

A First-Principles Study on the Half-Metallicity and Magnetism at the (001) Surfaces of the Quaternary Heusler Compound RhTiYGe

Dong-Chul Kim*

Department of Electrical and Electronics Engineering, Halla University, Wonju 26404, Korea

(Received 16 August 2018, Received in final form 20 September 2018, Accepted 28 September 2018)

Recently, it was predicted that the quaternary Heusler compounds, RhTiYGe is half-metallic in bulk state by a first-principles calculation. In this study, we have investigated whether the half-metallicity is conserved or not at the (001) surfaces of RhTiYGe by means of the full-potential linearized augmented plane wave (FLAPW) method within the general gradient approximation. For this we considered two types of surface termination: RhTi-terminated and YGe-terminated (001) surfaces. From the calculated total magnetic moments and the local density of states of each atom, we found that half-metallicity is conserved for the YGe-terminated system, while the RhTi-terminated (001) surface is not half-metallic. The main contributions to the total magnetic moments of the two systems come from the Ti atoms, and the values of magnetic moments are in between $1.35 \mu_B$ and $1.36 \mu_B$.

Keywords : half-metallicity, surface magnetism, electronic structure

4원 호이슬러 화합물 RhTiYGe의 (001) 표면에서 반쪽금속성에 대한 제일원리 연구

김동철*

한라대학교 전기전자공학과, 강원 원주시 한라대 1길 32, 26404

(2018년 8월 16일 받음, 2018년 9월 20일 최종수정본 받음, 2018년 9월 28일 게재확정)

전자구조 계산에 의해 덩치상태에서 반쪽금속성을 가지는 것으로 확인된 4원 호이슬러 화합물 RhTiYGe의 (001) 표면에서 반쪽금속성이 유지되는지 여부와 그 표면의 자성을 제일원리 Full-potential Linearized Augmented Plane Wave(FLAPW) 에너지띠 계산방법을 통해 연구하였다. 이를 위해 각기 Rh와 Ti 원자로 끝나는 (001) 표면과 Y와 Ge 원자로 끝나는 (001) 표면을 모두 고려하였다. 계산된 계의 총자기모멘트 및 원자별 상태밀도로부터 Y와 Ge 원자로 끝나는 표면계는 표면에서도 반쪽금속성을 유지하지만 Rh와 Ti 원자로 끝나는 표면계는 반쪽금속성이 유지되지 못함을 확인하였다. 이들 계에서 자기모멘트를 주로 제공하는 원자는 Ti로서 각 계에서 $1.35 \mu_B$ 에서 $1.38 \mu_B$ 의 자기모멘트를 가진다는 것을 확인하였다.

주제어 : 반쪽금속성, 표면자성, 전자구조 계산

I. 서 론

반쪽금속(half-metal) 물질에서는 한 쪽 스핀상태의 전자는 금속성을 나타내고 다른 쪽 스핀상태의 전자는 부도체적 성질을 나타내기 때문에 이러한 명칭을 가지게 되었다. 따라서, 반쪽금속에서는 페르미에너지에서 금속성을 나타내는 스핀의 전자상태만 존재하여 그 스핀분극률이 100%로서 이들 전자

만이 전도를 담당할 수 있어서 스핀주입 등 다양한 스핀트로닉스 소자에 응용되고 있다.

반쪽금속성은 1983년에 네덜란드의 de Groot 등[1]이 반호이슬러 화합물인 NiNbSn에서 처음 발견하였다. 그 후 여러 가지 구조를 가진 다양한 화합물에서 반쪽금속성이 예측되었으며 이들 중 일부는 실제로 합성되기도 하였다. 예를 들면 강자성 금속산화물[2-6], 묽은 자성반도체[7,8], 완전 호이슬러나 반호이슬러를 포함하는 호이슬러 화합물[9-15]이나 전이금속과 V족이나 VI족의 원소로 이루어진 zinc-blende 구조의 2원 화합물[16-20]이다. 이 중 호이슬러 화합물은 쉽게 합성이

되면서 높은 큐리온도와 큰 자기모멘트를 가지고 있어 많은 관심을 끌었다. 또한 호이슬러 화합물은 기존의 전자공학에서 널리 활용되어 온 zinc-blende 구조의 반도체와 구조적으로 잘 접합될 수 있어서 소자활용 등 실용적 면에서도 큰 관심을 받았다. 완전 호이슬러 화합물은 X_2YZ (X, Y는 전이금속, Z는 sp 원소)의 조성을 가지며 반호이슬러 화합물은 XYZ의 조성을 가진다. 완전호이슬러에서는 Co_2 -계의 화합물 예를 들면 Co_2FeZ 나 Co_2CrZ (Z = Al, Si, Ga, Ge) 등이 매우 높은 큐리 온도와 큰 자기모멘트를 가지는 것으로 알려졌다[21-23].

