

УДК 538.9, 539.1, 539.2

**Н. С. Солтанбек<sup>1</sup>, Н. А. Мерәлі<sup>1\*</sup>, А. У. Абуова<sup>1</sup>, Ф. У. Абуова<sup>1</sup>, Ж. Е. Зәкиева<sup>2</sup>,  
Ө. К. Әбдірашев<sup>1</sup>, А. Б. Базарбек<sup>1</sup>, Г. Д. Кабдрахимова<sup>1</sup>, Т. М. Инербаев<sup>1</sup>**

<sup>1)</sup> *Д.Н. Гүмилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан*

<sup>2)</sup> Астана Халықаралық университеті, Астана, Қазақстан

\* Байланыс үшін E-mail: nurpeis.93@mail.ru

Бұл мақалада CrNiZ ( $Z = \text{Sb, Sn}$ ) жартылай Гейслер қорытпаларының электрондық және магниттік қасиеттері тығыздық функционалы теориясы (DFT) негізінде кванттық-химиялық әдіспен зерттелді. Есептеулерде жалпыланған градиентті жуықтау (GGA) және мета-GGA (SCAN) алмасу-корреляциялық функционалдары қолданылды. Алынған нәтижелерге сәйкес, CrNiSb қорытпасы жартылай металлдық қасиетті көрсетсе, CrNiSn қорытпасы толық металлдық сипатқа ие екені анықталды. Мета-GGA (SCAN) функционалы CrNiZ қорытпаларының электрондық құрылымын дәлірек сипаттайтын әдіс ретінде тандалды. Сонымен қатар, CrNiSb қорытпасының магниттік моменті 3  $\mu\text{B}$ -ке тең болып, Слейтер-Полинг ережесіне сәйкес келетіндігі анықталды.

**Түйін сөздер:** тығыздық функционалы теориясы, жартылай металл, Гейслер қорытпалары, электрондық қасиеттер, күйлер тығыздығы, электрондық локализация функциясы.

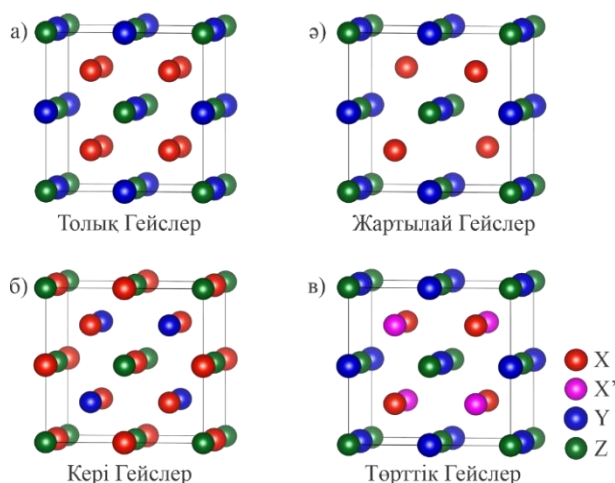
Гейслер және жартылай Гейслер қорытпалары – ерекше магниттік, топологиялық және электрондық қасиеттерге ие үштік интерметалдық материалдардың жоғары реттелген класы. Бұл қорытпалар жалпы кристалдық құрылымға ие болып, периодтық жүйенің көптеген элементтерін қамтитын 1000-нан астам әртүрлі комбинацияларды құрайды[1–8] (1-сурет). Әртүрлі зерттеу әдістері арқылы олардың қасиеттері жан-жақты зерттеліп келеді. Кубтық құрылымы бар Гейслер қорытпалары микроэлектроника мен спинтроника салаларында қолдану потенциалына байланысты ерекше назарға ие [9–14]. Кейбір Гейслер қорытпалары жоғары құрылымдық тұрақтылық пен 100% спиндік поляризацияны көрсетіп, олардың спинтроникада қолданылуына айтарлықтай мүмкіндік береді[15–19]. Яғни, өткізгіш электрондардың тек бір спин бағытында қозғалуы мүмкін. Мұндай қасиет оларды спиндік сүзгілер немесе спиндік инжекция үшін керемет материал жасайды. Бұл спинтрондық құрылғыларда ақпаратты спин арқылы сақтау мен беру тиімділігін арттырады[20].

