

محاسبات ابتدا به ساکن خواص ساختاری، فونونی و حرارتی Co_2MnGe و Co_2MnSi

علی فاضلی کیسی^{1*}، سید جواد موسوی²

¹گروه فیزیک، واحد اردبیل، دانشگاه آزاد اسلامی، اردبیل، ایران

²گروه فیزیک، واحد رشت، دانشگاه آزاد اسلامی، رشت، ایران

دریافت: 1396/06/25 ویرایش نهایی: 1396/11/25 پذیرش: 1397/02/17

چکیده

در این مقاله، خواص ساختاری، فونونی و حرارتی Co_2MnGe و Co_2MnSi محاسبه شده و با یکدیگر مقایسه گردیده‌اند. خواص ساختاری با دیگر نتایج نظری و تجربی هم‌خوانی خوبی دارد. با استفاده از نظریه تابعی چگالی اختلالی و بسته محاسباتی کوآنتوم اسپرسو، محاسبات پراکندگی فونونی در جهت‌های مختلف انجام شد. محاسبه چگالی حالت‌های فونونی کلی و جزئی نشان می‌دهد که با افزایش جرم، سهم اتم‌ها در بسامدهای بالاتر کاهش می‌یابد. علاوه بر آن محاسبات گرمای ویژه در حجم ثابت و نیز دمای دبای با استفاده از روش شبه‌هماهنگ دبای-ایشیتین و کد گیس 2 تنها با در نظر گرفتن سهم فونونی در محدوده دمای صفر تا 900 کلون به دست آمده که با دیگر کارهای نظری هم‌خوانی خوبی دارد. گرمای ویژه در دماهای پایین رفتاری به صورت T^3 دارد و در دماهای بالا به یک حد اشباع میل می‌کند همچنین دمای دبای با افزایش دما به آرامی کاهش می‌یابد.

کلیدواژگان: مدل شبه‌هماهنگ دبای-ایشیتین، خواص فونونی، Co_2MnSi و Co_2MnGe .

مقدمه

کاربردهای الکترومکانیکی دارند، بسیار مورد توجه می‌باشند [1،5]. در این میان Co_2MnSi و Co_2MnGe به‌عنوان آلیاژهای هویسلر² کامل با توجه به داشتن دمای کوری بالا (در حدود 900K که عاملی مهم در ساخت قطعات الکترونیکی است) از اولویت ویژه‌ای برخوردار می‌باشد [1،6].

Quardi و همکاران [7] خواص الکترونی و ساختار بلوری و خواص مکانیکی، مغناطیسی و تراپردی ترکیب هویسلر چند بلوری Co_2MnGe را بررسی نموده‌اند. همچنین خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی Co_2MnX (X=Si, Ge, Sn) توسط Picozzi و

آلیاژهای فرو مغناطیس مواد نیم‌فلز همواره مورد توجه محققین بوده‌اند. این مواد ویژگی‌هایی مرکب از خواص فلزی و نیم‌رسانایی از خود نشان می‌دهند. این ترکیبات اطراف انرژی فرمی به صورت قطبیده اسپینی کامل می‌باشند، به طوری که یک مؤلفه اسپینی آنها ویژگی‌های فلزی و مؤلفه دیگر ویژگی‌های نیم‌رسانایی از خود نشان می‌دهد [4-1].

این آلیاژها با توجه به استفاده‌های زیادی که در مباحث اسپینترونیک¹ مانند استفاده در ابزارهای مقاومت مغناطیسی تونلی، مقاومت‌های مغناطیسی بزرگ و حتی

*نویسنده مسئول: alif1364@yahoo.com

¹Spintronic

²Huesler

بسامدهای نوری در راستای گاما در حجم تعادلی، تابع غیر تعادلی انرژی آزاد گیبس به دست آمد و با کمینه سازی آن نسبت به حجم، خواص مختلف حرارتی به دست می آید [14].

در تمامی محاسبات فونونی و ساختاری بعد از بهینه سازی، انرژی قطع 60Ryd و مش یکنواخت 5×5×5 در نظر گرفته شد و برای محاسبات شبکه فونونی از مش 2×2×2 استفاده شده است.

