

ORIGINAL ARTICLE

Studying the Structural and Electronic Properties of a Half-Heusler NaTiAs Alloy: Transition to Half Metallicity

Yaghoob Naimi^{1*}, Abdoreza Jafari²

¹ Associate Professor, Department of Physics, Lamerd Higher Education Center, Shiraz University of Technology, Lamerd, Iran.

² Ph.D., Department of Physics, Lamerd Higher Education Center, Shiraz University of Technology, Lamerd, Iran.

Correspondence

Yaghoob Naimi
Email: naimi@sutech.ac.ir

How to cite

Naimi, Y. Jafari, A. (2026). Studying the Structural and Electronic Properties of a Half-Heusler NaTiAs Alloy: Transition to Half Metallicity, Optoelectronic, 8(2), 9-18.

ABSTRACT

We present a comparative study based on Density Functional Theory (DFT), of the effect of different approximations such as exchange-correlation (XC) functional, the Hubbard U, TB-mBJ correction and optimized lattice constant strain, on the structural and electronic properties of NaTiAs compound. First, using the DFT-based full-potential WIEN2k package, we compare the total energy versus volume of ferromagnetic, antiferromagnetic, and non-magnetic half-Heusler structures to obtain the more stable configuration phase and magnetic state. Calculations show that our compound is more stable in the half-Heusler β -phase and in the ferromagnetic state. Then we investigate the structural and electronic properties of NaTiAs- β using LDA, PBEsol, WC and PBE XC functionals. Our results show that different XC functionals cannot lead to half metallicity. But, when we use GGA+U and TB-mBJ schemes with PBE parameterization, the results indicate that the Fermi level cuts through the partially occupied band in the majority-spin channel while it located in the gap between the valence and conduction bands in the minority spin direction, thus it demonstrates the half-metallic behavior of this compound, and the amount of a total magnetic moment is equal to $1.0\mu_B$. Furthermore, by applying at least 2% optimized lattice-constant strain, NaTiAs- β becomes half metal. Examination of the elastic constants shows that the compound is stable. These types of compounds are candidates for making spintronic devices.

KEY WORDS

Half-Heusler Alloys, Half-Metallicity, Exchange-Correlation Functional, Electronic Structure, Density of State.

فصلنامه علمی
اپتوالکترونیک

«مقاله پژوهشی»

مطالعه خواص ساختاری و الکترونیکی آلیاژ نیمه هویسلر NaTiAs: گذار به حالت نیمه فلزی

یعقوب نعیمی^{۱*}، عبدالرضا جعفری^۲

چکیده

ما یک بررسی مقایسه‌ای بر اساس نظریه تابع چگالی (DFT) را ارائه می‌دهیم که اثر تقریب‌های مختلفی نظیر تابع تبادل-همبستگی، پتانسیل هابارد U، تصحیح TB-mBJ و کرنش ثابت شبکه بهینه‌شده روی خواص ساختاری و الکترونیکی ترکیب NaTiAs را بررسی می‌کند. در ابتدا، با استفاده از بسته WIEN2k مبتنی بر DFT انرژی کل در برابر حجم سلول واحد را برای ساختارهای نیمه‌هویسلر فرومغناطیسی، آنتی‌فرومغناطیسی و غیرمغناطیسی مقایسه می‌کنیم تا فاز پیکربندی و حالت مغناطیسی پایدارتر را به دست آوریم. محاسبات نشان می‌دهند که ترکیب نیمه‌هویسلر ما در فاز β و حالت فرومغناطیسی پایدارتر است. سپس ما خواص ساختاری و الکترونیکی $\text{NaTiAs}-\beta$ را با استفاده از تابع‌های تبادل-همبستگی LDA، PBESol، WC و PBE بررسی می‌کنیم. پس از رسم ساختار نواری برای حالت‌های اسپینی بالا و پایین نتایج ما نشان می‌دهند که هیچ یک از تابع‌های تبادل-همبستگی نمی‌توانند به نیمه‌فلزی بودن ترکیب منجر شوند. اما وقتی از دیدگاه $\text{GGA}+\text{U}$ و TB-mBJ با پارامترسازی PBE استفاده می‌کنیم، نتایج نشان می‌دهند که در یکی از کانال‌های اسپینی ساختار نواری سطح فرمی را قطع می‌کند و خاصیت فلزی از خود نشان می‌دهد؛ اما در کانال اسپینی دیگر، ساختار نواری دارای یک گاف انرژی است و شبیه به یک نیم‌رسانا رفتار می‌کند، این رفتار نیمه‌فلزی ترکیب را نشان می‌دهد و مقدار گشتاور مغناطیسی کل برابر با $1.0\mu_B$ است. علاوه بر این، با اعمال حداقل ۲ درصد کرنش به ثابت شبکه بهینه‌شده، $\text{NaTiAs}-\beta$ به نیمه‌فلز تبدیل می‌شود. بررسی ضرایب الاستیک نشان می‌دهد که ترکیب $\text{NaTiAs}-\beta$ یک ترکیب پایدار است. این نوع ترکیبات کاندیدایی جهت ساخت وسایل اسپینترونیک هستند.

واژه‌های کلیدی

ترکیب نیمه‌هویسلر، نیمه‌فلز، تابع تبادل-همبستگی، خواص الکترونیکی، چگالی حالت.

۱ استادیار، گروه فیزیک، مرکز آموزش عالی لامرد، دانشگاه صنعتی شیراز، لامرد، ایران.
۲ دکتری تخصصی، گروه فیزیک، مرکز آموزش عالی لامرد، دانشگاه صنعتی شیراز، لامرد، ایران.

نویسنده مسئول:

یعقوب نعیمی

رایانامه: naimi@sutech.ac.ir

استناد به این مقاله:

یعقوب نعیمی، عبدالرضا جعفری (۱۴۰۴). مطالعه خواص ساختاری و الکترونیکی آلیاژ نیمه هویسلر NaTiAs: گذار به حالت نیمه‌فلزی. فصلنامه علمی اپتوالکترونیک، ۸(۲)، ۹-۱۸.

