

DOI:10.3969/j.issn.1674-3644.2017.03.003

# 四元 Heusler 合金 $\text{Co}_2\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Al}$ 的电子结构、磁性及半金属性研究

戴晨盼, 卢志红, 刘静, 方孙, 程朝阳

(武汉科技大学省部共建耐火材料与冶金国家重点实验室, 湖北 武汉, 430081)

**摘要:**利用第一性原理计算方法,研究了  $L2_1$  型 Heusler 合金  $\text{Co}_2\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Al}$  ( $x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ ) 的磁性、电子结构、半金属性及四方变形等。结果表明,随着 Cr 掺杂浓度的提高,合金总磁矩主要由 Co 的 d 电子贡献,总磁矩线性升高,符合 Slater-Pauling 规则,晶格常数线性减小,符合 Vegard 定律;此外,随着  $x$  的增加,费米面从临近导带底向靠近价带顶移动,能隙宽度增加,当  $x>0.25$  时,合金具有半金属性。 $\text{Co}_2\text{V}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Al}$  合金由于费米面位于自旋向下带带隙中部,抗原子无序能力强,在整个合金系列中半金属稳定性最佳,且在四方变形研究中,当  $c/a$  在  $0.92\sim 1.07$  范围内时,该合金仍能保持稳定的半金属性。

**关键词:** Heusler 合金; Cr 掺杂; 磁性; 半金属性; 费米面; 态密度; 四方变形

**中图分类号:** O469; O482 **文献标志码:** A **文章编号:** 1674-3644(2017)03-0173-05

1983 年, de Groot 等在研究半 Heusler 合金 NiMnSb、PtMnSb 的电子结构时首次提出了半金属磁体的概念<sup>[1]</sup>, 这种磁性材料具有特殊的能带结构, 即两个自旋子能带分别呈金属性和半导体性(绝缘性), 导致其费米面附近出现 100% 自旋极化率, 因而被认为是理想的磁电子及自旋注入半导体器件<sup>[2]</sup>。

Heusler 合金具有典型的有序  $L2_1$  型结构, 分子式可表示为  $X_2YZ$ , 其中  $X, Y$  为过渡族元素(如 Co、Ni、Fe、Mn 等),  $Z$  为非磁性金属或非金属元素(如 Si、Ge、Al、Ga 等)。在 Heusler 合金中, 针对 Co 系 Heusler 合金的研究较多。研究表明, 该类合金具有较高的居里温度和自旋极化率, 因此在电子自旋材料领域具有广阔的应用前景<sup>[3-4]</sup>。早期研究中, 虽然理论计算得到  $\text{Co}_2\text{MnSi}$ 、 $\text{Co}_2\text{MnGe}$  等 Co 系 Heusler 合金具有半金属性, 但在实验中却没有测得接近 100% 的自旋极化率<sup>[5]</sup>。研究发现, 随着温度的升高, Co 基 Heusler 合金的半金属稳定性易受到原子无序、晶格缺陷、非准粒子激发等因素的影响<sup>[6-7]</sup>, 而合适的掺杂则被认为是提高该类合金自旋极化率的有效手段。Boochani 等<sup>[8]</sup>研究了  $\text{Co}_2\text{VAl}$  的半金属性, 结果

表明,  $\text{Co}_2\text{VAl}$  的费米面不在能隙中央, 而是比较靠近导带底部, 若受到轻微的原子无序或热扰动, 半金属性将遭到破坏, 合金的自旋极化率显著降低, 若用 Cr 原子对  $\text{Co}_2\text{VAl}$  中的 V 位进行掺杂, 理论上能将费米面位置调至带隙中部, 从而获得稳定的半金属性<sup>[9]</sup>。

另一方面, 通常使用薄膜外延生长法制造自旋电子学器件<sup>[10]</sup>, 但半金属材料的晶格一般与基底材料不同, 因此在器件制造过程中广泛存在晶格失配问题, 这会导致合金表面膜层产生晶格畸变, 最终改变半金属费米面的相对位置, 影响磁性材料的半金属稳定性<sup>[11]</sup>。目前制备工艺中, 基底晶格常数是固定的, 而基底的轴向应变对晶体的影响较大<sup>[12-13]</sup>。为此, 研究四方变形对外延生长薄膜机理的影响, 对制备半金属稳定性良好的磁性材料具有重要的现实意义。

