

ORIGINAL ARTICLE

Structural, Electronic, Magnetic, Elastic and Optical Properties of Half-Heusler Alloys XAgMg (X = Ti, Sc) Based on First-Principles Calculations

Erfan Cholaki¹, Borhan Arghavani nia^{2*}, Yawar Mohammadi³

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

² Assistant Professor, Department of Physics, Ker.C., Islamic Azad University, Kermanshah, Iran.

³ Assistant Professor, Department of Physics Education, Farhangian University, P.O. Box 14665-889, Tehran, Iran.

Correspondence

Borhan Arghavani nia

Email: b.arghavani@iau.ac.ir

EXTENDED ABSTRACT

Introduction: Functional materials exhibiting distinct electrical, magnetic, optical, and thermal behaviors play a vital role in advancing cutting-edge optoelectronic and energy technologies [1]. Among these systems, half-Heusler alloys with the general formula XYZ and face-centered cubic C1_b crystalline symmetry have attracted considerable attention owing to their exceptional structural stability, favorable electrical transport, and chemical versatility [2,3]. Recently, incorporating Ag and Mg into Heusler matrices has shown promise in modulating band structures, enhancing electrical conductivity, and suppressing lattice thermal conductivity, thereby facilitating high thermoelectric and electronic performance [4,5]. Theoretical DFT investigations have indicated that hybridization between transition metal d-orbitals and main-group p-orbitals fundamentally dictates their physical behavior. Despite existing literature on Heusler compounds, a comparative and comprehensive evaluation of the structural, mechanical, magnetic, and anisotropic optical behaviors of TiAgMg and ScAgMg has remained largely unexplored. This work aims to fill this gap through high-precision first-principles computations to assess their feasibility for spintronic and optical shielding devices.

Methodology: The computational simulations were carried out within the framework of Density Functional Theory (DFT) utilizing the full-potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method as implemented in the WIEN2k code [6,7]. Exchange-correlation effects were treated using the Generalized Gradient Approximation parameterized by Perdew, Burke, and Ernzerhof (PBE-GGA). For structural optimization and electronic properties, a Monkhorst-Pack grid with 3000 total k-points (yielding 104 irreducible k-points) was deployed, while optical properties were computed using a refined mesh of 10000 k-points (286 irreducible points) to ensure precise spectral resolution. The core-valence energy separation threshold was set to 6.0Ry. Plane-wave cutoff parameters were chosen as $R_{MT} \times K_{max} = 7.0$ and $G_{max} = 12 \text{ a.u.}^{-1}$ for potential expansion. Self-consistent cycle convergence was strictly achieved when total energy variations remained below 10⁻³Ry. Mechanical constants were evaluated via stress-strain relations, and optical dielectric functions were obtained through momentum matrix element integration [8].

Results: Total energy calculations fitted to the Birch-Murnaghan equation of state established the equilibrium lattice constants at $a = 6.71 \text{ \AA}$ for TiAgMg and $a = 6.66 \text{ \AA}$ for ScAgMg. Thermodynamic stability is verified by negative cohesive energies ($E_c = -3.60 \text{ kJ/mol}$ for TiAgMg and -2.76 kJ/mol for ScAgMg), confirming the superior structural stability of

How to cite

Cholaki, E. Arghavani nia, B. Mohammadi, Y. (2026). Structural, Electronic, Magnetic, Elastic and Optical Properties of Half-Heusler Alloys XAgMg (X = Ti, Sc): A First - Principles Study, Optoelectronic, 8(4), 43-52.

the Ti-based compound.

The electronic structure indicates metallic behavior for both systems, as non-zero electronic states cross the Fermi level in both spin channels. The states near the Fermi energy are dominated by Ti-3d and Sc-3d states, with hybridization from Ag and Mg orbitals. Magnetic assessments reveal total magnetic moments of $2.0\mu_B/\text{f.u.}$ for TiAgMg and $0.5\mu_B/\text{f.u.}$ for ScAgMg. The integer moment of TiAgMg ($Z_{\text{tot}}=17$) perfectly satisfies the Slater-Pauling rule ($M_{\text{tot}}=Z_{\text{tot}}-15$), induced by substantial spin asymmetry in Ti-3d states.

Mechanical stability criteria for cubic crystals ($C_{11}>0$, $C_{44}>0$, $C_{11}-C_{12}>0$, and $C_{11}+2C_{12}>0$) are fully satisfied by both compounds. TiAgMg exhibits noticeably higher elastic parameters ($C_{11}=132\text{GPa}$, $B=81\text{GPa}$, $G=44\text{GPa}$, $E=112\text{GPa}$) than ScAgMg ($C_{11}=65\text{GPa}$, $B=51\text{GPa}$, $G=28\text{GPa}$, $E=71\text{GPa}$), alongside a higher Debye temperature ($\theta_D=321\text{K}$ vs. 301K).

Table 1. Calculated structural parameters, cohesive energies, magnetic moments, and elastic constants of XAgMg (X=Ti, Sc)

Alloy	a (Å)	V (Bohr ³)	B (GPa)	E_c (kJ mol ⁻¹)	M_{tot} (μ_B)	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)	E (GPa)	θ_D (K)
TiAgMg	6.71	427.86	55.66	-3.60	2.0	132	55	49	112	321
ScAgMg	6.66	480.72	42.75	-2.76	0.5	65	44	52	71	301

Discussion: The mechanical evaluations demonstrate that while both alloys share identical Poisson's ratios ($\nu=0.27$), reflecting similar atomic bonding chemistry, TiAgMg possesses significantly enhanced stiffness, structural rigidity, and resistance to shear and volume deformation. The elevated bulk modulus and cohesive energy in TiAgMg stem from stronger interatomic hybridization and localized d-d orbital bonding.

Optical analysis over the complex dielectric function $\epsilon(\omega)=\epsilon_1(\omega)+i\epsilon_2(\omega)$ confirms metallic optical character. In the low-energy regime, $\epsilon_1(\omega)$ drops to negative values accompanied by large $\epsilon_2(\omega)$ amplitudes, confirming free-carrier Drude-like intraband screening. Both materials display clear optical anisotropy between distinct crystallographic axes. Interband transitions emerge within the 3.0–5.0eV window, causing prominent absorption peaks in the visible and near-ultraviolet range (1.7–5.0eV). Electron energy-loss spectra (EELS) identify prominent volume plasmon peaks at 5.0eV for TiAgMg (along the x-axis) and 10.0eV for ScAgMg (along the z-axis), demonstrating their functionality in selective plasmonic and high-reflectivity environments.