ترکیبات هویسلر بلوری شده در ساختار L2₁ شامل 4 زیرشبکه هستند که هر یک با یک عنصر شیمیایی در مکان A(0,0,0)، B(1/4,1/4,1/4)، C(1/2,1/2,1/2) و D(3/4,3/4,3/4) اشغال شده اند و متعلق به گروه فضایی Fm3m می باشند.

در ترکیب Co₂MnX(X=Si,Ge) هر اتم Mn، 8 اتم Co به عنوان همسایه اول دارد که در یک ساختار تقارنی هشت ضلعی قرار می گیرند در حالی که هر اتم Co 4 اتم Mn و 4 اتم از گروه اصلی به عنوان نزدیک ترین همسایگان دارد.

نتایج و بحث

خواص ساختاری

در جدول شماره 1 خواص ساختاری محاسبه شده کار حاضر شامل ثابت شبکه و مدول انبوهه استاتیک با دیگر کارهای تجربی و نظری مقایسه شده اند. مشاهده می شود بین نتایج ما و نتایج نظری و تجربی، سازگاری خوبی وجود دارد. برای Co₂MnGe ثابت شبکه ما کمی کمتر از مقدار تجربی است. برای مدول انبوهه مقدار تجربی وجود ندارد اما سازگاری نتیجه ما با دیگر نتایج نظری بسیار عالی است. برای Co₂MnSi ثابت شبکه و مدول انبوهه به مقدار تجربی ثابت شبکه و مقادیر نظری آنها نزدیک است.

همکاران [6] و نیز خواص فونونی و ساختار الکترونی Co₂MnX(X=Si,Ge,Al,Ga) توسط Candan و همکاران [8] مورد بررسی قرار گرفته است.

با توجه به اهمیت ویژگی های ترمودینامیکی مواد، بررسی خواص حرارتی مواد مختلف همواره مورد توجه بوده است. خواص ترمودینامیکی Co_xMnSiFe_{2-x} توسط Ito و همکاران [9] برای مقادیر 0 ≤ x ≤ 2 بررسی شده، اما تاکنون خواص حرارتی Co₂MnX(X=Si,Ge) و ارتباط آنها با خواص فونونی این مواد کمتر مورد توجه بوده است.

ما در این مقاله، پس از محاسبه خواص ساختاری، با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو [10] خواص فونونی این دو آلیاژ را به دست آورده، سپس با کد گیبس 2 [11,12] و روش شبه هماهنگ دبای-اینشتین خواص حرارتی آنها را محاسبه و در مورد دلایل نتایج به دست آمده بحث می کنیم.

ساختار بلوری و جزئیات محاسبات

محاسبات ابتدا به ساکن خواص ساختاری با روش نظریه تابعی چگالی با برازش داده ها با معادله خطی بیرج-مورناگان صورت پذیرفته است. پتانسیل تبدیلی-همبستگی به کار رفته در تمامی محاسبات تقریب شیب تعمیم یافته [13] GGA(PBE) می باشد. برای محاسبات از شبه پتانسیل های فوق نرم Co.pbe-sp-van.UPF و Si.pbe-n-van.UPF و Mn.pbe-sp-van.UPF استفاده شده است. محاسبات پراکندگی فونونی و چگالی حالت های فونونی کلی و جزئی با روش نظریه تابعی چگالی و با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو انجام شده است. همچنین خواص حرارتی بر مبنای محاسبات ابتدا به ساکن به وسیله کد گیبس 2 به دست آمده اند؛ که در آن با استفاده از داده های انرژی بر حسب حجم و

آن دانست. بالاتر بودن انرژی پیوند Co_2MnSi از Co_2MnGe صحت این موضوع را تأیید می‌کند [6].