이러한 3원 완전 호이슬러 화합물에서 2개의 X 전이원소 중 하나를 다른 전이원소 X'으로 치환하게 되면 4원 호이슬러 화합물이 된다. 4원 호이슬러 화합물에서 반쪽금속성 발현 여부에 대한 연구도 많이 이루어졌다. 그 결과 자성전이금속인 철과 코발트를 함유한 $CoFeCrZ$ (Z = Al, Si)[24]와 $CoFeTiZ$ (Z = Si, Ge, Sn), 그리고 $CoFeVSb$ [25] 등도 반쪽금속임이 확인되었다. 여기에 더하여 Zr[26,27]이 들어간 $ZrCoTiZ$ (Z = Si, Ge, Ga, and Al)이나 Ni이나 Mn이 들어간 4원 호이슬러 화합물 $NiCoMnGa$ 과 $CoFeMnZ$ (Z = Al, Si, Ga, Ge) 등도 반쪽금속성을 가진다는 것이 보고되었다[28-30]. 이들은 320 K에서 710 K 사이의 비교적 높은 큐리온도를 가진다는 것이 보고되었으나 반쪽금속 에너지 간격은 거의 0 eV이었다. 또한 자성전이금속원소인 Fe와 Ni을 포함하는 $NiFeTiP$ 와 $NiFeTiSi$ 도 반쪽금속성을 가진다는 것이 확인되었다[31].

바로 최근인 2018년 6월에 Han 등[32]은 전자구조 계산을 통해 자성전이금속이 포함되지 않은 4원 호이슬러 화합물인 $YRhTiGe$ 이 반쪽금속임을 보고하였다. 이들은 계산을 통해 여러 구조 중 Y는 (0.75, 0.75, 0.75), Rh는 (0, 0, 0), Ti는 (0.5, 0.5, 0.5), Ge는 (0.25, 0.25, 0.25)에 위치한 경우가 가장 안정적이며 이때의 평형 격자상수는 6.67 Å임을 보였다. 또한 $YRhTiGe$ 의 자기모멘트는 Slater-Pauling 관계 $M_t = Z_t - 18$ (여기서 M_t 는 보어마그네톤으로 나타낸 자기모멘트, Z_t 는 계의 총 가전자의 수)에 따라 총 가전자수가 20이므로 2.0 μ_B 을 가져 반쪽금속의 특성을 나타내고 있다.

반쪽금속을 실제로 소자에 효율적으로 활용하기 위해서는 표면에서 반쪽금속성 유지여부가 중요한 요소이다. 본 논문에서는 $YRhTiGe$ 에서 (001) 표면의 전자구조를 계산하여 표면에서도 반쪽금속성이 유지되는지를 검토하였다.

II. 연구방법 및 모형

4원 호이슬러 합금인 $YRhTiGe$ 에서 (001) 표면은 Y와 Ge 원자로 끝나는 면 (YGe-term)과 Rh와 Ti 원자로 끝나는 (RhTi-term) 두 가지의 (001) 표면이 있다. 여기서는 이들 두

