

«مقاله پژوهشی»

مطالعه خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی آلیاژهای هویسلر معکوس Ti_2ScX ($X=Si,Sn$): رهیافت نظریه تابعی چگالی

فاطمه کرمی^{1*}، احمد اسدی محمدآبادی²

1. دکتری، گروه فیزیک، دانشگاه فنی حرفه‌ای خرم آباد، ایران

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

تاریخ دریافت: 1401/11/05 تاریخ پذیرش: 1401/12/15

Study of Electronic, Magnetic and Optical Properties of Inverse Heusler Alloys Ti_2ScX ($X=Si,Sn$): Density Functional Theory Method

F. Karami^{*1}, A. Asadi Mohammad Abadi²

1. Ph.D., Department of Physics, Technical and Vocational University, Khoramabad, Iran

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

Received: 2023/01/25 Accepted: 2023/03/06

Abstract

In this research, the electronic, magnetic and optical properties of inverse Heusler alloys Ti_2ScX ($X=Si,Sn$) were studied using the Quantum Espresso software package based on the density functional theory. The results of the electronic properties investigation showed that both alloys are half-metals in their equilibrium lattice constant and exhibit 100% spin polarization around the Fermi level. The indirect half-metallic band gap for Ti_2ScSi and Ti_2ScSn alloys were obtained as 0.35eV and 0.11eV, respectively. Furthermore, considering the high values of the Curie temperature of Ti_2ScX ($X=Si, Sn$) alloys, it can be concluded that these alloys are stable at room temperature. Analyzing magnetic properties revealed that Ti_2ScX ($X=Si,Sn$) alloys exhibit ferromagnetic behavior in their stable structure, and their total magnetic moment is $7\mu_B/f.u.$, which is in good agreement with the Slater-Pauling rule. Consequently, it can be inferred Heusler alloys Ti_2ScX ($X=Si,Sn$) are half-metal ferromagnetism. Additionally, the optical properties of these alloys suggest their potential as electromagnetic waves absorbers.

Keywords

Spintronics, Inverse Heusler Alloy, Half-Metallic Properties, Density Functional Theory

چکیده

در این تحقیق، خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی آلیاژهای هویسلر معکوس Ti_2ScX ($X=Si,Sn$) با استفاده از بسته نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو بر پایه نظریه تابعی چگالی مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج حاصل از بررسی خواص الکترونی نشان دادند که هر دو آلیاژ در ثابت شبکه تعادلی خود نیم‌فلز و دارای قطبش اسپینی 100% در اطراف تراز فرمی هستند. مقادیر گاف نیم‌فلزی غیرمستقیم برای آلیاژ Ti_2ScSi و Ti_2ScSn به ترتیب 0/35 و 0/11 الکترون ولت به دست آمد. همچنین با توجه به مقادیر بالای دمای کوری برای دو آلیاژ مذکور، می‌توان نتیجه گرفت که این دو آلیاژ در دمای اتاق پایدار هستند. با بررسی خواص مغناطیسی مشاهده شد که آلیاژهای مورد مطالعه در ساختار پایدار خود فرومغناطیس هستند و گشتاور مغناطیسی کل آنها $7\mu_B/f.u.$ است که تطابق خوبی با قانون اسلاتر-پائولی دارد. بدین ترتیب می‌توان گفت که آلیاژهای مورد مطالعه فرومغناطیس نیم‌فلز هستند. همچنین، بررسی خواص اپتیکی این آلیاژها نشان می‌دهد که آنها می‌توانند به عنوان جاذب امواج الکترومغناطیسی به کار گرفته شوند.

واژه‌های کلیدی

اسپینترونیک، آلیاژ هویسلر معکوس، خاصیت نیم فلزی، نظریه تابعی چگالی

مقدمه

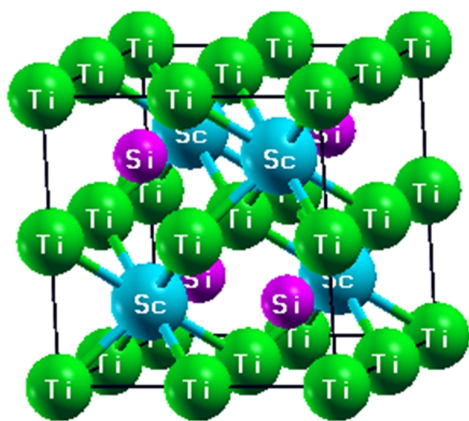
در دهه‌های گذشته، مواد با قطبش اسپینی کامل به دلیل کاربرد آنها در حوزه‌های گوناگون، توجه بسیاری از محققان علوم مختلف را در نقاط مختلف جهان به خود جلب کرده‌اند. گروهی از این مواد، آلیاژهای هویسلر¹ هستند که بر روی این آلیاژها به دلیل کاربردشان در قطعات اسپینترونیک مانند حافظه‌های قابل دسترس تصادفی مغناطیسی²، تزریق کننده‌های اسپینی³، پیوندگاه‌های تونلی مغناطیسی⁴، شیرهای اسپینی⁵ و قطعات مقاومت مغناطیسی عظیم⁶، تحقیقات گسترده‌ای در حال انجام است [9-1]. یکی از فاکتورهای مهم بر عملکرد قطعات اسپینترونیک بازده تزریق اسپین از یک ماده فرومغناطیس به یک نیم‌رسانا است. در واقع تمام قطعات اسپینترونیک به یک منبع اسپین نیاز دارند. فلزات مغناطیسی به دلیل قطبش اسپینی پایین برای این کار مناسب نیستند، بنابراین از مواد فرومغناطیس نیم‌فلز با قطبش اسپینی بالا در ساخت قطعات اسپینترونیک استفاده می‌شود. بنابراین آلیاژهای هویسلر فرومغناطیسی که دارای خاصیت نیم‌فلزی، دمای کوری بالا و گشتاور مغناطیسی کل صحیح باشند، می‌توانند به عنوان گزینه مناسبی در صنعت اسپینترونیک مورد استفاده قرار گیرند [10-13].