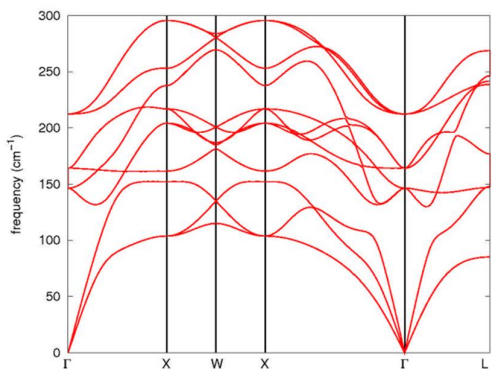
خواص فونونی

نمودار پراکندگی فونونی Co_2MnSi و Co_2MnGe در

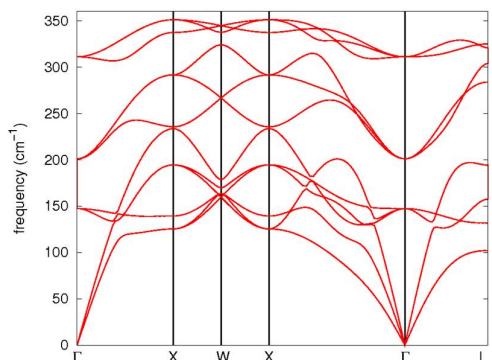
شکل الف و ب) نشان داده شده است.

با توجه به شکل، سه تبهگنی سه‌گانه در نقطه گاما مشاهده می‌شود که می‌توان دلیل آن را غیر قطبی بودن پیوندها عنوان کرد. همچنین سه مد صوتی شامل دو مد عرضی TA و یک مد طولی LA و نیز 9 مد نوری که شامل 6 مد عرضی TO و سه مد طولی LO است قابل مشاهده می‌باشد.

الف



ب



شکل الف. نمودار پراکندگی فونونی Co_2MnGe . ب. نمودار پراکندگی فونونی Co_2MnSi .

نمودار چگالی حالت‌های Co_2MnSi و Co_2MnGe در شکل 2 رسم شده است. مشاهده می‌شود دامنه

جدول 1. مقادیر ثابت شبکه برحسب آنگستروم و مدول انبوه استاتیک برحسب گیگا پاسکال کار حاضر و دیگر کارهای نظری و تجربی برای Co_2MnSi و Co_2MnGe .

B_0' برای Co_2MnSi	B_0' برای Co_2MnGe	مدول انبوه Co_2MnSi	ثابت شبکه Co_2MnSi	مدول انبوه Co_2MnGe	ثابت شبکه Co_2MnGe	
4,27	4,77	235,12	5,59	215,88	5,69	کار حاضر
-	-	-	5,65 [15]	-	5,74 [15]	تجربی
4,68 [8]	4,54 [8]	226 [5]	5,63 [5]	216,62 [16]	5,67 [16]	نظری

مشتق مدول حجمی هر دو آلیاژ نیز سازگاری خوبی با دیگر کارهای نظری دارد.

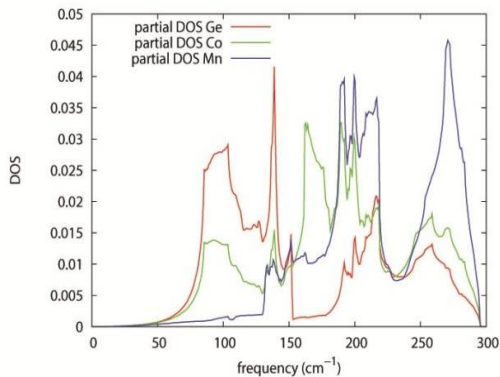
علاوه بر آن برای محاسبه تراکم‌پذیری خطی با توجه به رابطه:

$$B = K_V^{-1} = (K_1 + K_2 + K_3)^{-1} \quad 1$$

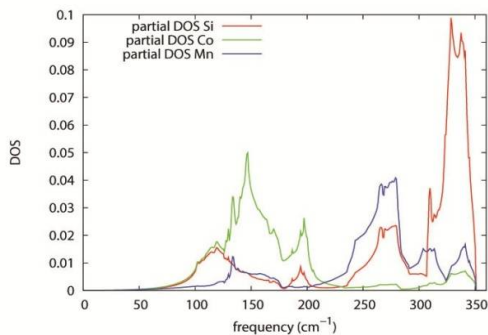
و با توجه به ساختار fcc دو آلیاژ و برابر بودن تراکم‌پذیری در سه راستای X, Y, Z مقدار آن برای Co_2MnSi و $1,54 \times 10^{-3} \text{GPa}^{-1}$ و برای Co_2MnGe $1,42 \times 10^{-3} \text{GPa}^{-1}$ می‌باشد.

