

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-2-118-124>

УДК 538.9, 539.1, 539.2

CuNiZ (Z = Al, Ga, Sb, Sn) ЖАРТЫЛАЙ ГЕЙСЛЕР ҚОРЫТПАЛАРЫНЫҢ ҚҰРЫЛЫМДЫҚ, ЭЛЕКТРОНДЫ ЖӘНЕ МЕХАНИКАЛЫҚ СИПАТТАМАЛАРЫН АЛҒАШҚЫ ПРИНЦИПТЕРГЕ НЕГІЗДЕЛІП ЗЕРТТЕУ

Н. С. Солтанбек¹, Н. А. Мерәлі^{1*}, Ф. У. Абуова¹, А. У. Абуова¹, Ж. Е. Зәкиева², Т. М. Инербаев¹

¹ *Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан*

² *Астана Халықаралық университеті, Астана, Қазақстан*

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

Бұл зерттеуде CuNiZ (Z = Al, Ga, Sb, Sn) жартылай Гейслер қорытпаларының құрылымдық, электрондық және механикалық қасиеттері тығыздық функционалы теориясы (DFT) негізінде жүйелі түрде зерттелді. Алынған нәтижелер бұл қорытпалардың динамикалық және механикалық тұрақтылығын көрсетіп, олардың құрылымдық симметриясы мен байланыс сипатын анықтауға мүмкіндік берді. Электрондық қасиеттерді талдау CuNiZ қорытпаларының металдық сипатқа ие екенін көрсетті, ал серпімділік модульдері мен Пуассон коэффициенттері олардың механикалық беріктігін сипаттады. Сонымен қатар, есептеулер бұл қорытпаларда иондық байланыс басым екенін және олардың серпімділік сипаттамалары белгілі механикалық тұрақтылық критерийлерін қанағаттандыратынын көрсетті. CuNiAl, CuNiSb және CuNiSn қорытпалары механикалық тұрғыдан тұрақты болып табылып, олардың анизотропия коэффициенттері және басқа да серпімділік параметрлері анықталды. Бұл зерттеу CuNiZ жартылай Гейслер қорытпаларының болашақта функционалды материал ретінде қолданылу мүмкіндігін көрсетеді. Атап айтқанда, олардың механикалық беріктігі мен құрылымдық ерекшеліктері бұл материалдарды термоэлектрлік және спинтроника құрылғыларында пайдалануға перспективалы кандидаттар ретінде қарастыруға мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: *жартылай Гейслер қорытпалары, құрылымдық қасиеттер, электрондық қасиеттер, механикалық тұрақтылық, серпімділік модуль, иондық байланыс, анизотропия, тығыздық функционалы теориясы.*

КІРІСПЕ

Жартылай Гейслер (ЖГ) қорытпалары құрылымдық қарапайымдылығымен ерекше физикалық қасиеттерге ие болып, әртүрлі материалтану салаларында, оның ішінде термоэлектрлік және спинтронды технологияларда қолдану үшін үлкен қызығушылық тудырады. CuNiZ қорытпалары, мұндағы Z' негізгі топ элементтері Al, Ga, Sb, Sn ретінде ұсынылған, өздерінің құрылымдық, электрондық және механикалық қасиеттерінің ерекше комбинациясымен ерекшеленіп, зерттеу үшін өзекті қорытпа түрі болып табылады. Бұл жаңа функционалды материалдарды дамыту үшін пайдалы болуы мүмкін.

Құрамының және құрылымының қарапайымдылығымен ерекшеленетін CuNiZ қорытпалары, дәстүрлі ЖГ қорытпаларынан айырмашылығы, жаңа қасиеттері бар материалдарды жасау мүмкіндіктерін ашады. Алайда, олардың фундаменталды қасиеттерін тереңірек түсіну және қасиеттерін оңтайландыру үшін алғашқы принциптерге негізделген теориялық модельдер арқылы зерттеу жүргізу қажет.

Зерттеліп отырған қорытпалар жоғары симметрия мен тұрақтылықпен сипатталатын құрылымдарға ие, сондықтан олар жоғары температуралармен және әртүрлі функционалдық қасиеттермен байланысты қолданбалар үшін тамаша кандидаттар болып табылады [1].

