ISSN (Print) 1598-5385
ISSN (Online) 2233-6648
≪연구논문≫ Journal of the Korean Magnetics Society 25(6), 175-179 (2015) http://dx.doi.org/10.4283/JKMS.2015.25.6.175

First-principles Study on the Half-metallicity and Magnetism of the (001) Surfaces of $(AlP)_1/(CrP)_1$ Superlattice

Beata Bialek and Jae Il Lee*
Department of Physics, Inha University, Incheon 22212, Korea

(Received 19 November 2015, Received in final form 7 December 2015, Accepted 7 December 2015)

The half-metallicity and magnetism of the (001) surfaces of $(AlP)_1/(CrP)_1$ superlattice were investigated by means of FLAPW (Full-potential Liniarized Augmented Plane Wave) method. We considered four types of (001) surface termination, i.e., Al(S)-, Cr(S)-, P(S)Al(S-1)- and P(S)Cr(S-1)-term systems. We found that only Cr(S)-term system maintains the half-metallicity at the surface as only this system has the calculated magnetic moment of integer number of bohr magnetons. The magnetic moment of Cr(S) atom in the system was 3.02 μ_B which was increased from the bulk value by the effects of band narrowing and increased spin-splitting at the surface. The electronic density of states of the P(S) atom in the P(S)Al(S-1)-term showed very sharp surface states due to the broken p_z bonds at the surface. We found there is still a strong p-d hybridization between the P(S) and Cr(S-1) layers in the P(S)Cr(S-1)-term which causes a considerable increase of magnetic moment of P(S) atom.

Keywords : $(AlP)_1/(CrP)_1$ superlattice, surface magnetism, half-metallicity, electronic structure calculation

$(AlP)_1/(CrP)_1$ 초격자계에서 (001) 표면의 자성과 반쪽금속성에 대한 제일원리 연구

Beata Bialek · 이재일*
인하대학교 물리학과, 인천시 남구 인하로 100, 22212

(2015년 11월 19일 받음, 2015년 12월 7일 최종수정본 받음, 2015년 12월 7일 게재확정)

덩치상태에서 반쪽금속성을 나타내는 $(AlP)_1/(CrP)_1$ 초격자계에서 (001) 표면의 자성과 반쪽금속성에 대해 FLAPW (Full-potential Liniarized Augmented Plane Wave) 방법을 이용하여 연구하였다. (001) 표면이 나타나는 Al(S)-, Cr(S)-, P(S)Al(S-1)- 및 P(S)Cr(S-1)-term 계 등 모두 네 가지 표면계를 고려하였다. 계산결과 Cr(S)-term 계만 정수배의 보어마그네톤의 자기모멘트를 가져 표면에서 반쪽금속성이 유지됨을 알았다. 이 계에서 표면 Cr 원자의 자기모멘트는 띠좁힘과 스핀분리의 증가 등의 표면효과로 인해 덩치상태에 비해 증가한 3.02 μ_B였다. P(S)Al(S-1)-term 계에서 표면 P(S)층의 상태밀도는 p_z 상태의 국소화로 인해 매우 예리한 표면상태의 봉우리를 보여 주었으며, P(S)Cr(S-1)-term의 경우 P(S)층과 Cr(S-1)층 사이에 큰 혼합이 존재하였고, 그 결과 P(S)층의 자기모멘트는 –0.33 μ_B이었다.

주제어 : $(AlP)_1/(CrP)_1$ 초격자계, 표면자성, 반쪽금속성, 전자구조 계산

I. 서 론

1983년에 de Groot 등이 반호이슬러 구조의 NiNbSn[1]에서 반쪽금속성을 처음 발견한 이래 반쪽금속에 대한 관심이 증대되어 왔다. 반쪽금속물질은 전자들 중 한 방향의 스핀은 금속성을 띠고 다른 쪽 스핀은 부도체적 성질을 가지는 강자성 물질로서 스핀트로닉스에 다양한 응용성을 가지고 있다. 스핀트로닉스 소자에서 일부는 아직 반도체를 이용하여야 하기 때문에 반도체와 접합을 이루는 반쪽금속물질도 반도체에 부합하는 구조 즉 호이슬러나 반호이슬러 구조의 반쪽금속 물질이 더 큰 관심의 대상이 되어왔다. 이 중 Co나 Fe, 그리고 Mn 등 3d 자성전이금속 기반의 호이슬러 물질[2]이 높은 큐리온도와 큰 자기모멘트를 가지기 때문에 주목을 받았으며, 철이나 크롬 산화물[3, 4] 등도 반쪽금속성을 가진다는 것이 실험 및 이론적 결과로 제시되었다.

