BiQuarterly Journal of Optoelectronic
Year 4, No. 2, Serial Number 11, Spring & Summer 2022 (P 49-56)
DOI: https://doi.org/10.30473/jphys.2022.65989.1125

دوفصلنامه
اپتوالکترونیک
سال چهارم، شماره دوم، پیاپی 11، بهار و تابستان 1401 (ص 49 - 56)

«مقاله پژوهشی»

بررسی خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی

سارا محمدی بیلانکوهی[1]، حسین غفوریان[*2]، فاطمه کرمی[3]
1. دکتری، گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، ایران
2. استادیار، گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، ایران
3. استادیار، گروه فیزیک، دانشگاه فنی و حرفه‌ای خرم‌آباد، ایران

تاریخ دریافت: 1401/03/01 **تاریخ پذیرش**: 1401/06/30

Electronic, Magnetic and Optical Properties of Ti_2ScGe Full-Heusler Compound Using the Density Functional Theory

S. Mohammadi Bilankohi[1], H. Ghaforyan[*2], F. Karami[3]
1. Department of Physics, Payame Noor University, Iran
2. Assistant Professor, Department of Physics, Payame Noor University, Iran
2. Assistant Professor, Department of Physics, Technical and Vocational University, Khoramabad, Iran

Received: 2022/05/22 **Accepted:** 2022/09/21

چکیده
در این مقاله خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe با استفاده از نظریه تابعی چگالی مورد مطالعه قرار گرفت. اولین چیزی که باید مورد بررسی قرار بگیرد ساختار پایدار برای ترکیب تمام هویسلر است که بعد از بررسی‌های به عمل آمده، ساختاری با عنوان نوع a در حالت فرومغناطیس در نظر گرفته شد. این ترکیب برای اولین بار در این مقاله مورد مطالعه قرار گرفته است و در شرایط مورد بررسی، به عنوان یک نیم فلز فرومغناطیس با گاف نیم فلزی به اندازه 0/4 الکترون ولت شناخته شد. این ترکیب چند فاکتور مورد قبول برای کاربردی بودن در ساخت ابزار اسپینترونیک دارد. از جمله آنها، خاصیت نیم فلزی، دمای کوری بالا در حدود 1086 کلوین، پایدار بودن آن در حالت فرومغناطیس و پیروی از قانون اسلیتر-پایولینگ است. بررسی خواص اپتیکی نشان داد که ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe می‌تواند به عنوان جاذب امواج نیز مورد مطالعه بیشتر قرار بگیرد.

واژه‌های کلیدی
اسپینترونیک، ترکیبات تمام هویسلر، خاصیت نیم فلزی، خواص اپتیکی

Abstract
Using the density functional theory, the electronic, magnetic and optical properties of Ti_2ScGe have been investigated. The first thing that should be examined is the stable structure for the full-Heusler compound, after the investigations, a structure named type a was considered in the ferromagnetic state. This compound is studied for the first time in this paper and in the investigated conditions, it was recognized as a ferromagnetic half-metallic with a half-metallic gap of 0.4 electron volts. This compound has several acceptable factors for its applicability in making spintronics devices. Such as, half-metallic properties, high Curie temperature around 1086 K, its stability in the ferromagnetic state, and following the Slater-Pauling rule. Also, the examination of the optical properties showed that the Ti_2ScGe full-Heusler compound can be further studied as a wave absorber.

Keywords
Full-Heusler Compounds, Half-Metallic Properties, Optical Properties, Spintronics