ЖГ қорытпалардың негізгі ерекшеліктерінің бірі – олардың жоғары термоэлектрлік тиімділікпен қатар жақсы механикалық қасиеттерді көрсетуі. Мысалы,

титанды негіздегі ЖГ қорытпалары, мысалы TiNiSn және TiNiSb, жоғары термоэлектрлік қасиеттерін көрсетті, бұл олардың электрондық құрылымы мен жылуөткізгіштік ерекшеліктерімен байланысты [2–6]. Бұл қорытпалар құрамдағы әртүрлі элементтердің пайдалану арқылы материалдың қасиеттеріне елеулі әсер етуі мүмкін екенін көрсететін жарқын мысал болып табылады. Соңғы 25 жылдағы термоэлектрлік ЖГ қорытпаларының дамуы талданып, 220 ғылыми мақалада зерттелген 1100-ден астам ЖГ композициясы туралы мәліметтер жиналған [7]. Әдеби зерттеулер нәтижесі бойынша MNiSn (M = Ti, Zr, Hf), MCoSb (M = Ti, Zr, Hf), MFeSb (M = V, Nb, Ta) ерекше электрондық және механикалық қасиеттерге ие болған. n-типті ЖГ қорытпаларының арасында XNiSn (X = Ti, Zr, Hf), ал p-типті (X = V, Nb, Ta) және ZrCoBi қорытпалары үлкен қызығушылық тудыратынын атап өтті [8]. Бұл қорытпалар термоэлектрлік генераторларда пайдаланудың тұрақтылығы мен елеулін көрсетті [9]. ЖГ қорытпаларының спинтрондық қасиеттері және олардың магниттік құрылғылардағы перспективалары талқыланады. Ғылыми жұмыста NiMnSb сияқты ферромагниттік қорытпаларға ерекше назар аударылады, олар жоғары Кюри температурасына және субстратпен жақсы үйлесімділікке ие.

Дегенмен, ЖГ қорытпалардың көп бөлігі әлі де жеткілікті зерттелмеген. Мұндай аз зерттелген топтардың бірі – CuNiZ типті қорытпалар. Бұл қорытпалар әлі толық теориялық және тәжірибелік тұрғыдан

зерттелмеген және олардың мүмкін болатын электрондық және механикалық қасиеттері әлі анықталмаған. Бұл олардың құрылымдық, электрондық және механикалық сипаттамаларын бағалауға бағытталған жаңа теориялық және эксперименттік зерттеулер үшін мүмкіндік ашады.

Сондықтан, CuNiZ қорытпаларын зерттеу өзекті мәселе болып табылады, себебі бұл материалдар әлі толық зерттелмеген жартылай Гейслер жүйелерінде ерекше қасиеттерге ие болуы мүмкін. Бұл зерттеу жалпы жартылай Гейслер қорытпалары туралы білімді кеңейтуге және қазіргі заманғы технологиялар үшін жаңа материалдарды ұсынуға көмектеседі.

ЖГ қорытпалары әдетте XYZ формуласына сәйкес келіп, C_{1b} құрылымында қарастыру міндеттелген. Олардың құрылымы кристаллдық формуласы XYZ түрінде болады, мұндағы X атомы мен Y атомдары – ауыспалы металдар, ал Z атомы – негізгі топ элементі болып табылады. Бұл қорытпаларды әдеби шолуларда $F\bar{4}3m$ (216) кеңістіктік тобына сәйкес деп қарастырады. ЖГ құрылымының прототипі ZnS құрылымына негізделіп жасалған. ЖГ қорытпасының Вайкофф позициялары 4A (0, 0, 0), 4B (1/2, 1/2, 1/2) және 4C (1/4, 1/4, 1/4) нүктелеріне сәйкес келеді [10].

ЗЕРТТЕУ ӘДІСТЕМЕСІ

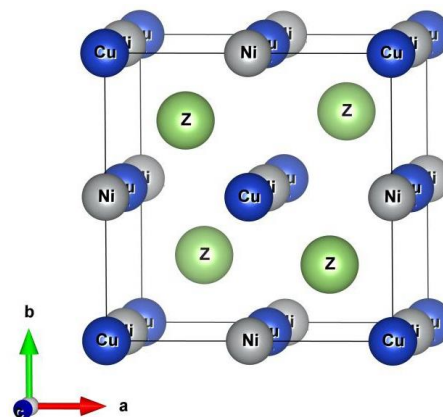
Бұл зерттеудегі барлық есептеулер тығыздық функционалы теориясы (DFT) аясында Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) бағдарламалық пакеті көмегімен жүргізілді [11]. Айырбастау-корреляция өзара әрекеттесулерін сипаттау үшін Perdew-Burke-Ernzerhof (PAW) әдісіндегі жалпы градиентті аппроксимация (GGA) қолданылды [12]. Барлық есептеулерде 700 эВ деңгейінде жазық толқындарды кесу энергиясы белгіленді. Бриллюэн аймағының интеграциясы үшін $6 \times 6 \times 6$ өлшемді k-нүктелер торы пайдаланылды. Бұл параметрлер жалпы энергияның дәлдігін қамтамасыз ететіндей деңгейде таңдалды. Есептеулердегі конвергенция критерийі әр атомға шаққандағы жалпы энергия өзгерісінің 10^{-7} эВ/атом шегінде сақталуын қамтамасыз етті. Реалды кеңістіктегі күштік тұрақтылар суперұяшық және шекті ығысу әдістері арқылы есептелді. Қарастырылған қосылыстардың серпімділік қаттылық тензоры C_{ij} кернеу (σ) мен деформация (ϵ) арасындағы байланыс $\sigma_i = C_{ij} \epsilon_j$ теңдеуі негізінде анықталды. Алынған деректерден барлық қажетті механикалық қасиеттер есептелді. Бұл әдіс фонондық топтық жылдамдық және модаға тәуелді Грюнайзен параметрі сияқты шамаларды кіріс ретінде пайдаланып, көлемдік кристалл материалдар үшін ерекше дәлдікпен қолайлы екенін көрсетті.

