

## RAPORT STIINTIFIC – ETAPA 1

Proiect: Materiale noi de tip Heusler pentru aplicatii in spintronica (HEUSPIN)

Cod proiect: PN-II-RU-TE\_2015-4-0009

Nr. contract 383/2015

### I. Rezumatul etapei 1

Conform obiectivelor definite in propunerea de proiect, in aceasta etapa ne propunem sa descriem teoretic proprietatile ferimagnetilor *half-metals* din clasa  $Mn_2YZ$  ( $Y = V, Ti, Cr$  si  $Z =$  element al grupelor III, IV sau V) si sa identificam mecanismele care genereaza mecanismul ‘*half-metalicitatii*’ si ferimagnetismului (HMF<sub>i</sub>) prin intelegerea rolului jucat de compozitia chimica, dezordine, variatia parametrului de retea si a interactiunilor de schimb in stabilirea acestui caracter. Urmarim ca prin calculele teoretice efectuate in aceasta etapa, sa realizam predictii de noi materiale HMF<sub>i</sub>, pe care sa incercam sa le sintetizam si sa le caracterizam experimental in etapa care urmeaza.

Au fost investigate proprietatile electronice si magnetice ale compusilor de tip  $Mn_2YZ$  ( $Mn_2VAl$ ,  $Mn_2VGa$ ,  $(Mn_{1-x}Fe_x)_2VGa$  si  $Mn_2VAs$ ) si s-a evaluat caracterul lor half-metalic si respectiv ferimagnetic (HMF<sub>i</sub>). De asemenea, a fost analizata influenta dezordinii si a dopajului asupra caracterului HMF<sub>i</sub> in acesti compusi.

S-au facut calcule de structura electronica de benzi prin metoda KKR, folosind diferite aproximatii pentru potentialul de corelatie si schimb. Au fost identificate aproximatiile prin care valorile gap-ului din canalul de spini majoritar si respectiv momentele magnetice de spin sunt in concordanta cu cele raportate in literatură de specialitate.

### II. Descrierea rezultatelor științifice și a gradului de realizare al obiectivelor

#### II.1. Calculul proprietatilor electronice si magnetice pentru compusul Heusler $Mn_2VAl$

Calculele structurii electronice pentru compusul  $Mn_2VAl$  au fost efectuate prima oara de catre Ishida et al. [1] folosind aproximatia densitatii locale (LDA) in teoria functionalei de densitate (DFT), aratand ca  $Mn_2VAl$  este aproape de starea *half-metalica*. Ulterior, Weht si Picket [2] au efectuat calcule folosind aproximatia gradientului generalizat (GGA) pentru potentialul de corelatie si schimb, aratand ca acest compus este ferimagnet *half-metalic*, cu momentele magnetice de  $1.5 \mu_B$  (Mn) si respectiv  $-0.9 \mu_B$  (V), in concordanta cu datele experimentale. Investigatiile privind interactiunile de schimb si temperatura Curie in  $Mn_2VAl$  efectuate de Sasioglu et al. [3] au aratat ca cuplajul antiferomagnetic intre atomii de V si Mn, combinat cu cuplajul feromagnetic al spinilor Mn duce la o structura stabila de spini. Ozdogan et al. [4] au aratat ca  $Mn_2VAl$  se supune regulii Slater-Pauling, potrivit careia momentul magnetic de spin  $M_t = Z_t - 24$  (unde  $Z_t$  - nr. total ai electronilor de valenta ai compusului, 22 pentru  $Mn_2VAl$ ), obtinand prin calcule FPLO (full potential nonorthogonal local-orbital) scalar-relativiste in aproximatia LDA, un moment magnetic total de  $-2 \mu_B$ . Insa, potrivit calculelor FPLO, compusul  $Mn_2VAl$  nu este un *half-metal*, dar o mica expansiune a rețelei ar impinge nivelul Fermi in gap-ul situat in banda de spin majoritara, compusul devenind astfel HMF<sub>i</sub>. Pe de alta parte, un grad mic de dezordine (V-Al intermixing) ar scadea polarizarea de spin la nivelul Fermi.

In acest context, vor fi prezentate calculele efectuate in cadrul acestui proiect pentru compusul  $Mn_2VAl$ , folosind diferite aproximatii pentru potentialul de corelatie si schimb. Acest compus este considerat drept referinta pentru urmatoarele investigatii, in care vor fi luate in considerare efectele dezordinii si respectiv ale substitutiilor cu alte elemente (metale 3d sau din grupele principale III-V).

**II.1.1. Detalii computationale:** Structura electronica a compusilor a fost calculata self-consistent prin metoda KKR complet relativista, folosind aproximatia sferelor atomice (ASA) [5]. Pentru energia de corelatie si schimb s-a folosit aproximatia gradientului generalizat (general gradient approximation - GGA) cu parametrizarea PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof); aditional, s-a determinat pozitia nivelului Fermi folosind formula Lloyd [5]. De asemenea, interactiunea Coulomb puternica intre electronii 3d localizati ai Mn/V a fost luata in considerare folosind metoda LSDA+DMFT [5]. Implementarea metodei LSDA+DMFT permite tratarea sistemelor dopate, in combinatie cu Aproximatia Potentialului Coherent (Coherent Potential Approximation – CPA)[5]. Descrierea interactiunii efective s-a realizat folosind parametrii Hubbard U si respectiv Hund J, ale caror valori sunt de obicei considerate in analogie cu alte sisteme similare sau prin aplicarea unui model de calcul. In acest studiu, am folosit pentru parametrul de interactiune coulombiana (Hubbard U) si respectiv pentru parametrul interactiunii de schimb (Hund J) valorile de  $U = 2.0$  eV si  $J = 0.9$  eV, considerate adecvate pentru metalele de tranzitie 3d [6].