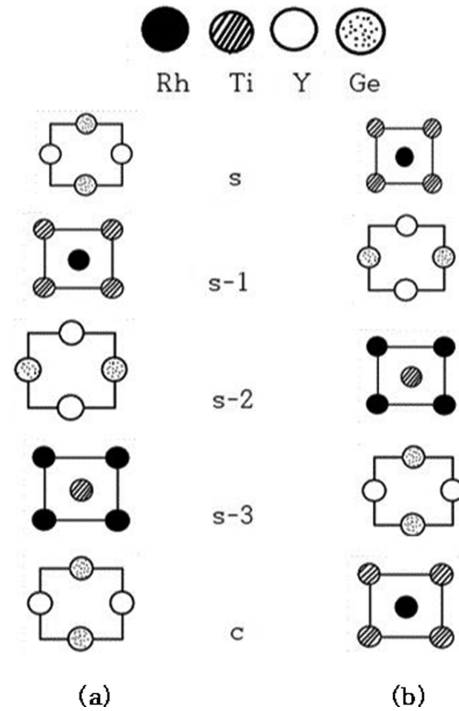


Fig. 1. Atomic structure Fig. 1 for the (a) YGe-terminated and (b) RhTi-terminated surface systems. S, S-1, ..., and C denote the surface, subsurface, ... and the center layers, respectively.

가지 (001) 표면 모두에 대해 계산을 수행하였다.

표면 전자구조 계산을 위해 반복구조모형에 덩치코드의 FLAPW(Full-potential Linarized Augmented Plane Wave) [33] 에너지 띠 방법을 이용하였다. 즉 Fig. 1에 보인 것처럼 YGe-term 표면계나 RhTi-term 표면계에 대해 각기 9개의 원자층으로 이루어진 박막계가 충분한 간격을 두고 반복되는 구조를 택함으로써 표면을 흉내내었다. PBE형[34]의 일반기울기 근사(GGA)를 채택하여 교환상관 퍼텐셜을 다루었다. 핵심전자들은 디락 방정식을 고려하여 완전상대론적 취급을 하였고[35], 원자가전자들에 대해서는 스핀-궤도 상호작용을 포함하지 않고 준상대론적으로 취급하였다.

FLAPW 방법에서 고려하는 머핀틴(Muffin-Tin)구의 반지름으로 Y와 Ge 원자는 2.6 a.u.로, Rh와 Ti는 2.3 a.u.로 잡았다. 전자상태의 에너지 고유값은 Kohn-Sham 방정식[36,37]을 풀어 구하였으며, 전하밀도와 스핀밀도가 각각 1.0×10^{-4} e/a.u.³ 이하일 때 자체충족적 수렴조건을 만족하는 것으로 정하였다.

III. 결과 및 논의

Fig. 2와 Fig. 3에 $YRhTiGe$ 에서 Y와 Ge 원자로 끝나는 (001) 표면계(YGe-term으로 나타내기로 한다)와 Rh와 Ti 원

