

## محاسبه ابتدا به ساکن ویژگی‌های الکترونی، اپتیکی و کشسانی ترکیب $\text{NiMnSb}$

نوع مقاله: علمی پژوهشی

حمدااله صالحی\*، زینب فرد علی‌دای، الهام کردستانی

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

\* salehi\_h@scu.ac.ir

### چکیده:

در این مطالعه خواص الکترونی، اپتیکی و کشسانی ترکیب  $\text{NiMnSb}$  با استفاده از روش امواج تخت بهبودیافته خطی و کد محاسباتی  $\text{Wien2k}$  مورد بررسی قرار گرفت. پارامترهای ساختاری محاسبه شده نشان دهنده سختی بالا و تراکم پذیری کم ترکیب  $\text{NiMnSb}$  بوده و پایداری ترمودینامیکی و دینامیکی ترکیب را تأیید می‌کند. نتایج ساختار نواری نشان می‌دهد که ترکیب  $\text{NiMnSb}$  یک نیم فلز با گاف نواری غیرمستقیم  $0.5\text{ eV}$  در نقطه  $\Gamma$  می‌باشد. همچنین، به دلیل ضریب جذب و بازتاب بالا ترکیب در ناحیه فرابنفش، ترکیب  $\text{NiMnSb}$  کاندیدایی مناسبی برای استفاده به عنوان محافظ موج الکترومغناطیس فرابنفش در ابزارهای نوری می‌باشد. در ثابت‌های کشسانی، مدول حجمی، مدول برشی، مدول یانگ، نسبت  $BH/GH$  و ضریب پواسون محاسبه شد. بزرگی مدول یانگ و نسبت  $BH/GH$  بیانگر شکل پذیری ترکیب بوده و باتوجه به مقدار محاسبه شده ضریب پواسون، بین اتم‌های سازنده ترکیب پیوند یونی وجود دارد.

### اطلاعات مقاله:

دریافت: ۲۸ تیر ۱۴۰۳

پذیرش: ۲۷ مهر ۱۴۰۳

صفحه ۵۷ تا صفحه ۷۰

در دسترس در نشانی:

[www.ijcse.ir](http://www.ijcse.ir)

زبان نشریه: فارسی

شاپا چاپی: ۲۳۵۲-۲۳۲۲

شاپا الکترونیکی:

۲۷۸۳-۳۰۰۳

### کلیدواژه:

$\text{NiMnSb}$ ، نیم فلز، ویژگی‌های

الکترونی، اسپین قطبیده، تابع

دی‌الکتریک، ضرایب کشسانی.

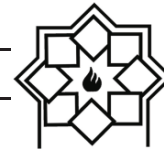
20.1001.1.23222352.1402.0.0.19.0

:DOR

### ۱- مقدمه

استفاده از این اثر در ذخیره سازی، انتقال و پردازش اطلاعات [۳]، مواد ترموالکتریک، سلول‌های خورشیدی [۴]، فیلترهای اسپینی، اتصالات تونلی و مقاومت‌های مغناطیسی بزرگ اشاره کرد [۵]. یکی از جنبه‌های مهم ترکیبات هویسler، خواص مغناطوآپتیکی آن‌ها می‌باشد. این اثر شامل تغییر در قطبش نور ناشی از برهم‌کنش نور با موادی است که دارای

با پیدایش درجه آزادی اسپین، به عنوان یک مشخصه مهم الکترون تلاش‌های زیادی برای استفاده از اسپین به عنوان یک ویژگی ضروری برای انتقال اطلاعات انجام شد و منجر به پایه‌گذاری علم اسپینترونیک در دهه ۱۹۸۰ شد [۱، ۲]. از جمله کاربردهای اسپینترونیک، می‌توان به امکان



گشتاور مغناطیسی بوده [۶] و مطالعه طیف نوری این مواد در فناوری‌های اسپینترونیک و سلول حافظه بسیار کاربردی می‌باشد. یکی از جنبه‌های مهم ترکیبات هویسلر، خواص مغناطواینتیکی آن‌ها می‌باشد. این اثر شامل تغییر در قطبش نور ناشی از برهم‌کنش نور با موادی است که دارای گشتاور مغناطیسی بوده [۶] و مطالعه طیف نوری این مواد در فناوری‌های اسپینترونیک و سلول حافظه بسیار کاربردی می‌باشد. به همین دلیل، وجود اسپین قطبیده در ابزارهای اسپینترونیک و یافتن موادی با این مشخصه بسیار حائز اهمیت می‌باشد. با کشف ترکیبات نیم‌فلزی و اهمیت آن‌ها در اسپینترونیک؛ بستر جدیدی برای مطالعه ترکیبات نیم‌فلزی ایجاد شد و منجر به معرفی موادی همچون ترکیبات تمام هویسلر و نیم‌هویسلر گردید [۷، ۸]. ترکیبات هویسلر خانواده‌ای از مواد مغناطیسی هستند که به دو گروه تقسیم‌بندی می‌شوند: ترکیبات تمام هویسلر با ساختار  $L2_1$  (فرمول عمومی  $X_2YZ$ ) و ترکیبات نیم‌هویسلر با ساختار  $C1_b$  ( $XYZ$ ) که  $X$  و  $Y$  فلزات واسطه و  $Z$  عنصر گروه اصلی می‌باشد [۹، ۱۰]. آلیاژهای نیم‌فلزی شامل چهار تقارن بلوری مکعبی (گروه فضایی  $F\bar{4}3m$ )، ارتورمبیک (گروه فضایی  $Pnma$ ) و هگزگونال (گروه فضایی  $P6_3/mmc$  و  $P\bar{6}2m$ ) می‌باشند [۱۱]. در این میان ترکیب نیم‌هویسلر NiMnSb به دلیل ساخت آسان و دمای کوری بالا بسیار مورد توجه قرار می‌گیرد [۱۲، ۱۳]. خاصیت نیم‌فلزی در ترکیبات نیم‌هویسلر ناشی از هیبریداسیون اوربیتال  $d$  دو عنصر  $X$  و  $Y$  بوده که منجر به ایجاد گاف نواری در ساختار می‌شود [۱۴] و در زمینه اسپینترونیک مورد توجه پژوهشگران قرار می‌گیرد. در میان مطالعات انجام‌شده بر روی این ترکیب، می‌توان به محاسبه خواص ساختاری، الکترونی، کشسانی و مغناطیسی