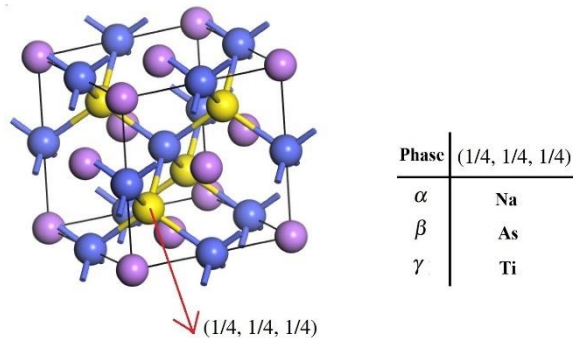
<https://jphys.journals.pnu.ac.ir>

مقدمه

مطالعه خواص فیزیکی مختلف ترکیبات هویسلر پس از کشف آن‌ها توسط فردریک هویسلر [۱] در سال ۱۹۰۳ اهمیت بسیاری پیدا کرده است. به‌طور کلی، ترکیبات هویسلر عمدتاً به دو گروه تقسیم می‌شوند: یکی به نام ترکیب نیمه‌هویسلر^۱ (HH) با فرمول XYZ و دیگری به نام ترکیب کامل هویسلر^۲ (FH) با فرمول X_2YZ . نکته جالب این است که این ترکیبات ممکن است خواصی داشته باشند که در عناصر تشکیل‌دهنده آن‌ها وجود ندارد. به عنوان مثال، می‌توان آلیاژ FH را یافت که دارای حالت مغناطیسی است؛ حتی اگر از اجزایی غیرمغناطیسی ساخته شده باشد؛ مانند Cu_2MnAl و Cu_2MnSi [۲]. همچنین نمونه دیگری از یک آلیاژ نیمه‌هویسلر HH با فرمول $TiNiSn$ وجود دارد که نیمه‌رسانا است، در حالی که سه عنصر آن فلز هستند [۳].

به دلیل کاربردهای متنوع ترکیبات هویسلر در زمینه‌های مختلف، این ترکیبات مورد توجه زیادی قرار گرفته‌اند و خواص گوناگونی از این ترکیبات مطالعه می‌شود؛ از جمله خواص ترموالکتریک [۴-۱۰]، ابررسانایی [۱۱] و قطبش اسپینی بالا [۱۲]. به‌طور کلی، ترکیبات HH در ساختار مکعبی Cl_b و با گروه فضایی F-43m بلورین می‌شوند و سه اتم در موقعیت‌های ویکوف (۰، ۰، ۰)، $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ و $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ قرار دارند. بنابراین سه پیکربندی اتمی ممکن برای XYZ در سلول واحد مکعبی وجود دارد. ما این پیکربندی‌ها را به عنوان فازهای α ، β و γ تعریف می‌کنیم که به ترتیب متناظر به موقعیت اتم X، Z و Y در موضع مرکزی منحصر به فرد $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ است، همان طور که در شکل ۱ نشان داده شده است. یکی از مهم‌ترین خواص ترکیبات HH، خاصیت نیمه‌فلزی است که منجر به قطبش اسپینی ۱۰۰٪ در نزدیکی سطح فرمی می‌شود. آلیاژهای هویسلر در دو کانال وابسته به اسپین رفتاری متفاوت نشان می‌دهند، در حالی که یکی از این کانال‌ها دارای رفتار فلزی است، کانال دیگر رفتار نیمه‌رسانا را نشان می‌دهد. این پدیده در بسیاری از مطالعات مشاهده شده است [۱۳-۲۱]. همچنین، ترکیبات جدید جالبی از HH اخیراً بررسی شده‌اند [۲۲-۳۰]. در محاسبات عددی، تابع تبادل-همبستگی پر دو و همکارانش^۳ (PBE) [۳۱] به عنوان تابع پیش‌فرض از تقریب گرادیان تعمیم‌یافته^۴ (GGA) توسط محققان استفاده می‌شود. اما جالب است که تأثیرهای تابع‌های

مختلف تبادل-همبستگی بر رفتار ساختاری و الکترونیکی آلیاژهای هویسلر را شاهد باشیم. در طول محاسبات ما، مشخص گردید که استفاده از توابع مختلف تبدالی-همبستگی برای ترکیب NaTiAs به عنوان یک ترکیب HH منجر به خواص الکترونی کم و بیش متفاوتی می‌شود.



شکل ۱. سه فاز ممکن برای پیکربندی یک ترکیب نیمه‌هویسلر بر اساس اتمی که در موقعیت میانی قرار می‌گیرد.

علاوه بر این، تأثیر فشار یا کرنش بر خواص الکترونیکی ترکیبات هویسلر توسط بسیاری از محققان مطالعه شده است. به عنوان مثال، تأثیر کرنش‌ها (تتراگنال و یکنواخت) روی نیمه‌هویسلر فرومغناطیسی AuMnSn در مرجع [۳۲] بررسی شد که نشان دادند AuMnSn تنها در محدوده ۸٪ تا ۱۰٪ درصد تنش u ، حالت فرومغناطیس نیمه‌فلزی فعال دارد. همچنین تأثیر فشار روی $LiCrZ$ ($Z=P, As, Bi$ و Sb) توسط شکیل و همکاران مطالعه شده و نتیجه‌گیری کردند که $LiCrSb$ و $LiCrBi$ در ثابت شبکه بهینه نیمه‌فلز هستند، در حالی که $LiCrAs$ و $LiCrP$ تحت فشار به آلیاژهای نیمه‌فلزی تبدیل می‌شوند [۳۳].

در این بررسی، ما رفتار ساختاری و الکترونیکی ترکیب نیمه‌هویسلر NaTiAs را با استفاده از نظریه تابع چگالی مطالعه می‌کنیم. ما تأثیر توابع همبستگی مختلف را به‌طور دقیق‌تر محاسبه و مقایسه می‌کنیم. به این منظور، خواص ساختاری و الکترونیکی NaTiAs را با استفاده از تقریب چگالی محلی^۵ LDA، PBE، PBEsol (PBE سازگار با مواد جامد) و تابع تبادل همبستگی وو-کوهن^۶ WC [۳۴] مطالعه می‌کنیم. علاوه بر این، ما دو رویکرد دیگر برای اصلاح را دنبال می‌کنیم. تقریب پتانسیل تبدالی ترن-بالاها^۷ (TB-mBJ) همچنین تقریب گرادیان تعمیم‌یافته به همراه پتانسیل هابارد^۸

