

Supplementary Materials

Xiaotian Wang^{a, b}, Zhenxiang Cheng^{b, *}, Hongkuan Yuan^a, R. Khenata^c

^a*School of Physical Science and Technology, Southwest University, Chongqing 400715, PR China*

^b*Institute for Superconducting and Electronic Materials, University of Wollongong, Wollongong 2500, Australia*

^c*Laboratoire de Physique Quantique, de la Matière et de la Modélisation Mathématique (LPQ3M), Université de Mascara, Mascara 29000, Algeria*

Table S1 The calculated energy different ΔE , lattice constant a , total and atomic spin magnetic moments for Titanium-based full-Heusler alloys with $L2_1$ and XA structures, respectively.

Compounds	Structure	ΔE (eV/cell)	a (Å)	Mt (μ_B /f.u.)	M_{Ti1} (μ_B)	M_{Ti2} (μ_B)	M_Y (μ_B)	M_Z (μ_B)	Stable structure
Ti ₂ VAI	XA	0.24	6.34	1.91	-0.84	0.58	2.31	-0.14	L2 ₁
	L2 ₁		6.33	1.31	-0.20	-0.20	1.81	-0.10	
Ti ₂ VGa	XA	0.30	6.30	1.86	-0.75	0.56	2.23	-0.17	L2 ₁
	L2 ₁		6.29	1.06	-0.12	-0.12	1.42	-0.10	
Ti ₂ VIn	XA	0.17	6.56	1.85	-1.14	0.15	2.97	-0.13	L2 ₁
	L2 ₁		6.53	1.25	-0.23	-0.23	1.84	-0.13	
Ti ₂ VSi	XA	0.26	6.18	0.97	-1.04	-0.11	2.19	-0.06	L2 ₁
	L2 ₁		6.17	0	0	0	0	0	
Ti ₂ VGe	XA	0.27	6.25	0.96	-0.15	-0.24	2.41	-0.05	L2 ₁
	L2 ₁		6.23	0	0	0	0	0	
Ti ₂ VSn	XA	0.06	6.54	0.90	-1.47	-0.56	2.98	-0.04	L2 ₁
	L2 ₁		6.48	0	0	0	0	0	
Ti ₂ VP	XA	0.23	6.07	0.05	-1.39	-0.54	1.98	-0.01	L2 ₁
	L2 ₁		6.06	0	0	0	0	0	
Ti ₂ VAs	XA	0.16	6.22	0.02	-1.62	-0.66	2.29	0.02	L2 ₁

	L2 ₁		6.18	0	0	0	0	0	
Ti ₂ VSb	XA	-0.06	6.48	0	-1.88	-0.80	2.67	0.01	XA
	L2 ₁		6.44	0	0	0	0	0	
Ti ₂ CrAl	XA	0.60	6.20	-0.01	0	-0.01	0	0	L2 ₁
	L2 ₁		6.22	0	0	0	0	0	
Ti ₂ CrGa	XA	0.73	6.17	-0.03	-0.01	-0.03	0	0	L2 ₁
	L2 ₁		6.19	0	0	0	0	0	
Ti ₂ CrIn	XA	0.61	6.42	-0.04	-0.01	-0.03	0	0	L2 ₁
	L2 ₁		6.42	0	0	0	0	0	
Ti ₂ CrSi	XA	0.44	6.05	0	0	0	0	0	L2 ₁
	L2 ₁		6.09	0	0	0	0	0	
Ti ₂ CrGe	XA	0.50	6.12	0	0	0	0	0	L2 ₁
	L2 ₁		6.15	0	0	0	0	0	
Ti ₂ CrSn	XA	0.38	6.39	0	0	0	0	0	L2 ₁
	L2 ₁		6.40	0	0.1	0.1	-0.2	0	
Ti ₂ CrP	XA	0.33	5.94	0	0	0	0	0	L2 ₁
	L2 ₁		5.99	0	0	0	0	0	
Ti ₂ CrAs	XA	0.32	6.08	0.03	0.01	-0.01	0.03	0	L2 ₁
	L2 ₁		6.12	0	0	0	0	0	
Ti ₂ CrSb	XA	0.12	6.35	0	0	0	0	0	L2 ₁
	L2 ₁		6.37	0	0	0	0	0	
Ti ₂ MnAl	XA	0.18	6.25	0	-1.78	-1.6	3.33	0.05	L2 ₁
	L2 ₁		6.17	0	0	0	0	0	