آلیاژهای تمام هویسلر را می‌توان به سه گروه تقسیم‌بندی کرد. گروه اول آلیاژهای تمام هویسلر (با فرمول کلی X_2YZ و ساختار $L2_1$)، گروه دوم آلیاژهای هویسلر معکوس (با فرمول کلی X_2YZ و ساختار XA) و گروه سوم آلیاژهای هویسلر چهارتایی (با فرمول کلی $XX'YZ$ و ساختار $L2_1$) هستند. تمام 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 عنصر غیر مغناطیسی از گروه‌های 3، 4 و 5 اصلی باشد [14-16].

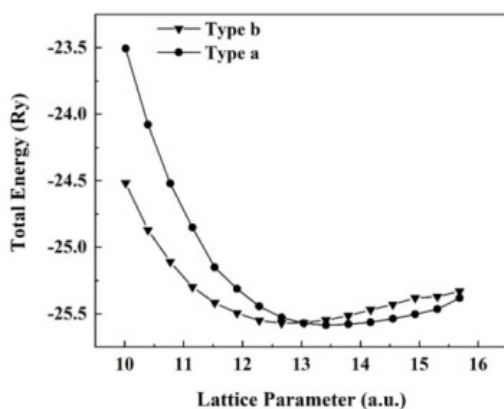
اخیراً مطالعات گسترده‌ای بر روی خاصیت نیم‌فلزی آلیاژهای هویسلر با هدف کاربرد آنها در ساخت قطعات اسپینترونیک انجام شده است. در هند، گروه تحقیقاتی ناتسان، با استفاده از کد VASP خواص ساختاری، الکترونی، مغناطیسی و الاستیکی آلیاژهای تمام هویسلر Cu_2MnZ ($Z=Pb, P, As, Bi, S, Se, Te$) را مورد مطالعه قرار دادند. آن‌ها دریافتند که تمام آلیاژهای مذکور فرومغناطیس هستند و سهم اتم Mn در گشتاور مغناطیسی کل از اتم‌های دیگر به طور قابل ملاحظه‌ای بیشتر است. همچنین با توجه به ساختار نواری نتیجه گرفتند که فقط آلیاژهای Cu_2MnZ ($Z=S, Se, Te$) خاصیت نیم‌فلزی از خود نشان می‌دهند و بقیه آلیاژها فلز هستند [17]. شاکیل و همکارانش، خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی آلیاژهای هویسلر چهارتایی $CoTcCrZ$ ($Z=Si, Gp, P$) را با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته و اعمال پتانسیل هابارد ($GGA+U$) در سه ساختار مختلف مورد مطالعه قرار دادند. آن‌ها نتیجه گرفتند که هر سه آلیاژ در یک نوع از ساختارها نیم‌فلز و در اطراف تراز فرمی دارای قطبش اسپینی کامل هستند. همچنین این آلیاژها به دلیل منفی بودن انرژی بستگی آنها، دارای پایداری دینامیکی هستند [18]. مونیر و همکارانش پاسخ الکترومغناطیسی، اپتیکی و ترموالکتریکی آلیاژ تمام هویسلر Co_2VGe را با استفاده از روش موج تخت بهبود یافته با پتانسیل کامل موجود در کد WIEN2K مورد مطالعه قرار دادند. آن‌ها با محاسبه و رسم نمودار چگالی حالت‌ها مشاهده کردند که آلیاژ مذکور نیم‌فلز است و یک گاف نواری $0/89eV$ را برای حالت اسپین پایین به دست آوردند. همچنین با بررسی خواص اپتیکی نشان دادند که قله جذبی این آلیاژ در ناحیه مرئی است و این موضوع می‌تواند کاربرد این آلیاژ را در قطعات اپتوالکترونیک فراهم سازد [19]. 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 [20]. فروزانی و همکارش خواص ساختاری، الکترونی، مغناطیسی و الاستیکی آلیاژهای هویسلر