همان‌طور که مشاهده می‌شود، هر دو ماده دارای پیوندهای کووالانسی هستند و مدول انبوه این مواد نشان از سختی آنها دارد که با نوع پیوند آنها سازگار است [7]. از آنجاکه الکترونگاتیوی $\text{Mn}, \text{Co}, \text{Si}$ و Ge به ترتیب 1,9، 1,8، 1,5 و 2,0 هستند، پیوند این اتم‌ها از نوع پیوندهای کووالانسی غیر قطبی هستند زیرا اختلاف الکترونگاتیوی آنها کوچک‌تر از 0,5 خواهد بود. از این رو به نظر می‌رسد آنچه باعث کوچک‌تر بودن ثابت شبکه در Co_2MnSi می‌باشد، قوی‌تر بودن پیوند و کوچک‌تر بودن شعاع کووالان (111pm) در Si مقایسه با (122pm) Ge است. همچنین قوی‌تر بودن پیوند کووالانسی در Co_2MnSi را می‌توان دلیل سخت‌تر بودن آن از Co_2MnGe و مدول انبوه بالاتر

الف



ب

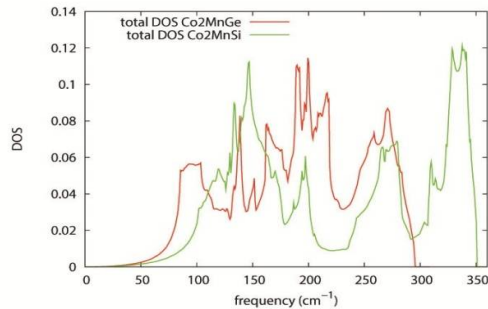


شکل 3 الف. نمودار چگالی حالت‌های جزئی Co_2MnGe . ب. نمودار چگالی حالت‌های جزئی Co_2MnSi .

خواص حرارتی

در شکل 4 نمودار گرمای ویژه در حجم ثابت برحسب دما برای Co_2MnGe و Co_2MnSi با در نظر گرفتن تنها سهم فونونی آنها، نشان داده شده است. از آنجا که کار قطعی تجربی در این باره وجود ندارد، نتایج این محاسبات می‌تواند بسیار مفید باشد [7, 17]. این محاسبات بر مبنای مدل شبه هماهنگ دبای-اینشتین با کد گیس 2 انجام شده است. برای Co_2MnGe ظرفیت گرمایی در دمای 300K حاصل از کار حاضر، (0,383) با کار نظری دیگر (حدوداً 0,376) تطابق بسیار خوبی دارد [7].

نوسان‌های Co_2MnGe تا 295 cm^{-1} است در حالی که در Co_2MnSi این دامنه تا 350 cm^{-1} می‌باشد. به‌علاوه، در Co_2MnSi و Co_2MnGe محاسبات گاف فونونی مشاهده نمی‌شود که با توجه به نزدیک بودن جرم اتم‌ها قابل انتظار است.



شکل 2 نمودار چگالی حالت‌های کلی فونونی Co_2MnGe و Co_2MnSi .

