

«مقاله پژوهشی»

## بررسی خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی آلیاژهای هویسلر $\text{Ir}_2\text{VZ}$ ( $\text{Z}=\text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}$ ) در دو ساختار فرضی $\text{XA}$ و $\text{L2}_1$ : محاسبات اصول اولیه

احمد اسدی محمد آبادی<sup>1\*</sup>، سید مهدی بیضایی<sup>2</sup>

1. استادیار، گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

2. دانشیار، گروه فیزیک، دانشگاه ولی عصر (عج)، رفسنجان، ایران

تاریخ دریافت: 1401/01/28 تاریخ پذیرش: 1401/03/01

## Investigation of Structural, Electronic and Magnetic Properties of Heusler Alloys $\text{Ir}_2\text{VZ}$ ( $\text{Z} = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}$ ) for Two Hypothetical $\text{L2}_1$ and $\text{XA}$ Structures: First- Principles Calculations

A. Asadi Mohammad Abadi<sup>\*1</sup>, S.M. Baizae<sup>2</sup>

1. Assistant Professor, Department of Physics, Payame Noor University, Tehran, Iran

2. Associate Professor, Department of Physics, Vali-e-Asr University, Rafsanjan, Iran

Received: 2022/04/17

Accepted: 2022/05/22

### Abstract

In this study, the structural, electronic and magnetic properties of new full Heusler alloys  $\text{Ir}_2\text{VZ}$  ( $\text{Z} = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}$ ) were studied using the Quantum Espresso software package based on density functional theory. Interchanging the positions of atoms, the calculations were performed for two hypothetical  $\text{L2}_1$  and  $\text{XA}$  structures. The results showed that, the  $\text{XA}$  structure of alloys was non-magnetic, while the  $\text{L2}_1$  structure of these alloys was ferrimagnetic. Based on investigation of structural properties of these alloys, it was found that the  $\text{Ir}_2\text{VSi}$  alloy is more stable than the other two alloys due to its lowest cohesive energy. Also, the results of calculations on electronic properties show that  $\text{Ir}_2\text{VSi}$ ,  $\text{Ir}_2\text{VGe}$  and  $\text{Ir}_2\text{VSn}$  alloys are half-metall, quasi half-metall and metall at equilibrium lattice constants, respectively. Thus  $\text{Ir}_2\text{VSi}$  alloy has 100% spin polarization around the Fermi level and its total magnetic moment ( $3\mu_B/\text{f.u.}$ ) exactly follows Slater-Pauling rule.

### Keywords

First-Principles Calculations, Heusler Alloy, Half-Metallicity, Density Functional Theory, Spintronics

### چکیده

در این تحقیق، خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی آلیاژهای تمام هویسلر جدید  $\text{Ir}_2\text{VZ}$  ( $\text{Z}=\text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}$ ) با استفاده از بسته نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو بر پایه نظریه تابعی چگالی مورد مطالعه قرار گرفت. با تعویض موقعیت مکانی اتم‌ها، محاسبات برای دو ساختار فرضی  $\text{XA}$  و  $\text{L2}_1$  انجام شد. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که ساختار  $\text{XA}$  آلیاژهای مذکور غیرمغناطیسی اما ساختار  $\text{L2}_1$  آنها فری‌مغناطیس است. با بررسی خواص ساختاری آلیاژهای مذکور، مشاهده شد که آلیاژ  $\text{Ir}_2\text{VSi}$  به دلیل دارا بودن پایین‌ترین انرژی بستگی، پایدارتر از دو آلیاژ دیگر است. همچنین، نتایج محاسبات الکترونی نشان می‌دهد که آلیاژهای  $\text{Ir}_2\text{VSn}$  و  $\text{Ir}_2\text{VGe}$ ،  $\text{Ir}_2\text{VSi}$  در ثابت شبکه تمادلی خود به ترتیب نیم‌فلز، شبه نیم‌فلز و فلز هستند. بنابراین آلیاژ  $\text{Ir}_2\text{VSi}$  دارای قطبش اسپینی 100% در اطراف تراز فرمی است و گشتاور مغناطیسی کل آن ( $3\mu_B/\text{f.u.}$ ) دقیقاً از قانون اسلاتر- پائولی تبعیت می‌کند.

