

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

УДК 537.622

ВЛИЯНИЕ ОБМЕННО-КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ НА СТАБИЛИЗАЦИЮ ПОЛУМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПЛАВОВ Mn_2VAl и Mn_2VSi

© 2023 г. В. Д. Бучельников^{а, *}, Д. Р. Байгутлин^а, В. В. Соколовский^а, О. Н. Мирошкина^б

^аЧелябинский государственный университет, ул. Бр. Кашириных, 129, Челябинск, 454001 Россия

^бУниверситет Дуйсбурга-Эссена, ул. Лотарштрассе, 1-21, Дуйсбург, 47057 Германия

*e-mail: buche@csu.ru

Поступила в редакцию 21.09.2022 г.

После доработки 02.11.2022 г.

Принята к публикации 05.12.2022 г.

Представлены теоретические исследования роли обменно-корреляционных эффектов в предсказании полуметаллических свойств ферромагнитных сплавов Гейслера Mn_2VAl и Mn_2VSi , представляющих особый интерес в спинтронике. Электронные, магнитные и структурные свойства изучены в рамках теории функционала плотности. Показано, что учет дополнительных корреляционных эффектов позволяет обнаружить два состояния, близких по энергии, но с различающимися магнитными моментами. Состояние с низкой намагниченностью демонстрирует полуметаллический характер со 100%-ной спиновой поляризацией, тогда как состояние с высокой намагниченностью обладает металлическим характером.

Ключевые слова: первопринципные вычисления, полуметаллический ферромагнетик, обменно-корреляционный функционал, GGA, мета-GGA

DOI: 10.31857/S0015323022601301, **EDN:** HKPCLY

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы все больший интерес мирового научного сообщества направлен на исследования материалов, применимых в спинтронике — одной из современных областей электроники. В основе спинтроники лежит возможность управления спиновыми степенями свободы носителей заряда в ферро-, ферри- и антиферромагнитных полуметаллах, влекущая за собой протекание спин-поляризованного тока и, как следствие, спин-зависимых физических эффектов (магнитосопротивления и эффекта переноса спина). Главной особенностью магнитоупорядоченных полуметаллических сплавов является наличие энергетической щели на уровне Ферми для одного из электронных состояний (“спин вверх” или “спин вниз”) и ее отсутствие в другом электронном состоянии. Такая комбинация обеспечивает 100%-ную спиновую поляризацию носителей заряда в одном из электронных состояний, и в результате они могут проявлять металлический характер в одном спиновом направлении (канале) и полупроводниковый — в другом.

Яркими представителями материалов, перспективных для применения в устройствах спинтроники, являются полуметаллические ферро- и

ферромагнетики и спиновые бесщелевые полупроводники на основе сплавов Гейслера [1–5]. Такие сплавы демонстрируют стабильную полуметаллическость, высокую температуру Кюри T_C , совместимость кристаллических структур для создания гетероструктур, предсказуемость их физических свойств простым эмпирическим соотношением, таким как правило Слейтера–Полинга, или степенью атомного беспорядка и силой обменных взаимодействий. Кроме того, сплавы Гейслера являются тройными интерметаллическими соединениями, и комбинация входящих в состав элементов, а также их процентное соотношение позволяют добиться тех или иных желаемых свойств уже известных и новых композиций.

Наиболее известным классом ферромагнитных (ФиМ) сплавов Гейслера, демонстрирующих полуметаллические свойства, являются соединения на основе Mn (Mn_2YZ , где $Y = V, Cr, Fe, Co, Ni$ и $Z = Al, Ga, Si, Ge, Sn, In$ [6–13]). Они обладают низким магнитным моментом (ввиду спиновой компенсации атомов Mn) и высокой температурой Кюри, сравнимой с T_C полуметаллических ферромагнетиков, что в совокупности позволяет снизить паразитные поля. Среди сплавов Mn_2YZ первым полуметаллическим ферромагнетиком,

теоретически предсказанным в рамках расчетов зонной структуры [14], был Mn_2VAl . Для данного сплава обнаружена энергетическая щель на уровне Ферми для канала “спин вверх” в противоположность полуметаллическим ферромагнитным (ФМ) сплавам Гейслера с энергетической щелью на канале “спин вниз”. Данная работа показала, что такое поведение можно предсказать из правила Слейтера–Полинга [15] в случае, когда из него следует отрицательное значение магнитного момента (данное правило связывает магнитный момент m и число валентных электронов N_v в полуметаллических соединениях Гейслера как $m = N_v - 24$). Галанакис и др. [16] рассмотрели влияние легирования Co и Fe на полуметаллические свойства сплавов Mn_2VAl и Mn_2VSi . Авторы пришли к выводу, что соединения с добавкой Fe становятся немагнитными полуметаллами, тогда как частичное замещение атомов Mn атомами Co приводит к проявлению полуметаллического антиферромагнитного характера. В последнем случае при нулевой температуре достигается полная спиновая компенсация, обусловленная антипараллельным упорядочением магнитных моментов Mn и Co. Рост температуры приводит к возникновению небольшого магнитного момента из-за формирования неэквивалентных магнитных подрешеток [17]. Интерес мирового научного сообщества также вызывают соединения Mn_2CoZ ($Z = \text{Al, Si, Ge, Sn, Sb}$) [18–20], Mn_2FeZ ($Z = \text{Al, Sb}$) [8] и Mn_2CrZ ($Z = \text{Al, Sb}$) [6] вследствие их ярко выраженных полуметаллических свойств.