به روش‌های تجربی و نظری اشاره کرد. در سال ۱۹۹۴ اولین مطالعه اساسی بر روی آلیاژهای نیم‌هویسلر نیم‌فلزی NiMnSb و PtMnSb در چارچوب نظریه تابعی چگالی انجام شد. براساس این مطالعه، آلیاژ NiMnSb و PtMnSb خواص مشابه زیادی داشته و هر دو آن‌ها در ساختار  $C1_b$  به‌صورت ساختار مکعبی (Fcc) و با گروه فضایی ( $F\bar{4}3m$ ) متبلور می‌شوند. همچنین، این دو آلیاژ و بسیاری از آلیاژهای نیم‌هویسلر  $C1_b$  براساس محاسبات ساختار نواری به‌عنوان فرومغناطیس نیم‌فلز شناخته می‌شوند. در دیگر مطالعات انجام‌شده می‌توان به محاسبه خواص به کمک کدهای محاسباتی نظیر Quantum ESPRESSO، VASP، CASSTEP در چارچوب نظریه تابعی چگالی و توابع گرین اشاره کرد. در این مطالعات ویژگی‌های ساختاری، الکترونی، مغناطیسی و کشسانی آلیاژ نیم‌هویسلر NiMnSb محاسبه و مورد بررسی قرار گرفته است. براساس خواص الکترونی و نتایج ساختار نواری محاسبه‌شده، می‌توان دریافت که این ترکیب در فاز مکعبی یک نیم‌فلز با گاف نواری  $0.48 \text{ eV}$  در نوار اسپین پایین می‌باشد و اتم‌های ترکیب به ترتیب  $Ni$ ،  $Mn$  و  $Sb$  موقعیت‌های اتمی  $(0, 0, 0)$ ،  $(0, 0.25, 0.25)$  و  $(0.75, 0.75, 0.75)$  قرار گرفته‌اند. همچنین، با بررسی خواص مغناطیسی آلیاژ NiMnSb مقدار بهینه  $\mu_B$  را  $3.76$  در محدوده دمایی  $573$  تا  $673$  کلوین گزارش دادند که به‌طور قابل‌توجهی کم‌تر از پیش‌بینی قانون اسلیتر-پائولینگ بوده و عنصر اصلی در ایجاد گشتاور مغناطیسی در این آلیاژ ناشی از اتم منگنز می‌باشد. [۲۵-۱۵].

بنابراین، با توجه به اهمیت کاربردی ترکیبات نیم‌هویسلر در زمینه‌های مختلف از جمله اسپینترونیک، ترکیب NiMnSb



کاندیدای مناسبی برای کاربردهای صنعتی و ابزارهای نوری بوده و در این مطالعه خواص الکترونی، اپتیکی و کشسانی آن در فاز مکعبی بررسی شده است. در بخش نخست پژوهش، روش انجام محاسبات به طور کامل بیان شده است. در بخش دوم، ویژگی‌های ساختاری، پایداری دینامیکی و ترمودینامیکی ترکیب مورد بررسی و مطالعه قرار گرفته است. در بخش سوم، ویژگی‌های الکترونی همچون ساختار نواری و چگالی حالت‌های الکترونی ترکیب بررسی شده است. در بخش چهارم و پنجم به ترتیب، طیف‌های اپتیکی و خواص کشسانی ترکیب محاسبه و گزارش شده است و در پایان نتایج به صورت خلاصه بیان شده است. لازم به ذکر است که از آنجایی که تاکنون خواص اپتیکی این ترکیب در حالت مکعبی بررسی نشده است؛ معیاری برای مقایسه خواص اپتیکی وجود ندارد و چون ترکیب  $\text{NiMnSb}$  دارای خاصیت فرومغناطیس می‌باشد؛ تمامی محاسبات به صورت اسپین قطبیده انجام شده است.

## ۲- روش محاسبات

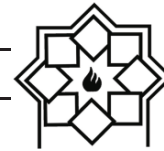
در این پژوهش، محاسبات با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) بر پایه نظریه تابعی چگالی و کد محاسباتی Wien2k انجام شده است. نرم‌افزار Wien2k به روش خودسازگار به حل دسته معادلات کوهن-شم تحت روش (FP-LAPW) پرداخته و با حل معادلات و به دست آوردن توابع موج تک‌الکترونی چگالی الکترونی جدید محاسبه می‌شود. یکی از روش‌های مناسب در انتخاب توابع موج تک‌الکترونی، تقسیم‌بندی بلور به دو ناحیه کره مافین-تین و ناحیه بین جایگاهی است. در روش (FP-LAPW) مجموعه پایه معرفی شده در داخل کره مافین-تین با شعاع RMT ترکیبی خطی از توابع موج شعاعی بوده و در

ناحیه بین جایگاهی، توابع موج مربوط به امواج تخت می‌باشد. بردار موج در داخل کره مافین-تین تا  $k_{\text{max}}$  و در نواحی بین جایگاهی تا  $G_{\text{max}}$  بسط داده می‌شود [۲۶]. پارامترهای اساسی، نظیر تعداد نقاط در منطقه اول بریلوئن،  $R_{\text{MT}k_{\text{max}}}$  و  $G_{\text{max}}$  به صورت بهینه مورد استفاده قرار گرفته است. به این ترتیب، میزان انرژی جداسازی الکترون‌های ظرفیت و مغزه  $6 \text{ Ry}$  به عنوان مبنا قرار گرفته و با دقت  $10^{-6} \text{ Ry}$  محاسبات خودسازگار انجام گرفت. برای رسیدن به همگرایی، مقدار بهینه  $R_{\text{MT}k_{\text{max}}} = 8$  و  $G_{\text{max}} = 12 \text{ (a.u}^{-1}\text{)}$  در نواحی بین جایگاهی چگالی بار و پتانسیل برحسب بردار موج قطع بسط داده شد که RMT شعاع کره مافین-تین و  $k_{\text{max}}$  بیانگر بزرگ‌ترین بردار موج  $k$  در بسط تابع موج می‌باشد. تعداد نقاط  $K$  در منطقه اول بریلوئن ۱۰۰۰ نقطه در نظر گرفته شد که به ازای آن یک شبکه  $(k\text{-mesh})$   $10 \times 10 \times 10$  ایجاد شد. محاسبات اثر تبدالی-همبستگی با استفاده از تقریب شیب تعمیم‌یافته (GGA-PBE) [۲۷] و چگالی موضعی اسپینی (LSDA) [۲۸] بررسی شد. همچنین، اوربیتال‌های الکترونی  $\text{Mn } (3d^5, 4s^2)$ ،  $\text{Ni } (3d^8, 4s^2)$  و  $\text{Sb } (5s^2, 5p^3)$  به عنوان الکترون‌های لایه ظرفیت در نظر گرفته شد.

## ۳- بحث و نتایج

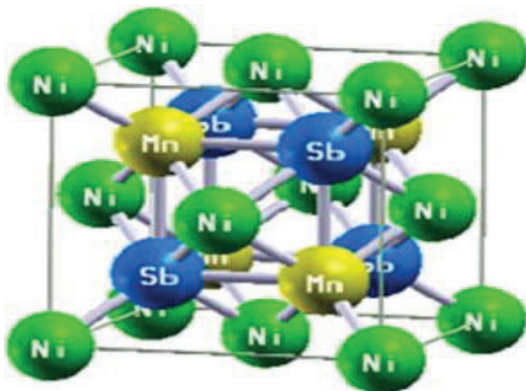
### ۳-۱- پارامترهای ساختاری

در نظریه تابعی چگالی و انجام محاسبات، اولین مرحله تعیین ثابت شبکه بهینه می‌باشد. لذا به کمک بسط انرژی یاخته بسیط و برازش انرژی محاسبه شده توسط معادله مورناگان می‌توان مقدار ثابت شبکه بهینه و دیگر مؤلفه‌های ساختاری را محاسبه کرد [۲۹]:



$$E_{\text{coh}} = -\frac{E_{\text{tot}} - [n_{\text{Ni}}E_{\text{Ni}} + n_{\text{Mn}}E_{\text{Mn}} + n_{\text{Sb}}E_{\text{Sb}}]}{n_{\text{Ni}} + n_{\text{Mn}} + n_{\text{Sb}}} \quad (2)$$

$E_{\text{tot}}$  انرژی کل بلور،  $E_A$  ( $A = \text{Ni, Mn, Sb}$ ) انرژی هر یک از اتم‌های تشکیل‌دهنده بلور در حالت آزاد و  $E_{\text{coh}}$  انرژی همدموسی می‌باشد. مقدار انرژی همدموسی با تقریب GGA-PBE و LSDA به ترتیب  $-0.45$  (eV/atom) و  $-0.18$  (eV/atom) محاسبه شد.