* **نویسنده مسئول**: حسین غفوریان

*Corresponding Author: hghaforyan@pnu.ac.ir

مقدمه

در سال‌های اخیر ترکیب‌های نیم هویسلر[1] [1-3] و تمام هویسلر[2] [4-11] از نظر خاصیت نیم فلزی مورد بررسی قرار گرفته‌اند. این ترکیب‌ها به دلیل دارا بودن خواص نیم فلزی و دمای کوری[3] بالا مورد توجه محققان قرار گرفته‌اند. این ترکیب‌های فرومغناطیس نیم‌فلز به دلیل داشتن قطبش اسپینی کامل (100%)، در شیرهای اسپینی[4] [12-15] و ابزارهای اسپینترونیک[5] [16،17] به کار می‌روند. تعریف قطبش اسپینی کامل به این صورت است که ترکیب‌های با قطبش اسپینی کامل در سطح فرمی، در یک جهت اسپینی رفتار فلزی از خود نشان می‌دهند و در جهت دیگر اسپینی مانند عایق‌ها رفتار می‌کنند. اگر چنین رفتاری از یک ترکیب مشاهده شود آن ترکیب نیم فلز است. فرمول کلی تمام هویسلرها به صورت X_2YZ است و دارای ساختار $L2_1$ و گروه فضایی $F\bar{4}3m$ هستند. در ساختار $L2_1$ چهار شبکه fcc وجود دارد که در راستای قطر اصلی به اندازه یک چهارم در هم نفوذ کرده‌اند و عناصر هر کدام در یک زیرشبکه fcc قرار دارند.

در این مقاله خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe با استفاده از نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار می‌گیرد. با توجه به بررسی به عمل آمده این ترکیب تاکنون نه به صورت تئوری و نه به صورت آزمایشگاهی مورد بررسی قرار نگرفته است و اولین بار در این مقاله از نظر خاصیت نیم فلزی مورد بررسی قرار می‌گیرد.

روش محاسبات

محاسبات با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو [18] انجام شده است. در این محاسبات از تقریب گرادیان تعمیم یافته[6] (GGA) برای تابع تبادل-همبستگی استفاده شده است و شبه پتانسیل‌های به کار رفته از نوع فوق نرم pbe[7] هستند. برای انرژی قطع تابع موج 60 ریدبرگ و انرژی قطع چگالی بار 480 ریدبرگ اعمال شده است. برای ترکیب‌های تمام هویسلر بهترین نسبت بین انرژی قطع تابع موج و چگالی بار 8 تا 12 است که با توجه به بهینه‌سازی‌های انجام شده، برای این ترکیب نسبت 8 مناسب‌تر بود. منطقه اول بریلوئن با مش بندی $10 \times 10 \times 10$ ساخته شده است و آستانه همگرایی برای انرژی کل 10^{-5} در نظر گرفته شده است.

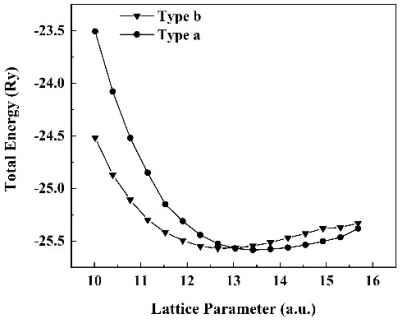
نتایج و بحث

ابتدا باید یک ساختار پایدار برای ترکیب پیدا کرد. برای ترکیب‌های تمام هویسلر دو ساختار متداول وجود دارد که برای ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe این دو ساختار را از نظر انرژی کل[8] با هم مقایسه کردیم، ساختار نوع a و ساختار نوع b. نمودار این مقایسه در شکل 1 نمایش داده شده است و همچنین در جدول 1 جایگاه عناصر در این دو ساختار لیست شده است. در نهایت این نتیجه حاصل شد که ساختار نوع a که در آن عنصر Ti در (0، 0، 0) و (0/5، 0/5، 0/5) عنصر Sc در (0/25، 0/25، 0/25) و عنصر Ge در (0/75، 0/75، 0/75) قرار دارند، به طور کلی ساختار پایدارتری است. این دو ساختار از نظر انرژی بسیار به هم نزدیک هستند اما به طور کلی ساختار نوع a در تمام انرژی‌ها پایدارتر است. ساختار بلوری ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe در ساختار نوع a در شکل 2 نمایش داده شده است.