Ti ₂ MnGa	XA	0.27	6.22	0	-1.75	-1.66	3.25	0.16	L2 ₁
	L2 ₁		6.15	-0.07	0.12	0.12	-0.30	-0.01	
Ti ₂ MnIn	XA	-0.17	6.48	0	-1.98	-1.90	3.72	0.16	XA
	L2 ₁		6.39	-0.13	0.52	0.52	-1.14	-0.04	
Ti ₂ MnSi	XA	0.11	6.02	1.00	1.41	0.86	-1.22	-0.06	L2 ₁
	L2 ₁		6.06	-0.02	-0.41	-0.41	0.75	0.05	
Ti ₂ MnGe	XA	0.16	6.11	0.99	1.62	1.13	-1.62	-0.13	L2 ₁
	L2 ₁		6.12	0	0	0	0	0	
Ti ₂ MnSn	XA	0.07	6.35	0.99	1.40	0.78	-1.08	-0.10	L2 ₁
	L2 ₁		6.37	0.48	-0.98	-0.98	2.28	0.17	
Ti ₂ MnP	XA	0.11	5.92	1.55	1.24	0.46	-0.07	-0.07	L2 ₁
	L2 ₁		5.98	0	0	0	0	0	
Ti ₂ MnAs	XA	0.09	6.06	1.83	1.50	0.60	-0.18	-0.09	L2 ₁
	L2 ₁		6.12	0	0	0	0	0	
Ti ₂ MnSb	XA	-0.34	6.33	1.96	1.78	0.80	-0.49	-0.13	XA
	L2 ₁		6.37	-0.12	1.53	-1.53	2.66	0.28	
Ti ₂ FeAl	XA	0.06	6.11	1.00	1.36	0.89	-1.16	-0.09	L2 ₁
	L2 ₁		6.16	0.56	-0.39	-0.39	1.29	0.06	
Ti ₂ FeGa	XA	0.27	6.08	1.00	1.34	0.98	-1.16	-0.15	L2 ₁
	L2 ₁		6.15	0.80	-0.49	-0.49	1.65	0.15	
Ti ₂ FeIn	XA	0.05	6.37	1.00	1.70	1.50	-2.00	-0.19	L2 ₁
	L2 ₁		6.41	0.93	-0.73	-0.73	2.22	0.17	
Ti ₂ FeSi	XA	0.05	5.98	2.00	1.62	0.76	-0.29	-0.10	L2 ₁