|                 |                                            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |
|-----------------|--------------------------------------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|
| H<br>2,20       | <b>X<sub>2</sub>YZ - Гейслер қоспалары</b> |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            | He         |
| Li<br>0,98 1,57 | Be                                         |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            | B<br>2,04  | C<br>2,55  | N<br>3,04  | O<br>3,44  | F<br>3,98  | Ne         |
| Na<br>0,93 1,31 | Mg                                         |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            | Al<br>1,61 | Si<br>1,90 | P<br>2,19  | S<br>2,58  | Cl<br>3,16 | Ar         |
| K<br>0,82       | Ca                                         | Sc         | Ti<br>1,36 | V<br>1,54  | Cr<br>1,63 | Mn<br>1,66 | Fe<br>1,55 | Co<br>1,83 | Ni<br>1,88 | Cu<br>1,91 | Zn<br>1,90 | Ga<br>1,61 | Ge<br>1,81 | As<br>2,01 | Se<br>2,55 | Br<br>2,96 | Kr<br>3,00 |
| Rb<br>0,82      | Sr<br>0,95                                 | Y<br>1,22  | Zr<br>1,33 | Nb<br>1,60 | Mo<br>1,66 | Tc<br>1,90 | Ru<br>2,20 | Rh<br>2,28 | Pd<br>2,20 | Ag<br>2,20 | Cd<br>1,93 | In<br>1,69 | Sn<br>1,78 | Sb<br>1,96 | Te<br>2,05 | I<br>2,60  | Xe<br>2,60 |
| Cs<br>0,79      | Ba<br>0,89                                 |            | Hf<br>1,30 | Ta<br>1,50 | W<br>1,70  | Re<br>1,90 | Os<br>2,20 | Ir<br>2,20 | Pt<br>2,20 | Au<br>2,40 | Hg<br>1,90 | Tl<br>1,80 | Pb<br>1,80 | Bi<br>1,90 | Po<br>2,00 | At<br>2,20 |            |
| Fr<br>0,70      | Ra<br>0,90                                 |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |            |
|                 |                                            | La<br>1,10 | Ce<br>1,12 | Pr<br>1,13 | Nd<br>1,14 | Pm<br>1,13 | Sm<br>1,17 | Eu<br>1,20 | Gd<br>1,20 | Tb<br>1,10 | Dy<br>1,22 | Ho<br>1,23 | Er<br>1,24 | Tm<br>1,25 | Yb<br>1,10 | Lu<br>1,27 |            |
|                 |                                            | As<br>1,10 | Se<br>1,30 | Br<br>1,40 | Pt<br>1,50 | Ag<br>1,70 | Ni<br>1,70 | Pu<br>1,28 | Am<br>1,28 | Cm<br>1,13 | Bk<br>1,28 | Cf<br>1,30 | Es<br>1,30 | Fm<br>1,30 | Md<br>1,30 | No<br>1,30 | Lr<br>1,30 |

Сурет 1. Химиялық элементтердің периодтық жүйесі

Гейслер қорытпаларының құрылымы, көбінесе, кристалдық тордағы атомдардың орналасуы арқылы реттеледі, бұл олардың қасиеттерін икемді етуге мүмкіндік береді. Құрылымдық өзгерістер жасау арқылы Гейслер қорытпаларының қасиеттерін өзгертіп, оларды нақты спинтрондық міндеттерге бейімдеуге болады.

Жартылай металдық Гейслер қорытпаларын жасау және зерттеу бүгінгі күндегі маңызды ғылыми міндеттердің бірі болып табылады. Ең жиі зерттелетін түрлерінің бірі –  $X_2YZ$  типіндегі қорытпалар, мұнда  $X$  жоғары валентті ауыспалы металл,  $Y$  төмен валентті ауыспалы металл, ал  $Z$   $sp$  элементін құрайды. Негізінен, Гейслер қорытпаларының төрт түрі бар. Толық Гейслер қорытпалары  $L_21$  құрылымында, кері Гейслер қорытпалары  $XA$  құрылымдарында кристалданады. Екінші кластағы Гейслер қорытпалары  $XYZ$  формуласына сәйкес келеді және  $C_1b$  құрылымында кристалданады. Мұндай қорытпалар жартылай Гейслер қорытпалары деп аталады, Жартылай Гейслер қорытпаларының құрылымы  $XYZ$  түрінде болады, мұнда  $X$  және  $Y$  – ауыспалы металдар, ал  $Z$  – негізгі топтың элементі. Бұл қорытпалар симметриясы төмен кубтық құрылымда кристалданады, оның кеңістіктік тобы –  $F43m$  (216). Мұндай құрылым  $ZnS$  тетраэдрлік құрылымына негізделген, онда октаэдрлік тордың кейбір бөліктері толтырылып, жаңа құрылым жасалады (2-сурет). Вайкофф позициялары  $4A$  (0, 0, 0),  $4B$  ( $1/2$ ,  $1/2$ ,  $1/2$ ) және  $4C$  ( $1/4$ ,  $1/4$ ,  $1/4$ ) нүктелеріне сәйкес келеді [21–28]. Жартылай Гейслер қорытпаларының жартылай металдық қасиеттері олардың спинтроникада маңызды материал болуына мүмкіндік береді. Олардың қолданылу салаларына тоқталсақ, Қатты диск жетектері (HDD) және Спинді поляризацияланған тасымалдау негізіндегі транзисторлар. [29–30].