5 Local Density Approximation (LDA)

6 Wu-Cohen (WC)

7 Tran-Blaha Modified Becke-Johnson (TB-mBJ)

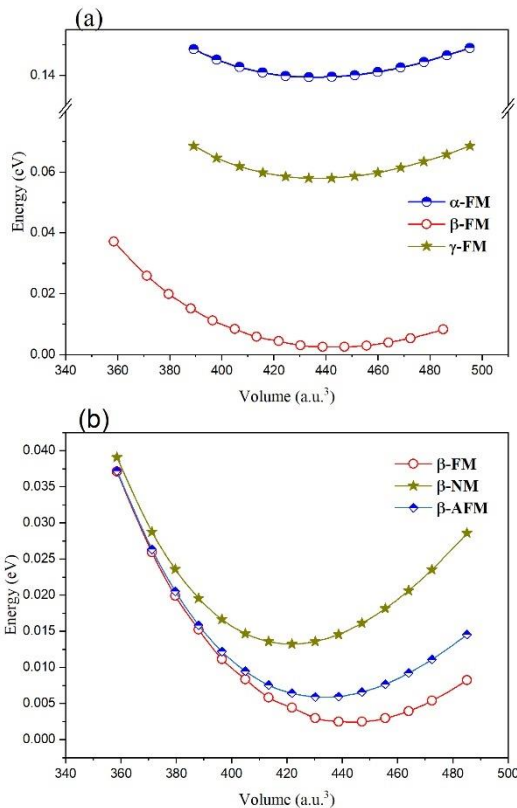
8 Hubbard potential U

1 Half-Husler (HH)

2 Full-Husler (FH)

3 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE)

4 Generalized Gradient Approximation (GGA)



شکل ۲. (a) انرژی ترکیب NaTiAs در حالت فرومغناطیس برای سه فاز مختلف. (b) انرژی برای فاز β در حالت‌های مختلف مغناطیسی. نتایج نشان می‌دهد که حالت فرومغناطیس β پایدارترین حالت است.

خواص ساختاری

در مرحله اول، ما طول ثابت شبکه ترکیب NaTiAs را برای سه فاز ممکن α ، β و γ با به حداقل رساندن انرژی کل به عنوان تابعی از حجم سلول واحد بهینه‌سازی کردیم. پس از آن، برای یافتن پایدارترین پیکربندی اتمی، انرژی کل تمامی پیکربندی‌ها را در برابر حجم سلول واحد با در نظر گرفتن حالت‌های فرومغناطیسی^۲ (FM)، آنتی‌فرومغناطیسی^۳ (AFM) و غیرمغناطیسی^۴ (NM) مقایسه کردیم.

نتایج گزارش شده در شکل ۲ نشان می‌دهد که فاز β با پیکربندی FM از نظر انرژی پایدارتر از سایر فازهای ساختاری و حالت‌های مغناطیسی است. بنابراین در ادامه محاسبات خود را روی ترکیب NaTiAs با فاز β و پیکربندی FM ادامه می‌دهیم.

اختلاف انرژی کل بین انرژی‌ها (به عنوان تابعی از حجم) و انرژی مربوط به حجم بهینه بر اساس رابطه $\Delta E = E(V) - E(V_{op})$ محاسبه می‌شود. این اختلاف انرژی برای توابع همبستگی LDA، PBE، PBEsol و WC در

(GGA+U). در نهایت، به عنوان یک روش دیگر برای بررسی گذار به حالت نیمه فلزی، تاثیر کرنش روی ثابت شبکه بهینه‌شده نیز مطالعه شده است.

جزئیات محاسبات

محاسبات ساختار الکترونیکی ترکیب NaTiAs با استفاده از روش موج‌های تقویت‌شده خطی با پتانسیل کامل^۱ (FP-LAPW) صورت گرفته که با بسته شبیه‌سازی WIEN2k [۳۵] انجام شده است. در اینجا از توابع همبستگی LDA، PBE، PBEsol و WC استفاده شده است. همچنین یک مطالعه مقایسه‌ای بین رویکردهای GGA، GGA+U و TB-mBJ با پارامترسازی PBE انجام شده است. برای محاسبات پتانسیل خودسازگار در ناحیه بریلیون، مجموعه‌ای متراکم از k_{2000} -نقطه استفاده شده است. پارامتر قطع موج‌سطح برابر با $R_{kmax} = 7$ تنظیم شده که در آن R حداقل شعاع کره‌های مافین-تین و k_{max} بزرگ‌ترین مقدار بردار شبکه معکوس از مجموعه پایه است. در این روش در واقع فضای بلور شامل دو ناحیه است، یکی ناحیه درون کره‌های مافین-تین که شامل یون‌ها و الکترون‌های مقید (ظرفیت) است و ناحیه دوم که فضای بین جایگاهی (بین کره‌های مافین-تین) و شامل الکترون‌های رسانش است. نواحی درون کره‌های مافین-تین پتانسیل تقارن کروی دارد. جواب‌های معادله شرودینگر به صورت حاصلضرب هماهنگ‌های کروی در یک تابع وابسته به شعاع است. در فضای بین جایگاهی پتانسیل ثابت و جواب‌های معادله شرودینگر به صورت توابع موج تخت هستند. از شرط پایستگی توابع موج هماهنگ کروی و توابع موج تخت روی مرز کره‌های مافین-تین به مقدار لازم برای R_{kmax} می‌رسیم که مقدار مناسب توصیه‌شده برای ترکیب بررسی‌شده ما توسط خود نرم‌افزار WIEN2k مقدار ۷ است.

برای گسترش تابع موج و همچنین چگالی الکترون‌ها و پتانسیل‌های داخل کره‌های مافین-تین، بزرگ‌ترین مقدار عدد کوانتومی زاویه‌ای l_{max} برابر با ۱۰ تنظیم شده است. در مورد محاسبات فرومغناطیسی (FM) و آنتی‌فرومغناطیسی (AFM)، شبکه FCC با ۳ اتم برای FM و شبکه مکعب ساده با ۱۲ اتم برای AFM بررسی شده است. همه حلقه‌های خودسازگار تا زمانی که اختلاف انرژی کل بین مراحل تکرار متوالی کمتر از 10^{-4} eV باشد، تکرار شده‌اند.