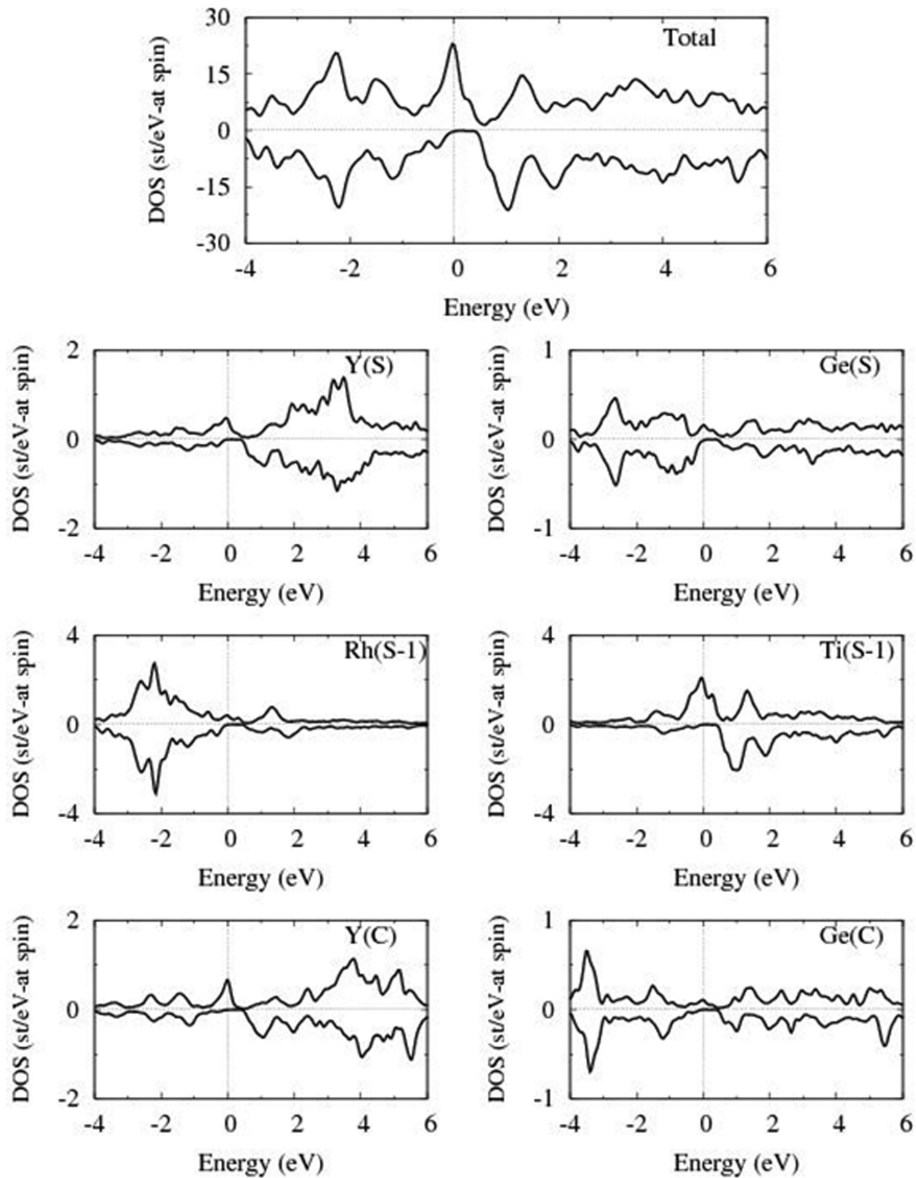


Fig. 2. The total and atom-projected spin-polarized density of states (DOS) for the chosen atoms of the YGe-term of the RhTiYGe (001) surface system. The spin-down DOS values are multiplied by a negative number, and the Fermi levels are set to zero.

자로 끝나는 (001) 표면계(RhTi-term)에 대한 총상태밀도와 원자별 상태밀도가 주어져 있다. Fig. 2에는 YGe-term계에 대한 총상태밀도와 원자별 상태밀도로서 맨 위 패널에는 총 상태밀도가 제시되어 있으며, 그 아래 차례대로 표면층(S)의 Y와 Ge 원자, 표면 밀층(S-1)의 Rh와 Ti 원자, 그리고 가운데 층(C)의 Y와 Ge 원자의 원자별 상태밀도가 주어져 있다.

먼저 맨 위 패널의 총상태밀도를 보면 다수전자의 경우 페르미 에너지에서 상당한 상태밀도를 가지고 있으나 소수전자의 상태밀도는 페르미 에너지에서 에너지 간격이 존재하여 YGe-term 표면계는 반쪽금속성을 유지한다고 할 수 있다. 원자별 상태밀도를 보면, 가운데 층의 Y와 Ge의 경우 덩치와

같이 소수스핀전자 상태밀도의 에너지 간격이 0.4 eV로서 반쪽금속성을 보여주고 있고, (S-1)층의 Rh와 Ti 그리고 (S)층의 Y와 Ge 원자의 상태밀도에서도 가운데 층보다는 에너지 간격이 다소 줄었으나 여전히 반쪽금속성이 유지되고 있음을 알 수 있다. 따라서 YGe-term 표면계는 표면층에서도 반쪽금속성을 유지하며, 계산된 총 자기모멘트가 7.0 μ_B 로 정수인 점도 이 계가 반쪽금속성임을 증거하고 있다.

덩치 YRhTiGe에서 반쪽금속성이 나타내는 이유는 전이금속인 Rh와 Ti의 d 전자상태 사이의 혼성으로 생긴 t_{2g} 와 t_{1u} 의 Γ_{15} 와 Γ_{25} 상태가 분리된 것이 원인으로보고 있다[10]. YGe-term 표면계의 경우 표면의 Y와 Ge 원자와 그 밀층의