### واژه‌های کلیدی

محاسبات اصول اولیه، آلیاژ هویسلر، نیم‌فلزی، نظریه تابعی چگالی، اسپینترونیک

## مقدمه

ساخت قطعات اسپینترونیکی انجام شده است. در این رابطه، بوهاو و همکارانش، خواص ساختاری و الکترونی آلیاژهای  $Ni_2CuSn$  و  $Ni_2CuSb$  را در سه ساختار ممکن ( $L2_1, XA, L2_1B$ ) با استفاده از کد CASTEP و بر پایه روش شبه پتانسیل بررسی کردند. آنها نشان دادند که ساختار  $L2_1$  به دلیل هیبریداسیون قوی میان حالت‌های  $d$  اتم‌های  $Ni$  و  $Cu$ ، پایدارتر از ساختارهای دیگر است [25]. در چین، گروه تحقیقاتی زانگ، ساختار الکترونی، مغناطیسی و خواص نیم‌فلزی آلیاژ تمام هویسلر  $Hf_2Val$  را با استفاده از محاسبات اصول اولیه بررسی کردند. آنها دریافتند که آلیاژ مذکور با ساختار معکوس یک نیم‌فلز فرومغناطیس است و گشتاور مغناطیسی کل آن ( $2\mu_B/f.u.$ ) است که از قانون اسلاتر-پائولی تبعیت می‌کند. همچنین به دلیل منفی بودن انرژی بستگی، این آلیاژ پایدار است [26]. رجبی و همکارانش، خاصیت نیم‌فلزی آلیاژهای تمام هویسلر  $NaTO_2$  ( $T=Sc, Ti, V, Cr, Mn$ ) را با استفاده از روش موج تخت بهبود یافته با پتانسیل کامل موجود در کد WIEN2k بر پایه نظریه تابعی چگالی مورد مطالعه قرار دادند. آنها نتیجه گرفتند که همه آلیاژها به جز آلیاژهای  $NaVO_2$  و  $NaScO_2$  فرومغناطیس نیم‌فلز هستند. همچنین دریافتند که همه آلیاژهای مذکور به دلیل داشتن انرژی بستگی منفی در عمل قابلیت سنتز شدن دارند [27]. در ایران علوی صدر و همکارانش ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و مغناطیسی آلیاژ تمام هویسلر  $Co_2TaGa$  را با استفاده از کد محاسباتی WIEN2k بررسی کردند و نشان دادند که این آلیاژ در ثابت شبکه تعادلی خود یک نیم‌فلز با گاف نواری  $0/48eV$  و قطبش اسپینی 100% است. همچنین این آلیاژ دارای نظم فرومغناطیس است و گشتاور مغناطیسی کل آن  $2\mu_B$  به دست آمد [28].

در این تحقیق، خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی آلیاژهای تمام هویسلر  $Ir_2VZ$  ( $Z=Si, Ge, Sn$ ) با استفاده از محاسبات اصول اولیه در چارچوب نظریه تابعی چگالی، بررسی شده است. لازم به ذکر است که پیشرفت‌های حاصل شده در زمینه آلیاژهای هویسلر عمدتاً به صورت نظری بوده و در واقع گام نخست کاربرد این آلیاژها در عمل، مطالعه به صورت نظری و بررسی خاصیت نیم‌فلزی آنها است.

در دهه‌های گذشته، آلیاژهای هویسلر به دلیل خواص فیزیکی گوناگون از جمله خاصیت نیم‌فلزی، ابرسانایی و خاصیت حافظه‌ای شکل القا شده با میدان مغناطیسی مورد توجه پژوهشگران زیادی قرار گرفته‌اند [10-1]. یکی از خواص کلیدی آلیاژهای هویسلر<sup>1</sup>، خاصیت نیم‌فلزی است. آلیاژهای هویسلر فرومغناطیس با قطبش اسپینی بالا در تراز فرمی، دو کانال اسپینی با دو رفتار متفاوت دارند. آنها در یک کانال اسپینی رفتار فلزی دارند و در کانال اسپینی دیگر رفتار عایق یا نیم‌رسانا از خود نشان می‌دهند. از این رو، آلیاژهای فرومغناطیس نیم‌فلز، گزینه مناسبی برای کاربرد در صنعت اسپینترونیکی هستند. قطعات اسپینترونیکی<sup>2</sup> می‌توانند در ساخت و توسعه وسایلی همچون سنسورهای مغناطیسی<sup>3</sup>، فیلتر و شیرهای اسپینی<sup>4</sup> مورد استفاده قرار بگیرند. همچنین این آلیاژها در ساخت الکترودهای ایده‌آل نقش مهمی دارند که از این الکترودها در ساخت پیوندگاه‌های تونلی مغناطیسی<sup>5</sup> و قطعات مقاومت مغناطیسی عظیم<sup>6</sup> استفاده می‌شود [11-16].

آلیاژهای هویسلر را می‌توان به چهار گروه تقسیم کرد. گروه اول آلیاژهای نیم‌هویسلر (با فرمول کلی  $XYZ$  و ساختار  $C1_b$ )، گروه دوم آلیاژهای تمام هویسلر (با فرمول کلی  $X_2YZ$  و ساختار  $L2_1$ )، گروه سوم آلیاژهای هویسلر معکوس (با فرمول کلی  $X_2YZ$  و ساختار  $XA$ ) و گروه چهارم آلیاژهای هویسلر چهارتایی (با فرمول کلی  $XX'YZ$  و ساختار  $L2_1$ ) هستند. همه این ساختارها از چهار زیرشبکه fcc تشکیل شده‌اند که این زیرشبکه‌ها به اندازه یک چهارم در راستای قطر اصلی در هم نفوذ کرده‌اند. در همه این گروه‌ها  $X, X'$  و  $Y$  می‌توانند هر یک از عناصر واسطه  $3d, 4d$  و  $5d$  باشند و  $Z$  یک عنصر غیر مغناطیسی از گروه‌های  $3, 4$  و  $5$  اصلی است [17-24].

