ISSN (Print) 1598-5385
ISSN (Online) 2233-6648
≪연구논문≫ Journal of the Korean Magnetics Society 25(2), 31-38 (2015) http://dx.doi.org/10.4283/JKMS.2015.25.2.031

Half-metallicity and Magnetism at the (001) Surfaces of the Quaternary Heusler Alloys CoFeCrZ (Z = Ga, Ge): A First-principles Study

Dong-Chul Kim
Department of Electrical and Electronics Engineering, Halla University, Wonju 220-712 Korea

Jae Il Lee*
Department of Physics, Inha University, Incheon 402-751, Korea

(Received 11 March 2015, Received in final form 3 April 2015, Accepted 7 April 2015)

Recently, a first-principles study led to a prediction that quaternary Heusler compounds, CoFeCrZ (Z = Ga, Ge) are excellent half-metallic ferromagnets. In this study, we investigate the electronic and the magnetic properties at the (001) surfaces of CoFeCrGa and CoFeCrGe by means of the full-potential linearized augmented plane wave (FLAPW) method within generalized gradient approximation. We considered two types of surface termination: CoFe-terminated and CrZ-terminated surfaces, Z being either Ga or Ge. From the calculated total magnetic moments and the local density of states, we found that half-metallicity is not preserved for all the surfaces. But the calculated atomic density of states showed that CrGa-terminated surface of the CoFeCrGa is almost half-metallic. The magnetic moment of the Co, Fe, or Cr atoms at the surface or subsurface layers in each system had very different values.

Keywords : half-metallicity, surface magnetism, electronic structure

4원 호이슬러 합금 CoFeCrZ(Z = Ga, Ge)의 (001) 표면에서의 자성과 반쪽금속성: 제일원리 계산 연구

김동철
한라대학교 전기전자공학과, 강원 원주시 한라대 1길, 220-712

이재일*
인하대학교 물리학과, 인천시 남구 인하로 100, 402-751

(2015년 3월 11일 받음, 2015년 4월 3일 최종수정본 받음, 2015년 4월 7일 게재확정)

최근에 전자구조 계산으로 반쪽금속성을 가진다는 것이 확인된 4원 호이슬러 화합물인 CoFeCrGa와 CoFeCrGe의 (001)표면에서 반쪽금속성의 유지여부와 표면자성을 Full-potential Linearized Augmented Plane Wave 에너지띠 계산방법을 통해 연구하였다. 이를 위해 두 화합물 모두에서 각기 CoFe와 CrGa, 그리고 CrGe로 끝나는 (001)표면을 모두 고려하였다. 계산된 상태밀도로부터 두 화합물의 두가지 절단표면계 모두에서 반쪽금속성이 유지되지 못함을 알았다. 다만 CoFeCrGa에서 CrGa(001) 표면계는 그 상태밀도로부터 거의 반쪽금속성을 가짐을 알았다. 두 계에서 표면이나 표면 밑층의 Co나 Fe, 그리고 Cr 원자의 자기모멘트는 계에 따라 상당히 다른 값을 가졌다.

주제어 : 반쪽금속성, 표면자성, 전자구조 계산

© The Korean Magnetics Society. All rights reserved.
*Corresponding author: Tel: +82-32-860-7654,
Fax: +82-32-872-7562, e-mail: jilee@inha.ac.kr

I. 서 론

반쪽금속에서는 한 쪽 스핀 전자는 금속성을 나타내고 다른 쪽 스핀 전자는 반도체나 부도체적 성질을 가지기 때문에 스핀분극률이 100 %이다. 따라서 반쪽금속성 물질은 다양한 스핀트로닉스 소자에 응용 가능성이 크기 때문에 많은 관심을 받아 왔다.

네덜란드의 de Groot가 반호이슬러 화합물인 NiNbSn에서 반쪽금속성을 처음 발견한 이래[1], 페라이트[2]나 크롬산화물[3] 및 호이슬러 구조[4, 5]를 가진 다양한 화합물에서도 반쪽금속성이 확인되었다. 이 중 호이슬러 화합물이 실용적 면에서 많은 관심을 받았는데 이는 호이슬러 구조가 주로 zinc-blende 구조를 가지는 반도체와 구조적으로 잘 부합될 수 있기 때문이다. 호이슬러 구조를 가진 화합물 중 코발트계 화합물이 높은 큐리 온도와 큰 자기모멘트로 각광을 받고 있다. 이 중에서 Co_2FeZ나 Co_2CrZ(Z = Al, Si, Ga, Ge)가 매우 높은 큐리 온도를 가지는 반쪽금속이라는 것이 이론적으로 예측되었다[6, 7]. 실제로 이들 화합물들이 실험적으로 합성되었는데, 그중에서 Co_2FeSi가 6μ_B의 가장 큰 자기모멘트와 가장 높은 1100 K의 큐리온도를 가진다는 것이 보고되었으며[8], Kim과 Lee는 제일원리 계산을 통해 Co_2FeSi의 (001)표면에서 반쪽금속성이 유지되는지 여부를 탐구하기도 하였다[9].

이러한 3원 호이슬러 뿐 아니라 코발트를 포함한 4원 호이슬러 구조의 반쪽금속성에도 관심이 미치게 되어 CoFeMnZ (Z = Al, Si, Ga, Ge)나 NiCoMnGa 등도 반쪽금속성을 나타내면서 비교적 높은 320 K에서 710 K 사이의 큐리온도를 가진다는 것이 최근에 보고되었다[10-12]. 하지만 이들은 거의 0 eV에 가까운 작은 반쪽금속 간격을 가졌다.

