

CoOsCrSi相变、磁性及半金属性质的第一性原理计算

吴 浩

兰州交通大学数理学院, 甘肃 兰州

收稿日期: 2025年5月6日; 录用日期: 2025年6月10日; 发布日期: 2025年6月19日

摘要

铁磁形状记忆合金可在磁场驱动下变形, 具有多种物理特性, 在许多技术领域都有应用前景。在此, 我们报道了新型四元Heusler合金CoOsCrSi的相变特性与半金属行为。结果表明, CoOsCrSi合金在立方相下表现出显著的半金属特性。并且该体系具有较大的能量差值以及显著的四方畸变1.27, 预示着马氏体相变的可能性。CoOsCrSi的居里温度分别达到808.83 K, 远超过室温, 表明其有望成为性能优异的新型功能材料。本文为拓展了Heusler合金体系的功能特性, 以及开发兼具多重物性的新型功能材料提供了理论设计依据。

关键词

半金属, 磁性, 居里温度, 结构相变

First-Principles Calculations on the Phase Transitions, Magnetism and Half-Metallic Properties of CoOsCrSi

Hao Wu

School of Mathematics and Sciences, Lanzhou Jiaotong University, Lanzhou Gansu

Received: May 6th, 2025; accepted: Jun. 10th, 2025; published: Jun. 19th, 2025

Abstract

Ferromagnetic shape memory alloys can deform under the drive of a magnetic field and possess multiple physical properties, showing application prospects in many technological fields. Herein,

we report the phase transition characteristics and half-metallic behavior of the novel quaternary Heusler alloy CoOsCrSi. The results show that the CoOsCrSi alloy exhibits remarkable half-metallic properties in the cubic phase. Moreover, this system has a large energy difference and a significant tetragonal distortion of 1.27, indicating the possibility of a martensitic phase transition. The Curie temperature of CoOsCrSi reaches 808.83 K respectively, which is far higher than room temperature, suggesting that it is expected to become a new functional material with excellent performance. This paper provides a theoretical design basis for expanding the functional characteristics of the Heusler alloy system and developing new functional materials with multiple physical properties.

Keywords

Half-Metal, Magnetism, Curie Temperature, Structural Phase Transition

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

哈斯勒合金作为一类具有立方结构的金属间功能材料，因其独特的原子占位特征和多样化的物理性质，如铁磁性、半金属性及形状记忆效应等，在自旋电子器件领域展现出重要应用潜力。传统哈斯勒合金体系包括原子比为 1:1:1 的半哈斯勒型 XYZ 和 2:1:1 的全哈斯勒型 X_2YZ [1]。而通过引入第四种元素显著拓展了材料设计维度，以 LiMgPdSn 为结构原型，这类四元合金通过不同过渡金属元素的精确占位调控，不仅降低了原子无序度引起的能量损耗，更在能带和磁性能优化方面展现出独特的优势。近年来，理论计算与实验研究共同推动了四元哈斯勒合金的发展[2]。以 CoFeMnZ ($Z = Si, As, Sb$) 和 ZrFeVZ ($Z = Al, Ga, In$) 为代表的体系在费米能级处表现出 100% 自旋极化率的半金属特性，其带隙宽度随 4d 和 5d 过渡金属的引入显著增加，有效提升了半金属态的稳定性[3] [4]。实验方面，Bainsla 团队采用电弧熔炼法制备的 CoFeMnGe 合金在室温下展现出与 Slater-Pauling 规则相符的磁化强度值，验证了理论预测的可靠性[5]。然而，现有研究多聚焦于单一性能优化，对兼具高居里温度、大磁矩、马氏体相变等多功能特性的四元体系探索仍存在不足。

本文中，我们利用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法，对四元哈斯勒合金 CoOsCrSi 的结构、半金属性质、磁性和相变进行研究。首先对 CoOsCrSi 的不同原子占位和磁性进行了计算。在此基础上对 CoOsCrSi 的居里温度进行了计算，通过计算四方变形过程中的能量变化，得到了这些材料是否具有马氏体相变。最后通过计算能带结构和态密度，明确了磁矩的主要来源和半金属特性。