Conclusions: First-principles FP-LAPW calculations demonstrate that TiAgMg and ScAgMg half-Heusler alloys are thermodynamically, chemically, and mechanically stable. Both materials exhibit metallic behavior in both spin polarizations. TiAgMg exhibits pronounced ferromagnetic ordering with an integer magnetic moment of $2.0\mu_B/\text{f.u.}$, strictly obeying the Slater-Pauling formalism across its equilibrium volume. Mechanical findings confirm that TiAgMg offers superior hardness, elastic stiffness, and thermal stability over ScAgMg. Furthermore, optical dielectric and EELS spectra underline high metallic absorption, optical anisotropy, and well-defined plasmon resonances, highlighting TiAgMg as a favorable candidate for spintronic components, plasmonic wave devices, and optical filter applications.

Conflict of Interest: The authors declare that there are no conflicts of interest regarding the publication of this manuscript.

References

- [1] Hussain, M. K. (2018). Investigations of the electronic and magnetic properties of newly (001) surface LiCrS and LiCrSe half-Heusler compounds. *Applied Physics A*, 124, 343.

- [2] Graf, T., Felser, C., & Parkin, S. S. P. (2011). Simple rules for the understanding of Heusler compounds. *Progress in Solid State Chemistry*, 39(1), 1–50.
- [3] Casper, F., Graf, T., Chadov, S., Balke, B., & Felser, C. (2012). Half-Heusler compounds: Novel materials for energy and spintronic applications. *Semiconductor Science and Technology*, 27(6), 063001.
- [4] Ma, J., & He, J. (2021). Enhanced thermoelectric performance in Ag–Mg substituted Heusler alloys. *Materials Today Physics*, 18, 100407.
- [5] Singh, D. J. (2022). Computational insights into electronic structures of Ti- and Sc-based half-Heuslers. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 34(34), 345502.
- [6] Blaha, P., Schwarz, K., Madsen, G. K. H., Kvasnicka, D., & Luitz, J. (2001). *WIEN2k: An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties*. Vienna University of Technology.
- [7] Cholaki, E., Arghavani Nia, B., Rezaee, S., & Parsamehr, S. (2024). Calculation of structural, electronic, magnetic and optical properties of C₃N monolayer substituted with magnesium. *European Physical Journal Applied Physics*, 99.
- [8] Arghavani nia, B., Shahrokhi, M., & Sedighi, M. (2018). Structural, electronic and optical properties of Ca₃Bi₂: First-principles investigation. *Chinese Journal of Physics*, 56(6), 2796–2804.

ABSTRACT

In this research, the structural, electronic, magnetic, and optical properties of ternary half-Heusler alloys are investigate based on density functional theory calculations. The electronic structure results showed that both TiAgMg and ScAgMg compounds exhibit metallic behavior in both spin orientations. Magnetic analysis demonstrates the magnetic property of TiAgMg is greater than that of ScAgMg, and due to its magnetic nature, this alloy has a total magnetic moment (2 μ_B /f.u.) that strictly follows the Slater–Pauling rule. Thermodynamic assessment confirms the chemical stability o the studied compounds showed that the TiAgMg compound has suitable stability. Mechanical and elastic evaluation prove that both alloys satisfy Born stability criteria. However, TiAgMg, due to its higher values of elastic constants, mechanical moduli, and Debye temperature, exhibits greater mechanical stability and hardness than ScAgMg. Investigation of the optical properties of optical anisotropy of these two compounds shows that the TiAgMg compound exhibits good performance in the calculation of optical properties, and this compound can be a suitable candidate for use as an absorber of waves.

KEYWORDS

Half-Heusler Alloys, DFT, Electronic Properties, Magnetic Behavior, Optical Anisotropy.

فصلنامه علمی

اپتوالکترونیک

«مقاله پژوهشی»

بررسی ویژگی‌های ساختاری، الکترونی، مغناطیسی، الاستیک و اپتیکی آلیاژهای نیمه هویسلر $XAgMg$ ($X=Ti, Sc$) بر اساس محاسبات اصول اولیه

عرفان چولکی^۱، برهان ارغوانی نیا^{۲*}، یاور محمدی^۳

چکیده

در این مقاله ویژگی‌های ساختاری، الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی ترکیب نیمه هویسلر بر مبنای محاسبات نظریه تابعی چگالی بررسی شده است. نتایج ساختار الکترونی نشان داد که ترکیبات $ScAgMg, TiAgMg$ در هر دو کانال اسپینی دارای ماهیت فلزی هستند. بررسی ساختار نواری نشان می‌دهد که خاصیت مغناطیسی $TiAgMg$ بیشتر از $ScAgMg$ است و این آلیاژ به دلیل ماهیت مغناطیسی دارای گشتاور مغناطیسی کل ($2\mu_B/f.u$) دقیقاً از قانون اسلاتر-پائولی تبعیت می‌کند. محاسبه پایداری شیمیایی ترکیبات بررسی شده نشان داد که ترکیب $TiAgMg$ از پایداری مناسبی برخوردار است. نتایج خواص مکانیکی و الاستیکی نشان داد که هر دو ساختار معیارهای پایداری مکانیکی بورن را دارند. با این حال، $TiAgMg$ به دلیل مقادیر بالاتر ثابت‌های الاستیک، مدول‌های مکانیکی و دمای دمای، پایداری و سختی مکانیکی بیشتری نسبت به $ScAgMg$ از خود نشان می‌دهد. بررسی ویژگی‌های اپتیکی ناهمسانگردی نوری برای این دو ترکیب نشان می‌دهد که ترکیب $TiAgMg$ عملکرد مناسبی در محاسبه خواص نوری از خود نشان می‌دهد که این ترکیب می‌تواند گزینه مناسبی برای استفاده به عنوان جاذب امواج باشد.

واژه‌های کلیدی

آلیاژهای نیم هویسلر، DFT، خواص الکترونیکی، رفتار مغناطیسی، ناهمسانگردی نوری.

۱ دانشجوی دکترا، گروه فیزیک، واحد کرمانشاه، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه، ایران.
۲ استادیار، گروه فیزیک، واحد کرمانشاه، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه، ایران.
۳ استادیار، گروه آموزش فیزیک، دانشگاه فرهنگیان، صندوق پستی ۸۸۹-۱۴۶۶۵ تهران، ایران.