이러한 결과에 동기를 부여 받아 최근에 Gao 등[13]은 제일원리 계산에 의해, 4원 화합물인 CoFeCrZ(Z = Al, Si, Ga, Ge)들이 2μ_B(CoFeCrAl 및 CoFeCrGa) 또는 3μ_B(CoFeCrSi 및 CoFeCrGe)의 자기모멘트를 가지는 반쪽금속이 됨을 보였다. 또한 이들은 CoFeCrSi에서 (001)표면의 자성과 반쪽금속성에 대해 이론적 계산을 수행하고 CrSi나 CoFe 원자로 끝나는 (001)표면 모두 반쪽금속성이 깨짐을 보였다.

본 논문에서는 이들이 다루지 않은 CoFeCrGa와 CoFeCrGe에서 (001)표면의 전자구조를 계산하여 표면의 자성과 반쪽금속성 유지 여부를 검토하고자 한다.

II. 연구방법 및 모형

4원 호이슬러 합금인 CoFeCrGa 및 CoFeCrGe에서 (001) 표면을 고려하면, CoFe 원자로 끝나는 표면과 CrGa 또는 CrGe 원자로 끝나는 두 종류의 표면이 있을 수 있는데, 여기서는 이들 표면 모두에 대해 연구하였다. 이들 표면의 전자구조 계산을 위해 각기 9층으로 이루어진 판 모형을 채택하였다. 이렇게 하면 9층 중에서 가운데층은 덩치상태와 비슷한 전자구조를 가질 것으로 예상된다. 각 판에서 층간 간격이나 면내의 원자사이의 거리는 덩치상태의 경우와 같이 택하였다. 이에 따라, 덩치의 격자상수가 각기 10.828 a.u. 및 10.809 a.u.인 CoFeCrGa판과 CoFeCrGe판에서 그 층간 간격은 2.707 a.u.와 2.702 a.u.이다. 또한 (001)면에서 2차원 기본격자는 한 변이 각기 7.657 a.u.와 7.643 a.u.인 정사각형이다.

표면 전자구조 계산을 위해 FLAPW(Full-potential Liniarized Augmented Plane Wave) 에너지 띠 방법[14]을 이용하였으며. 교환상관 퍼텐셜에 대해서는 PBE형[15]의 일반기울기 근사(GGA)를 채택하였다. 원자가전자들에 대해서는 스핀-궤도 상호작용을 포함하지 않고 준상대론적으로 취급하였으며, 핵심전자들은 디락 방정식을 고려하여 완전상대론적 취급을 하였다[16].

FLAPW 방법에서 고려하는 머핀틴(Muffin-Tin)구의 반지름으로는 모든 원자에 대해 2.3 a.u.로 잡았으며, 균등하게 잡은 36개의 **k**-점에 대해 Kohn-Sham 방정식[17, 18]을 풀어 에너지 고유값을 얻었다. 자체충족적 수렴조건은 전하밀도와 스핀밀도가 각각 1.0×10^{-4} e/a.u.^{3} 이하일 때로 택하였다.

III. 결과 및 논의

Fig. 1과 2에 CoFeCrGa에서 CrGa 원자로 끝나는 표면계(CrGa-term으로 나타내기로 한다)와 CoFe 원자로 끝나는 표면계(CoFe-term)에 대한 원자별 상태밀도가 주어져 있다. Fig. 1의 CrGa-term 계를 보면 오른쪽 패널에서 내부 층 원자들의 경우 모두 소수스핀 상태밀도에서 페르미 에너지를 중심으로 띠간격이 존재하여, 덩치 CoFeCrGa가 반쪽금속임을 확인시켜 주고 있다. 왼쪽 패널에서 표면층의 Cr(S)이나 Ga(S)원자, 표면 밑층의 Co(S-1)이나 Fe(S-1)원자에 대한 상태밀도를 보면 오른쪽 패널의 내부층 원자에 비해 가전자의 상태밀도가 낮은 에너지 쪽으로 조금 이동하여 페르미 에너지에 살짝 걸쳐 있음을 알게 되는데, 이는 CrGa-term 표면계는 반쪽금속성이 살짝 깨지고 있음을 나타내는 것이다. 실제로 이 계의 총 자기모멘트는 12.98μ_B로 반쪽금속의 특성이라 할 수 있는 정수배에 가까운 값을 가지고 있다. 위와 같은 본 논문에서의 결과는 교환상관퍼텔셜을 GGA로 취급하여 얻은 것으로서, 참고문헌[9]에서처럼 +U를 도입하여 계산한다면 반쪽금속성이 유지될 가능성도 있을 것으로 예측되어 차후에 이를 위한 보충연구가 필요하다고 생각된다.