## II.1.2. Rezultatele calculelor de structura electronica de benzi pentru $Mn_2VAl$

Considerand parametrul de retea experimental ( $5.92 \text{ \AA}$ )[7] si structura de tip  $L2_1$  (grup spatial  $Fm_3m$ , nr. 225) cu pozitiile Mn (8c) ( $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$ ), V (4a) (0 0 0) si Al (4b) ( $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$ ) [8], calculele efectuate folosind metoda KKR complet relativista arata valori diferite ale momentelor magnetice pentru diferitele metode de aproximare a potentialului de corelatie si schimb pentru compusul  $Mn_2VAl$ . Conform valorilor prezentate in Tabelul 1, calculele GGA folosind metoda Lloyd pentru determinarea nivelului Fermi sunt in concordanta cu Weht et al. [2], care arata un moment magnetic de spin net de  $2 \mu_B$  pentru  $Mn_2VAl$ .

Tabelul 1 Momentele magnetice calculate folosind metoda SPRKKR pentru compusul  $Mn_2VAl$ .

	GGA		GGA+Lloyd		LSDA+DMFT	
	$m_s (\mu_B)$	$m_l (\mu_B)$	$m_s (\mu_B)$	$m_l (\mu_B)$	$m_s (\mu_B)$	$m_l (\mu_B)$
Mn	1.35	0.03	1.58	0.03	1.20	0.05
V	-0.96	0.01	-1.00	0.01	-0.67	0.02
Al	-0.04	0.00	-0.04	0.00	-0.013	0.00
total	1.69	0.07	2.01	0.05	1.72	0.11

Densitatile de stari (DOS) pentru  $Mn_2VAl$  calculate folosind metodele GGA+Lloyd si respectiv LSDA+DMFT sunt prezentate in Figura 1. Se observa ca in ambele cazuri, densitatea de stari prezinta un gap situat in banda de spin majoritar (*spin-up*), dar largimea gapului si respectiv pozitia nivelului Fermi difera in functie de metoda de aproximare folosita in calcul. A se nota largimea mai mare a gapului in cazul calculelor LSDA+DMFT, inasa polarizarea de spin este diferita de 100% din cauza densitatii de spini majoritari nenula la nivelul Fermi. De asemenea, observam aici ca aceste calcule au fost facute in modul complet relativist, in care cuplajul spin-orbita (SOC) este luat in considerare. In prezenta SOC, spinul

electronic nu mai este un numar cuantic bun, iar functiile de unda *spin-up* nu au un caracter exclusiv (pur), ci contin si caracter *spin-down*. De aceea, DOS in interiorul gap-ului nu este strict egal cu zero, ci are o valoare apropiata de zero iar polarizarea de spin este mai mica de 100%, in acord cu Galanakis et al. [9].

In concluzie, calculele efectuate in cadrul acestui proiect pentru  $Mn_2VAl$  sunt in bun acord cu datele din literatura de specialitate. De asemenea, aproximatiile folosite (in special GGA+Lloyd) in calcule sunt adecvate pentru descrierea proprietatilor electronice si magnetice ale acestui compus.

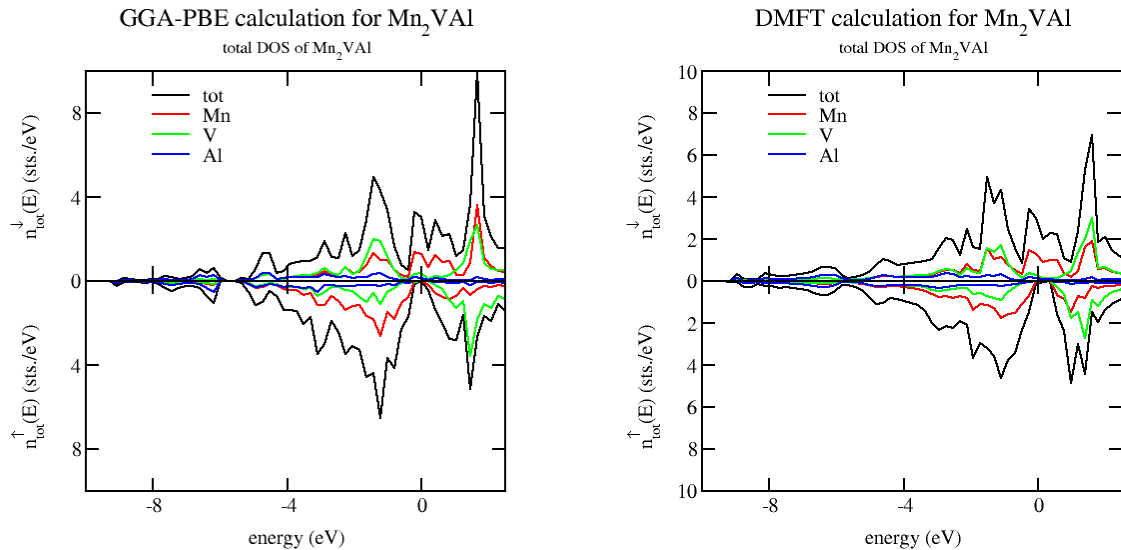


Fig. 1 Densitatile de stari (DOS) pentru  $Mn_2VAl$  calculate folosind metodele GGA+Lloyd si respectiv LSDA+DMFT. Originea axei energiei corespunde nivelului Fermi.

