

ISSN 2518-1726 (Online),
ISSN 1991-346X (Print)

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ҰЛТТЫҚ ҒЫЛЫМ АКАДЕМИЯСЫ

әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінің

Х А Б А Р Л А Р Ы

ИЗВЕСТИЯ

НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК
РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН
Қазақстанның ұлттық университетінің
әл-Фараби

NEWS

OF THE ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN
al-Farabi Kazakh National University

SERIES
PHYSICO-MATHEMATICAL

5 (339)

SEPTEMBER – OKTOBER 2021

PUBLISHED SINCE JANUARY 1963

PUBLISHED 6 TIMES A YEAR

ALMATY, NAS RK

NAS RK is pleased to announce that News of NAS RK. Series physico-mathematical journal has been accepted for indexing in the Emerging Sources Citation Index, a new edition of Web of Science. Content in this index is under consideration by Clarivate Analytics to be accepted in the Science Citation Index Expanded, the Social Sciences Citation Index, and the Arts & Humanities Citation Index. The quality and depth of content Web of Science offers to researchers, authors, publishers, and institutions sets it apart from other research databases. The inclusion of News of NAS RK. Series of chemistry and technologies in the Emerging Sources Citation Index demonstrates our dedication to providing the most relevant and influential content of chemical sciences to our community.

Қазақстан Республикасы Ұлттық ғылым академиясы «ҚР ҰҒА Хабарлары. Физикалық-математикалық сериясы» ғылыми журналының Web of Science-тің жаңаланған нұсқасы Emerging Sources Citation Index-те индекстелуге қабылданғанын хабарлайды. Бұл индекстелу барысында Clarivate Analytics компаниясы журналды одан әрі the Science Citation Index Expanded, the Social Sciences Citation Index және the Arts & Humanities Citation Index-ке қабылдау мәселесін қарастыруда. Web of Science зерттеушілер, авторлар, баспашылар мен мекемелерге контент тереңдігі мен сапасын ұсынады. ҚР ҰҒА Хабарлары. Химия және технология сериясы Emerging Sources Citation Index-ке енуі біздің қоғамдастық үшін ең өзекті және беделді химиялық ғылымдар бойынша контентке адалдығымызды білдіреді.

НАН РК сообщает, что научный журнал «Известия НАН РК. Серия физико-математическая» был принят для индексирования в Emerging Sources Citation Index, обновленной версии Web of Science. Содержание в этом индексировании находится в стадии рассмотрения компанией Clarivate Analytics для дальнейшего принятия журнала в the Science Citation Index Expanded, the Social Sciences Citation Index и the Arts & Humanities Citation Index. Web of Science предлагает качество и глубину контента для исследователей, авторов, издателей и учреждений. Включение Известия НАН РК в Emerging Sources Citation Index демонстрирует нашу приверженность к наиболее актуальному и влиятельному контенту по химическим наукам для нашего сообщества.

Бас редактор:

МҰТАНОВ Ғалымқайыр Мұтанұлы, техника ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, ҚР БҒМ ҒК «Ақпараттық және есептеу технологиялары институты» бас директорының м.а. (Алматы, Қазақстан) Н=5

Редакция алқасы:

ҚАЛИМОЛДАЕВ Мақсат Нұрәділұлы (бас редактордың орынбасары), физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, ҚР БҒМ ҒК «Ақпараттық және есептеу технологиялары институты» бас директорының кеңесшісі, зертхана меңгерушісі (Алматы, Қазақстан) Н=7

БАЙГУНЧЕКОВ Жұмаділ Жанабайұлы (бас редактордың орынбасары), техника ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, Кибернетика және ақпараттық технологиялар институты, Сағпаев университетінің Қолданбалы механика және инженерлік графика кафедрасы, (Алматы, Қазақстан) Н=3

ВОЙЧИК Вальдемар, техника ғылымдарының докторы (физика), Люблин технологиялық университетінің профессоры (Люблин, Польша) Н=23