Table I에는 CrGa-term계에서 원자별로 s, p, d 등 각운동

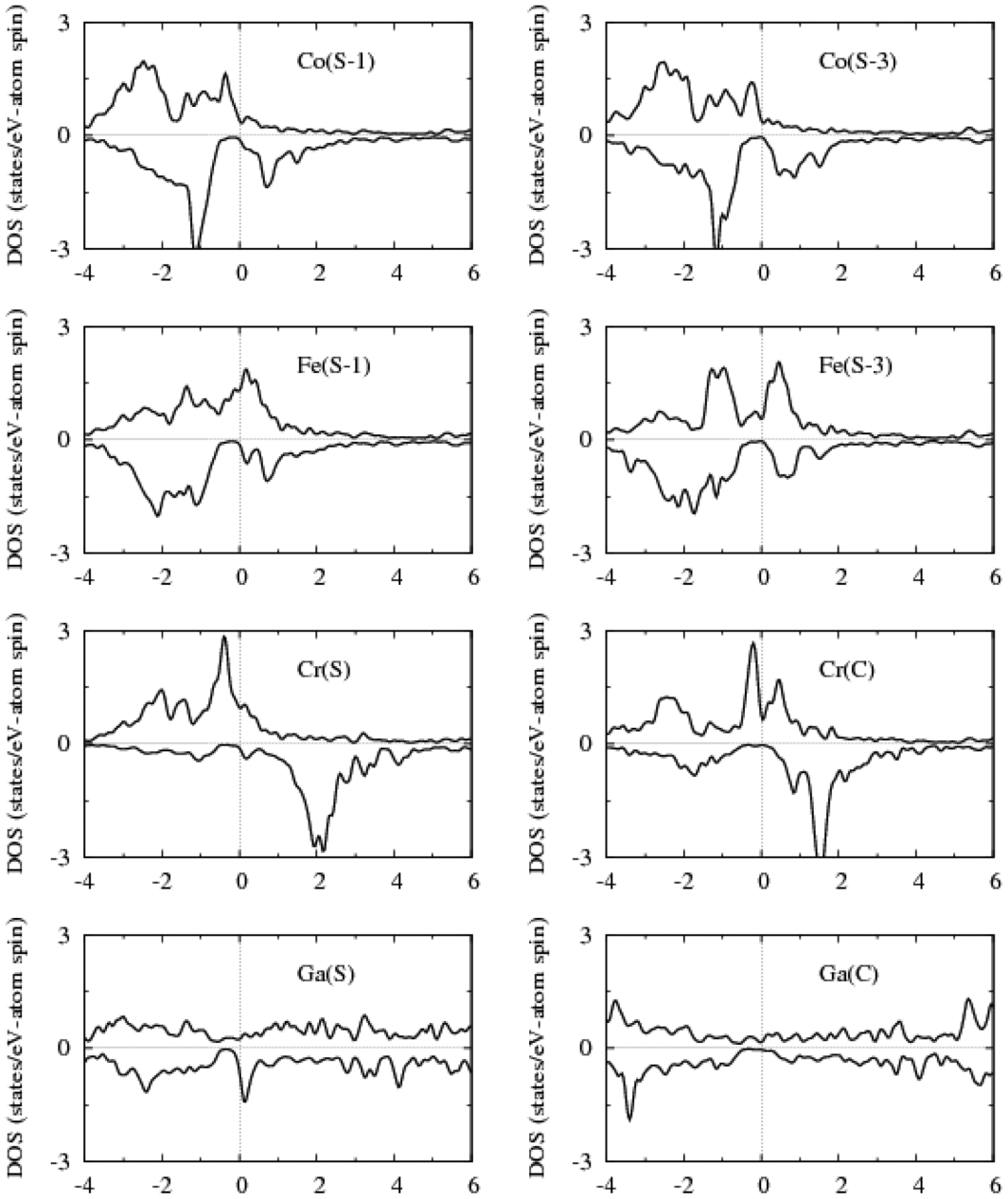

Fig. 1. Atom-projected spin-polarized density of states (DOS) for the chosen atoms of the CrGa-term of the CoFeCrGa (001) surface system. The spin-down DOS values are multiplied by a negative number, and the Fermi levels are set to zero.

량에 따른 다수스핀과 소수스핀전자수 및 총전자수 그리고 자기모멘트 값이 제시되어 있다. 이를 보면 Co원자의 경우에 표면 밑층인 (S-1)층의 자기모멘트는 0.92μ_B로서 안쪽의 (S-3)층의 값인 0.94μ_B와 비슷한 값을 가졌으며, Fe원자의 경우는 (S-1)층의 자기모멘트가 –0.59μ_B로서 내부 (S-3)층의 –0.87μ_B보다 절대값 크기가 작아졌다. Cr원자의 경우는 표면 S층의 자기모멘트는 3.05μ_B로서, 가운데 층인 C층 원자의 1.83μ_B보다 훨씬 증가하였다. 이는 Fig. 1의 Cr(C)와 Cr(S) 원자의 상태밀도를 비교하여 보면 알 수 있듯이 자성전이금속 표면에서 전형적으로 나타나는 표면 효과, 즉 띠좁힘 효과와 교환분리의 증가로 인한 것이다.

