

ОСОБЕННОСТИ ФАЗОВОЙ СТАБИЛЬНОСТИ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА Ti_2VZ ($Z = Al, As, Ga, Ge, In, P, Sb, Si, Sn$)

А.А. Раев, К.Р. Ерагер, В.В. Соколовский, В.Д. Бучельников

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: raiev.a@mail.ru

Аннотация. Исследованы химическая стабильность, структурные, магнитные и электронные свойства сплавов Ti_2VZ ($Z = Al, As, Ga, Ge, In, P, Sb, Si, Sn$) с использованием методов теории функционала плотности. Установлено, что все соединения термодинамически стабильны, причем их устойчивость коррелирует с концентрацией валентных электронов (e/a) и уменьшается для более тяжелых элементов. Магнитные свойства зависят от состава и степени тетрагональности: в кубической фазе рост e/a снижает намагниченность, тогда как деформация решетки ее усиливает. Полуметаллическое поведение с 100 % спиновой поляризацией обнаружено при $e/a = 4$ и 4,25, а для Ti_2VSb ($e/a = 4,5$) выявлено полупроводниковое состояние с узкой щелью (~0,1 эВ). Результаты согласуются с расчетами на основе функционала PBE и демонстрируют преимущества SCAN-функционала для точного описания сложных сплавов.

Ключевые слова: сплавы Ti_2VZ ; полуметаллическое поведение; спиновая поляризация; тетрагональные искажения; электронная структура; магнитные свойства; функционал SCAN.

Введение

В последние годы полуметаллические (ПМ) ферромагнитные (ФМ) соединения привлекают все большее внимание из-за их большого потенциала в области применения устройств спинтроники [1, 2]. Концепция ПМ ферромагнетиков была первоначально предложена де Гроотом и др. на основе расчетов полусплава Гейслера $NiMnSb$ в 1983 году, который вел себя как металл для одного направления спина и как полупроводник или изолятор для противоположного направления спина [3]. ПМ поведение приводит к 100 % спиновой поляризации в одном из спиновых каналах на уровне Ферми E_F . На сегодняшний день многочисленное семейство сплавов Гейслера рассматривается в качестве перспективных (ПМ) материалов. Однако большинство из них содержат дорогостоящие элементы, либо сплавы, предложенные теоретически, являются неустойчивыми. В связи с этим поиск устойчивых ПМ сплавов Гейслера, состоящих из распространенных элементов, представляется актуальной задачей для современного материаловедения [4].

Например, в работе S. Galeghirian и др. [5] представлены исследования сплавов Гейслера Ti_2VZ ($Z = Al, Ga$ и In). В кубической структуре типа $L2_1$ исследуемые составы показали себя как обычные ферромагнетики, однако в инверсионной структуре ХА каждое из соединений демонстрирует ПМ-характеристики с соответствующей шириной запрещенной зоны 0,52, 0,51 и 0,59 эВ. В работе Santaof Qi и др. [6] рассмотрены сплавы Гейслера Ti_2VZ ($Z = Si, Ge, Sn$). Результаты расчетов показали, что сплавы Ti_2VSi и Ti_2VGe относятся к ПМ-соединениям с идеальной 100 % спиновой поляризацией на уровне E_F , в то время как сплав Ti_2VSn является ферромагнетиком. Кроме того, полностью компенсированный ферромагнетизм и полупроводимость довольно устойчивы в широком диапазоне сжатия и расширения решетки.

В представленной работе мы рассмотрели широкий спектр соединений на основе Ti_2VZ ($Z = Al, As, Ga, Ge, In, P, Sb, Si, Sn$) с целью установления взаимосвязи между электронными, структурными, магнитными свойствами и концентрацией валентных электронов.

Детали и методология вычислений

Расчеты свойств основного состояния сплавов Ti_2VZ ($Z = Al, As, Ga, Ge, In, P, Sb, Si, Sn$) выполнены в рамках теории функционала плотности, реализованной в программном пакете VASP [7, 8], с использованием приближения обменно-корреляционного функционала SCAN [9] (мета-

обобщенное градиентное приближение). Исследуемые кристаллические структуры были сгенерированы на базе 16-атомной элементарной кубической ячейки (пр. группа № 216, F43m) с ФМ-упорядочением магнитных моментов (рис. 1) [10]. Общепринятое название данной структуры – инверсионная структура ХА гейслеровского типа, прототип Hg_2CuTi . Структура ХА примечательна тем, что за счет расположения атомов в неэквивалентных позициях возможен полуметаллический характер зонной структуры на уровне E_F в отличие от регулярной гейслеровской структуры L21, прототип Cu_2MnAl . Кроме того, согласно эмпирическому правилу сплавы Гейслера X_2YZ могут кристаллизоваться в структуру ХА при условии, если атомный номер или валентность Y элемента выше, чем у X из того же периода [10]. Для соединений Ti_2VZ выполняется рассмотренное условие, кроме того, разница между энергиями структур ХА и $L2_1$ весьма малая.