جدول 1. جایگاه عناصر برای دو ساختار نوع a و نوع b برای ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe

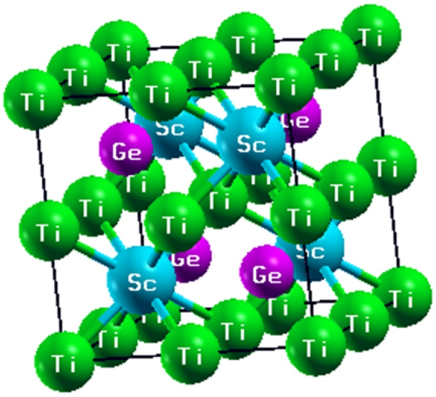
	نوع a	نوع b
Ti	(0.0.0)	(0.0.0)
Sc	(0/25 0/25 0/25)	(0/5 0/5 0/5)
Ti	(0/5 0/5 0/5)	(0/25 0/25 0/25)
Ge	(0/75 0/75 0/75)	(0/75 0/75 0/75)

1. Half-Heusler
2. Full-Heusler
3. Curie Temperature
4. Spin Valves
5. Spintronic Device
6. Generalized Gradient Approximation
7. Perdew Burke Ernzerhof
8. Total Energy

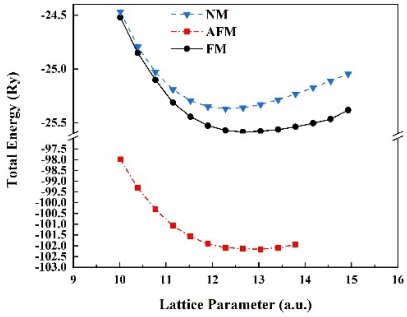


شکل 1. مقایسه انرژی کل برای دو ساختار نوع a و نوع b برای ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe

برای بررسی حالت مغناطیسی این ترکیب، سه حالت غیرمغناطیس، فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس مورد بررسی قرار گرفتند. همان طور که در شکل 3 نشان داده شده است، نتایج نشان داد که حالت آنتی فرومغناطیس این ترکیب با اختلاف زیادی، انرژی کل کمتری نسبت به حالت‌های غیرمغناطیس و فرومغناطیس دارد. اما حالت‌های غیرمغناطیس و فرومغناطیس انرژی کل نزدیک به هم دارند و البته حالت فرومغناطیس پایدارتر است. از آنجا که محاسبات روی حالت آنتی فرومغناطیس بسیار سنگین و زمان‌بر است، حالت فرومغناطیس را به عنوان حالت پایدار در نظر گرفتیم و بقیه محاسبات روی ساختار پایدار نوع a و در حالت فرومغناطیس انجام شد.



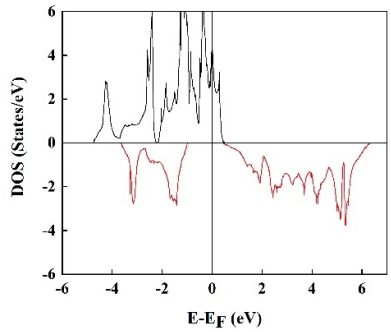
شکل 2. ساختار بلوری برای ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe



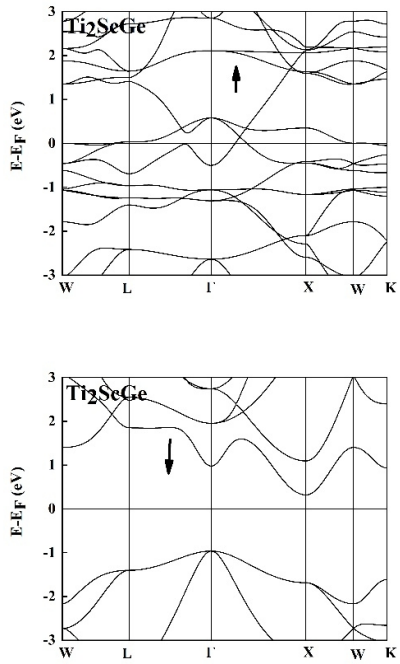
شکل 3. مقایسه انرژی کل سه حالت غیرمغناطیس NM، فرومغناطیس FM و آنتی فرومغناطیس AFM برای ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe

برای بررسی خاصیت نیم فلزی ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe، ساختار نواری[1] و چگالی حالت‌های الکترونی[2] کل را باید رسم کرد و از نظر وجود گاف انرژی مورد بررسی قرار داد. اگر در چگالی حالت‌های کل در یک جهت اسپینی گاف انرژی وجود داشته باشد و در جهت دیگر گافی وجود نداشته باشد، می‌توان گفت که ترکیب مورد نظر نیم فلز است. نمودارهای مربوط به چگالی حالت‌های کل و ساختار نواری به ترتیب در شکل‌های 4 و 5 نمایش داده شده است. در شکل چگالی حالت‌های الکترونی در حالت اسپین اقلیت یک گاف انرژی مشاهده می‌شود اما در اسپین اکثریت گافی وجود ندارد. این همان رفتاری است که نشان دهنده نیم فلز بودن ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe است. مقدار گاف نیم فلزی محاسبه شده برای این ترکیب 0/4 الکترون ولت است که گاف نسبتا خوبی به حساب می‌آید. در شکل 5 ساختار نواری برای اسپین اقلیت و اکثریت به صورت جداگانه رسم شده است. در ساختار نواری اسپین اقلیت یک گاف انرژی مشاهده می‌کنیم که تأییدی بر گاف موجود در چگالی حالت‌های کل است اما در اسپین اکثریت گاف انرژی وجود ندارد.

1 Band Structure
2 Density of States (DOS)

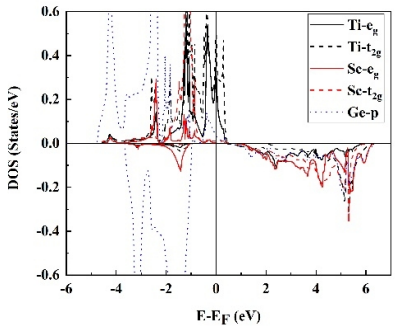


شکل 4. چگالی حالت‌های الکترونی کل برای ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe. مقادیر منفی نشان دهنده اسپین اقلیت است



شکل 5. ساختار نواری برای ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe. علامت ↑ نشان دهنده اسپین اکثریت و علامت ↓ نشان دهنده اسپین اقلیت است

برای ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe قاعده اسلیتر-پائولینگ[1] [19، 20] به صورت $M_{tot} = (Z_{tot} - 8)\mu_B$ به کار می‌رود و مغناطش کل این ترکیب عدد صحیح 7/00 می‌باشد. Z_{tot} تعداد کل الکترون‌های ظرفیت و μ_B مگنتون بور[2] می‌باشد. مطالعات نشان داده است که گشتاور مغناطیسی در اسپینترونیک موضوع مهمی است و به‌خصوص ترکیباتی که گشتاور مغناطیس کل صحیحی دارند در این زمینه کاربردی هستند. بنابراین ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe می‌تواند گزینه مناسبی برای استفاده در ابزار اسپینترونیک باشد. مقادیر مربوط به گشتاور مغناطیسی جزئی در جدول 2 آورده شده‌اند. مقادیر جدول نشان می‌دهد که گشتاور مغناطیسی کل بیشتر ناشی از عنصر تیتانیوم (Ti) در این ترکیب است. همچنین نمودار چگالی حالت‌های جزئی در شکل 6 رسم شده است. همان طور که مشاهده می‌شود گاف نیم فلزی بیشتر ناشی اوربیتال‌های e_g و t_{2g} عناصر Ti و Sc است.