2 Ferromagnetic (FM)

3 Antiferromagnetic (AFM)

4 Non-Magnetic (NM)

1 Full Potential-Linearized Augmented Plane-Wave (FP-LAPW)

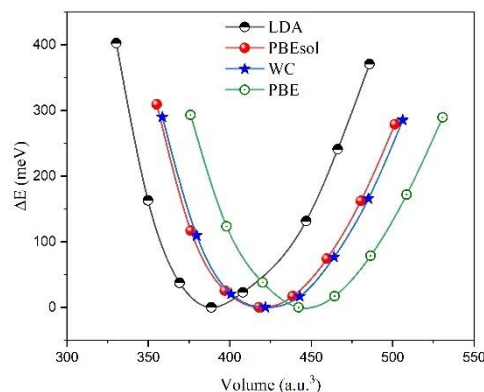
عنوان حالت مغناطیسی پایدار در شکل ۴ و ۵ به ترتیب برای حالت‌های متفاوت تبادلی-همبستگی و تصحیح پتانسیل هابارد برای هر دو کانال اسپینی اکثریت و اقلیت ترسیم شده است.

مشاهده می‌شود که برای تمامی توابع همبستگی، سطح فرمی از نوارهای جزئی اشغال شده در هر دو کانال اسپینی عبور می‌کند و بنابراین خاصیت نیمه‌فلزی بودن دیده نمی‌شود. با این حال، اگر به دقت به کانال اسپین اقلیت نگاه کنیم، قابل توجه است که در حالت PBE، نوار هدایت کمی پایین‌تر از سطح فرمی قرار دارد و بنابراین ممکن است با افزودن برخی تصحیح‌هایی مانند پتانسیل هابارد (GGA+U)، پتانسیل اصلاح شده (TB-mBJ) یا اعمال کرنش به ثابت شبکه بهینه به سطح فرمی منتقل شود و به حالت نیمه‌فلزی گذار داشته باشیم.

پتانسیل هابارد در روش‌های محاسباتی، دافعه کولنی بین الکترون‌های یک ترکیب را بهتر به تصویر می‌کشد. پتانسیل هابارد یک انرژی برهمکنشی است که در مدل هابارد برای الکترون‌هایی که در یک سایت از شبکه قرار دارند و با هم برهمکنش می‌کنند، تعریف می‌شود. به عبارت دیگر، وقتی دو الکترون (با اسپین مخالف) در یک سایت قرار می‌گیرند، انرژی به میزان U افزایش می‌یابد. این انرژی معمولاً ناشی از دفع الکترون‌ها به دلیل بار منفی آنها است. این پتانسیل به‌طور معمول برای فلزات واسطه که اربیتال d و f فعال دارند در نظر گرفته می‌شود.

اغلب U به عنوان یک پارامتر قابل تنظیم در نظر گرفته می‌شود. معمولاً مقدار U را با مقایسه نتایج به دست آمده با مشاهدات تجربی مانند فاصله نواری، اندازه‌های مغناطیسی یا داده‌های طیف‌سنجی تنظیم می‌کنند. ما در این مقاله چون در ترکیب بررسی شده فلز واسطه Ti را داریم که دارای اربیتال فعال d است از مقدار $U=4/9$ eV استفاده کرده‌ایم که از مرجع شماره [۳۶] استخراج شده است. TB-mBJ یک مدل اصلاح‌شده از پتانسیل‌های تبادلی-همبستگی در نظریه تابعی چگالی است که برای محاسبه دقیق‌تر خواص الکترونی مواد، به ویژه در محاسبه گاف انرژی، طراحی شده است. این پتانسیل در سال‌های اخیر به دلیل دقت بالای آن در شبیه‌سازی خواص نیمه‌هادی‌ها و مواد دیگر، مورد توجه قرار گرفته است. نوارهای انرژی بر اساس این سه دیدگاه هابارد، TB-mBJ و اعمال کرنش به ثابت شبکه بهینه در شکل‌های ۵، ۶ و ۷ آورده شده‌اند.

شکل ۳ ترسیم شده است. واضح است که هر منحنی برای هر تابع تبادل همبستگی دارای رفتار پارابولیک است. همچنین از شکل مشخص است که حجم بهینه به سمت مقادیر بالاتر منتقل می‌شود، در حالی که تابع همبستگی از LDA به WC، PBEsol و PBE تغییر می‌کند.



شکل ۳. اختلاف انرژی کل بین انرژی‌ها (به عنوان تابعی از حجم) و انرژی مربوط به حجم بهینه $(\Delta E = E(V) - E(V_{op}))$ بر اساس تقریب تابع‌های تبادلی همبستگی مختلف.

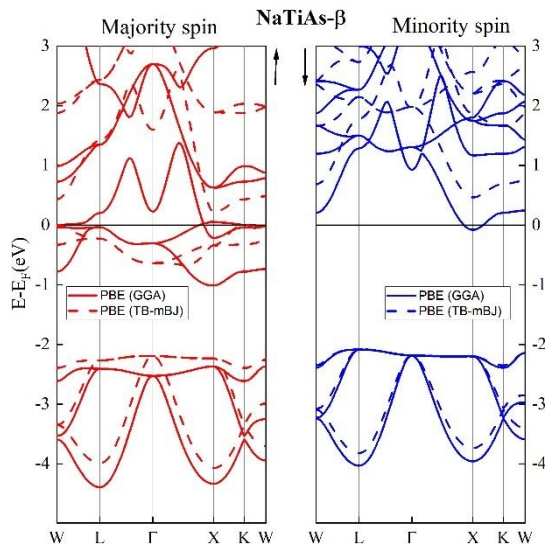
مقدار حجم بهینه در نقطه حداقل انرژی برای توابع همبستگی LDA، PBEsol، WC و PBE به ترتیب تقریباً معادل $388/6$ ، $417/8$ ، $421/8$ و $442/2$ (a.u.³) است. ثابت شبکه بهینه برای توابع همبستگی ذکرشده از حجم بهینه مربوط به هر تابع همبستگی استخراج شده است. مقادیر محاسبه‌شده ثابت شبکه بهینه NaTiAs برای توابع همبستگی LDA، PBEsol، WC و PBE در جدول شماره ۱ گزارش شده است. واضح است که ثابت شبکه بهینه از LDA به WC، PBEsol و PBE رفتار افزایشی را نشان می‌دهند.