基于此, 本文以  $\text{Co}_2\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Al}$  系列合金为研究对象, 采用基于密度泛函理论(DFT)的广义梯度近似(GGA)进行第一性原理计算, 研究了不同 Cr 掺杂浓度下  $\text{Co}_2\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Al}$  合金的晶体结构、电子结构、磁性、半金属性等, 对比分析了原子无序对  $x=0.5, 1$  时合金半金属稳定性的影

收稿日期: 2017-01-09

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11574242)。

作者简介: 戴晨盼(1990-), 男, 武汉科技大学硕士生。E-mail: dai-chenpan@foxmail.com

通讯作者: 刘静(1964-), 女, 武汉科技大学教授, 博士生导师。E-mail: liujing@wust.edu.cn

响,并以  $\text{Co}_2\text{V}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Al}$  为例,研究了该合金态密度及能量对四方变形  $c/a$  的响应。

## 1 模型与计算方法

$L2_1$  结构 Heusler 合金的晶体结构如图 1 所示。在 Wyckoff 坐标系下, $X(\text{Co})$  原子占据  $A(0, 0, 0)$  和  $C(0.5, 0.5, 0.5)$  位置, $Y(\text{V}$  或  $\text{Cr})$  原子占据  $B(0.25, 0.25, 0.25)$  位置, $Z(\text{Al})$  原子占据  $D(0.75, 0.75, 0.75)$  位置,其中  $X$  原子的两种占位是等效的。

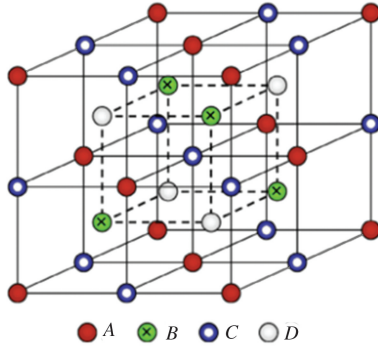


图 1  $L2_1$  有序结构 Heusler 合金晶体结构图

Fig. 1 Schematic diagram of Heusler alloy in  $L2_1$  order structure

在一个  $\text{Co}_2\text{VAl}$  晶胞中,分别用 0、1、2、3、4 个 Cr 原子取代 V 原子,得  $x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$  的掺杂浓度,即  $\text{Co}_2\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Al}$ 。本文基于密度泛函理论的第一性原理,采用模拟包(VASP)进行计算,用广义梯度近似(GGA)定义交换关联函数,用投影缀加波函数(PAW)模拟价电子与芯部电子的相互作用。计算中,平面波截断能设为 500 eV,收敛精度为  $10^{-5}$  eV,使用  $11 \times 11 \times 7$  的 Monkhorst-Pack 型  $k$  网格进行布里渊区能量积分。

## 2 结果与讨论

### 2.1 晶格常数与磁性能

利用能量最小化原理,对  $\text{Co}_2\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Al}$  系列合金的晶格常数进行优化,结果如图 2 所示。由图 2 可以看出,随着 Cr 掺杂浓度  $x$  的增加,平衡晶格常数呈线性下降的趋势,即从  $\text{Co}_2\text{VAl}$  的 0.5723 nm 下降至  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  的 0.5692 nm,这是由于 Cr 的半径比 V 小,Cr 替代原子的增多会使整体的平衡晶格常数减小<sup>[14]</sup>,计算结果符合 Vegard 定律。

表 1 为 GGA 计算得  $\text{Co}_2\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Al}$  系列合金的原胞总磁矩  $M_{\text{tot}}$  和各原子磁矩,其中  $M_{\text{s-p}}$  为根据 S-P 规则计算得到的原胞总磁矩。由表 1 可见,随着掺杂浓度  $x$  的增加,Co 的磁矩变化较小,