شکل 6. چگالی حالت‌های جزئی برای ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe. مقادیر منفی نشان دهنده اسپین اقلیت است

جدول 2. مقادیر گشتاور مغناطیسی جزئی بر حسب μ_B برای ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe

	M_{Ti}	M_{Sc}	M_{Ge}
Ti_2ScGe	2/82	1/89	-0/53

یکی از ویژگی‌های مهمی که در مورد ترکیب‌های تمام هویسلر مورد بررسی قرار می‌گیرد، دمای کوری است. دمای کوری معیاری از پایداری ترکیب در دمای اتاق است؛ یعنی اگر دمای کوری ترکیب به اندازه کافی از دمای اتاق بالاتر باشد، این نتیجه حاصل می‌شود که ترکیب مورد بررسی، یک امتیاز مثبت برای استفاده در ساخت ابزار اسپینترونیک دارد. دمای کوری با استفاده از تقریب میدان میانگین[3]

1. Slater-Pauling Rule

2. Bohr Magneton

3. Mean Field Approximation

تخمین زده شده است و رابطهٔ آن به صورت $T_c = 2\Delta E_{AFM-FM}/3k_B$ است [21] و مقدار آن برای ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe برابر با 1086 کلوین به دست آمد. این مقدار برای دمای کوری مقدار بالایی است و نشان دهنده یک امتیاز مثبت دیگر برای این ترکیب برای کاربردی بودن در ساخت ابزار اسپینترونیک است.

در این بخش تابع دی الکتریک مورد بررسی قرار می‌گیرد و همچنین نمودارهای ضریب شکست و ضریب خاموشی ترسیم می‌شود. تابع دی‌الکتریک برای توصیف پاسخ ماده به میدان الکترومغناطیسی به کار می‌رود. تابع دی الکتریک $\varepsilon(\omega)$ از دو قسمت تشکیل شده است. قسمت حقیقی[1] $\varepsilon_1(\omega)$ و قسمت موهومی[2] $\varepsilon_2(\omega)$. روابط مربوط به قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک به صورت زیر است [22]

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2(\omega) \tag{1}$$

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

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

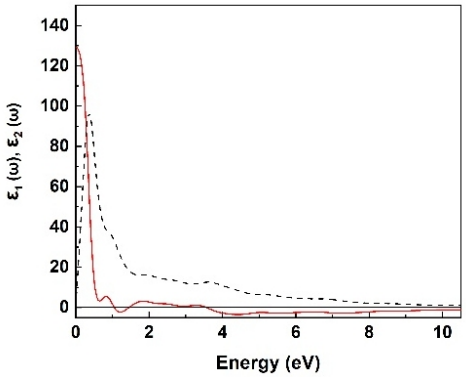
قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، ضریب شکست[3] $n(\omega)$ و ضریب خاموشی[4] $k(\omega)$ برای ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe به ترتیب در شکل‌های 7 و 8 رسم شده‌اند. ضریب شکست و ضریب خاموشی از روابط زیر محاسبه می‌شوند:

$$n(\omega) = \left[\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega)+\varepsilon_2^2(\omega)}+\varepsilon_1(\omega)}{2}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{4}$$

$$k(\omega) = \left[\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega)+\varepsilon_2^2(\omega)}-\varepsilon_1(\omega)}{2}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{5}$$

1. Real Part
2. Imaginary Part
3. Refraction Coefficient
4. Extinction Coefficient

با مشاهده شکل‌های 7 و 8 و همچنین مقایسه روابط ریاضی داده شده، متوجه می‌شویم که نمودار ضریب شکست و قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک بسیار شبیه به هم هستند و همچنین نمودارهای ضریب خاموشی و قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک رفتاری مشابه هم دارند. این تشابه را با توجه به روابط ریاضی آنها هم می‌توان پیش‌بینی کرد.