이러한 상황에서 대부분의 반도체 물질이 가지는 섬아연광 구조(zinc-blende; ZB)를 가지는 반쪽금속물질 개발을 위한

© 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

연구가 진행되었는데 이 중 최초로 발견된 물질은 Akinaga 등[5]이 발견한 CrAs이다. 이들은 전자구조 계산을 통해 ZB 구조의 CrAs가 반쪽금속성을 가진다는 것을 먼저 확인한 다음, 분자다발쌓기(molecular beam epitaxy; MBE) 방법을 이용하여 박막상태의 CrAs를 합성하였다. 이 후 CrP나 CrTe 등[6, 7] 전이금속과 V나 VI족으로 이루어진 pnitides 나 chalcogenide 화합물도 반쪽금속성을 가진다는 것이 발견되었다.

이후 새로운 반쪽금속을 발견하기 위한 전자구조계산 연구의 결과, 다양한 물질에서 반쪽금속성이 나타남을 알게 되었다. 이 중 특이한 것은 ZB 구조를 가지는 II^A-V 화합물인 CaP, CaAs, CaSb와 CaN 등[8, 9]과 ZB AB(A=Ca, Sr, Ba; B=N, P, As, Sb) 화합물 등[10]에서도 반쪽금속성이 발견되었는데, 이들 화합물들은 전이금속을 포함하지 않기 때문에 d_0 또는 sp 반쪽금속이라 부른다. 이 후 다양한 sp 반쪽금속들이 전자구조계산을 통해 발견되었는데, 예를 들자면 ZB 구조나 암염 구조의 SrC와 BaC 및[11, 12] 암염구조를 가진 NaN과 KN[13] 등이 있다.

최근들어 두 종류의 sp 반쪽금속이 초격자구조를 이루고 있을 때의 전자구조 계산도 수행되고 있다. Song 등[14]은 ZB 구조의 CaX(X=N, P, As)와 YX(Y=Al, Ga, In)이 (001)면으로 초격자를 이룬 $(CaX)_1/(YX)_1$ 초격자에서 전자구조 계산을 한 결과 이들 아홉 가지 초격자 조합 모두가 1 μ_B의 자기모멘트를 가지는 반쪽금속임을 확인하였다. 또한 Marbet 등[15]은 $Al_{1-x}Cr_xP$의 화합물과 $(AlP)_1/(CrP)_1$ 및 $(AlP)_1/(CrP)_3$계에 대해 FP-LMTO(full-potential linear muffin-tin orbital) 방법으로 전자구조를 계산한 결과 $Al_{0.875}Cr_{0.125}P$, $Al_{0.75}Cr_{0.25}P$, $Al_{0.5}Cr_{0.5}P$는 각기 3, 6, 3 μ_B을 갖는 반쪽금속이며 $(AlP)_1/(CrP)_1$ 및 $(AlP)_1/(CrP)_3$는 각기 3 μ_B을 갖는 반쪽금속임을 보였다.

본 연구에서는 $(AlP)_1/(CrP)_1$ 초격자계에서 (001) 표면에 대한 전자구조를 계산하여 그 표면계가 반쪽금속성을 유지하는지 여부와 원자별 상태밀도를 검토하여 이들 계의 전자구조에 대한 이해의 폭을 넓히고자 한다.