## II.2. Calculul proprietatilor electronice si magnetice pentru compusul Heusler $Mn_2VGa$

Calcul de structura electronica de benzi si masuratori experimentale de difractie de neutroni si magnetorezistenta pentru compusul  $Mn_2VGa$  au fost efectuate de catre Ramesh Kumar et al. [10]. Calculele efectuate folosind metoda *plane wave self-consistent field* [10] in aproximatia GGA arata ca acest compus este aproape de starea *half-metalica* (cu un pseudo-gap de 0.2 eV) la parametrul de retea de echilibru (5.827 Å), inasa un grad de dezordine de tip *anti-site* peste 20% poate distruge aceasta stare. Masuratorile experimentale de difractie de neutroni [10] au confirmat ordinea ferimagnetica in acest sistem, cu momente magnetice de 1.28  $\mu_B$  pentru atomii de Mn si respectiv -0.71  $\mu_B$  pentru atomii de V.

De asemenea, Klewe et al. [11] au investigat proprietatile structurale, magnetice si electronice ale filmelor subtiri de  $Mn_2VGa$ . In calculele de structura electronica de benzi folosind metoda KKR [5] in aproximatia GGA s-a folosit formula Lloyd pentru a imbunatati convergenta sarcinii in raport cu momentul unghiular maxim ( $l_{max} = 3$ ). S-a obtinut pentru  $Mn_2VGa$  in structura ideala  $L2_1$  un moment magnetic total de 1.94  $\mu_B/f.u.$ , cu 1.37  $\mu_B$  pentru atomii de Mn si respectiv -0.76  $\mu_B$  pentru atomii de V. In acelasi timp, calculele prin metoda FLAPW pentru structura ideala  $L2_1$  duc la valori de 1.98  $\mu_B/f.u.$ , cu 1.47  $\mu_B$  pentru Mn si respectiv -0.91  $\mu_B$  pentru V. Calculele de structura electronica folosind metoda KKR in aproximatia potentialului coerent (CPA) arata ca dezordinea chimica distruge starea *half-metalica*, inasa un *pseudo-gap* in banda de spin majoritari este prezent la nivelul Fermi.

## II.2.1. Rezultatele calculului de structura electronica de benzi pentru $Mn_2VGa$ in structura $L2_1$

S-au efectuat calcule de structura electronica de benzi folosind metoda KKR complet relativista pentru compusul  $Mn_2VGa$  avand structura de tip  $L2_1$  (grup spatial  $Fm_3m$  nr. 225) cu pozitiile Mn (8c)  $(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4})$ , V (4a)  $(0 \ 0 \ 0)$  si Ga (4b)  $(\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2})$ . In prima faza, s-a determinat parametrul de retea la echilibru avand valoarea de  $5.75 \text{ \AA}$ , prin minimizarea valorii energiei totale (Fig. 2).

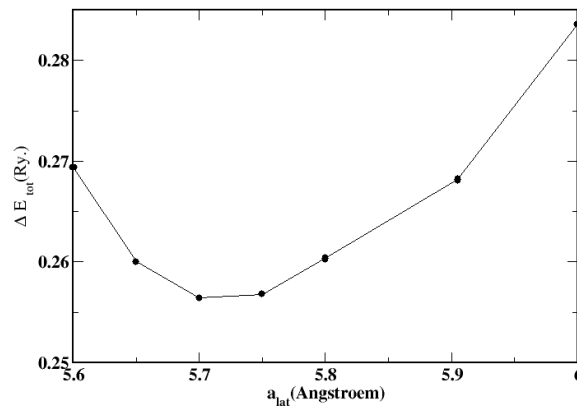


Fig. 2. Variatia energiei totale (in Ry.) in functie de parametrul de retea pentru compusul  $Mn_2VGa$ .

Calculul densitatii electronice de stari folosind metodele GGA+Lloyd si respectiv LSDA+DMFT ( prezentate in Figura 3) arata ca acest compus este foarte aproape de caracterul *half-metalic* insa din nou DOS la nivelul Fermi nu este strict egal cu zero din cauza considerarii cuplajului spin-orbita (SOC). Se observa inasa ca polarizarea de spin este aproape de 100 % iar largimea *pseudo-gap*-ului este mai mare in cazul calculului LSDA+DMFT.