В настоящее время в литературе можно найти достаточно большое количество исследований, посвященных изучению полуметаллического характера сплавов Mn_2YZ в рамках первопринципных расчетов зонной структуры. Однако до сих пор остаются открытыми вопросы влияния обменно-корреляционных эффектов на предсказание электронной структуры и полуметаллических свойств таких материалов. На сегодняшний день самым распространенным методом описания обменно-корреляционных эффектов остается приближение обобщенного градиента (generalized gradient approximation, GGA). Однако в случае полуметаллических сплавов данное приближение не позволяет получить энергетическую щель в канале “спин вверх” или “спин вниз” на уровне Ферми, ответственную за полуметаллическость. Предполагается, что учёт дополнительных взаимодействий в рамках аппроксимаций более новых поколений позволит решить эту проблему и повысит точность вычислений. В связи с этим в данной работе основное внимание уделено выявлению роли обменно-корреляционных эффектов при описании электронной структуры, полуметаллических, магнитных и структурных свойств сплавов Mn_2VAl и Mn_2VSi .

ДЕТАЛИ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Исследования выполнены в рамках теории функционала плотности с помощью метода связанных проекционных плоских волн (PAW), реализованного в программном пакете VASP [21, 22]. Учет обменно-корреляционных эффектов осуществлен в рамках приближения обобщенного градиента (GGA), учитывающего градиент электронной плотности (функционал PBE (Perdew, Burke, Ernzerhof) [23]), и мета-обобщенного градиента (мета-GGA), дополнительно учитывающего зависимость от плотности кинетической энергии. Данное приближение реализовано в недавно разработанном функционале SCAN (strongly constrained and appropriately normed) [24].

Расчеты выполнены для элементарной ячейки, состоящей из 16 атомов и позволяющей смоделировать два типа кристаллических структур – прямую и обратную гейслеровские решетки. В прямой $L2_1$ -решетке (рис. 1а) атомы Mn располагаются в эквивалентных позициях $8c$ ($1/4, 1/4, 1/4$) и $(3/4, 3/4, 3/4)$, в то время как атомы Al (Si) и V занимают $4a$ ($0, 0, 0$) и $4b$ ($1/2, 1/2, 1/2$) позиции Вайкоффа. В обратной ХА гейслеровской структуре (рис. 1б) атомы Mn размещены в неэквивалентных позициях $4a$ ($0, 0, 0$) и $4c$ ($1/4, 1/4, 1/4$), тогда как V и Al (Si) – в позициях $4b$ ($1/2, 1/2, 1/2$) и $4d$ ($3/4, 3/4, 3/4$) соответственно.

Для PAW-потенциалов использованы следующие конфигурации валентных электронов: $3s^23p^64s^23d^5$ для Mn, $3s^23p^64s^23d^3$ для V, $3s^23p^1$ для Al и $3s^23p^2$ для Si. Энергия обрезания плоских волн составляла 450 эВ. Генерация сетки k -точек в обратном пространстве выполнена по схеме Монкхорста–Пака. Геометрическая оптимизация кристаллической структуры выполнена на сетке $8 \times 8 \times 8$ k -точек, тогда как расчеты плотностей электронных состояний (densities of states, DOS) и зонной структуры – на сетке $17 \times 17 \times 17$ k -точек. Критерии сходимости полной энергии и остаточных атомных сил выбраны 10^{-6} эВ и 10^{-2} эВ/Å, соответственно. При оптимизации проведена полная релаксация объема кристалла и найден минимум энергии, соответствующий равновесному параметру решетки. Крайние значения, используемые при релаксации, взяты исходя из того, что для хорошо изученных сплавов Гейслера на основе $3d$ -переходных металлов значение параметра решетки находится в диапазоне от ≈ 5.6 Å до ≈ 6.4 Å [6–13]. После этого параметр решетки дополнительно уточнен с помощью релаксации структуры, считая степенями свободы позиции ионов, объем и форму ячейки с помощью алгоритма сопряженного градиента.

В качестве магнитных конфигураций рассмотрены ФМ и антиферромагнитное (АФМ) упорядочения. В ФМ состоянии магнитные моменты

