZ (Z= As and Si) Heuslers by XAS, XMCD and MOKE: A DFT study." *Materials Today Communications* 26 (2021): 101773.
- [24] M. Born, R. Oppenheimer, *Z. Q. der Molekeln, Ann. Phys.* 389, 457 (1927).
- [25] W. Kohn, P. Hohenberg, *Phys. Rev.* B136, 864 (1964).
- [26] W. Kohn, L.J. Sham, *Phys. Rev.* 140, 1133 (1965).
- [27] W. Kohn, L.J. Sham, *Phys. Rev.* 140 (4A) (1965) A1133.
- [28] P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, S. Trickey, *Comput. Phys. Commun.* 59(2), 399(1990).
- [29] G. K. H. Madsen, P. Blaha, K. Schwarz, E. Sjöstedt, L. Nordström, *Phys. Rev. B*. 64 (19), 195134 (2001).
- [30] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* 77(18), 3865 (1996).
- [31] M. H. Elhmar, H. Rached, D. Rached, R. Khenata, G. Murtaza, S. Bin Omran, and W. K. Ahmed, *J. Magnetism and Magnetic Materials*, 393, 165 (2015).
- [32] S. Parsamehr, et al., *Philosophical Magazine* 101(3), 369-386 (2021).
- [33] F-R. Fan, H. Wu, D. Nabok, S. Hu, W. Ren, C. Draxl and A. Stroppa, *J. Am. Chem. Soc.* 139 (37), 12883 (2017).
- [34] S. Hashemzadeh, B. N. Shakarab, S. M. Elahi, A. Boochani, H. Akbari, *Pramana*, 96 (4), 187 (2022).