نویسنده مسئول:

برهان ارغوانی نیا

رایانامه: b.arghavani@iau.ac.ir

استناد به این مقاله:

عرفان چولکی، برهان ارغوانی نیا، یاور محمدی (۱۴۰۵). بررسی ویژگی‌های ساختاری، الکترونی، مغناطیسی، الاستیک و اپتیکی آلیاژهای نیمه هویسلر $XAgMg$ ($X=Ti, Sc$) بر اساس محاسبات اصول اولیه. فصلنامه علمی اپتوالکترونیک، ۸(۴)، ۴۳-۵۲.

مقدمه

در قرن حاضر، فناوری با سرعت بالایی در حال پیشرفت است که این پیشرفت‌ها مبتنی بر توسعه و استفاده از مواد کاربردی جدید است. مواد کاربردی به دسته‌هایی از مواد با خواص الکتریکی، مغناطیسی، نوری، حرارتی، شیمیایی اشاره دارد. با توسعه انرژی خورشیدی، لیزر، ارتباطات و سایر فناوری‌ها، مواد کاربردی با خواص فوتوالکتریک توجه گسترده‌ای را به خود جلب کرده‌اند. آلیاژهای هویسler دسته‌ای از ترکیبات مغناطیسی هستند که با وجود گذشت بیش از یک قرن از کشف این ترکیبات، به دلیل این که ویژگی‌های متنوعی از خود نشان می‌دهند [۱] به عنوان یکی از مهم‌ترین خانواده‌های مواد ترموالکتریکی و الکترونیکی شناخته می‌شوند که ساختار کریستالی نوع C1b دارند و با فرمول کلی XYZ نمایش داده می‌شوند که در آن X و Y فلزات واسطه و Z معمولاً یک عنصر از گروه‌های اصلی است [۲،۳]. این ترکیبات به دلیل پایداری حرارتی بالا، رسانایی الکتریکی مناسب و انعطاف پذیری در ترکیب شیمیایی، از گزینه‌های برجسته برای استفاده در دستگاه‌های ترموالکتریک، اسپینترونیک و سلول‌های خورشیدی محسوب می‌شوند [۴-۶].

در سال‌های اخیر، ترکیباتی بر پایه Ag و Mg منجر به بهبود رسانایی الکتریکی و کاهش رسانایی گرمایی شبکه می‌شود و این امر موجب افزایش ضریب شایستگی ترموالکتریکی (ZT) در این سیستم‌ها می‌گردد [۷،۸]. آلیاژهای بر پایه Ag و Mg با داشتن ساختار پایدار نیمه‌هویسler، خواص الکترونی مطلوبی از خود نشان می‌دهند که می‌تواند برای کاربردهای انرژی و حسگری بسیار مفید باشد [۹].

بررسی‌های انجام‌شده با استفاده از محاسبات مبتنی بر نظریه تابعی چگالی (DFT^۱) نشان می‌دهد که در این ترکیبات بر پایه Ag و Mg، باند رسانش عمدتاً از اوربیتال‌های d عنصر X (مانند Ti یا Sc) و باند ظرفیت از اوربیتال‌های p عناصر Ag و Mg تشکیل شده است [۱۰]. علاوه بر این، مطالعه دینامیکی فونونی و انرژی تشکیل منفی، پایداری ترمودینامیکی بالای این آلیاژها را تأیید می‌کند [۱۱ و ۱۲].

بنابراین ترکیباتی از نوع XAgMg (X = Ti, Sc) به عنوان مواد نوظهور نیمه‌هویسler، چشم‌انداز روشنی برای

استفاده در فناوری‌های ترموالکتریکی و دستگاه‌های الکترونیکی نانومقیاس ارائه می‌دهند.

روش محاسبات

محاسبات این مقاله از روش امواج تخت بهبودیافته خطی با پتانسیل کامل FP-LAPW^۲ با استفاده از کد Wien2K بر پایه نظریه تابعی چگالی انجام شده است [۱۳-۱۴]. برای محاسبه ویژگی‌های ساختاری، انرژی تبادل همبستگی با استفاده از تقریب PBE-GGA^۳ در نظر گرفته شده است. در فضای وارون بهینه تعداد نقاط K را برای محاسبات الکترونی انبوه ۳۰۰۰ نقطه معادل ۱۰۴ نقطه کاهش‌پذیر انتخاب شده است. برای انجام محاسبات اپتیکی تعداد نقاط K، ۱۰۰۰۰ نقطه معادل ۲۸۶ نقطه کاهش‌پذیر انتخاب شده است، این پارامترها با استفاده از شرط همگرایی انرژی به‌دست آمده است. انرژی جداسازی حالت مغزه از ظرفیت برابر با ۶ Ry - انتخاب شده است. همچنین پارامترهای ورودی محاسباتی $R_{MT}K_{max}=7$ و برای بسط پتانسیل از پارامتر بهینه $G_{max}=12$ و برای انجام محاسبات خودسازگار با دقت همگرایی کمتر از $10^{-3}Ry$ در نظر گرفته شد.

نتایج

خواص ساختاری و پایداری

ساختار بلوری ترکیبات سه تایی نیمه هویسler کامل (گروه فضایی 216، Fm43) به عنوان نمونه، TiAgMg شامل یک شبکه براوه fcc با پایه سه اتمی است که اتم گروه اصلی جدول تناوبی، در اینجا Ti، در مختصات‌های (0,0,0) و اتم Ag با مختصات (1/2,1/2,1/2) و اتم Mg با مختصات (3/4,3/4,3/4) قرار می‌گیرند که در شکل (۱) نشان داده شده است.