	L2 ₁		6.08	1.52	-0.29	-0.29	1.97	0.14	
Ti ₂ FeGe	XA	0.23	6.10	2.00	1.70	0.90	-0.44	-0.16	L2 ₁
	L2 ₁		6.15	1.68	-0.31	-0.31	2.11	0.19	
Ti ₂ FeSn	XA	-0.08	6.31	2.00	1.85	1.05	-0.72	-0.18	XA
	L2 ₁		6.37	0.01	0.01	0.01	0	0	
Ti ₂ FeP	XA	0.18	5.89	2.63	1.66	0.50	0.55	-0.08	L2 ₁
	L2 ₁		5.96	0	0	0	0	0	
Ti ₂ FeAs	XA	0.14	6.04	2.86	1.80	0.54	0.64	-0.11	L2 ₁
	L2 ₁		6.10	0	0	0	0	0	
Ti ₂ FeSb	XA	-0.43	6.30	2.96	1.93	0.53	0.65	-0.14	XA
	L2 ₁		6.35	0.163	0.09	0.09	0	-0.01	
Ti ₂ CoAl	XA	-0.004	6.13	2.00	1.68	0.89	-0.42	-0.15	XA
	L2 ₁		6.20	1.91	0.26	0.26	1.33	0.07	
Ti ₂ CoGa	XA	0.14	6.12	2.00	1.62	1.00	-0.42	-0.20	L2 ₁
	L2 ₁		6.15	0	0	0	0	0	
Ti ₂ CoIn	XA	-0.20	6.36	2.00	1.70	1.13	-0.62	-0.21	XA
	L2 ₁		6.39	0	0	0	0	0	
Ti ₂ CoSi	XA	0.15	6.02	3.00	1.98	0.94	0.20	-0.12	L2 ₁
	L2 ₁		6.09	2.40	0.54	0.54	1.27	0.06	
Ti ₂ CoGe	XA	0.28	6.10	3.00	1.98	0.99	0.22	-0.18	L2 ₁
	L2 ₁		6.15	2.27	0.49	0.49	1.23	0.06	
Ti ₂ CoSn	XA	-0.28	6.36	3.00	2.02	1.01	0.18	-0.21	XA
	L2 ₁		6.40	0	0	0	0	0	

Ti ₂ CoP	XA	0.80	5.94	2.20	1.34	0.59	0.36	-0.09	L2 ₁
	L2 ₁		6.01	1.57	0.35	0.35	0.84	0.02	
Ti ₂ CoAs	XA	0.74	6.09	2.36	1.44	0.62	0.42	-0.11	L2 ₁
	L2 ₁		6.14	1.88	0.47	0.47	0.92	0.02	
Ti ₂ CoSb	XA	0.16	6.35	3.02	1.66	0.79	0.71	-0.14	L2 ₁
	L2 ₁		6.39	2.29	0.60	0.60	1.11	-0.01	
Ti ₂ NiAl	XA	-0.02	6.20	3.00	2.04	1.26	-0.11	-0.19	XA
	L2 ₁		6.23	1.46	0.61	0.61	0.27	-0.02	
Ti ₂ NiGa	XA	0.33	6.17	3.00	1.97	1.36	-0.06	-0.26	L2 ₁
	L2 ₁		6.19	1.18	0.46	0.46	0.28	-0.02	
Ti ₂ NiIn	XA	-0.09	6.42	3.00	1.97	1.40	-0.09	-0.27	XA
	L2 ₁		6.44	1.25	0.52	0.52	0.26	-0.04	
Ti ₂ NiSi	XA	0.69	6.09	3.41	1.92	1.47	0.18	-0.14	L2 ₁
	L2 ₁		6.14	1.26	0.59	0.59	0.14	-0.06	
Ti ₂ NiGe	XA	0.79	6.17	3.55	2.01	1.56	0.21	-0.23	L2 ₁
	L2 ₁		6.17	1.00	0.47	0.47	0.12	-0.06	
Ti ₂ NiSn	XA	0.20	6.43	3.83	2.19	1.68	0.22	-0.26	L2 ₁
	L2 ₁		6.42	0.03	0.01	0.01	0.01	0	
Ti ₂ NiP	XA	1.48	5.99	1.45	0.81	0.78	-0.03	-0.11	L2 ₁
	L2 ₁		6.02	0	0	0	0	0	
Ti ₂ NiAs	XA	1.35	6.15	1.80	1.05	0.93	0.01	-0.18	L2 ₁
	L2 ₁		6.15	0	0	0	0	0	
Ti ₂ NiSb	XA	0.66	6.41	2.54	1.36	1.26	0.11	-0.19	L2 ₁