شکل ۱- سلول واحد ترکیب NiMnSb در فاز مکعبی

مقادیر گزارش شده نشان می‌دهد که ترکیب NiMnSb در تقریب GGA-PBE به دلیل داشتن انرژی همدموسی کم‌تر پایداری ترمودینامیکی بیش‌تری دارد. برای تأیید نتایج پایداری ترمودینامیکی، پایداری دینامیکی ترکیب نیز مورد بررسی قرار گرفته و نمودار پاشندگی فونونی ترکیب NiMnSb در امتداد نقاط  $\Gamma$ ،  $X$ ،  $W$  و  $K$  در شکل ۲ آورده شده است.

$$E(V) = E_0 + \frac{BV_0}{B_0} \left[ \frac{V}{V_0} + \frac{(\frac{V}{V_0})^{1-B_0'-B_0}}{B_0-1} \right] \quad (1)$$

در این معادله  $B$  مدول حجمی،  $B_0'$  مشتق مدول حجمی،  $V_0$  حجم تعادلی و  $E_0$  انرژی حالت پایه در فشار و دمای صفر کلون می‌باشد. ثابت شبکه، حجم بهینه و پارامترهای ساختاری محاسبه و در جدول ۱ گزارش شده است. باتوجه به نتایج به‌دست آمده، مشاهده می‌شود که تقریب GGA-PBE پایداری بیش‌تری را برای ساختار گزارش می‌دهد و مقدار محاسبه شده با این تقریب هم‌خوانی خوبی با دیگر نتایج دارد. مقدار بزرگ مدول حجمی که در هر دو تقریب بیش‌تر از  $100$  GPa می‌باشد؛ بیانگر تراکم‌پذیری کم و سختی زیاد ترکیب می‌باشد. لذا می‌توان نتیجه گرفت که ترکیب NiMnSb در حالت مکعبی به راحتی تغییر شکل نمی‌دهد و برای ایجاد تغییر شکل در بلور آن انرژی زیادی لازم است. اما از آنجایی مقدار مدول حجمی و مشتق آن در دیگر مطالعات محاسبه و گزارش نشده است؛ معیاری جهت مقایسه وجود ندارد. ساختار مورد مطالعه ترکیب NiMnSb در فاز مکعبی در شکل ۱ نشان داده شده است. انرژی همدموسی یک کمیت ترمودینامیکی جهت تعیین پایداری مکانیکی بلور بوده و مقدار انرژی است که باید به بلور اضافه شود تا اجزای آن به‌صورت اتم‌های آزاد خنثی و به فاصله نامتناهی از هم و در حال سکون قرار بگیرند [۳۲]:

جدول ۱- پارامترهای ساختاری محاسبه شده ترکیب NiMnSb با دو تقریب PBE و LSDA

| پارامترهای ساختاری                     | مطالعه حاضر |        | مطالعات دیگران              |                            |
|----------------------------------------|-------------|--------|-----------------------------|----------------------------|
|                                        | GGA-PBE     | LSDA   | مقدار تجربی <sup>[۳۰]</sup> | مقدار نظری <sup>[۳۱]</sup> |
| $a$ ( $\text{\AA}$ )                   | ۵٫۹۱        | ۵٫۷۷   | ۵٫۹۲                        | ۵٫۹۱                       |
| $V_0$ ( $\text{\AA}^3$ )               | ۳۴۹٫۸۷      | ۳۲۴٫۲۷ | -                           | -                          |
| $B_0$ (GPa)                            | ۱۰۹٫۹۹      | ۱۴۷٫۰۳ | -                           | ۱۱۰٫۴۰                     |
| $B_0'$                                 | ۶٫۲۸        | ۵٫۶۷   | -                           | -                          |
| $K \times 10^{-3}$ (GPa) <sup>-۱</sup> | ۰٫۰۹        | ۶٫۸۰   | -                           | -                          |



بررسی قراردادده و مقدار گاف نواری و نحوه مشارکت اوربیتال‌ها را تعیین کرد. باتوجه به شکل ۳ در هر دو حالت اسپین بالا و پایین در نوار ظرفیت و رسانش، تپه‌گنی‌هایی وجود دارد که ناشی از اوربیتال‌های d اتم‌های Mn و Ni می‌باشد. همچنین، مقدار گاف نواری محاسبه‌شده با تقریب GGA-PBE نشان می‌دهد که ترکیب NiMnSb یک نیم‌فلز با گاف نواری غیرمستقیم به پهنای ۰.۵ eV در راستای  $\Gamma$  به X بوده و با دیگر نتایج مطابقت خوبی دارد.

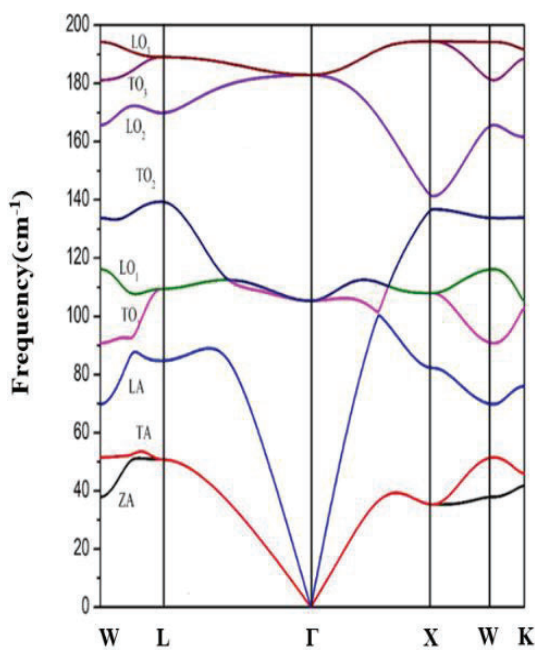
در شکل ۴ چگالی حالت‌های کلی و جزئی ترکیب NiMnSb آورده شده است. باتوجه به این نمودار، غیرصفر بودن چگالی حالت‌ها در تراز فرمی در اسپین بالا و وجود گاف نواری در اسپین پایین بیانگر خاصیت نیم‌فلزی این ترکیب در حالت مکعبی می‌باشد و مطابقت خوبی با نتایج حاصل از ساختار نواری دارد. علاوه بر این، بیش‌ترین مشارکت در نوار ظرفیت ناشی از اوربیتال d اتم Ni و p اتم Sb و در نوار رسانش به اوربیتال d اتم Mn مربوط می‌شود.