2. 计算方法

本文使用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法，采用 Vienna ab-initio Simulation Package (VASP) 软件对 CoOsCrSi 四元哈斯勒合金的结构稳定性、结构相变、磁性及电子性质进行系统性计算[6]。理论计算中，交换关联泛函选用 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 修正的广义梯度近似(GGA)，离子实与价电子相互作用通过投影缀加平面波(PAW)赝势描述[7] [8]。各元素的价电子构型分别为 $3d^74s^2$ 、 $5d^66s^2$ 、 $3d^54s^1$ 、 $3s^23p^2$ ，充分考虑了过渡金属 d 轨道及主族元素 p 轨道的电子关联效应。截断能和 k 点收敛测试的结果如图 1 所示。在能量变化小于 0.001 eV/atom 变化区间中，平面波截断能设置为 800 eV。布里渊区积分采用 Monkhorst-Pack 方案生成 $11 \times 11 \times 11$ 的 k 点网格[9]。结构优化过程中，体系能量收敛标准为 1×10^{-8}

eV, 原子受力收敛标准为 0.01 eV/Å, 保障几何弛豫的数值精度。

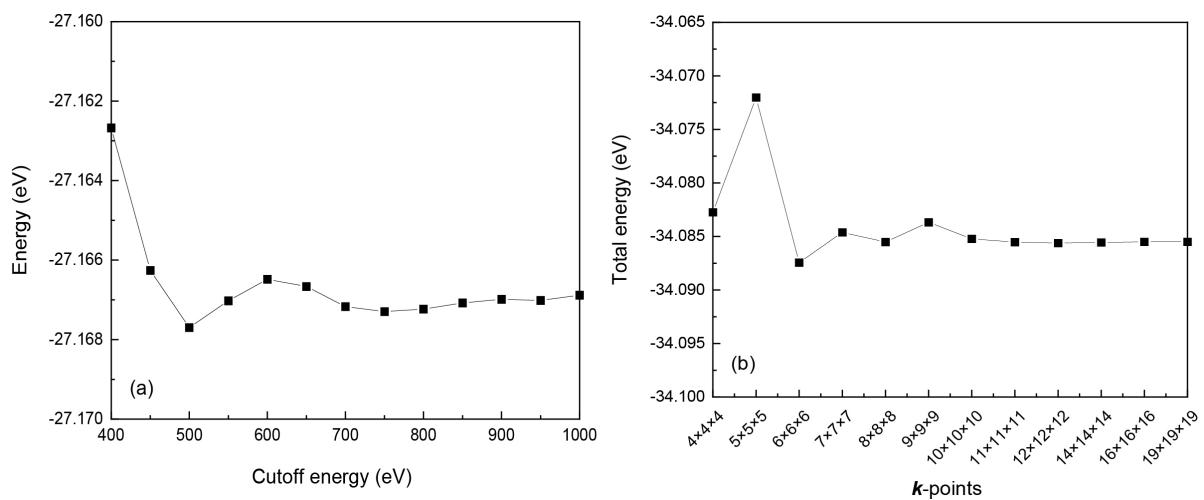


Figure 1. The cut-off energy and k -point convergence tests for CoOsCrSi respectively
图 1. CoOsCrSi 的截断能和 k 点收敛性测试

针对立方结构的力学稳定性分析, 通过应力 - 应变法计算弹性张量, 应变幅度控制在 0.005 范围内。基于立方晶系对称性, 21 个独立弹性常数简化为 C_{11} 、 C_{12} 和 C_{44} 三个主分量, 其力学稳定性判据由 Born 准则判定[10]:

$$\begin{aligned} C_{11} &> 0, \quad C_{44} > 0, \quad C_{11} - C_{12} > 0, \\ C_{11} + 2C_{12} &> 0, \quad C_{12} < B < C_{11} \end{aligned} \quad (1)$$

四元哈斯勒合金的生成焓为[11]:

$$\Delta H(XX'YZ) = H(XX'YZ) - H(X) - H(X') - H(Y) - H(Z) \quad (2)$$

ΔH 和 H 分别为形成焓和固体单体焓。热力学稳定性可以通过生成焓是否为负值来判断。

3. 结果和讨论

3.1. CoOsCrSi 的结构

图 2 为 CoOsCrSi 的立方相和四方相的晶体结构, 哈斯勒合金 CoOsCrSi 存在三种不同的原子占位形式, 结果见表 1。为明确其能量最低的原子占位状态, 对 CoOsCrSi 的总能量与体积关系进行计算, 结果见图 3 所示, 发现 CoOsCrSi 的 type II 型原子占位的能量最低, 表明其在基态下呈现 type II 型原子排列。