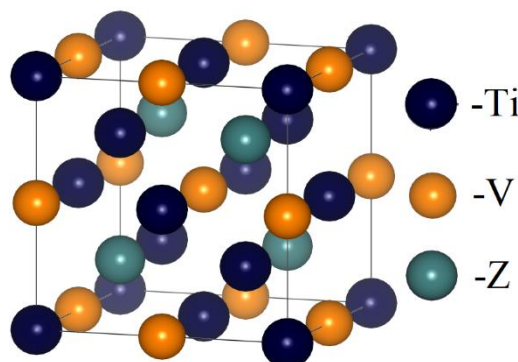


Рис. 1. Кристаллическая структура типа ХА соединений Ti_2VZ

Геометрическая оптимизация проводилась в рамках ионной релаксации с изменением позиций атомов, формы и объема ячейки. Интегрирование по k точкам зоны Бриллюэна проводилось на Γ -центрированной k -сетке ($7 \times 7 \times 7$) с плотностью ~ 5500 точек на атом обратной решетки. Энергия обрезания плоских волн составляла 470 эВ, а параметр сходимости составлял 10^{-7} эВ/атом.

Значения спиновой поляризации в расчетах плотности электронных состояний оценивались по формуле

$$P(\%) = \frac{p_{\uparrow}(E_F) - p_{\downarrow}(E_F)}{p_{\uparrow}(E_F) + p_{\downarrow}(E_F)} \times 100, \quad (1)$$

где $p_{\uparrow}$, $p_{\downarrow}$ – плотность электронных состояний на уровне E_F со спином вверх и вниз соответственно.

Энергия формирования сплава рассчитывалась по формуле

$$E_f = E_{tot} - \sum_i E_i, \quad (2)$$

где E_{tot} – полная энергия сплава, приходящаяся на один атом, а E_i – энергии атомов чистых элементов, которые рассчитывались с использованием функционала SCAN с учетом равновесных структур, взятых из базы данных электронного ресурса Materials project [11].

Результаты вычислений и их обсуждение

Для оценки химической стабильности сплавов Ti_2VZ ($Z = \text{Al, As, Ga, Ge, In, P, Sb, Si, Sn}$), т. е. их устойчивости к сегрегации на составляющие элементы, была рассчитана энергия формирования E_f структуры ХА с использованием (2). Если E_f принимает отрицательное значение, сплав считается стабильным; в противном случае происходит его распад на составляющие элементы. На рис. 2 приведена зависимость E_f от Z элемента.

Значения E_f для всех рассмотренных соединений расположены в отрицательном диапазоне, что говорит об их химической стабильности по отношению к распаду на составляющие элементы. Можно сделать вывод, что с ростом концентрации валентных электронов e/a , приходящихся на атом, соединения Ti_2VZ становятся более стабильными, тогда как увеличение периода Z элемента при фиксированном значении e/a способствует понижению химической устойчивости со-

единения. Так, элементы III группы (Al, Ga, In) формируют соединения с самой наименьшей энергией формирования; элементы IV группы (Si, Ge) находятся в отрезке промежуточной стабильности; а элементы V группы (P, As и Sb) приводят к наибольшей стабильности кубической фазы.