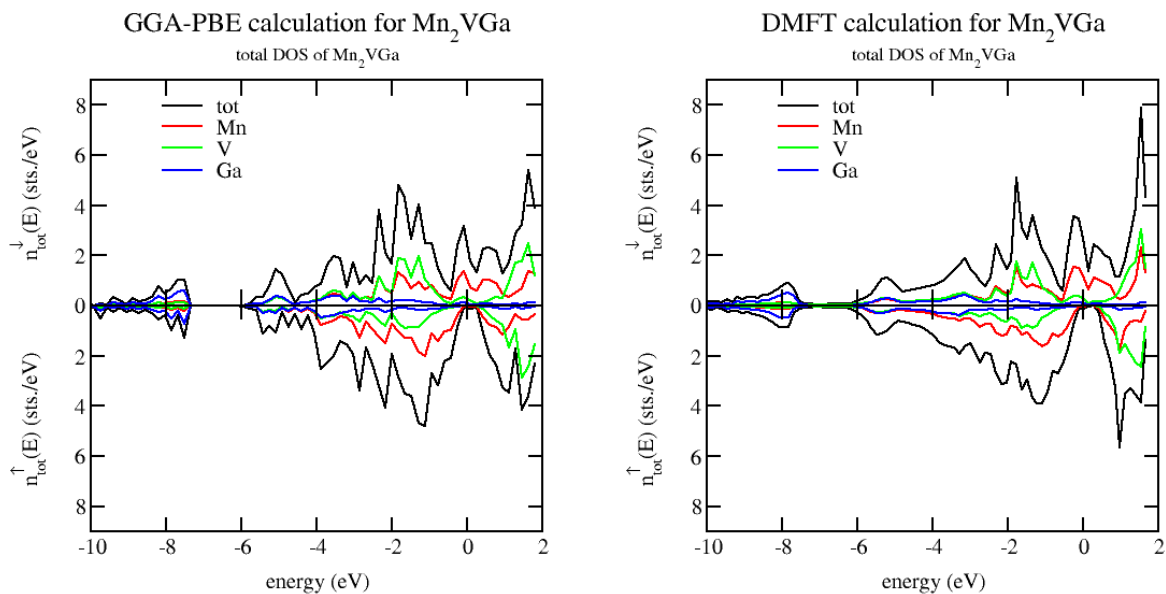


Fig. 3 Densitatea electronica de stari calculata folosind metoda KKR in modulele GGA+Lloyd, respectiv LSDA+DMFT pentru compusul  $Mn_2VGa$ .

Valorile momentelor magnetice calculate pentru compusul  $Mn_2VGa$  sunt prezentate in Tabelul 2. Pentru comparatie, sunt prezentate valorile momentelor magnetice deduse din masuratori de difractie de neutroni [10] si respectiv calculate prin metoda FLAPW [11].

Tabelul 2 Momentele magnetice calculate folosind metoda SPRKKR pentru compusul  $Mn_2VAl$ , alaturi de valorile experimentale obtinute prin difractie de neutroni [10], respectiv calculele FLAPW [11].

	GGA+Lloyd		LSDA+DMFT		ND [10]	FLAPW [11]
	$m_s$ ( $\mu_B$ )	$m_l$ ( $\mu_B$ )	$m_s$ ( $\mu_B$ )	$m_l$ ( $\mu_B$ )	$m_s$ ( $\mu_B$ )	$m_s$ ( $\mu_B$ )
Mn	1.41	0.03	1.19	0.04	1.29	1.47
V	-0.80	0.01	-0.71	0.02	-0.70	-0.91
Ga	-0.03	0.00	-0.02	0.00		
total	1.98	0.06	1.65	0.10		1.98

Comparand valorile obtinute prin calculele noastre cu valorile obtinute experimental prin difractie de neutroni [10] observam o foarte buna concordanta, in particular pentru calculele folosind metoda LSDA+DMFT. De asemenea, o buna concordanta a valorilor momentelor magnetice obtinute prin calcule KKR (metoda GGA+Lloyd) si respectiv FLAPW [11] este de remarcat.

## II.2.2. Efectele dezordinii substitutionale pentru $Mn_2VGa$

S-a considerat in compusul  $Mn_2VGa$  o dezordine de tip  $D0_3$  [8], existand mixing intre atomii de Mn si V de pe pozitiile 8c si respectiv 4a. In acest fel, ocuparea pozitiilor cristalografice va fi  $(Mn_{1-x}V_x)^{8c}_2(Mn_{2x}V_{2x})^{4a}Ga^{4b}$ . Calculele efectuate folosind metoda GGA+Lloyd pentru un grad de dezordine  $x = 0.05$  arata ca dezordinea de acest tip distruge starea *half-metalica* a  $Mn_2VGa$  (Fig. 4), in timp ce momentele magnetice se modifica, conform Tabelului 3.