جدول ۱. ثابت شبکه بهینه برای توابع تبادل همبستگی مختلف

توابع تبادل همبستگی	ثابت شبکه بهینه (آنگستروم)
LDA	۶/۱۵۸
PBEsol	۶/۲۸۵
WC	۶/۲۹۹
PBE	۶/۴۱۲

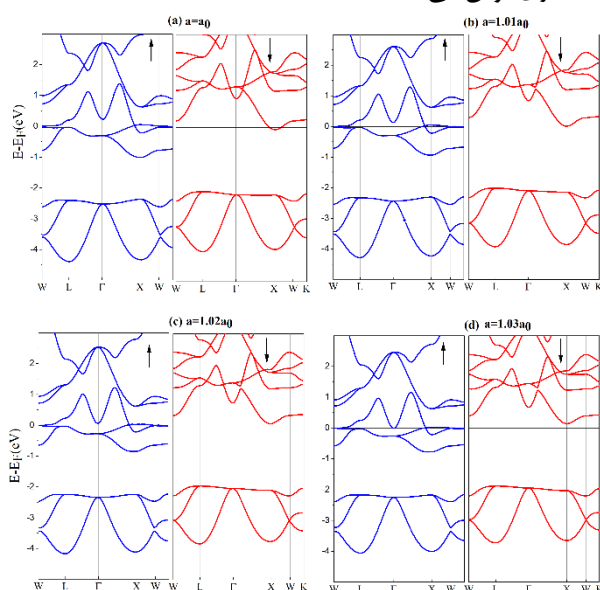
خواص الکترونیکی

به طور کلی، رفتار ساختار نوارهای الکترونیکی و چگالی حالت نزدیک به سطح فرمی نقش مهمی در مشخصه خواص الکترونیکی مواد مانند نیمه‌فلزی بودن ایفا می‌کند. ساختار نوارهای ترکیب NaTiAs در حالت فرومغناطیسی (FM) به

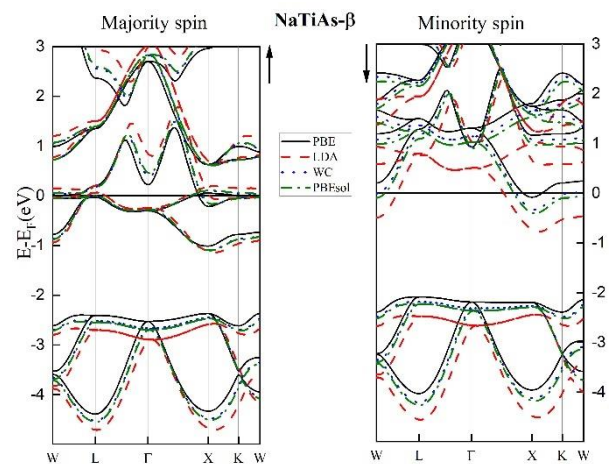


شکل ۶. ساختار نواری برای ترکیب NaTiAs-β در حالت اسپین اقلیت بر اساس توابع مختلف تبادل همبستگی. انرژی صفر همان سطح فرمی است.

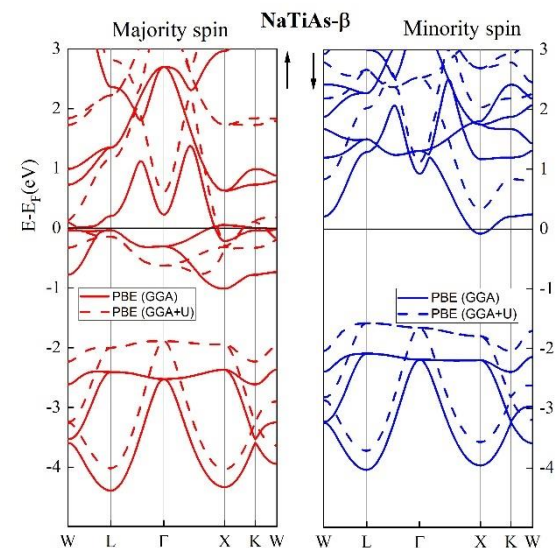
در رویکرد کرنش ثابت شبکه (شکل ۷)، برای کرنش هیدرواستاتیک برابر با ۲ درصد و مقادیر بالاتر، NaTiAs به یک نیمه فلز تبدیل می شود. از شکل ۷، نوارهای ظرفیت و رسانش عمدتاً به اوربیتال های p (کاملاً پر شده) و d (نیمه پر شده) نسبت داده می شوند. زیرا در ساختار NaTiAs-β، Ti و As در موقعیت های همسایه نزدیک قرار دارند، با افزایش ثابت شبکه بهینه، هم پوشانی بین اوربیتال های As-p و Ti-d کاهش می یابد (شکاف نوار افزایش می یابد)؛ بنابراین نوار رسانش به سمت مقدار بالای سطح فرمی تمایل پیدا کرده و در نتیجه به خاصیت نیمه فلزی بودن می انجامد.



شکل ۷. نوارهای انرژی برای ساختار وقتی تحت تاثیر کشش ثابت شبکه بهینه قرار می گیرد. برای کشش هیدرواستاتیک برابر با ۲ درصد و مقادیر بالاتر ترکیب به حالت نیمه فلز گذار می کند. نماد معرف (↑) معرف اسپین بالا و نماد (↓) بیانگر اسپین رو پایین است.



شکل ۸. ساختار نواری برای ترکیب NaTiAs در حالت اسپین اکثریت و اقلیت بر اساس توابع مختلف تبادل همبستگی. انرژی صفر همان سطح فرمی است.



شکل ۹. نوارهای انرژی برای ساختار مورد نظر با بدون پتانسیل هابارد (خطوط ممتد) با پتانسیل هابارد (خطوط چین)

واضح است که در اشکال ۵ و ۶ در کانال اسپینی اقلیت، ساختار نواری به سمت بالا منتقل شده و اکنون سطح فرمی در یک شکاف بین نوارهای ظرفیت و هدایت قرار دارد که منجر به خاصیت نیمه فلزی می شود. مقدار گشتاور مغناطیسی کل برابر با $M_{Tot} = 1.0 \mu_B$ به دست می آید. برای جزئیات بیشتر در مورد گشتاور مغناطیسی کل به مرجع [۱۸] مراجعه کنید.