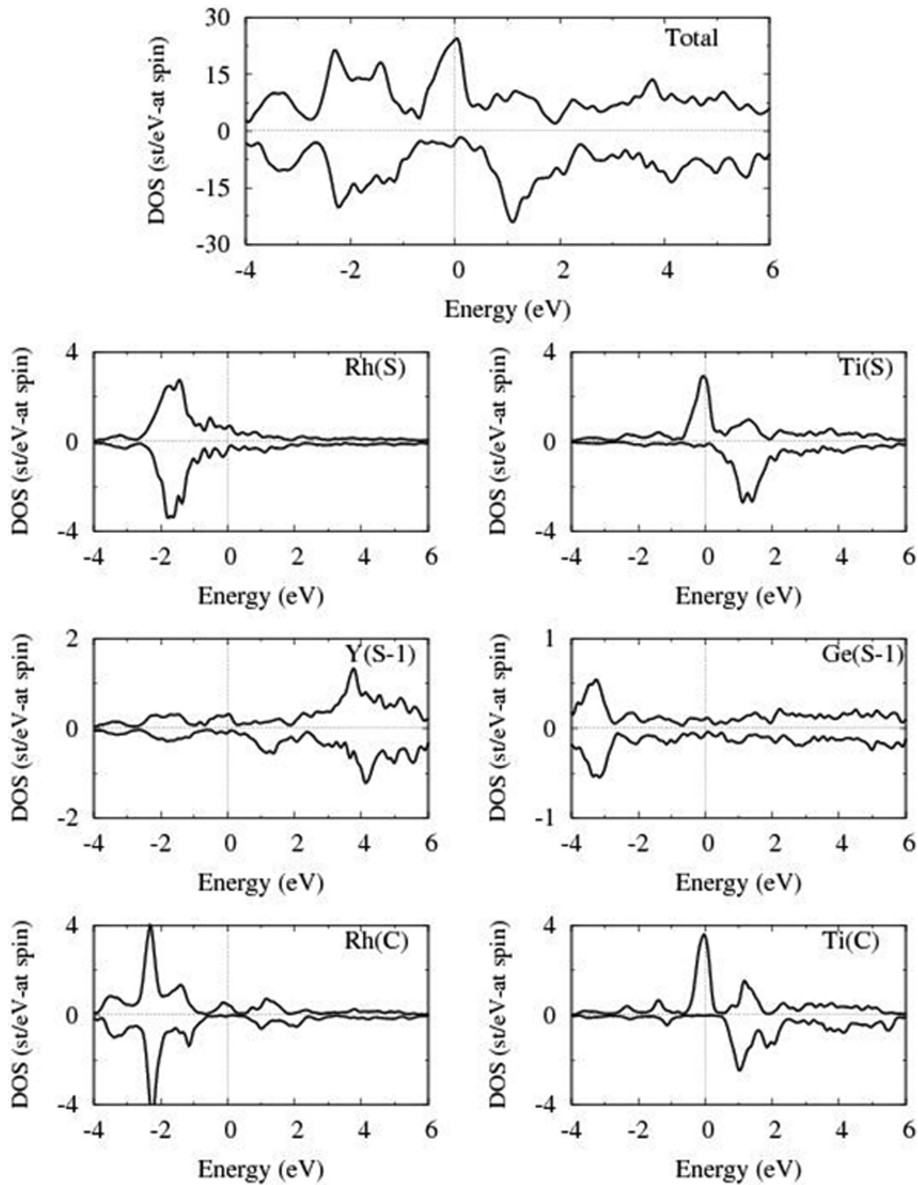


Fig. 3. The total and atom-projected spin-polarized density of states (DOS) for the chosen atoms of the RhTi-term of the RhTiYGe (001) surface system. The spin-down DOS values are multiplied by a negative number, and the Fermi levels are set to zero.

Rh와 Ti의 결합이 끊어지지 않아 Rh와 Ti의 혼성에 의해 생긴 t_{2g} 와 t_{1u} 상태의 분리가 유지되기 때문에 반쪽금속 상태가 깨지지 않는 것으로 생각된다.