2 Full-Potential Linearized Augmented Plane Wave

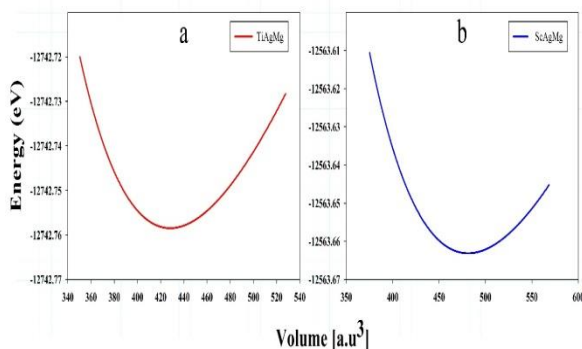
3 Perdew-Burke-Ernzerhof Generalized Gradient Approximation

1 Density Functional Theory

چولکی و همکاران: بررسی ویژگی‌های ساختاری، الکترونی، مغناطیسی، الاستیک و اپتیکی آلیاژهای نیمه هویسر XAgMg (X=Ti, Sc)
جدول ۱. ثابت‌های شبکه (a, b)، انرژی کل (E)، حجم تعادلی (V)، مدول حجمی (B)، مشتق مدول حجمی (B'), گشتاور مغناطیسی کل (M_{tot})، انرژی چسبندگی

Alloy	A (Å)	E (Ry)	V (Bohr ³)	B (Gpa)	B'	Ec (Kj/mol)
TiAgMg	a=b=6.71	-12742.74	427.86	55.66	4.58	-3.60
ScAgMg	a=b=6.66	-12563.66	480.72	42.75	4.35	-2.76

شده است. علت اهمیت محاسبه انرژی بلور این است که هر خاصیت بلور، به نوعی به انرژی یا مشتقات آن بستگی دارد. در نقطه کمینه منحنی انرژی-حجم شاهد پایدارترین حالت برای سلول اولیه هستیم. ترکیب TiAgMg سخت‌تر از ترکیب ScAgMg است؛ چون فشاری معادل 55(Gpa) دارد. مدول حجمی معیاری از سختی بلور است یا انرژی لازم برای ایجاد یک تغییر شکل معین در آن است؛ هرچه این کمیت بیشتر باشد بلور سخت‌تر و خاصیت تراکم‌پذیری آن کمتر است و انتظار می‌رود که اتم‌ها در فواصل دور از همدیگر قرار بگیرند. به منظور بررسی ویژگی‌های این ساختار، محاسبات ساختار الکترونی آن را بهینه کرده‌ایم.

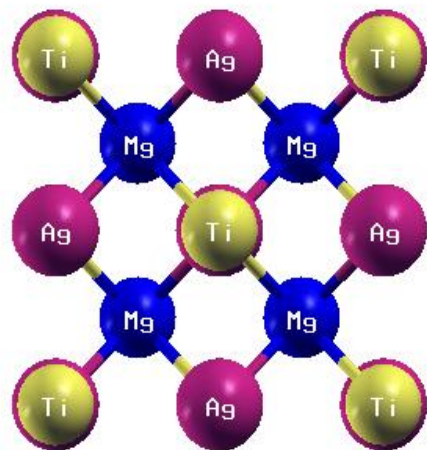
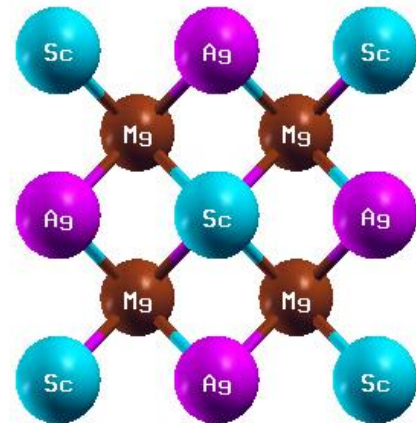


شکل ۲. نمودار (a) تغییرات انرژی بر حسب حجم ترکیب TiAgMg و نمودار (b) تغییرات انرژی بر حسب حجم ترکیب ScAgMg

انرژی چسبندگی مقدار انرژی مورد نیاز برای شکستن اتم‌های یک جامد به شکل اتمی منفرد آن است. که یکی از کمیت‌های فیزیکی مهم برای بیان پایداری گرمایی است، در مواردی مانند دمای ذوب، دمای جوش و غیره. برای بررسی پایداری شیمیایی این ساختار به محاسبه انرژی چسبندگی آن می‌پردازیم که از رابطه زیر به‌دست می‌آید.

$$E_{(c)} = \frac{E_{tot}^{TiAgMg} - [N_{Ti}E_{Ti}^{single} + N_{Ag}E_{Ag}^{single} + N_{Mg}E_{Mg}^{single}]}{N_{Ti} + N_{Ag} + N_{Mg}} \quad (3)$$

در آن E_{tot} انرژی کل محاسبه‌شده برای آلیاژ TiAgMg و E انرژی اتم‌های Ti-Ag-Mg است و N تعداد اتم‌های این ترکیب را نشان می‌دهد. نتایج این محاسبه در جدول (۱) لیست شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود مقدار به‌دست‌آمده منفی، دلیلی بر پایداری ترمودینامیکی این ترکیبات است؛ اما مقدار محاسبه‌شده نشان می‌دهد که ترکیب TiAgMg نسبت



شکل ۱. سلول واحد اولیه ترکیب ScAgMg, TiAgMg

از جمله ویژگی‌های ساختاری هر بلور پارامترهای شبکه در حالتی است که ساختار بررسی‌شده در کمینه انرژی خود باشد. برای دست یافتن به این مقدار کمینه انرژی، ابتدا انرژی کل برحسب حجم یاخته بسط بلور محاسبه و با استفاده از برازش منحنی توسط معادله حالت مورناگان، ترکیب حاصل گردید که به صورت زیر است. ثابت شبکه بهینه:

$$E(V) = E_0 + \left[B \times \frac{V}{B_0} \times \left(\frac{1}{(B'_0-1)} \times \left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'_0} + 1 \right) - B \times \frac{V_0}{(B'_0-1)} \right] \quad (1)$$

$$Pressure = \frac{B}{B'_0} \times \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'_0} - 1 \right] \quad (2)$$