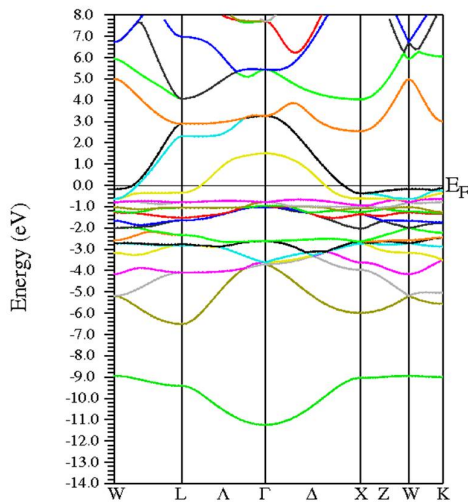
قله‌های مشاهده شده در نمودارهای چگالی حالت‌ها تکنیکی‌های وان هوف¹ هستند که بیانگر ثابت بودن انرژی در آن بسامدها و صفر شدن شیب انرژی که در منحنی چگالی حالت‌ها قرار دارد، می‌باشند. به دلیل سنگین تر بودن Ge از Co و نقش بیشتر آن در مدهای صوتی قله اول در نمودار مربوط به Co_2MnGe می‌باشد.

در شکل 3 الف وب چگالی حالت‌های جزئی Co_2MnGe و Co_2MnSi رسم شده است در بسامدهای پایین اتم‌های سنگین تر (Ge در Co_2MnGe و Co در Co_2MnSi) سهم عمده را در نوسان‌های فونونی دارند و با افزایش بسامد، اتم‌های Co و Mn سهم اصلی را در نوسان ساختار، خواهند داشت. در بسامدهای بالا سهم عمده در Co_2MnGe در اختیار Mn و در Co_2MnSi در اختیار Si خواهد بود. مقایسه نتایج به دست آمده با نتایج حاصل از کار Candan و همکاران [8] و نیز Ouardi و همکاران [7] همخوانی بسیار خوبی را نشان می‌دهد.

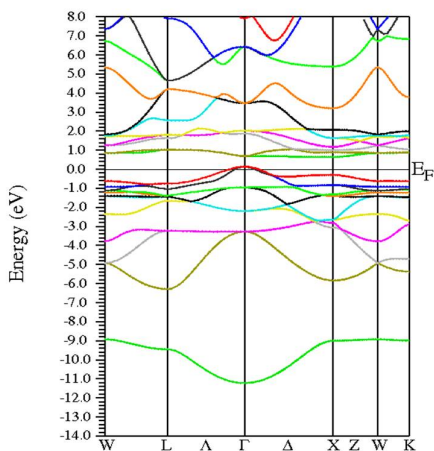
¹Van Hove Singularities

همچنین ساختار نواری Co_2MnGe در دو حالت اسپین بالا و پایین در شکل 6 الف و ب نشان داده شده است. در حالت اسپین بالا خاصیت فلزی مشخص می‌باشد. گاف نواری در حالت اسپین پایین در حدود 0.56eV می‌باشد که در توافق خوبی با دیگر کارهای نظری است [8].

الف

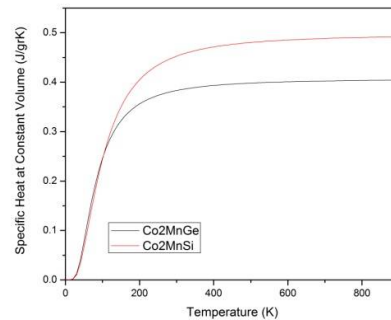


ب



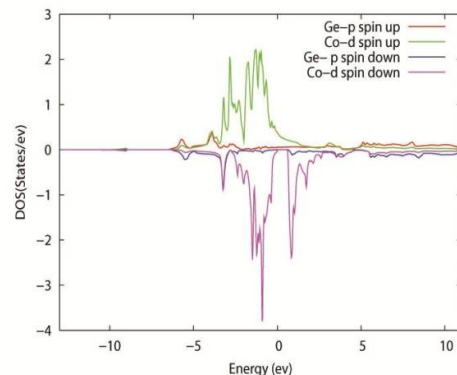
شکل 6 الف. نمودار ساختار نواری Co_2MnGe برای اسپین بالا،
ب. نمودار ساختار نواری Co_2MnGe برای اسپین پایین.