Fig. 2에 주어진 CoFeCrGa에서 CoFe-term 표면계에 대한 상태밀도를 보면 오른쪽 패널에 주어진 내부 층의 상태밀도는 거의 반쪽금속성을 유지하고 있으나, 왼쪽 패널의 표면층이나 표면 밑층 원자를 보면 반쪽금속성이 깨져 있음을 알 수 있다. 실제로 이 계의 총자기모멘트는 9.81μ_B로 정수와는 거리가 있다. Table II에 주어진 각 원자의 자기모멘트를 보면 표면 Co(S)원자는 가운데층 Co(C)원자에 비해 자기모멘

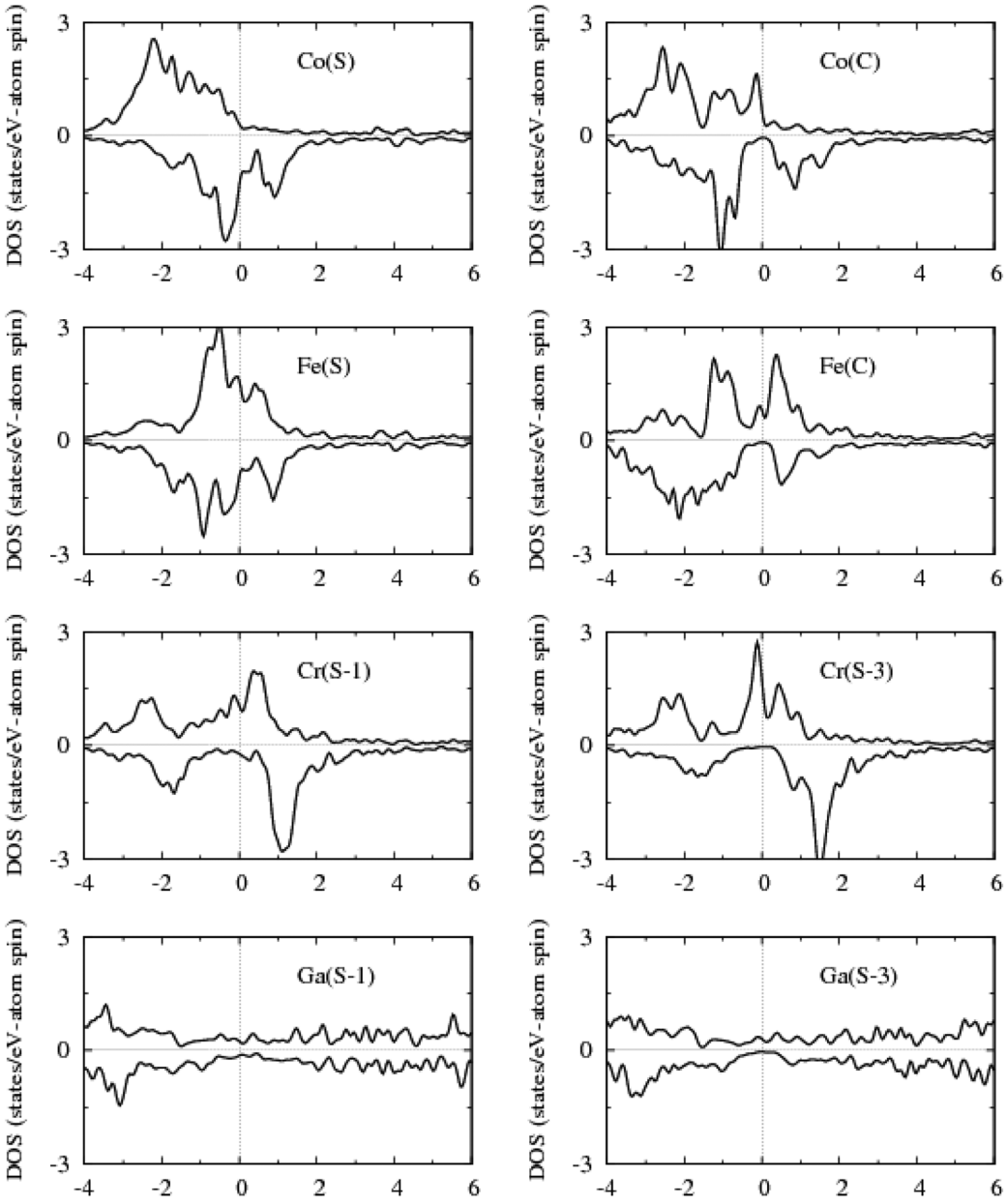

Fig. 2. Atom-projected spin-polarized density of states (DOS) for the chosen atoms of the CoFe-term of the CoFeCrGa (001) surface system. The spin-down DOS values are multiplied by a negative number, and the Fermi levels are set to zero.

Table I. *l*-decomposed electrons within muffin-tin spheres on the atoms in the CrGa-term of CoFeCrGa (001) surface system. The values of magnetic moments (MMs) calculated for the atoms are also given. S, S-1, and C denote the surface-, subsurface- and center layers.

Atom		s (↑/↓)	p (↑/↓)	d (↑/↓)	Total (↑/↓)	MM [μ_B]
Co	S-1	0.39 (0.20/0.19)	0.42 (0.21/0.21)	7.34 (4.12/3.22)	8.16 (4.54/3.62)	0.92
	S-3	0.39 (0.20/0.19)	0.42 (0.21/0.21)	7.34 (4.13/3.21)	8.18 (4.56/3.62)	0.94
Fe	S-1	0.37 (0.18/0.19)	0.40 (0.19/0.21)	6.26 (2.84/3.42)	7.04 (3.22/3.82)	–0.59
	S-3	0.37 (0.18/0.19)	0.40 (0.19/0.21)	6.26 (2.71/3.55)	7.05 (3.09/3.96)	–0.87
Cr	S	0.26 (0.15/0.11)	0.20 (0.11/0.09)	4.00 (3.50/0.50)	4.49 (3.77/0.72)	3.05
	C	0.31 (0.16/0.15)	0.33 (0.17/0.16)	3.98 (2.89/1.09)	4.67 (3.25/1.42)	1.83
Ga	S	0.87 (0.43/0.44)	0.70 (0.34/0.36)	9.90 (4.95/4.95)	11.49 (5.74/5.75)	–0.02
	C	0.82 (0.41/0.41)	0.89 (0.43/0.46)	9.94 (4.97/4.97)	11.67 (5.82/5.85)	–0.03

Table II. *l*-decomposed electrons within muffin-tin spheres on the atoms in the FeCo-term of CoFeCrGa (001) surface system. The values of magnetic moments (MMs) calculated for the atoms are also given.