1. Heusler Alloys
2. Magnetic Random Access Memories
3. Spin Injector
4. Magnetic Tunnel Junctions
5. Spin Valves
6. Giant Magneto-Resistance Devices

4a و 4c، و اتمهای Sc و Z(Si,Sn) به ترتیب در موقعیت‌های 4c و 4d قرار می‌گیرند (شکل 1). در ابتدا برای یافتن ساختار پایدار آلیاژهای مورد مطالعه، با تغییر موقعیت مکانی اتمها (جدول 1)، انرژی کل بر حسب ثابت شبکه برای دو ساختار XA (نوع a) و $L2_1$ (نوع b) محاسبه شد. این نمودار برای آلیاژ Ti_2ScSi (شکل 2 آورده شده است. آلیاژ Ti_2ScSn نیز از همین الگو پیروی می‌کند. با توجه به نمودار شکل 2 مشاهده می‌شود که ساختار نوع a پایدارتر از ساختار نوع b است. بنابراین، محاسبات بعدی برای تعیین خواص مختلف آلیاژهای مورد مطالعه، بر روی ساختار نوع a انجام شد.



شکل 1. ساختار بلوری برای آلیاژ هویسلر معکوس Ti_2ScSi



شکل 2. نمودار انرژی کل بر حسب ثابت شبکه برای دو ساختار نوع a و نوع b آلیاژ هویسلر معکوس Ti_2ScSi

Rh_2VX ($X=Si,Ge,Sn$) را با استفاده از محاسبات اصول اولیه و به کمک نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو بررسی نمودند. آن‌ها دریافته‌اند که آلیاژ Rh_2VSn فلز است، ولی دو آلیاژ دیگر فرومغناطیس نیم‌فلز با قطبش اسپینی کامل هستند. همچنین با بررسی خواص الاستیکی دریافته‌اند که هر سه آلیاژ به لحاظ مکانیکی پایدار هستند [21].

در این تحقیق، خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی آلیاژهای هویسلر معکوس Ti_2ScX ($X=Si,Sn$)، با استفاده از رهیافت نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار گرفته است. لازم به ذکر است که آلیاژهای مذکور تا کنون از نظر تئوری و تجربی مورد بررسی قرار نگرفته‌اند.

روش محاسبات

محاسبات ابتدا به ساکن بر اساس نظریه تابعی چگالی با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو و بر اساس روش شبه‌پتانسیل موج تخت انجام شد. در این محاسبات، برای اعمال تبادل و همبستگی میان الکترون‌های d جایگزیده، از تقریب گرادیان تعمیم یافته¹ ساخته شده توسط پدرو-بروک انزروهوف² کمک گرفته شد [22]. همچنین در محاسبات، برای تعیین برهم‌کنش میان هسته و الکترون‌های ظرفیت از شبه پتانسیل فوق نرم استفاده شد [23]. در تمامی محاسبات، برای خلاصه کردن بسط توابع موج کوهن-شم، انرژی قطع 60 ری‌دبرگ برای تابع موج و 480 ری‌دبرگ برای چگالی بار اعمال شد. تقسیم‌بندی منطقه اول بریلوئن کاهش یافته به روش منخورست-پک انجام شد و تعداد نقاط kی بهینه $10 \times 10 \times 10$ در محاسبات مورد استفاده قرار گرفت. همچنین محاسبات خودسازگار با دقت همگرایی کمتر از 10^{-5} Ry انجام شد.

یافته‌ها

سلول واحد آلیاژهای هویسلر معکوس (با نمونه اولیه Hg_2CuTi و گروه فضایی $F43m$) دارای چهار مختصه $4c(0/5, 0/5, 0/5)$ ، $4b(0/25, 0/25, 0/25)$ ، $4a(0.0.0)$ و $4d(0/75, 0/75, 0/75)$ می‌باشد که در آن اتمهای Ti در

1. Generalized Gradient Approximation
2. Perdew Burke Ernzerhof

وجود دارد اما در اسپین اکثریت² گاف انرژی وجود ندارد. این رفتاری است که برای آلیاژهای هویسلر به عنوان خاصیت نیم فلزی تعریف می‌شود؛ یعنی این آلیاژها در یک جهت اسپینی، رفتاری شبیه فلزها و در جهت اسپینی دیگر،

جدول 1. موقعیت مکانی اتم‌ها برای دو ساختار نوع a و نوع b

آلیاژهای هویسلر معکوس Ti_2ScX ($X=Si, Sn$)		
نوع b	نوع a	
(0, 0, 0)	(0, 0, 0)	Ti
(0/5, 0/5, 0/5)	(0/25, 0/25, 0/25)	Sc
(0/25, 0/25, 0/25)	(0/5, 0/5, 0/5)	Ti
(0/75, 0/75, 0/75)	(0/75, 0/75, 0/75)	X