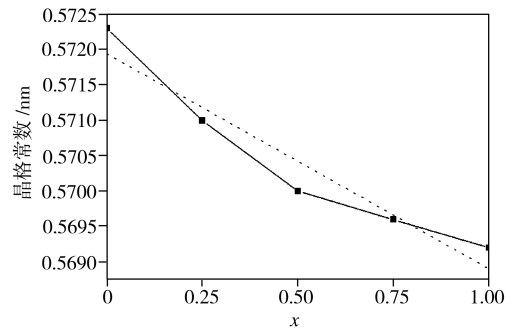


图 2  $\text{Co}_2\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Al}$  的晶格常数随  $x$  的变化

Fig. 2 Variation of lattice constant of  $\text{Co}_2\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Al}$  with  $x$  Al 原子始终保持在一个小的负磁矩值附近,V 的磁矩则由正值( $x=0, 0.25$ )变为负值,Cr 的磁矩呈减小趋势,降低了约 36.2%。GGA 计算所得合金的总磁矩随着  $x$  的增加呈线性上升趋势,与 S-P 规则相符( $m=N_V-24$ ,  $m$  代表原胞磁矩, $N_V$  代表原胞中价电子总数),这与掺杂元素 Cr 的磁矩比 V 高有关,尽管 Cr 的磁矩呈减小趋势,但晶胞中 Cr 数量增多,总磁矩仍然上升。

表 1  $\text{Co}_2\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Al}$  中各原子磁矩和原胞总磁矩(单位: $\mu_B$ )  
Table 1 Total magnetic moments and atomic magnetic moments per cell in  $\text{Co}_2\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Al}$

$x$	$M_{\text{Co}}$	$M_{\text{Al}}$	$M_{\text{V}}$	$M_{\text{Cr}}$	$M_{\text{tot}}$	$M_{\text{s-p}}$
0	0.890	-0.039	0.281	-	2.023	2
0.25	0.829	-0.014	0.143	2.138	2.250	2.25
0.5	0.781	-0.059	-0.060	2.067	2.583	2.5
0.75	0.773	-0.073	-0.055	1.728	2.749	2.75
1	0.760	-0.088	-	1.570	3.025	3

### 2.2 电子结构及半金属性

计算得  $\text{Co}_2\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Al}$  合金的总态密度如图 3 所示。由图 3 中可以看出,整个系列合金的自旋向上带均呈现金属性。当  $x=0.5, 0.75, 1$  时,体系的费米面存在较大的能隙,显示出半金属性质;当  $x=0, 0.25$  时,费米面处有部分态密度出现,半金属性遭到破坏,显示出金属性,且自旋极化率降低。此外,随着  $x$  的增大,费米面从临近导带底向靠近价带顶移动,能隙宽度增大。

为更好地说明合金总态密度的来源及成分,对分波态密度进行分析,结果如图 4 所示。由图 4 可见,在 -6 eV 以下时,贡献主要来自于低能量的 Al 原子的 s 电子,且几乎不受 3d 电子的影响,在图中并未标出;-5 eV 附近时,主要是 Al 原子 p 电子的贡献;在 -6 ~ -4 eV 之间,主要发生了 Al 的 p 电子与过渡金属 3d 电子的杂化;而 -4 ~ +2 eV 之间的态密度峰则主要来自过渡金属元素 3d 电子的贡献,这是 Co-V 和 Co-Cr 原子间的强共价杂化作用造成的,V(Cr)原子的自旋态密度发生  $e_g-t_{2g}$  能级劈裂,形成了低能的成键态峰和高能的反键态峰,并由低态密度区域分隔开。从

图4中还可以看出,费米面以下的成键态峰较多,且成键态主要来自于Co和Cr原子,反键态主要来自于Co原子。此外,Co原子无论自旋向上或向下均具有较大的态密度,且成键态密度主要集中在费米面以下;在费米面以上,Co原子的反成键态密度相对较高,能量比V原子的反成键峰高,这意味着Co原子的交换劈裂增强,将导致Co原子磁矩增加,这与表1结果一致。在Cr原子自旋向上的态密度中存在成键态峰和反键态峰,而自旋向下的态密度中,在交换劈裂的作用下反键态峰向费米能级以上移动,使得Cr的磁矩增大。V的d轨道在低Cr掺杂浓度( $x=0.25, 0.5$ )时主要填充在费米面以上,而高掺杂浓度时则填充在费米面以下,因此V在低Cr掺杂浓度下表现为正磁矩,在高浓度下变为负磁矩<sup>[15]</sup>。