Сурет 2. Гейслер қорытпаларының негізгі түрлері

Жартылай Гейслер қорытпаларына деген қызығушылық алғашқы теориялық есептеулерде NiMnSb қорытпасының жартылай металдық қасиеттері анықталғаннан кейін қайта өршіді. Бұл табысты нәтижелер кейінгі зерттеулерге түрткі болып, Гейслер қорытпаларын спинтроника саласында қолдану мүмкіндіктерін тереңірек зерттеудің негізін қалады.

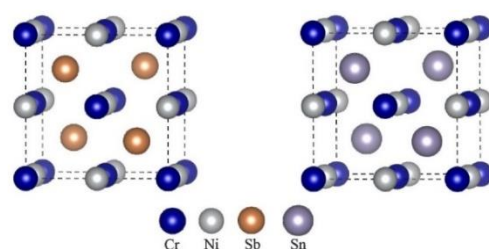
#### ЗЕРТТЕУ ӘДІСТЕМЕСІ

CrNiZ (Z = Sb, Sn) типіндегі Гейслер қорытпаларының электрондық және магниттік қасиеттері тығыздық функционалы теориясы (DFT) шеңберінде Vienna ab initio модельдеу пакеті (VASP) [17–20] көмегімен есептелді. Псевдопотенциалдар үшін корреляциялық алмасу функционалы ретінде Пердью-Берк-Эрнзерхоф (PBE) жалпыланған градиентті жуықтау (GGA) және meta-GGA (SCAN) әдістерімен есептеулер жүргізілді [20]. Есептеулер кезінде шекті энергия 500 эВ-қа тең, ал  $k$ -нүктелер торы Монкхорст-Пак әдісі бойынша  $6 \times 6 \times 6$  өлшемде таңдалды. Есептеулердің дәлдігі толық энергиялар арасындағы айырмашылық  $10^{-7}$  эВ/атом шегінде болатындай етіп орнатылды. Псевдопотенциалдарда келесі электрондық конфигурациялар пайдаланылды: Cr ( $3d^5 4s^1$ ), Ni ( $3d^8 4s^2$ ), Sb ( $4d^{10} 5p^3$ ), және Sn ( $4d^{10} 5p^2$ ).

#### НӘТИЖЕЛЕР

##### 1. ҚҰРЫЛЫМДЫҚ ҚАСИЕТТЕРІ

CrNiZ (Z = Sb, Sn) жартылай Гейслер қорытпалары XYZ формуласымен анықталған  $C1_b$  құрылымында кристалданады және F43m кеңістіктік тобына жатады (№216). Бұл құрылымда XYZ атомдары белгілі бір Вайкофф позицияларын алады: 4a (0, 0, 0), 4b (0,5, 0,5, 0,5) және 4c (0,25, 0,25, 0,25). 3-суретте осы қорытпалардың кристалдық құрылымының визуалды көрінісі көрсетілген. Көптеген зерттеулерде X, Y және Z атомдары үшін Вайкофф позицияларының орналасуын жиі өзгеріп отырады. Біздің жағдайда Cr атомдары X позициясында, Ni атомдары Y позициясында және Sb, Sn атомдары Z позицияларында орналасқан.