БОШКАЕВ Қуантай Авғазыұлы, Ph.D. Теориялық және ядролық физика кафедрасының доценті, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан) Н-10

QUEVEDO Hemando, профессор, Ядролық ғылымдар институты (Мехико, Мексика) Н=28

ЖҮСПОВ Марат Абжанұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, теориялық және ядролық физика кафедрасының профессоры, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан) Н=7

КОВАЛЕВ Александр Михайлович, физика-математика ғылымдарының докторы, Украина ҰҒА академигі, Қолданбалы математика және механика институты (Донецк, Украина) Н=5

МИХАЛЕВИЧ Александр Александрович, техника ғылымдарының докторы, профессор, Беларусь ҰҒА академигі (Минск, Беларусь) Н=2

РАМАЗАНОВ Тілекқабұл Сәбитұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінің ғылыми-инновациялық қызмет жөніндегі проректоры, (Алматы, Қазақстан) Н=26

ТАКИБАЕВ Нұрғали Жабағаұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан) Н=5

ТИГИНЯНУ Ион Михайлович, физика-математика ғылымдарының докторы, академик, Молдова ғылым Академиясының президенті, Молдова техникалық университеті (Кишинев, Молдова) Н=42

ХАРИН Станислав Николаевич, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, Қазақстан-Британ техникалық университеті (Алматы, Қазақстан) Н=10

ДАВЛЕТОВ Асқар Ербуланович, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан) Н=12

КАЛАНДРА Пьетро, Ph.D (физика), Наноқұрылымды материалдарды зерттеу институтының профессоры (Рим, Италия) Н=26

«ҚР ҰҒА Хабарлары.

Физика-математикалық сериясы».

ISSN 2518-1726 (Online),

ISSN 1991-346X (Print)

Меншіктеуші: «Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы» РҚБ (Алматы қ.). Қазақстан Республикасының Ақпарат және қоғамдық даму министрлігінің Ақпарат комитетінде 14.02.2018 ж. берілген **№ 16906-Ж** мерзімдік басылым тіркеуіне қойылу туралы куәлік.

Тақырыптық бағыты: *математика, информатика, механика, физика, ғарыштық зерттеулер, астрономия, ионосфера.*

Мерзімділігі: жылына 6 рет.

Тиражы: 300 дана.

Редакцияның мекен-жайы: 050010, Алматы қ., Шевченко көш., 28, 219 бөл., тел.: 272-13-19

<http://www.physico-mathematical.kz/index.php/en/>

© Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы, 2021

Типографияның мекен-жайы: «Аруна» ЖК, Алматы қ., Мұратбаев көш., 75.

Главный редактор:

МУТАНОВ Галимкаир Мутанович, доктор технических наук, профессор, академик НАН РК, и.о. генерального директора «Института информационных и вычислительных технологий» КН МОН РК (Алматы, Казахстан) Н=5

Редакционная коллегия:

КАЛИМОЛДАЕВ Максат Нурадилович, (заместитель главного редактора), доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК, советник генерального директора «Института информационных и вычислительных технологий» КН МОН РК, заведующий лабораторией (Алматы, Казахстан) Н=7

БАЙГУНЧЕКОВ Жумадил Жанабаевич, (заместитель главного редактора), доктор технических наук, профессор, академик НАН РК, Институт кибернетики и информационных технологий, кафедра прикладной механики и инженерной графики, университет Сатпаева (Алматы, Казахстан) Н=3

ВОЙЧИК Вальдемар, доктор технических наук (физ.-мат.), профессор Люблинского технологического университета (Люблин, Польша) Н=23

БОШКАЕВ Куантай Авгазыевич, доктор Ph.D, преподаватель, доцент кафедры теоретической и ядерной физики, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан) Н=10

QUEVEDO Hemando, профессор, Национальный автономный университет Мексики (UNAM), Институт ядерных наук (Мехико, Мексика) Н=28

ЖУСУПОВ Марат Абжанович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической и ядерной физики, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан) Н=7