### ۳-۳- خواص اپتیکی

ثابت‌های اپتیکی پاسخ تابش موج الکترومغناطیسی اعمالی در چارچوب نظریه خطی بوده و با روابط کرامرز-کرونیک به هم مرتبط می‌شوند. تابع دی‌الکتریک یکی از مهم‌ترین پارامترها در مطالعه خواص اپتیکی یک ماده بوده و با محاسبه این تابع می‌توان به طیف وسیعی از ویژگی‌های اپتیکی ساختار مورد مطالعه دست یافت [۳۳]. تابع دی‌الکتریک مختلط از طریق رابطه زیر محاسبه می‌شود [۳۴]:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (3)$$

$\varepsilon_1(\omega)$  سهم حقیقی و  $\varepsilon_2(\omega)$  سهم موهومی تابع دی‌الکتریک می‌باشد که باتوجه به روابط کرامرز-کرونیک توسط معادلات

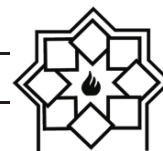


شکل ۲- نمودار پاشندگی فونونی ترکیب NiMnSb در فاز مکعبی

در نمودار پاشندگی فونونی، بسامدهای فونونی مثبت و حقیقی نشان‌دهنده پایداری ساختار و بسامدهای منفی و موهومی بیانگر ناپایداری ساختار می‌باشند. مطابق این نمودار به علت دارا بودن محدوده بسامدی مثبت، ترکیب NiMnSb پایدار بوده و می‌تواند به روش تجربی در آزمایشگاه سنتز شود. بنابراین، باتوجه به سازگاری نتایج محاسبات با تقریب GGA-PBE در خواص ساختاری، مقدار انرژی همدوسی و نمودار پاشندگی فونونی، کلیه خواص ترکیب با این تقریب محاسبه و گزارش می‌شود.

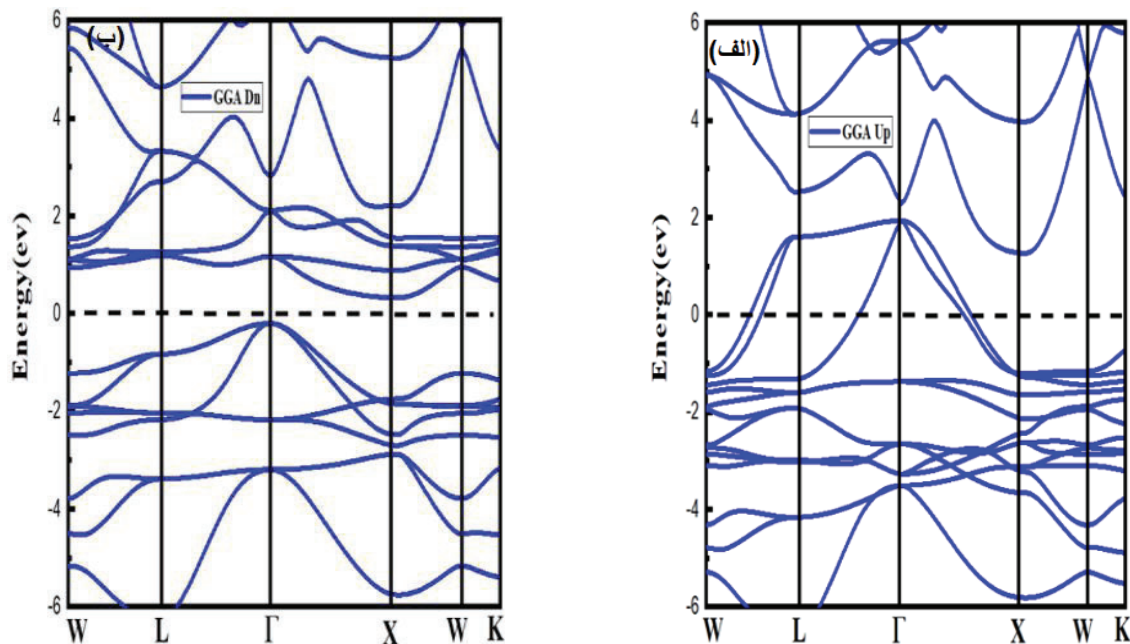
### ۳-۲- خواص الکترونی

در محاسبه خواص الکترونی، ساختار نواری و چگالی حالت‌های الکترونی مورد مطالعه قرار گرفته است. به کمک این نمودارها می‌توان عایق، نیم‌رسانا و فلز بودن مواد را مورد

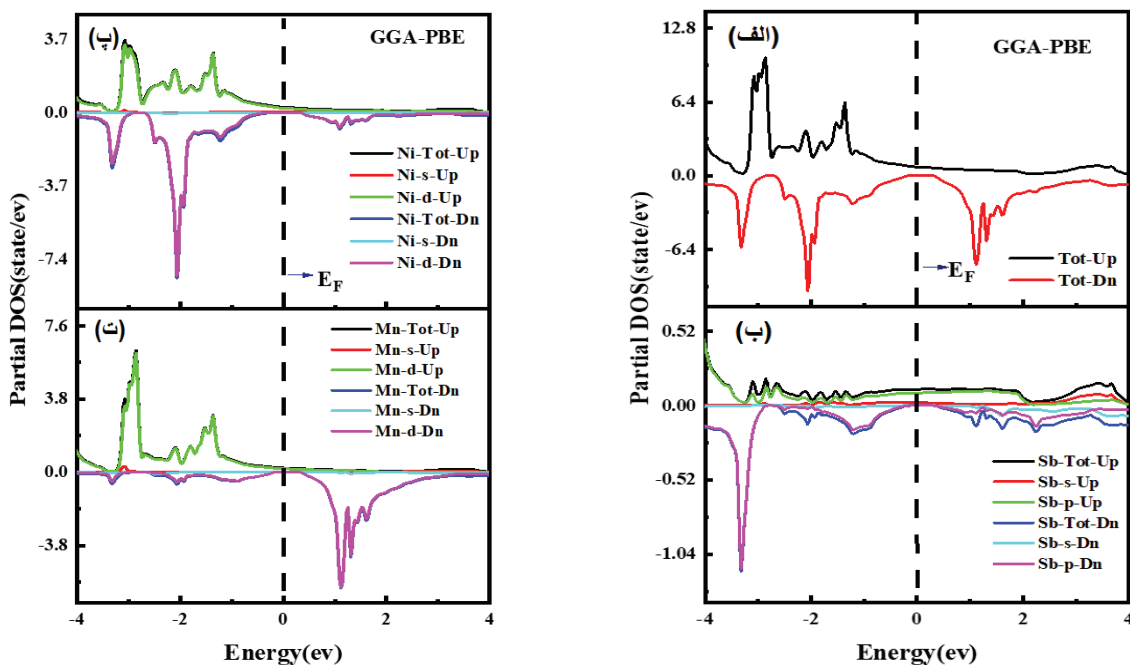


(۴) و (۵) محاسبه می‌شوند [۳۵، ۳۶]:

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2P}{\pi} \left\{ \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \right\} \quad (۴)$$



شکل ۳- نمودار ساختار نواری ترکیب NiMnSb با تقریب GGA-PBE در فاز مکعبی



شکل ۴- نمودار چگالی حالت‌های (الف) کلی و جزئی (ب) اتم Sb، (پ) اتم Ni و (ت) اتم Mn در ترکیب NiMnSb با تقریب GGA-PBE



$$n(\omega) = \sqrt{\frac{|\epsilon(\omega)| + \text{Re}\epsilon(\omega)}{2}} \quad (8)$$

$$k(\omega) = \sqrt{\frac{|\epsilon(\omega)| - \text{Re}\epsilon(\omega)}{2}} \quad (9)$$