在高有序合金中,由于原子间为共价键连接,

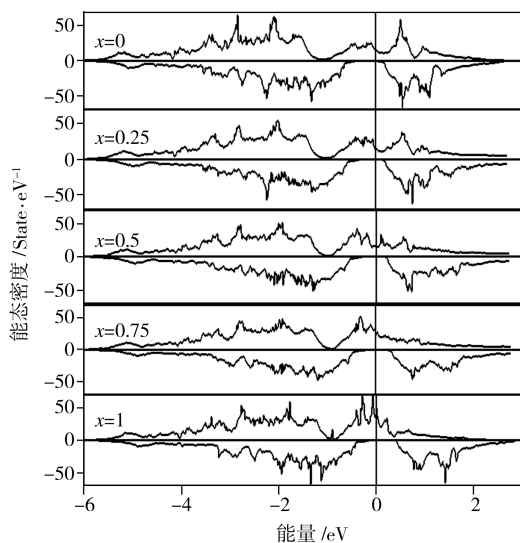


图3  $\text{Co}_2\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Al}$  的总态密度图

Fig. 3 Total densities of states of  $\text{Co}_2\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Al}$

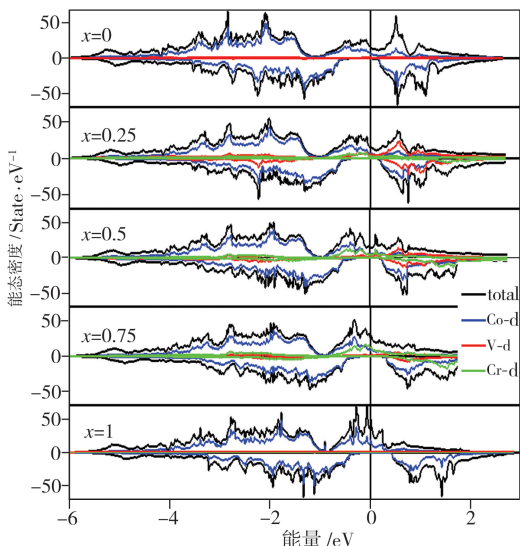


图4  $\text{Co}_2\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Al}$  的分波态密度图

Fig. 4 Partial densities of states of  $\text{Co}_2\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Al}$

因而形成了高度对称的四面体子晶格结构,最终造成不同对称位的d电子轨道的杂化,见图5,其中d1、d2、d3代表三重简并  $t_{2g}$  的  $d_{xy}$ 、 $d_{yz}$ 、 $d_{zx}$  轨道,d4、d5代表二重简并  $e_g$  的  $d_{x^2-y^2}$ 、 $d_{z^2}$  轨道。由图5可知,A位和C位的Co原子中简并与对称性相同的  $t_{2g}(e_g)$  轨道发生杂化,在低于费米面处形成成键态  $t_{2g}(e_g)$ ,在高于费米面处形成反键态  $t_{1u}(e_u)$  轨道。形成的杂化轨道继续与Cr原子的  $t_{2g}$  和  $e_g$  轨道杂化,最终形成成键态的  $t_{2g}$  和  $e_g$  占据轨道以及反键态的  $e_u$  和  $t_{1u}$  未占据轨道。由于Co-Co杂化后形成的反键态  $e_u$  和  $t_{1u}$  轨道与Cr的3d轨道不在同一表象,因此Co-Co杂化形成的反键态  $e_u$  和  $t_{1u}$  不参与进一步的杂化而得以保留。所以, $\text{Co}_2\text{CrAl}$  中Co原子之间的d电子轨道杂化决定了真正的带隙,带隙大小即为Co-Co杂化后形成的反键态  $e_u$  和  $t_{1u}$  之间的能量差<sup>[8]</sup>。

合金中掺杂Cr元素后,能隙来源发生变化,随着x的增大,能隙左边缘一直由Co原子的d轨道决定,并被其他过渡元素V、Cr的d轨道能隙包围;右边缘在  $x > 0.75$  时,由Co原子的d轨道决定, $x < 0.75$  时,由V原子的d轨道决定。