Atom		s (↑/↓)	p (↑/↓)	d (↑/↓)	Total (↑/↓)	MM [μ_B]
Co	S	0.37 (0.20/0.17)	0.24 (0.13/0.11)	7.26 (4.35/2.91)	7.88 (4.68/3.20)	1.47
	C	0.39 (0.20/0.19)	0.42 (0.21/0.21)	7.33 (4.16/3.17)	8.18 (4.59/3.59)	1.00
Fe	S	0.32 (0.16/0..16)	0.22 (0.11/0.11)	6.22 (3.08/3.14)	6.77 (3.36/3.41)	–0.05
	C	0.37 (0.18/0.19)	0.40 (0.19/0.21)	6.25 (2.65/3.42)	7.05 (3.04/4.51)	–0.97
Cr	S-1	0.31 (0.49/0.47)	0.32 (0.16/0.16)	3.95 (2.53/1.42)	4.63 (2.87/1.76)	1.11
	S-3	0.31 (0.16/0.15)	0.33 (0.17/0.16)	3.98 (2.83/1.15)	4.66 (3.18/1.48)	1.70
Ga	S-1	0.82 (0.41/0.41)	0.87 (0.42/0.45)	9.93 (4.96/4.97)	11.65 (5.81/5.84)	–0.03
	S-3	0.82 (0.41/0.41)	0.89 (0.43/0.46)	9.94 (4.97/4.97)	11.67 (5.82/5.85)	–0.04