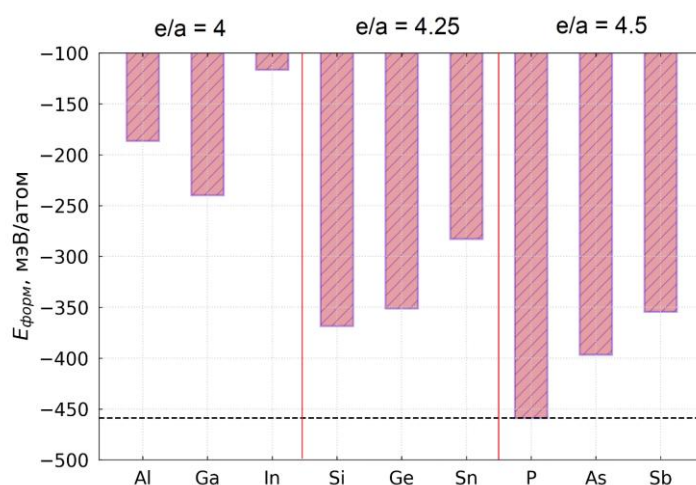


Рис. 2. Энергия формирования сплавов Ti_2VZ с кубической структурой ХА

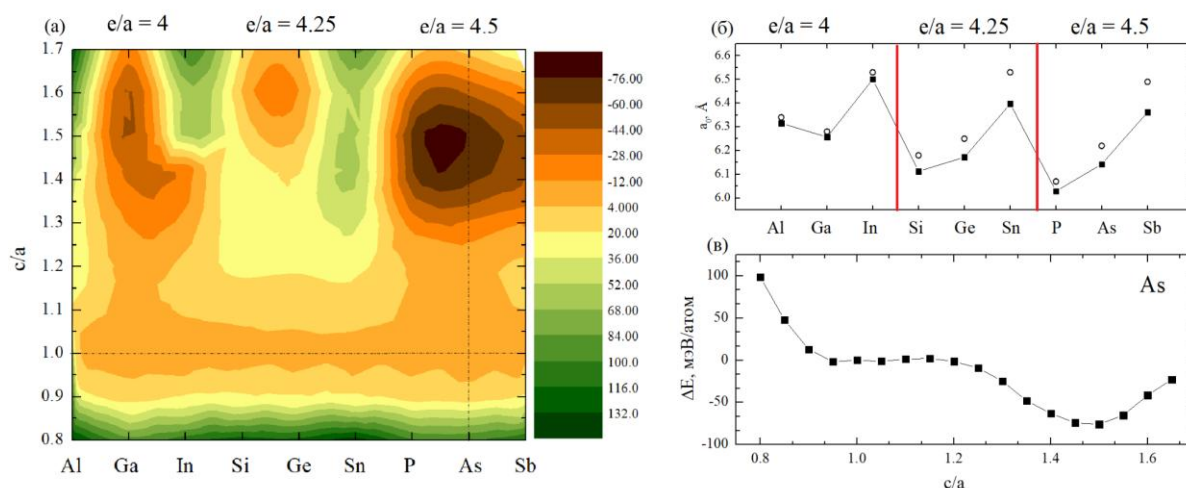


Рис. 3. (а) Контур изменения энергии в мэВ/атом, нормированный на кубическую фазу, для сплавов Ti_2VZ в зависимости от степени ее тетрагонального искажения c/a ; (б) постоянная ХА решётки a_0 вдоль линии $c/a = 1$; открытыми символами показаны значения a_0 , полученные с помощью функционала PBE в [5, 6, 12]; (в) зависимость $\Delta E(c/a)$ для Ti_2VAs

С целью проверки устойчивости кубической фазы ХА к возможным искажениям проведены расчеты изменения энергии (ΔE) соединений в зависимости от степени ее тетрагонального искажения (c/a). На рис. 3, а изображена контурная карта распределения ΔE в зависимости от c/a и содержания Z элемента в Ti_2VZ . Значение ΔE рассчитано относительно энергии структуры ХА ($c/a = 1$). Из рис. 3 видно, что увеличение e/a , приводит к возникновению глобального минимума энергии при степени тетрагонального искажения c/a в интервале от 1,4 до 1,6. Данная особенность проявляется наиболее ярко для Ti_2VP , Ti_2VAs и Ti_2VSb . Это объясняется тем, что данные химические элементы находятся в V группе периодической системы и имеют больше свободных электронов на внешней орбитали, способствующих нестингу поверхности E_F на границах зоны Бриллюэна.

На рис. 3, б и в показаны срезы контурной карты вдоль направлений, отмеченных пунктирной линией на рис. 3, а. Можно видеть, что равновесный параметр кубической решетки a_0 демонстрирует монотонно повторяющееся поведение: при фиксированной концентрации e/a увеличение порядкового номера Z элемента способствует увеличению a_0 за счет увеличения атомного

радиуса Z элемента. Стоит отметить хорошее согласие значений a_0 , полученных в данной работе с помощью функционала SCAN, и значений a_0 , вычисленных с помощью функционала PBE [5, 6, 12], в особенности для сплавов с $e/a = 4$.

На рис. 4 изображена контурная карта распределения полного магнитного момента в зависимости от c/a и содержания Z элемента в Ti_2VZ , а также срезы контурной карты вдоль направлений, отмеченных пунктирной линией. Широкий диапазон значений намагниченности от $-0,2$ до $4 \mu_B/\text{ф.ед.}$ указывает на чувствительность магнитного упорядочения и магнитных свойств к тетрагональной деформации и легированию Z элемента.