$\text{Re}\epsilon(\omega)$  سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک می‌باشد. پارامتر مهم دیگر در خواص اپتیکی، ضریب رسانندگی می‌باشد. الکترون‌ها با جذب فوتون، برانگیخته شده و حالت‌های اشغال نشده بالای تراز فرمی را اشغال می‌کنند. به جذب فوتون توسط الکترون‌ها جذب بین‌نواری و به این گذار بین‌نواری هدایت اپتیکی گویند که توسط رابطه زیر تعریف می‌شود:

$$\sigma(\omega) = \frac{\omega}{4\pi} \epsilon_2(\omega) \quad (10)$$

$\sigma(\omega)$  رسانندگی اپتیکی می‌باشد. به جذب بر واحد طول یک محیط اپتیکی ضریب جذب می‌گویند:

$$I(\omega) = \sqrt{2}\omega[(\epsilon_1^2(\omega) - \epsilon_2^2(\omega))^{\frac{1}{2}} - \epsilon_1(\omega)]^{\frac{1}{2}} = \frac{2\omega k(\omega)}{c} \quad (11)$$

در فرآیند جذب، الکترون‌ها با جذب انرژی از نوار ظرفیت به نوار رسانش انتقال می‌یابند. به همین علت، مقدار بیشینه نمودار جذب و سهم موهومی تابع دی‌الکتریک با یکدیگر هم‌خوانی دارند. ضریب بازتاب نیز بیانگر شدت موج بازتابی به موج فرودی می‌باشد که به کمک رابطه زیر تعریف می‌شود [۳۵]:

$$R(\omega) = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (12)$$

باتوجه به طیف تابع دی‌الکتریک شکل ۵-الف مشاهده می‌شود که در محدوده‌ای از انرژی (۱۴/۱۱-۴/۶۰) که در آن  $\epsilon_1(\omega)$  منفی است؛ امواج الکترومغناطیسی منتشر نمی‌شوند.

لذا در این ناحیه از انرژی بلور شفافیت خود را از دست می‌دهد و به دلیل ایجاد حفره‌ها و مشارکت آن‌ها در رسانش، بیش‌ترین جذب و رسانندگی وجود دارد. همچنین، ثابت دی‌الکتریک و ضریب شکست استاتیک ترکیب NiMnSb به ترتیب ۲۷/۸۰ و ۵/۲۷ می‌باشد. طبق نمودار ۵-پ، در انرژی ۷/۶۰ eV ضریب جذب دارای مقدار بیشینه است؛ لذا در این انرژی ماده شفافیت

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} \sum_j \langle i | M | j \rangle^2 f_i(1 - f_j) \delta(E_f - E_i - \omega) \quad (5)$$

P قسمت اصلی انتگرال کوشی، M عنصر ماتریسی مؤلفه اندازه حرکت در راستای قطبش نور، i و f حالت اولیه و نهایی و  $E_i$  انرژی الکترون در حالت i می‌باشد [۳۵، ۳۶].

با محاسبه سهم حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، می‌توان سایر خواص اپتیکی نظیر طیف اتلاف انرژی  $L(\omega)$ ، ضریب شکست  $n(\omega)$ ، ضریب خاموشی  $k(\omega)$ ، ضریب جذب  $\alpha(\omega)$ ، ضریب بازتاب  $R(\omega)$  و رسانندگی  $\sigma(\omega)$  را به دست آورد. باتوجه به ماهیت مکعبی ترکیب NiMnSb و رفتار یکسان ترکیب در هر سه جهت x، y و z بلور دارای ساختار همسانگرد بوده و تمامی طیف‌های اپتیکی فقط در جهت x مورد مطالعه قرار می‌گیرند.

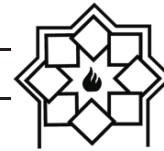
یکی از کمیت‌های مهم در بررسی خواص جامدات تابع اتلاف انرژی است. این تابع با احتمال اتلاف انرژی E در واحد طول برای الکترون در حال عبور از محیط متناسب است و به کمک رابطه زیر تعریف می‌شود:

$$L(\omega) = \text{Im} \frac{-1}{\epsilon(\omega)} = \frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)} \quad (6)$$

ضریب شکست مختلط یکی دیگر از پارامترهای مهم در بررسی خواص اپتیکی است که به اثر متقابل میکروسکوپی اتمی وابسته می‌باشد:

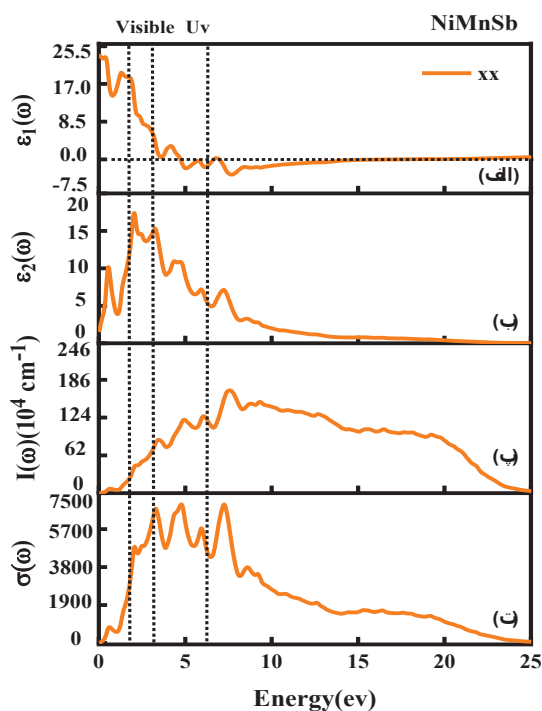
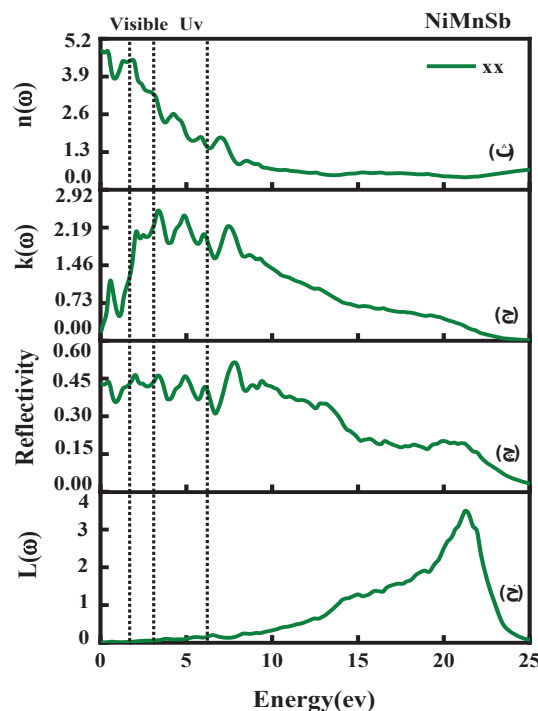
$$N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) \quad (7)$$

$n(\omega)$  ضریب شکست ماده و  $k(\omega)$  ضریب خاموشی می‌باشد. ضریب خاموشی بیانگر میزان جذب تابش موج الکترومغناطیسی توسط ماده می‌باشد. به عبارتی، اگر موج الکترومغناطیسی به راحتی از ماده عبور کند،  $k(\omega)$  کوچک و اگر پرتو به سختی درون ساختار نفوذ کند دارای  $k(\omega)$  بزرگ می‌باشد:



با نمودار ۵-الف دارند. از این رو، براساس منحنی‌های ترسیم‌شده می‌توان بیان کرد که  $n(\omega)$  مشابه  $\epsilon_1(\omega)$  و  $k(\omega)$  همانند  $\epsilon_2(\omega)$  رفتار می‌کند. در نمودار ۵-خ بلندترین قله در انرژی ۲۱/۶۰ eV متناسب با انرژی پلاسمون‌های حجمی بوده و در این انرژی شدت انتقال بین‌نواری کمینه می‌باشد. در انرژی‌های بالاتر از ۲۵ eV نیز به دلیل کاهش احتمال گذار، تابع اتلاف به سمت صفر میل می‌کند. همچنین، از مقایسه نمودار ضریب جذب و ضریب بازتاب می‌توان دریافت که به دلیل وجود ضریب جذب و بازتاب بالا در محدوده فرابنفش، ترکیب NiMnSb می‌تواند به‌عنوان حافظ موج الکترومغناطیس فرابنفش در ابزارها و تجهیزات نوری مورد استفاده قرار گیرد.