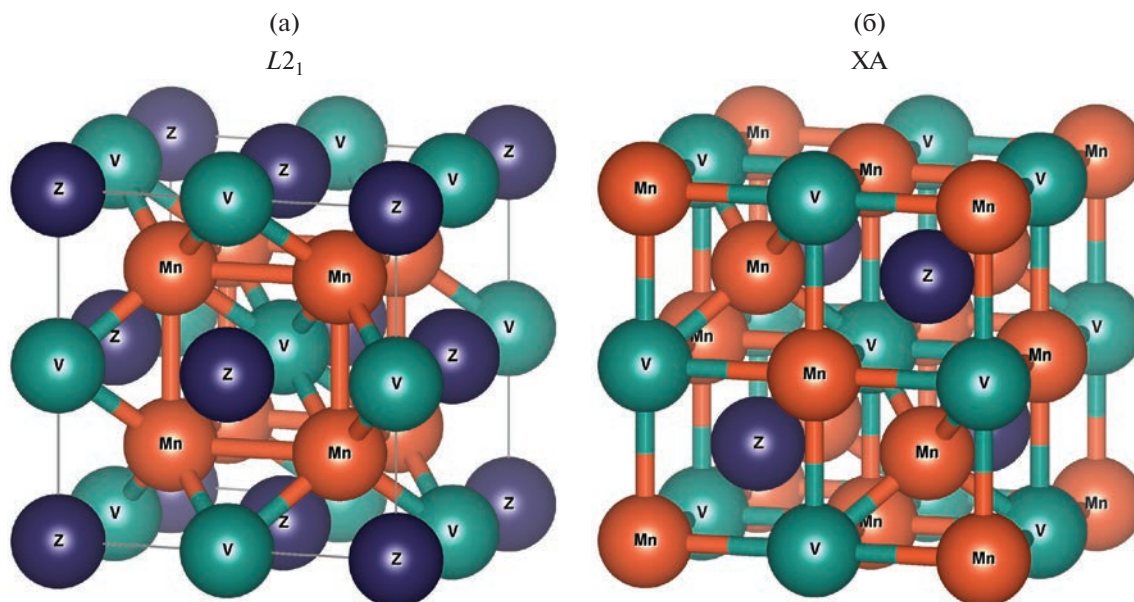


Рис. 1. Два типа кристаллических решеток сплавов Гейслера Mn_2VZ : (а) прямая $L2_1$ (пространственная группа $Fm\bar{3}m$, № 225, прототип: Cu_2MnAl) и (б) обратная ХА (пространственная группа $F43m$, № 216, прототип: Hg_2TiCu) структуры.

атомов Mn параллельны друг другу, тогда как магнитные моменты атомов V ориентированы антипараллельно им. В случае АФМ состояния магнитные моменты атомов Mn антипараллельны друг другу в шахматном порядке, тогда как магнитный момент атомов V равен нулю.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Известно, что сплавы Гейслера на основе Mn (Mn_2YZ) могут кристаллизоваться в прямую $L2_1$ или обратную ХА кубические структуры в зависимости от соотношения между зарядовыми числами X и Y элементов. Конкуренция между указанными типами кристаллических структур может приводить к возникновению АФМ взаимодействия атомов Mn и, следовательно, ФМ или АФМ упорядочению. В связи с этим первый этап исследований связан с выполнением геометрической оптимизации обеих кристаллических структур с учетом различного магнитного упорядочения.

На рис. 2 представлены результаты расчетов полной энергии рассматриваемых структур относительно структуры с наименьшей энергией в зависимости от параметра решетки сплавов Mn_2VAl и Mn_2VSi , выполненных с использованием PBE и SCAN функционалов. Видно, что оба функционала предсказывают $L2_1$ структуру с ФМ упорядочением как энергетически наиболее выгодную для Mn_2VAl и Mn_2VSi . Стоит отметить, что предпочтительность прямой структуры является типичным результатом для сплавов Гейслера X_2YZ , у

которых валентность X элемента больше валентности Y элемента.

В качестве различий PBE и SCAN в описании свойств основного состояния можно отметить, что разница энергий ΔE между прямой и обратной структурами меньше в случае расчетов с помощью SCAN. Однако даже наименьшая $\Delta E = E^{AFM} - E^{FM} \approx 35$ мэВ/атом для Mn_2VSi представляется довольно большой, и обратная решетка с АФМ упорядочением не может рассматриваться в качестве конкурентной для ФМ $L2_1$.

В связи с этим остановимся подробнее на рассмотрении кривых $\Delta E(a)$ наиболее выгодной конфигурации ФМ $L2_1$. В случае PBE расчетов, на кривой $\Delta E^{FM}(a)$ наблюдается один глобальный минимум при ≈ 5.8 и 5.65 Å для Mn_2VAl и Mn_2VSi , (рис. 2а, 2б). Полученные равновесные параметры решеток находятся в хорошем согласии с экспериментальными и теоретическими работами, результаты которых для сравнения приведены в табл. 1 (во всех работах, цитируемых в табл. 1, тип решетки установлен как $L2_1$). Однако стоит отметить, что расширение решетки приводит к небольшому изгибу кривой $\Delta E(a)$ для Mn_2VAl при $a \approx 6.15$ Å, что связано с появлением фазы с высоким магнитным моментом, как будет показано позже. Аналогичный изгиб наблюдается и для Mn_2VSi при большем параметре решетки (не показан на рис. 2б в выбранном масштабе).

Дополнительный учет корреляционных эффектов в рамках SCAN функционала приводит к принципиально отличному поведению полной