Сурет 3. CrNiZ (Z=Sb, Sn) жартылай Гейслер қорытпаларының кристалдық құрылымы

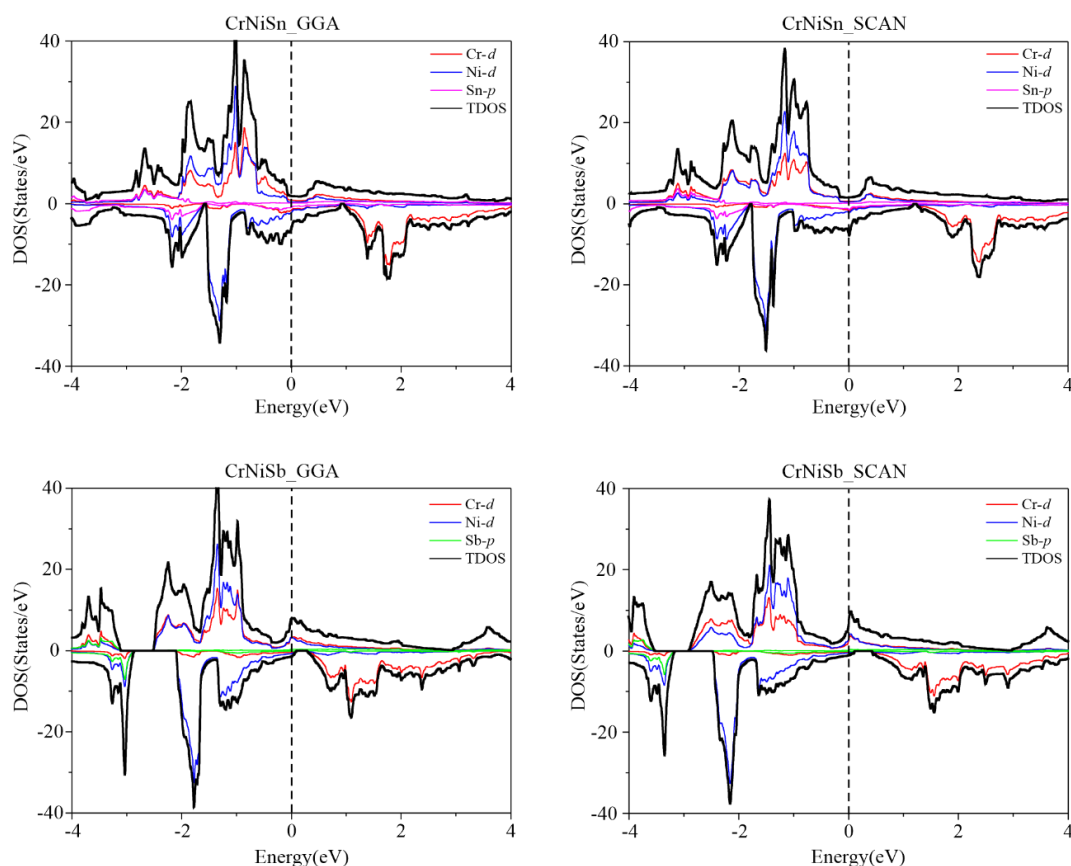
Жартылай Гейслер қорытпаларындағы X, Y, және Z атомдарының координациялық ортасы олардың симметриясына және орналасуына байланысты өзгеше. Z атомдары диагональ бойындағы белгілі нүктелерде орналасқан. Z атомы (Sb немесе Sn) 4X (Cr) атомымен қоршалған. Бұл атомдардың саны аз, өйткені Z атомдары құрылымның белгілі бір бағытталған симметриясын сақтай отырып орналасқан. Y атомдары құрылымда диагональ бойынша симметриялы орналасқан. Y (Ni) атомы 4X (Cr) атомымен және 4Z (Sb немесе Sn) атомдарымен қоршалған. X атомдары құрылымның тор түйіндерінде орналасқан. X (Cr) атомы 4Y (Ni) атомымен және 4Z (Sb немесе Sn) атомымен қоршалған, бұл химиялық байланыстың беріктігін және құрылымның тұрақтылығын қамтамасыз етеді [21–25]. Төменде берілген 1 кестеде зерттелген қорытпалардың GGA және meta-GGA SCAN жуықтауларымен есептелген энергия мәндері мен тор параметрлері көрсетілген [26].

1 кесте. CrNiZ (Z=Sb, Sn) жартылай Гейслер қорытпаларының тор параметрлері мен энергия мәндері

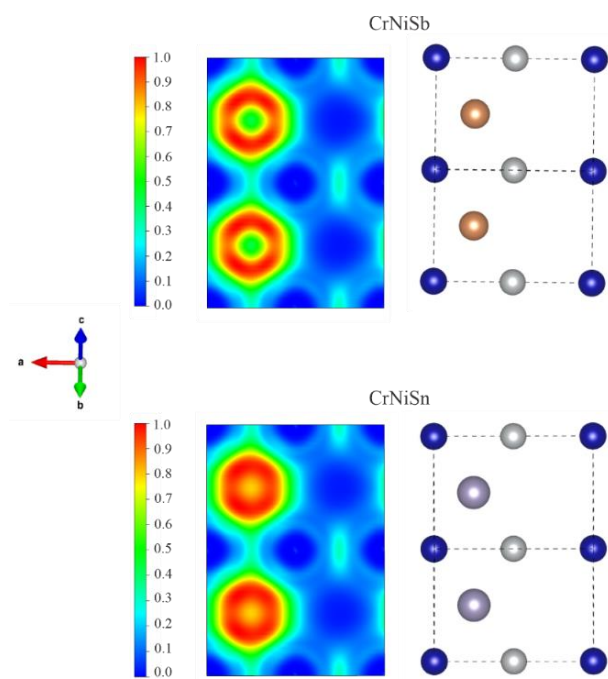
| Қорытпа | Құрылым | Функционал түрі | Тор параметрі (Å) | Энергия (эВ) |
|---------|---------|-----------------|-------------------|--------------|
| CrNiSb  | $C1_b$  | GGA             | 6,040             | -73,526      |
| CrNiSb  | $C1_b$  | SCAN            | 5,987             | -71,456      |
| CrNiSn  | $C1_b$  | GGA             | 6,057             | -69,968      |
| CrNiSn  | $C1_b$  | SCAN            | 6,011             | -69,462      |