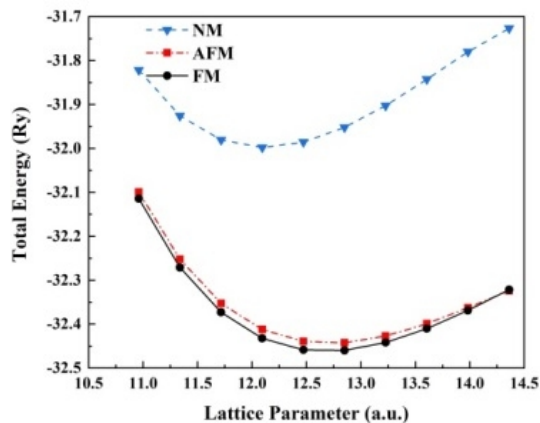
رفتاری شبیه عایق‌ها دارند. بنابراین هر دو آلیاژ مورد مطالعه نیم فلز هستند. مقدار گاف نیم فلزی برای آلیاژ Ti_2ScSi ، 0/35 الکترون ولت و برای آلیاژ Ti_2ScSn ، 0/11 الکترون ولت است.

برای بررسی بهتر، ساختار نواری آلیاژهای Ti_2ScX ($X=Si, Sn$) در ثابت شبکه تعادلی و در راستای مسیرهای پرتقارن در ناحیه اول بریلوئن در شکل 5 نشان داده شده است. در این نمودارها، اسپین اقلیت و اکثریت به صورت جداگانه نشان داده شده‌اند. با توجه به نمودارهای چگالی حالت‌ها، انتظار می‌رود که در ساختار نواری نیز، در اسپین اقلیت گاف انرژی مشاهده شود که این چنین است. برای نمایش واضح تر ساختار نواری آلیاژ Ti_2ScSn ، تصویر دقیق تر آن در کادری جداگانه نشان داده شده است. با توجه به محاسبات انجام شده، گاف انرژی که متفاوت از گاف نیم فلزی است، برای هر دو آلیاژ Ti_2ScSi و Ti_2ScSn به ترتیب 1/41 و 0/99 الکترون ولت است. به نظر می‌رسد که با افزایش شعاع اتمی عنصر غیرمغناطیسی $X(Si, Sn)$ خاصیت نیم‌فلزی آلیاژ ضعیف تر می‌شود. بنابراین می‌توان گفت که آلیاژ Ti_2ScSi به دلیل گاف نواری بزرگ، یک نیم‌فلز ایده‌آل است. (این جمله حذف شد)

در بررسی دقیق تر منشاء خاصیت نیم‌فلزی، چگالی حالت‌های جزئی آلیاژهای مذکور محاسبه و نمودار آنها در

برای تعیین خواص حالت پایه آلیاژهای Ti_2ScX ($X=Si, Sn$) انرژی کل بر حسب ثابت شبکه برای سه حالت غیرمغناطیسی، فرومغناطیس و آنتی فرومغناطیس محاسبه و پس از برازش داده‌ها با معادله حالت مورناگان، نمودار آنها رسم شد.

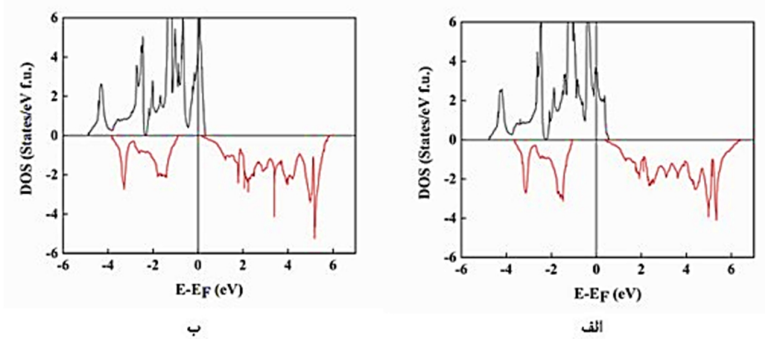
نتیجه این بررسی برای آلیاژ Ti_2ScSi در شکل 3 نمایش داده شده است. آلیاژ Ti_2ScSn نیز رفتار مشابهی دارد. با توجه به نمودار مشاهده می‌شود که حالت فرومغناطیس آلیاژهای تحت مطالعه، دارای انرژی پایین تری نسبت به دو حالت دیگر است. این آلیاژها به دلیل موازی بودن گشتاورهای مغناطیسی اتم‌های Ti و Sc دارای نظم فرومغناطیس هستند. بنابراین می‌توان گفت که برهم‌کنش تبدیلی میان الکترون‌های ظرفیت اتم‌های مغناطیسی موجود در آلیاژ، نقش مهمی در تعیین نظم مغناطیسی بازی می‌کند.



شکل 3. نمودار انرژی بر حسب ثابت شبکه آلیاژ هویسلر معکوس Ti_2ScSi در سه حالت غیرمغناطیس (NM)، فرومغناطیس (FM) و آنتی فرومغناطیس (AFM)

در ادامه با محاسبه چگالی کل حالت‌ها، ساختار الکترونی آلیاژهای هویسلر معکوس Ti_2ScX ($X=Si, Sn$) مورد بررسی قرار گرفت که نتایج این محاسبات در شکل 4 نشان داده شده است.