در سال‌های اخیر، تحقیقات زیادی بر روی خاصیت نیم‌فلزی آلیاژهای هویسلر با هدف به کارگیری آنها در

1. Heusler Alloy
2. Spintronics Devices
3. Magnetic Sensor
4. Spin Valves
5. Magnetic Tunnel Junctions
6. Giant Magneto-Resistance Devices

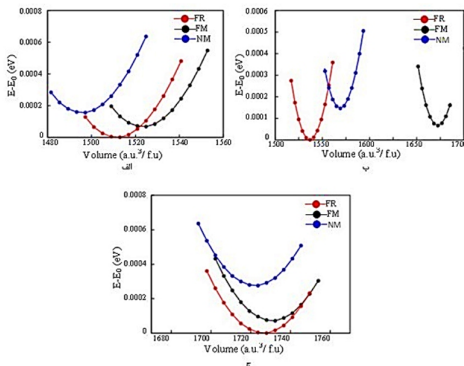
### روش محاسبات

محاسبات اصول اولیه با استفاده از کد pwsc از بسته نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو و بر پایه روش شبه‌پتانسیل موج تخت انجام شد. در این روش برای نشان دادن تبادل و همبستگی میان الکترون‌های d جایگزیده، از تقریب شیب تعمیم یافته ساخته شده توسط پدرو-بروک کمک گرفته شد [29]. همچنین در محاسبات، برای تعیین برهم‌کنش میان هسته و الکترون‌های ظرفیت از شبه پتانسیل فوق نرم استفاده شد [30]. به منظور اطمینان از دقت نتایج در تمامی محاسبات، انرژی قطع 85Ry، برای خلاصه کردن بسط توابع موج کوهن-شم و 680Ry برای چگالی بار به کار گرفته شد. تقسیم‌بندی منطقه اول بریلوئن کاهش یافته به روش منخورست-پک انجام شد و تعداد نقاط k بهینه 12×12×12 در محاسبات مورد استفاده قرار گرفت. همچنین محاسبات خودسازگار با دقت همگرایی کمتر از 10<sup>-5</sup>Ry در نظر گرفته شد.

در ابتدا، برای تعیین خواص حالت پایه آلیاژهای هویسلر Ir<sub>2</sub>VZ (Z=Si,Ge,Sn) اختلاف انرژی کل (E-E<sub>0</sub>) بر حسب حجم سلول واحد برای سه حالت فرومغناطیس، فری‌مغناطیس و غیرمغناطیسی محاسبه و پس از برازش داده‌ها با معادله حالت مورناگان کردار آنها رسم شد (شکل 2). کردارهای به دست آمده نشان می‌دهند که ساختار XA ی هر سه آلیاژ مذکور غیرمغناطیسی هستند. همچنین با توجه به کردارها، مشاهده می‌شود که حالت فری‌مغناطیس آلیاژهای مورد مطالعه با ساختار L2<sub>1</sub> دارای انرژی پایین‌تری نسبت به دو حالت دیگر است. بنابراین این آلیاژها به دلیل پادموازی بودن گشتاور مغناطیسی اتم‌های Ir، V و Z، دارای نظم فری‌مغناطیس هستند، زیرا دارای پایین‌ترین انرژی نسبت به دو حالت دیگر هستند. بنابراین می‌توان گفت که برهم‌کنش تبادلی میان الکترون‌های ظرفیت اتم‌های مغناطیسی موجود در آلیاژ نقش مهمی را در تعیین نظم مغناطیسی بازی می‌کند.

### یافته‌ها

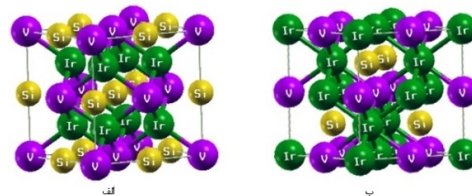
آلیاژهای تمام هویسلر X<sub>2</sub>YZ دارای دو ساختار L2<sub>1</sub> (با نمونه اولیه Cu<sub>2</sub>MnAl و گروه فضایی Fm $\bar{3}$ m) و ساختار XA (با نمونه اولیه Hg<sub>2</sub>CuTi و گروه فضایی F43m) هستند. سلول واحد این آلیاژها دارای 4 مختصه مکانی 4c(0/5, 0/5, 0/5)، 4b(0/25, 0/25, 0/25)، 4a(0.0.0) و 4d(0/75, 0/75, 0/75) است. در ساختار L2<sub>1</sub>، اتم‌های Ir موقعیت‌های 4b و 4d، اتم‌های V موقعیت 4a و اتم‌های Z(Si,Ge,Sn) موقعیت 4c را اشغال می‌کنند (شکل 1-1). اما در ساختار XA، اتم‌های Ir در موقعیت‌های 4a و 4b و اتم‌های V و Z(Si,Ge,Sn) به ترتیب در موقعیت‌های 4c و 4d قرار می‌گیرند (شکل 1-ب).