С одной стороны, для каждого из соединений тетрагональное искажение (сжатие, растяжение) способствует увеличению магнитного момента за счет изменения расстояний ближайшего окружения атомов Ti и V . С другой стороны, в случае кубической фазы ($c/a = 1$) увеличение концентрации e/a приводит к снижению и, в конечном счете, подавлению намагниченности (рис. 4, б). Таким образом, для группы соединений $Ti_2V(\text{Al, Ga, In})$ характерно среднее значение намагниченности $m \approx 1,85 \mu_B/\text{ф.ед.}$, для $Ti_2V(\text{Si, Ge, Sn}) - 0,83 \mu_B/\text{ф.ед.}$ и для $Ti_2V(\text{P, As, Sb}) - 0 \mu_B/\text{ф.ед.}$

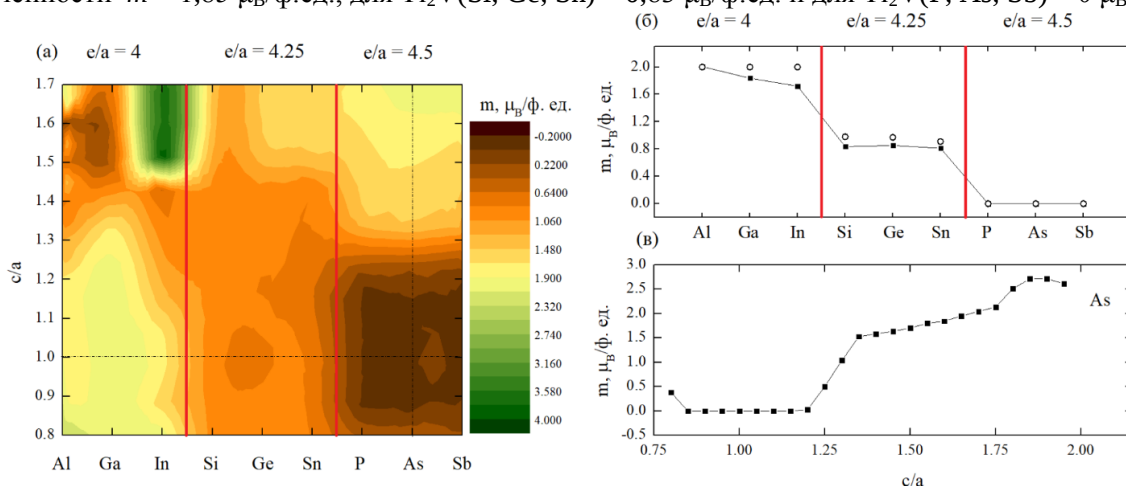


Рис. 4. а) контур полного магнитного момента для сплавов Ti_2VZ в зависимости от степени тетрагонального искажения c/a кубической структуры ХА; б) Намагниченность ХА решётки вдоль линии $c/a = 1$; открытыми символами показаны значения m , полученные с помощью функционала PBE в [5, 6, 12]; в) зависимость $m(c/a)$ для Ti_2VAs

Схожие значения m были получены ранее в работах [5, 6, 12], где использовали в расчетах функционал PBE. Интересно отметить, что для сплавов $Ti_2V(\text{P, As, Sb})$ деформация кубической структуры сопровождается сменой магнитного упорядочения и скачкообразным изменением намагниченности с 0 до $2 \mu_B/\text{ф.ед.}$ для фаз со степенью тетрагональности $c/a = 1$ и $1,5$ соответственно.

В принципе, значения m для ХА структуры согласуются со значениями, полученными с помощью правила Слейтера–Полинга: добавление элемента в металлический сплав приводит к уменьшению намагниченности насыщения сплава m на величину, пропорциональную количеству валентных электронов N_{ev} , $m = N_{ev} - 18$. Таким образом, для $Ti_2V(\text{Al, Ga, In})$ N_{ev} и m составляют 16 и $-2 \mu_B/\text{ф.ед.}$, для $Ti_2V(\text{Si, Ge, Sn}) - 17$ и $-1 \mu_B/\text{ф.ед.}$ и $Ti_2V(\text{P, As, Sb}) - 18$ и $0 \mu_B/\text{ф.ед.}$ соответственно. Отрицательный знак m косвенно указывает на наличие энергетической щели в «спин вверх» канале.