II. 연구 방법 및 모형

$(AlP)_1/(CrP)_1$ 초격자계에서 (001) 표면에 대한 전자구조를 계산하기 위해 Al이나 Cr 원자로 끝나는 두 가지 표면과 P 원자가 표면에 있고 표면 밑층에 각기 Al 원자나 Cr 원자가 놓인 두 표면계를 포함하여 모두 네 가지 표면계를 고려하였다. 이들 표면계를 각기 Al(S)-term, Cr(S)-term, P(S)Al(S-1)-term 및 P(S)Cr(S-1)-term으로 나타내기로 한다. 표면의 전자구조를 계산하기 위해 판 모형을 채택하였으며 Al(S)-나 Cr(S)-term의 경우는 각기 Al과 Cr 원자가 가운데 층에 놓인 9층의 판을 구성하였고, P(S)Al(S-1)-이나 P(S)Cr(S-1)-term 계는 각기 Al(S)- 및 Cr(S)-term 계의 양 끝에 P 원자 층을 붙인 11층의 판을 구성하였다. 덩치상태의 격자상수는 Merabet 등[15]이 계산한 5.27 A(= 9.95886 a.u.)로 잡았기에 표면계의 2차원 격자상수는 이 값의 $1/\sqrt{2}$ 인 7.04191 a.u.이다.

본 연구에서는 FLAPW(Full-potential Liniarized Augmented Plane Wave)[16] 방법을 이용하여 전자구조 계산을 하였는데 이 방법에서는 효율적 기저함수 구성을 위해 물질 내 공간을 원자핵을 중심으로 한 MT(Muffin Tin) 구 영역과 그 사이 영역으로 나누게 되는데 MT 구내에서는 구면조화함수를 기저로 택하고 사이 영역에서는 평면파를 기저로 하고 이들을 결합하여 보강평면파를 구성한다. 본 계산에서는 MT 구의 반지름으로 Cr 원자는 2.2 a.u., Al과 P 원자는 각기 2.1 a.u.로 택하였다. 이들 값은 흔히 택하는 값보다 좀 작은데 이는 Merabet 등이 계산한 격자상수가 작기 때문이다. 사용된 기저함수의 수는 각 계에서 원자당 150개 정도로 잡았고, **k**-점의 수는 못줄이는 브릴루앙 영역에서 25개를 택하여 이 각 점들에 대해 Kohn-Sham 방정식[17]을 풀어 에너지 띠를 구하였다. 이때 전하밀도와 스핀밀도가 각각 2.0×10^{-4} e/a.u.^{3} 이하로 되는 경우에 자체충족 수렴조건을 만족하는 것으로 간주하였다.

PBE 형태[18]의 함수로 교환상관 퍼텐셜을 나타내는 일반기울기 근사(Geralized Gradient Approximation; GGA)를 취하였고, 핵심전자들에 대해서는 디락 방정식을 고려하는 완전상대론적 취급을 하였으며[19] 원자가전자들은 준상대론적으로 취급하였다.

III. 결과 및 논의

먼저 각각의 계에 대해 계산한 총 자기모멘트를 보면, Al(S)-, Cr(S)-, P(S)Al(S-1)- 및 P(S)Cr(S-1)-term 계의 경우에 각기 5.31, 12.00, 4.89, 6.10 μ_B로서 총 자기모멘트가 보어마그네톤의 정수배를 가지는 Cr(S)-term 계만 반쪽금속성을 가진다고 할 수 있다. 이는 Rahman 등[20]이 계산한 CrP (001)의 결과와도 부합하는데, 이들의 계산결과도 역시 Cr로 끝나는 표면은 반쪽금속성을 유지하나 P 원자로 끝나는 표면계는 반쪽금속성이 깨졌다.

이러한 점은 각기 Fig. 1~4에 주어진 원자별 상태밀도를 통해 확인할 수 있다. Fig. 2에 주어진 Cr(S)-term의 경우를 보면 Cr(C)층부터 P(S-1)층이나 Cr(S)층까지 모두 소수스핀 상태밀도에서 페르미 에너지를 가운데 둔 에너지 간격을 보이고 있다. P(S-1)층과 P(S-3)층의 상태밀도를 보면 거의 비슷하나 소수스핀상태밀도에서 –2~–3 eV에 갈라진 세 개의 예