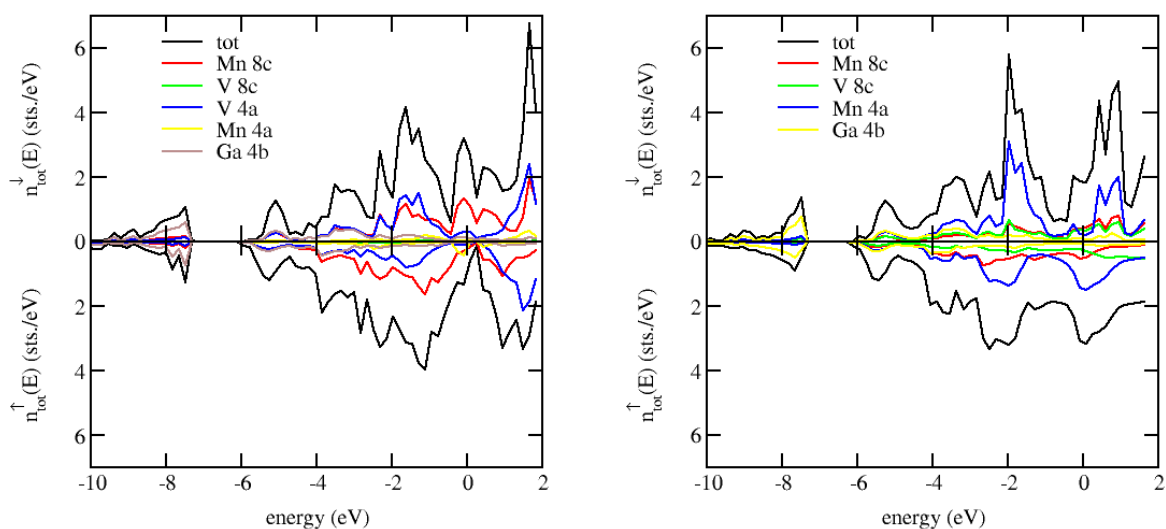


Fig. 3 Densitatea de stari electronice pentru compusul  $Mn_2VGa$ , cu dezordine de tip  $D0_3$  (stanga) si respectiv  $L2_{1b}$ . Gradul de dezordine in cazul  $D0_3$  corespunde unei valori  $x = 0.05$ .

Un alt tip de dezordine, denumit  $L2_{1b}$  [8] a fost luat in considerare in calculele de structura electronica pentru  $Mn_2VGa$ . Considerand acest tip de dezordine, ocuparea pozitiilor cristalografice se face dupa formula  $(Mn_{0.5}V_{0.5})^{8c}_2(Mn)^{4a}Ga^{4b}$ , adica V din pozitia 4a va fi complet substituit cu Mn, care va ocupa atat pozitia initiala (8c) cat si pozitia 4a. Si in acest caz, conform calculelor densitatii de stari, dezordinea distruge starea half-metalica (conform Fig. 3).

Tabelul 3 Momentele magnetice calculate folosind metoda SPRKKR (GGA+Lloyd) pentru compusul  $Mn_2VAl$  in structura  $L2_1$  si respectiv considerand dezordinea de tip  $D0_3$  si respectiv de tip  $L2_{1b}$ .

	$L2_1$		$D0_3 (x = 0.05)$		$L2_{1b}$	
	$m_s (\mu_B)$	$m_l (\mu_B)$	$m_s (\mu_B)$	$m_l (\mu_B)$	$m_s (\mu_B)$	$m_l (\mu_B)$
Mn 8c	1.41	0.03	1.37	0.03	2.21	0.02
V 8c			0.48	0.00	-0.06	0.00
V 4a	-0.80	0.01	-0.74	0.01		
Mn4a			1.67	-0.01	0.16	0.00
Ga	-0.03	0.00	-0.02	0.00	-0.03	0.00
total	1.98	0.06	2.14	0.06	2.29	0.02

### II.3. Calculul proprietatilor electronice si magnetice ale compusilor $(Mn_{1-x}Fe_x)_2VGa$

Conform Galanakis et al. [12], in cazul sistemelor  $Mn_2VAl$  si  $Mn_2VSi$ , dopajul cu elemente 3d poate fi o modalitate de a imbunatati proprietatile acestor materiale pentru aplicatii spintronice. Pentru folosirea lor ca si senzori, se impune obtinerea de materiale cu magnetizare apropiata de zero, pentru a nu perturba magnetic vecinatatea si pentru a avea