Для проверки возможной полуметалличности исследуемых соединений дополнительно проведен анализ плотностей электронных состояний (ПЭС) и зонной структуры в «спин вверх»- и «спин вниз»-каналах. Отметим следующие особенности. В соединениях с концентрацией $e/a = 4$ и $4,25$ зонная структура «спин вниз»-канала демонстрирует металлическое поведение ввиду множественных пересечений уровня E_F . Напротив, для «спин вниз» канала характерно наличие энергетической щели между валентной зоной и зоной проводимости. При этом для соединений $Ti_2V(\text{Al, Ga})$ ($e/a = 4$) и $Ti_2V(\text{Si, Ge})$ ($e/a = 4,25$) уровень E_F расположен достаточно близко к валентной зоне, тогда как для $Ti_2V\text{In}$ ($e/a = 4$) и $Ti_2V\text{Sn}$ ($e/a = 4,25$) уровень E_F находится практически посреди запрещенной зоны. Последующее увеличение концентрации e/a до $4,5$ приводит к металлическому и полупроводниковому характерам зонной структуры для $Ti_2V(\text{P, As})$ и $Ti_2V\text{Sb}$ соответственно. Расчеты показывают, что увеличение порядкового номера Z элемента при фикс-

сированном соотношении $e/a = 4,5$ способствует раскрытию запрещенной зоны ($\Delta E_{gap} \approx 0,1$ эВ) на E_F .

Для примера, на рис. 5 приведены зонный спектр и ПЭС для «спин вверх» канала соединения Ti_2VSn . Ветви зон демонстрируют сильную дисперсию вдоль выбранных путей в k -пространстве. В данном случае максимальное значение энергии потолка валентной зоны (вдоль пути К–Г) и дна зоны проводимости (точка X) составляют $-0,08$ и $0,17$ эВ соответственно, а их разница образует широкую щель в $0,26$ эВ на уровне E_F . Пики ПЭС ниже E_F соответствуют гибридным d -состояниям Ti и V, тогда как пики ПЭС в зоне проводимости отвечают за гибридизацию d -орбиталей V и sp орбиталей Sn. В целом, резкие пики ПЭС указывают на локализованные состояния электронов в окрестностях уровня E_F . Таким образом, 100 % заселенность d -орбиталей электронами в «спин вверх»-состоянии и отсутствие «спин вниз»-электронов на E_F приводит к 100 % спиновой поляризации.

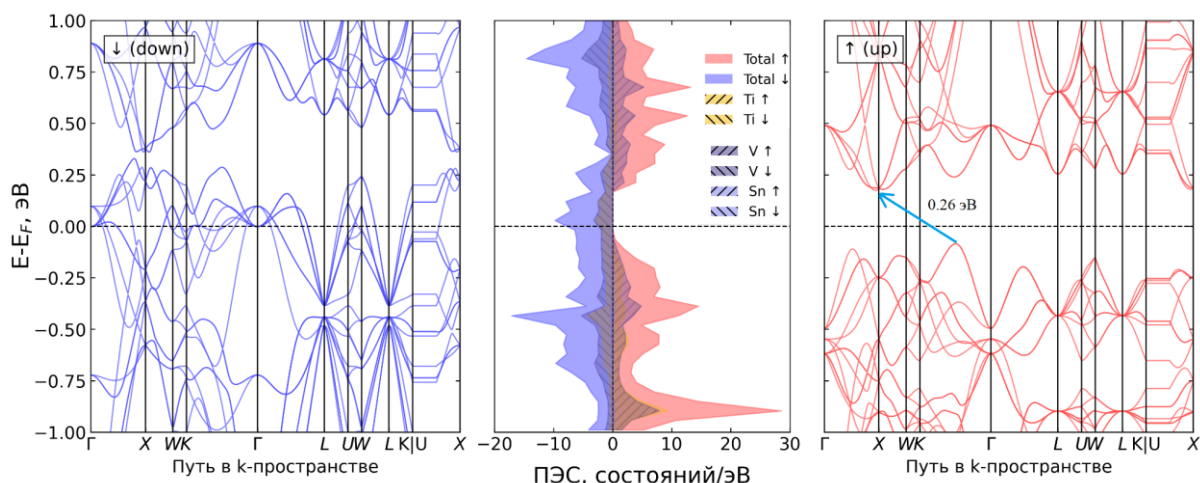


Рис. 5. Зонная структура и плотность электронных состояний для сплава Ti_2VSn в «спин вверх»- и «спин вниз»-каналах

В качестве обобщения результатов расчетов зонной структуры на рис. 6 представлена зависимость ширины запрещенной зоны в соединениях Ti_2VZ с разным содержанием валентных электронов. Наблюдается четкая корреляция между поведением ΔE_{gap} и намагниченностью (m) в зависимости от e/a . Для соединений с низким содержанием e/a и высокой m характерна наибольшая ширина запрещенной зоны в канале «спин вверх». При этом увеличение порядкового номера элемента Z при фиксированном $e/a = 4$ приводит к уменьшению ΔE_{gap} , что свидетельствует о существенных различиях в электронной структуре исследуемых материалов.