	L2 ₁		6.40	0.03	0.02	0.02	0	0	
Ti ₂ CuAl	XA	0.49	6.30	3.73	2.24	1.92	-0.22	-0.20	L2 ₁
	L2 ₁		6.28	0.03	0.02	0.01	0	0	
Ti ₂ CuGa	XA	0.87	6.29	3.81	2.22	2.04	-0.16	-0.28	L2 ₁
	L2 ₁		6.24	0	0	0	0	0	
Ti ₂ CuIn	XA	0.34	6.53	3.85	2.26	2.08	-0.18	-0.30	L2 ₁
	L2 ₁		6.48	0	0	0	0	0	
Ti ₂ CuSi	XA	1.34	6.19	3.15	1.70	1.74	-0.12	-0.18	L2 ₁
	L2 ₁		6.15	0.21	0.12	0.12	-0.02	0	
Ti ₂ CuGe	XA	1.37	6.28	3.32	1.84	1.84	-0.10	-0.26	L2 ₁
	L2 ₁		6.21	0.18	0.12	0.10	-0.02	-0.02	
Ti ₂ CuSn	XA	0.73	6.53	3.50	2.0	1.92	-0.14	-0.28	L2 ₁
	L2 ₁		6.48	0.57	0.34	0.34	-0.06	-0.04	
Ti ₂ CuP	XA	1.94	6.12	1.87	0.82	1.28	-0.12	-0.12	L2 ₁
	L2 ₁		6.06	0	0	0	0	0	
Ti ₂ CuAs	XA	1.71	6.28	1.90	0.94	1.34	-0.12	-0.24	L2 ₁
	L2 ₁		6.21	0.10	0.04	0.04	0.02	0.02	
Ti ₂ CuSb	XA	1.02	6.52	2.33	1.16	1.52	-0.12	-0.24	L2 ₁
	L2 ₁		6.48	0.151	0.08	0.08	0	0	
Ti ₂ ZnAl	XA	0.85	6.41	3.60	2.10	2.02	-0.32	-0.20	L2 ₁
	L2 ₁		6.33	0.19	0.12	0.12	-0.04	-0.02	
Ti ₂ ZnGa	XA	1.18	6.40	3.46	2.00	2.04	-0.28	-0.30	L2 ₁
	L2 ₁		6.31	0.18	0.12	0.12	-0.02	-0.02	

Ti ₂ ZnIn	XA	0.71	6.64	3.61	2.10	2.08	-0.26	-0.30	L2 ₁
	L2 ₁		6.55	0.75	0.46	0.46	-0.10	-0.08	
Ti ₂ ZnSi	XA	1.42	6.28	2.47	1.30	1.56	-0.22	-0.16	L2 ₁
	L2 ₁		6.22	0	0	0	0	0	
Ti ₂ ZnGe	XA	1.42	6.38	2.66	1.48	1.66	-0.20	-0.28	L2 ₁
	L2 ₁		6.29	0.56	0.32	0.32	-0.06	-0.04	
Ti ₂ ZnSn	XA	0.90	6.63	2.66	1.48	1.64	-0.20	-0.26	L2 ₁
	L2 ₁		6.56	0.76	0.46	0.46	-0.10	-0.08	
Ti ₂ ZnP	XA	1.76	6.23	1.66	0.72	1.32	-0.22	-0.14	L2 ₁
	L2 ₁		6.17	0.09	0.04	0.04	0	0	
Ti ₂ ZnAs	XA	1.82	6.42	2.26	1.16	1.58	-0.20	-0.28	L2 ₁
	L2 ₁		6.31	0.09	0.04	0.04	0	0	
Ti ₂ ZnSb	XA	1.02	6.64	2.21	1.16	1.50	-0.18	-0.24	L2 ₁
	L2 ₁		6.56	0.16	0.08	0.08	0	0	