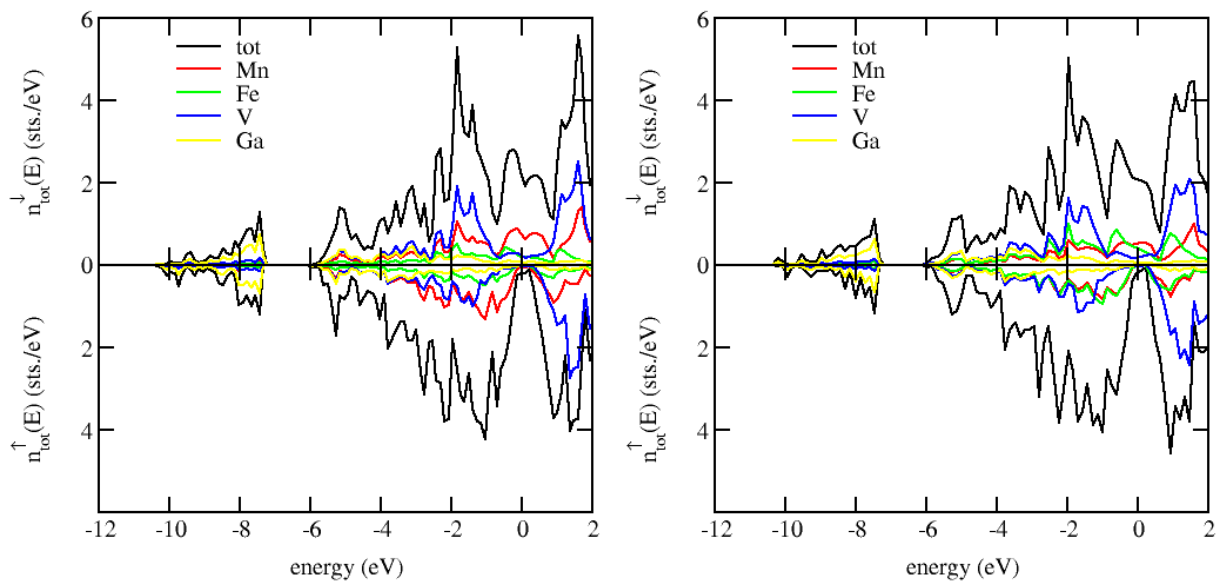


Fig. 4 Densitatea de stari electronice pentru compusii  $(Mn_{0.75}Fe_{0.25})_2VGa$  (stanga) si respectiv  $(Mn_{0.5}Fe_{0.5})_2VGa$  (dreapta) obtinute prin calcule KKR complet relativiste (GGA+Lloyd).

pierderi de energie cat mai scazute. Prin doparea  $Mn_2VGa$  cu Fe, numarul electronilor de valenta in sistem ar creste, iar potrivit regulii Slater-Pauling, pentru  $(Mn_{0.75}Fe_{0.25})_2VGa$  s-ar obtine  $M_t = -1.5 \mu_B$ , in timp ce pentru  $(Mn_{0.5}Fe_{0.5})_2VGa$ , momentul de spin total ar fi  $-1 \mu_B$ . Prin calculele efectuate, ne-am propus sa analizam caracterul *half-metalic* al compusilor de tip  $(Mn,Fe)_2VGa$ . Am considerat ca la substitutia Mn cu Fe, datorita razelor metalice foarte apropiate ( $1.27 \text{ \AA}$  pt Mn si respectiv  $1.26 \text{ \AA}$  pentru Fe), pozitia in care substituie Fe este cea ocupata de Mn (8c) iar parametrul de retea nu se schimba semnificativ. Prin urmare, calculele de structura electronica KKR (GGA+Lloyd) au fost efectuate pentru  $(Mn_{1-x}Fe_x)_2VGa$ , cu  $x = 0.25$  si respectiv  $0.5$ , in structura corespunzatoare grupului spatial grup  $Fm_3m$  nr. 225 si parametrul de retea  $a_{lat} = 5.75 \text{ \AA}$ . Densitatile de stari pentru acesti compusi sunt prezentate in Fig. 4, in timp ce momentele magnetice calculate sunt prezentate in Tabelul 4, alaturi de valorile pentru compusul de referinta  $Mn_2VGa$ . In Fig. 4 se observa aparitia de stari electronice in gap-ul situat in banda de spini majoritari, astfel ca la nivelul Fermi, densitatea de spini majoritara este nenula iar polarizarea de spin va fi sub 100 %. Totusi, apreciem ca scaderea polarizarii de spin nu este una semnificativa.

Tabelul 4 Momentele magnetice calculate folosind metoda KKR (GGA+Lloyd) pentru compusii  $(Mn_{0.75}Fe_{0.25})_2VGa$  si respectiv  $(Mn_{0.5}Fe_{0.5})_2VGa$ .

	$Mn_2VGa$		$(Mn_{0.75}Fe_{0.25})_2VGa$		$(Mn_{0.5}Fe_{0.5})_2VGa$	
	$m_s (\mu_B)$	$m_l (\mu_B)$	$m_s (\mu_B)$	$m_l (\mu_B)$	$m_s (\mu_B)$	$m_l (\mu_B)$
Mn 8c	1.41	0.03	1.28	0.03	1.13	0.02
Fe 8c			0.47	0.03	0.33	0.01
V 4a	-0.80	0.01	-0.66	0.01	-0.48	0.01
Ga 4b	-0.03	0.00	-0.02	0.00	-0.02	0.00
total	1.98	0.06	1.47	0.06	0.96	0.04

Momentele magnetice de spin ale compusilor  $(Mn_{1-x}Fe_x)_2VGa$  sunt aproape de valorile determinate prin regula Slater-Pauling; momentele magnetice de spin ale Mn scad cu cresterea concentratiei de Fe, de la  $1.41 \mu_B$  pentru  $x = 0$  pana la  $1.13 \mu_B$  pentru  $x = 0.5$ . De asemenea, o scadere a momentului magnetic de spin se observa si pentru Fe, de la  $0.47 \mu_B$  pentru  $x = 0.25$  la  $0.33 \mu_B$  pentru  $x = 0.5$ .

#### II.4. Calculul proprietatilor electronice si magnetice ale compusului $Fe_2VGa$

Un caz aparte corespunde situatiei in care intreg continutul de Mn din compusul Heusler  $(Mn_{1-x}Fe_x)_2VGa$  este inlocuit cu Fe. In cazul  $Fe_2VGa$ , regula Slater-Pauling arata ca momentum magnetic de spin total ar trebui sa fie nul iar compusul ar fi un semi-metal nemagnetic, cu un *pseudo-gap* la nivelul Fermi in ambele canale de spini. Potrivit calculelor efectuate de Slebarski et al. [13,14] prin metoda full potential screened-KKR (FSKKR),  $Fe_2VGa$  este un semimetal nonmagnetic cu un pseudo-gap localizat la nivelul Fermi, inasa prin inducerea unei dezordini (atomi de Fe ce ocupa pozitiile V), se pot crea clusteri magnetici care dau nastere unei magnetorezistente gigant (GMR) negative.