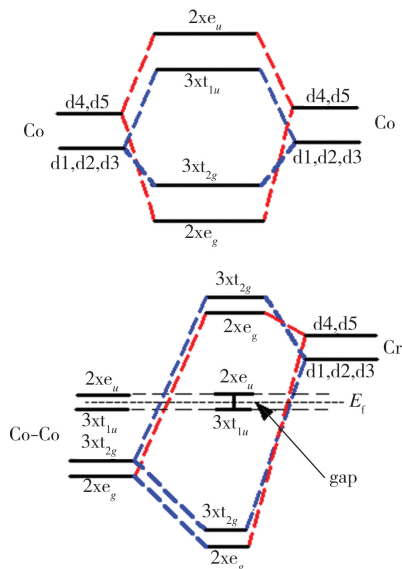


图5  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  的d电子轨道杂化示意图

Fig. 5 Schematic diagram of hybridization of d-electron in  $\text{Co}_2\text{CrAl}$

由图3可知,当  $x=0.5, 1$  时,费米面在靠近带隙中央的位置,能隙宽度接近,半金属带隙宽度(少数自旋态最高价带或最低导带的电子反转到多数自旋态费米能级所需的最小能量值)一致,半金属稳定性大致相同,故计算原子无序对两种合金半金属性的影响,结果见图6。由图6可知,当受到轻微原子无序时,四元合金  $\text{Co}_2\text{V}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Al}$  的费米面在带隙边缘但仍具有半金属性,而三元合金  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  的自旋向下带在费米面处出现部

分态密度,半金属性遭到破坏。由此可知,通过掺杂可增强合金的抗原子无序能力,提高合金的应用性,且在所有成分中, $\text{Co}_2\text{V}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Al}$ 的半金属稳定性最佳。

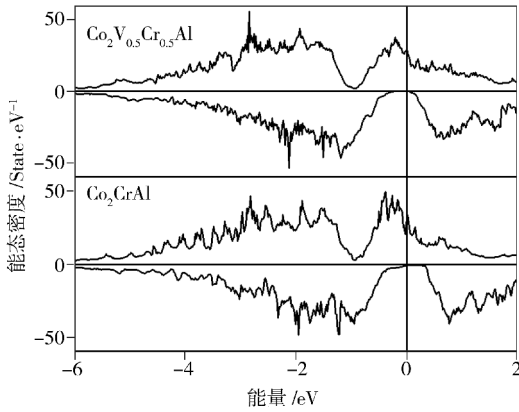


图6  $\text{Co}_2\text{V}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Al}$  和  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  受到轻微原子无序时的态密度图

Fig. 6 Total densities of states in  $\text{Co}_2\text{V}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Al}$  and  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  with a slight atomic disorder

### 2.3 四方变形

根据以上结果可知, $\text{Co}_2\text{V}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Al}$ 合金具有较大的带宽,费米面在能隙中间,且抗热扰动和抗结构缺陷能力强,是理想的自旋注入材料,因此本文主要研究四方变形  $c/a$  对该合金半金属性的影响,其在不同  $c/a$  下的总态密度如图7所示。由图7可见,当  $c/a=0.9$  时,导带顶在费米能级左侧,费米面并未落在能隙中间位置,合金的半金属性被破坏,但由于自旋向下态在费米面处的态密度相对自旋向上态小,使得其自旋极化率仍较高;而当  $c/a=0.95, 1, 1.05$  时,费米面在能隙中部,合金仍保持半金属性;当  $c/a=1.1$  时,导带底在费米能级左侧,合金半金属性被破坏,自旋极化率相对较高。

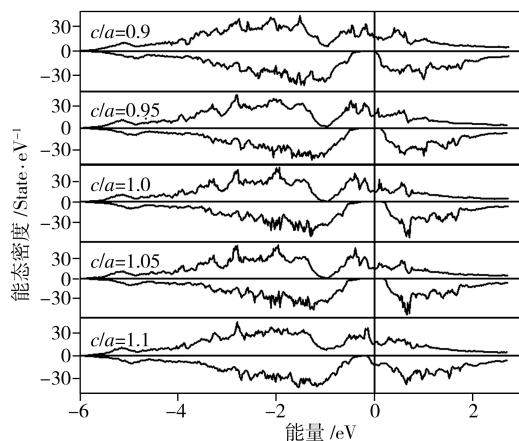


图7  $\text{Co}_2\text{V}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Al}$  在不同  $c/a$  下的总态密度