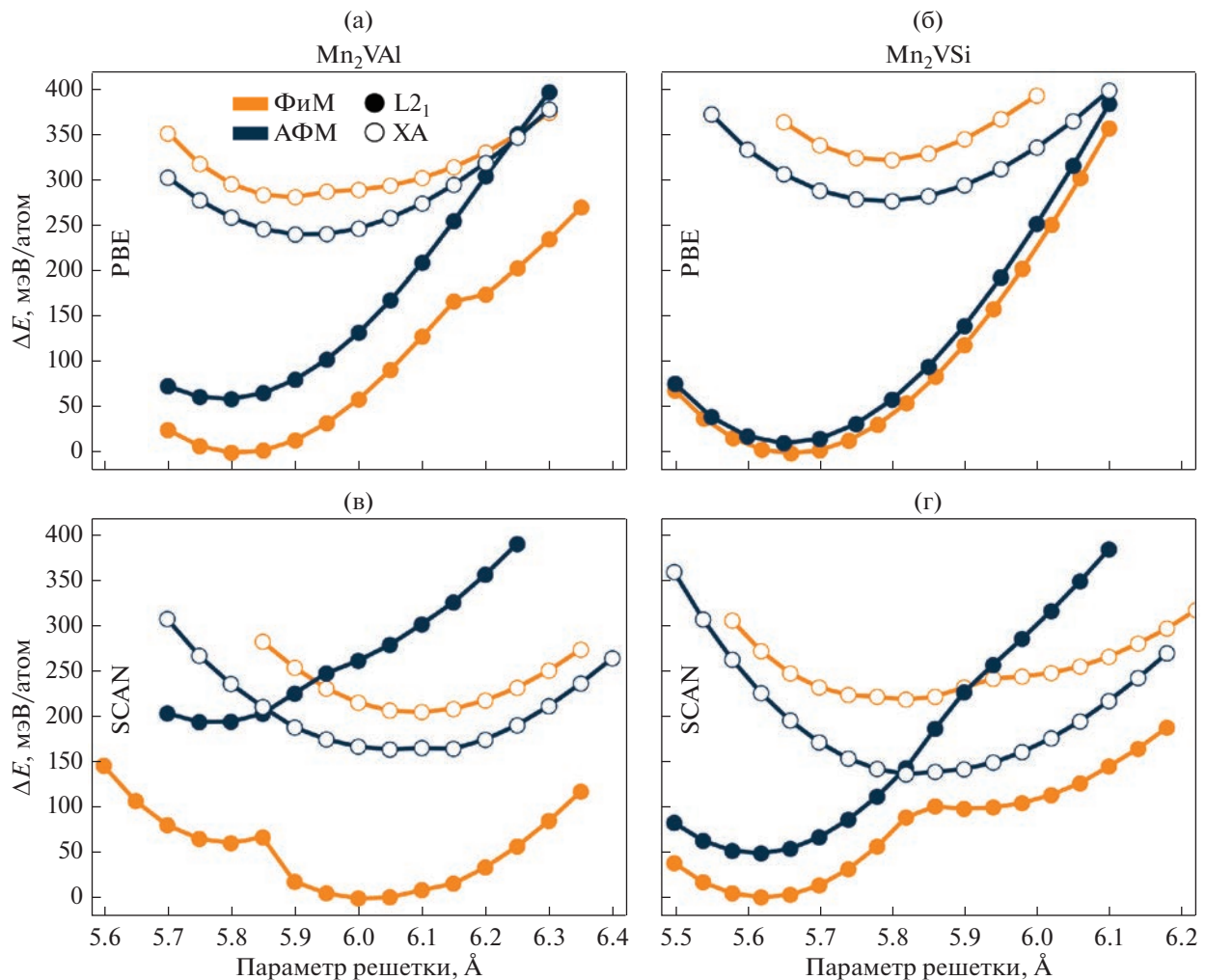


Рис. 2. Разность полных энергий (ΔE) для Mn_2VAI и Mn_2VSi как функции параметра решетки, рассчитанных с помощью (а, б) PBE и (в, г) SCAN функционалов. Для каждого случая ΔE построена по отношению к фазе с наименьшей энергией. Результаты представлены для кубических структур L_{21} и XA типа с ФМ и АФМ упорядочением.

энергии сплавов. SCAN кривые $\Delta E^{\text{ФМ}}(a)$ для обоих сплавов характеризуются двумя ярко выраженными минимумами. Для сплава Mn_2VSi глобальный энергетический минимум наблюдается при том же значении постоянной решетки $a \approx 5.65 \text{ \AA}$, что и в случае PBE, тогда как локальный минимум соответствует большему значению a^{SCAN} (рис. 2г). Напротив, для Mn_2VAI глобальный минимум обнаружен при параметре решетки $a^{\text{SCAN}} \approx 6 \text{ \AA}$, большем, чем соответствующий левому (локальному) минимуму кривой ΔE и полученный с помощью PBE $a \approx 5.8 \text{ \AA}$. Для обоих сплавов разница энергий между глобальным и локальным минимумами не превышает 100 мВ/атом, и поиск возможных способов уменьшения этой разницы может лечь в основу дальнейших исследований. Так как минимум с небольшим магнитным моментом соответствует полуметаллическому состоянию, а минимум с высоким магнитным моментом — метал-

лическому, это позволяет создать устройство с переключаемым давлением/магнитным полем состоянием полуметалл—металл, что можно использовать, например, для создания материальной базы троичных компьютеров или диодов с управляемой поляризацией. Для этого необходимо реализовать ситуацию (например, с помощью внешних напряжений, магнитного поля или легирования), когда в сплаве оба минимума сравниваются по энергии. Предполагается, что в таком случае можно получить образцы с различным характером “металличности” и применять их для переключения с полуметаллического на металлическое состояние и наоборот.

