

СПИНТРОНИКА САЛАСЫНДА ҚОЛДАНУҒА АРНАЛҒАН ФЕРРИМАГНИТТІК
ГЕЙСЛЕР НАНОҚОРЫТПАЛАРЫНЫҢ КОМПЬЮТЕРЛІК ДИЗАЙНЫСолтанбек Н.С.¹, Мерәлі Н.А.,² Абдуалиев Б.Б.³
Sns.nurgul@mail.ru¹Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар
кафедрасының магистранты, Нұр-Сұлтан, Қазақстан²Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Техникалық физика кафедрасының докторанты, Нұр-
Сұлтан, Қазақстан³Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар
кафедрасының 4 курс студенті, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Ғылыми жетекшісі - Абуова Ф.У.

Гейслер қорытпаларының электрондық, магниттік, және құрылымдық қасиеттері қазіргі таңда әлем бойынша ғалымдардың жоғары қызығушылығын тудырып отыр. Ферми бетінде толық спиндік поляризацияға ие болатын жартылай металл материалдарын спинтроника құрылғыларында қолдану қазіргі таңда үлкен қызығушылық тудыруда. 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 екені анықталды. Жоба аясында $MnAlCo_2$, $MnAl_2Co$, Mn_2AlCo қорытпаларының құрылымдық ерекшеліктері мен $MnAlFeCo$, $TiAlFeCo$ және $TiFeCoSi$ негізіндегі қоспалардың химиялық құрылымы мен магниттік қасиеттерін зерттеліп, олардың магниттік моменттері қоспалардың құрылымынан тікелей тәуелді екені анықталды [2].

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. Сыртқы магниттік өрістің төмендігінің әсерінен энергияны аз жоғалту қасиетіне, және төмен спиндік магниттік моментке ие мұндай материалдар өздерінің ферромагнитті аналогтарымен салыстырғанда шынайы қолданысқа ыңғайлы материалдар қатарына жатады. Гейслер қоспалары жалпы жағдайда Зерттеу үдерісінде Mn_2AlCo қосылысындағы Mn(A) элементінің ең жақын көршісі Mn(B) болғандықтан, және олардың арақашықтығы өте жақын болғандықтан, олардың d-күйлері арасында күшті тура байланыс бар екені анықталды. Демек, магниттік туралану үшін Mn(A) моменті мен Mn(B) моменттері арасында коваленттік механизмбасым болады. Mn(B) атомы Mn(A) атомына қарағанда Co атомымен күшті гидрацияға ие. Атомдардың орналасу реті мен, мөлшері олардың толық қосылыс ретіндегі қасиеттерін біршама өзгерте алады. Спинтроника тұрғысынан электрондардың спиндік поляризациясы және спиндерінің реттілігі маңызды рөл атқарады [3]. Ал $MnAlFeCo$, $TiAlFeCo$ және $TiFeCoSi$ қорытпаларына келсек, олардың құрылымдық қасиеттері ерекше. Бұған дәлел төмендегі 2 кестеде көрсетілген. $MnAlFeCo$ қоспасының ұяшықтарында Mn – 4, Al – 4, Fe – 4, Co – 4 атомдар орналасқан. Сәйкесінше, $TiAlFeCo$ және $TiFeCoSi$ қоспасының ұяшықтарында да барлық элементтерде 4 атомнан орналасқан [4].

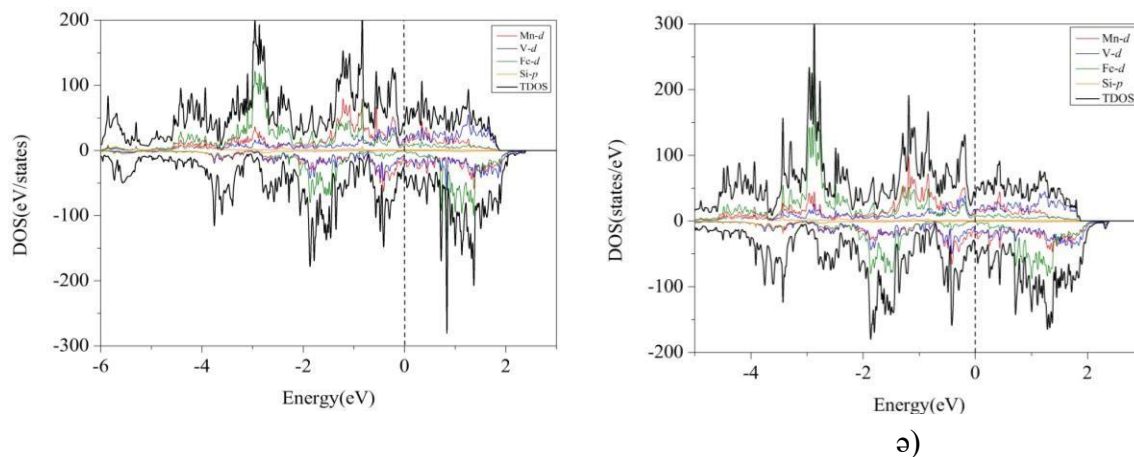
1-кесте - Қоспалардың құрылымдық қасиеттері