Table 1. Three different atomic site occupations in the Heusler alloy CoOsCrSi

表 1. 哈斯勒合金 CoOsCrSi 的三种不同原子占位

相	4a (0, 0, 0)	4b (0.25, 0.25, 0.25)	4c (0.5, 0.5, 0.5)	4d (0.75, 0.75, 0.75)
type I 型	Co	Os	Cr	Si
type II 型	Co	Cr	Os	Si
type III 型	Os	Co	Cr	Si

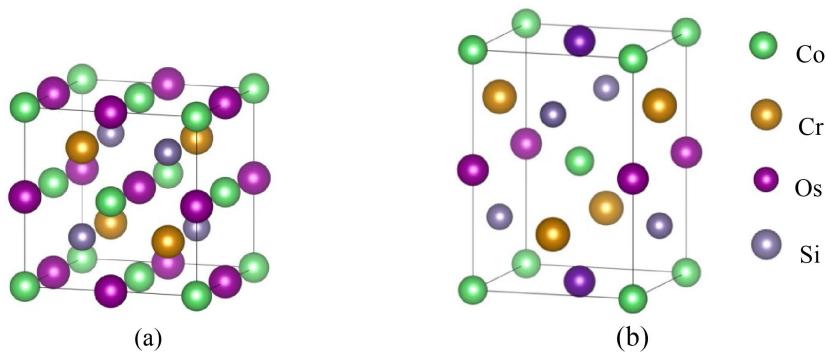


Figure 2. The cubic phase and tetragonal phase structures of CoOsCrSi respectively
图 2. CoOsCrSi 的立方相和四方相结构

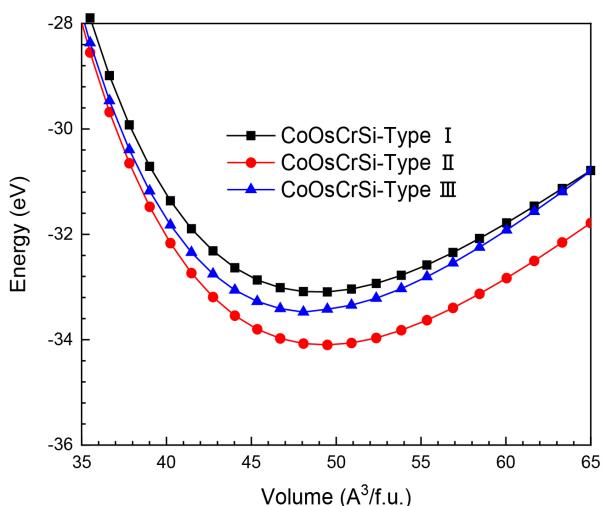


Figure 3. The energy-volume curves of CoOsCrSi with three different atomic site occupation types
图 3. CoOsCrSi 三种不同原子占位类型的 E-V 曲线

进一步探究磁性基态特征，对 CoOsCrSi 的铁磁(FM)、顺磁(PM)和反铁磁(AFM)相总能量进行计算，结果见图 4 所示。数据显示，type II 型结构的铁磁相能量显著低于其他磁性相，证实 CoOsCrSi 的磁性基态为铁磁性相。

对力学性质的计算结果见表 2 所示，计算得到的弹性常数满足立方相的 Born 准则。此外，我们还将哈斯勒合金 CoOsCrSi 与结构与之相似的 CoFeMnSi 的力学性质进行了对比，对比结果详见表 3。发现哈斯勒合金 CoOsCrSi 的剪切模量(G)以及杨氏模量(E)的数值相较于 CoFeMnSi 较低，而其普氏比(B/G)和泊松比(ν)的数值则相对更大[12]。从原子组成方面进行分析，由于 CoOsCrSi 中的 Os 与 Cr 原子和 CoFeMnSi 中的 Fe 与 Mn 原子相比较，二者之间的半径差异更大，使原子间的间距更大，导致键合力减弱。导致哈斯勒合金 CoOsCrSi 的剪切模量(G)以及杨氏模量(E)较低。除此之外，CoFeMnSi 的元素电负性差异相对较小，原子位置更容易移动，因此其体积模量(B)相比于 CoOsCrSi 较小。在电子结构层面进行分析，CoOsCrSi 的价电子数相较于 CoFeMnSi 要更低，并且元素的电负性差异大，CoOsCrSi 具有更强的离子键特性。使得 CoOsCrSi 的普氏比(B/G)和泊松比(ν)相对更大。CoOsCrSi 具有较大的四方畸变，具有良好的形状记忆效应，在形状记忆合金应用领域前景广阔。除此之外，对 CoOsCrSi 的生成焓的计算结果均小于零，结果表明，CoOsCrSi 在实验上可以合成。