شکل 2. کردار انرژی بر حسب حجم آلیاژهای الف- Ir<sub>2</sub>VSi، ب- Ir<sub>2</sub>VGe و ج- Ir<sub>2</sub>VSn در سه حالت فرومغناطیس، فری مغناطیس و غیرمغناطیسی

برای بهینه‌سازی ساختار کریستالی آلیاژهای هویسلر Ir<sub>2</sub>VZ (Z=Si,Ge,Sn) از معادله حالت بریج- مورناگان استفاده شد که عبارت است از:

$$E(V) = E_0 + \frac{9V_0 B_1}{16} \left\{ \frac{e}{V} \left( \frac{\sigma}{\rho} \right)^2 - \frac{1}{4} \frac{B_2}{V} \left( \frac{\sigma}{\rho} \right)^2 - \frac{1}{4} \frac{B_3}{V} \left( \frac{\sigma}{\rho} \right)^2 - 4 \frac{B_4}{V} \left( \frac{\sigma}{\rho} \right)^2 \right\} \quad (1)$$

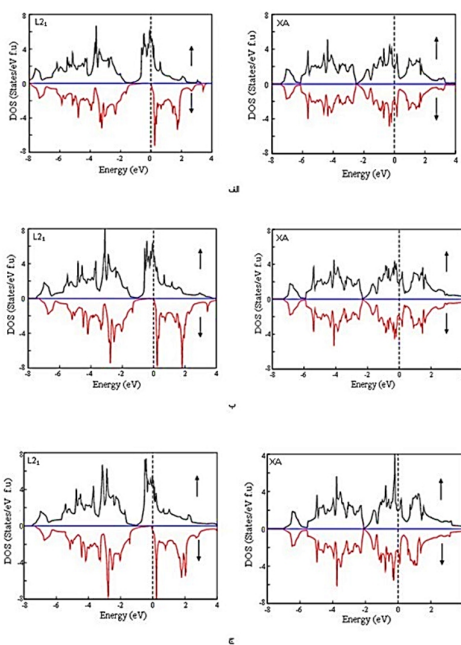


شکل 1. ساختار بلوری آلیاژ Ir<sub>2</sub>VSi در فاز الف (L2<sub>1</sub>) و ب) XA

در این معادله،  $E_0$ ،  $V_0$ ،  $B_0$  و  $B'_0$  به ترتیب کمینه انرژی کل در حجم تعادلی، حجم سلول واحد، مدول حجمی و مشتق مدول حجمی هستند [31]. همچنین برای بررسی پایداری دینامیکی آلیاژهای فوق، انرژی بستگی آنها با استفاده از رابطه 2 محاسبه شد [32]:

$$E_{coh} = E_{tot} - (2E_{Ir}^{atom} + E_V^{atom} + E_Z^{atom}) \quad (2)$$

در این رابطه  $E_{coh}$  انرژی بستگی،  $E_{tot}$  انرژی کل ساختار و  $E_{Ir}$ ،  $E_V$  و  $E_Z$  به ترتیب انرژی اتم‌های منزوی Ir، V و Z ( $Z=Si, Ge, Sn$ ) هستند. در جدول 1 مقادیر ثابت شبکه تعادلی، مدول حجمی، مشتق مدول حجمی و انرژی بستگی آلیاژهای  $Ir_2VZ$  ( $Z=Si, Ge, Sn$ ) در ساختار  $L2_1$  آورده شده است. با توجه به مقادیر موجود در جدول 1 مشاهده می‌شود که ثابت شبکه تعادلی با افزایش عدد اتمی عنصر Z در آلیاژ افزایش یافته است. همچنین، مقادیر منفی انرژی بستگی نشان می‌دهد که هر سه آلیاژ به لحاظ دینامیکی پایدار هستند و در بین آنها آلیاژ  $Ir_2VSi$  به دلیل داشتن انرژی بستگی کوچک‌تر، از دو آلیاژ دیگر پایدارتر است.