КОВАЛЕВ Александр Михайлович, доктор физико-математических наук, академик НАН Украины, Институт прикладной математики и механики (Донецк, Украина) Н=5

МИХАЛЕВИЧ Александр Александрович, доктор технических наук, профессор, академик НАН Беларуси (Минск, Беларусь) Н=2

РАМАЗАНОВ Тлеккабул Сабитович, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК, проректор по научно-инновационной деятельности, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан) Н=26

ТАКИБАЕВ Нургали Жабагаевич, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан) Н=5

ТИГИНЯНУ Ион Михайлович, доктор физико-математических наук, академик, президент Академии наук Молдовы, Технический университет Молдовы (Кишинев, Молдова) Н=42

ХАРИН Станислав Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК, Казахстанско-Британский технический университет (Алматы, Казахстан) Н=10

ДАВЛЕТОВ Аскар Ербуланович, доктор физико-математических наук, профессор, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан) Н=12

КАЛАНДРА Пьетро, доктор философии (Ph.D, физика), профессор Института по изучению наноструктурированных материалов (Рим, Италия) Н=26

«Известия НАН РК.

Серия физико-математическая».

ISSN 2518-1726 (Online),

ISSN 1991-346X (Print)

Собственник: Республиканское общественное объединение «Национальная академия наук Республики Казахстан» (г. Алматы).

Свидетельство о постановке на учет периодического печатного издания в Комитете информации Министерства информации и общественного развития Республики Казахстан № 16906-Ж выданное 14.02.2018 г.

Тематическая направленность: *математика, информатика, механика, физика, космические исследования, астрономия, ионосфера.*

Периодичность: 6 раз в год.

Тираж: 300 экземпляров.

Адрес редакции: 050010, г. Алматы, ул. Шевченко, 28, оф. 219, тел.: 272-13-19

<http://www.physico-mathematical.kz/index.php/en/>

© Национальная академия наук Республики Казахстан, 2021

Адрес типографии: ИП «Аруна», г. Алматы, ул. Муратбаева, 75.

Editor in chief:

MUTANOV Galimkair Mutanovich, doctor of technical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, acting director of the Institute of Information and Computing Technologies of SC MES RK (Almaty, Kazakhstan) H=5

Editorial board:

KALIMOLDAYEV Maksat Nuradilovich (Deputy Editor-in-Chief), doctor in Physics and Mathematics, Professor, Academician of NAS RK, Advisor to the General Director of the Institute of Information and Computing Technologies of SC MES RK, Head of the Laboratory (Almaty, Kazakhstan) H=7

BAYGUNCHEKOV Zhumadil Zhanabayevich, (Deputy Editor-in-Chief), doctor of Technical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, Institute of Cybernetics and Information Technologies, Department of Applied Mechanics and Engineering Graphics, Satbayev University (Almaty, Kazakhstan) H=3

WOICIK Waldemar, Doctor of Phys.-Math. Sciences, Professor, Lublin University of Technology (Lublin, Poland) H=23

BOSHKAYEV Kuantai Avgazievich, PhD, Lecturer, Associate Professor of the Department of Theoretical and Nuclear Physics, Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan) H=10

QUEVEDO Hemando, Professor, National Autonomous University of Mexico (UNAM), Institute of Nuclear Sciences (Mexico City, Mexico) H=28

ZHUSSUPOV Marat Abzhanovich, Doctor in Physics and Mathematics, Professor of the Department of Theoretical and Nuclear Physics, al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan) H=7

KOVALEV Alexander Mikhailovich, Doctor in Physics and Mathematics, Academician of NAS of Ukraine, Director of the State Institution «Institute of Applied Mathematics and Mechanics» DPR (Donetsk, Ukraine) H=5

MIKHALEVICH Alexander Alexandrovich, Doctor of Technical Sciences, Professor, Academician of NAS of Belarus (Minsk, Belarus) H=2

RAMAZANOV Tlekkabul Sabitovich, Doctor in Physics and Mathematics, Professor, Academician of NAS RK, Vice-Rector for Scientific and Innovative Activity, al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan) H=26