Рассмотрим теперь поведение намагниченности ФМ L_{21} структуры сплавов Mn_2VAI и Mn_2VSi . Зависимости полных магнитных моментов от параметра решетки, полученные с помощью PBE и SCAN функционалов, приведены на

Таблица 1. Параметр решетки (a , Å), спиновые магнитные моменты атомов Mn и V (μ_{Mn} и μ_{V} , $\mu_{\text{B}}/\text{атом}$) и полные магнитные моменты ($\mu_{\text{пол}}$, $\mu_{\text{B}}/\text{ф.е.}$) сплавов Mn_2VSi и Mn_2VAl , полученные с помощью функционалов PBE и SCAN для состояний с низким магнитным моментом (LMS) и высоким магнитным моментом (HMS)

Mn_2VSi					Mn_2VAl				
	a	μ_{Mn}	μ_{V}	$\mu_{\text{пол}}$		a	μ_{Mn}	μ_{V}	$\mu_{\text{пол}}$
PBE (LMS)	5.657	0.639	−0.374	0.941	PBE (LMS)	5.804	1.344	−0.807	1.999
SCAN (LMS)	5.617	0.859	−0.715	1.000	SCAN (LMS)	5.798	1.732	−1.462	2.013
SCAN (HMS)	5.885	3.072	−1.774	4.529	SCAN (HMS)	6.002	3.115	−2.086	4.215
Расчет [28]	—	0.700	−0.390	0.970	Расчет [27]	5.687	1.264	−0.581	1.930
Расчет [27]	5.56	0.000	0.000	0.000	Расчет [28]	—	1.520	−0.950	2.000
Расчет [16]	6.175	−0.960	0.856	1.000	Расчет [14]	5.875	1.500	−0.900	2.100
—	—	—	—	—	Эксп. [25]	5.875	1.2	−0.700	1.700
—	—	—	—	—	Эксп. [26]	—	1.500	−0.900	2.100
—	—	—	—	—	Эксп. [29]	—	1.430	−1.040	1.820

рис. 3. Для всех случаев наблюдается ступенчатое поведение магнитного момента при нулевой температуре, что указывает на возможность существования данных сплавов в двух $\Phi\text{иМ}$ состояни-

ях: состояние с низкой намагниченностью при меньшем параметре решетки (левый минимум кривой $\Delta E^{\Phi\text{иМ}}(a)$) и состояние с высокой намагниченностью при большем a (правый минимум кривой $\Delta E^{\Phi\text{иМ}}(a)$).

Стоит отметить, что оба функционала предсказывают целое значение магнитного момента при равновесном параметре решетки (в данном случае — для левого минимума ΔE^{SCAN}), свидетельствуя о полуметаллическом характере электронных свойств рассматриваемых сплавов. Полученные с помощью PBE и SCAN полные магнитные моменты равны 2 $\mu_{\text{B}}/\text{ф.е.}$ для Mn_2VAl и 1 $\mu_{\text{B}}/\text{ф.е.}$ для Mn_2VSi и находятся в согласии с правилом Слейтера–Полинга [15].

Рассмотрим $\Phi\text{иМ}$ состояние с высоким магнитным моментом (рис. 3). Переход в данное состояние при изменении объема решетки сопровождается изломом кривой $\Delta E(a)$ в случае PBE функционала и возникновением явного минимума (глобального для Mn_2VAl и локального для Mn_2VSi) в случае SCAN функционала (рис. 2). При этом магнитные моменты для Mn_2VAl и Mn_2VSi принимают дробные значения для обоих функционалов, что указывает на металлический характер электронной структуры вблизи уровня Ферми. Таким образом, учет дополнительных электронных взаимодействий в обменно-корреляционной энергии приводит к возможности обнаружения двух магнитных фаз с низким и высоким магнитным моментом, характеризующихся полуметаллическим и металлическим поведением. При этом переход между двумя состояниями наблюдается вблизи равновесного параметра решетки (см. рис. 3).

Для более детального анализа магнитных свойств Mn_2VAl и Mn_2VSi спиновые моменты атомов Mn и V, а также полный спиновый магнитный момент приведены в табл. 1. Магнитные моменты атомов Mn и V разноразнаправлены, благодаря чему полный магнитный момент становится

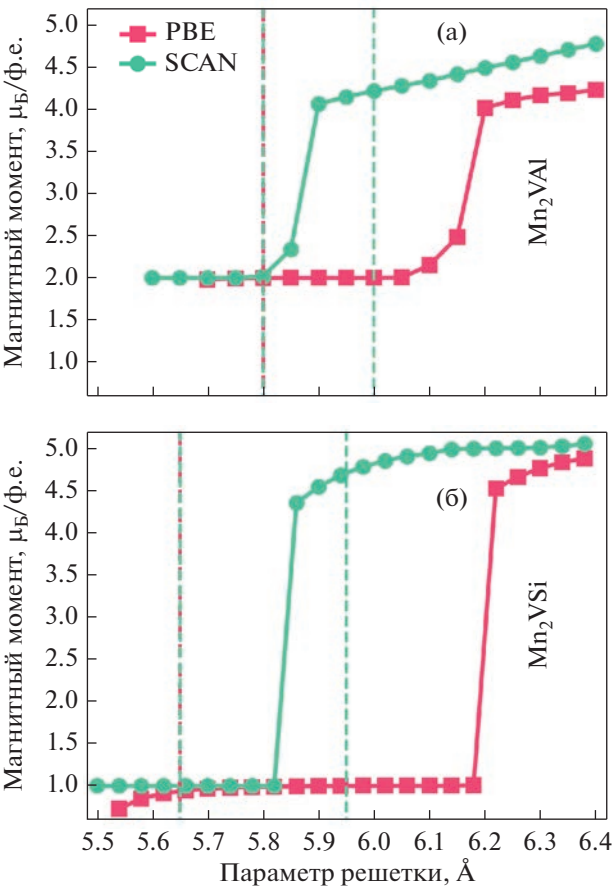


Рис. 3. Полный магнитный момент как функция параметра решетки для энергетически выгодной $L2_1$ фазы сплавов (а) Mn_2VAl и (б) Mn_2VSi с $\Phi\text{иМ}$ упорядочением. Результаты получены с помощью PBE и SCAN функционалов. Штриховыми линиями показаны равновесные параметры решетки для слабо- и сильномагнитной фазы.