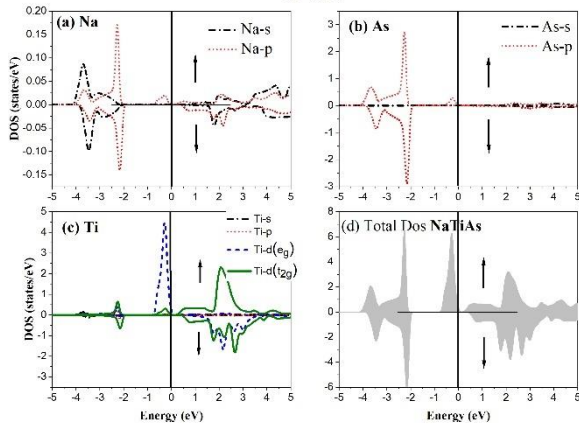
از شکل ۵ و ۶ مشخص است که رفتار نوارهای انرژی ظرفیت و رسانش برای تصحیح های پتانسیل هابارد GGA+U و TB-mBJ تقریباً مشابه است. تفاوت بین دو روش مربوط به مقدار شکاف نوار (اختلاف انرژی بین حداکثر مقدار نوار ظرفیت و حداقل مقدار نوار رسانش) است. از شکل های ۵ و ۶ مشخص است که شکاف نواری برای GGA+U کوچک تر از شکاف نواری TB-mBJ است.

چگالی حالت‌ها

در ادامه، ما روی چگالی حالت جزئی (PDOS) از اتم‌های Na، Ti و As و چگالی حالت کل (TDOS) ترکیب NaTiAs با توجه به دو رویکردهای اخیر GGA+U و TB-mBJ می‌کنیم که به خاصیت نیمه‌فلزی این ترکیب منجر می‌شود. نتایج PDOS و TDOS در شکل‌های ۸ و ۹ ترسیم شده است. از این شکل‌ها مشخص است که GGA+U و TB-mBJ در سطح فرمی به قطبش ۱۰۰ درصدی اسپین‌ها در کانال اسپین اقلیت ($\downarrow$) منجر می‌شوند، که این امر نیز نشان‌دهنده نیمه‌فلزی بودن آن‌هاست.

این ساختار با توجه به اینکه در یک کانال قطبش اسپینی ۱۰۰ درصدی دارد، می‌تواند جهت ساخت وسایل اسپینترونیک استفاده شود. اسپینترونیک^۱ اصولاً علمی متفاوت با الکترونیک معمولی است که در آن، به جای بار الکترن، اسپین به عنوان یک درجه آزادی حامل اطلاعات است. به دلیل اینکه تغییر حالت اسپین الکترون انرژی کمتری در مقایسه با جریان بارهای الکتریکی نیاز دارد، می‌تواند باعث سرعت بیشتر در انتقال داده‌ها، مصرف کمتر انرژی گردد و همچنین از مزایای وسایل اسپینترونیک امکان ذخیره یا انتقال حجم داده‌های بیشتری نسبت به وسایل سنتی الکترونیکی است. ترکیبات اسپینترونیک اغلب در نیم‌رساناهای فرومغناطیسی دیده می‌شوند.

TB-mBJ



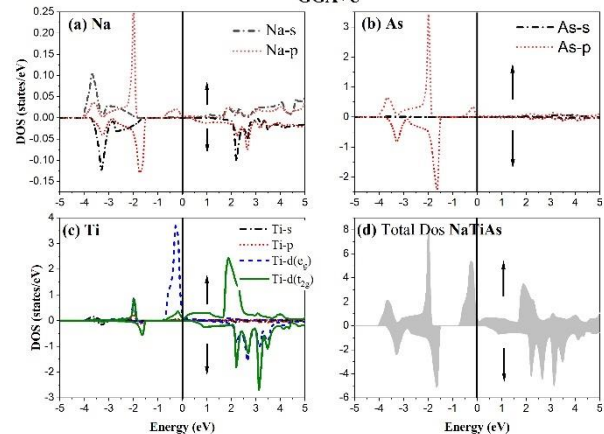
شکل ۹. چگالی حالت‌ها بر اساس دیدگاه TB-mBJ برای ترکیب NaTiAs-β.

از شکل‌های ۸(d) و ۹(d) مشاهده می‌شود که اگر به کانال اسپین پایین ($\downarrow$) توجه کنیم، شکاف نواری قابل مشاهده است. از فایل‌های محاسبات عددی بسته WIEN2k، مشخص شده است که GGA+U دارای شکاف نواری معادل ۱/۷۱۴ الکترون ولت (از ۱/۴۷۵- الکترون ولت تا ۰/۲۳۹ الکترون ولت) و TB-mBJ دارای شکاف نواری معادل ۲/۴۸۵ الکترون ولت (از ۲/۰۲۵- الکترون ولت تا ۰/۴۶ الکترون ولت) است که با نتایج مقایسه ساختارهای نواری مطابقت دارد.

پایداری مکانیکی و ضرایب الاستیک

برای توصیف خواص مکانیکی ترکیب NaTiAs-β، ثابت‌های الاستیک C_{ij} اساسی و ضروری هستند که می‌توان آنها را از محاسبات انرژی کل حالت پایه به دست آورد. این ثابت‌ها را می‌توان برای بررسی پایداری فازی و خواص مکانیکی ترکیب مطالعه‌شده به کار برد. کرنش ϵ_j ، پاسخ یک سیستم به تنش اعمالی σ_i است. ثابت‌های الاستیک C_{ij} ضرایب تناسبی هستند که کرنش و تنش را به صورت $\sigma_i = C_{ij}\epsilon_j$ به هم مرتبط می‌کنند. برای کریستال با سلول واحد مکعبی، به دلیل تقارن قوی، فقط سه ثابت الاستیک مستقل وجود دارد، $C_{11} = C_{22} = C_{33}$ ، $C_{12} = C_{13} = C_{23}$ و $C_{44} = C_{55} = C_{66}$. از این ثابت‌های الاستیک مستقل، مدول بالک B و مدول برشی G مجموعه‌های پلی‌کریستالی را می‌توان بر اساس تقریب وویگت - رویس - هیل به دست آورد. در میانگین وویگت، مدول بالک B و مدول برشی G شبکه مکعبی به صورت زیر داده می‌شود [۳۷].

GGA+U



شکل ۸. چگالی حالت‌ها بر اساس دیدگاه GGA+U برای ترکیب NaTiAs-β.