Нәтижелер

1. Құрылымдық қасиеттері

ЖГ CuNiZ (Z = Al, Ga, Sb, Sn) қорытпаларының жалпы формуласы XYZ, ал құрылымдық көрінісі C_{1b} қарастырылған және кеңістіктің топ ретінде $F\bar{4}3m$ (№216) таңдалды. CuNiZ ЖГ құрылымының X, Y

және Z атомдары сәйкесінше Вайкофф позицияларында орналасқан: 4a (0, 0, 0), 4b (0,5, 0,5, 0,5), 4c (0,25, 0,25, 0,25). 1-суретте ЖГ CuNiZ құрылымының кристаллдық құрылымының көрінісі бейнеленген. Қарастырылып отырған құрылым үшін Cu атомдары, негізгі топ атомдары ретінде X позициясында, ал Ni атомдары сәйкесінше Y позициясы орнында және Z атомдары сәйкесінше Z позициялары орнында.



Сурет 1. CuNiZ (Z=Al, Ga, Sb, Sn) ЖГ құрылымының кристаллдық құрылымы

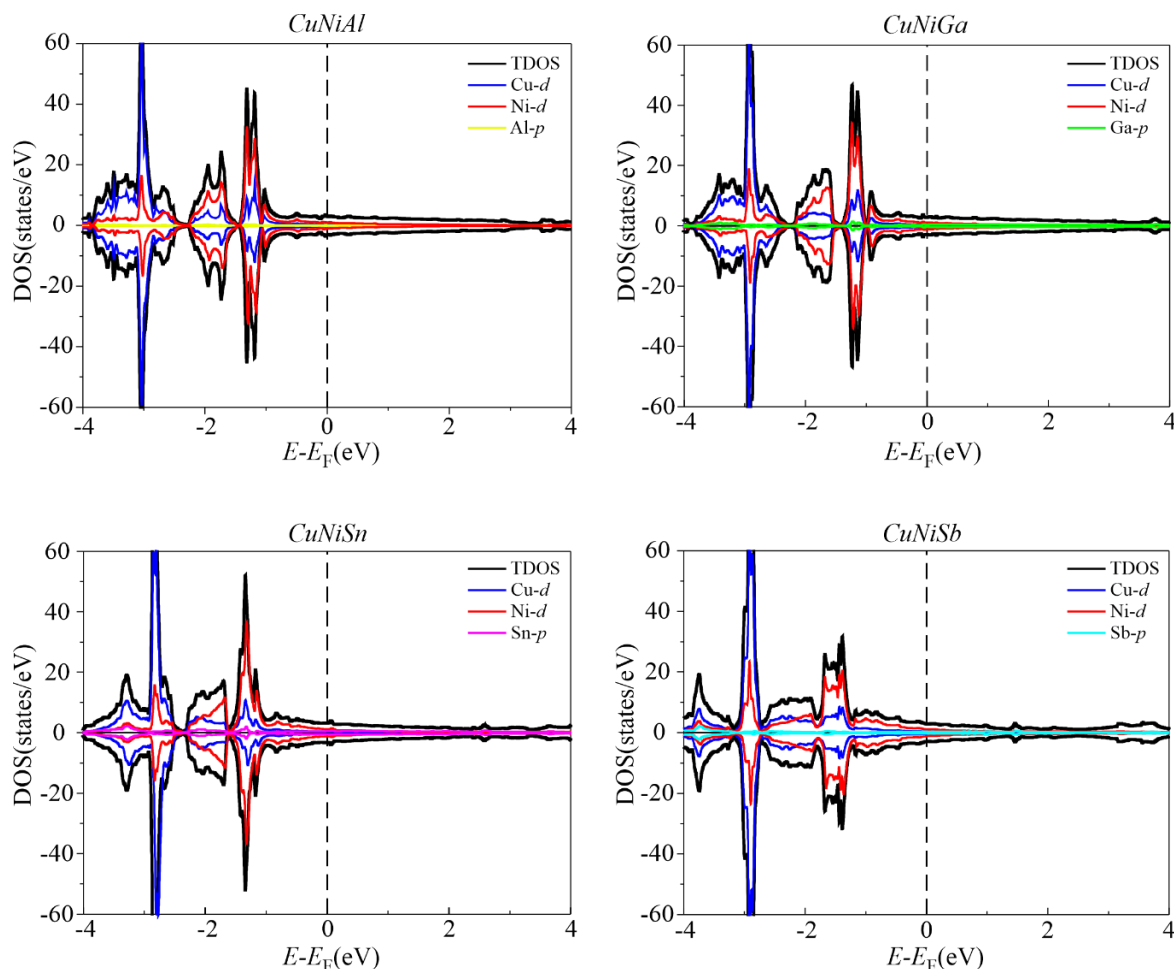
1-кестеде зерттелген жартылай Гейслер қорытпаларының есептелген энергия мәндері мен тор параметрлері көрсетілген. Қорытпаның Z атомдарының өзгерісі оның жалпы кристаллдық өлшеміне әсер етеді. Z атомдарының иондық радиусының артуына қарай, CuNiZ ЖГ қорытпасының электрондық және механикалық қасиеттері қалай өзгеретінін қарастырамыз.