خود را از دست می‌دهد. در نمودار ضریب رسانندگی ۵-ت مشاهده می‌شود که با افزایش انرژی فوتون‌های فرودی مقدار رسانندگی اپتیکی افزایش می‌یابد؛ به‌گونه‌ای که در انرژی ۸/۱ eV ضریب رسانندگی ترکیب NiMnSb بیشینه خواهد شد. در شکل ۵-ث مقدار ضریب شکست استاتیک برابر ۵/۲۷ است که در نمودار سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک نیز آورده شده است. باتوجه به این نمودار می‌توان دریافت که در نقاط بیشینه ۰/۳۳ eV و ۱/۷۷ eV عبور امواج الکترومغناطیس به حداقل مقدار رسیده و پس از این مقادیر ضریب شکست روند کاهشی خواهد داشت. براساس طیف ضریب خاموشی شکل ۵-ج، مقادیر بیشینه انرژی ۴/۲۰ eV و ۶/۳۸ eV متناظر با صفرهای حقیقی تابع دی‌الکتریک بوده و مطابقت خوبی



شکل ۵- نمودار طیف‌های اپتیکی (الف) سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک، (ب) سهم موهومی تابع دی‌الکتریک (پ) ضریب جذب، (ت) ضریب رسانندگی، (ث) ضریب شکست، (ج) ضریب خاموشی، (خ) طیف اتلاف انرژی ترکیب NiMnSb با تقریب GGA-PBE



### ۳-۴- ویژگی‌های کشسانی

در مطالعه حاضر، تمامی ضرایب کشسانی با استفاده از کد محاسباتی IRelast که تعمیم‌یافته بسته cubic – elast می‌باشد محاسبه شده است. این کد اخیراً به کد محاسباتی Wien2k اضافه شده و به روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل به محاسبه ثابت‌های کشسانی با تقارن‌های مختلف می‌پردازد. با محاسبه ثابت‌های کشسانی می‌توان اطلاعات مفیدی درباره ویژگی‌های مکانیکی و شاخص‌های پیوند ماده به دست آورد. یکی از دلایل محاسبه ضرایب کشسانی، تعیین پایداری ساختار مواد است. شرطی پایداری در فاز مکعبی براساس معادلات زیر تعریف می‌شود [۳۷]:

$$C_{11} + 2C_{12} > 0 \quad (13)$$

$$C_{11} - C_{12} > 0 \quad (14)$$

$$C_{11}, C_{44} > 0 \quad (15)$$

برای بلور مکعبی سه ثابت کشسانی مستقل وجود دارد که با استفاده از آن‌ها می‌توان ویژگی‌های مکانیکی جامد را شرح داد. دو پارامتر مهم در بررسی ویژگی‌های کشسانی، مدول برشی و مدول حجمی می‌باشد که در ساختار مکعبی با سه تقریب Voigt, Reuss و Hill از طریق روابط زیر محاسبه می‌شود [۳۸]:

$$G_V = \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5} \quad (16)$$

$$G_R = \frac{5(C_{11} - C_{12})C_{44}}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})} \quad (17)$$

$$G_H = \frac{G_V + G_R}{2} \quad (18)$$

مدول حجمی، بیانگر میزان مقاومت بلور در برابر فشارهای وارد شده در هر سه راستا می‌باشد و بیانگر سختی و مقاومت مواد می‌باشد و به کمک روابط زیر تعریف می‌شوند [۳۸]:

$$B_R = B_V = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (19)$$

$$B_H = \frac{B_V + B_R}{2} \quad (20)$$

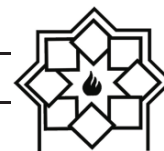
خاصیت شکل‌پذیری یکی از کمیت‌های مهم فیزیکی در ساخت مواد می‌باشد. میزان نرمی، سختی و شکننده بودن مواد را می‌توان به چندین روش نشان داد. در یک روش از نسبت مدول حجمی به مدول برشی و قابلیت چکش‌خواری استفاده می‌شود، به صورتی که به ازای مقادیر بیش‌تر از ۱/۷۵ بلور مورد نظر شکل‌پذیرتر و به ازای مقادیر کمتر، شکننده‌تر خواهد بود. روش دوم در تعیین سختی مواد، تعیین ضریب پواسون می‌باشد. هرچه مواد شکننده‌تر ضریب پواسون کوچک‌تر خواهد بود. این ضریب، در محدوده عددی (۰/۱-۰/۲۵) پیوند کووالانسی و در محدوده (۰/۲۵-۰/۵) پیوند یونی را برای ترکیب نتیجه می‌دهد:

$$\gamma = \frac{3B - 2G_H}{2(3B + 2G_H)} \quad (21)$$

سومین معیار جهت بررسی سختی مواد، مدول یانگ می‌باشد که بیانگر تمایل ماده به تغییر شکل در خلاف جهت نیروی اعمالی است. هرچه مدول یانگ دارای مقدار بیش‌تری باشد، ماده سخت‌تر و کووالانسی‌تر می‌شود:

$$E = \frac{9B_H G_H}{3B_H + G_H} \quad (22)$$

با توجه به مقادیر محاسبه شده در جدول ۲ شرط تعادل مکانیکی برقرار بوده و ترکیب NiMnSb از لحاظ مکانیکی پایدار می‌باشد. با توجه به مدول حجمی محاسبه شده و مقایسه با دیگر مطالعات؛ می‌توان به صحت مقدار به دست آمده و مقاومت ترکیب پی برد. مقادیر سه معیار سختی، نسبت BH/GH، ضریب پواسون و مدول یانگ برای فازهای مختلف در جدول ۲ آورده شده است. علت اختلاف مدول یانگ محاسبه شده در کار حاضر با دیگر مطالعه موجود به نوع بسته محاسباتی، پتانسیل و روش استخراج ضرایب مربوط می‌شود.



جدول ۲- پارامترهای کشسانی محاسبه شده در ترکیب NiMnSb

| محاسبات           | $C_{11}$<br>(GPa) | $C_{12}$<br>(GPa) | $C_{44}$<br>(GPa) | $B_H$<br>(GPa) | $G_H$<br>(GPa) | $B_H/G_H$ | $\gamma$ | $E$<br>(GPa) |
|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|----------------|----------------|-----------|----------|--------------|
| مطالعه حاضر       | ۱۳۷/۶۵            | ۷۶/۳۳             | ۳۹/۶۲             | ۹۶/۶۶          | ۳۸/۰۵          | ۲/۳۷      | ۰/۳۲     | ۱۰۱/۰۲       |
| مطالعه تجربی [۳۹] | ۱۳۸/۰۰            | ۴۵/۰۰             | ۴۸/۰۰             | -              | -              | -         | -        | -            |
| مطالعه نظری [۳۱]  | ۱۶۷/۰۷            | ۸۲/۰۶             | ۵۳/۲۷             | ۱۱۰/۴۰         | ۴۸/۶۷          | ۲/۲۶      | ۰/۳۸     | ۱۲۷/۳۰       |

براساس نتایج به دست آمده به دلیل ضریب جذب و بازتاب بالا در محدوده فرابنفش، ترکیب NiMnSb می‌تواند به عنوان محافظ امواج الکترومغناطیس فرابنفش در ابزارها و تجهیزات نوری مورد استفاده قرار گیرد. در خواص کشسانی، براساس ضرایب کشسانی  $C_{11}$ ،  $C_{12}$  و  $C_{44}$  شرط تعادل مکانیکی برقرار بوده و ساختار پایدار می‌باشد. همچنین، بزرگ بودن مدول یانگ و ضریب پواسون بیانگر خاصیت شکل پذیری و سختی زیاد ترکیب است و باتوجه به مقدار گزارش شده ضریب پواسون، بین اتم‌های سازنده ترکیب NiMnSb پیوند یونی وجود دارد.