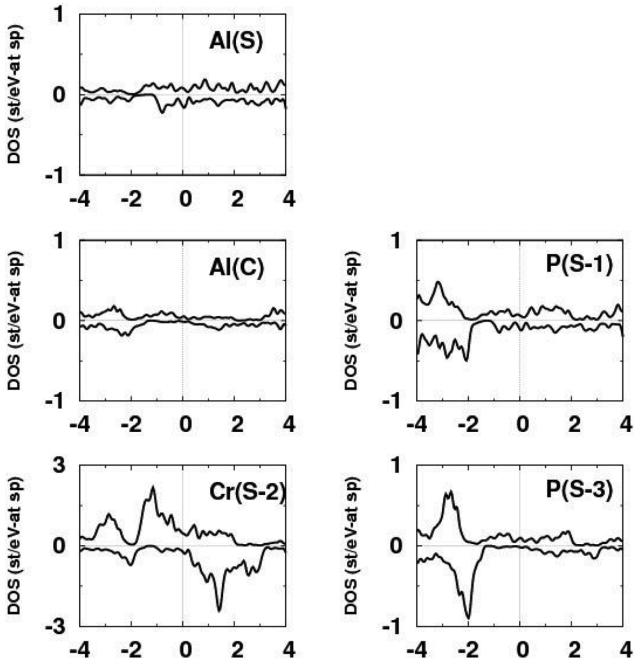

Fig. 1. Atom-projected spin-polarized density of states (DOS) for the atoms of the Al(S)-terminated $(AlP)_1/(CrP)_1(001)$ system. The spin-down DOS values are multiplied by a negative number, and the Fermi levels are set to zero.

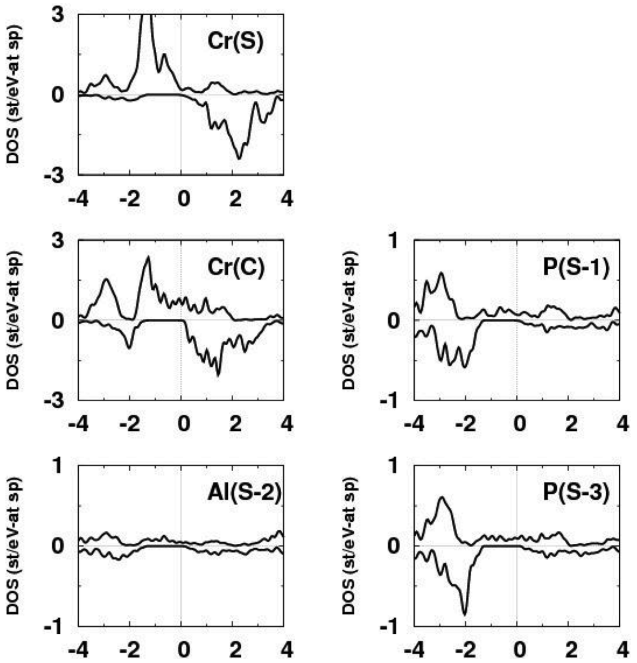

Fig. 2. Atom-projected spin-polarized density of states (DOS) for the atoms of the Cr(S)-terminated $(AlP)_1/(CrP)_1(001)$ system. The spin-down DOS values are multiplied by a negative number, and the Fermi levels are set to zero.