شکل 3. چگالی حالت‌های الکترونی کل در دو ساختار  $L2_1$  و XA برای آلیاژهای الف)  $Ir_2VSi$  ب)  $Ir_2VGe$  و ج)  $Ir_2VSn$

جدول 2. گشتاور مغناطیسی کل آلیاژهای  $Ir_2VZ$  و گشتاور مغناطیسی اتم‌های تشکیل دهنده

Alloy	$\mu_a$ ( $\mu_B$ /atom)			$\mu_t$ ( $\mu_B$ /f.u.)
	Ir	V	Z	
$Ir_2VSi$	1/663	-1/281	0/965	3/010
$Ir_2VGe$	1/661	-1/279	0/912	2/955
$Ir_2VSn$	1/665	-1/280	0/764	2/814

جدول 1. پارامترهای بهینه محاسبه شده آلیاژهای  $Ir_2VZ$  ( $Z=Si, Ge, Sn$ )

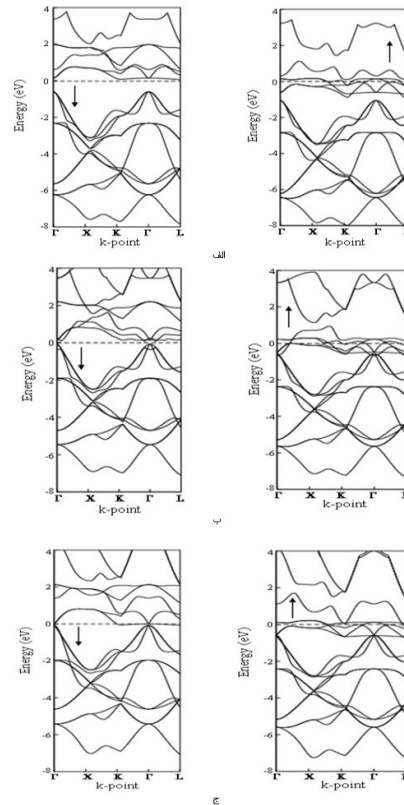
آلیاژ	A (Å)	$B_0$ (Gp)	$B'_0$ (eV)	$E_{coh}$
$Ir_2VSi$	11/48	67/9	15/1	-23/57
$Ir_2VGe$	11/54	1491	15	-22/43
$Ir_2VSn$	12/00	702	1/1	-19/11

در ادامه محاسبات، برای تعیین خاصیت نیم‌فلزی آلیاژهای  $Ir_2VZ$  ( $Z=Si, Ge, Sn$ ) با محاسبه چگالی کل حالت‌ها، ساختار الکترونی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج این محاسبات برای دو ساختار فرضی  $L2_1$  و XA در شکل 3 نشان داده شده است. به وضوح دیده می‌شود که ساختار XA آلیاژهای مذکور به دلیل وجود تقارن کامل در کردار چگالی حالت‌ها، غیرمغناطیسی است. همچنین در ساختار  $L2_1$  این آلیاژها، مشاهده می‌شود که آلیاژهای  $Ir_2VSi$  و  $Ir_2VGe$  به ترتیب نیم‌فلز و شبه‌نیم‌فلز هستند و آلیاژ

شکل 5 آورده شده است. لازم به ذکر است که فقط اربیتال‌های با چگالی حالت‌های الکترونی بالا در نظر گرفته شده‌اند. نتایج به دست آمده نشان می‌دهند که اربیتال‌های 5d اتم‌های Ir، بیشترین سهم را در چگالی حالت‌های الکترونی در اطراف تراز فرمی دارند. همچنین در هر سه آلیاژ، یک هیبریداسیون قوی بین اربیتال‌های dی اتم Ir و اربیتال‌های pی اتم‌های Z(Si,Ge,Sn) وجود دارد. در آلیاژ Ir<sub>2</sub>VSi اربیتال‌های 3pی اتم Si نقش مهمی را در خاصیت نیم‌فلزی بازی می‌کنند، اما به نظر می‌رسد که در آلیاژهای Ir<sub>2</sub>VGe و Ir<sub>2</sub>VSn حضور اربیتال‌های dی اتم‌های Ge و Sn خاصیت نیم‌فلزی را تضعیف می‌کنند.

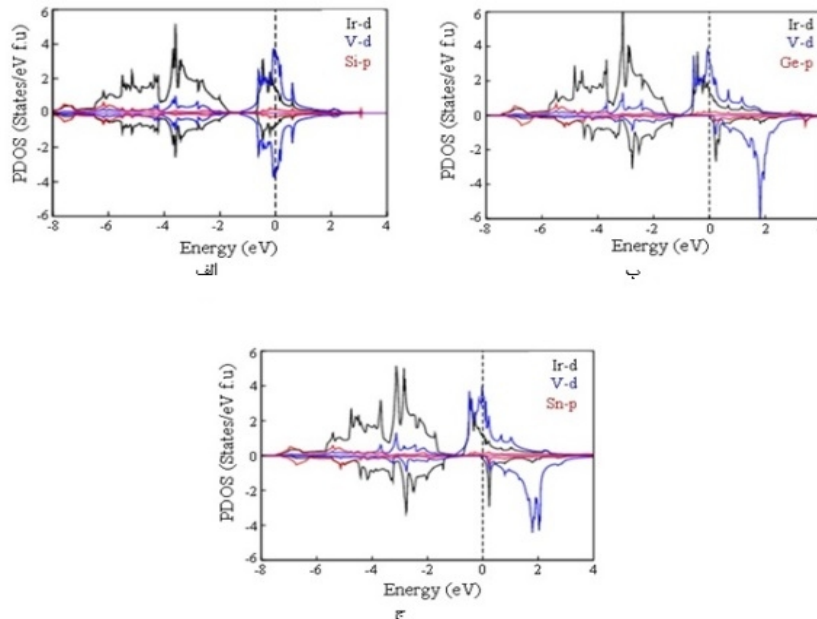
در جدول 2 گشتاور مغناطیسی کل آلیاژهای Ir<sub>2</sub>VZ در ساختار L2<sub>1</sub> و همچنین گشتاور مغناطیسی جزئی مربوط به اتم‌های تشکیل دهنده آنها آورده شده است. با توجه به مقادیر موجود، مشاهده می‌شود که فقط گشتاور مغناطیسی کل آلیاژ Ir<sub>2</sub>VSi (3μ<sub>B</sub>/f.u.) با تقریب خیلی خوبی از قانون اسلاتر پائولی تبعیت می‌کند. بر طبق این قانون، رابطه میان گشتاور مغناطیسی کل آلیاژ و تعداد الکترون‌های ظرفیت به صورت  $\mu_t = Z_t - 24$  است [33-35].