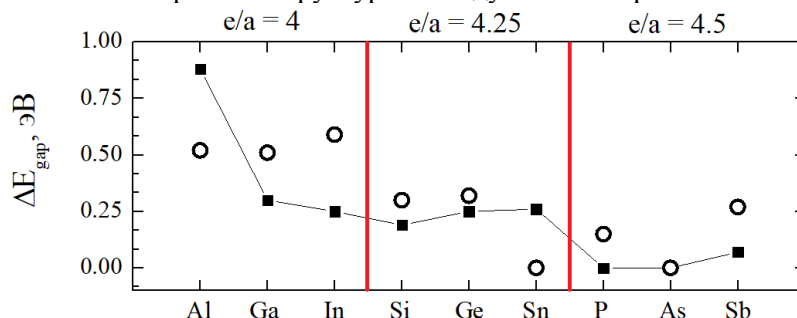


Рис. 6. Ширина запрещенной зоны в зависимости от химического элемента Z в сплавах Ti_2VZ ($Z = Al, Si, P, Ga, Ge, As, In, Sn, Sb$). Открытыми символами показаны значения ΔE_{gap} , полученные с помощью функционала PBE в [5, 6, 12]

В соединениях с $e/a = 4,25$ наблюдаются близкие значения ΔE_{gap} , что обусловлено сходством их электронной структуры и, как следствие, практически одинаковой намагниченностью. Для третьей группы соединений ($e/a = 4,5$) характерен металлический тип зонной структуры ($\Delta E_{gap} = 0, m = 0$), за исключением состава Ti_2VSb . В этом случае увеличение радиуса орбиталей и снижение энергии связи приводят к образованию запрещенной зоны и полупроводниковому поведе-

нию. В целом, можно заметить, что значения ΔE_{gap} , полученные с помощью расчетов функционалом SCAN, качественно воспроизводят результаты для функционала PBE [5, 6, 12]. Согласно исследованиям [13], функционал SCAN зарекомендовал себя лучшим образом в сравнении с PBE в плане предсказания ширины запрещенной зоны в полупроводниках и полуметаллических ферро- и ферримагнетиках.

Заключение

Проведенные расчеты химической стабильности, структурных и магнитных свойств, а также электронной структуры сплавов Ti_2VZ ($Z = \text{Al, As, Ga, Ge, In, P, Sb, Si, Sn}$) позволили выявить ключевые закономерности их поведения в зависимости от состава. Установлено, что все исследуемые соединения термодинамически стабильны, причем их устойчивость возрастает с увеличением концентрации валентных электронов (e/a) и снижается при переходе к более тяжелым элементам в пределах группы. Тетрагональные искажения структуры приводят к появлению энергетических минимумов при $c/a = 1,4\text{--}1,6$, особенно выраженных для Ti_2VP , Ti_2VAs и Ti_2VSb , что связано с электронными особенностями элементов V группы.

Магнитные свойства сплавов демонстрируют сильную зависимость от состава и степени тетрагональности: в кубической фазе увеличение e/a подавляет намагниченность, тогда как деформация решетки способствует ее росту. Полуметаллическое поведение со 100 % спиновой поляризацией наблюдается для соединений с $e/a = 4$ и 4,25, где в «спин вверх»-канале формируется широкая запрещенная зона, а в «спин вниз»-канале сохраняется металлический характер проводимости. Для Ti_2VSb ($e/a = 4,5$) обнаружено полупроводниковое состояние с узкой щелью ($\sim 0,1$ эВ), что подчеркивает роль атомного радиуса и гибридизации электронных состояний в формировании электронной структуры.

Полученные результаты согласуются с предыдущими исследованиями, выполненными с использованием функционала PBE, и подтверждают перспективность применения функционала SCAN для точного описания сложных сплавов. Выявленные закономерности могут быть полезны для целенаправленного дизайна материалов с заданными магнитными и транспортными свойствами, в частности, для разработки спиновых фильтров и термоэлектрических устройств. Дальнейшие исследования могут быть сосредоточены на экспериментальной верификации предсказанных свойств, а также на изучении влияния внешних факторов (температуры, давления) на стабильность и функциональные характеристики этих соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ в рамках проекта № 24-12-20016 (расчеты электронных свойств) и государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 075-00186-25-00 (расчеты структурных и магнитных свойств)).