TAKIBAYEV Nurgali Zhabagaevich, Doctor in Physics and Mathematics, Professor, Academician of NAS RK, al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan) H=5

TIGHINEANU Ion Mikhailovich, Doctor in Physics and Mathematics, Academician, Full Member of the Academy of Sciences of Moldova, President of the AS of Moldova, Technical University of Moldova (Chisinau, Moldova) H=42

KHARIN Stanislav Nikolayevich, Doctor in Physics and Mathematics, Professor, Academician of NAS RK, Kazakh-British Technical University (Almaty, Kazakhstan) H=10

DAVLETOV Askar Erbulanovich, Doctor in Physics and Mathematics, Professor, al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan) H=12

CALANDRA Pietro, PhD in Physics, Professor at the Institute of Nanostructured Materials (Monterotondo Station Rome, Italy) H=26

News of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan. Physical-mathematical series.
ISSN 2518-1726 (Online),
ISSN 1991-346X (Print)

Owner: RPA «National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan» (Almaty). The certificate of registration of a periodical printed publication in the Committee of information of the Ministry of Information and Social Development of the Republic of Kazakhstan No. 16906-Ж, issued 14.02.2018

Thematic scope: *mathematics, computer science, mechanics, physics, space research, astronomy, ionosphere.*

Periodicity: 6 times a year.

Circulation: 300 copies.

Editorial address: 28, Shevchenko str., of. 219, Almaty, 050010, tel. 272-13-19

<http://www.physico-mathematical.kz/index.php/en/>

NEWS

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

PHYSICO-MATHEMATICAL SERIES

ISSN 1991-346X

Volume 5, Number 339 (2021), 6–16

<https://doi.org/10.32014/2021.2518-1726.79>

УДК 548.4:539. 538.972

Абуова Ф.У.¹, Инербаев Т.М.^{1,2}, Абуова А.У.¹, Каптагай Г.А.^{3*}, Мерәлі Н.¹

¹ Евразийский национальный университет им. Л.Н.Гумилева, Нур-Султан, Казахстан;

² Южно-Китайский педагогический университет, Гуанчжоу, Китай;

³ Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан.

E-mail: gulbanu.kaptagai@mail.ru

СТРУКТУРНЫЕ, ЭЛЕКТРОННЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВАМ $n_2\text{CoZ(Al/Ga)}$ ПРИ ЛЕГИРОВАНИИ ВАНАДИЕМ

Аннотация. В настоящей работе мы исследуем структурные, электронные, магнитные свойства сплавов Гейслера $\text{Mn}_2\text{Co}_{1-x}\text{V}_x\text{Z}$ ($Z = \text{Ga, Al}$ и $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$). Обнаружено, что по мере роста концентрации ванадия параметры решетки увеличиваются линейно. Соединение Mn_2CoGa и Mn_2VG а имеют намагниченность 2.00 и 2.01 $\mu_B/\text{f.u.}$ соответственно. Почти полная компенсация магнитного момента была достигнута для сплава $\text{Mn}_2\text{Co}_{1-x}\text{V}_x\text{Z}$ ($Z = \text{Ga, Al}$) при $x=0.5$. Данный эффект объясняется ферромагнитным упорядочиванием магнитных моментов ионов Mn, V и Co. Эффект замещения приводит к сужению запрещенной зоны для электронных состояний со спином вниз по мере роста $0 \leq x \leq 0.5$. Дальнейший рост x приводит к уширению запрещенной зоны. При полной компенсации магнитного момента в исследуемых системах ($x=0.5$) для электронных состояний со спином вниз формируется область пониженной плотности электронных состояний вблизи уровня Ферми.

Энергетические распределения электронных состояний вышеуказанных структур при замещении V на Co при уменьшении общего числа электронов от 26 до 22 формируют отрицательный магнитный момент структуры, который в свою очередь приводит перемещению энергетической щели в высокоспиновую зону.