از آن‌جا که تعداد الکترون‌های ظرفیت آلیاژ Ir<sub>2</sub>VSi 27 عدد است، بنابراین گشتاور مغناطیسی کل از این رابطه 3μ<sub>B</sub>/f.u. به دست می‌آید که با نتایج حاصل از محاسبات



شکل 4. ساختار نواری اسپین بالا و پایین آلیاژهای الف - Ir<sub>2</sub>VSi ب- Ir<sub>2</sub>VGe و ج- Ir<sub>2</sub>VSn

به منظور بررسی منشأ خاصیت نیم‌فلزی، چگالی حالت‌های جزئی آلیاژهای مذکور، محاسبه و کردار آنها در



شکل 5. چگالی حالت‌های جزئی آلیاژهای الف) Ir<sub>2</sub>VSi ب) Ir<sub>2</sub>VGe و ج) Ir<sub>2</sub>VSn در نزدیکی تراز فرمی

تابعی چگالی مطالعه شد. نتایج حاصل از بررسی خواص مغناطیسی نشان می‌دهد که ساختار  $XA$ ی این آلیاژها غیرمغناطیسی و ساختار  $L2_1$  آنها، فری مغناطیس هستند. همچنین از بین سه آلیاژ مورد مطالعه، مشاهده شد که آلیاژ  $Ir_2VSi$  با گاف نواری قابل ملاحظه یک نیم‌فلز ایده‌آل است و گشتاور مغناطیسی کل آن با قانون اسلاتر پائولی مطابقت دارد. آلیاژ  $Ir_2VGe$  با گاف نواری ناچیز شبه نیم‌فلز و آلیاژ  $Ir_2VSn$  یک فلز عادی است. همچنین با بررسی خواص ساختاری، مشاهده شد که هر سه آلیاژ به لحاظ دینامیکی پایدار هستند و در بین آنها، آلیاژ  $Ir_2VSi$  به دلیل دارا بودن پایین‌ترین انرژی بستگی، از دو آلیاژ دیگر پایدارتر است. بنابراین، اگر در عمل آلیاژ  $Ir_2VSi$  قابل سنتز و تولید باشد، می‌تواند به عنوان یک گزینه مناسب برای کاربرد در ساخت قطعات اسپینترونیک مورد توجه قرار گیرد.

## References

- [1] Felser C, Wollmann L, Chadov S, Fecher G.H., Parkin S.S.P. Basics and prospective of magnetic Heusler compounds. *APL Mater.* 2015 Apr 13; 3(4):041518.
- [2] Bainsla L, Suresh K.G. Equiatomic quaternary Heusler alloys: a material perspective for spintronic applications. *Appl. Phys. Rev.* 2016 Sep 22; 3(3):031101.
- [3] Wang X, Cheng Z, Wang J, Wang X.L, Liu G. Recent advances in the Heusler based spin-gapless semiconductors. *J. Mater. Chem. C.* 2016 4(30):7176-92.
- [4] Sanvito S, Osés C, Xue J, Tiwari A, Zic M, Archer T, Tozman P, Venkatesan M, Coey M, Curtarolo S. Accelerated discovery of new magnets in the Heusler alloy family. *Sci. Adv.* 2017 Apr 14; 3(4):e1602241.
- [5] Tafti F.F, Fujii T, Juneau-Fecteau A, Rene de Cotret S, Doiron-Leyraud N, Asamitsu A, Taillefer L. Superconductivity in the noncentrosymmetric half-Heusler compound  $LuPtBi$ : a candidate for topological superconductivity. *Phys. Rev. B.* 2013 May 13; 87(18):184504.