NaTiAs- β یک ساختار شکل پذیر است. دمای دمای^۳ بالای این ترکیب گواهی است بر ظرفیت گرمایی بالای این ساختار و می تواند انرژی گرمایی بالایی را در خود ذخیره کند.

نتیجه گیری

در این مطالعه، ما اثرات تابع های مختلف تبادل- همبستگی، پتانسیل هابارد U، تصحیح TB-mBJ و تغییرات کششی ثابت شبکه بهینه را بر خواص ساختاری و الکترونیکی ترکیب NaTiAs بررسی کردیم. با استفاده از بسته نرم افزاری WIEN2k مبتنی بر DFT و روش پتانسیل کامل، ثابت کردیم که ترکیب NaTiAs- β در حالت فرومغناطیسی پایدارتر است. هنگامی که تابع های مختلف تبادل همبستگی مانند LDA، PBEsol، PBE و WC را برای به دست آوردن خواص ساختاری و الکترونیکی ترکیب اعمال کردیم، به این نتیجه رسیدیم که این تابع ها به تنهایی نمی توانند منجر به حالت نیمه فلزی شوند. با این حال، هنگامی که از روش های GGA+U و TB-mBJ با پارامتریزاسیون PBE استفاده کردیم، ترکیب خاصیت نیمه فلزی با گشتاور مغناطیسی کل برابر با $1.0 \mu_B$ را نشان داد. تفاوت بین این دو روش در مورد مقدار شکاف انرژی است. شکاف انرژی برای TB-mBJ بزرگ تر از شکاف انرژی GGA+U است. همچنین، در مورد روش تغییرات کرنشی ثابت شبکه، نتایج ما نشان داد که برای ۲ درصد و مقدار بالاتر از تنش هیدرواستاتیک ثابت شبکه، NaTiAs نیمه فلز می شود. ضرایب الاستیک به دست آمده در جدول ۲ نشان می دهند که این ترکیب پایدار و شکل پذیر است.

$$B = \frac{C_{11} + 2C_{22}}{3} \quad (1)$$

$$G = \frac{3C_{44} - C_{11} - C_{12}}{5} \quad (2)$$

با استفاده از روابط استاندارد زیر، سایر مدول های الاستیک مهم مانند مدول یانگ E و نسبت پواسون ν را می توان به صورت زیر به دست آورد [۳۸]

$$E = \frac{9BG}{3B + G} \quad (3)$$

$$\nu = \frac{3B - 2G}{2(3B + G)} \quad (4)$$

مقادیر به دست آمده برای ضرایب بالا در جدول ۲ آورده شده است.

جدول ۲. ضرایب الاستیک و مدول ها

C_{11}	Gpa ۳۹۶/۶۷
C_{12}	Gpa ۱۶۴/۶۰
C_{44}	Gpa ۳۰/۷۷
B	Gpa ۲۴۱/۹۶
G	Gpa ۶۴/۸۷
ν	۰/۳۸
B/G	۳/۷۲
Θ_D	K ۴۴۲/۳۷

با توجه به مقادیر موجود در جدول ۲ شرایط پایداری زیر معروف به شرایط بورن-هوانگ [۳۹] برقرار است و ترکیب شرایط پایداری خوبی دارد.

$$\begin{aligned} C_{11} &> 0, \\ C_{44} &> 0, \\ C_{11} &> C_{12}, \\ C_{11} + 2C_{12} &> 0 \end{aligned} \quad (5)$$

نسبت B/G ، شکل پذیر^۱ یا شکننده^۲ بودن ساختار را نشان می دهد به طوری که برای مقادیر بیشتر از ۱/۷۵ شکل پذیر و کمتر از آن شکننده است؛ بنابراین ساختار بالکی