علاوه بر آن نمودار چگالی حالت‌های کلی الکترونی Co_2MnGe در دو حالت اسپینی در شکل 7 نشان داده

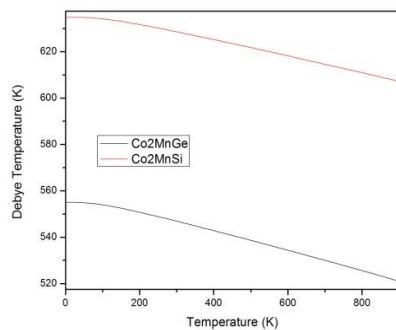


شکل 4. نمودار گرمای ویژه در حجم ثابت برحسب دما برای Co_2MnGe و Co_2MnSi در فشار 0GPa .

گرمای ویژه در Co_2MnGe در دماهای پایین (0K تا 100K) اندکی بیشتر از Co_2MnSi می‌باشد، با توجه به اینکه سهم عمده در مدهای صوتی در Co_2MnGe بر عهده Ge است، علت این موضوع را باید در قوی‌تر بودن پیوند Co-Ge از Co-Co در Co_2MnSi دانست. علاوه بر اینکه اختلاف الکترونگاتیوی و بیشتر بودن شعاع کووالان Co از Ge به عنوان عامل قوی بودن پیوند این مسئله را تأیید می‌کند، قوی بودن هیبریداسیون تراز d کبالت و تراز p ژرمانیوم اثبات شده است که در شکل 5 نشان داده شده است،



شکل 5. نمودار چگالی حالت‌های جزئی Co_2MnGe برای اسپین‌های بالا و پایین.



شکل 8. نمودار دمای دمای برحسب دما برای Co_2MnGe و Co_2MnSi در فشار 0 GPa.

در خصوص Co_2MnSi نیز مقدار دمای دمای

$$C_V = \frac{12}{5} \pi^4 N K_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3$$

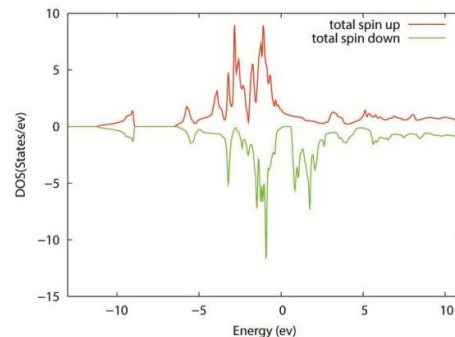
به دست آمده حاصل از $\theta_D = 524\text{K}$ می باشد که با کار نظری Ito و همکاران ($\theta_D = 520\text{K}$) سازگاری بسیار خوبی دارد [9]. همچنین دمای دمای در Co_2MnSi نسبت به Co_2MnGe افزایش می یابد که می تواند به دلیل شعاع کوچک تر اتم Si از اتم Ge باشد که با کوچک تر شدن سطح مقطع پراکندگی و در نتیجه افزایش سرعت صوت در جامد، دمای دمای که با سرعت صوت در ارتباط است، افزایش می یابد.

همچنین با افزایش دما، دمای دمای برای هر دو ماده به آرامی کاهش می یابد که به دلیل افزایش تحرک یون ها و در نتیجه کاهش سرعت صوت در دو آلیاژ است.

نتیجه گیری

در این مقاله خواص ساختاری، فونونی و حرارتی Co_2MnGe و Co_2MnSi محاسبه شد. ثابت شبکه Co_2MnGe برابر $5/69\text{Å}^3$ و برای Co_2MnSi برابر $5/587\text{Å}^3$ به دست آمد که در توافق خوبی با کارهای

شده است. در محدوده گاف نواری چگالی حالت ها صفر می باشد. تکنیکی های وان هوف چگالی های الکترونی نیز مشهود است.



شکل 7. نمودار چگالی حالت های کلی الکترونی Co_2MnGe برای اسپین های بالا و پایین.

همچنین در خواص حرارتی در بسامدهای بالاتر اختلاف الکترون گاتیوی و قطبی بودن پیوندها نقش اصلی را ایفا می کنند و چون اختلاف الکترون گاتیوی Co-MnSi-Mn در Co_2MnSi به ترتیب از Co-MnSi-Mn و $\text{Co-Co}_2\text{MnGe}$ بیشتر است در دماهای بالاتر از 100K ویژه Co_2MnSi از Co_2MnGe بیشتر می باشد. در دماهای پایین رفتار ظرفیت گرمایی به صورت T^3 است. در دماهای بالا (بالای 400K) نیز ظرفیت گرمایی به سمت مقدار ثابت میل می کند.