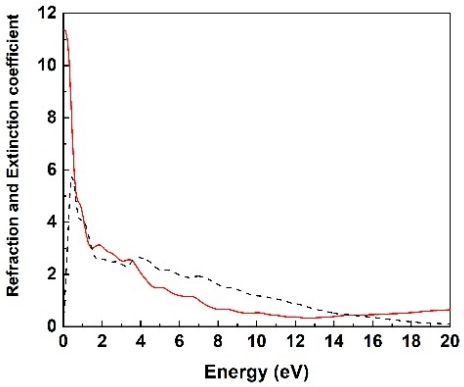
شکل 7. قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک برای ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe. نمودار خط صاف قسمت حقیقی و خط چین قسمت موهومی تابع دی الکتریک است

در شکل 7 در قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک که با خط چین نمایش داده شده است، قله‌های ریز و درشتی دیده می‌شود که نشان دهنده گذارهای بین نواری[5] و درون نواری[6] است. قله‌ای که در ابتدای این نمودار قرار دارد نسبت به دیگر قله‌ها بسیار بلندتر است و نشان دهنده یک گذار بین نواری است.

در شکل 8 ضریب شکست و ضریب خاموشی برای ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe رسم شده است. ضریب خاموشی معیاری از جذب نور در محیط یا ماده است. این ترکیب در نمودار ضریب خاموشی چند قله دارد که بلندترین آن در انرژی حدود 0/5 الکترون ولت است. این قله بلند نشان می‌دهد که در این انرژی جذب بالایی وجود دارد. یکی از نتایجی که می‌توان از وجود این قله‌های

5. Intraband Transition
6. Interband Transition

مختلف در ضریب خاموشی گرفت این است که ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe گزینهٔ نسبتاً خوبی برای استفاده به عنوان جاذب امواج است.



شکل 8. ضریب شکست و ضریب خاموشی برای ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe. خط صاف ضریب شکست و خط چین ضریب خاموشی است

بحث و نتیجه‌گیری

در این مقاله ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe از نظر خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی مورد بررسی و مطالعه قرار گرفت. نتایج به دست آمده حاکی از نیم فلز بودن این ترکیب با گاف نیم فلزی 0/4 الکترون ولت است. بعد از بررسی چگالی حالت‌های کل و ساختار نواری، خواص مغناطیسی این ترکیب بررسی شد و مقدار صحیح 7/00 مگنتون بور برای مغناطش کل به دست آمد. نتایجی که از این مطالعه حاصل شد، تأییدی بر این مطلب بود که ترکیب تمام هویسلر Ti_2ScGe گزینه مناسبی برای استفاده در ساخت ابزار اسپینترونیک است. نیم فلز بودن، دمای کوری بالا در حدود 1086 کلوین و مغناطش کل صحیح از این نتایج بودند. همچنین بررسی تابع دی الکتریک، ضریب شکست و ضریب خاموشی نشان داد که این ترکیب می‌تواند برای جاذب امواج بودن، مورد مطالعه بیشتر قرار گیرد.

References

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

[2] M. Safavi, M. Moradi, M. Rostami, Structural, Electronic and Magnetic Properties of NaKZ (Z = N, P, As, and Sb) Half-Heusler Compounds: a First-Principles study, J. Superconduct. Nov. Magn. 30 (2016) 989-997. https://doi.org/10.1007/s10948-016-3865-8

[3] A. Lakdja, H. Rozale, A. Chahed, O. Benhelal, Ferromagnetism in the half-Heusler XCsBa compounds from first-principles calculations (X = C, Si, and Ge), J. Alloys. Compd. 564 (2015) 8–12. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2013.02.026

[4] Gh. Forozani, F. Karami, M. Moradi, Structural, electronic, magnetic and vibrational properties of full-Heusler Ir_2CrX (X = Si, Ge) compounds, Acta Physica Polonica A, 137 (2020) 430-435. https://doi.org/10.12693/APhysPolA.137.430

[5] Gh. Forozani, F. Karami, M. Moradi, Structural, Electronic, Magnetic and Optical Properties of Ir_2ScZ (Z = Si, Ge and Sn) Full-Heusler Compounds: a First-Principles study, The Journal of Electronic Materials, 49 (2020) 5947-5956. https://doi.org/10.1007/s11664-020-08308-2

[6] Gh. Forozani, F. Karami, M. Moradi, Electronic, Magnetic and Optical Properties of V_2ScX (Z = Ga, In) Full-Heusler Compounds, Journal of Research on Many-body Systems, 12 (2022) 67-76.