Литература

1. Žutić, I. Spintronics: Fundamentals and Applications / I. Žutić, J. Fabian, S.D. Sarma // Reviews of modern physics. – 2004. – Vol. 76, Iss. 2. – P. 323.
2. Review on Spintronics: Principles and Device Applications / A. Hirohata, K. Yamada, Y. Nakatani *et al.* // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2020. – Vol. 509. – P. 166–711.
3. New Class of Materials: Half-Metallic Ferromagnets / R. De Groot, F. Mueller, P. Van Engen, K. Buschow // Phys. Rev. Lett. – 1983. – Vol. 50, Iss. 25. – P. 2024–2027.
4. Марченков, В.В. Полуметаллические ферромагнетики, спиновые бесщелевые полупроводники и топологические полуметаллы на основе сплавов Гейслера: теория и эксперимент / В.В. Марченков, В.Ю. Ирхин // Физика металлов и металловедение. – 2021. – Т. 122, № 12. – С. 1221–1246.
5. Galehgirian, S. First Principles Study on Half-Metallic Properties of Heusler Compounds Ti_2VZ ($Z = \text{Al, Ga, and In}$) / S. Galehgirian, F. Ahmadian // Solid State Communications. – 2015. – Vol. 202. – P. 52–57.
6. Qi, S. First-Principles Study on the Structural, Electronic and Magnetic Properties of the Ti_2VZ ($Z = \text{Si, Ge, Sn}$) Full-Heusler Compounds / S. Qi, J. Shen, C.-H. Zhang // Materials Chemistry and Physics. – 2015. – Vol. 164. – P. 177–182.
7. Kresse, G. Efficient Iterative Schemes for Ab initio Total-Energy Calculations using a Plane-wave Basis Set / G. Kresse, J. Furthmüller // Phys. Rev. B. – 1996. – Vol. 54, Iss. 16. – P. 11169–11186.

8. Kresse G., Joubert D. From Ultrasoft Pseudopotentials to the Projector Augmented-Wave Method / G. Kresse, D. Joubert // *Phys. Rev. B.* – 1999. – Vol. 59, Iss. 3. – P. 1758–1775.

9. Accurate First-Principles Structures and Energies of Diversely Bonded Systems from an Efficient Density Functional / J. Sun, R.C. Remsing, Y. Zhang *et al.* // *Nature chemistry.* – 2016. – Vol. 8, no. 9. – P. 831–836.

10. Graf, T. Simple Rules for the Understanding of Heusler Compounds / T. Graf, C. Felser, S. Parkin // *Prog. Solid State Chem.* – 2011. – Vol. 39, Iss. 1. – P. 1–50.

11. Commentary: The Materials Project: A Materials Genome Approach to Accelerating Materials Innovation / A. Jain, S.P. Ong, G. Hautier *et al.* // *APL Materials.* – 2013. – no. 1 (1). – P. 011002.

12. Robust Fully-Compensated Ferrimagnetism and Semiconductivity in Inverse Heusler Compounds: Ti_2VZ ($Z = P, As, Sb, Bi$) / Y.J. Zhang, Z.H. Liu, G.D. Liu *et al.* // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* – 2018. – Vol. 449. – P. 515–521.

13. Meta-GGA SCAN Functional in the Prediction of Ground State Properties of Magnetic Materials: Review of the Current State / V. Sokolovskiy, D. Baigutlin, O. Miroshkina, V. Buchelnikov // *Metals.* – 2023. – Vol. 13, Iss. 4. – P. 728.

Поступила в редакцию 6 июля 2025 г.

Сведения об авторах

Раев Андрей Александрович – аспирант, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: raiev.a@mail.ru.

Ерагер Ксения Романовна – кандидат физико-математических наук, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: eragerk@rambler.ru.

Соколовский Владимир Владимирович – доктор физико-математических наук, доцент, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: vsokolovsky84@mail.ru.

Бучельников Василий Дмитриевич – доктор физико-математических наук, профессор, Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: buche@csu.ru.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2025, vol. 17, no. 3, pp. 71–78*

DOI: 10.14529/mmph250308

PHASE STABILITY AND ELECTRONIC STRUCTURE OF HEUSLER ALLOYS Ti_2VZ ($Z = Al, As, Ga, Ge, In, P, Sb, Si, Sn$)

A.A. Raev, K.R. Erager, V.V. Sokolovsky, V.D. Buchelnikov
Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation
E-mail: raiev.a@mail.ru

Abstract. The article deals with the chemical stability, structural, magnetic, and electronic properties of Ti_2VZ ($Z = Al, As, Ga, Ge, In, P, Sb, Si, Sn$) alloys using density functional theory methods. All compounds are found thermodynamically stable, and their stability correlates with the valence electron concentration (e/a) and decreases for heavier elements. The magnetic properties depend on composition and the degree of tetragonality: in the cubic phase, an increase in e/a reduces magnetization intensity, whereas lattice distortion increases it. Half-metallic behavior with 100 % spin polarization appears at $e/a = 4$ and 4,25, while Ti_2VSb ($e/a = 4,5$) acquires a semiconducting state with a narrow gap $\sim 0,1$ eV. The results agree with PBE functional calculations and demonstrate the advantages of the SCAN functional for accurate description of complex alloys.