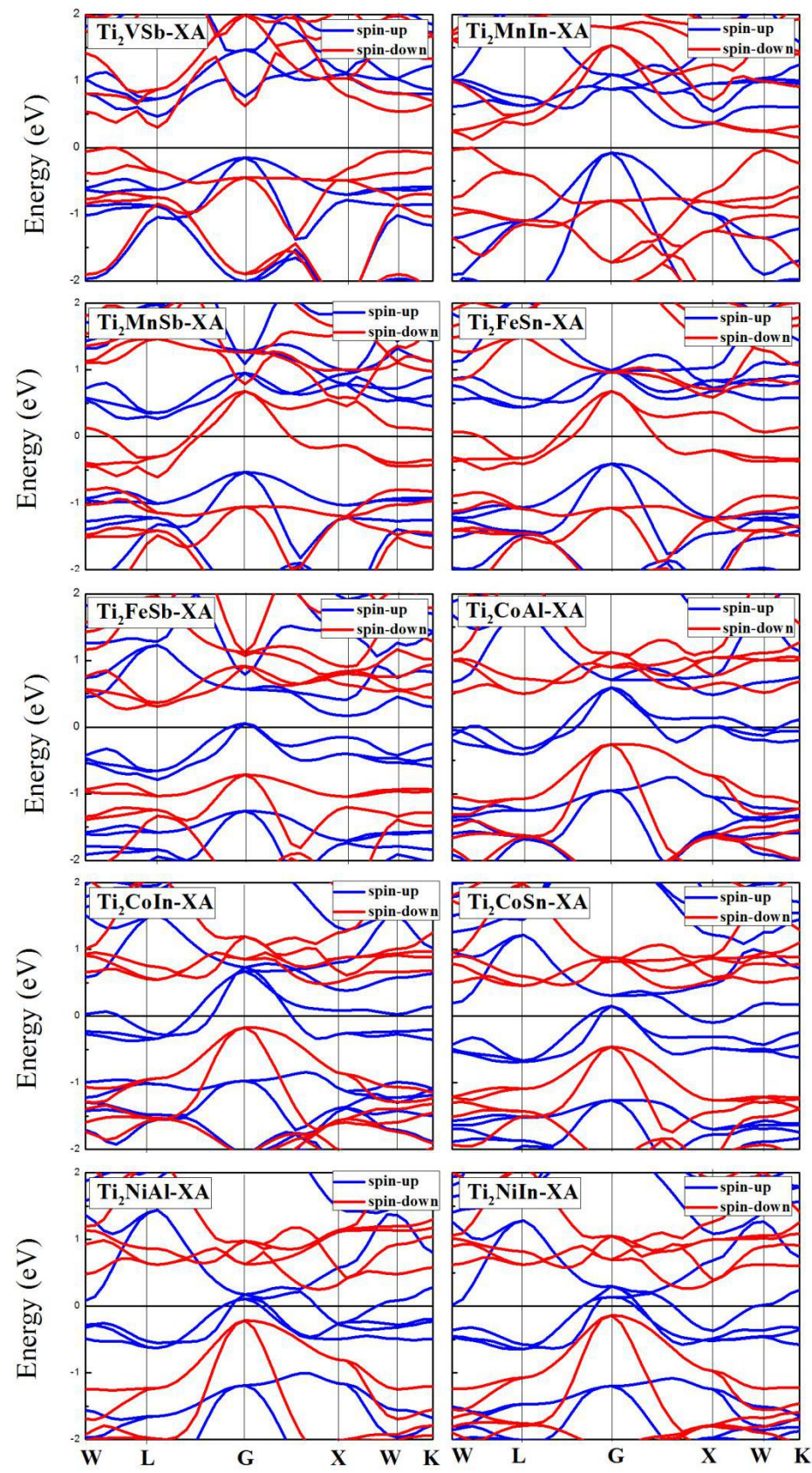


Fig. S1 Calculated band structures for Ti_2VSb , Ti_2MnIn , Ti_2MnSb , Ti_2FeSn , Ti_2FeSb , Ti_2CoAl , Ti_2CoIn , Ti_2CoSn , Ti_2NiAl and Ti_2NiIn with XA type structure.