https://doi.org/10.22055/jrmbs.2022.17349

[7] F. Karami, Investigation of Electronic structure, Magnetic and Optical Properties of Cr_2ScSb Full-Heusler Compound, Optoelectronic, 3 (2020) 81-88. https://jphys.journals.pnu.ac.ir/article_7204.html

[8] I. Asfour, H. Rached, S. Benalia, D. Rached, Investigation of electronic structure, magnetic properties and thermal properties of the new half-metallic ferromagnetic full-Heusler alloys Cr2GdSi1-xGex: an ab-initio study, J. Alloys. Compd. 676 (2016) 440– 451. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2016.03.075

[9] F. Bagverdi, F. Ahmadian, First principles study of half-metallic ferromagnetism of the full-Heusler compounds RbSrX2 (X = C, N, and O), J. Supercond. Nov. Magn. 28 (2015) 2773–2781. https:-//doi.org/10.1007/s10948-015-3094-6

[10] J. Jalilian, Comment on 'Study of electronic, magnetic, optical and elastic properties of Cu2MnAl a gapless full Heusler compound, J. Alloys. Compd. 626 (2015) 277–279.https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2014.12.039

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

[12] S. Li, C. Cheng, K. Meng and C. Chen, Excitation fluence dependence of spin-wave dynamics and intrinsic Gilbert damping in epitaxial Co2FeAl film, Jpn. J. Appl. Phys. 58 (2019) 040903. https:// doi.org/10.7567/13474065/ab07eb

[13] M. Urdampilleta, S. Klyatskaya, J. Cleuziou, et al. Supramolecular spin valves, Nature Mater 10 (2011) 502-506. https://doi.org/10.1038/nmat3050

[14] A. Bsiesy, Spin injection into semiconductors: towards a semiconductor-based spintronic device, C. R. Phys. 6 (2005) 1022-1026. https://doi.org/10.1016/j.crhy.2005.11.003

[15] R.A.P. Ribeiro, A. Camilo, S.R. De Lazaro, Electronic structure and magnetism of new ilmenite compounds for spintronic devices: FeBO3 (B = Ti, Hf, Zr, Si, Ge, Sn), J. Magn. Magn. Mater 394 (2015) 463–469. https://doi.org/10.-1016/j.jmmm.2015.05.096

[16] S. A. Khandy, D. C. Gupta, Electronic structure, magnetism and thermoelectricity in layered perovskites: Sr2SnMnO6 and Sr2SnFeO6, J. Magn. Magn. Mater. 441 (2017) 166-173. https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2017.05.058

[17] S.A. Khandy, I. Islam, D. C. Gupta, A. Laref, Full Heusler alloys (Co2TaSi and Co2TaGe) as potential spintronic materials with tunable band profiles, J. of Solid State Chemistry 270 (2019) 173179.- https://doi.org/10.1016/j.jssc.2018.11.011

[18] P. Giannozzi et al., QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials, J. Phys. Condens. Matter. 21 (2009) 395502. https://doi.org/10. 1088/09538984/21/-39/395502

[19] J. C. Slater, The Ferromagnetism of Nickel. II. Temperature Effects, Phys. Rev. 49 (1936) 931-937. https://doi.org/10.1103/PhysRev.49.931

[20] K. Sato, et al. Exchange interactions in diluted magnetic semiconductors, J. Phys. Condens. Matter 16 (2004) S5491–S5497.

https://doi.org/10.1088/09538984/16/48/003

[21] L. Pauling, The Nature of the Interatomic Forces in Metals, Phys. Rev. 54 (1938) 899904.https://doi.org/10.1103/PhysRev.54.899

[22] A. Delin, O. Eriksson, R. Ahuja, B. Johansson, M.S.S. Brooks, T. Gasche, S. Auluck, and J.M. Wills, Optical properties of the group-IVB refractory metal compounds, Phys. Rev. B 54 (1996) 1673-1681. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.1673

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)