### تعارض منافع

هیچ گونه تعارض منافع توسط نویسندگان بیان نشده است.

### تقدیر و تشکر

این مقاله از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد دفاع شده در دانشگاه شهید چمران اهواز استخراج شده است. نویسندگان بر خود لازم می‌دانند مراتب تشکر صمیمانه خود را از دانشگاه شهید چمران که ما را در انجام و ارتقای کیفی این پژوهش یاری دادند، اعلام کنند.

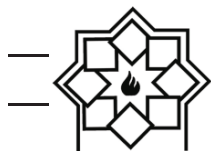
### مراجع

[1]. S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A.

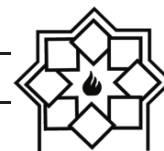
بزرگ بودن مدول یانگ و نسبت  $B_H/G_H$ ، دلالت بر چکش خواری و سختی زیاد ترکیب داشته و از اهمیت بالایی در ساخت ترکیب برخوردار است. علاوه بر این، باتوجه به مقدار محاسبه شده ضریب پواسون (در محدوده ۰/۵-۰/۲۵)، بین اتم های سازنده ترکیب NiMnSb پیوند یونی وجود دارد.

### ۴- نتیجه گیری

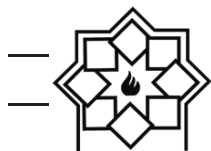
در این پژوهش، خواص الکترونی، اپتیکی و کشسانی ترکیب NiMnSb براساس نظریه تابعی چگالی با پتانسیل کامل و کد محاسباتی Wien2k مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج ساختاری به دست آمده نشان می‌دهد که ترکیب NiMnSb دارای پایدار ترمودینامیکی و دینامیکی می‌باشد. در بررسی خواص الکترونی، نتایج ساختار نواری نشان دهنده نیم فلز بودن ترکیب NiMnSb با گاف نواری غیرمستقیم  $0.5 \text{ eV}$  در نقطه  $\Gamma$  بوده و با گاف نواری حاصل از چگالی حالت‌ها مطابقت خوبی دارد. چگالی حالت‌های جزئی نیز نشان می‌دهد که بیشترین مشارکت در نوار ظرفیت ناشی از اوربیتال d اتم Ni و p اتم Sb و در نوار رسانش به اوربیتال d اتم Mn مربوط می‌شود. کلیه خواص اپتیکی از قبیل سهم حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک، طیف اتلاف انرژی، ضریب شکست، ضریب خاموشی، ضریب جذب، ضریب بازتاب و رسانندگی محاسبه و گزارش شد.



- metallicity versus Symmetry in Pt, Ni and Co-based Half Heusler Alloys: A First-principles Calculation", *J. Phys. Rev.*, (2019), 99, 1-20.
- [12]. A. Dehghan, S. Davatolhagh, "d<sup>0</sup>-d half-Heusler alloys: A potential class of advanced spintronic materials", *J. Alloys Compd.*, (2019), 772, 132-139.
- [13]. A. Dehghan, S. Davatolhagh, "Dirac-like half-metallicity of d<sup>0</sup>-d half-Heusler alloys", *J. Phys. Supercond.*, (2018), 552, 53-56.
- [14]. Z. Wen, T. Kubota, K. Takanashi, "Optimization of half-Heusler PtMnSb alloy films for spintronic device applications", *J. Appl. Phys.*, (2018), 51, 1-6.
- [15]. X. Wang, V. Antropov and B. Harmon, "First principles study of magneto-optical properties of half metallic Heusler alloys: NiMnSb and PtMnSb", *J. Trans. on Mag.*, (1994), 30, 4458-4460.
- [16]. A. Debernardi, M. Peressi, A. Baldereschi, "Structural and electronic properties of NiMnSb Heusler compound and its interface with GaAs", *J. Mater. Sci. Eng.*, (2003), 23, 743-746.
- [17]. L. Chioncel, M. I. Katsnelson, R. A. de Groot, A. I. Lichtenstein, "Nonquasiparticle states in the half-metallic ferromagnet NiMnSb", *J. Phys. Rev.*, (2003), 68, 144425-7.
- [18]. V. D. Buchelnikov, P. Entel, S. V. Taskaev, V. V. Sokolovskiy, A. Hucht, M. Ogura, H. Akai, M. E. Gruner, S. K. Nayak, "Monte Carlo study of the influence of antiferromagnetic exchange interactions on the phase transitions of ferromagnetic Ni-Mn-X alloys (X= In, Sn, Sb)", *J. Phys. Rev.*, (2008), 78, 1-11.
- [19]. Y. Zhang, J. Liu, Z. Mao and X. Zhao, "Ultrasonic investigation on NiMnSb single crystal using pulse-echo technique", *J. Phys. Con. Ser.*, (2010), 217, 01211.
- [20]. Z. Wen, T. Kubota, T. Yamamoto, K. Takanashi, "Fully epitaxial C1<sub>b</sub>-type NiMnSb half-Heusler compound films
- Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnar, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, D. M. Treger, "Spintronics: a spin-based electronics vision for the future", *J. Sci.*, (2001), 294, 1488-1495.
- [2]. S. Bhatti, R. Sbiaa, A. Hirohat, H. Ohno, S. Fukami, S. N. Piramanayagam, "Spintronics based random access memory: a review", *J. Mater. Today.*, (2017), 20, 530-548.
- [3]. R. A. de Groot, F. M. Muller, P. G. van Engen, K. H. J. Buschow, "New Class of Materials: Half-Metallic Ferromagnets", *J. Phys. Rev. Lett.*, (1983), 50, 2024-2027.
- [4]. T. Graf, S. S. Parkin, C. Felser, "Heusler compounds-A material class with exceptional properties", *IEEE. Trans. Magn.*, (2010), 47, 367-373.
- [5]. M. Lezaic, I. Galanakis, G. Bihlmayer, S. Blugel, "Structural and magnetic properties of the (001) and (111) surfaces of the half-metal NiMnSb", *J. Phys. Condens. Matter.*, (2005), 17, 3121-3126.
- [6]. R. Carey, D. M. Newman, M. L. Wears, "Giant low-temperature enhancement of magneto-optic Kerr effects in PtMnSb", *J. Phys. Rev.*, (2000), 62, 1520-1523.
- [7]. S. Wurmehl, G. H. Fecher, H. C. Kandpa, V. Ksenofontov, C. Felser, H. J. Lin, "Investigation of Co<sub>2</sub>FeSi: The Heusler compound with highest Curie temperature and magnetic moment", *J. Appl. Phys. Lett.*, (2006), 88, 1-3.
- [8]. I. Galanakis, P. H. Dederichs, N. Papanikolaou, "Slater-Pauling behavior and origin of the half-metallicity of the full Heusler alloys", *J. Phys. Rev.*, (2002), 66, 1-9.
- [9]. T. Graf, C. Felser, S. S. Parkin, "Simple rules for the understanding of Heusler compounds", *J. Prog. solid. state chem.*, (2011), 39, 1-50.
- [10]. T. Miyamoto, M. Nagasako, R. Kainuma, "Phase equilibria in the Ni-Mn-Sb alloy system", *J. Alloys Compd.*, (2019), 772, 64-71.
- [11]. M. Baral, A. Chakrabarti, "Half-