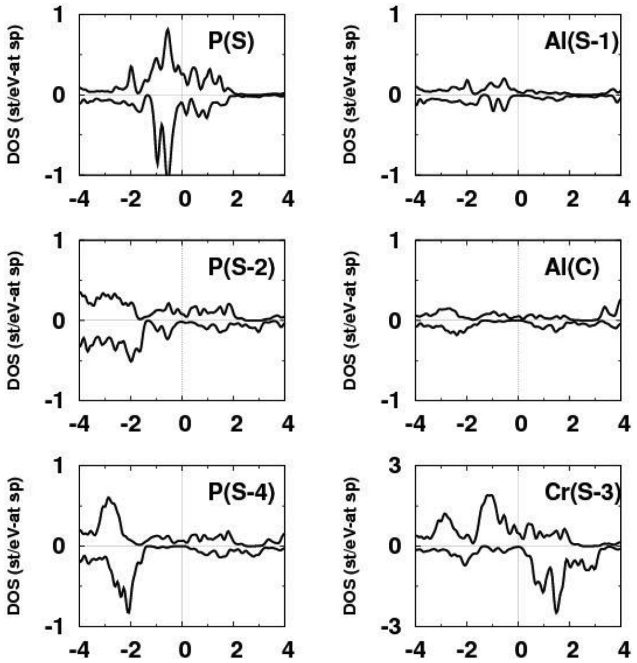

Fig. 3. Atom-projected spin-polarized density of states (DOS) for the atoms of the P(S)Al(S-1)-terminated $(AlP)_1/(CrP)_1(001)$ system. The spin-down DOS values are multiplied by a negative number, and the Fermi levels are set to zero.

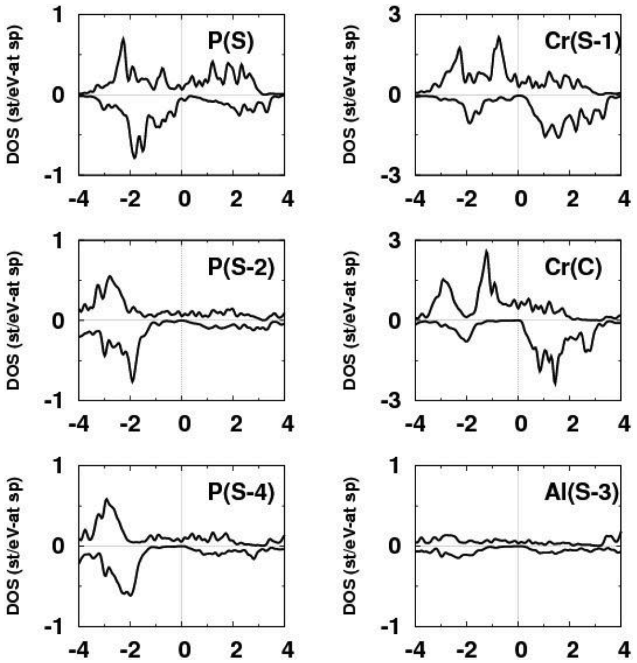

Fig. 4. Atom-projected spin-polarized density of states (DOS) for the atoms of the P(S)Cr(S-1)-terminated $(AlP)_1/(CrP)_1(001)$ system. The spin-down DOS values are multiplied by a negative number, and the Fermi levels are set to zero.

리한 봉우리를 볼 수 있는데 이는 표면층에 가까워서 생긴 국소화 상태로 보인다. Cr(C)와 Cr(S)층의 상태밀도를 비교하며 보면 Cr(S)층에서는 전형적인 표면효과로 띠좁힘이나 스핀분리가 증가한 모습을 보이고 있다. Cr(C)층의 다수스핀상

Table I. *l*-Decomposed electrons within muffin-tin spheres of the atoms in Al(S)-terminated $(AlP)_1/(CrP)_1$(001) system. The values of magnetic moments (MMs) calculated for the atoms are also given.

Atom	s (↑/↓)	p (↑/↓)	d (↑/↓)	Total (↑/↓)	MM [μ_B]
Al(S)	0.60 (0.30/0.30)	0.38 (0.19/0.19)	0.07 (0.03/0.04)	1.05 (0.52/0.53)	–0.01
Al(C)	0.50 (0.26/0.24)	0.56 (0.29/0.27)	0.11 (0.06/0.05)	1.19 (0.62/0.57)	0.05
Cr(S-2)	0.25 (0.14/0.11)	0.23 (0.12/0.11)	3.91 (3.18/0.73)	4.43 (3.46/0.97)	2.49
P(S-3)	1.19 (0.59/0.60)	1.97 (0.94/1.03)	0.07 (0.05/0.02)	3.24 (1.59/1.65)	–0.06
P(S-1)	1.20 (0.60/0.60)	1.92 (0.91/1.01)	0.08 (0.06/0.02)	3.21 (1.57/1.64)	–0.07

Table II. *l*-Decomposed electrons within muffin-tin spheres of the atoms in Cr(S)-terminated $(AlP)_1/(CrP)_1$(001) system. The values of magnetic moments (MMs) calculated for the atoms are also given.