1 кесте. CuNiZ' (Z = Al, Ga, Sb, Sn) ЖГ қорытпаларының тор параметрлері мен энергия мәндері.

Қорытпа	Тор параметрі (Å)	Энергия (эВ)	Көлем (Å ³)
CuNiAl	5,580	-52,703	173,79
CuNiGa	5,593	-48,749	174,99
CuNiSb	5,838	-54,633	199,02
CuNiSn	5,854	-52,609	200,68

2. Электрондық қасиеттері

Зерттеліп отырған ЖГ қорытпаларының электрондық қасиеттерін сипаттау мақсатында 2 – суретте көрсетілген электрондық күйлер тығыздығы талданды. Талдау барысында CuNiZ (Z = Al, Ga, Sb, Sn) жүйесінің барлық қорытпалары металлдық қасиет көрсеткенін байқауға болады. ЖГ қорытпаларының валенттік зона аймағының –6 эВ және –4 эВ аралығында қорытпаның барлық элементтері жалпы электрондық күй тығыздығына аз көлемде бірдей үлес қосатынын, ал –4 эВ және –2,2 эВ аралығында электрондық тығыздық көрсеткішіне негізгі үлестің басым бөлігін Cu атомдарының d-электрондары қосса, –2,2 эВ және –1,3 эВ аралығында негізгі үлес керісінше Ni атомдарының d-электрондарына тиесілі екенін байқаймыз. –1,3 эВ көрсеткішінен Ферми



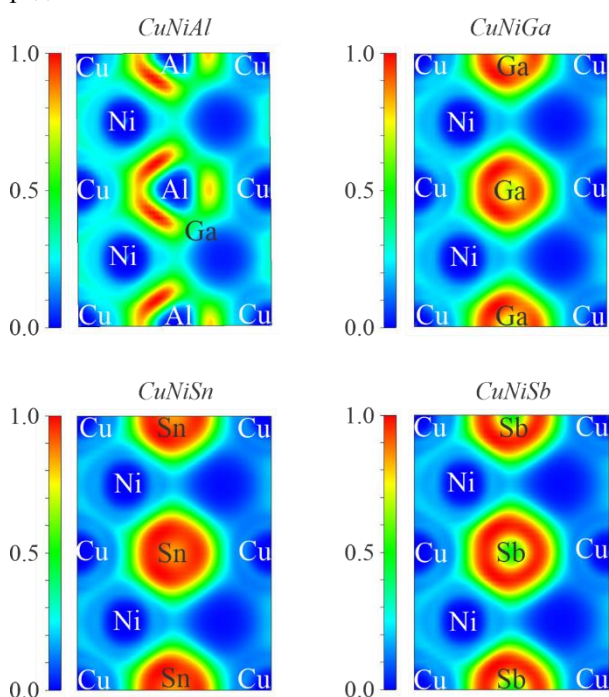
Сурет 2. CuNiZ (Z=Al,Ga,Sb,Sn) ЖГ қорытпалары үшін күйлердің электрондық тығыздықтары

энергиясы деңгейіне дейінгі аралықта барлық атомдардың электродық тығыздық күйіне үлесі шамалас. Ферми энергиясы деңгейіндегі Z' атомдары мен Ni атомдарының *d*-электрондарының үлесі көрсеткіші, және аталмыш аймақта псевдосаңылаулардың болмауы зерттеліп отырған ЖГ қорытпалар тобының металлдық қасиет көрсететінін білдіреді. Өткізгіштік аймақтағы атомдардың жалпы үлесі шамалас болғанымен, ең жоғарғы мән Cu атомдарының *d*-электрондарына тиесілі екенін байқаймыз. Демек, Z атомдарының өзгерісі электрондық құрылымның қасиеттеріне әсер етпейтінін тұжырымдай аламыз.

