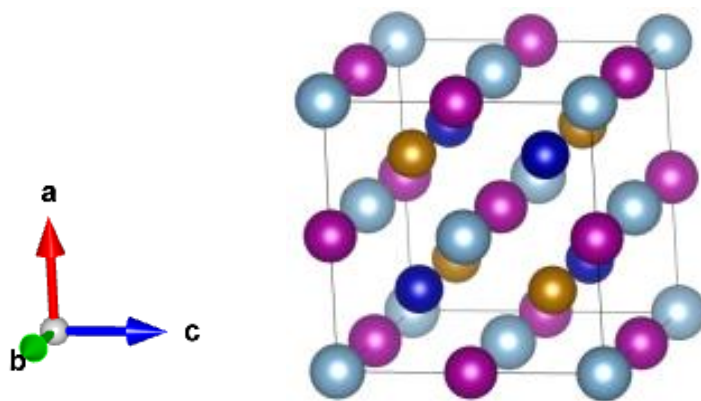
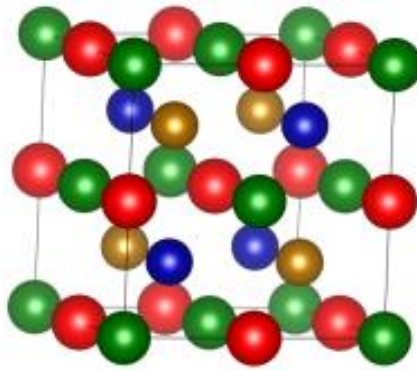
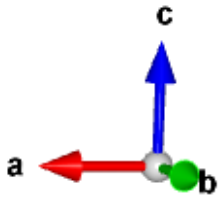


***MnAlFeCo*, *TiAlFeCo* ЖӘНЕ *TiFeCoSi* ТИПТІ ТОЛЫҚ ГЕЙСЛЕР ҚОРЫТПАЛАРЫНЫҢ
МАГНИТТІК ҚАСИЕТТЕРІ****Мерәлі Нұрпейіс Айдарбекұлы**Nurpeis.93@mail.ruЛ.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Физика-техникалық факультеті, техникалық физика
кафедрасының докторанты

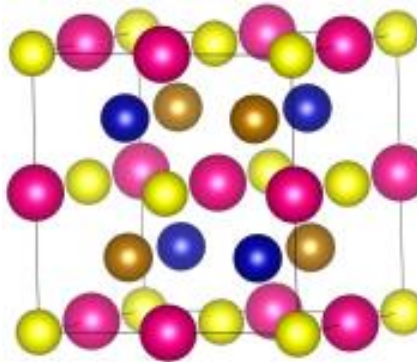
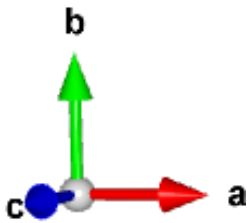
Ғылыми жетекші: ф.-м.ғ.к., доцент Инербаев Т.М.

Гейслер қорытпаларының құрылымы мен қасиеттері жағынан ғылымда ерекше назар аударылады. Қорытпаларының құрылымы жартылай металдардан немесе сілтілі емес спиндік жартылай өткізгіштерден тұрады. Гейслер қорытпалары спинтроникада және техниканың көптеген салаларында қолданылады. Гейслер қорытпасы ковалентті тордың тұрақтылығына ие болып келеді, екінші жағынан тор ішіндегі металдар басқа металдармен ауыстырылады осылайша қорытпа ретінде қолданылады. Гейслер қорытпасы үш негізгі прототиптік топқа жіктеледі: толық(X_2YZ), жартылай(XYZ) және кері(XYZ_2) [1]. Бұл жерде X,Y-ферромагнетик элементтер, ал Z-парамагнетик болып келеді. Олардың барлығы кубтық тәрізді торлы құрылымға ие [4-5]. Жұмыстың мақсаты: *MnAlFeCo*, *TiAlFeCo* және *TiFeCoSi* негізіндегі қоспалардың химиялық құрылымы мен магниттік қасиеттерін зерттеу. *MnAlFeCo* қоспасының ұяшықтарында Mn – 4, Al – 4, Fe – 4, Co – 4 атомдар орналасқан. Сәйкесінше, *TiAlFeCo* және *TiFeCoSi* қоспасының ұяшықтарында да барлық элементтерде 4 атомнан орналасқан.

*MnAlFeCo*



TiAlFeCo



TiFeCoSi

Кесте – 1.

<i>Формула</i>	<i>Кеңістіктік тобы [топ нөмірі]</i>	<i>Қалыптасу энергиясы (эВ)</i>	<i>Band Gap(eV)</i>	<i>Кристалдық құрылымы</i>	<i>Магниттік момент μ_B</i>
MnAlFeCo [2]	F43m [216]	-0,255	0.000	Кубтық	2.998
TiAlFeCo [3]	F43m [216]	-0,581	0,121	Кубтық	0,000
TiFeCoSi [4]	F43m [216]	-0.656	0.000	Кубтық	1.003

MnAlFeCo, *TiAlFeCo* және *TiFeCoSi* типіндегі Гейслер қорытпаларының бірқатар қосылыстары *ab initio* әдістерімен зерттелінді. Химиялық құрамына байланысты атомдардағы магниттік моменттің өзгеруі зерттелінді. Магниттік қасиеттердің өзгеруі жүйеде иондардың заряд күйлерімен анықталатыны көрсетілген.

Пайдаланған әдебиеттер тізімі

1. A. Hirohata, H. Sukegawa, H. Yanagihara, I. Zutic, T. Seki, S. Mizukami, and R. Swaminathan, “Roadmap for Emerging Materials for Spintronic Device Applications,” *IEEE Transactions on Magnetism*, vol. 51, pp. 1–11, Oct 2015.
2. Materials Data on MnAlFeCo (SG:216) by Materials Project,
3. Materials Data on TiAlFeCo (SG:216) by Materials Project,
4. Materials Data on TiFeCoSi (SG:216) by Materials Project,
5. C. Felser, L. Wollmann, S. Chadov, G. H. Fecher, and S. S. P. Parkin, “Basics and prospective of magnetic Heusler compounds,” *APL Materials*, vol. 3, , 2015, P. 041518
6. S. Sanvito, C. Oses, J. Xue, A. Tiwari, M. Zic, T. Archer, P. Tozman, M. Venkatesan, M. Coey, and S. Curtarolo, “Accelerated discovery of new magnets in the heusler alloy family,” *Science Advances*, vol. 3, no. 4, 2017.