همخوانی دارد. گشتاور مغناطیسی کل آلیاژ  $Ir_2VGe$  از عدد صحیح کمی انحراف دارد که این موضوع دلالت بر شبه نیم‌فلز بودن آن است. در مورد آلیاژ  $Ir_2VSn$  انحراف از عدد صحیح قابل ملاحظه است و به همین دلیل این آلیاژ فلز است و چگالی حالت برای اسپین پایین این آلیاژ در اطراف تراز فرمی غیرصفر است. لازم به ذکر است که در هر سه آلیاژ، اتم‌های  $Ir$  به دلیل داشتن اوربیتال‌های  $d$ ، بیشترین سهم را در گشتاور مغناطیسی کل آلیاژ دارند. همچنین هر سه آلیاژ مورد نظر به دلیل پادموازی بودن مغناطش اتم‌های تشکیل‌دهنده، فری مغناطیس هستند.

## بحث و نتیجه‌گیری

خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی آلیاژهای هوسلر  $Ir_2VZ$  ( $Z=Si, Ge, Sn$ ) در دو ساختار فرضی  $XA$  و  $L2_1$  با استفاده از محاسبات اصول اولیه در چارچوب نظریه

- [6] Ameri M, Touia A, Khenata R, Al Douri Y, Baltache H. Structural and optoelectronic properties of  $NiTiX$  and  $CoVX$  ( $X = Sb$  and  $Sn$ ) half-Heusler compounds: an ab initio study. *Optik.* 2013 Apr 1; 124(7):570-4.
- [7] Missoum A, Seddik T, Murtaza G, Khenata R, Bouhemadou A, Al-Douri Y, Abdiche A, Meradji H, Baltache H. Ab initio study of the structural and optoelectronic properties of the half-Heusler  $CoCrZ$  ( $Z=Al, Ga$ ). *Can. J. Phys.* 2014 92(10):1105-12.
- [8] Abderrahim B, Ameri M, Bensaid D, Azaz Y, Doumi B, Al-Douri Y, Benzoudji F. Half-metallic magnetism of quaternary Heusler compounds  $Co_2Fe_xMn_{1-x}Si$  ( $x=0, 0.5$ , and  $1.0$ ): first-principles calculations. *J. Supercond. Novel Magn.* 2016 Feb 29(2):277-83.
- [9] Yahiaoui I.E, Lazreg A, Dridi Z, Al-Douri Y. Electronic and magnetic properties of  $Co_2CrGa_{1-x}Si_x$  Heusler alloys. *J. Supercond. Novel Magn.* 2017 Feb 30(2):421-4.
- [10] Amrich O, Amine Monir M.E, Baltach H, Omran S.B, Sun X.W, Wang X, Al-Douri Y, Bouhemadou A, Khenata R. Half-metallic ferrimagnetic characteris-