Atom	s (↑/↓)	p (↑/↓)	d (↑/↓)	Total (↑/↓)	MM [μ_B]
Cr(S)	0.21 (0.13/0.08)	0.13 (0.07/0.06)	3.99 (3.77/0.22)	4.34 (3.98/0.36)	3.62
Cr(C)	0.25 (0.14/0.11)	0.24 (0.13/0.11)	3.92 (3.26/0.66)	4.44 (3.54/0.90)	2.64
Al(S-2)	0.51 (0.27/0.24)	0.56 (0.30/0.26)	0.11 (0.06/0.05)	1.19 (0.63/0.56)	0.06
P(S-3)	1.19 (0.59/0.60)	1.98 (0.94/1.04)	0.07 (0.05/0.02)	3.24 (1.59/1.65)	–0.07
P(S-1)	1.19 (0.59/0.60)	1.98 (0.94/1.04)	0.06 (0.05/0.01)	3.25 (1.59/1.66)	–0.07

Table III. *l*-Decomposed electrons within muffin-tin spheres of the atoms in P(S)Al(S-1)-terminated $(AlP)_1/(CrP)_1$(001) system. The values of magnetic moments (MMs) calculated for the atoms are also given.

Atom	s (↑/↓)	p (↑/↓)	d (↑/↓)	Total (↑/↓)	MM [μ_B]
P(S)	1.26 (0.63/0.63)	1.78 (0.79/0.89)	0.04 (0.02/0.02)	2.97 (1.44/1.53)	–0.10
P(S-2)	1.21 (0.60/0.61)	1.95 (0.91/1.04)	0.07 (0.05/0.02)	3.23 (1.56/1.67)	–0.11
P(S-4)	1.19 (0.59/0.60)	1.97 (0.94/1.03)	0.07 (0.05/0.02)	3.24 (1.58/1.66)	–0.07
Al(S-1)	0.51 (0.26/0.25)	0.57 (0.29/0.28)	0.11 (0.05/0.06)	1.20 (0.61/0.59)	0.02
Al(C)	0.50 (0.26/0.24)	0.56 (0.29/0.27)	0.11 (0.06/0.05)	1.19 (0.62/0.57)	0.04
Cr(S-3)	0.26 (0.14/0.12)	0.23 (0.12/0.11)	3.92 (3.16/0.76)	4.43 (3.43/1.00)	2.43

태밀도에서 –1 eV와 –3 eV 부근에 있는 두 개의 봉우리를 Cr(S)층의 경우와 비교해보면 –3 eV 부근의 봉우리는 Cr(S)층에서는 높이가 낮아졌고, –1 eV의 봉우리는 띠폭이 좁아지면서 하나는 높고 하나는 작은 두 개의 예리한 봉우리로 되었다. 또한 Cr(C)층에서 약 3 eV였던 스핀분리가 Cr(S)층에서는 약 4 eV로 증가하였다. 이러한 결과로 Cr(S)층의 자기모멘트가 Cr(C)의 경우에 비해 상당히 증가하리라고 예상할 수 있는데, Table II에 주어진 원자별 자기모멘트의 계산결과를 보면 Cr(C)층의 자기모멘트는 Merabet 등[15]의 계산결과인 2.59 μ_B와 비슷한 2.64 μ_B인데 비해 Cr(S)층의 값은 3.02 μ_B로 증가하였다. 또한 Cr(S)층의 s, p, d의 전자수를 보면 p-전자수가 Cr(C)층의 0.24개 보다 줄어든 0.13개로서 이 역시 표면효과로서 표면층에서 p 전자가 진공 영역 쪽으로 흩어져 나갔기 때문이다.

Fig. 1에 주어진 Al(S)-term 계의 상태밀도를 보면 Al(C)나 P(S-3)층은 거의 반쪽금속성을 유지하고 있으나 Cr(S-2)층부터 반쪽금속성이 깨짐을 알 수 있다. Al(S)층에서 페르미 에너지 이하에서 다수와 소수스핀상태를 비교하여 보면 소수상태스핀이 극히 미세하게 많음을 알 수 있는데 실제로 Al(C)층에서 0.05 μ_B였던 자기모멘트가 Al(S)층에서 –0.01 μ_B이 되었다.