References

منابع

- [1] Heusler F, Starck W, Haupt E. Magnetisch-chemische studien. Deutsche Physikalische Gesellschaft, 219-223 (1903).
- [2] Geiersbach U, Bergmann A, Westerholt K. Structural, magnetic and magnetotransport properties of thin films of the Heusler alloys Co_2MnAl , Co_2MnSi , Co_2MnGe and Co_2MnSn . Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 240, 546-549 (2002).
- [3] Rai DP, et al. Electronic and Piezoelectric properties of half-Heusler compounds: A first principles study. J. Phys.: Conf. Ser. 765, 012005 (2016).
- [4] Shutoh N, Sakurada S. Thermoelectric properties of the $\text{Ti}_x(\text{Zr}_{0.5}\text{Hf}_{0.5})_{1-x}\text{NiSn}$ half-Heusler compounds. J. Alloys Compd. 389(1-2), 204-208 (2005).
- [5] Lue CS, Kuo YK. Thermoelectric properties of the semimetallic Heusler compounds $\text{Fe}_{2-x}\text{V}_{1+x}\text{M}$ ($\text{M} = \text{Al}, \text{Ga}$). Phys. Rev. B 66, 085121 (2002).
- [6] Javed M, Sattar M, Benkraouda M, Amrane N. First-principles investigations on the structural stability, thermophysical and half-metallic properties of the half-Heusler CrMnS alloy. Optical and Quantum Electronics 54(1) (2022).
- [7] Djelti R, Besbes A, Bestani B. TB-mBJ calculations of optical and thermoelectric properties of half-Heusler FeCrAs alloy. Optical and Quantum Electronics 52, 414 (2020).
- [8] Anissa B, Radouan D, Kars Durukan I. Study of structural, electronic, elastic, optical and thermoelectric properties of half-Heusler compound RbScSn : A TB-mBJ DFT study. Optical and Quantum Electronics 54, 372 (2022).
- [9] Asefirad S, et al. Electronic and thermoelectric properties of the 2D $\text{Cu}_2\text{FeSnS}_4$: DFT study. Modern Physics Letters B. 37(34), 2350186 (2023).
- [10] Fazeli Kisomi A, et al. Investigation on Structural, Electronic, and Thermoelectric Properties of Half-Heusler Compounds TiXSb ($\text{X} = \text{Si}, \text{Ge}$) under Pressure Based on Density Functional Theory (DFT), Physics of the Solid State. 61 1969 (2019).
- [11] Winterlik J, Felser GH, Fesler C. Superconductivity in palladium-based Heusler compounds. Solid State Commun. 145, 475 (2008).
- [12] hillebrand B, Felser C. High-spin polarization of Heusler alloys. Journal of Physics D: Applied Physics 39 (5), E01 (2006).
- [13] Gupta DC, Bhat I.H. A first-principles study of RuMn_2Si : Magnetic, electronic and mechanical properties. J. Alloys Compd. 575, 292 (2013).
- [14] Gupta DC, Bhat IH. Full-potential study of Fe_2NiZ ($\text{Z} = \text{Al}, \text{Si}, \text{Ga}, \text{Ge}$). Materials Chemistry and Physics 146(3), 303-312 (2014).
- [15] Dehghan A, Davatolhagh S. d^0 - d half-Heusler alloys: A potential class of advanced spintronic materials. J. Alloys Compd. 772, 132-139 (2019).
- [16] Dehghan A, Davatolhagh S. First principles study of d^0 - d half-Heusler alloys containing group-IV, -V, and -VI sp atoms as prospective half-metals for real spintronic applications, Mater. Chem. Phys. 273, 125064 (2021).
- [17] Jafari AR, Davatolhagh S, Dehghan A. Half-metallic p^0 - d half-Heusler alloys with stable structure in Ferromagnetic state. Journal of Physics and Chemistry of Solids 166, 110702 (2022).
- [18] Naimi Y, Jafari AR, Rashid MA. Half-metallic Na-based half-Heusler alloys as potential spintronic materials. Opt. Quant. Electron 56, 691 (2024).
- [19] Manoj KY, Biplab S. First principles study of thermoelectric properties of Li-based half-Heusler alloys, J. Alloys Compd. 622, 388-393 (2015).
- [20] Moradi M, Taheri N, Rostami M. Structural, electronic, magnetic and vibrational properties of half-Heusler NaZrZ ($\text{Z} = \text{P}, \text{As}, \text{Sb}$) compounds. Phys. Lett. A 382, 3004-3011 (2018).
- [21] Shakil M, et al. Determination of structural stability, elastic, thermal and half metallic behavior of CoZrVZ ($\text{Z} = \text{Al}, \text{Ga}, \text{In}, \text{Sn}$) quaternary Heusler alloys: A DFT study. Physica B Condens. Matter 625, 413524 (2022).
- [22] Rached Y, et al. A comprehensive computational investigation on the physical properties of TiXSb ($\text{X} = \text{Ru}, \text{Pt}$) half-Heusler alloys and $\text{Ti}_2\text{RuPtSb}_2$ double half-Heusler. Quantum Chemistry. 122 (9), e26875 (2022).
- [23] Rached Y, et al. Theoretical Insight into the Stability, Magneto-electronic and Thermoelectric Properties of XCrSb ($\text{X} = \text{Fe}, \text{Ni}$) Half-Heusler Alloys and Their Superlattices. Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. 35, 875-887 (2022).
- [24] Zerrouki T, et al. Firstprinciples calculations to investigate structural stabilities, mechanical and optoelectronic properties of NbCoSn and NbFeSb half-Heusler compounds. Quantum Chemistry. 121(8), e26582 (2021).
- [25] Rached Y, et al. DFT assessment on stabilities, electronic and thermal transport properties of $\text{CoZrSb}_{1-x}\text{Bi}_x$ half-Heusler alloys and their superlattices. The European Physical Journal Plus. 138(4), 307 (2023).
- [26] Mehtougui N, et al. Novel semiconductor compounds XZrZ ($\text{X} = \text{Ni}, \text{Cu}$ and $\text{Z} = \text{C}, \text{B}$) suitable for clean energy in optoelectronic and thermoelectric devices. Computational Condensed Matter. 32, e00730 (2022).
- [27] Vahabzadeh NA, et al. Structural, Half-Metallic, Optical, and Thermoelectric Study on the Zr_2TiX ($\text{X} = \text{Al}, \text{Ga}, \text{Ge}, \text{Si}$) Heuslers: by DFT. Silicon. 11, 501 (2019).
- [28] Karami F, Asadi Mohammad Abadi A, Study of Electronic, Magnetic and Optical Properties of Inverse Heusler Alloys Ti_2ScX ($\text{X} = \text{Si}, \text{Sn}$): Density Functional Theory Method. BiQuarterly Journal of Optoelectronic 1(12), 109-118 (2023).
- [29] Asadi Mohammad Abadi A, Baizae SM, Investigation of Structural, Electronic and Magnetic Properties of Heusler Alloys Ir_2VZ ($\text{Z} = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}$) for Two Hypothetical L21 and XA Structures: First- Principles Calculations. BiQuarterly Journal of Optoelectronic 2(11), 9-16 (2022).
- [30] Mohammadi Bilankohi S, Ghaforyan H, Karami F. Electronic, Magnetic and Optical Properties of

- Ti₂ScGe Full-Heusler Compound Using the Density Functional Theory. BiQuarterly Journal of Optoelectronic 2(11), 49-56 (2022).
- [31] Perdew JP, Burke K, Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. Phys. Rev. Lett. 77, 3865-3868 (1996).
- [32] Chibueze TC, et al. Tetragonal and uniaxial strains in pristine and doped halfHeusler AuMnSn alloy. Journal of Alloys and Compounds. 848, 156186 (2020).
- [33] Shakil M, et al. Theoretical investigation of structural, magnetic and elastic properties of half Heusler LiCrZ (Z = P, As, Bi, Sb) alloys, Physica B Condens. Matter, 575, 411677-9 (2019).
- [34] Wu Z, Cohen RE. More accurate generalized gradient approximation for solids. Phys. Rev. B. 73, 235116 (2006).
- [35] Blaha P, et al. WIEN2K, an Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, Techn. Universit"at Wien, Austria, 2001.
- [36] Lan G, Song J, Yanga Z, A linear response approach to determine Hubbard U and its application to evaluate properties of Y₂B₂O₇, B = transition metals 3d, 4d and 5d, J. Alloys Compd. 749, 909–925 (2018).
- [37] Voigt DW, Lehrbuch der Kristallphysik, (1928) (Leipzig: Taubner).
- [38] Rechard H, et al. Full-potential calculation of the structural, elastic, electronic and magnetic properties of XFeO₃ (X=Sr and Ba) perovskite. Physica B Condens. Matter. 405, 3515– 3519 (2010).
- [39] Born M, Huang K. Dynamical theory and experiment I. Springer, Berlin (1982).