با توجه به شکل 4 مشاهده می‌شود که برای هر دو آلیاژ Ti_2ScSi و Ti_2ScSn در اسپین اقلیت¹ گاف انرژی

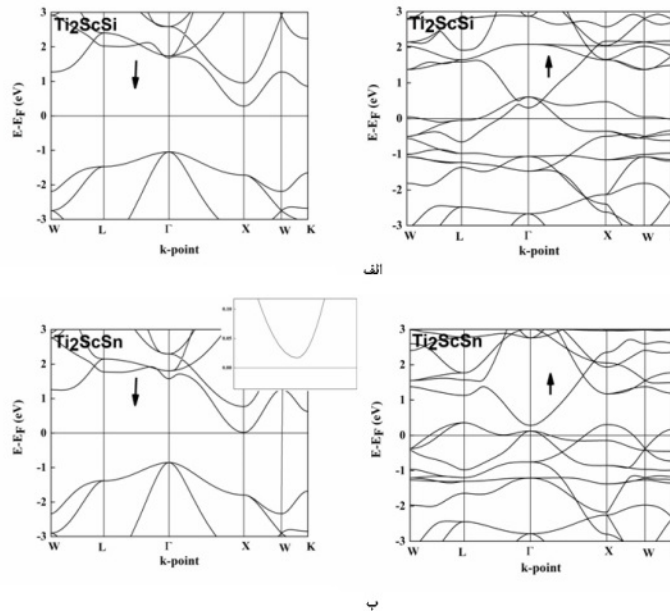


شکل 4. چگالی حالت‌های الکترونی کل آلیاژهای هویسلر معکوس الف- Ti_2ScSi و ب- Ti_2ScSn . مقادیر منفی نشان دهنده اسپین اقلیت است.

معکوس Ti_2ScX ($X=Si,Sn$) و همچنین گشتاور مغناطیسی جزئی مربوط به اتم‌های تشکیل دهنده آنها آورده شده است. مقادیر موجود در جدول نشان می‌دهند که گشتاور مغناطیسی کل برای آلیاژ Ti_2ScSi عدد صحیح $6/99 \mu_B/f.u.$ و برای آلیاژ Ti_2ScSn عدد $7/00 \mu_B/f.u.$ است.

نتایج حاصل از محاسبات، تطابق خوبی را با قانون اسلاتر- پائولی¹ نشان می‌دهد. بر طبق این قانون، رابطه

شکل 6 نشان داده شده است. لازم به ذکر است که فقط اربیتال‌های با چگالی حالت‌های الکترونی بالا در نظر گرفته شده‌اند. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که در هر دو آلیاژ، در نزدیکی تراز فرمی سهم اربیتال‌های e_g اتم Ti و t_{2g} اتم Sc بیشتر از سهم بقیه اربیتال‌ها است. همچنین در هر دو آلیاژ، یک هیبریداسیون قوی بین اربیتال‌های d اتم Ti و اربیتال‌های p اتم‌های $X(Si,Sn)$ وجود دارد. در جدول 2 گشتاور مغناطیسی کل آلیاژهای هویسلر



شکل 5. ساختار نواری آلیاژ هویسلر معکوس الف- Ti_2ScSi و ب- Ti_2ScSn . علامت \uparrow نشان دهنده اسپین اکثریت و علامت \downarrow نشان دهنده اسپین اقلیت است.

میان گشتاور مغناطیسی کل آلیاژ و تعداد الکترون‌های ظرفیت به صورت $\mu_t = Z_t - 8$ است که در این رابطه Z_t تعداد الکترون‌های ظرفیت و μ_t گشتاور مغناطیسی کل می‌باشد [24 و 25]. از آن‌جا که تعداد الکترون‌های ظرفیت آلیاژهای Ti_2ScX ($X=Si, Sn$)، 15 عدد است، بنابراین گشتاور مغناطیسی کل از این رابطه $7\mu_B/f.u.$ به دست می‌آید که با نتایج حاصل از محاسبات تطابق خوبی دارد. لازم به ذکر است که در هر دو آلیاژ، اتم‌های Ti به دلیل داشتن اوربیتال‌های d، بیشترین سهم را در گشتاور مغناطیسی کل آلیاژ دارند.

جدول 2. گشتاور مغناطیسی کل آلیاژهای Ti_2ScX و

گشتاور مغناطیسی اتم‌های تشکیل دهنده

Alloy	μ_a ($\mu_B/atom$)			μ_t ($\mu_B/f.u.$)
	Ti	Sc	X	
Ti_2ScSi	2/71	1/79	-0/21	7/00
Ti_2ScSn	2/81	1/88	-0/51	6/99

یکی دیگر از پارامترهای مهم آلیاژهای هویسلر که نشان‌دهنده پایداری و کاربردی بودن آن‌ها می‌باشد، دمای کوری است. در واقع اگر دمای کوری آلیاژی بالا باشد، می‌توان نتیجه گرفت که این آلیاژ در دمای اتاق پایداری خوبی دارد و قابلیت ساخت و استفاده در صنعت اسپینترونیک را دارد. با استفاده از تقریب میدان میانگین¹ [26]، دمای کوری برای آلیاژهای هویسلر معکوس Ti_2ScSi و Ti_2ScSn تخمین زده شد که به ترتیب مقادیر 954 و 1100 کلوین به دست آمد که مقادیر بسیار خوبی برای دمای کوری محسوب می‌شوند و پایداری آلیاژ را در دمای اتاق تضمین می‌کنند.