Fig. 3에 주어진 P(S)Al(S-1)-term 계의 상태밀도를 보면 가운데 Al(C)와 P(S-4)층은 반쪽금속성을 유지하고 있으나 Cr(S-3)층부터 반쪽금속성이 훼손되고 있음을 알 수 있다. P(S)층의 상태밀도를 보면 다수스핀의 경우 –0.7 eV에서, 소수스핀의 경우 –0.7 eV과 –1.0 eV에서 예리한 표면상태가 생김을 알 수 있다. 이는 표면에서 끊어져 댕글링 본드가 된 p_z 상태가 국소화되었기 때문으로 보인다. P(S)층의 각운동량별 전자수를 보면 역시 p 전자수가 가운데 층이나 P(S-2)층의 값인 1.97개에서 1.78개로 줄어들었다. 표면 P(S)층의 자기모멘트는 P(S-4)나 P(S-2)층에 비해 음의 값쪽으로 다소 증가한 –0.11 μ_B이었다.

Fig. 4에 주어진 P(S)Cr(S-1)-term 계의 상태밀도를 보면 가운데 층인 Cr(C)층부터 P(S-2)층 까지는 반쪽금속성을 유지하고 있고 Cr(S-1)층부터 반쪽금속성이 깨져 있다. 이 계의 P(S)층의 상태밀도를 P(S)Al(S-1)-term 계의 P(S)층과 비교하여 보면 띠좁힘 효과가 다소 작으며 봉우리의 상태밀도 값도 작다. P(S)층의 상태밀도를 Cr(S-1)층과 비교하며 보면 이와 비슷한 양상을 보여주고 있는데 이는 표면이 생성되었더라도 P(S)층과 Cr(S-1)층 사이에는 여전히 큰 p-d 혼합이 존재하기

Table IV. *l*-Decomposed electrons within muffin-tin spheres of the atoms in P(S)Cr(S-1)-terminated $(AlP)_1/(CrP)_1(001)$ system. The values of magnetic moments (MMs) calculated for the atoms are also given.

Atom	s (↑/↓)	p (↑/↓)	d (↑/↓)	Total (↑/↓)	MM [μ_B]
P(S)	1.27 (0.63/0.64)	1.66 (0.66/1.00)	0.04 (0.03/0.01)	2.97 (1.32/1.65)	−0.33
P(S-2)	1.19 (0.59/0.60)	1.97 (0.94/1.03)	0.07 (0.05/0.02)	3.23 (1.58/1.65)	−0.07
P(S-4)	1.19 (0.59/0.60)	1.97 (0.93/1.04)	0.07 (0.05/0.02)	3.24 (1.58/1.66)	−0.08
Cr(S-1)	0.26 (0.14/0.12)	0.23 (0.11/0.12)	3.91 (2.97/0.94)	4.42 (3.23/1.19)	2.05
Cr(C)	0.25 (0.14/0.11)	0.24 (0.13/0.11)	3.91 (3.22/0.69)	4.42 (3.49/0.93)	2.56
Al(S-3)	0.50 (0.26/0.24)	0.56 (0.29/0.27)	0.11 (0.06/0.05)	1.20 (0.62/0.58)	0.04

때문으로 보인다. Table IV에 주어진 P(S)층의 자기모멘트는 덩치상태에 비해 그 절대값이 상당히 증가한 −0.33 μ_B로서 Rahman 등[20]이 계산한 CrP(001)에서 P 원자로 끝나는 (001) 표면계에서 P 표면원자의 자기모멘트인 −0.55 μ_B와 비교할 만하다. Cr(S-1)층의 자기모멘트는 덩치상태라 할 수 있는 Cr(C)층의 2.56 μ_B보다 줄어든 2.05 μ_B를 가졌다.