در شکل 8 نمودار تغییرات دمای دمای برحسب دما برای Co_2MnSi و Co_2MnGe رسم شده است.

مقدار دمای دمای در دمای صفر کلونین را برابر $554/93\text{K}$ به دست آوردیم که با کار به دست آمده بر مبنای سرعت صوت ($\theta_D^{\text{acc}} = 554\text{K}$) تطابق بسیار خوبی دارد [7].

[4] R.A.de Groot, F.M. Mueller, P.G. van Engen, K.H.J. Buschow, New Class of Materials: half-metallic ferromagnets. *Physical Review Letters* **50** (1983) 2024.

[5] J. Enkovaara, A. Ayuela, A.T. Zayak, P. Entel, L. Nordström, M. Dube, J. Jalkanen, J. Impola, R.M. Nieminen, Magnetically driven shape memory alloys. *Materials Science and Engineering* **378** (2004) 52–60.

[6] S. Picozzi, A. Continenza, A.J. Freeman, Co_2MnX (X=Si, Ge, Sn) Heusler compounds: An ab initio study of their structural, electronic, and magnetic properties at zero and elevated pressure, *Physical Review B* **66** (2002) 94421.

[7] S. Ouardi, G.H. Fecher, B. Balke, A. Beleanu, X. Kozina G. Stryganyuk, C. Felser, W. Klob, H. Schrader, F. Bernardi, J. Morais, E. Ikenaga Y. Yamashita, S. Ueda, K. Kobayashi, Electronic and crystallographic structure, hard x-ray photoemission, and mechanical and transport properties of the half-metallic Heusler compound Co_2MnGe . *Physical Review B* **84** (2011) 155122.

[8] A. Candan, G.Ugur, Z. Charifi, H. Baaziz, M.R. Ellialtioglu. Electronic structure and vibrational properties in cobalt-based full-Heusler compounds: A first principle study of Co_2MnX (X=Si, Ge, Al, Ga), *Journal of Alloys and Compounds* **560** (2013) 215–222.

[9] M. Ito, T. Furuta, K. Kai, A. Taira, K. Onda, I. Shigeta, M. Hiroi Thermodynamic Properties of Heusler $\text{Fe}_{2-x}\text{Co}_x\text{MnSi}$, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **428** (2017) 390–393.

[10] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G.L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A. Dal Corso, S. de Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerstmann, C. Gougoussis, A. Kokalj, M. Lazzeri, L. Martin-Samos, N. Marzari, F. Mauri, R. Mazzarello, S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, S. Scandolo, G. Sclauzero, A.P. Seitsonen, A. Smogunov, P.

نظری و تجربی می‌باشد. نمودارهای پراکندگی فونونی رسم گردید و در آنها مطابق انتظار سه مد صوتی و 9 مد نوری مشاهده شد. چگالی حالت‌های فونونی کلی و جزئی محاسبه و مشاهده گردید که با کاهش جرم، سهم اتم‌ها در بسامدهای بالاتر افزایش می‌یابد که مطابق انتظار و هماهنگ با کارهای نظری است. همچنین گاف فونونی در محاسبات چگالی حالت‌ها مشاهده نشد که با توجه به نزدیکی جرم اتم‌ها قابل انتظار است. نتیجه بررسی خواص حرارتی با محاسبه تغییرات گرمای ویژه در حجم ثابت و نیز دمای دمای برحسب دما با نتایج نظری و تجربی موجود انطباق خوبی را نشان داد. در محاسبات گرمای ویژه، گرمای ویژه در Co_2MnGe در دماهای پایین (0K تا 100K) اندکی بیشتر از Co_2MnSi می‌باشد، با توجه به اینکه سهم عمده در مدهای صوتی در Co_2MnGe بر عهده Ge است، علت این موضوع را باید در قوی‌تر بودن پیوند Co-Ge از Co-Co در Co_2MnSi دانست. همچنین دمای دمای با افزایش دما به آرامی کاهش می‌یابد.