Keywords: Heusler alloys $Ti-VZ$; half-metallic behavior; spin polarization; tetragonal distortion; electronic structure; magnetic properties; SCAN functional.

References

1. Žutić I., Fabian J., Sarma S. D. Spintronics: Fundamentals and Applications. *Reviews of modern physics*, 2004, Vol. 76, Iss. 2, p. 323. DOI: 10.1103/RevModPhys.76.323
2. Hirohata A., Yamada K., Nakatani Y., Prejbeanu L., Diény B., Pirro P., Hillebrands B. Review on Spintronics: Principles and Device Applications. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Vol. 509, Article 166711. DOI: 10.1016/j.jmmm.2020.166711
3. De Groot R., Mueller F., Van Engen P., Buschow K. New Class of Materials: Half-Metallic Ferromagnets // *Phys. Rev. Lett.*, 1983, Vol. 50, Iss. 25, pp. 2024–2027. DOI: 10.1103/PhysRevLett.50.2024
4. Marchenkov V.V., Irkhin V.Y. Half-Metallic Ferromagnets, Spin Gapless Semiconductors, and Topological Semimetals Based on Heusler Alloys: Theory and Experiment. *Phys. Metals Metallogr.*, 2021, Vol. 122, pp. 1133–1157. DOI: 10.1134/S0031918X21120061
5. Galeghirian S., Ahmadian F. First Principles Study on Half-Metallic Properties of Heusler Compounds Ti_2VZ ($Z = Al, Ga, \text{ and } In$). *Solid State Communications*, 2015, Vol. 202, pp. 52–57. DOI: 10.1016/j.ssc.2014.10.017
6. Qi S., Shen J., Zhang C.-H. First-Principles Study on the Structural, Electronic and Magnetic Properties of the Ti_2VZ ($Z = Si, Ge, Sn$) Full-Heusler Compounds. *Materials Chemistry and Physics*, 2015, Vol. 164, pp. 177–182.
7. Kresse G., Furthmüller J. Efficient Iterative Schemes for Ab initio Total-Energy Calculations using a Plane-Wave Basis Set. *Phys. Rev. B.*, 1996, Vol. 54, Iss. 16, pp. 11169–11186. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.11169
8. Kresse G., Joubert D. From Ultrasoft Pseudopotentials to the Projector Augmented-Wave Method. *Phys. Rev. B*, 1999, Vol. 59, Iss. 3, pp. 1758–1775. DOI: 10.1103/PhysRevB.59.1758
9. Sun J., Remsing R.C., Zhang Y., Sun Z., Ruzsinszky A., Peng H., Yang Z., Paul A., Waghmare U., Wu X., Klein M.L., Perdew J.P. Accurate First-Principles Structures and Energies of Diversely Bonded Systems from an Efficient Density Functional. *Nature chemistry*, 2016, Vol. 8, pp. 831–836.
10. Graf T., Felser C., Parkin S. Simple Rules for the Understanding of Heusler Compounds. *Prog. Solid State Chem.*, 2011, Vol. 39, pp. 1–50. DOI: 10.1016/j.progsolidstchem.2011.02.001
11. Jain A., Ong S.P., Hautier G., Chen W., Richards W.D., Dacek S., Cholia S., Gunter D., Skinner G., Ceder K.A., Persson K. Commentary: The Materials Project: A Materials Genome Approach to Accelerating Materials Innovation. *APL Materials*, 2013, Vol. 1, p. 011002. DOI: 10.1063/1.4812323
12. Zhang Y.J., Liu Z.H., Liu G.D., Ma X.Q., Cheng Z.X. Robust Fully-Compensated Ferrimagnetism and Semiconductivity in Inverse Heusler Compounds: Ti_2VZ ($Z = P, As, Sb, Bi$). *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2018, Vol. 449, pp. 515–521. DOI: 10.1016/j.jmmm.2017.10.088
13. Sokolovskiy V., Baigutlin D., Miroshkina O., Buchelnikov V. Meta-GGA SCAN Functional in the Prediction of Ground State Properties of Magnetic Materials: Review of the Current State. *Metals*, 2023, Vol. 13, Iss. 4, p. 728. DOI: 10.3390/met13040728

Received July 6, 2025

Information about the authors

Raev Andrew Aleksandrovich is Post-graduate Student, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: raiev.a@mail.ru.

Erager Ksenia Romanovna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: eragerk@rambler.ru.

Sokolovsky Vladimir Vladimirovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation; e-mail: vsokolovsky84@mail.ru.

Buchelnikov Vasily Dmitrievich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: buche@csu.ru.