Fig. 7 Total densities of states of  $\text{Co}_2\text{V}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Al}$  at different  $c/a$  values

为进一步了解轴向应力对  $\text{Co}_2\text{V}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Al}$  合

金半金属性的影响,计算自旋向下态的  $E_{\text{vb}}$ 、 $E_{\text{cb}}$ 、 $E_{\text{g}}$  随  $c/a$  的变化,结果如图8所示,其中  $E_{\text{g}}$  为能隙宽度,  $E_{\text{vb}}$  为价带顶至费米能级的差值,  $E_{\text{cb}}$  为导带底至费米能级的差值。由图8可知,当  $c/a$  在  $0.92 \sim 1.07$  范围内,合金仍具有半金属性,且  $E_{\text{cb}}$  变化较大而  $E_{\text{vb}}$  变化较小;当  $c/a < 1$  时,随着  $c/a$  的增大,  $E_{\text{cb}}$  增加,  $E_{\text{vb}}$  减小,因此能隙宽度  $E_{\text{g}}$  增幅较大;当  $c/a > 1$  时,随着  $c/a$  的增大,  $E_{\text{vb}}$  缓慢增大,而  $E_{\text{cb}}$  急剧下降,因而能隙宽度有所下降。

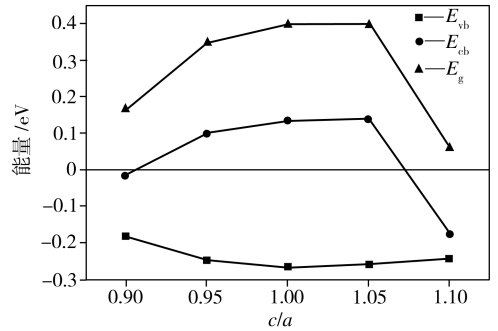


图8  $E_{\text{g}}$ 、 $E_{\text{vb}}$  和  $E_{\text{cb}}$  随  $c/a$  的变化

Fig. 8 Variation of  $E_{\text{g}}$ ,  $E_{\text{vb}}$  and  $E_{\text{cb}}$  with  $c/a$

### 3 结语

本文基于密度泛函理论的第一性原理,对  $\text{Co}_2\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Al}$  ( $x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ ) 系列合金的电子结构、磁性、能隙起源及半金属性等进行了系统的研究。随着 Cr 掺杂浓度的增加,合金的总磁矩增大,平衡晶格常数减小,费米面从导带底向价带顶移动,能隙宽度增加。当 Cr 掺杂浓度  $x$  为  $0.5, 0.75, 1$  时,合金具有半金属性,其中,  $\text{Co}_2\text{V}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Al}$  合金由于具有相对大的半金属带隙,且在轻微原子无序及较大的四方变形  $c/a$  下仍保持稳定的半金属性,因此,其预期能成为可实现高自旋极化率的自旋电子材料。

### 参考文献

- [1] de Groot R A, Mueller F M, van Engen P G, et al. New class of materials: half-metallic ferromagnets [J]. Physical Review Letters, 1983, 50(25): 2024-2027.
- [2] 任尚坤,张凤鸣,都有为. 半金属磁性材料[J]. 物理学进展, 2004, 24(4): 381-397.
- [3] Trudel S, Gaier O, Hamrle J, et al. Magnetic anisotropy, exchange and damping in cobalt-based full-Heusler compounds: an experimental review [J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 2010, 43(19): 193001.
- [4] Chadov S, Graf T, Chadova K, et al. Efficient spin injector scheme based on Heusler materials [J]. Physical Review Letters, 2011, 107(4): 047202.