برای بررسی خواص اپتیکی آلیاژهای Ti_2ScSi و Ti_2ScSn تابع دی‌الکتریک، ضریب شکست و ضریب خاموشی را بررسی می‌کنیم. تابع دی‌الکتریک $\epsilon(\omega)$ شامل دو قسمت حقیقی $\epsilon_1(\omega)$ و موهومی $\epsilon_2(\omega)$ است که به صورت مجموع این دو قسمت نوشته می‌شود [27]

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + \epsilon_2(\omega) \quad (1)$$

روابط مربوط به ضریب شکست $n(\omega)$ و ضریب خاموشی² $k(\omega)$ به صورت زیر هستند

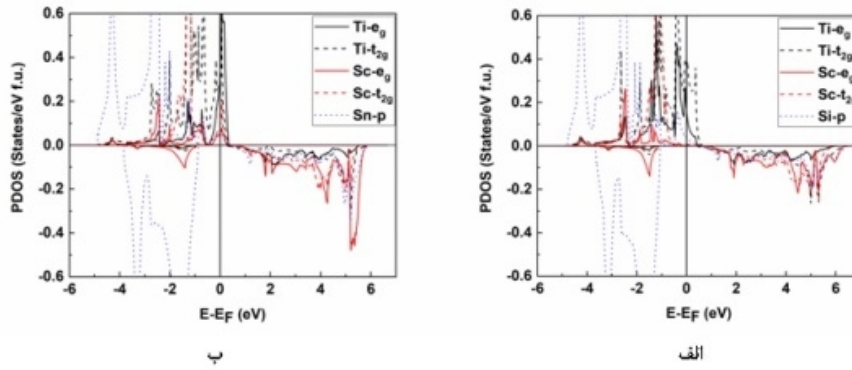
$$n(\omega) = \frac{\hat{\epsilon} \sqrt{e_1^2(\omega) + e_2^2(\omega)} + e_1(\omega) \hat{U}}{2 \hat{U}} \quad (2)$$

$$k(\omega) = \frac{\hat{\epsilon} \sqrt{e_1^2(\omega) + e_2^2(\omega)} - e_1(\omega) \hat{U}}{2 \hat{U}} \quad (3)$$

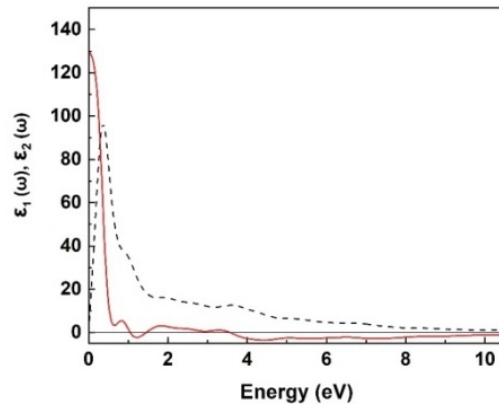
قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک برای آلیاژ Ti_2ScSi در شکل 7 و همچنین ضریب شکست و ضریب خاموشی برای این ترکیب در شکل 8 نشان داده شده‌اند. آلیاژ Ti_2ScSn نیز از همین الگو پیروی می‌کند، لذا برای آن نمودار جداگانه‌ای آورده نشده است. با توجه به نمودارها می‌توان تشابهی در آنها مشاهده کرد. قله‌ها و دره‌های قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک بسیار شبیه به ضریب شکست است و این دو کردار رفتار مشابهی دارند. همچنین کردار مربوط به قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک، مشابه ضریب خاموشی است که در صورت دقت در روابط ریاضی مربوط به آنها، این تشابه قابل توجیه است. در شکل 7 در قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک، گذارهای بین‌نواری³ و درون‌نواری⁴ قابل مشاهده است که در واقع همان قله‌های ریز و درشتی هستند که در شکل دیده می‌شوند. طبیعتاً قله‌های بلندتر نشان دهنده گذارهای بین‌نواری هستند، از جمله قله بلندی که در ابتدای شکل دیده می‌شود. قله‌های کوتاه‌تر نشان دهنده گذارهای درون‌نواری هستند که بیشتر قله‌ها از این نوع هستند.