##### 2. ЭЛЕКТРОНДЫҚ ҚАСИЕТТЕРІ

4 – суретте CrNiSb және CrNiSn қорытпалары үшін күйлердің электрондық тығыздықтары (DOS) GGA және SCAN әдістерімен салыстырылып көрсетілген. GGA әдісі арқылы есептелген зерттеулер екі қорытпа үшін де металдық қасиетті көрсетеді. SCAN әдісі арқылы есептелген CrNiSn қорытпасында Ферми деңгейі маңында тығыздық айтарлықтай азаяды, бірақ толық нөлге тең емес, демек бұл әдісте аталған қорытпаның металдық қасиетін көрсетеді. CrNiSb қорытпасы үшін SCAN әдісі күйлердің толық тығыздығы (TDOS)  $\beta$ -күйіндегі псевдосаңылауларын көрсетеді. Псевдосаңылаулар – бұл электрондық күйлердің айтарлықтай төмендеуі немесе болмауы байқалатын, олардың электрондық құрылымдарының бірегей сипаттамаларын көрсететін DOS шеңберіндегі аймақтар. Қорытпаның осындай сипаттамалары энергетикалық тұрғыдан қолайлы конфигурациялары бойынша жартылай металдарға ұқсас электрондық қасиеттерді көрсетеді.



Сурет 4. CrNiZ (Z=Sb, Sn) жартылай Гейслер қорытпаларының GGA және SCAN әдістері арқылы салыстырылған күйлердің электрондық тығыздықтары



Сурет 5. CrNiZ (Z=Sb, Sn) жартылай Гейслер қорытпалары үшін ELF

CrNiSb және CrNiSn қорытпаларының электрондық локализация функциясы (ELF) олардың электрондық құрылымын түсіну үшін есептелініп, 110 жазықтығында проекциясы 5 суретте көрсетілген. Электрон локализациясының функциясы (ELF) жоғары мәндерге ие аймақтарда электрондар жұптасуға бейім келеді, бұл металаралық қорытпаларда жақын орналасқан атомдар арасындағы коваленттік байланыстардың түзілуін сипаттайды. Cr және Sb арасында коваленттік байланыс бар, бірақ Ni элементі айналасындағы электрон тығыздығы төмен болғандықтан, ол орталық атом ретінде тек өткізгіштік қасиетке әсер етеді. Cr және Sn элементтері арасындағы коваленттік байланыс күштірек және тығыз орналасқан, бұл қорытпаның химиялық тұрақтылығына әсер етеді. CrNiSb қорытпасына қарағанда, CrNiSn қорытпасында коваленттік байланыстардың тығыздығы көбірек байқалады. Бұл қорытпа электрондық локализация көрсеткіштері бойынша Cr және Sn элементтері арасында коваленттік байланыстың күштірек екенін көрсетеді.

*2 кесте. CrNiZ (Z=Sb, Sn) жартылай Гейслер қорытпаларының магниттік моменттері ( $\mu_B$ )*

| Қорытпа | Функционал түрі | Cr    | Ni     | Sb     | Sn     | Толық | С-П ережесі |
|---------|-----------------|-------|--------|--------|--------|-------|-------------|
| CrNiSb  | GGA             | 3,271 | -0,240 | -0,117 |        | 2,914 | 3           |
|         | SCAN            | 3,489 | -0,497 | -0,114 |        | 2,876 |             |
| CrNiSn  | GGA             | 3,297 | -0,006 |        | -0,128 | 3,162 | 2           |
|         | SCAN            | 3,584 | -0,176 |        | -0,055 | 3,353 |             |