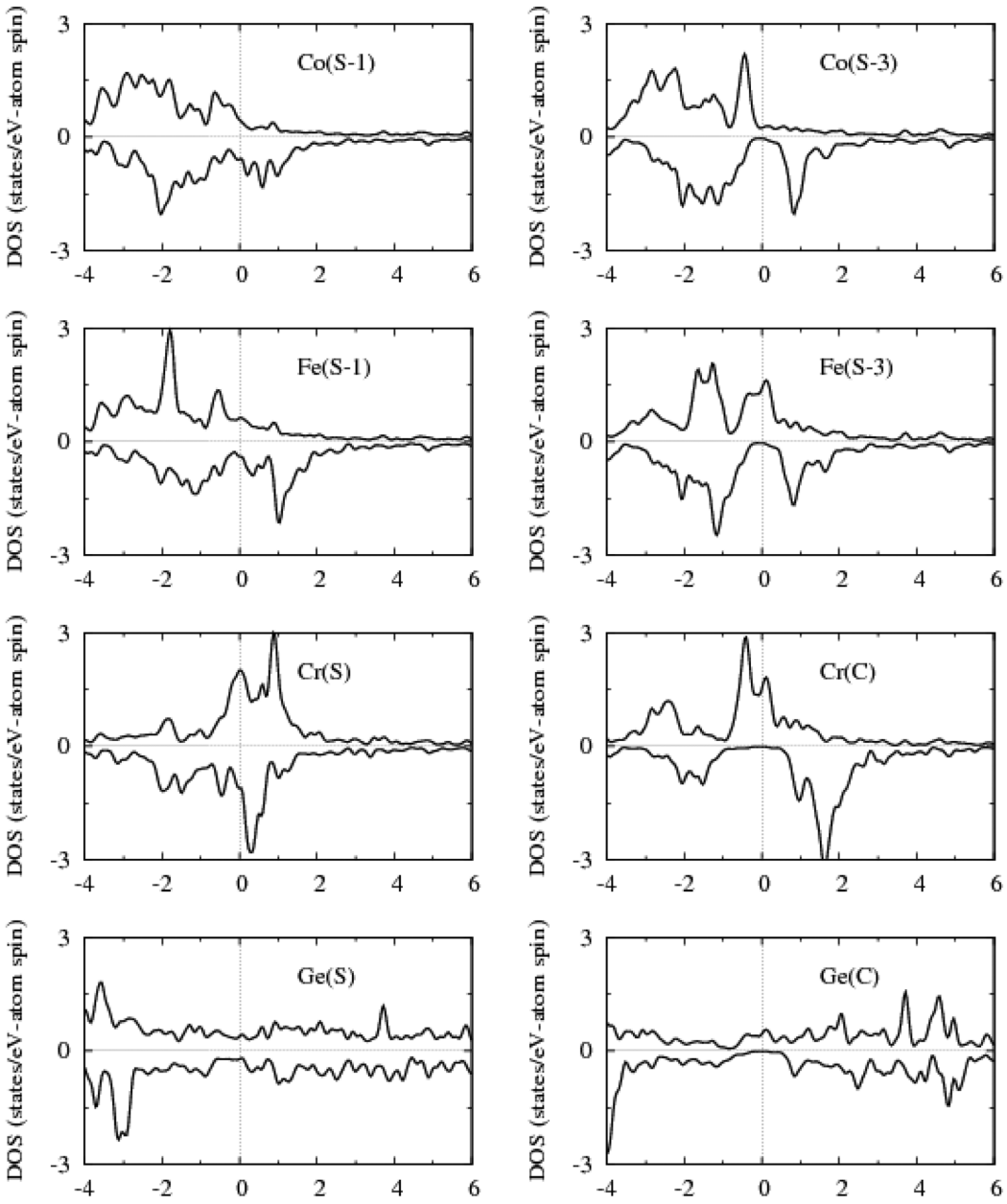

Fig. 3. Atom-projected spin-polarized density of states (DOS) for the chosen atoms of the CrGe-term of the CoFeCrGe (001) surface system. The spin-down DOS values are multiplied by a negative number, and the Fermi levels are set to zero.

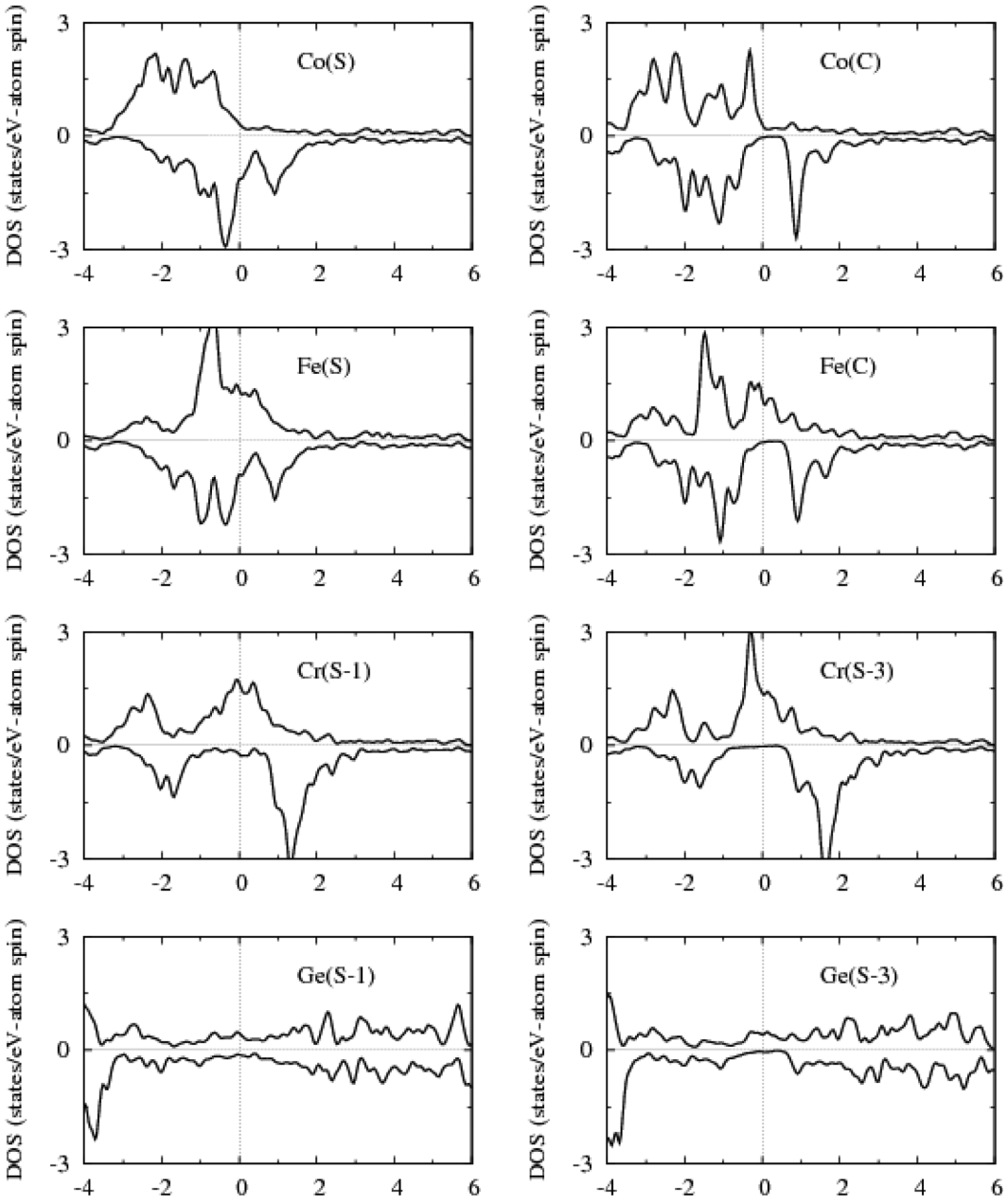

Fig. 4. Atom-projected spin-polarized density of states (DOS) for the chosen atoms of the CoFe-term of the CoFeCrGe (001) surface system. The spin-down DOS values are multiplied by a negative number, and the Fermi levels are set to zero.

트가 1.5배 가까이 증가하여 1.47μ_B의 값을 가졌는데 이 또한 띠좁힘과 교환분리가 증가하였기 때문이다. 한 가지 특이한 점은 표면 Fe(S) 원자의 자기모멘트가 –0.05μ_B로서 거의 자성이 없어졌다는 것이다.