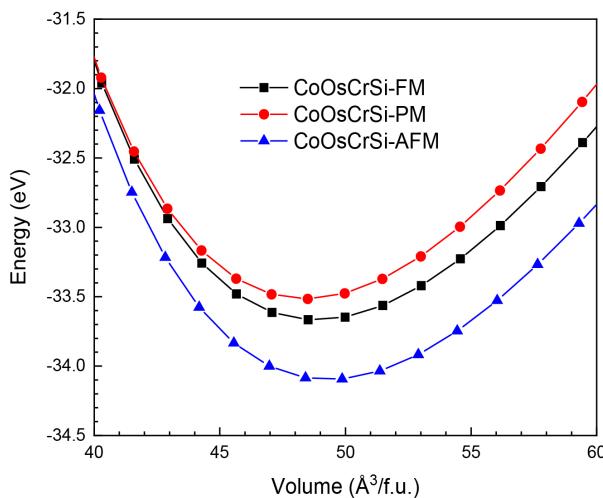


Figure 4. The E - V curves of CoOsCrSi under different magnetic states

图 4. CoOsCrSi 不同磁性下的 E - V 曲线

Table 2. The elastic constants (C_{ij}), lattice constant (a) and formation enthalpy (ΔH) of CoOsCrSi
表 2. CoOsCrSi 的弹性常数(C_{ij})、晶格常数(a)和生成焓(ΔH)

化合物	C_{11}	C_{12}	C_{44}	a	ΔH
CoOsCrSi	316.97	251.02	137.61	5.78	-6.53

Table 3. The bulk modulus (B), shear modulus (G), Young's modulus (E), Pugh's ratio (B/G) and Poisson's ratio (ν) of CoOsCrSi and CoFeMnSi

表 3. CoOsCrSi 和 CoFeMnSi 的体积模量(B)、剪切模量(G)、杨氏模量(E)、普氏比(B/G)和泊松比(ν)

化合物	B	G	E	B/G	ν
CoOsCrSi	273.0	78.2	214.1	3.49	0.37
CoFeMnSi	236.7	114.8	296.5	2.06	0.29

此外，居里温度(T_C)可通过平均场近似计算[13]:

$$2\Delta E/3x = K_B T_C \quad (3)$$

在这个方程中， ΔE 是反铁磁相和铁磁相之间的能量差， K_B 是玻耳兹曼常数。利用平均场近似，得到 CoOsCrSi 的居里温度分别为 808.83 K。

3.2. CoOsCrGe 的结构相变

发生马氏体相变，必须满足两个条件：首先，马氏体相与奥氏体相之间必须存在能量差 ΔE_M ；其次，必须存在显著的四方畸变 c/a [14]。本文通过贝恩路径对 CoOsCrSi 的四方变形进行了研究，计算了 CoOsCrSi 在四方变形过程中发生的能量变化。结果见图 5。当 $c/a = 1$ 时，合金处于奥氏体相， $\Delta E = 0$ 。在四方变形过程中，CoOsCrSi 在 $c/a = 1$ 时出现局部能量最小值。随着 c/a 的增加，CoOsCrSi 的能量在 $c/a = 1.27$ 时达到最小值，这表明 CoOsCrSi 哈斯勒合金的马氏体相倾向于形成四方结构。

图 6 显示了 CoOsCrSi 哈斯勒合金四方畸变后的态密度分布的变化。相比于图 8 CoOsCrSi 立方相的态密度图。经过四方畸变后态密度的自旋上升和自旋下降态密度分布的对称性增强。这是由于过渡金属

原子之间的 d 电子杂化降低了峰值之间的能差、平滑了局部峰值变化。此外，四方相密度图中费米能级附近的尖峰现象也有所减少。这是因为四方畸变削弱了过渡金属原子中 d 电子的局部性，表明合金四方结构中的态密度分布更加分散。这种分散会降低费米能级上的态密度，从而提高晶体的稳定性，从而产生了 Jahn-Teller 效应。