- tics of  $\text{Co}_2\text{YZ}$  ( $Z = \text{P, As, Sb, and Bi}$ ) new full-Heusler alloys: a DFT study, *J. Super.Novel Magn.* 2018 Jan 31(1):241-50.
- [11] Rasool M.N, Hussain A, Javed A, Khan M.A, Iqbal F. Structural stability, electronic and magnetic behaviour of spin-polarized  $\text{YCoVZ}$  ( $Z= \text{Si, Ge}$ ) and  $\text{YCoTiZ}$  ( $Z= \text{Si, Ge}$ ) Heusler alloys. *Mater. Chem. Phys.* 2016 Nov 1; 183:524-33.
- [12] Bainsla L, Suresh K.G, Nigam A.K, Manivel Raja M, Varaprasad B.S.D.Ch.S, Takahashi Y.K, Hono K. High spin polarization in  $\text{CoFeMnGe}$  equiatomic quaternary Heusler alloy. *J. Appl. Phys.* 2014 Nov 28; 116(20):203902.
- [13] Halder M, Mukadam M.D, Suresh K.G, Yusuf S.M. Electronic structural and magnetic properties of the quaternary Heusler alloy  $\text{NiCoMnZ}$  ( $Z \frac{1}{4} \text{Al, Ge, and Sn}$ ), *J. Magn. Mater.* 2015 Mar 1; 377:220-5.
- [14] Bainsla L, Mallick A.I, Raja M.M, Nigam A.K, Varaprasad B.S.D.Ch.S, Takahashi Y.K, Alam A, Suresh K.G, Hono K. Spin gapless semiconducting behavior in equiatomic quaternary  $\text{CoFeMnSi}$  Heusler alloy, *Phys. Rev.* 2015 Mar 13; 91(10):104408.
- [15] Kervan N, Kervan S. Half-metallic properties of  $\text{Ti}_2\text{FeSi}$  full Heusler compound. *J. Phys. Chem. Solids.* 2011 Nov 1; 72(11):1358-61.
- [16] Wen Z, Sukegawa H, Mitani S, Inomata K. Tunnel magnetoresistance in textured  $\text{Co}_2\text{FeAl/MgO/CoFe}$  magnetic tunnel junctions on a  $\text{Si/SiO}_2$  amorphous substrate. *Appl. Phys. Lett.* 2011 May 9; 98(19):192505.
- [17] Atulasimha J, Bandyopadhyay S. *Nanomagnetic and 553 Spintronic Devices for Energy-Efficient Memory and Com-554 putting.* New York: Wiley. 2016 Mar 3-7.
- [18] Huang W, Wang X, Chen X, Lu W, Damewood L, Fong C.Y. Structural and electronic properties of half-Heusler alloy  $\text{PdMnBi}$  calculated from first principles. *Mater. Chem. Phys.* 2014 Nov 14; 148(1-2):32-8.
- [19] Amirabadizadeh A, Emami S.A, Nourbakhsh Z, Sadr S.M, Baizae S.M. The effect of substitution of As for Ga on the topological phase and structural, electronic and magnetic properties of  $\text{Mn}_2\text{ZrGa}$  Heusler alloy. *J. Supercond. Novel Magn.* 2017 Apr 30(4):1035-49.
- [20] Behbahani M.A, Moradi M, Rostami M, Davatolhagh S. First principle study of structural, electronic and magnetic properties of half-Heusler  $\text{IrCrZ}$  ( $Z= \text{Ge, As, sn and sb}$ ) compounds. *J. Phys. Chem. Solids.* 2016 May 1; 92:85-93.
- [21] Jourdan M, Minár J, Braun J, Kronenberg A, Chadov S, Balke B, Gloskovskii A, Kolbe M, Elmers HJ, Schönhense G, Ebert H. Direct observation of half-metallicity in the Heusler compound  $\text{Co}_2\text{MnSi}$ . *Nature communications.* 2014 May 30; 5(1):1-5.
- [22] Amari S, Mebsout R, Mecabih S, Abbar B, Bouhaf B. First principle study of magnetic, elastic and thermal properties of full Heusler  $\text{Co}_2\text{MnSi}$ . *Intermetallics.* 2014 Jan 1; 44:26-30.
- [23] Chen J, Luo H, Jia P, Meng F, Liu G, Liu E, Wang W, Wu G. Site preference and electronic structure of  $\text{Mn}_2\text{RuSn}$ : a theoretical study. *J. Magn Mater.* 2014 Sep 1; 365:132-7.
- [24] Kang X.H, Zhang J.M. The structural, electronic and magnetic properties of a novel quaternary Heusler alloy  $\text{TiZrCoSn}$ . *J. Phys. Chem. Solids.* 2017 Jun 1; 105:9-15.
- [25] Liu B, Luo H, Xin Y, Zhang Y, Meng F, Liu H, Liu E, Wang W, Wu G. Unusual site preference of Cu in  $\text{Ni}_2$ -based Heusler alloys  $\text{Ni}_2\text{CuSb}$  and  $\text{Ni}_2\text{CuSn}$ . *Solid State Communications.* 2015 Nov 1; 222:23-7.
- [26] Zhang L, Gao Y.C. Electronic structures, magnetic properties and half-metallicity in the Heusler alloy  $\text{Hf}_2\text{VAl}$ . *Chine. J. phys.* 2017 Aug 1; 55(4):1466-72.
- [27] Rajabi K, Ahmadian F. Half-metallicity in new Heusler alloys  $\text{NaTO}_2$

- (T= Sc, Ti, V, Cr, and Mn): A first-principles study. *Solid State Communications*. 2018 Mar 1; 271:29-38.
- [28] Alavisadr S. M, Dadigiv Z. The Study of the Electronic Structure and Magnetic Properties of Co<sub>2</sub>TaGa Heusler Compound. *BiQuarterly Journal of Optoelectronic*. 2021 2(9):19-26.
- [29] Perdew J.P, Burke K, Ernzerhof M. Perdew, burke, and ernzerhof reply. *Phys. Rev. Lett*. 1998 Jan 26; 80(4):891.
- [30] Vanderbilt D. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism. *Phys. Rev. B*. 1990 Apr 15; 41(11):7892.
- [31] Murnaghan F.D. The compressibility of media under extreme pressures *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A*. 1944 Sep 15; 30(9):244-7.
- [32] Amudhavalli A, Rajeswarapalanichamy R, Iyakutti K. Half metallic ferromagnetism in Ni based half Heusler alloys. *Comput. Mater. Sci*. 2018 Jun 1;148:87-103.
- [33] Slater J.C. The ferromagnetism of nickel. *Phys. Rev*. 1936 Apr 1; 49(7):537.
- [34] Pauling L. The nature of the interatomic forces in metals. *Phys. Rev*. 1938 Dec 1; 54(11):899.
- [35] Galanakis I, Dederichs P. H, Papanikolaou N. Slater-Pauling behavior and origin of the half-metallicity of the full-Heusler alloys. *Phys. Rev. B*. 2002 Nov 18; 66(17):174429.

COPYRIGHTS



© 2022 by the authors Licensee PNU, Tehran, Iran This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution 4 0 International (CC BY4 0) (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0>)