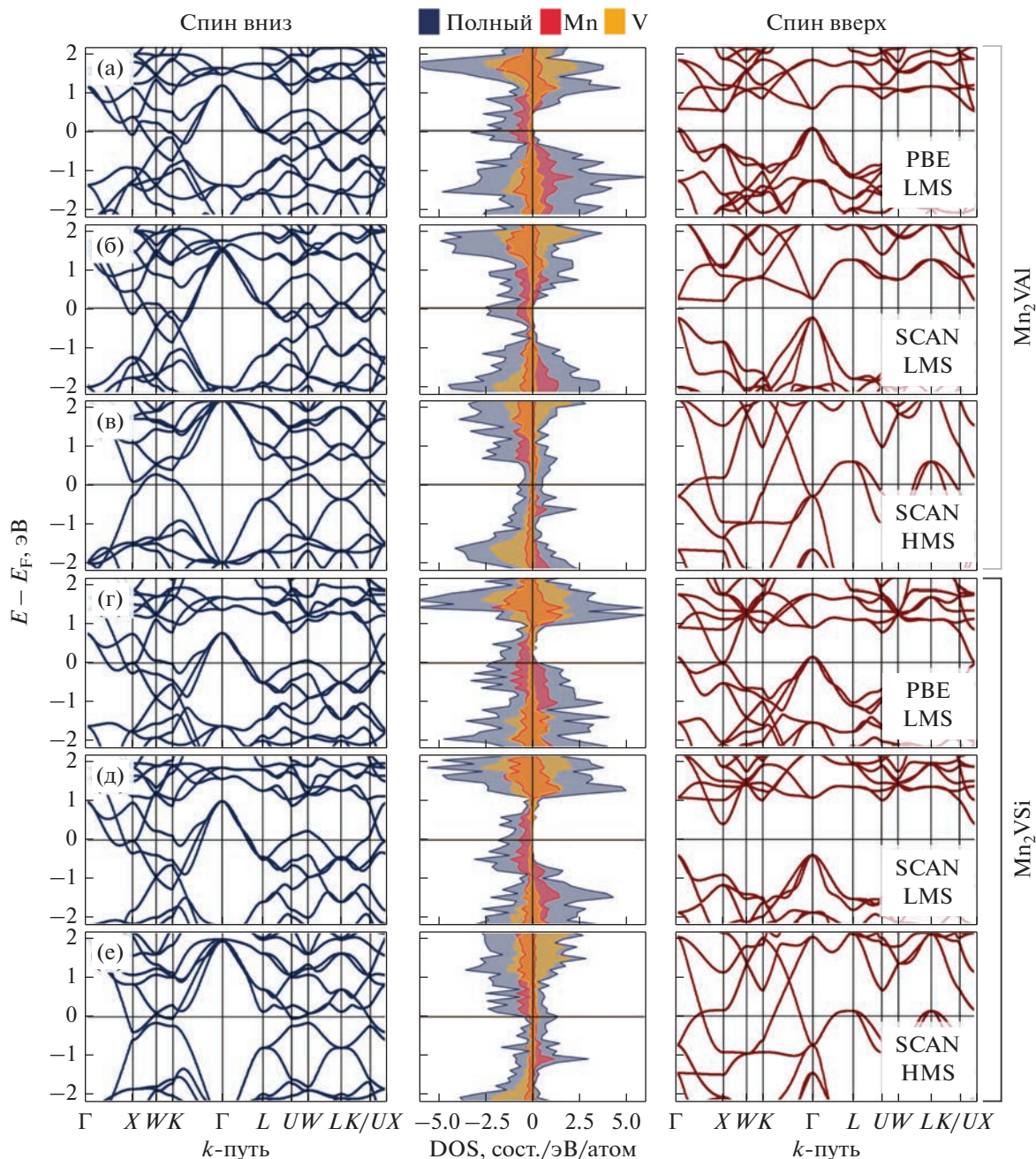


Рис. 4. Зонная структура и плотность электронных состояний для Mn_2VAl и Mn_2VSi , рассчитанные с помощью функционалов PBE и SCAN для слабомагнитной (а, б, г, д) и сильномагнитной (в, е) фаз.

небольшим. Отметим, что величина и направление магнитных моментов атомов Mn и V в случае Mn_2VAl для низкомагнитного состояния (LMS) имеют хорошее согласие с экспериментальными данными, полученными с помощью спинового ЯМР [25] и нейтронной дифракции [26], а также с расчетными данными [27, 28]. В случае Mn_2VSi экспериментальные результаты для объемного образца отсутствуют, однако также наблюдается

хорошее согласие полученных нами результатов с расчетами [28].