- total energy of tungsten", J. Phys. Rev., (1985), 32, 7792-7797.
- [30]. P. Webster, R. M. Makikar, "Chemical order and magnetic properties of the  $\text{Ni}_{2-x}\text{MnSb}$  system", J. Magn. Magn. Mater., (1984), 42, 300-308.
- [31]. Y. Wu, B. Wu, Zh. Wei, Z. Zhou, Ch. Zhao, Ch. Zhao, Y. Xiong, Sh. Tou, Sh. Yang, B. Zhou, Y. Shao, Structural, half-metallic and elastic properties of the half-Heusler compounds  $\text{NiMnM}$  ( $\text{M} = \text{Sb, As and Si}$ ) and  $\text{IrMnAs}$  from firstprinciples calculation", J. Intermetallics., (2014), 53, 26-33.
- [32]. V. Mishra, A. Sagdeo, V. Kumar, M. K. Warshi, H. M. Rai, S. K. Saxena, D. R. Roy, V. Mishra, R. Kumar, P. R. Sagde, "Electronic and optical properties of  $\text{BaTiO}_3$  across tetragonal to cubic phase transition: An experimental and theoretical investigation", J. Appl. Phys., (2017), 122, 1-10.
- [33]. M. Dresselhaus, G. Dresselhaus, S. Cronin, A. G. S. Filho, Optical properties of solids, Springer., Berlin, 2018.
- [34]. X-H. Li, X-Y. Su, R- Z. Zhang, C-H. Xing, Z-L. Zhu, "Pressure-induced band engineering, work function and optical properties of surface F-functionalized  $\text{Sc}_2\text{C MXene}$ ", J. Phys. Chem. Solids., (2020), 137, 1-9.
- [35]. C. Ambrosch-Draxl, J. O. Sofo, "Linear optical properties of solids within the full potential linearized augmented plane wave method", J. Comput. Phys. Commun., (2006), 175, 1-14.
- [36]. H. Wang, Y. Zheng, M-Q. Cai, H. Huang, H. L. W. Chan, "First-principles study on the electronic and optical properties of  $\text{BiFeO}_3$ ", J. Solid. State. Commun., (2009), 149, 641-644.
- [37]. C. F. Cline, L. D. Harold, W. H. Glenn, "Elastic constants of hexagonal  $\text{BaO}$ ,  $\text{ZnS}$ , and  $\text{CdSe}$ ", J. Appl. Phys., (1967), 1944-1948.
- [38]. R. Hill, "The Elastic Behavior of a Crystalline Aggregate", J. Phys. Soc. Sec., (1952), 65, 349-354.
- for current-perpendicular-to-plane giant magnetoresistance devices with an Ag spacer", J. Sci. Rep., (2016), 5, 1-2.
- [21]. Y. Ma, H. Hao, X. Liu, H. Luo, F. Meng, H. Liu, "Influence of Fe-doping on magnetic structure and martensitic transformation in  $\text{Ni-Mn-In}$  and  $\text{Ni-Mn-Sb}$  alloys", J. Intermetallics., (2018), 93, 263-268.
- [22]. B. Govind, A. Kumar, S. Bano, A. Bhardwaj, D. K. Misra, "Structural and Magnetic Properties of  $\text{Ni}_{1+x}\text{MnSb}$  Bulk Heusler Composite Materials", J. ACS Omega., (2020), 5, 11895-11900.
- [23]. T. Fukuhara, Y. Kamiya, K. Mitsumoto, H. Tanida, Y. Muro, T. Namiki, Sh. Masubuchi, K. Ooiwa, "Chemical Composition and Atomic Ordesr of Single Crystal  $\text{NiMnSb}$ ", J. Stron. Correlat. Elec. Sys., (2020), 30, 011178-6.
- [24]. V. Uvarov, N. Uvarov and M. Melnik, "Elecrtonic Structure and Magnetic Properties of Heusler Alloys  $\text{MMnSb}$  ( $\text{M} = \text{Ni, Pd, Pt}$ )", J. Ukrayn kij Fyizich., (2021), 66, 450-455.
- [25]. J. Zelezny, Z. Fang, K. Olenik, J. Patchett, F. Gerhard, C. Gould, L. W. Molenkamp, C. Gomez, J. Zemen, T. Tichy, T. Jungwirth, C. Ciccarelli, "Unidirectional magnetoresistance and spin-orbit torque in  $\text{NiMnSb}$ ", J. Phys. Rev., (2021), 104, 1-29.
- [26]. S. Cottenirs, "Density Functional Theory and the Family of (L)APW-methods: a step-by-step introduction", (2004), 1-75.
- [27]. J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, "Generalized gradient approximation made simple", J. Phys. Rev. Lett., (1996), 77, 18-28.
- [28]. J. Perdew, Y. Wang, "Pair-distribution function and its coupling constant average for the spin-polarized electron gas", J. Phys. Rev., (1992), 46, 12947-12959.
- [29]. Su. H. Wei, H. Krakauer, M. Weinert, "Lieanrized augmented-plane-wave calculation of the electronic structure and



- [39]. J. Giapintzakis C. Grigorescu A. Klini, A. Manousaki, V. Zarbo, J. Androulakis, Z. Viskadourakis, C. Fotakis, "Low-temperature growth of NiMnSb thin films by pulsed-laser deposition", J. Appl. Phys. Lett., (2002), 80, 2716-2718.

## **Ab-initio Calculation of the Electronic, Optical and Elastic Properties of NiMnSb Compound**

**Hamdollah Salehi\*, Zeinab Fard Alidadi, Elham Kordestani**

**Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University, Ahvaz, Iran**

\* salehi\_h@scu.ac.ir

**Abstract:** In the present study, the electronic, optical and elastic properties of NiMnSb compound were studied using linearized augmented plane wave method and Wien2k calculation code. The calculated structural parameters indicate the high hardness and low compressibility of the NiMnSb compound, and confirm the thermodynamically and dynamically stability of the compound. The band structure results show that the NiMnSb compound is a half-metal with an indirect band gap at the  $\Gamma$  point of 0.5 eV. Also, due to the high absorption and reflection coefficient of the compound in the ultraviolet region, the NiMnSb compound is a suitable candidate for use as an ultraviolet electromagnetic wave protector in optical instruments. In elastic parameters, bulk modulus, shear modulus, Young's modulus, ratio BH/GH and Poisson's coefficient, were calculated. The large Young's modulus and ratio BH/GH, indicate the ductile of the compound and according to the calculated value of Poisson's coefficient, there is an ionic bond between the constituent atoms of the NiMnSb compound.

**Keywords:** NiMnSb, Half-metal, Electronic properties, Spin polarized, Dielectric function, Elastic constants.