Полный магнитный момент сплава $\text{Mn}_2\text{Co}_{1-x}\text{V}_x\text{Z}$ ($Z = \text{Ga, Al}$), уменьшается с убыванием числа валентных электронов на атом e/a . Рассчитанные значения магнитных моментов сплавов соответствуют ожидаемым значениям для полуметаллических сплавов полного Гейслера по правилу Слейтера-Полинга. Результаты исследования важны для практических приложений при изготовлении спинтронных устройств с использованием полностью скомпенсированных полуметаллических ферромагнетиков на основе Mn_2CoZ ($Z=\text{Ga, Al}$).

Ключевые слова: сплавы Гейслера, ферромагнитное упорядочивание, бесщелевые спиновые полупроводники, DFT.

Введение. В последние годы сплавы Гейслера на основе Mn привлекают большое внимание благодаря своим уникальным свойствам и возможным применениям во многих областях техники. Одним из важных применений сплавов Гейслера на основе Mn является их использование в области спинтроники – области электроники, где перенос энергии и информации осуществляется не электрическим током, а током спинов. До сих пор сообщалось, что довольно много сплавов Гейслера на основе Mn являются полуметаллами или бесщелевыми спиновыми полупроводниками. Полуметаллические материалы демонстрируют высокую спиновую поляризацию, достигающую 100% вблизи уровня Ферми (E_F). Эти свойства позволяют рассматривать их как материалы для магнитных сенсоров или энергонезависимых запоминающих устройств с произвольным доступом. Эти сплавы не создают дипольных полей и чрезвычайно устойчивы к внешним магнитным полям по сравнению с их ферромагнитными аналогами. Таким образом, их использование в устройствах значительно снижает энергопотери.

Бесщелевые спиновые полупроводники представляет собой промежуточное состояние между хорошо известными полуметаллическими ферромагнетиками и бесщелевыми полупроводниками. В случае бесщелевых спиновых полупроводников один спиновой канал имеет открытую запрещенную зону вблизи E_F , как полуметалл, а другой – спиновой канал имеет нулевую ширину как бесщелевой полупроводник. Таким образом, проводящие электроны или дырки не только на 100% поляризованы по спину, но и легко могут быть переведены в возбужденное состояние. Среди этих сплавов Гейслера на основе Mn особенно интересны Mn_2CoZ ($Z = Al, Ga$), поскольку они не только теоретически предсказаны как полуметаллы / бесщелевые спиновые полупроводники, но также могут быть реализованы экспериментально [1].

В теоретическом исследовании [2] обсуждалось влияние легирования кобальтом на полуметаллическое свойство и спин бесщелевой полупроводниковой характер структуры Mn_2CoAl . Увеличение концентрации кобальта от $x=0$ до 1 привело повышению общей намагниченности структуры и полному исчезновению энергетической щели. Авторами работ [3,4] было обнаружено, что при внедрении примесей Fe и Cr в соединение Mn_2CoAl не меняет ее полуметаллическое свойство, в то же время для структуры Mn_2CoGa наблюдалось усиление полуметаллического свойства. Несмотря на многочисленные исследования с целью описания электронной и магнитных свойств сплавов Гейслера, данная задача остается полностью не раскрытым.

Полностью скомпенсированный ферримагнетизм в полуметаллах имеет особый характер. Плотности состояний для электронов с разнонаправленными спинами не одинаковы, как в обычных антиферромагнетиках, но при этом материал имеет нулевой средний магнитный момент. Для предсказания магнитного момента часто используется правило Слейтера - Полинга [5], согласно которому суммарный магнитный момент в полуметаллических полных сплавах Гейслера можно найти по формуле $M_t = Z_t - 24$, где Z_t – общее количество валентных электронов на элементарную ячейку, M_t – магнитный момент элементарной ячейки.