CuNiZ (Al,Ga,Sb,Sn) ЖГ қорытпаларындағы электрондардың шоғырлануын талдау мақсатында электрондық локализация функциясы (ELF) жасалды. Электродық локализация функциясы үшін 110 жазықтығы таңдалды, зерттеу нәтижесі 3-суретте көрсетілген. Әрбір суреттегі түстік шкала қызыл (максималды локализация) мен көк (минималды локализация) арасында ауысып отырады. Қызыл түс электрондардың кеңістікте тығыз орналасқанын және ковалентті байланыс не электрондық жұптың күшті локализациясын білдіреді, ал көк түс электрондардың сирек орналасқанын, яғни әлсіз немесе металлдық

сипаттағы байланысты көрсетеді. CuNiAl және CuNiGa жүйелерінде (III топ элементтері Al, Ga) электрондық байланысқа айтарлықтай үлес қосатын *s-p* орбитальдардың ықпалы жоғарырақ. Бұл жүйелерде коваленттілік үлесі біршама өсуі мүмкін, себебі Al мен Ga-ның сыртқы қабаттарындағы *p* орбитальдар металл-металл өзара әрекеттесуіне қосылады. CuNiSb және CuNiSn жүйелерінде (Sb – V топ элементі, Sn – IV топ элементі) электрондық бұлттың локализациясы біраз өзгеше сипат алады. Sb атомдары 5 *p*-электрондары арқылы коваленттілікті арттырады, ал Sn – 5 *s* және 5 *p* орбитальдары арқылы қосылып, металлдық-коваленттік сипат арасында аралық байланыс түзуі ықтимал. Бірінші суретте қызыл түске боялған аймақтар бір-біріне жақын орналасқан «доға» немесе «жартылай сақина» түрінде көрінеді. Бұл аймақтар атомдар арасындағы электрон тығыздығының жоғары екенін, яғни коваленттілік/локальді байланыстардың бар екенін көрсетеді. Екінші және үшінші суреттерде қызыл түсті аймақтардың формасы алдыңғыға қарағанда анағұрлым «дөңгелек» не «шеңберге ұқсас» болып келеді. Бұл металлдық сипат пен коваленттіліктің арасындағы тепе-теңдіктің әртүрлі екенін, сондай-ақ қоспаның

химиялық құрамы өзгерген сайын электрондық бұлттың таралуы да өзгертетінін аңғартады. CuNiAl қорытпасы үшін электрондық локализация функциясының «оқшауланған» қызыл аймақтары біршама аздау болып, жалпы металдық сипат сақталады. CuNiAl, CuNiSb және CuNiSn қорытпалары үшін коваленттілік үлесінің артуы нәтижесінде кейбір аймақтарда ELF мәні жоғары. Әсіресе Sb атомының қатысуымен ковалентті байланыстың қарқындылығы өседі. Осылайша, электрондық локализация функциясын талдау арқылы CuNi негізді сплавтарда қоспа элементтерінің әсерінен металдық және ковалентті байланыс сипаттарының қалай өзгертетінін көруге болады. Бұл нәтижелер материалдың физикалық қасиеттерін (беріктік, өткізгіштік, т.б.) болжауда маңызды рөл атқарады.



Сурет 3. CuNiZ (Z=Al, Ga, Sb, Sn) жартылай Гейслер қорытпалары үшін ELF

3. Серпімділік қасиеттері

Қатты дененің көптеген негізгі қасиеттері материалдың серпімділік қасиеттерімен тығыз байланысты [13]. Серпімділік тұрақтылықтарды зерттеу арқылы материалдың тұрақтылығы, қаттылығы, сынғыштығы, икемділігі, анизотропияның табиғаты және басқа механикалық құбылыстар сипатталады [14]. Серпімділік тұрақтылар Гуктың деформация заңын қолдану арқылы анықталады. 2-кестеде CuNiZ ЖГ қорытпалар қатарының серпімділік тұрақтыларды зерттеу нәтижелері келтірілген. Қарастырылып отырған ЖГ қорытпалары кубтық кристалл болғандықтан, серпімділік тұрақтылары арқылы анықталатын механикалық тұрақтылық Борн критерийлеріне сәйкес келуі керек:

$$C_{11} > 0, C_{44} > 0, C_{11} - C_{12} > 0, C_{11} + 2C_{12} > 0$$

2-кестеде көрсетілген C_{ij} серпімділік тұрақтылардың есептік мәндері CuNiAl, CuNiSb және CuNiSn ЖГ қорытпалары үшін оң екенін және сәйкесінше кубтық кристалл қорытпаларының механикалық тұрақты екенін көрсететін жоғарыда көрсетілген шектеуді қанағаттандыратынын көреміз. Алайда CuNiGa ЖГ қорытпасы Борн критерийіне сәйкес келмегенін байқаймыз. Демек бұл қорытпа механикалық тұрақты емес, және бұл қорытпаның серпімділік қасиеттерін қарастырмаймыз.