반면 Fig. 2에 주어진 RhTi-term의 상태밀도를 보면 먼저 맨 위 패널의 총상태밀도를 보면 다수전자나 소수전자 모두 페르미 에너지에서 상태밀도 값을 가지고 있어 반쪽금속성이 깨짐을 알 수 있다. 또한 가운데 층 Rh와 Ti 원자는 덩치와 같이 약 0.4 eV인 에너지 간격을 보이고 있어 반쪽금속 상태를 유지하나 표면 밀층 (S-1)층의 Y와 Ge 원자 그리고 표면 층(S)의 Rh와 Ti는 소수스핀전자상태에서 에너지 간격이 없어 반쪽금속성이 깨짐을 알 수 있다. 이는 표면 Rh와 Ti

원자가 표면생성으로 인해 Y와 Ge와의 결합이 깨지면서 t_{2g} 와 t_{1u} 상태의 분리가 유지되지 못하기 때문으로 생각된다. 실제로 계산된 총 자기모멘트도 정수가 아닌 $9.65 \mu_B$ 로서 반쪽금속성이 깨짐을 알 수 있다. 표면 Ti와 Rh 원자는 표면생성으로 인해 반쪽금속성이 깨지지만, 표면효과로 인한 띠좁힘 현상이 나타나서 가운데 층에 비해 상태밀도 봉우리들이 좀 더 예리한 모양을 보여주고 있다.

Table I에는 YGe-term계에서 원자별로 머핀턴 구내에서 s, p, d 등 각운동량에 따른 다수와 소수스핀의 전자수 및 총전자수 그리고 자기모멘트 값이 제시되어 있다. 이를 보면 Ti 원자의 경우에, 가운데 층에 가까운 (S-3)층의 자기모멘트는

Table I. *l*-Decomposed electrons within muffin-tin spheres on the atoms in the YGe-term of RhTiYGe (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 (\uparrow/\downarrow)	p (\uparrow/\downarrow)	d (\uparrow/\downarrow)	Total (\uparrow/\downarrow)	MM [μ_B]
Rh	S-1	0.24 (0.12/0.12)	0.18 (0.09/0.09)	6.79 (3.36/3.43)	7.22 (3.57/3.65)	-0.08
	S-3	0.24 (0.12/0.12)	0.18 (0.09/0.09)	6.79 (3.37/3.42)	7.21 (3.58/3.63)	-0.05
Ti	S-1	0.17 (0.10/0.07)	0.14 (0.08/0.06)	1.96 (1.53/0.43)	2.28 (1.71/0.57)	1.15
	S-3	0.16 (0.09/0.07)	0.14 (0.08/0.06)	2.00 (1.65/0.35)	2.31 (1.83/0.48)	1.35
Y	S	0.15 (0.08/0.07)	0.13 (0.07/0.06)	0.80 (0.49/0.31)	1.10 (0.65/0.45)	0.21
	S-2	0.18 (0.10/0.08)	0.19 (0.10/0.09)	0.95 (0.53/0.42)	1.35 (0.75/0.60)	0.14
	C	0.18 (0.10/0.08)	0.18 (0.10/0.08)	0.94 (0.54/0.40)	1.35 (0.77/0.58)	0.19
Ge	S	1.36 (0.68/0.68)	1.49 (0.70/0.79)	10.00 (5.00/5.00)	12.86 (6.39/6.47)	-0.08
	S-2	1.41 (0.65/0.66)	1.58 (0.76/0.82)	10.04 (5.02/5.02)	12.95 (6.45/6.50)	-0.05
	C	1.41 (0.65/0.66)	1.59 (0.77/0.82)	10.03 (5.02/5.01)	12.95 (6.45/6.50)	-0.05