Для анализа электронной структуры сплавов $\text{Mn}_2\text{V}(\text{Al, Si})$ в состояниях с высоким (HMS) и низким (LMS) магнитным моментом вычислены плотности электронных состояний и зонная структура с использованием PBE и SCAN функционалов (рис. 4). Зонная структура и DOS подтверждают предположение о полуметаллической природе низкомагнитной фазы. Профиль DOS

имеет хорошее согласие с данными работ [27, 29, 30]. Однако в случае РВЕ 100%-ная спиновая поляризация не достигается, т.к. наблюдаются пересечения в Γ точке для Mn_2VAl и в Γ и X точках для Mn_2VSi . Неидеальная поляризация также отмечена на плотностях состояний, полученных в работах [27, 29, 30] при использовании функционала РВЕ. Энергетическая щель обнаружена для канала “спин вверх”, что соответствует полуметаллу I_4 типа по классификации [1]. Для обоих сплавов предсказано наличие не прямой запрещенной зоны $E_{\Gamma-X}$, причем ширина запрещенной зоны для Mn_2VSi больше, чем для Mn_2VAl . Также следует отметить, что в случае РВЕ ширина запрещенной зоны в точке X для Mn_2VSi равняется нулю, и сплав демонстрирует поведение бесщелевого полупроводника.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрены структурные, магнитные и электронные свойства полуметаллических ферромагнетиков Mn_2VAl и Mn_2VSi в рамках теории функционала плотности с учетом обменно-корреляционных эффектов в рамках функционалов разных поколений (GGA РВЕ и мета-GGA SCAN). Показано, что исследуемые соединения кристаллизуются в прямую $L2_1$ структуру с ФМ упорядочением. При этом разница энергий между $L2_1$ и ХА структурами уменьшается в случае учета дополнительных корреляционных эффектов. В рамках GGA схемы можно получить лишь одно состояние с псевдо-полуметаллическим поведением, обусловленным перекрытием уровня Ферми для “спин вверх” состояний в Γ -точке. Учет дополнительных корреляционных эффектов в рамках мета-GGA приближения приводит к возникновению двух минимумов на кривой зависимости энергии от параметра решетки. Эти минимумы соответствуют ФМ состояниям с низким и высоким магнитным моментом.

Анализ зонной структуры сплавов Mn_2VAl и Mn_2VSi показывает, что оба соединения при меньшем объеме кубической решетки находятся в низкомагнитном полуметаллическом состоянии со 100%-ной спиновой поляризацией и целым магнитным моментом, тогда как увеличение объема решетки приводит к скачку намагниченности и переходу систем в металлическое состояние. Можно предположить, что для данных систем переход из полуметаллического в металлическое состояние возможен с помощью приложения внешнего давления или магнитного поля, а также при изменении температуры. В этом случае сплавы Mn_2VAl и Mn_2VSi могут стать основой для новых функциональных материалов, использующихся в устройствах спинтроники.

ФИНАНСИРОВАНИЕ

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 22-12-20032 (вычисления функционалом SCAN) и государственного задания Минобрнауки РФ № 075-01391-22-03 (вычисления функционалом РВЕ).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Felser C., Fecher G.H., Balke B. Spintronics: a challenge for materials science and solid-state chemistry // *Angew. Chem. Int. Ed.* 2007. V. 46. № 5. P. 668–699.
2. Elphick K., Frost W., Samiepour M., Kubota T., Takanashi K., Sukegawa H., Mitani S., Hirohata A. Heusler alloys for spintronic devices: review on recent development and future perspectives // *Sci. Technol. Adv. Mater.* 2021. V. 22. № 1. P. 235–271.
3. Bainsla L., Suresh K. Equiatomic quaternary Heusler alloys: A material perspective for spintronic applications // *Appl. Phys. Rev.* 2016. V. 3. № 3. P. 031101.
4. Hirohata A., Sagar J., Fleet L.R., Parkin S.S. Heusler alloy films for spintronic devices. Springer, 2016. P. 219–248.
5. Marchenkov V., Irkhin V.Y. Half-metallic ferromagnets, spin gapless semiconductors, and topological semimetals based on Heusler alloys: Theory and experiment // *Phys. Met. Metallogr.* 2021. V. 122. № 12. P. 1133–1157.
6. Luo H., Zhu Z., Liu G., Xu S., Wu G., Liu H., Qu J., Li Y. Prediction of half-metallic properties for the Heusler alloys Mn_2CrZ ($Z = \text{Al, Ga, Si, Ge, Sb}$): A first-principles study // *J. Magn. Magn. Mater.* 2008. V. 320. № 3–4. P. 421–428.
7. Zenasni H., Faraoun H., Esling C. First-principle prediction of half-metallic ferrimagnetism in Mn-based full-Heusler alloys with highly ordered structure // *J. Magn. Magn. Mater.* 2013. V. 333. P. 162–168.
8. Luo H., Zhang H., Zhu Z., Ma L., Xu S., Wu G., Zhu X., Jiang C., Xu H. Half-metallic properties for the Mn_2FeZ ($Z = \text{Al, Ga, Si, Ge, Sb}$) Heusler alloys: A first-principles study // *J. Appl. Phys.* 2008. V. 103. № 8. P. 083908.
9. Sokolovskiy V.V., Zagrebin M.A., Sokolovskaya Y., Buchelnikov V.D. Structural and magnetic properties of Mn_2NiZ ($Z = \text{Ga, In, Sn, Sb}$) Heusler alloys from *ab initio* calculations // *Solid State Phenomena / Trans Tech Publ.* V. 233. 2015. P. 229–232.
10. Ram M., Saxena A., Aly A.E., Shankar A. Half-metallicity in new Heusler alloys Mn_2ScZ ($Z = \text{Si, Ge, Sn}$) // *RSC Adv.* 2020. V. 10. № 13. P. 7661–7670.
11. Chadov S., Qi X., Kübler J., Fecher G.H., Felser C., Zhang S.C. Tunable multifunctional topological insulators in ternary Heusler compounds // *Nat. Mater.* 2010. V. 9. № 7. P. 541–545.
12. Graf T., Parkin S., Felser C. Heusler compounds – A material class with exceptional properties // *IEEE Trans. Magn.* 2010. V. 47. № 2. P. 367–373.
13. Nayak A.K., Nicklas M., Chadov S., Khuntia P., Shekhar C., Kalache A., Baenitz M., Skourski Y., Guduru V.K., Puri A. et al. Design of compensated fer-