2 кесте. CrNiZ (Z=Al, Ga, Sb, Sn) ЖГ қорытпаларының C_{ij} серпімділік тұрақтылары

Қорытпа	C_{11}	C_{12}	C_{44}	$C_{12}-C_{44}$
CuNiAl	115,4	110,4	6,6	103,8
CuNiGa	105,6	111,7	-5,6	117,3
CuNiSb	124,1	105,7	26,1	79,6
CuNiSn	130,5	91,3	20,1	71,2

2-кесте мәндерін талдай отырып, C_{11} тұрақтыларының мәні C_{44} мәндерінен үлкен екенін көруге болады. Бұл қорытпа таза ығысу деформациясына қарағанда бір бағытты деформацияға төзімділігі жоғары екенін білдіреді. Материалдардың сынғыштығын немесе икемділігін бағалау үшін маңызды критерий Коши қысымы болып табылады, ол $C_{12}-C_{44}$ ретінде анықталады. Коши қысымы материалдың сәйкесінше металл және бейметалл екенін ғана емес ғана емес [15], сонымен қатар Кошидің теріс қысымы сынғыштықты, ал оң қысымы материалдың икемділігін көрсетеді. Зерттеу барысында Коши қысымының оң екенін анықтадық, демек зерттеліп отырған қорытпалар тобының табиғаты икемді екенін болжай аламыз.

Материалдардың механикалық қасиеттерін түсіну үшін поликристаллдардың серпімділік параметрлері өте маңызды параметрлер болып табылады, мысалы, көлемді серпімділік модулі B , ығысу модулі G , Юнг модулі E және Пуассон коэффициенті ν , анизотропия коэффициенті A . Сондықтан біз осы параметрлердің ЖГ қорытпаларының Z атомы өзгеруіне қарай өзгеруісін зерттейміз. Бұл параметрлерді бағалау үшін біз Вейгт-Ройс-Хилл схемасын қолдандық. Кубтық кристаллдар үшін серпімділік және ығысу модульдері [16]:

$$B_B = B_P = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3}$$

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

$$G_P = \frac{5C_{44}(C_{11} - C_{12})}{[4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})]}$$

Хиллдің мәліметтері бойынша B және G орташа мәндерін көрсетуге болады:

$$B = \frac{1}{2}(B_P + B_B)$$

$$G = \frac{1}{2}(G_B + G_P)$$

Юнг модулі (E) және Пуассон коэффициенті (ν) келесі қатынастар арқылы анықталуы мүмкін:

$$E = \frac{9BG}{3B + G}$$

$$\nu = \frac{3B - 2G}{2(3B + G)}$$

Есептелген серпімділік модульдер 3-кестеде көрсетілген. Механикалық тұрақты ЖГ қорытпаларының Z атомдарының өзгеріс барысында, олардың көлемді серпімділік модулі төмендейді, ал ығысу модулі керісінше жоғарылайды. Пуассон коэффициентінің жоғарылауымен материалдың икемділігі артады. Пуассон коэффициенті ЖГ қорытпаларының Z атомдарының иондық радиусы ұлғаюына қарай жоғарылайды. Пью коэффициенті, B/G, кез-келген материалдың икемділігі/сынғыштығы туралы ақпарат береді. Егер $B/G > 1,75$ теңсіздігі орындалатын болса, онда материал икемділікке ие, ал $B/G < 1,75$ теңсіздігі орындалса, ол сынғыш болып табылады. Есептеу нәтижелеріне сәйкес, B/G мәндері 1,75-тен жоғары екенін анықталды. Қатты материалда анизотропия дәрежесі Зенер анизотропия коэффициентімен анықталады, изотропты материал үшін анизотропия коэффициенті 1-ге тең болады, ал 1-ден кіші немесе үлкен мәндер серпімділік анизотропия дәрежесін көрсетеді [17]. Анизотропия коэффициенті мәнін анықтау үшін келесі теңдеу қолданылды:

$$A = \frac{2C_{44}}{(C_{11} - C_{12})}$$

Зерттелген анизотропия коэффициенттері 1-ден өзгеше болғандықтан, серпімділік анизотропия дәрежесін көрсететіні анықталды.