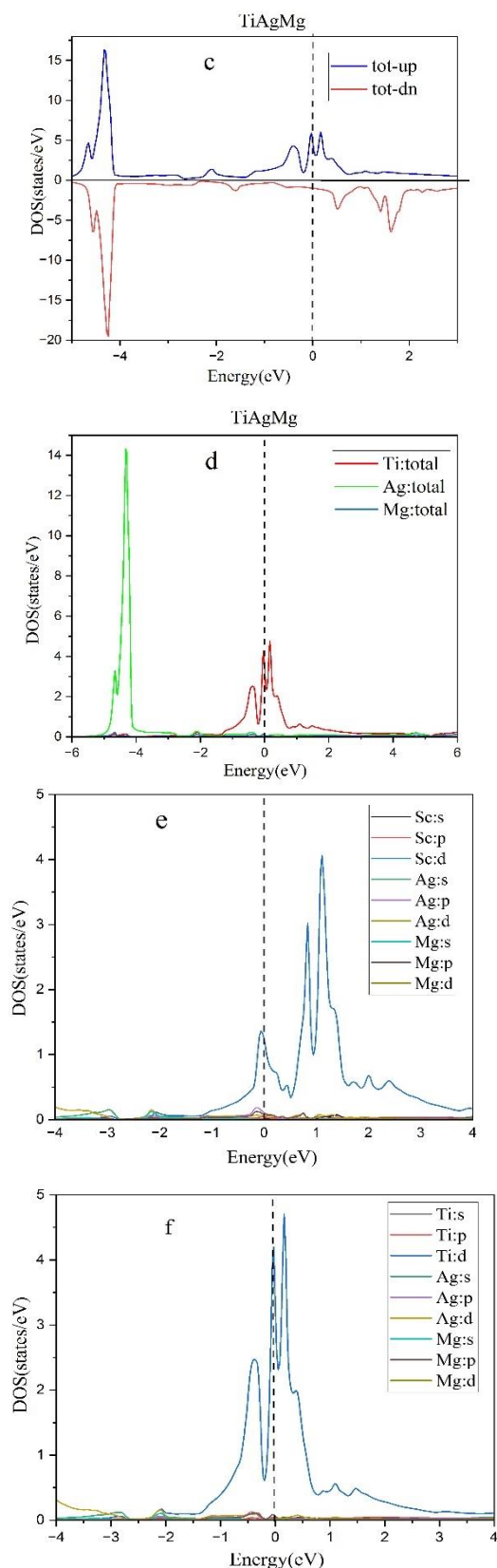
که در آن B مدول حجمی، B' مشتق مدول حجمی و V حجم یاخته است. این منحنی یک رفتار سهمی‌گون دارد که نقطه کمینه منحنی، سطح کمینه و در نتیجه پارامتر شبکه تعادلی را به ما می‌دهد. مقادیر این پارامترها در جدول (۱) آورده

به ترکیب ScAgMg پایدارتر است.

خواص الکترونی و مغناطیسی

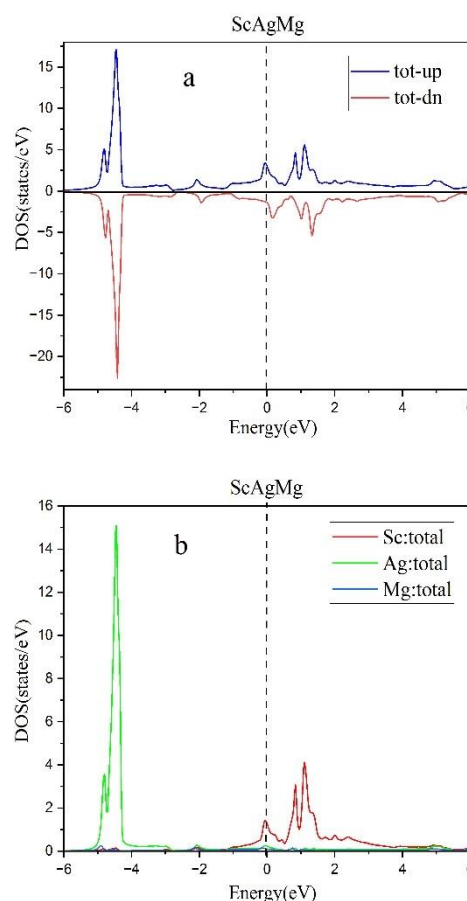
توزیع انرژی الکترون‌های نوار رسانش و ظرفیت از عوامل اساسی در تعیین خواص الکترونی جامدات است. از آنجا که تعداد حالت‌های الکترونی در یک نوار الکترونی (رسانش یا ظرفیت) بسیار زیاد است، برای بیان تعداد این حالت‌ها از مفهوم چگالی حالت‌ها استفاده می‌شود. همچنین ساختار نواری می‌تواند اطلاعاتی در مورد ماهیت بلور، فلز یا غیر فلز بودن، عدم یا وجود گاف انرژی، اندازه و نوع گاف انرژی ارائه دهد.

چگالی حالات TiAgMg و ScAgMg با در نظر گرفتن تقریب GGA-PBE در شکل (۳a و b) نشان داده شده است. نمودار چگالی حالات الکترونی برای هر دو کانال اسپینی سطح فرمی را قطع نموده که این باعث ایجاد رفتاری فلزی می‌شود. آلیاژهای مذکور به دلیل عدم تقارن نمودارهای ایجادشده برای اسپین بالا و پایین با هم برابر نیستند؛ بنابراین نمودار چگالی حالت‌ها، مغناطیسی بودن این ترکیبات را نشان می‌دهند. منحنی چگالی حالت‌های الکترونی جزیی نشان می‌دهد که در بیشترین سهم در نزدیکی سطح فرمی مربوط به اتم Ti در ترکیب TiAgMg و اتم Sc در ترکیب ScAgMg است (شکل ۳b و d).



شکل ۳. نمودار (a) چگالی حالات کل ترکیب ScAgMg برای اسپین بالا و پایین و (b) چگالی حالات جزیی، نمودار (c) چگالی حالات کل ترکیب TiAgMg برای اسپین بالا و پایین و (d) چگالی حالات جزیی

مهم‌ترین مشخصه در بررسی ساختار نواری، مقدار شکاف انرژی که از تفاوت محل قرارگیری لبه کمینه توار رسانش و لبه بیشینه نوار ظرفیت است، به‌دست می‌آید. باتوجه به اینکه در



گشتاور مغناطیسی کل از این رابطه $2 \mu_B/f.u$ به دست می‌آید که با نتایج حاصل از محاسبات همخوانی دارد. رابطه میان گشتاور مغناطیسی کل آلیاژ و تعداد الکترون‌های ظرفیت به صورت $\mu_t = Zt - 15$ است. مقدار نیمه - صحیح گشتاور در ScAgMg نشانگر این است که هیچ کدام از کانال‌های اسپین به طور کامل نیمه پر یا نیمه خالی نبوده و در نتیجه نیمه-فلزی کامل مشاهده نمی‌شود. تفاوت مقدار گشتاور محاسبه شده ناشی از تعداد بیشتر الکترون‌های d در Ti و عدم تقارن اسپینی شدیدتر در این ترکیب TiAgMg است.