- rimagnetic Heusler alloys for giant tunable exchange bias // *Nat. Mater.* 2015. V. 14. № 7. P. 679–684.
14. *Weht R., Pickett W.E.* Half-metallic ferrimagnetism in Mn_2VAl // *Phys. Rev. B.* 1999. V. 60. № 18. P. 13006.
 15. *Felser C., Fecher G.H.* Spintronics: from Materials to Devices. N.Y., USA: Springer, 2013. 369 p.
 16. *Galanakis I., Özdoğan K., Şaşıoğlu E., Aktaş B.* Doping of Mn_2VAl and Mn_2VSi Heusler alloys as a route to half-metallic antiferromagnetism // *Phys. Rev. B.* 2007. V. 75. № 9. P. 092407.
 17. *Şaşıoğlu E.* Nonzero macroscopic magnetization in half-metallic antiferromagnets at finite temperatures // *Phys. Rev. B.* 2009. V. 79. № 10. P. 100406.
 18. *Dai X., Liu G., Chen L., Chen J., Wu G.* Mn_2CoSb compound: Structural, electronic, transport and magnetic properties // *Solid State Commun.* 2006. V. 140. № 11–12. P. 533–537.
 19. *Luo H., Zhu Z., Ma L., Xu S., Zhu X., Jiang C., Xu H., Wu G.* Effect of site preference of 3d atoms on the electronic structure and half-metallicity of Heusler alloy Mn_2YAl // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2008. V. 41. № 5. P. 055010.
 20. *Liu G., Dai X., Liu H., Chen J., Li Y., Xiao G., Wu. G.* Mn_2CoZ ($Z = \text{Al, Ga, In, Si, Ge, Sn, Sb}$) compounds: Structural, electronic, and magnetic properties // *Phys. Rev. B.* 2008. V. 77. № 1. P. 014424.
 21. *Kresse G., Furthmüller J.* Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set // *Phys. Rev. B.* 1996. V. 54. P. 11 169–11 186.
 22. *Kresse G., Joubert D.* From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method // *Phys. Rev. B.* 1999. V. 59. P. 1758.
 23. *Perdew J., Burke K., Ernzerhof M.* Generalized gradient approximation made simple // *Phys. Rev. Lett.* 1996. V. 77. P. 3865.
 24. *Sun J., Ruzsinszky A., Perdew J.P.* Strongly constrained and appropriately normed semilocal density functional // *Phys. Rev. Lett.* 2015. V. 115. P. 036402.
 25. *Nakamichi T., Stager C.* Phenomenological formula of NMR satellite of Heusler alloys and magnetic structure of Mn_2VAl // *J. Magn. Magn. Mater.* 1983. V. 31. P. 85–87.
 26. *Itoh H., Nakamichi T., Yamaguchi Y., Kazama N.* Neutron diffraction study of Heusler type alloy $\text{Mn}_{0.47}\text{V}_{0.28}\text{Al}_{0.25}$ // *Trans. Jpn. Inst. Met.* 1983. V. 24. № 5. P. 265–271.
 27. *Özdoğan K., Galanakis I., Şaşıoğlu E., Aktaş B.* Search for half-metallic ferrimagnetism in V-based Heusler alloys Mn_2VZ ($Z = \text{Al, Ga, In, Si, Ge, Sn}$) // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2006. V. 18. № 10. P. 2905.
 28. *Wurmehl S., Kandpal H.C., Fecher G.H., Felser C.* Valence electron rules for prediction of half-metallic compensated-ferrimagnetic behaviour of Heusler compounds with complete spin polarization // *J. Condens. Matter Phys.* 2006. V. 18. № 27. P. 6171.
 29. *Nagai K., Fujiwara H., Aratani H., Fujioka S., Yomosa H., Nakatani Y., Kiss T., Sekiyama A., Kuroda F., Fujii H. et al.* Electronic structure and magnetic properties of the half-metallic ferrimagnet Mn_2VAl probed by soft X-ray spectroscopies // *Phys. Rev. B.* 2018. V. 97. № 3. P. 035143.
 30. *Li H., Hayashi K., Dong J., Li J.-F., Miyazaki Y.* Distinct impact of order degree on thermoelectric power factor of *p*-type full-Heusler Mn_2VAl compounds // *Mater. Res. Express.* 2020. V. 7. № 5. P. 055503.