### 3. Магниттік қасиеттері

CrNiSb және CrNiSn Heusler қорытпаларының толық магниттік моменттері ( $\mu_B$ ) SCAN және GGA функционалдары арқылы есептелді. Сонымен қатар, әрбір жеке атомның магниттік моменттері анықталды. Толық магниттік моменттер мен атомдық магниттік моменттердің бұрын есептелген теориялық мәндері 2 кестеде берілген. Біз есептеген CrNiSb қорытпасының толық магниттік моменті шамамен 3  $\mu_B$  болды. Бұл Слейтер-Полинг (С-П) ережесіне бағынатынын көрсетеді. Алайда, CrNiSn бұл ережені сақтамады. CrNiSn қорытпасында атомдардың магниттік моменттері С-П ережесінің ауытқуына ықпал етеді. Ni атомының *d*-электрондары әдетте магниттік емес, бірақ көрші атомдармен гибридтену нәтижесінде оның спиндік күйі өзгереді. Sn атомы (Sb-мен салыстырғанда) электртерістілігі жоғарырақ және оның *d*-орбитальдары Cr атомдарымен әлсіз гибридтенеді. Бұл Cr атомының магниттік моментінің азаюына немесе толық өзгеруіне алып келеді. Нәтижесінде, CrNiSn қорытпасының магниттік моменті күтілгеннен ерекшеленеді. С-П ережесінде жартылай Гейслер қорытпаларындағы толық магниттік моментті келесі формула бойынша есептеуге болатындығы есептеледі [31]:  $M_t = Z_t - 18$ , мұндағы  $Z_t$  – бірлік ұяшықтағы валенттік электрондарының жалпы саны және  $M_t$  – бірлік ұяшықтағы магниттік момент.

#### Қорытынды

Қорытындылай келе, тығыздық функционалы теориясы (DFT) негізінде жүргізілген зерттеу CrNiZ (Z = Sb, Sn) жартылай Гейслер қорытпаларының электрондық және магниттік қасиеттерін тереңірек түсінуге мүмкіндік берді. Жалпыланған градиентті жуықтау (GGA) және мета-GGA (SCAN) алмасу-корреляциялық функционалдарын қолдану нәтижелері CrNiSb қорытпасының жартылай металлдық қасиеттерін, ал CrNiSn қорытпасының толық металлдық сипатын анық көрсетті. Сонымен қатар, мета-GGA (SCAN) функционалы зерттелген қорытпалардың электрондық құрылымын сипаттауда дәлірек әдіс ретінде танылды. CrNiSb қорытпасының магниттік моменті 3  $\mu_B$ -ке тең болып, Слейтер-Полинг ережесіне толық сәйкес келуі оның ерекше магниттік қасиеттерін айқындады. Бұл зерттеу CrNiZ қорытпаларының болашақта функционалдық материалдар ретінде қолданылу мүмкіндігін көрсетеді.

*Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің AP22683528 «Гейслер қорытпаларына негізделген термоэлектрлік және спинтрондық материалдардың компьютерлік дизайны» грантының қаржылық қолдауымен орындалды.*

### ӘДЕБИЕТТЕР / REFERENCES

- Gilleßen M., Dronskowski R. A combinatorial study of full Heusler alloys by first-principles computational methods // Journal of computational chemistry. – 2009. – Vol. 30, Issue 8. – P. 1290–1299.
- Galanakis I. Appearance of half-metallicity in the quaternary Heusler alloys // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2004. – Vol. 16, Issue 18. – P. 3089.
- Zhang M. et al., Half-metallic ferromagnetism in hypothetical semi-Heusler alloys NiV M (M= P, As, Sb, S, Se, and Te) // Journal of applied physics. – 2004. – Vol. 95, Issue 11. – P. 7219–7221.
- Shishidou T., Freeman A., Asahi R. Effect of GGA on the half-metallicity of the itinerant ferromagnet CoS<sub>2</sub> // Physical Review B. – 2001. – Vol. 64, Issue 18. – P. 180401.
- Galanakis I. Surface half-metallicity of CrAs in the zinc-blende structure // Physical Review B. – 2002. – Vol. 66, Issue 1. – P. 012406.
- Stroppa A. et al. Electronic structure and ferromagnetism of Mn-doped group-IV semiconductors // Physical Review B. – 2003. – Vol. 68, Issue 15. – P. 155203.
- Kusakabe K. et al. New half-metallic materials with an alkaline earth element // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2004. – Vol. 16, Issue 48. – P. S5639.
- Kandpal H.C. et al. Electronic structure, magnetism and disorder in the Heusler compound Co<sub>2</sub>TiSn // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2007. – Vol. 40, Issue 6. – P. 1587.
- Miura Y., Nagao K., Shirai M. Atomic disorder effects on half-metallicity of the full-Heusler alloys Co<sub>2</sub>(Cr<sub>1-x</sub>Fe<sub>x</sub>)Al: A first-principles study // Physical Review B. – 2004. – Vol. 69, Issue 14. – P. 144413.
- Fecher G.H. et al. Slater-Pauling rule and Curie temperature of Co<sub>2</sub>-based Heusler compounds // Journal of applied physics. – 2006. – Vol. 99, Issue 8. – P. 08J106-1–08J106-9.
- Lenzen, K.-M.H. Magnetoresistive Sensors and Memory // In book: Frontiers of Multifunctional Nanosystems. – Dordrecht, 2002. – P. 431–452.
- Caballero J. et al. Magnetoresistance of NiMnSb-based multilayers and spin valves // Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films. – 1998. – Vol. 16, Issue 3. – P. 1801–1805.
- Hordequin C., Nozieres J., Pierre J. Half metallic NiMnSb-based spin-valve structures // Journal of magnetism and magnetic materials. – 1998. – Vol. 183, Issue 1-2. – P. 225–231.
- Zhang Y., Wang W. et al. Structure and magnetic properties of Fe<sub>2</sub>NiZ (Z=Al, Ga, Si and Ge) Heusler alloys // Physica B Condensed Matter. – 2013. – Vol. 420. – P. 86–89.
- Midhunlal P. et al. Near total magnetic moment compensation with high Curie temperature in Mn<sub>2</sub>V<sub>0.5</sub>Co<sub>0.5</sub>Z (Z=