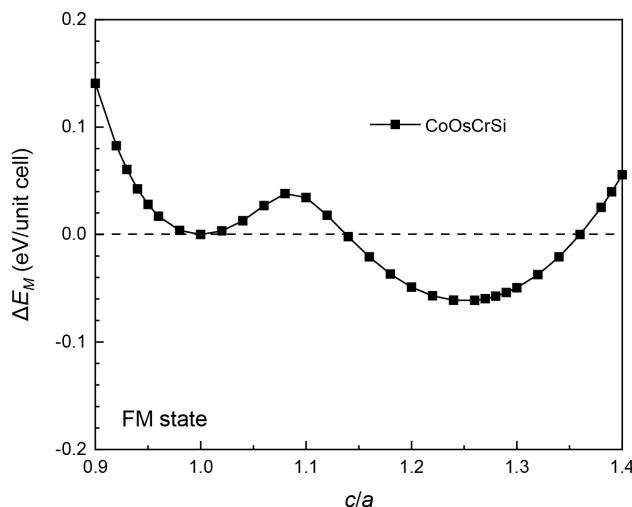


Figure 5. The variation of the tetragonal phase energy of CoOsCrSi with the tetragonal distortion

图 5. CoOsCrSi 的四方相能量随四方畸变的变化

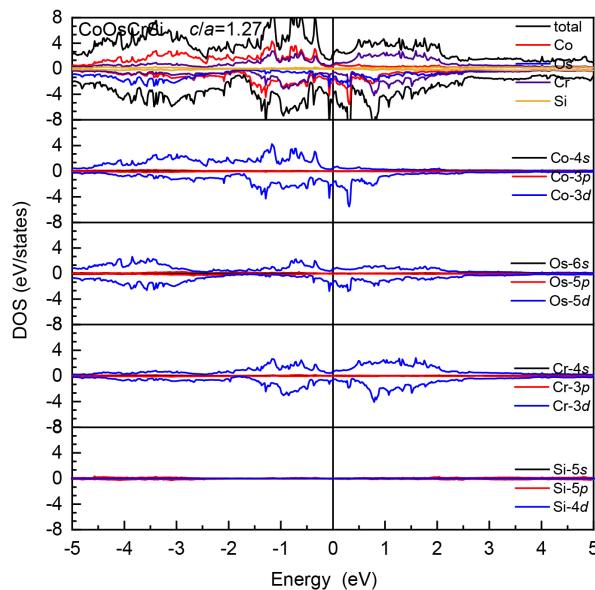


Figure 6. The total density of states and the partial density of states of the tetragonal phase of CoOsCrSi

图 6. CoOsCrSi 的四方相的总态密度与分波态密度

3.3. CoOsCrSi 的半金属性

具有半金属特性的哈斯勒合金其磁矩为整数，因此通过计算 CoOsCrSi 磁矩来进行分析，其磁矩大小

为 $3 \mu_B$, 符合 Slater-Pauling, 即 $M_t = Z_t - 24$ [15]。这一结果证实了哈斯勒合金 CoOsCrSi 具有半金属特性。为进一步探究 CoOsCrSi 的半金属特性。计算了 CoOsCrSi 的能带和态密度, 结果如图 7 所示。CoOsCrSi 的自旋向上能带与费米能级相交, 从而产生了非零的态密度状态。相反, 自旋向下能带和电子态密度在费米能级表现出明显的带隙。

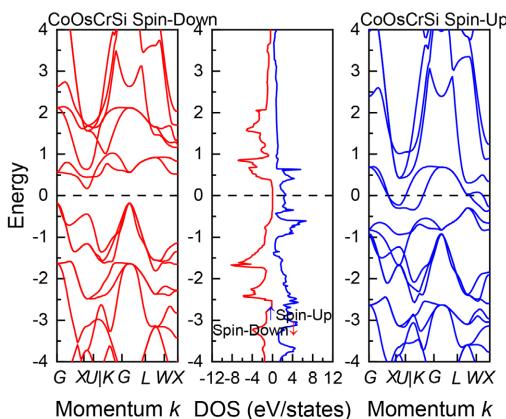


Figure 7. The band structure and total density of states of CoOsCrSi

图 7. CoOsCrSi 的能带和总态密度

半金属具有 100% 的自旋极化, 这可以通过计算费米能级附近的自旋极化率来判断[16]:

$$S_p = \frac{DOS(E_F \uparrow) - DOS(E_F \downarrow)}{DOS(E_F \uparrow) + DOS(E_F \downarrow)} \quad (4)$$