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

Atom		s (\uparrow/\downarrow)	p (\uparrow/\downarrow)	d (\uparrow/\downarrow)	Total (\uparrow/\downarrow)	MM [μ_B]
Rh	S	0.21 (0.11/0.10)	0.09 (0.05/0.04)	6.86 (3.40/3.46)	7.16 (3.55/3.61)	-0.06
	S-2	0.23 (0.11/0.12)	0.18 (0.09/0.09)	6.82 (3.41/3.41)	7.23 (3.61/3.62)	-0.01
	C	0.23 (0.11/0.12)	0.18 (0.09/0.09)	6.81 (3.39/3.42)	7.23 (3.60/3.63)	-0.03
Ti	S	0.16 (0.09/0.07)	0.09 (0.05/0.04)	1.92 (1.63/0.29)	2.16 (1.77/0.39)	1.38
	S-2	0.16 (0.09/0.07)	0.14 (0.08/0.06)	1.99 (1.64/0.35)	2.29 (1.81/0.48)	1.33
	C	0.16 (0.09/0.07)	0.14 (0.08/0.06)	1.98 (1.65/0.33)	2.29 (1.83/0.46)	1.36
Y	S-1	0.18 (0.10/0.08)	0.18 (0.10/0.08)	0.92 (0.52/0.40)	1.33 (0.75/0.58)	0.18
	S-3	0.18 (0.10/0.08)	0.19 (0.11/0.08)	0.94 (0.54/0.40)	1.35 (0.77/0.58)	0.19
Ge	S-1	1.32 (0.66/0.66)	1.56 (0.76/0.80)	10.03 (5.02/5.01)	12.94 (6.45/6.49)	-0.04
	S-3	1.41 (0.65/0.66)	1.59 (0.77/0.82)	10.03 (5.02/5.01)	12.96 (6.46/6.50)	-0.04

1.35 μ_B 이고 표면 밀층인 (S-1)층 Ti 원자의 자기모멘트는 이 보다 줄어든 1.15 μ_B 이다. Y 원자의 경우 (C)층의 자기모멘트는 0.19 μ_B 이고 (S-2)층에서는 0.14 μ_B 로 줄어드나 (S)층에서 0.21 μ_B 로 다소 늘어난다. Rh와 Ge 원자는 Han 등의 계산결과와 마찬가지로 다소 작은 값의 음의 자기모멘트를 가진다[32].

Table II에는 표면에서 반쪽금속성이 유지되지 못하는 RhTi-term계에 대한 원자별 s, p, d 전자수와 자기모멘트가 주어졌다. 여기서 Ti(C)층은 덩치상태로 간주할 수 있는데 그 자기모멘트가 1.36 μ_B 이며 표면 Ti(S)의 경우 1.38 μ_B 로 큰 차이를 보이지 않는다. 여기서도 Rh와 Ge의 자기모멘트는 음의 값으로 원자의 위치에 따라 -0.06 μ_B 에서 -0.01 μ_B 를 가진다.

IV. 결론 및 요약

최근에 전자구조 계산을 통해 반쪽금속성을 가진다는 것이 확인된 4원 호이슬러 화합물인 RhTiYGe에서 (001) 표면에 대해 FLAPW 에너지 띠 계산방법을 이용하여 표면자성과 반

쪽금속성 유지여부를 탐구하였다. 이 화합물에서 (001) 표면은 Rh와 Ti 원자(RhTi-term)나 Y나 Ge 원자(YGe-term)로 끝나는 두 개의 절단면이 있기 때문에 이들 두 가지 표면에 대해 모두 원자별 상태밀도 등을 계산하였다. 그 결과 RhTi-term계는 반쪽금속성이 유지되지 못하는 반면 YGe-term계는 반쪽금속성이 유지됨을 확인하였다. 이는 Fig. 2와 Fig. 3에 주어진 각 표면계의 총상태밀도나 원자별 상태밀도로부터 확인이 되며, RhTi-term계의 총자기모멘트가 9.65 μ_B 로 정수가 아닌 반면 YGe-term계의 총자기모멘트는 정수인 7.0 μ_B 란 점으로부터도 확인할 수 있다.

이는 YGe-term계의 경우 표면에서도 반쪽금속성이 유지되는 이유는 표면층 Y와 Ge 원자와 표면 밀층 Rh와 Ti 원자와의 결합이 유지되어 이들 결합이 반쪽금속성을 발현시키는 t_{2g} 와 t_{1u} 상태의 분리를 유지시켜주기 때문으로 생각된다.