خواص مکانیکی

ضرایب الاستیک و خواص مکانیکی آلیاژهای TiAgMg و ScAgMg در جدول (۳) نشان داده شده است. پایداری مکانیکی ساختارهای مکعبی TiAgMg و ScAgMg با استفاده از ثابت‌های الاستیک مستقل C_{11} ، C_{12} و C_{44} بررسی شد. نتایج نشان می‌دهد که در هر دو ترکیب، شرایط پایداری مکانیکی بورن برای ساختارهای مکعبی شامل $C_{11} > 0$ ، $C_{44} > 0$ ، $C_{11} - C_{12} > 0$ و $C_{11} + 2C_{12} > 0$ به طور کامل برقرار است؛ بنابراین هر دو ساختار از نظر مکانیکی پایدار هستند. مقایسه کمی مقادیر ثابت‌های الاستیک و مدول‌های مکانیکی نشان می‌دهد که ساختار TiAgMg دارای مقادیر بزرگتری از C_{11} ، مدول بالک، مدول برشی و مدول یانگ نسبت به ScAgMg است. این موضوع بیانگر مقاومت بیشتر TiAgMg در برابر تغییر شکل‌های فشاری و کشسانی و در نتیجه سختی مکانیکی بالاتر آن است. در مقابل، ساختار ScAgMg به دلیل حجم شبکه بزرگتر، رفتار مکانیکی نرم‌تری از خود نشان می‌دهد.

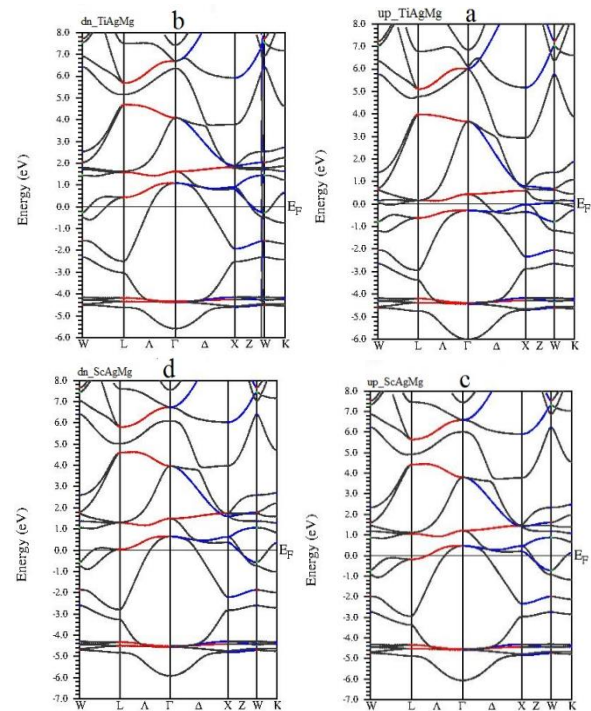
از سوی دیگر، ضریب پواسون در هر دو ساختار تقریباً مقدار ثابتی دارد که نشان می‌دهد ماهیت پیوندی در TiAgMg و ScAgMg مشابه بوده و تفاوت‌های مکانیکی مشاهده شده عمدتاً ناشی از تفاوت در حجم شبکه و استحکام پیوندهای بین‌اتمی است. همچنین دمای دمای دمای بالاتر در TiAgMg نشان‌دهنده سختی بیشتر شبکه و تقویت برهم‌کنش‌های فونونی در این ترکیب است.

جدول ۳. ثابت‌های الاستیک و خواص مکانیکی آلیاژهای TiAgMg و ScAgMg

پارامتر	ScAgMg	TiAgMg	واحد
C_{11}	65	132	GPa
C_{12}	44	55	GPa
C_{44}	52	49	GPa
(B)	51	81	GPa
(G)	28	44	GPa
(E)	71	112	GPa
(ν)	0.27	0.27	—
θ_D	301	321	K

انرژی‌های بالا تعداد حالات و احتمال حضور الکترون نسبت به ناحیه فرمی و والانس افزایش یافته و این ترکیبات خاصیت فلزی قوی پیدا می‌کند، مطابق نمودار چگالی حالت‌ها در شکل (f و e^3)، در نزدیکی سطح فرمی بیشترین سهم در TiAgMg مربوط به اوربیتال‌های d عنصر Ti و بیشترین سهم در ScAgMg مربوط به اوربیتال‌های d عنصر Sc است.

نمودار ساختار نواری در شکل (۴) نشان داده شده است. نوارهای انرژی برای اسپین بالا و پایین آلیاژ TiAgMg و ScAgMg با هم تفاوت دارند که نشان‌دهنده مغناطیسی بودن این ساختارها است. اما نمودار نواری TiAgMg به وضوح نشان می‌دهد که حالت مغناطیسی این ترکیب بیشتر از ترکیب ScAgMg است. نتایج به دست آمده از ساختار نواری با نتایج چگالی حالت‌ها کاملاً مطابقت دارد. نتایج محاسبات مغناطیسی در جدول (۲) نشان داده شده است.



شکل ۴. نمودار (a-b) ساختار نواری ترکیب TiAgMg برای اسپین بالا و پایین و نمودار (c-d) ساختار نواری ترکیب ScAgMg برای اسپین بالا و پایین

گشتاور مغناطیسی از اهمیت ویژه‌ای در علم اسپینترونیک برخوردار است. اسلیتر و پائولینگ رابطه‌ای بین گشتاور مغناطیسی کل و تعداد الکترون‌های ظرفیت ارائه کردند که به قاعده اسلیتر - پائولینگ معروف است. محاسبات اسپین‌پارالایز نشان می‌دهد که هر دو ترکیب TiAgMg و ScAgMg رفتار فلزی داشته و در هر دو کانال اسپینی چگالی حالت در سطح فرمی صفر نیست؛ لذا هیچ کدام نیمه-فلز نیستند. مقدار گشتاور مغناطیسی کل برای TiAgMg برابر $2 \mu_B/f.u$ و برای ScAgMg برابر $0.5 \mu_B/f.u$ گزارش می‌شود. از آنجا که تعداد الکترون‌های ظرفیت آلیاژ TiAgMg عدد ۱۷ است؛ بنابراین