- Ga, Al) Heusler alloys // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2018. – Vol. 51, Issue 7. – P. 075002-1-075002-10.
16. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // Physical review letters. – 1996. – Vol. 77, Issue 18. – P. 3865–3868.
17. Kresse G., Furthmüller J. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set // Computational materials science. – 1996. – Vol. 6, Issue 1. – P. 15–50.
18. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Physical review B. – 1996. – Vol. 54, Issue 16. – P. 11169–11186.
19. Kresse G., Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method // Physical review b. – 1999. – Vol. 59, Issue 3. – P. 1758
20. Manz T.A., Limas N.G. Introducing DDEC6 atomic population analysis: part 1. Charge partitioning theory and methodology // RSC advances. – 2016. – Vol. 6, Issue 53. – P. 47771–47801.
21. Abuova F. et al. Structural, Electronic and Magnetic Properties of  $Mn_2Co_{1-x}V_xZ$  (Z= Ga, Al) Heusler Alloys: An Insight from DFT Study // Magnetochemistry. – 2021. – Vol. 7, Issue 12. – P. 159-1–159-12.
22. Абуова Ф. и др. Структурные, электронные и магнитные свойства  $Mn_2CoZ$  (Al/Ga) при легировании ванадием // Известия НАН РК. – 2021. – № 5. – С. 6–16. [Abuova F. i dr. Strukturnye, elektronnyye i magnitnyye svoystva  $Mn_2CoZ$  (Al/Ga) pri legirovanii vanadiem // Izvestiya NAN RK. – 2021. – No. 5. – P. 6–16. (In Russ.)]
23. Абуова Ф. и др. Электронная структура, магнитные свойства и стабильность сплавов Гейслера  $Mn_2Co_{1-x}V_xZ$  (Z= Al, Ga) // Вестник НЯЦ РК. – 2020. – № 4. – С. 24–28. <https://doi.org/10.52676/1729-7885-2020-4-24-28> [Abuova F.U., Inerbayev T.M., Abuova A.U., Kaptagay G.A., Merali N.A., Soltanbek N. Electronic structure, magnetic properties and stability of Heusler alloys  $Mn_2Co_{1-x}V_xZ$  (Z = Al, Ga // NNC RK Bulletin. – 2020. – Vol. 4. – P. 24–28. (In Russ.)]
24. Abuova A., Merali N., Abuova, F. et al. Electronic Properties and Chemical Bonding in  $V_2FeSi$  and  $Fe_2VSi$  Heusler Alloys // Crystals. – 2022. – Vol. 12, Issue 11. – P. 1546-1-1546-13.
25. Merali N.A., Soltanbek N.S., Abuova F.U., Inerbaev T.M., Nurkenov S.A., Abuova A.U. First-principles studies of  $X_2FeSi$  Heusler alloys // NNC RK Bulletin. – 2023. – No. 2. – P. 66–73. <https://doi.org/10.52676/1729-7885-2023-2-66-73>
26. Draganyuk O.N., Zhandun V.S., Zamkova N.G. Half-metallicity in  $Fe_2MnSi$  and  $Mn_2FeSi$  heusler compounds: A comparative ab initio study // Materials Chemistry and Physics. – 2021. – Vol. 271. – P. 124897-1–124897-87.
27. Savin A. et al. ELF: The electron localization function // Angewandte Chemie International Edition in English. – 1997. – Vol. 36, Issue 17. – P. 1808–1832.
28. Seredina M. et al. Magnetic and transport properties of as-prepared  $Mn_2CoGa$  // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2019. – Vol. 470. – P. 55–58.
29. Ghimire M. P. et al. First principles study of the electronic and magnetic properties of semi-Heusler alloys  $NiXSb$  (X= Ti, V, Cr and Mn) // Journal of alloys and compounds. – 2011. – Vol. 509. – No. 41. – P. 9742–9752.
30. Kulkova S. E. et al. The electronic structure and magnetic properties of full-and half-Heusler alloys // Materials transactions. – 2006. – Vol. 47. – No. 3. – P. 599–606.
31. Al-zyadi J. M. K., Gao G. Y., Yao K. L. First-principles investigation of the structural and electronic properties of bulk full-Heusler alloy  $Mn_2CoSn$  and its (0 0 1) surface // Journal of alloys and compounds. – 2013. – Vol. 565. – P. 17–21.