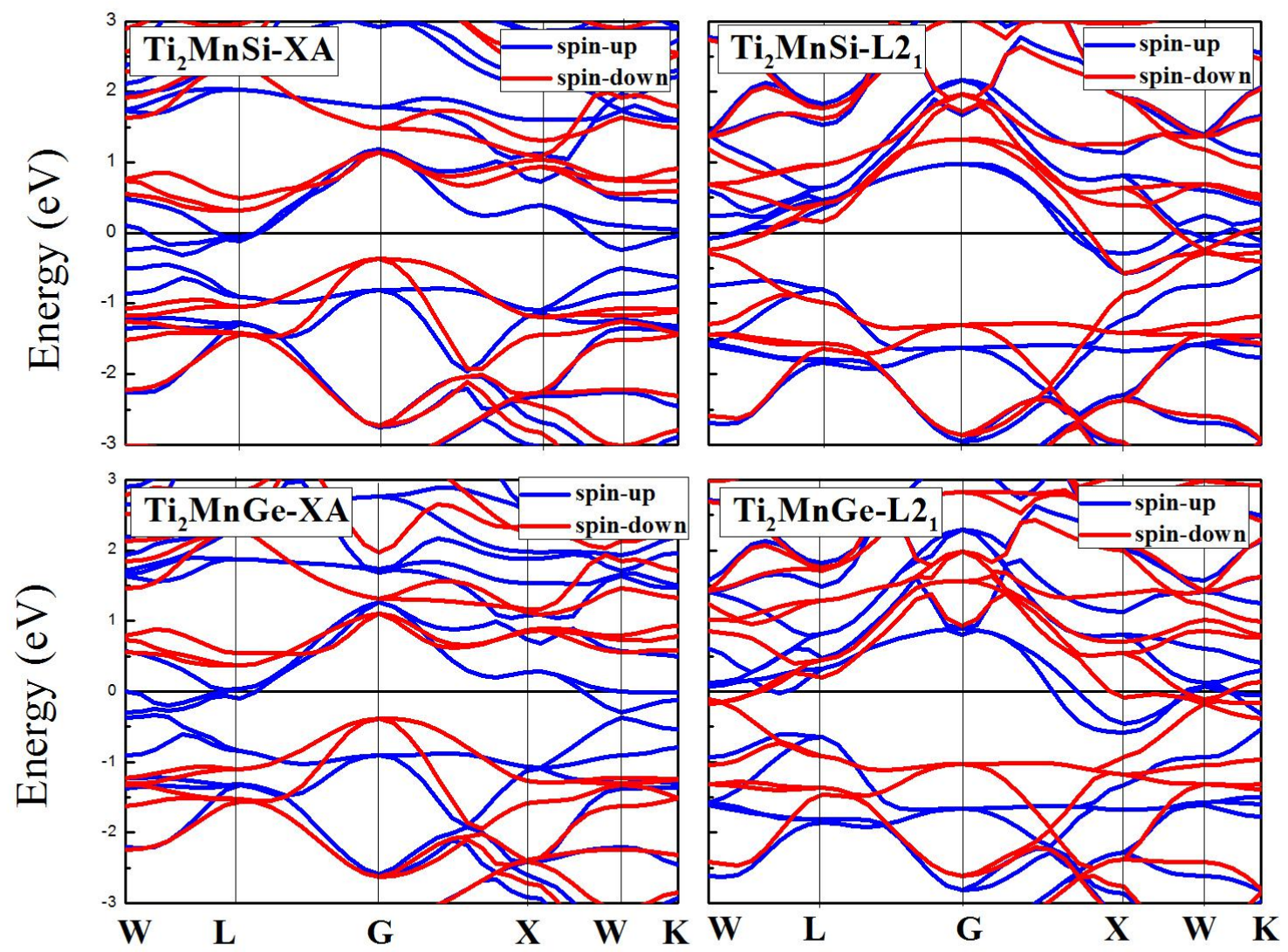


Fig. S2 Calculated band structures for Ti_2MnZ ($Z = \text{Si}, \text{Ge}$) with XA and L2_1 type structures.