S_p 表示自旋极化率, $DOS(E_F \uparrow)$ 表示自旋上升电子的状态密度, $DOS(E_F \downarrow)$ 表示自旋下降电子的状态密度。CoOsCrSi 的自旋极化率为 100%, 表现出完全的自旋极化行为, 在自旋向上能带观察到金属特性, 而在自旋向下能带则观察到绝缘体或半导体特性, 在该区域的状态密度为零。公式(4)证实了所有哈斯勒合金的自旋极化率均为 100%, 这支持了所有四种材料在平衡晶格常数下均表现出半金属特性的观点。为进一步分析磁矩的来源, 对 CoOsCrSi 的原子轨道磁矩进行了计算, 结果如表 4 所示。结果表明 CoOsCrSi 的主要由哈斯勒合金 CoOsCrSi 的 Co 原子的 $4d$ 轨道和 Cr 原子的 $3d$ 轨道提供, 而 Os 原子 $4d$ 轨道和 Si 原子对磁性的贡献很小, 几乎可以忽略不计。此外, 我们针对具有相同结构的 Os 基四元哈斯勒合金 OsTiVIn 与 CoOsCrSi 的磁性展开了对比分析[17]。发现, OsTiVIn 的磁矩为 $2 \mu_B$, 而 CoOsCrSi 的磁矩为 $3 \mu_B$, 二者的磁矩情况均符合 Slater-Pauling 规则, 即 $M_t = Z_t - 24$ 。进一步分析可知, 磁矩的大小与价电子数密切相关, 由于 CoOsCrSi 的价电子数相比于 OsTiVIn 更高, 使得 CoOsCrSi 展现出了更高的磁矩。

Table 4. Atomic orbital magnetic moments (μ_B) of the Heusler alloy CoOsCrSi

表 4. 哈斯勒合金 CoOsCrSi 的原子轨道磁矩(μ_B)

原子	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>
Co	0.000	-0.009	1.128
Os	0.006	-0.015	-0.062
Cr	0.013	0.010	1.902
Ge	0.011	-0.019	0.000

并且我们开展了针对能带结构投影权重的计算工作，深入分析 CoOsCrSi 的电子结构以及成键特性，进而阐释其半金属性的起源与稳定性。计算所得结果见图 9，该图清晰地展示了哈斯勒合金 CoOsCrSi 能带的具体贡献，在自旋向上能带中导带底和价带顶都主要由 Cr 原子的 d 轨道贡献。在自旋向下能带中的导带底主要由 Cr 原子的 d 轨道贡献，而价带顶主要由 Co 原子的 d 轨道进行贡献。Os 原子对能带的贡献相对很小，而 Si 原子的 d 轨道的贡献情况可以忽略不计。将这一结果与图 8 所展示的 CoOsCrSi 的总态密度和分波态密度进行对比，发现两者结果吻合。哈斯勒合金涉及不同轨道中具有相似能级的电子轨道之间的轨道杂化。系统的宏观特性受到费米级附近的态密度结构的显著影响。因此，CoOsCrSi 的性质主要受过渡金属原子 d 轨道电子相互作用的影响。

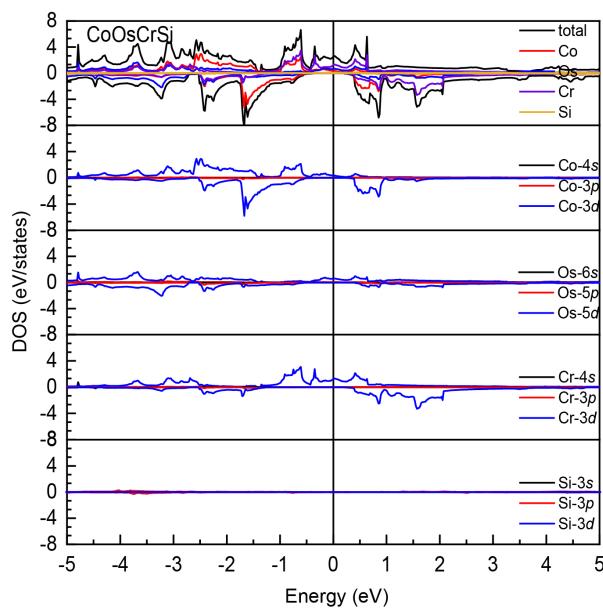


Figure 8. The total density of states and partial density of states of the cubic phase of CoOsCrSi