3 кесте. CrNiZ (Z=Sb, Sn) жартылай Гейслер қорытпаларының серпімділік қасиеттері

Қорытпа	B	G	ν	A	B/G
CuNiAl	112,066	4,472	0,480	1,222	25,055
CuNiGa	109,666	-4,388	0,520	0,456	-24,990
CuNiSb	111,833	17,192	0,427	1,427	6,504
CuNiSn	104,366	19,898	0,410	0,007	5,244

Қорытынды

Қорытындылай келе, CuNiZ (Z = Al, Ga, Sb, Sn) жартылай Гейслер қорытпаларының құрылымдық, электрондық және серпімділік қасиеттері жан-жақты зерттелді. Алынған есептеу нәтижелері бұл қорытпалардың кристалдық құрылымы тұрақты екенін және олардың жүйелерінде иондық байланыстардың басым рөл атқаратынын көрсетті. Сонымен қатар, CrNiZ (Z = Al, Ga, Sb, Sn) қорытпалары металлдық қасиетке ие екені анықталды. Механикалық қасиеттерін талдау барысында CuNiAl, CuNiSb және CuNiSn қорытпаларының серпімділік тұрақтылығы расталды. Олардың көлемдік серпімділік және ығысу модульдері, Пуассон коэффициенті, анизотропия

факторы және Пью коэффициенті есептелді. Бұл параметрлер олардың механикалық беріктігі мен икемділігін сипаттайды және осы материалдардың қолдану мүмкіндіктерін анықтауға көмектеседі. Жүргізілген зерттеу нәтижелері CuNiZ жартылай Гейслер қорытпаларының перспективалы функционалды материалдар ретінде пайдалануға жарамды екенін көрсетеді. Әсіресе, олардың механикалық тұрақтылығы мен құрылымдық ерекшеліктері бұл қорытпаларды термоэлектрлік, спинтроника және басқа да технологиялық салаларда қолдану мүмкіндігін қарастыруға негіз бола алады. Бұдан әрі бұл материалдардың практикалық қолдану аясын кеңейту мақсатында қосымша эксперименттік және теориялық зерттеулер жүргізу қажет.

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

ӘДЕБИЕТТЕР / REFERENCES

1. Tavares, S., Yang, K., & Meyers, M. A. Heusler alloys: Past, properties, new alloys, and prospects // Progress in Materials Science. – Elsevier, 2023. – V. 132. – P. 101017.
2. Rogl, G., Grytsiv, A., Gürth, M., Tavassoli, A., Ebner, C., Wünschek, A., Puchegger, S., Soprunyuk, V., Schranz, W., Bauer, E., et al. Mechanical properties of half-Heusler alloys // Acta Materialia. – Elsevier, 2016. – V. 107. – P. 178–195.
3. Elphick, K., Frost, W., Samiepour, M., Kubota, T., Takanashi, K., Sukegawa, H., Mitani, S., & Hirohata, A. Heusler alloys for spintronic devices: Review on recent development and future perspectives // Science and Technology of Advanced Materials. – Taylor & Francis, 2021. – V. 22(1). – P. 235–271.
4. Webster, P. J. Heusler alloys // Contemporary Physics. – Taylor & Francis, 1969. V. 10(6). – P. 559–577.
5. Abuova, A., Merali, N., Abuova, F., Khovaylo, V., Sagatov, N., & Inerbaev, T. (2022). Electronic properties and chemical bonding in V₂FeSi and Fe₂VSi Heusler alloys // Crystals. – MDPI, 2022. – V. 12(11). – P. 1546.
6. Abuova, F., Inerbaev, T., Abuova, A., Merali, N., Soltanbek, N., Kaptagay, G., Seregina, M., & Khovaylo, V. Structural, electronic, and magnetic properties of Mn₂Co_{1-x}VXZ (Z = Ga, Al) Heusler alloys: An insight from DFT study // Magnetochemistry. – MDPI, 2021. – V. 7(12). – P. 159.
7. Rogl, G., & Rogl, P. F. Development of thermoelectric half-Heusler alloys over the past 25 years // Crystals. – MDPI, 2023. – V. 13(7). – P. 1152.
8. Quinn, R. J., & Bos, J.-W. G. Advances in half-Heusler alloys for thermoelectric power generation // Materials Advances. – Royal Society of Chemistry, 2021. – V. 2(19). – P. 6246–6266.
9. Elphick, K., Frost, W., Samiepour, M., Kubota, T., Takanashi, K., Sukegawa, H., Mitani, S., & Hirohata, A. Heusler alloys for spintronic devices: Review on recent development and future perspectives // Science and