Fig. 3과 4에는 CoFeCrGe에서 각기 CrGe-term계와 CoFe-term계에 대한 상태밀도가 주어져 있다. 이들에서 각기 오른쪽 패널에 주어진 내부 원자들의 상태밀도를 보면 거의 반쪽금속성을 가지고 있음을 알 수 있다. 그러나 왼쪽 패널에 주어진 표면 원자나 표면 밑층 원자들의 상태밀도는 이들 표면계에서 반쪽금속성이 깨짐을 알 수 있다. 실제로 이들 계의 총자기모멘트는 CrGe-term계의 경우 11.14μ_B, CoFe-term계의 경우 12.90μ_B로 정수가 아니라서, 반쪽금속성이 유지되지 못함을 확인시켜 주고 있다.

Table III 및 IV에는 각기 CrGe-term계와 CoFe-term계의 원자별 자기모멘트가 제시되어 있다. CrGe-term계에서 Cr(S)의 자기모멘트는 –0.55μ_B로서 내부 Cr 원자의 자기모멘트 값인 1.85μ_B에 비해 그 부호가 반대이면서서 크기도 상당히 줄어들었다. 또한 이 계에서 Fe(S-1) 원자의 자기모멘트는

Table III. *l*-decomposed electrons within muffin-tin spheres on the atoms in the CrGe-term of CoFeCrGe (001) surface system. The values of magnetic moments (MMs) calculated for the atoms are also given.

Atom		s (↑/↓)	p (↑/↓)	d (↑/↓)	Total (↑/↓)	MM [μ_B]
Co	S-1	0.39 (0.20/0.19)	0.43 (0.21/0.22)	7.34 (4.17/3.17)	8.21 (4.60/3.61)	1.00
	S-3	0.38 (0.19/0.19)	0.44 (0.21/0.23)	7.39 (4.18/3.21)	8.22 (4.59/3.63)	0.96
Fe	S-1	0.36 (0.19/0.17)	0.40 (0.20/0.20)	6.30 (3.84/2.46)	7.05 (4.25/2.85)	1.40
	S-3	0.35 (0.18/0.17)	0.41 (0.20/0.21)	6.34 (3.27/3.07)	7.12 (3.66/3.46)	0.20
Cr	S	0.25 (0.12/0.13)	0.20 (0.10/0.10)	4.01 (1.74/2.27)	4.49 (1.97/2.52)	–0.55
	C	0.31 (0.16/0.15)	0.34 (0.17/0.16)	4.11 (2.94/1.17)	4.77 (3.28/1.49)	1.85
Ge	S	1.12 (0.56/0.56)	1.17 (0.58/0.59)	9.98 (4.99/4.99)	12.29 (6.14/6.15)	–0.01
	C	1.06 (0.53/0.53)	1.31 (0.64/0.67)	10.02 (5.01/5.01)	12.43 (6.20/6.23)	–0.03

Table IV. *l*-decomposed electrons within muffin-tin spheres on the atoms in the FeCo-term of CoFeCrGe (001) surface system. The values of magnetic moments (MMs) calculated for the atoms are also given.

Atom		s (↑/↓)	p (↑/↓)	d (↑/↓)	Total (↑/↓)	MM [μ_B]
Co	S	0.36 (0.19/0.17)	0.25 (0.13/0.12)	7.28 (4.31/2.97)	7.91 (4.64/3.27)	1.37
	C	0.38 (0.19/0.19)	0.44 (0.21/0.23)	7.39 (4.19/3.20)	8.23 (4.61/3.62)	0.99
Fe	S	0.32 (0.16/0.16)	0.23 (0.12/0.11)	6.25 (3.10/3.15)	6.81 (3.38/3.43)	–0.04
	C	0.35 (0.18/0.17)	0.42 (0.20/0.21)	6.34 (3.33/3.01)	7.13 (3.73/3.40)	0.32
Cr	S-1	0.31 (0.16/0.15)	0.32 (0.16/0.16)	4.00 (2.68/1.32)	4.67 (3.02/1.65)	1.37
	S-3	0.30 (0.16/0.14)	0.32 (0.16/0.16)	4.04 (2.90/1.14)	4.70 (3.24/1.46)	1.78
Ge	S-1	1.07 (0.54/0.53)	1.29 (0.63/0.66)	10.01 (5.00/5.01)	12.41 (6.19/6.22)	–0.02
	S-3	1.06 (0.53/0.53)	1.31 (0.64/0.67)	10.02 (5.01/5.01)	12.42 (6.19/6.23)	–0.04

1.40μ_B로서 내부 원자인 Fe(S-3)의 0.20μ_B보다 상당히 증가하였다. Table IV를 보면 Fe(S)의 자기모멘트는 –0.04μ_B로서 가운데 층인 Fe(C) 값인 0.32μ_B보다 그 크기가 상당히 줄어 들었다. 이렇게 원자들의 위치에 따라 그 자기모멘트의 크기나 방향이 달라지는 것은 교환상호작용 에너지 부분을 낮추어 계가 안정된 자기배열 상태로 되려고 하기 때문으로 생각된다.