مرجع‌ها

[1] I. Galanakis, P.H. Dederichs (Eds), *Half-Metallic Alloys Fundamentals and Applications*, Springer, Berlin, Heidelberg, (2005).

[2] A. Bergmann, J. Grabis, B.P. Toperverg, V. Leiner, M. Wolff, H. Zabel, K. Westerholt, Antiferromagnetic dipolar ordering in $[\text{Co}_2\text{MnGe}/\text{V}]_N$ multilayers. *Physical Review B* **72** (2005) 214403.

[3] S. Kämmerer, A. Thomas, A. Hütten, G. Reiss, Heusler alloy as magnetic electrodes in magnetic tunnel junctions Co_2MnSi Heusler alloy as magnetic electrodes in magnetic tunnel junctions. *Applied Physics Letters* **85** (2004) 79.

- Fe) Heusler compounds : a first principle study. *Journal of Physics: Conference Series* **765** (2016) 012010.
- [17] S. Amari, R. Mebsout, S. Méçabih, B. Abbar, B. Bouhafs, First-principle study of magnetic, elastic and thermal properties of full Heusler Co_2MnSi , *Intermetallics* **44** (2014) 26-30
- Umari, R.M. Wentzcovitch, *QUANTUM ESPRESSO package:www.quantum-espresso.org*
- [11] A. Otero-de-la-Roza, V. Luaña, Gibbs 2 : A new version of the quasi-harmonic model code. I. Robust treatment of the static data. *Computer Physics Communications* **182** (2011) 1708–1720.
- [12] A. Otero-de-la-Roza, D. Abbasi-pérez, V. Luana, GIBBS2: A new Version of the quasiharmonic model code. II. Models for Solid-State thermodynamics, features and implementation. *Computer Physics Communications* **182** (2011) 2232–2248.
- [13] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Physical Review Letters* **77** (1996) 3865-3868.
- [14] ع. فاضلی کیسمی، ج. موسوی، محاسبات ابتدا به ساکن خواص ساختاری، گذار فاز، فونونی و خواص ترمودینامیکی AIA، نشریه پژوهش سیستم‌های بس‌ذره‌ای، 6 (1395) 59-65.
- [15] P. J. WEBSTER, Magnetic and chemical order in Heusler alloys containing Cobalt and Manganese. *Journal of Physics Chemistry of Solids* **32** (1971) 1221.
- [16] H. Joshi, D.P. Rai, Sandeep, R.K. Thapa, Electronic structure and thermoelectric property of Co_2YGe (Y= Mn,

Ab initio calculations of structural, phonon and thermal properties of Co_2MnGe and Co_2MnSi

Ali Fazeli Kisomi^{*1}, Seyed Javad Mousavi²

¹Departemant Of Physics, Ardabil Branch, Islamic Azad University, Ardabil, Iran

²Department Of Physics, Rasht Branch, Islamic Azad University, Rasht, Iran

Received: 16.09.2017 Final revised: 14.02.2018 Accepted: 07.05.2018

Abstract

In this paper, structural, phonon and thermal properties of Co_2MnGe and Co_2MnSi were calculated and compared with each other. Structural properties of these alloys have a good agreement with other experimental and theoretical works. By using density functional perturbation theory and Quantum Espresso package, phonon dispersion calculation in different directions has been done. Calculation of total and partial phonon density of states demonstrated that by increasing of mass of atoms their contributions decrease at higher frequencies. Also, calculations of specific heat at constant volume and Debye temperature by quasi-harmonic Debye-Einstein model and GIBBS2 package were performed by considering only phonon contribution in the temperatures ranging 0K to 900K which have a good consistency with other theoretical studies. Specific heat at low temperatures has T^3 behavior, while it tends to saturation limit at high temperatures. Debye temperature decreases by increasing temperature slowly.

Keywords: quasi-harmonic Debye-Einstein model, phonon properties, Co_2MnGe and Co_2MnSi

* Corresponding Author: alif1364@yahoo.com