Calculele KKR de structura electronica de benzi efectuate folosind aproximatiile GGA+Lloyd, respectiv LSDA\_DMFT pentru potentialul de corelatie si schimb arata ca intra-adevar acest compus este nemagnetic. Din calculele de densitati electronice de stari (Fig. 5) se observa un *pseudo-gap* in vecinatatea nivelului Fermi, inasa pozitia acestuia in raport cu *pseudo-gap*ul difera in functie de aproximatia folosita in calcule, compusul avand un comportament semimetalic. In urmatoarea etapa, ne propunem sa verificam daca substitutia

cu Co sau Cr ar induce un caracter *half-metalic* in acest compus si sa analizam rolului dezordinii asupra acestui caracter.

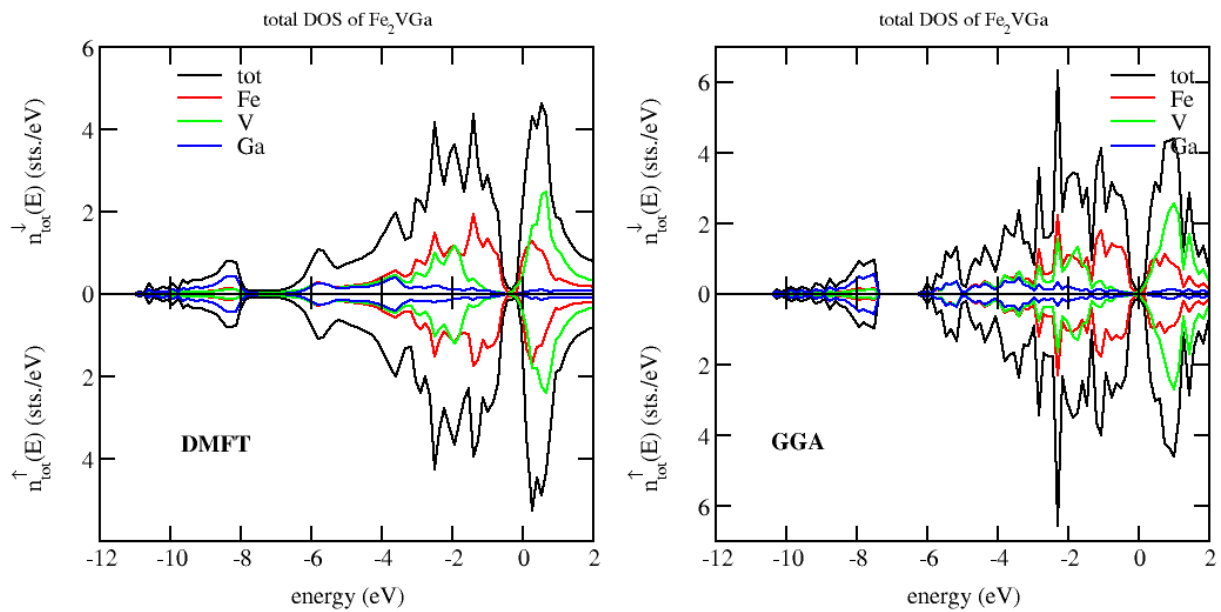


Fig. 5 Densitatea electronica de stari calculata folosind metoda KKR in modurile GGA+Lloyd, respectiv LSDA+DMFT pentru compusul  $\text{Fe}_2\text{VGa}$ .

## II.5. Calculul proprietatilor electronice si magnetice ale compusului $\text{Mn}_2\text{VAs}$

In cazul  $\text{Mn}_2\text{VAs}$ , regula Slater-Pauling arata ca momentum magnetic de spin total ar trebui sa fie nul. Calculele KKR de structura electronica de benzi au fost efectuate pentru a verifica daca aceasta regula este respectata in cazul  $\text{Mn}_2\text{VAs}$  si respectiv pentru a testa caracterul

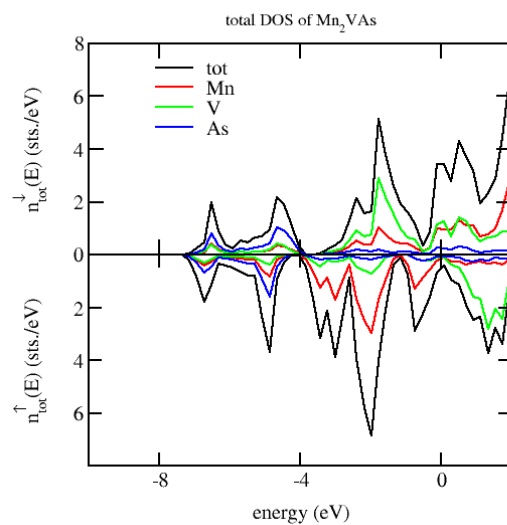


Fig. 6 Densitatea electronica de stari calculata folosind metoda KKR in modul GGA+Lloyd pentru  $\text{Mn}_2\text{VAs}$  cu  $a_{\text{lat}} = 6.1 \text{ \AA}$ .