Недавно теоретически было предсказано существование несколько полностью скомпенсированных ферримагнетиков в системах Mn-Co-V-Al, Mn-Co-V-Si и Mn-Co-V-Ga [6, 7]. Некоторые из предсказанных полуметаллических ферримагнетиков $Mn_{2-x}Co_xVAl$ были синтезированы и исследованы [8, 9], но их главным недостатком было низкое значение температуры Кюри, что является препятствием для применения сплавов в области спинтроники. Например, для состава $MnCoVAl$ температура Кюри T_C составляет 105 K [10]. Более подходящим для применения в качестве спинтронного материала является $Mn_{1.5}FeV_{0.5}Al$ с температурой Кюри $T_C = 355$ K и практически 100-% спиновой поляризацией [11]. Наибольшие значения температуры Кюри были достигнуты для системы Mn-Co-V-Ga, где они превышают 690 K для составов $Mn_2V_{1-x}Co_xGa$ ($x = 0; 0.25; 0.5; 0.75; 1$). Наблюдаемые данные для сплавов T_C являются самыми высокими среди полностью скомпенсированных ферримагнетиков на основе Mn_2V . Компенсация магнитного момента без значительного уменьшения T_C указывает на то, что замещение ванадия кобальтом не ослабляет обменное взаимодействие в сплавах Mn_2VGa [12]. Напротив, замещение марганца кобальтом приводит к уменьшению температуры Кюри в сплавах $Mn_{2-x}Co_xVGa$ ($x = 0.5; 0.75; 1$), вплоть до 171 K для $MnCoVGa$ [13]. В рамках приближения среднего поля было обнаружено, что антиферромагнитная связь Mn-V является наиболее сильным взаимодействием и вносит большой вклад в температуру Кюри, чем ферромагнитные связи Mn-Mn и V-V [14]. В сплавах $Mn_{2-x}Co_xVGa$ ($x = 0.5; 0.75; 1$) величина температуры Кюри коррелирует с величиной суммарного магнитного момента. При увеличении концентрации кобальта суммарный магнитный момент на формульную единицу уменьшается, что сопровождается к уменьшением T_C . Кроме того, температура Кюри для Co_2VGa почти на 300 K меньше, чем у Mn_2VGa , следовательно слабое ферромагнитное взаимодействие между атомами Co и V по сравнению с антиферромагнитным взаимодействием Mn и V приводит к снижению температуры магнитного упорядочения.

Комбинированный анализ нейтронной дифракции и *ab initio* расчетов выявили кристаллическую структуру и магнитную конфигурацию, которые не могли быть определены с помощью дифракции рентгеновских лучей и магнитных измерений. Данные нейтронной дифракции и подробные *ab initio* исследования подтвердили структуру $L2_1$ для Mn_2VGa и структуру X_a для Mn_2CoGa . Как было установлено, причиной компенсации магнитного момента в $Mn_2(V_{1-x}Co_x)Ga$, является антипараллельная связь между ферромагнитно ориентированными парами атомов Mn, Co, V [15].

С учетом вышеизложенного можно заключить, что исследования, направленные на поиск полностью скомпенсированных полуметаллических ферримагнетиков в сплавах Гейслера с высокой температурой Кюри, являются в настоящий момент актуальной задачей. К настоящему времени теоретически не исследованы составы с замещением кобальта на ванадий. С одной стороны,

антиферромагнитное взаимодействие Mn-V является наиболее сильным в сплавах Mn-Co-V-Ga и отвечает за высокие значения температуры Кюри, с другой стороны, замещение марганца на кобальт приводит к ослаблению обменного взаимодействия и снижению величины точки Кюри. Вместе с этим замена ванадия на кобальт не ослабляет магнитного взаимодействия в этих сплавах. В данной работе мы устанавливаем закономерности влияния замещения кобальта ванадием в сплавах Mn-Co-V-Ga, и в Mn-Co-V-Al ($x = y = 0; 0.1; \dots; 0.5$) на их структурные, магнитные и электронные свойства исследуемых сплавов.