图 8. CoOsCrSi 立方相的总态密度和分波态密度

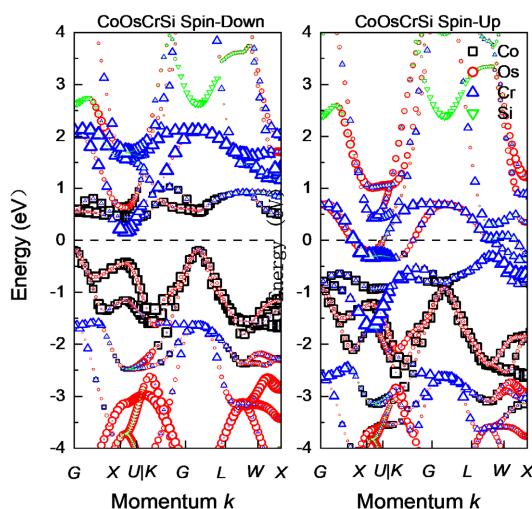


Figure 9. The projected band structure of CoOsCrSi

图 9. CoOsCrSi 的投影能带

除此之外，在(110)平面上对 CoFeMnSi 的电子自旋密度分布和电荷密度差分布进行了计算，来进一步分析 CoOsCrSi 的电子结构的特点。结果见图 10。电子自旋密度定义为两个自旋方向之间的电子密度差，颜色越亮表示差越大。发现 Cr 原子和 Cr 原子周围红色区域很大，表明它们具有强磁性，Os 周围的区域颜色不太亮，表明它们具有弱磁性。而 Si 原子的色差与背景无法区分，导致磁性非常弱。这些结果与表 3 中计算的原子磁矩结果吻合。在图 10(b)即电荷密度差分布图中，蓝色表示电子不足，红色表示电子过剩。电子的积累主要集中在 Co 和 Os 原子之间的对角线方向，反映了典型的共价键特征。并且一个球形的蓝色区域围绕着 Si 原子，这表明 Si 原子的价电子在哈斯勒合金 CoOsCrSi 中形成了金属键。

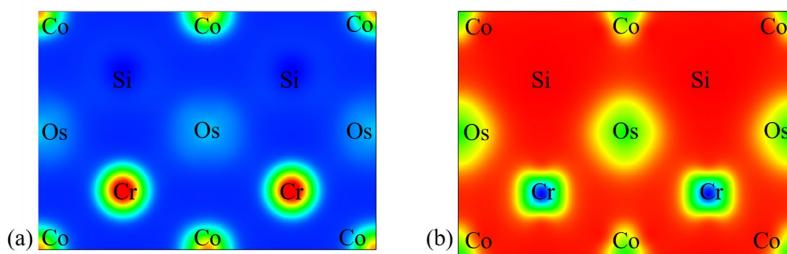


Figure 10. The total density of states and partial density of states of the cubic phase of CoOsCrSi
图 10. CoOsCrSi 立方相的总态密度和分波态密度

4. 结论

本文用第一性原理方法对 CoOsCrSi 的结构稳定性、相变、磁性及电子性质进行了研究。CoOsCrSi 在三种类型的总能量和体积的关系中 type II 型能量最低，在铁磁性状态下的平衡能最低，CoOsCrSi 在 type II 和铁磁性相中是最稳定的。通过平均场近似计算，CoOsCrSi 的居里温度为 808.83 K。CoOsCrSi 四方马氏体相的能量小于其奥氏体相的能量值，且两相之间磁矩差距较大，表现出该合金具有磁致形状记忆合金的功能。除此之外，CoOsCrSi 具有半金属带隙，在费米能级附近的自旋极化率均达到 100%，均具有整数磁矩，符合 Slater-Pauling 规则 $M_t = Z_t - 24$ ，CoOsCrSi 均具有优异的形状记忆效应和半金属特性，有望拓展 Os 基 Heusler 合金体系的功能特性提供了理论依据。

参考文献

- [1] Galanakis, I., Özdogan, K. and Şaşioğlu, E. (2016) Spin-Filter and Spin-Gapless Semiconductors: The Case of Heusler Compounds. *AIP Advances*, **6**, Article ID: 055606. <https://doi.org/10.1063/1.4943761>
- [2] Shakil, M., Arshad, H., Aziz, S., Gillani, S.S.A., Rizwan, M. and Zafar, M. (2021) Determination of Phase Stability, Half Metallicity, Mechanical and Thermal Behavior of Fe Based Quaternary Heusler Alloys. *Journal of Alloys and Compounds*, **856**, Article ID: 157370. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.157370>
- [3] Elahmar, M.H., Rached, H., Rached, D., Khenata, R., Murtaza, G., Bin Omran, S., et al. (2015) Structural, Mechanical, Electronic and Magnetic Properties of a New Series of Quaternary Heusler Alloys Cofemnz ($Z = \text{Si}, \text{As}, \text{Sb}$): A First-Principle Study. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **393**, 165-174. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2015.05.019>
- [4] Guo, R., Liu, G., Wang, X., Rozale, H., Wang, L., Khenata, R., et al. (2016) First-Principles Study on Quaternary Heusler Compounds ZrFeVz ($Z = \text{Al}, \text{Ga}, \text{In}$) with Large Spin-Flip Gap. *RSC Advances*, **6**, 109394-109400. <https://doi.org/10.1039/c6ra18873g>
- [5] Bainsla, L., Suresh, K.G., Nigam, A.K., Manivel Raja, M., Varaprasad, B.S.D.C.S., Takahashi, Y.K., et al. (2014) High Spin Polarization in Cofemnge Equiatomic Quaternary Heusler Alloy. *Journal of Applied Physics*, **116**, Article ID: 203902. <https://doi.org/10.1063/1.4902831>
- [6] Kresse, G. and Joubert, D. (1999) From Ultrasoft Pseudopotentials to the Projector Augmented-Wave Method. *Physical*