- Technology of Advanced Materials. – Taylor & Francis, 2021. – V. 22(1). – P. 235–271.
10. Kresse, G., & Furthmüller, J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Physical Review B. – American Physical Society, 1996. – V. 54(16). – P. 11169–11186. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>
11. 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. – V. 6(1). – P. 15–50. [https://doi.org/10.1016/0927-0256\(96\)00008-0](https://doi.org/10.1016/0927-0256(96)00008-0)
12. Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. Generalized gradient approximation made simple // Physical Review Letters. – APS, 1996. – V. 77(18). – P. 3865.
13. Fu, H., Li, D., Peng, F., Gao, T., & Cheng, X. Ab initio calculations of elastic constants and thermodynamic properties of NiAl under high pressures // Computational Materials Science. – 2008. – V. 44(2). – P. 774–778. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2008.04.014>
14. Wang, W.-Z., & Wei, X.-P. Half-metallic antiferromagnetic in Mn₂ZnCa // Computational Materials Science. – 2011. – V. 50(7). – P. 2253–2256. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2011.02.011>
15. Guo, S.-D., & Liu, B.-G. (2011). Improved half-metallic ferromagnetism of transition-metal pnictides and chalcogenides calculated with a modified Becke-Johnson exchange potential. Europhysics Letters, 93(4), 47006. <https://doi.org/10.1209/0295-5075/93/47006>
16. Wu, Z. J., Zhao, E. J., Xiang, H. P., Hao, X. F., Liu, X. J., & Meng, J. Crystal structures and elastic properties of superhard IrN₂ and IrN₃ from first principles // Physical Review B. – 2007. – V. 76(5). – P. 054115. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.054115>
17. Evecen, M. First-principles study on the structural, elastic, electronic and vibrational properties of scandium-based intermetallic compounds (ScX, X = Co, Rh, and Ir) under pressure // Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics. 2017. – V. 12(2). – P. 100–108. <https://doi.org/10.1166/jno.2017.2042>

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ, ЭЛЕКТРОННЫХ И МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛУГЕЙСЛЕРОВСКИХ СПЛАВОВ CuNiZ (Z = Al, Ga, Sb, Sn) НА ОСНОВЕ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Н. С. Солтанбек¹, Н. А. Мерәлі^{1*}, А. У. Абуова¹, Ф. У. Абуова¹, Ж. Е. Зәкиева², Т. М. Инербаев¹

¹ *Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан*

² *Международный университет Астана, Астана, Казахстан*

* E-mail для контактов: Nurpeis.93@mail.ru

В данной работе проведено систематическое исследование структурных, электронных и механических свойств полугейслеровских сплавов CuNiZ (Z = Al, Ga, Sb, Sn) на основе теории функционала плотности (DFT). Полученные результаты подтверждают динамическую и механическую стабильность этих сплавов, а также позволяют охарактеризовать их структурную симметрию и природу химических связей. Анализ электронных свойств показал, что сплавы CuNiZ обладают металлическим характером, а расчет упругих модулей и коэффициента Пуассона дал представление об их механической прочности. Дополнительно проведенные расчеты подтвердили преобладание ионной связи в данных сплавах, а также их соответствие основным критериям механической устойчивости. Сплавы CuNiAl, CuNiSb и CuNiSn оказались механически стабильными, при этом для них были определены коэффициенты анизотропии и другие упругие параметры. Данное исследование демонстрирует, что полугейслеровские сплавы CuNiZ являются перспективными кандидатами для использования в качестве функциональных материалов. В частности, их механическая прочность и структурные особенности позволяют рассматривать эти материалы как потенциальные кандидаты для применения в термоэлектрических и спинтронных устройствах.

Ключевые слова: *сплавы полу-Гейслера, структурные свойства, электронные свойства, механическая устойчивость, упругие модули, ионная связь, анизотропия, теория функционала плотности.*

FIRST-PRINCIPLES STUDY OF THE STRUCTURAL, ELECTRONIC, AND MECHANICAL
PROPERTIES OF CuNiZ (Z = Al, Ga, Sb, Sn) HALF-HEUSLER ALLOYS

N. S. Soltanbek¹, N. A. Merali^{1*}, A. U. Abuova¹, F. U. Abuova¹, Z. Y. Zakiyeva², T. M. Inerbaev¹

¹ L. N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

² Astana International University, Astana, Kazakhstan

* E-mail for contacts: Nurpeis.93@mail.ru

In this study, a systematic investigation of the structural, electronic, and mechanical properties of CuNiZ (Z = Al, Ga, Sb, Sn) half-Heusler alloys was carried out based on density functional theory (DFT). The obtained results confirm the dynamical and mechanical stability of these alloys and provide insights into their structural symmetry and bonding nature. The electronic structure analysis revealed that CuNiZ alloys exhibit metallic behavior, while the calculated elastic moduli and Poisson's ratio characterize their mechanical strength. Furthermore, the calculations indicated the dominance of ionic bonding in these alloys and confirmed their compliance with fundamental mechanical stability criteria. The CuNiAl, CuNiSb, and CuNiSn alloys were found to be mechanically stable, with their anisotropy coefficients and other elastic parameters determined. This study demonstrates that CuNiZ half-Heusler alloys are promising candidates for functional materials. In particular, their mechanical robustness and structural properties make them potential candidates for applications in thermoelectric and spintronic devices.

Keywords: half-Heusler alloys, structural properties, electronic properties, mechanical stability, elastic moduli, ionic bonding, anisotropy, density functional theory.