2. Extinction Coefficient
3. Intraband Transition
4. Interband Transition

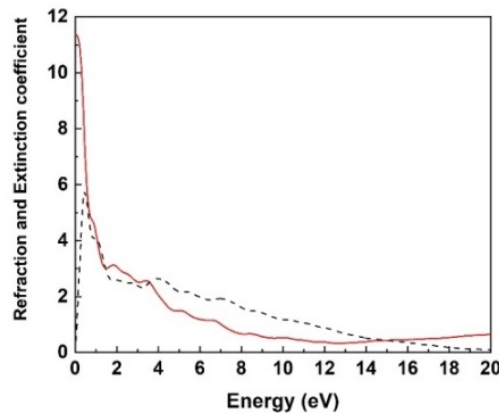
1. Mean Field Approximation



شکل 6. چگالی حالت‌های الکترونی جزئی آلیاژهای هویسلر معکوس الف- Ti_2ScSi و ب- Ti_2ScSn . مقادیر منفی نشان دهنده اسپین اقلیت است.



شکل 7. قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک برای آلیاژ هویسلر Ti_2ScSi . خط صاف قسمت حقیقی و خط چین قسمت موهومی است.



شکل 8. ضریب شکست و ضریب خاموشی برای آلیاژ هویسلر Ti_2ScSi . خط صاف ضریب شکست و خط چین ضریب خاموشی است.

ابتدا به ساکن در چارچوب نظریه تابعی چگالی مطالعه شد. نتایج حاصل از بررسی خواص الکترونی و مغناطیسی نشان می‌دهند که هر دو آلیاژ فرومغناطیس نیم‌فلز هستند و گشتاور مغناطیسی کل آن‌ها با قانون اسلاتر-پائولی تطابق خوبی دارد. همچنین با محاسبه دمای کوری مشخص شد که این دو آلیاژ دمای کوری بالایی دارند و در دمای اتاق می‌توانند پایداری خوبی داشته باشند. بنابراین این دو آلیاژ می‌توانند گزینه‌های مناسبی برای کاربرد در ساخت قطعات اسپینترونیک باشند. با بررسی خواص اپتیکی آلیاژهای مذکور مشاهده شد که آنها در بعضی از انرژی‌ها دارای جذب بالایی هستند و می‌توانند به عنوان جاذب امواج الکترومغناطیسی در کاربردهای عملی مورد استفاده قرار گیرند.

در شکل 8 ضریب خاموشی به صورت خط چین نشان داده شده است که قله‌ها در این شکل مفهومی متفاوت از شکل 7 دارند. از آنجا که ضریب خاموشی معیاری از جذب نور در محیط است، لذا هر جا قله بلندی دیده شود، نشان دهنده جذب بالا در آن انرژی است. بلندترین قله برای ضریب خاموشی در انرژی حدود 0/5 الکترون ولت وجود دارد که بیان کننده جذب بالا در این انرژی است. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که آلیاژهای هویسلر Ti_2ScSi و Ti_2ScSn می‌توانند گزینه‌ای برای ساخت ابزار جذب نور باشند. آلیاژهای مذکور این پتانسیل را دارند که از نظر خواص اپتیکی و در شرایط متفاوت مورد مطالعه بیشتر قرار گیرند.

بحث و نتیجه‌گیری

خواص الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی آلیاژهای هویسلر معکوس Ti_2ScX ($X=Si,Sn$) با استفاده از محاسبات

References

- [1] Moradi M, Taheri N, Rostami, M. Structural, electronic, magnetic and vibrational properties of half-Heusler $NaZrZ$ ($Z =P, As, Sb$) compounds. *Physics Letter A*. 2018 Oct 18; 382(41): 3004-11.
- [2] Asfour I, Rached H, Benalia S, Rached D. Investigation of electronic structure, magnetic properties and thermal properties of the new half-metallic ferromagnetic full-Heusler alloys $Cr_2GdSi_{1-x}Gex$: An ab-initio study. *Journal of Alloys and Compounds*. 2016 Aug 15; 676:440-51.
- [3] 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. *Science advances*. 2017 Apr 14; 3(4):e1602241.
- [4] Forozani G, Karami F, Moradi M. Structural, Electronic, Magnetic, and Optical Properties of Ir_2ScZ ($Z=Si,Ge,Sn$) Full-Heusler Compounds: A First-Principles Study. *Journal of Electronic Materials*. 2020 Oct 49(10):5947-56.
- [5] Rani D, Suresh KG, Yadav AK, Jha SN, Bhattacharyya D, Varma MR, Alam A. Structural, electronic, magnetic, and transport properties of the equiatomic quaternary Heusler alloy $CoRhMnGe$: Theory and experiment. *Physical Review B*. 2017 Nov 6; 96(18):184404.
- [6] Zhou T, Feng Y, Chen X, Yuan H, Chen H. Half-metallicity and magnetism of $Ti_2Ni_{1-x}Co_xAl_{1-y}Si_y$ Heusler alloys. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2017 Feb 1; 423:306-13.
- [7] Li S, Cheng C, Meng K, Chen C. Excitation fluence dependence of spin-wave dynamics and intrinsic Gilbert damping in epitaxial Co_2FeAl film. *Japanese Journal of Applied Physics*. 2019 Mar 27; 58(4):040903.
- [8] Ribeiro RA, Camilo Jr A, De Lazaro SR. Electronic structure and mag-