Гейслерқоспасы	Кристалдық жүйе	Ұқсастық тобы [топ нөмірі]	Тор параметрлері Å
MnAlCo ₂ [4]	Кубтық, L2 ₁	Fm m [225]	a = 4.060 b = 4.060 c = 4.060 $\alpha = 60^\circ$ $\beta = 60^\circ$ $\gamma = 60^\circ$
MnAl ₂ Co [4]	Тетрагонал, L1 ₀	P4/mmm [123] $\bar{4}$	a = 0.854 b = 0.854 c = 6.046 $\alpha = 90^\circ$ $\beta = 90^\circ$ $\gamma = 90^\circ$
Mn ₂ AlCo [5]	Кубтық, C1 _b	F 3m [216]	a = 4.0020 b = 4.020 c = 4.020 $\alpha = 60^\circ$ $\beta = 60^\circ$ $\gamma = 60^\circ$
MnAlFeCo [5]	Кубтық, C1 _b	F43m [216]	a = 4.031 b = 4.031 c = 4.031 $\alpha = 60^\circ$ $\beta = 60^\circ$ $\gamma = 60^\circ$
TiAlFeCo [5]	Кубтық, C1 _b	F43m [216]	a = 4.235 b = 4.235 c = 4.235 $\alpha = 60^\circ$ $\beta = 60^\circ$ $\gamma = 60^\circ$
TiFeCoSi [6]	Кубтық, C1 _b	F43m [216]	a = 4.587 b = 4.587 c = 4.587 $\alpha = 60^\circ$ $\beta = 60^\circ$ $\gamma = 60^\circ$

Ал MnAlFeCo, TiAlFeCo және TiFeCoSi қорытпаларына келсек, олардың құрылымдық қасиеттері ерекше. Бұған дәлел төмендегі 2 кестеде көрсетілген. *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 [6]. Қарастырылатын келесі қоспалар қатарына *MnVFeSi* жатады. Сонымен қатар, бұл қоспалар синтезделгенімен, әзірге алынған ақпараттар қатарын толық әрі нақты сипаттай алатын мақалалар жарық көрмеген [7]. Сол себепті, аталмыш мақалада бұл қоспалардың әртүрлі концентрациясы нәтижесінде электрондық құрылымымен қатар, қандай магниттік ерекшеліктерге ие болатындығы жайлы талдау жасау үшін, олардың

электрондық толтырылу деңгейі жайлы нақты ақпарат алуымыз шарт. Жоғарыда аталған талдаулар *vasp* бағдарламалық қосымшасы арқылы есептелді. Төменде 1 суретте алынған деректердің бейнелік нұсқасы көрсетілген.



1-сурет - *MnVFeSi* қоспасы концентрациядағы өзгешеліктің магниттік қасиетке әсері (а - *MnVFeSi* үшін Mn1 атомының өзгерісі, ә - *MnVFeSi* үшін Mn2 атомының өзгерісі)

Жоғарыдағы суреттен байқайтынымыздай, Ферми деңгейі маңындағы бос кеңістіктің болмауы бұл қосылыстың өткізгіш болып табылатындығы туралы ақпарат береді. Себебі, жоғары не төмен спиннің екеуінің кем дегенде біреуінде саңылау болса, бұл қоспаның жартылайөткізгіш екендігін дәлелдеуге болар еді. Алайда, заңдылыққа сәйкес, бұл ереже орындалмағандықтан, аталмыш қосылыс түрін өткізгіш деп қана қоймай, оның спинтроника саласындағы қолданысының нақты аймағын анықтауға болады.

Қолданылған әдебиеттер тізімі

1. K. Ozdogan, I. Galanakis, E. Sasioglu, B. Aktas, *Phys. Status Solidi // RRL*, 2007, p. 6-9.
2. I. Galanakis, K. Ozdogan, E. Sasiglu, and B. Aktas, *Phys. Rev. // B* 75, 2007, p. 22-25.
3. T. Graf, C. Felser, S.S.P. Parkin, *Prog. // Solid State Chem.* 39, 2011, p. 1-4.
4. Materials Data on *MnAlCo2* (SG:225) by Materials Project
5. Materials Data on *MnAl2Co* (SG:123) by Materials Project
6. Materials Data on *Mn2AlCo* (SG:216) by Materials Project
7. 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. 41-78.