본 논문에서는 표면완화에 대한 계산을 수행하지 않았고, 압축이나 팽창이 표면의 반쪽금속성에 미치는 효과에 대해서도 검토하지 않았는데, 표면완화나 압축 및 팽창, 또는 국소적 질서 변화 등 대칭성을 약화시키는 외부적 요인은 반쪽금속성을 해치는 쪽으로 작용한다는 이전의 연구결과[19-22]를 볼 때, 이들 효과를 CoFeCrZ(Z = Ga, Ge)에서 CoFe-term이나 CrGe- 또는 CrGa-term에 고려하더라도, 본 연구에서 반쪽금속성이 유지되지 못한다는 계산을 반전시키는 결과를 얻지는 못할 것으로 예측된다. 단, 이러한 예측을 확인하기 위한 추가적 연구는 필요하다고 보인다.

IV. 결론 및 요약

최근에 전자구조 계산을 통해 반쪽금속성을 가진다는 것이 확인된 4원 호이슬러 화합물인 CoFeCrGa와 CoFeCrGe에서 그 (001)표면에 대해 FLAPW 에너지 띠 계산방법을 이용하여 표면자성과 반쪽금속성 유지여부를 탐구하였다. 이 화합물에서 (001)표면은 CoFe나 CrGa 또는 CrGe로 끝나는 두 개의 절단면이 있기 때문에 이들 두 가지 표면에 대해 모두 원자별 상태밀도 등을 계산하였다. 그 결과 CoFeCr*Z*(*Z* = Ga, Ge)에서 CoFe 절단면이나 CrGa 또는 CrGe로 끝나는 표면계 모두에서 덩치와는 달리 반쪽금속성이 유지되지 못함을 알게 되었다. 다만, CoFeCrGa에서 CrGa로 끝나는 표면계의 경우 상태밀도로 보아 거의 반쪽금속성이 유지됨을 알았으며, 이는 이 계의 총자기모멘트가 정수에 가까운 12.98μ_B라는 점과도 부합한다. 표면이나 표면 바로 밑층에서 Co나 Cr 그리고 Fe 원자의 자기모멘트는 4개의 계에 따라 상당히 다른 값을 가졌다. 예를 들면 CoFeCrGa에서 CrGa로 끝나는 면에서 Cr(S)의 자기모멘트는 3.05μ_B, Fe(S-1)의 자기모멘트는 –0.59μ_B였으나 CoFeCrGe에서 CrGe로 끝나는 면에서 Cr(S)의 자기모멘트는 1.11μ_B, Fe(S-1)는 1.40μ_B로 큰 차이를 보였다. 이렇게 계에 따라 자기모멘트의 부호나 크기가 상당히 다른 것은 자기모멘트의 배열에 따라 교환상호작용 에너지를 조절하여 계가 안정된 상태를 찾아가기 때문으로 생각된다.

감사의 글

이 연구는 2013년도 한라대학교 교내연구비 지원에 의한

것입니다.

References

[1] R. A. de Groot, F. M. Müller, P. G. van Engen, and K. H. J. Buschow, Phys. Rev. Lett. **50**, 2024 (1983).

[2] Y. S. Dedkov, U. Rudiger, and G. Guntherodt, Phys. Rev. B **65**, 064417 (2002).

[3] S. P. Lewis, P. B. Allen, and T. Sasaka, Phys. Rev. B **55**, 10253 (1997).

[4] I. Galanakis, P. H. Dederichs, and N. Papanikolaou, Phys. Rev. B **66**, 174429 (2002).

[5] T. Graf, C. Felser, and S. P. P. Parkin, Prog. Solid State Chem. **39**, 1 (2011).

[6] H. C. Kandpal, G. H. Fecher, and C. Felser, J. Phys. D **40**, 1507 (2007).

[7] J. Kuebler, G. H. Fecher, and C. Felser, Phys. Rev. B **76**, 024414 (2007).

[8] S. Wurmehl, G. H. Fecher, H. C. Kandpal, C. Felser, V. Ksenofontov, and H.-J. Lin, Appl. Phys. Lett. **88**, 032503 (2006).

[9] M. Kim and J. I. Lee, J. Korean Phys. Soc. **60**, 1068 (2012).

[10] X. Dai, G. Liu, G. H. Fecher, C. Felser, Y. Li, and H. Liu, J. Appl. Phys. **105**, 07E901 (2009).

[11] P. Klaer, B. Balke, V. Alijani, J. Winterlik, G. H. Fecher, C. Felser, and H. J. Elmers, Phys. Rev. B **84**, 144413 (2011).

[12] V. Alijani, J. Winterlik, G. H. Fecher, S. S. Naghavi, and C. Felser, Phys. Rev. B **83**, 184428 (2011).

[13] G. Y. Gao, L. Hu, K. L. Yao, B. Luo, and N. Liu, J. Alloy. Compd. **551**, 539 (2013).

[14] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, Phys. Rev. B **24**, 864 (1981).

[15] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).

[16] D. D. Koelling and B. N. Harmon, J. Phys. C **10**, 3107 (1977).

[17] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. **136**, B864 (1964).

[18] W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).

[19] J. C. Li and Y. J. Jin, Appl. Surf. Sci. **283**, 876 (2013).

[20] X. G. Xu, D. L. Zhang, Y. Wu, X. Zhang, X. Q. Li, H. L. Yang, and Y. Jiang, Rare Metals **31**, 107 (2012).

[21] J. L. Pan, J. Ni, and B. C. Yang, Physica B **405**, 1580 (2010).

[22] G. N. Li, Y. J. Jin, and J. I. Lee, Chin. Phys. B **19**, 097102 (2010).