- netism of new ilmenite compounds for spintronic devices: FeBO_3 (B=Ti, Hf, Zr, Si, Ge, Sn). *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2015 Nov 15; 394:463-9.
- [9] Zutic I, Fabian J, Sarma SD. Spintronics: Fundamentals and applications. *Reviews of modern physics*. 2004 Apr 23;76(2):323.
- [10] Khandy SA, Gupta DC. Electronic structure, magnetism and thermoelectricity in layered perovskites: $\text{Sr}_2\text{SnMnO}_6$ and $\text{Sr}_2\text{SnFeO}_6$. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2017 Nov 1; 441:166-73.
- [11] Khandy SA, Islam I, Gupta DC, Laref A. Full Heusler alloys (Co_2TaSi , Co_2TaGe) as potential spintronic materials with tunable band profiles. *Journal of Solid State Chemistry*. 2019 Feb 1; 270:173-9.
- [12] Rortais F, Vergnaud C, Marty A, Vila L, Attane JP, Widiez J, Zucchetti C, Bottegoni F, Jaffres H, George JM, Jamet M. Non-local electrical spin injection and detection in germanium at room temperature. *Applied Physics Letters*. 2017 Oct 30;111(18).
- [13] Forozani G, Abadi AA, Baizae SM, Gharaati A. Structural, electronic and magnetic properties of CoZrIrSi quaternary Heusler alloy: First-principles study. *Journal of Alloys and Compounds*. 2020 Jan 30; 815:152449.
- [14] Wen Z, Sukegawa H, Mitani S, Inomata K. Tunnel magnetoresistance in textured $\text{Co}_2\text{FeAl/MgO/CoFe}$ magnetic tunnel junctions on a Si/SiO_2 amorphous substrate. *Applied Physics Letters*. 2011 May 9; 98(19):192505.
- [15] Kang XH, Zhang JM. The structural, electronic and magnetic properties of a novel quaternary Heusler alloy TiZrCoSn . *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 2017 Jun 1; 105:9-15.
- [16] Amirabadizadeh A, Abbas Emami SA, Nourbakhsh Z, Alavi Sadr SM, Baizae SM. The effect of substitution of As for Ga on the topological phase and structural, electronic and magnetic properties of Mn_2ZrGa Heusler alloy. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*. 2017 Apr 30:1035-49.
- [17] Namboodiri PN, Natesan B. First principle calculation of structural, electronic, magnetic, and elastic properties of ferromagnetic Cu_2MnZ (Z= Pb, P, As, Bi, S, Se, and Te) Heusler alloys. *Physica B: Condensed Matter*. 2023 Mar 15; 653:414673.
- [18] Zafar M, Sadia H, Rizwan M, Arshad H, Ahmad S, Gillani SS, Bao CC, Wei XP, Shakil M. Theoretical study of the structural, electronic and magnetic properties of equiatomic quaternary CoTcCrZ (Z= Si, Ge, P) Heusler alloys. *Chinese Journal of Physics*. 2020 Apr 1; 64:123-37.
- [19] Ain Q, Jbara AS, Rizvi SZ, Shaheen M, Munir J. Electromagnetic, optical and thermoelectric response of full-Heusler Co_2VGe alloy for spintronic and thermoelectric applications: DFT+SOC study. *Physica B: Condensed Matter*. 2023 May 15; 657:414820.
- [20] Alavisadr S. M, Dadigiv Z. The Study of the Electronic Structure and Magnetic Properties of Co_2TaGa Heusler Compound. *BiQuarterly Journal of Optoelectronic*. 2021 2(9):19-26.
- [21] Forozani G, Rasouli MS. First-Principles Study of the Structural, Phase Stability, Electronic, Magnetic, and Elastic Properties of Heusler Alloys VXRh_2 (X= Si, Ge, and Sn). *physica status solidi (b)*. 2023 Jun 260(6):2200557.
- [22] Perdew JP, Burke K, Ernzerhof M. Perdew, burke, and ernzerhof reply. *Physical Review Letters*. 1998 Jan 26; 80(4):891.
- [23] Vanderbilt D. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism. *Physical review B*. 1990 Apr 15; 41(11):7892.

- [24] Slater JC. The ferromagnetism of nickel. II. Temperature effects. *Physical Review*. 1936 Jun 15;49(12):931.
- [25] Sato K, Dederichs PH, Katayama-Yoshida H, Kudrnovsky J. Exchange interactions in diluted magnetic semiconductors. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2004 Nov 19;16(48):S5491.
- [26] Pauling L. The nature of the interatomic forces in metals. *Physical Review*. 1938 Dec 1;54(11):899.
- [27] Delin A, Eriksson O, Ahuja R, Johansson B, Brooks MS, Gasche T, Auluck S, Wills JM. Optical properties of the group-IVB refractory metal compounds. *Physical Review B*. 1996 Jul 15; 54(3):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>)