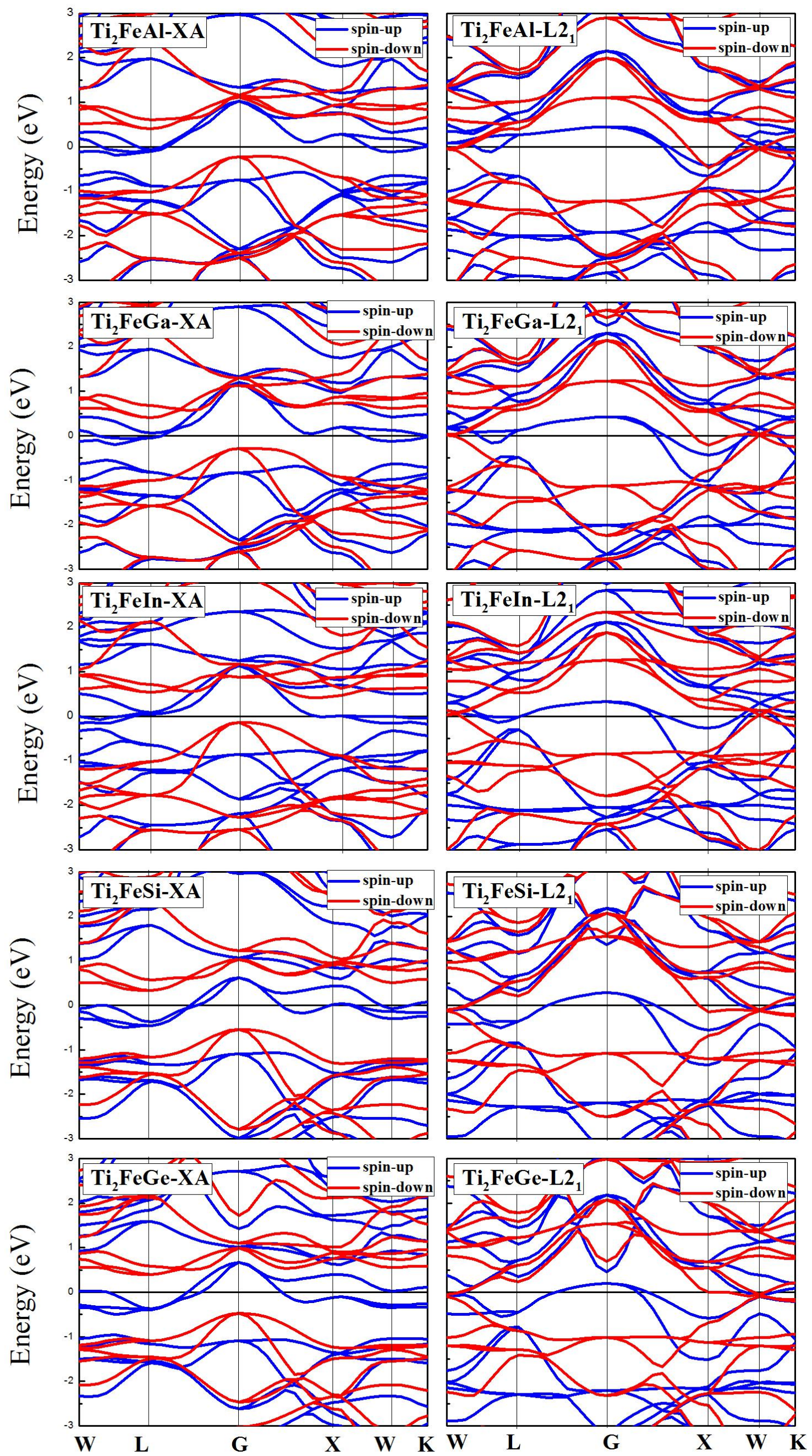


Fig. S3 Calculated band structures for Ti_2FeZ ($Z = \text{Al, Ga, In, Si, Ge}$)

with XA and $L2_1$ type structures.