خواص اپتیکی

تابع دی‌الکتریک مختلط مهم‌ترین پارامتر برای بیان ویژگی‌های اپتیکی یک ماده است که در واقع پاسخ بلور به میدان الکترومغناطیس با بسامد (ω) را نشان می‌دهد که با معادله $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ بیان می‌شود. که در آن $\epsilon_1(\omega)$ بخش حقیقی و $\epsilon_2(\omega)$ بخش موهومی تابع دی‌الکتریک است [۱۵ و ۱۶]. نتایج به‌دست‌آمده از محاسبات تابع دی‌الکتریک،

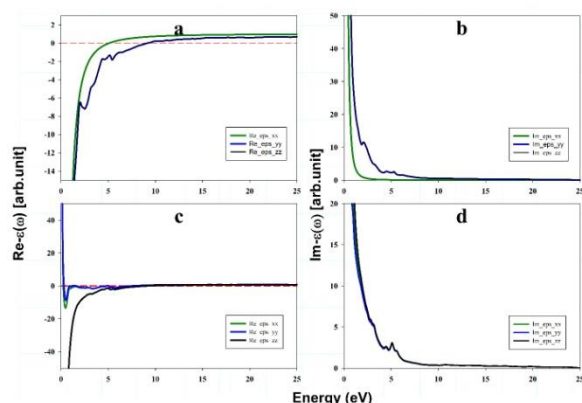
جدول ۲. گشتاورمغناطیسی کل و گشتاور مغناطیسی اتم‌های تشکیل‌دهنده

آلیاژهای ScAgMg و TiAgMg

Compounds	method	M_X	M_{Ag}	M_{Mg}	M_{Tot}
TiAgMg	GGA PBE-	1.5887	0.0296	0.0486	2.0
ScAgMg	GGA PBE-	0.2305	0.0195	0.0192	0.5

ضریب جذب و تابع اتلاف انرژی نشان می‌دهد که هر دو ترکیب ScAgMg و TiAgMg رفتار مشخصه فلزات را از خود بروز می‌دهند. در انرژی‌های پایین، بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک $\epsilon_1(\omega)$ به مقادیر منفی می‌رسد که نشان‌دهنده پاسخ پلاسمونی و وجود الکترون‌های آزاد است. همچنین مقادیر بالای $\epsilon_2(\omega)$ در نزدیکی انرژی صفر مؤید اتلاف نوری بزرگ در ناحیه کم‌انرژی است که ویژگی معمول در مواد فلزی محسوب می‌شود. ویژگی‌های اپتیکی این ترکیبات ناهمسانگرد بوده، قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک در شکل ۵ (a-b) برای ترکیب TiAgMg و ترکیب ScAgMg در شکل ۵ (c-d) آورده شده است. طیف‌های به‌دست‌آمده نشان می‌دهند که نمودار در بازه‌های ۳ الکترون ولت برای راستای x و ۵ الکترون ولت برای راستای y دارای مقدار منفی است که امواج الکترومغناطیس در این ناحیه منتشر نمی‌شود، در این ناحیه قسمت موهومی دارای بیشترین مقدار است. بیشینه مقدار تابع دی‌الکتریک در ۱/۵ الکترون ولت رخ می‌دهد که در این ناحیه ترکیب بیشترین شفافیت و کمترین جذب را از خود نشان می‌دهد.

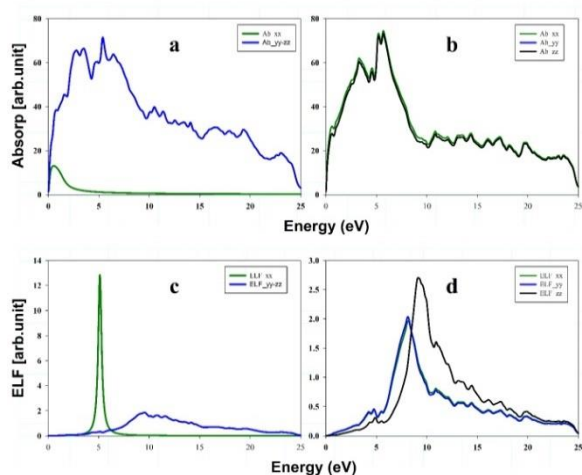
قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک در شکل ۵ (b-d) نشان داده شده است. نمودار موهومی به سمت مثبت بی‌نهایت در هر دو ترکیب را نشان می‌دهد که نشان‌دهنده رفتار فلزی این ساختار است. نمودار بخش موهومی این ترکیبات نشان می‌دهد که در محدوده انرژی ۳ تا ۵ الکترون ولت شاهد چندین پیک کوچک هستیم که معرف گذار بین‌نواری هستند و از ۵ الکترون ولت به بعد شاهد کاهش گذار هستیم، در ناحیه‌ای که بخش حقیقی دارای مقدار منفی است بخش موهومی نیز دارای بیشینه مقدار خود است.



شکل ۵. تصویر a قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک، تصویر b قسمت

موهومی تابع دی‌الکتریک برای ترکیب TiAgMg و (c-d) برای ترکیب ScAgMg

نمودار مربوط به ضریب جذب برای این دو ترکیب در شکل ۶ (a-b) نشان داده شده است؛ بنابراین قله‌های اصلی در نمودار جذب در انرژی‌های مشابه با قله‌های اصلی در نمودار بخش موهومی تابع دی‌الکتریک واقع می‌شوند که به منظور استفاده در کاربردهای اپتیکی، قله‌هایی که در ناحیه نور مرئی (حدود ۱/۷ تا ۵ الکترون ولت) واقع می‌شوند، مورد توجه قرار می‌گیرند. ضریب جذب برای هر دو ترکیب از انرژی‌های حدود ۱/۵ eV آغاز شده و در محدوده مرئی (۳-۱/۷ الکترون ولت) افزایش قابل توجهی نشان می‌دهد. این افزایش ناشی از گذارهای بین‌باندی محدود و سهم بالای چگالی حالات در ناحیه سطح فرمی است. با این حال، با توجه به ماهیت فلزی این ساختارها، جذب مشاهده‌شده عمدتاً ریشه در رفتار الکترون‌های آزاد دارد و قابل مقایسه با عملکرد مواد نیمه‌هادی متداول مانند Si و GaAs در فوتو دیودها یا سلول‌های خورشیدی نیست. بیشینه‌های جذب متناسب با نواحی منفی قسمت حقیقی است که نشان از بیشترین مقدار جذب در این مقادیر را دارد. که بیشترین جذب مربوط به ساختار TiAgMg است.