- [5] Galanakis I, Özdoğan K, Şaşoğlu E. Role of defects and disorder in the half-metallic full-Heusler compounds[M]//Aktas B, Mikailov F. Advances in Nanoscale Magnetism. Springer Berlin Heidelberg, 2009: 1-19.
- [6] Li Q F, Zhao H F, Wang L. An ab initio study of Co-Cr(V) disorder effects on the electronic structure and magnetic properties of  $\text{Co}_2\text{Cr}_{1-x}\text{V}_x\text{Al}$  alloys [J]. Solid State Communications, 2010, 150(1-2): 109-113.
- [7] Nehra J, Lakshmi N, Venugopalan K. Effect of substitution of Co with Fe on the structural, electronic and magnetic properties of Heusler alloy  $\text{Co}_2\text{CrAl}$ [J]. Physica B: Condensed Matter, 2015, 459: 46-51.
- [8] Boochani A, Khosravi H, Khodadadi J, et al. Calculation of half-metal, Debye and Curie temperatures of  $\text{Co}_2\text{VAl}$  compound: first principles study [J]. Communications in Theoretical Physics, 2015, 63(5): 641-647
- [9] Rai D P, Sandeep, Shankar A, et al. Ground state calculation of the electronic structure and magnetic properties of  $\text{Co}_2\text{VAl}$ : a local spin density approximation with exchange correlation potential study [J]. Physica Scripta, 2012, 86(4): 045702.
- [10] Ivanov V A, Aminov T G, Novotortsev V M, et al. Spintronics and spintronics materials[J]. Russian Chemical Bulletin, 2004, 53(11): 2357-2405.
- [11] Hirohata A, Kikuchi M, Tezuka N, et al. Heusler alloy/semiconductor hybrid structures[J]. Current Opinion in Solid State and Materials Science, 2006, 10(2): 93-107.
- [12] Matsuda K, Kasahara T, Marukame T, et al. Epitaxial growth of  $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{Al}$  Heusler alloy thin films on  $\text{MgO}(001)$  substrates by magnetron sputtering[J]. Journal of Crystal Growth, 2006, 286(2): 389-393.
- [13] Conca A, Jourdan M, Herbolt C, et al. Epitaxy of thin films of the Heusler compound  $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{Al}$  [J]. Journal of Crystal Growth, 2007, 299(2): 299-302.
- [14] Huang T, Cheng X M, Guan X W, et al. Effect of the chalcogenide element doping on the electronic properties of  $\text{Co}_2\text{FeAl}$  Heusler alloys[J]. Journal of Electronic Materials, 2016, 45(2): 1028-1034.
- [15] 赵晶晶, 祁欣, 刘恩克, 等.  $\text{Co}_{50}\text{Fe}_{25-x}\text{Mn}_x\text{Si}_{25}$  系列合金的结构、磁性和半金属性研究[J]. 物理学报, 2011, 60(4): 047108.

## Electronic structure, magnetic properties and half metallicity of quaternary Heusler alloys $\text{Co}_2\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Al}$

*Dai Chenpan, Lu Zhihong, Liu Jing, Fang Sun, Cheng Zhaoyang*

(State Key Laboratory of Refractory Materials and Metallurgy, Wuhan University of Science and Technology, Wuhan 430081, China)

**Abstract:** The electronic structure, magnetism, half metallicity and tetragonal distortion of  $L2_1$  type Heusler alloy  $\text{Co}_2\text{V}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Al}$  ( $x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ ) were investigated using first principle method. The results show that total magnetic moments of the alloy, which are mainly contributed by the d electrons of Co atom, increase linearly with the increase of Cr doping concentration, whereas the lattice constants decrease linearly, according with the Slater-Pauling rule and Vegard's law, respectively. Moreover, with the increase of  $x$ , the Fermi level moves from the bottom of conduction band to near the top of valence band and the width of energy gap also increases. The Heusler alloy exhibits half-metallicity even when  $x$  goes down to 0.5. Since the Fermi level lies in the middle of spin-down energy gap,  $\text{Co}_2\text{V}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Al}$  alloy can withstand slight atomic disorder and exhibits an excellent half-metallic stability. Besides, in the research of its tetragonal distortion,  $\text{Co}_2\text{V}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Al}$  alloy still presents a perfect half-metallicity as the tetragonality  $c/a$  varies from 0.92 to 1.07.

**Key words:** Heusler alloy; Cr doping; magnetism; half-metallicity; Fermi level; density of state; tetragonal distortion

[责任编辑 董贞]