IV. 결론 및 요약

$(AlP)_1/(CrP)_1$ 초격자계에서 (001) 표면의 전자구조와 자성 그리고 반쪽금속성에 대해 FLAPW 방법을 이용하여 탐구하였다. (001) 표면으로 끝나는 모든 계를 고려하기 위해 Al(S)-, Cr(S)-, P(S)Al(S-1)- 및 P(S)Cr(S-1)-term 계 등 네 가지 표면계를 생각하였다. 계산결과 Cr(S)-term 계만 12 μ_B의 자기모멘트를 가져 표면에서 반쪽금속성이 유지됨을 알았다. 이 계에서 표면 Cr원자의 자기모멘트는 덩치상태라 할 수 있는 가운데 Cr층의 값인 2.64 μ_B에 비해 증가한 3.02 μ_B를 가졌다. 이는 전형적인 표면효과인 띠좁힘과 스핀분리의 증가 때문이다.

Al(S)-term의 경우 p-전자의 흩뜨림으로 인해 표면에서 반쪽금속성이 깨졌으며 그 자기모멘트는 −0.01 μ_B의 미세한 음의 값을 가졌다. P(S)Al(S-1)-term 계에서 표면 P(S)층의 상태밀도는 p_z 상태의 국소화로 인해 매우 예리한 표면상태의 봉우리를 보여 주었으나 자기모멘트는 −0.11 μ_B이었다. P(S)Cr(S-1)-term의 경우 P(S)층의 상태밀도와 Cr(S-1) 상태밀도를 비교하여 보면 두 상태밀도가 비슷한 모양을 하고 있어 이 두 층사이에 여전히 p-d 혼합이 존재함을 알았고 그 결과 P(S)층의 자기모멘트는 덩치상태에 비해 절대값이 상당히 커진 −0.33 μ_B이었다.

감사의 글

이 논문은 인하대학교 연구비 지원에 의한 것으로 감사드립니다.

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] I. Galanakis and P. H. Dederichs, Phys. Rev. B **66**, 174429 (2002).
[3] S. P. Lewis, P. B. Allen, and T. Sasaka, Phys. Rev. B **55**, 10253 (1997).
[4] Y. S. Dedkov, U. Rudiger, and G. Guntherrodt, Phys. Rev. B **65**, 064417 (2002).
[5] H. Akinaga, T. Manago, and M. Shirai, Jap. J. Appl. Phys. **39**, L1118 (2000).
[6] W. H. Xie, Y. Q. Xu, B. G. Liu, and D. G. Pettifor, Phys. Rev. Lett. **91**, 037204 (2003).
[7] I. Galanakis and P. Mavropoulos, Phys. Rev. B **67**, 104417 (2003).
[8] K. Kusakabe, M. Geshi, H. Tsukamoto, and N. Suzuki, J. Phys.: Condens. Matter **16**, 55639 (2004).
[9] O. Volnianska, P. Jakubas, and P. Boguslawski, J. Alloys Compd. **423**, 191 (2006).
[10] M. Sieberer, J. Redinger, S. Khmelevskyi, and P. Mohn, Phys. Rev. B **73**, 024404 (2006).
[11] G. Y. Gao, K. L. Yao, E. Sasioglu, L. M. Sandratskii, Z. L. Liu, and J. L. Jiang, Phys. Rev. B **75**, 174442 (2005).
[12] O. Volnianska and P. Boguslawski, Phys. Rev. B **75**, 224418 (2007).
[13] E. Yan, Physica B **407**, 879 (2012).
[14] X.-S. Song, S. Dong, and H. Zhao, Compu. Mater. Sci. **84**, 306 (2014).
[15] M. Merabet, D. Rached, S. Benalia, A. H. Reshek, N. Bettahar, H. Righi, H. Baltache, F. Soyalp, and M. Labair, Superlattices and Microstructures **65**, 195 (2014).
[16] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, Phys. Rev. B **24**, 864 (1981).
[17] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. **136**, B864 (1964); W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
[18] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
[19] D. D. Koelling and B. N. Harmon, J. Phys. C **10**, 3107 (1977).
[20] G. Rhaman, S. Cho, and S. C. Hong, J. Magn. Magn. Mater. **310**, 2192 (2007).