Материалы и методы. Расчеты электронной структуры проводились методом функционала плотности в базисе плоских волн, как это реализовано в программном коде VASP. Использовался метод проекционных присоединенных волн (projector augmented wave – PAW) [16]. Первопринципные вычисления были проведены в рамках аппроксимации обобщенного градиента (Perdew-Burke-Ernzerh of generalized gradient approximation PBE-GGA) для обменно-корреляционного потенциала [17-20]. В расчетах для всех случаев использовалась отсечка базисной плоской волны 500 эВ. Для интегрирования зоны Брюллиена в обратном пространстве использовалась схема Монкхорста - Пака плотностью $4 \times 4 \times 4$. Эти параметры обеспечивали хорошую сходимость по полной энергии. Допуск сходимости для расчетов был выбран как разница по полной энергии в пределах 10^{-6} эВ/атом. Были использованы следующие электронные конфигурации для псевдо потенциалов: Mn($3d^6 4s^1$), Co($3d^8 4s^1$), V($3d^4 4s^1$), Ga($3d^2 3p^1$), Al ($3s^2 3p^1$), соответственно. Для того, чтобы выполнить оптимизацию кристаллической структуры, использовалась суперячейка $2 \times 2 \times 2$, состоящая из 128 атомов для структуры $L2_1$ (пространственная группа симметрии F-43m №216, прототип Hg₂CuTi).

Результаты исследования. Структура. Сплавы Гейслера кристаллизуются в высокоупорядоченную кубическую структуру и имеют стехиометрический состав X_2YZ , где X и Y - элементы переходных металлов, а Z - элемент основной группы. В сплавах Гейслера есть четыре позиции, а именно A (0, 0, 0), B (0.25, 0.25, 0.25), C (0.5, 0.5, 0.5) и D (0.75, 0.75, 0.75) соответственно. Элементы переходного металла X, Y входят в узлы A, B, C, а элемент Z основной группы всегда входит в узлы D в кубической решетке [21].

Всего в элементарной ячейке содержится 8 атомов Mn, 4 атома Co и 4 атома элемента Z. Сплав Гейслера Mn_2CoZ содержит два симметрично - неэквивалентных атома Mn. Приняты обозначения Mn1 (Mn2) соответствуют атомам марганца, расположенным в своих позициях (в позициях подрешетки алюминия) соответственно. Атомы марганца, расположенные в подрешетке алюминия, по-другому называют избыточными атомами марганца. Атомы Co и Z занимают узлы решетки, симметрично - эквивалентные между собой. Учитывался ферромагнитная (ФИМ) магнитно-спиновая конфигурация. В случае ферромагнитного порядка, магнитные моменты избыточных атомов марганца (Mn2) располагались в подрешетке Z и были «перевернуты» по отношению к моментам атомов Mn1, и в одном направлении с атомами Co расположенных в своих узлах.

Для определения характера электронных и магнитных свойств структур $Mn_2Co_{1-x}V_xZ$ ($Z = Ga, Al$), обусловленных замещением кобальта ванадием, в расчетной ячейке были выделены все возможные координационные сферы атомов кобальта. Все координационные сферы атомов кобальта были расщеплены на под сферы. Так, при $x = 0.25$ 1, 4 и 3 атомы кобальта под сфер, соответственно первой, третьей и четвертой координационных сфер кобальта были замещены атомами ванадия. Также при $x = 0.5$ 4, 8 и 4 атомы кобальта под сфер, соответственно, первой, третьей и четвертой координационных сфер кобальта были замещены атомами ванадия. (Так при $x = 0.25$ 1, 4 и 3 и $x = 0.5$ 4, 8 и 4 атомы кобальта под сфер, соответственно, первой, третьей и четвертой координационных сфер кобальта были замещены атомами ванадия.) В случае концентрации 0,75 4, 8 и 9, 3 атомы кобальта под сфер, соответственно, первой, второй и третьей, четвертой координационных сфер кобальта были замещены атомами ванадия. В таблице 1 указано количество атомов ванадия, расположенных в подсферах указанных координационных сфер атомов кобальта в соответствии с концентрацией замещения.

Таблица 1. Количество атомов ванадия расположенных в подсферах указанных координационных сфер в соответствии с концентрацией замещения.