- Review B*, **59**, 1758-1775. <https://doi.org/10.1103/physrevb.59.1758>
- [7] Perdew, J.P., Burke, K. and Ernzerhof, M. (1996) Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, **77**, 3865-3868. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.77.3865>
- [8] Blöchl, P.E. (1994) Projector Augmented-Wave Method. *Physical Review B*, **50**, 17953-17979. <https://doi.org/10.1103/physrevb.50.17953>
- [9] Monkhorst, H.J. and Pack, J.D. (1976) Special Points for Brillouin-Zone Integrations. *Physical Review B*, **13**, 5188-5192. <https://doi.org/10.1103/physrevb.13.5188>
- [10] Rached, H., Rached, D., Khenata, R., Reshak, A.H. and Rabah, M. (2009) First-principles Calculations of Structural, Elastic and Electronic Properties of Ni₂MnZ (Z = Al, Ga and In) Heusler Alloys. *Physica Status Solidi (b)*, **246**, 1580-1586. <https://doi.org/10.1002/pssb.200844400>
- [11] Mohamedi, M.W., Chahed, A., Amar, A., Rozale, H., Lakdja, A., Benhela, O., et al. (2016) *Ab-Initio* Study of Structural, Elastic, Thermal, Electronic and Magnetic Properties of Quaternary Heusler Alloys Comncrz (Z = Al, As, Si, Ge). *The European Physical Journal B*, **89**, Article No. 267. <https://doi.org/10.1140/epjb/e2016-70183-6>
- [12] Tan, X., You, J., Liu, P. and Wang, Y. (2019) Theoretical Study of the Electronic, Magnetic, Mechanical and Thermodynamic Properties of the Spin Gapless Semiconductor CoFeMnSi. *Crystals*, **9**, Article 678. <https://doi.org/10.3390/cryst9120678>
- [13] Gencer, A., Surucu, O., Usanmaz, D., Khenata, R., Candan, A. and Surucu, G. (2021) Equiaatomic Quaternary Heusler Compounds TiVFeZ (Z = Al, Si, Ge): Half-Metallic Ferromagnetic Materials. *Journal of Alloys and Compounds*, **883**, Article ID: 160869. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.160869>
- [14] 陈家华, 刘恩克, 李勇, 祁欣, 刘国栋, 罗鸿志, 王文洪, 吴光恒. Ga₂基Heusler合金Ga₂XCr(X=Mn, Fe, Co, Ni, Cu)的四方畸变、电子结构、磁性及声子谱的第一性原理计算[J]. 物理学报, 2015, 64(7): 318-326.
- [15] Kübler, J. (1984) First Principle Theory of Metallic Magnetism. *Physica B + C*, **127**, 257-263. [https://doi.org/10.1016/s0378-4363\(84\)80039-x](https://doi.org/10.1016/s0378-4363(84)80039-x)
- [16] Yousuf, S. and Gupta, D.C. (2018) Insight into Half-Metallicity, Spin-Polarization and Mechanical Properties of L21 Structured MnY₂Z (Z= Al, Si, Ga, Ge, Sn, Sb) Heusler Alloys. *Journal of Alloys and Compounds*, **735**, 1245-1252. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.11.239>
- [17] Shi, J., Song, T., Qi, P., Wang, X., Liu, Z. and Sun, X. (2023) Structural Stabilities and Half-Metallicity Properties of the OsTiVIn and OsZrVIn Quaternary Heusler Alloys under High Pressure. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **566**, Article ID: 170316. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2022.170316>