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] Z. Stotek, W. M. Temmerman, A. Svane, L. Petit, G. M. Stocks, and H. Wimmer, *J. Magn. Magn. Mater.* **272**, 1816 (2004).
- [3] W. Song, J. Wang, and Z. Wu, *Chem. Phys. Lett.* **482**, 246 (2009).
- [4] S. Lv, H. Li, D. Han, Z. Wu, X. Liu, and J. Meng, *J. Magn. Magn. Mater.* **323**, 416 (2011).
- [5] Y. S. Dedkov, U. Rudiger, and G. Guntherrodt, *Phys. Rev. B* **65**, 064417 (2002).
- [6] S. P. Lewis, P. B. Allen, and T. Sasaka, *Phys. Rev. B* **55**, 10253 (1997).
- [7] Y. Zhang, W. Liu, and H. Niu, *Solid State Commun.* **145**, 590 (2008).
- [8] Y. Saeed, S. Nazir, A. Shaikat, and A. H. Reshak, *J. Magn. Magn. Mater.* **322**, 3214 (2010).
- [9] X. Q. Chen, R. Podloucky, and P. Rogl, *J. Appl. Phys.* **100**, 113901 (2006).
- [10] K. Özdoğan, E. Şaştoğlu, and I. Galanakis, *J. Appl. Phys.* **113**, 193903 (2013).
- [11] H. C. Kandpal, G. H. Fecher, and C. Felser, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **40**, 1507 (2007).
- [12] K. Özdoğan and I. Galanakis, *J. Magn. Magn. Mater.* **321**, L34 (2009).
- [13] V. Sharma, A. K. Solanki, and A. Kashyap, *J. Magn. Magn. Mater.* **322**, 2922 (2010).
- [14] I. Galanakis, P. H. Dederichs, and N. Papanilolaou, *Phys. Rev. B* **66**, 174429 (2002).
- [15] T. Graf, C. Felser, and S. P. P. Parkin, *Prog. Solid State Chem.* **39**, 1 (2011).
- [16] I. Galanakis and P. Mavropoulos, *Phys. Rev. B* **67**, 104417 (2003).
- [17] Y. Q. Xu, B. G. Liu, and D. G. Pettifor, *Phys. B* **329**, 1117 (2003).
- [18] K. L. Yao, G. Y. Gao, Z. L. Liu, and L. Zhu, *Solid State Commun.* **133**, 301 (2005).
- [19] K. L. Yao, G. Y. Gao, Z. L. Liu, L. Zhu, and Y. L. Li, *Phys. B* **366**, 62 (2005).
- [20] X. F. Ge and Y. M. Zhang, *J. Magn. Magn. Mater.* **321**, 198 (2009).
- [21] H. C. Kandpal, G. H. Fecher, and C. Felser, *J. Phys. D* **40**, 1507 (2007).
- [22] J. Kübler, G. H. Fecher, and C. Felser, *Phys. Rev. B* **76**, 024414 (2007).
- [23] B. Balke, S. Wurmehl, G. H. Fecher, C. Felser, and J. Kübler, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **9**, 014102 (2008).
- [24] G. Y. Gao, L. Hu, K. L. Yao, B. Luo, and N. Liu, *J. Alloy. Compd.* **551**, 539 (2013).
- [25] Y. J. Zhang, Z. H. Liu, G. T. Li, X. Q. Ma, and G. D. Liu, *J. Alloy. Compd.* **616**, 449 (2014).
- [26] S. Berri, M. Ibrir, D. Maouche, and M. Attallah, *Comput. Condens. Matter* **1**, 26 (2014).
- [27] S. Berri, M. Ibrir, D. Maouche, and M. Attallah, *J. Magn. Magn. Mater.* **371**, 106 (2014).
- [28] X. Dai, G. Liu, G. H. Fecher, C. Felser, Y. Li, and H. Liu, *J. Appl. Phys.* **105**, 07E901 (2009).
- [29] P. Klaer, B. Balke, V. Alijani, J. Winterlik, G. H. Fecher, C. Felser, and H. J. Elmers, *Phys. Rev. B* **84**, 144413 (2011).
- [30] V. Alijani, J. Winterlik, G. H. Fecher, S. S. Naghavi, and C. Felser, *Phys. Rev. B* **83**, 184428 (2011).
- [31] N. Karimian and F. Ahmadian, *Solid State Commun.* **233**, 60 (2015).
- [32] Y. Han, Y. Wu, T. Li, R. Khenata, T. Yang, and X. Wang, *Materials* **11**, 797 (2018).
- [33] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Weinert, and A. J. Freeman, *Phys. Rev. B* **24**, 864 (1981).
- [34] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
- [35] D. D. Koelling and B. N. Harmon, *J. Phys. C* **10**, 3107 (1977).
- [36] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, B864 (1964).
- [37] W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, A1133 (1965).