## **ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ ПОЛУГЕЙСЛЕРСКИХ СПЛАВОВ CrNiZ (Z=Sb, Sn) НА ОСНОВЕ РАСЧЕТОВ АВ ИНИТІО**

**Н. С. Солтанбек<sup>1</sup>, Н. А. Мерәлі<sup>1\*</sup>, А. У. Абуова<sup>1</sup>, Ф. У. Абуова<sup>1</sup>, Ж. Е. Зәкиева<sup>2</sup>,  
Ө. К. Әбдірашев<sup>1</sup>, А. Б. Базарбек<sup>1</sup>, Г. Д. Кабдрахимова<sup>1</sup>, Т. М. Инербаев<sup>1</sup>**

<sup>1)</sup> Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

<sup>2)</sup> Международный университет Астана, Астана, Казахстан

\* E-mail для контактов: nurreis.93@mail.ru

В этой статье электронные и магнитные свойства полуГейслерских сплавов CrNiZ (Z = Sb, Sn) были исследованы квантово-химическим методом на основе теории функционала плотности (DFT). В расчетах использовались обобщенные градиентные аппроксимации (GGA) и обменно-корреляционные функционалы мета-GGA (SCAN). Согласно полученным результатам, было обнаружено, что в то время как сплав CrNiSb проявляет полуметаллический характер, сплав CrNiSn имеет металлический характер. Функционал Мета-GGA (SCAN) был выбран в качестве метода более точного описания электронной структуры сплавов CrNiZ. Кроме того, было обнаружено, что магнитный момент сплава CrNiSb равен 3  $\mu_B$ , что соответствует правилу Слейтера-Полинга.

**Ключевые слова:** теория функционала плотности, полуметалл, сплавы Гейслера, электронные свойства, плотность состояний, функция электронной локализации.

INVESTIGATION OF THE STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES  
OF HALF-HEUSLER ALLOYS CrNiZ (Z=Sb, Sn) BASED ON AB INITIO CALCULATIONS

N. S. Soltanbek<sup>1</sup>, N. A. Merali<sup>1\*</sup>, A. U. Abuova<sup>1</sup>, F. U. Abuova<sup>1</sup>, Z. Y. Zakiyeva<sup>2</sup>,  
O. K. Abdirashev<sup>1</sup>, A. B. Bazarbek<sup>1</sup>, G. D. Kabdrakhimova<sup>1</sup>, T. M. Inerbaev<sup>1</sup>

<sup>1)</sup> L. N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

<sup>2)</sup> Astana International University, Astana, Kazakhstan

\* E-mail for contacts: nurpeis.93@mail.ru

In this article, the electronic and magnetic properties of half-Heusler alloys CrNiZ (Z = Sb, Sn) were investigated by a quantum chemical method based on density functional theory (DFT). Generalized gradient approximations (GGA) and meta-GGA exchange-correlation functionals (SCAN) were used in the calculations. According to the results obtained, it was found that while the CrNiSb alloy exhibits a half-metallic character, the CrNiSn alloy has a metallic character. The Meta-GGA (SCAN) functional was chosen as a method for a more accurate description of the electronic structure of CrNiZ alloys. In addition, it was found that the magnetic moment of the CrNiSb alloy is 3  $\mu_B$ , which corresponds to the Slater-Pauling rule.

**Keywords:** density functional theory, half-metal, Heusler alloys, electronic properties, density of states, electronic localization function.