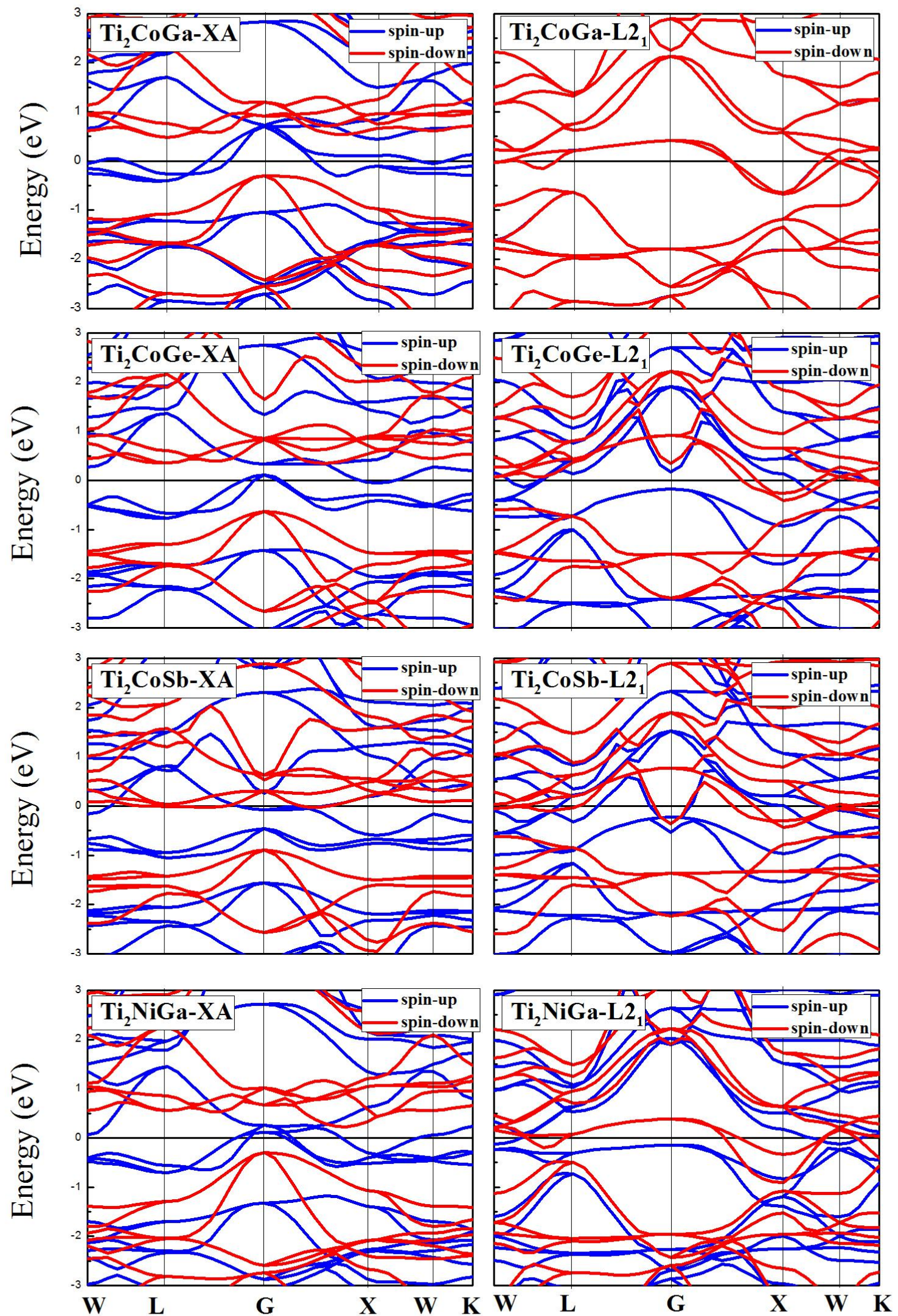


Fig. S4 Calculated band structures for Ti_2MnZ ($Z = Ga, Ge, Sb$) and Ti_2NiGa with XA and $L2_1$ type structures.