*half-metalic* al acestui compus. S-a considerat acelasi tip de structura ca si pentru compusii anteriori (grup spatial Fm<sub>3m</sub> nr. 225) iar parametrul de retea este in curs de minimizare. Datele preliminare arata insa ca pentru un parametru de retea  $a_{lat} = 6.1 \text{ \AA}$ , caracterul half-metalic nu se pastreaza, conform Fig. 6. Totusi, exista un *pseudo-gap* in apropierea nivelului Fermi, iar pozitia acestuia poate fi modificata prin varierea parametrului de retea.

### III. Concluzii și perspective

Calcululele de structura electronica de benzi arata ca compusii Heusler de tipul Mn<sub>2</sub>VAl si respectiv Mn<sub>2</sub>VGa sunt ferimagneti, insa caracterul lor *half-metalic* este discutabil din cauza considerarii cuplajului spin-orbita (SOC); analizand insa largimea *pseudo-gap*ului si pozitia nivelului Fermi in acesti compusi, putem spune ca potentialul acestora pentru utilizare in domeniul spintronicii (evaluat prin gradul de polarizare la nivelul Fermi) este de luat in seama.

In cazul folosirii acestor materiale la constructia de senzori, magnetizarea lor ar trebui sa fie cat mai redusa, aceasta conditie putand fi realizata prin doparea, de ex. a Mn<sub>2</sub>VGa cu Fe. In cazul in care substitutia Fe se face pe pozitia ocupata de Mn (raze metalice apropiate), polarizarea de spin sufera o scadere usoara. In urmatoarea etapa, se urmareste prepararea materialelor de acest tip pentru a se evalua si experimental gradul de polarizare de spin si respectiv eventualele sursele de reducere a acestuia (evaluandu-se gradul si tipul de dezordine ce apare in probe). De asemenea, se preconizeaza efectuarea de calcule pentru compusii Mn<sub>2</sub>VAl si Mn<sub>2</sub>VGa dopati cu alte metale 3d (Ni, Cr, Co) si evaluarea caracterului HMF<sub>i</sub> a acestora, respectiv evaluarea efectului dezordinii asupra caracterului HMF<sub>i</sub> a Mn<sub>2</sub>VAl.

In cazul compusului Mn<sub>2</sub>VAs, deoarece datele structurale lipsesc, se va evalua parametrul de retea de echilibru si respectiv energia de formare. De asemenea, caracterul HMF<sub>i</sub> in cazul stabilitatii va fi de asemenea evaluat. Similar, pentru compusul Fe<sub>2</sub>VGa va fi continuat studiul, luand in calcul dezordinea si respectiv substitutia Fe cu Cr.

Un alt subiect de studiu va fi, in etapa care urmeaza, studiul substitutiei V in compusii de tip Mn<sub>2</sub>VZ cu Ti si respectiv Cr, cu evaluarea caracterului HMF<sub>i</sub> a acestora. In final, avem in vedere si studiul proprietatilor electronice ale compusilor de tipul Mn<sub>2</sub>V(Z<sub>1-x</sub>Z\*<sub>x</sub>), cu Z, Z\* apartinand grupelor III-V, urmarind pastrarea caracterului HMF<sub>i</sub> combinat cu micsorarea magnetizarii acestora.

Compusii pentru care studiile teoretice arata un caracter HMF<sub>i</sub> stabil in raport cu dezordinea si cu variatia parametrului de retea si respectiv o valoare scazuta a magnetizarii vor fi preparati, urmand sa li se evalueze experimental proprietatile magnetice si electronice in etapa care urmeaza.

### Bibliografie

- [1] S. Ishida, S. Asano and J. Ishida, J. Phys. Soc. Japan 53 (1984) 2718
- [2] R. Weht and W. E. Pickett, Phys. Rev. B 60 (1999) 13006
- [3] E. Sasioglu, L. M. Sandratskii and P. Bruno, J. Phys. Condensed Matter 17 (2005) 995

- [4] K. Ozdogan, I. Galanakis, E. Sasioglu and B. Aktas, *J. Phys. Condensed Matter* 18 (2006) 13
- [5] H. Ebert, D. Ködderitzsch, J. Minár, *Rep. Prog. Phys.* 74 (2011) 096501
- [6] L. Chioncel, E. Arrigoni, M. I. Katsnelson and A. I. Lichtenstein, *Phys. Rev. B* 79 (2009) 125123
- [7] C. Jiang, M. Venkatesan, J. M. D. Coey *Solid State Communications* 118 (2001) 513
- [8] T. Graf, C. Felser, S.P. Parkin, *Progress in Solid State Chemistry* 39 (2011) 1
- [9] I. Galanakis and Ph. Mavropoulos, *J. Phys. Condensed Matter*, 19 (2007) 315213
- [10] K Ramesh Kumar, N. Harish Kumar, P. D. Babu, S. Venkatesh and S. Ramakrishnan, *J. Phys.: Condensed Matter* 24 (2012) 336007
- [11] C. Klewe, M. Meinert, J. Schmalhorst, G. Reiss, *J. Phys.: Condensed Matter* 25 (2013) 076001
- [12] I. Galanakis, K. Ozdogan, E. Sasioglu and B. Aktas, *Phys. Rev. B* 75 (2007) 092407
- [13] A. Slebarski and J. Goraus, *Phys. Rev. B* 80 (2009) 235121
- [14] J. Goraus and A. Slebarski, *Materials Science-Poland*, 25 (2007) 359