شکل ۶. تصویر (a-b) نمودار جذب تابع دی‌الکتریک و تصویر (c-d)

نمودار تابع اتلاف انرژی

ترکیبات است. در نقطه کمینه منحنی انرژی - حجم شاهد پایدارترین حالت سلول اولیه ترکیب TiAgMg هستیم. گشتاور مغناطیسی کل به دست آمده برای ترکیب TiAgMg در توافق با رابطه اسلیر- پائولینگ $M_{\text{tot}} = Z_{\text{tot}} - 15$ بوده و عدد صحیح بودن آن در محدوده وسیعی اطراف ثابت شبکه تعادلی بیانگر عدم حساسیت خاصیت فلزی به پارامتر شبکه است.

هر دو ترکیب TiAgMg و ScAgMg از نظر مکانیکی پایدار هستند؛ اما مقادیر بزرگ‌تر مدول‌های الاستیک و دمای دمای در TiAgMg نشان می‌دهد که این ساختار از استحکام و پایداری مکانیکی بالاتری نسبت به ScAgMg برخوردار است. تفاوت رفتاری این دو ترکیب عمدتاً به اختلاف حجم شبکه و شدت برهم‌کنش‌های بین‌اتمی مربوط می‌شود.

به‌طور کلی، خواص اپتیکی این ترکیبات بیشتر با رفتارهای فلزی و پلاسمونی سازگار بوده و استفاده بالقوه آن‌ها می‌تواند در کاربردهای مرتبط با بازتاب بالا، فیلترهای نوری فلزی یا ساختارهای پلاسمونیک مورد توجه قرار گیرد.

تغییرات تابع اتلاف انرژی الکترون بر حسب انرژی فوتون ورودی در شکل ۶ (c-d) ارائه شده است. طیف اتلاف انرژی الکترون برای راستاهای تعیین شده این دو ترکیب در انرژی‌های صفر الکترون ولت شروع می‌شود. این طیف بیانگر میزان جذب انرژی یک پرتو الکترونی توسط الکترون‌های ترکیب هدف است. هر یک از بیشینه‌های تابع اتلاف انرژی الکترونی بیانگر برخوردهای کشسان و یا غیرکشسان است. شاخص‌ترین بیشینه در این طیف مربوط به قله پلاسمونی است که بیانگر نوسانات دسته جمعی بار الکترونی در بلور است. اصلی‌ترین قله این تابع در انرژی ۵ الکترون ولت در راستای x برای ترکیب TiAgMg رخ داده است و ۱۰ الکترون ولت در راستای z ترکیب ScAgMg قابل مشاهده است.

نتیجه‌گیری

در این کار بر اساس روش نظریه تابعی چگالی، ترکیبات نیمه هویسلر TiAgMg و ScAgMg مطالعه شده است. محاسبات الکترونی و اپتیکی به وضوح نشان‌دهنده ماهیت فلزی این

منابع

References

- [1] Hussain, M. K. (2018). Investigations of the electronic and magnetic properties of newly (001) surface LiCrS and LiCrSe half-Heusler compounds. *Applied Physics A*, 124, 343.
- [2] Graf, T., Felser, C., & Parkin, S. S. P. (2011). Simple rules for the understanding of Heusler compounds. *Progress in Solid State Chemistry*, 39(1), 1–50.
- [3] Casper, F., Graf, T., Chadov, S., Balke, B., & Felser, C. (2012). Half-Heusler compounds: Novel materials for energy and spintronic applications. *Semiconductor Science and Technology*, 27(6), 063001.
- [4] Zhu, T., Fu, C., & Snyder, G. J. (2017). Optimizing thermoelectric performance of half-Heusler compounds. *Advanced Energy Materials*, 7(15), 1700848.
- [5] Bhattacharya, S., et al. (2019). First-principles study of electronic and thermoelectric properties of Ti-based half-Heusler alloys. *Journal of Alloys and Compounds*, 775, 1214–1222.
- [6] Yu, C., et al. (2020). Exploring Sc-based half-Heusler compounds for thermoelectric applications. *Physica B: Condensed Matter*, 579, 411912.
- [7] Ma, J., & He, J. (2021). Enhanced thermoelectric performance in Ag-Mg substituted Heusler alloys. *Materials Today Physics*, 18, 100407.
- [8] Singh, D. J. (2022). Computational insights into electronic structures of Ti- and Sc-based half-Heuslers. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 34(34), 345502.
- [9] Gao, M., et al. (2023). Electronic structure and thermoelectric behavior of TiAgMg and ScAgMg half-Heusler compounds: A DFT study. *Computational Materials Science*, 226, 112054.
- [10] Zhang, Y., et al. (2021). Band structure engineering in Mg-Ag-based Heusler alloys. *Physica Status Solidi B*, 258(6), 2000629.
- [11] Li, X., & Yang, J. (2022). First-principles prediction of half-Heusler Mg-based alloys with tunable band gaps. *Journal of Materials Chemistry C*, 10(11), 4337–4345.
- [12] Niu, X., et al. (2023). Phonon stability and thermoelectric properties of Ti-based Heusler alloys. *Applied Physics A*, 129(2), 128.
- [13] Blaha, P., Schwarz, K., Madsen, G. K. H., Kvasnicka, D., & Luitz, J. (2001). WIEN2k: An augmented plane wave + local orbitals program for calculating crystal properties. Vienna University of Technology.
- [14] Cholaki, E., Arghavani Nia, B., Rezaee, S., & Parsamehr, S. (2024). Calculation of structural, electronic, magnetic and optical properties of C₃N monolayer substituted with magnesium. *European Physical Journal Applied Physics*, 99.
- [15] Arghavani nia, B., Shahrokhi, M., & Sedighi, M. (2018). Structural, electronic and optical properties of CaBi₂: First-principles investigation. *Chinese Journal of Physics*, 56(6), 2796–2804.
- [16] Sedighi, M., Arghavani Nia, B., Zarringhalam, H., & Moradian, R. (2011). First principles investigation of magnesium antimonite semiconductor compound in two different phases under hydrostatic pressure. *Physica B: Condensed Matter*, 406(17), 3149–3153.