$Mn_2Co_{1-x}V_xZ$ ($Z = Ga, Al$ и $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$).	№ координационной сферы			
x	1	2	3	4

0.25	1		4	3
0.5	4		8	4
0.75	4	8	9	3

На рисунке 1 представлены рассчитанные зависимости равновесных параметров решётки, полных магнитных моментов от концентрации атомов V в сплавах $Mn_2Co_{1-x}V_xZ$ ($Z = Ga, Al$) ($0 \leq x \leq 1$). Сплав Mn_2CoGa имеет постоянную решетки $a = b = c = 5.762 \text{ \AA}$ (экс. 5.877 \AA), что больше, чем у Mn_2CoAl 5.729 \AA (экс. 5.819 \AA). Как видно, параметр решетки линейно возрастает при увеличении концентрации V для каждой из исследуемых структур, что можно объяснить разностью атомных радиусов V (1.34 \AA) и Co (1.25 \AA). Данный результат находится в хорошем согласии с экспериментальными результатами [10]. Полученные результаты были использованы для дальнейших расчетов спинового магнитного момента.

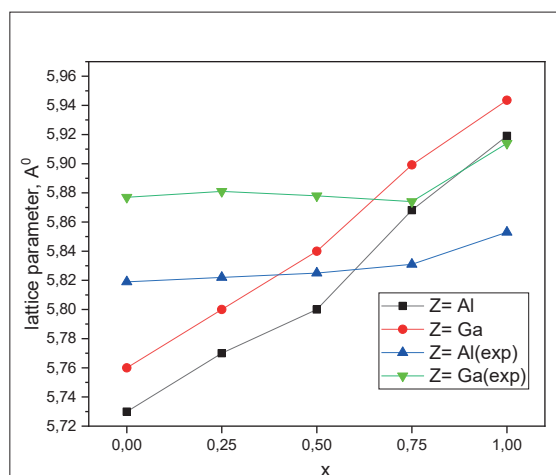


Рис.1 Изменение параметра решетки $Mn_2Co_{1-x}V_xZ$ ($Z = Ga, Al$ и $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) сплавы Гейслера сравнение теоретических данных с экспериментальными

Электронные свойства. На рисунке 2а,б показаны полные и парциальные ПЭС сплавов Mn_2CoZ ($Z = Al, Ga$), вычисленные с использованием равновесных параметров кристаллической решетки. Можно отметить, что полные ПЭС сплавов Mn_2CoZ ($Z = Al, Ga$) разделены на подзоны с проекциями спина «вверх» и «вниз». Основная же часть ПЭС находится при более высоких энергиях и, в основном, связана с $3d$ -состояниями Mn и Co. Можно также видеть, что во всех случаях валентная зона характеризуется преимущественно $3d$ -состояниями Co и в меньшей мере вкладом от элемента Mn. В случае зоны проводимости, наоборот, можно отметить вклады от $3d$ -состояний Mn больше, чем Co. Ясно видно, что вычисленные ПЭС подзоны с проекцией спина «вверх» всех исследуемых сплавов проявляют металлический характер из-за заполненной зоны на уровне Ферми. Кроме того, наибольшая плотность состояний спин-вверх наблюдается для сплавов Mn_2CoZ ($Z = Al, Ga$). Следует также отметить, что плотность состояний спин «вверх» на уровне E_F слегка увеличивается с уменьшением отношения числа валентных электронов, приходящихся на атом (e/a), а именно, когда атомы Co замещаются атомами V. При замещении Co на V щель в подзоне спин «вниз» сужается и когда концентрация атомов ванадия достигает значение $x=0.5$ формируется состояние с псевдо-щелью (рис 2с,д), когда вблизи энергии Ферми плотность состояний электронов со спином вниз ненулевая и материал формально становится металлом. При этом плотность состояний электронов со спином вниз много меньше плотности состояний со спином вверх вблизи E_F .

Из кривых парциальных ПЭС $3d$ -состояний Mn и Co следует, что происхождение энергетической щели связано с $d-d$ гибридизацией между $3d$ -орбиталями ближайших соседей Mn-Mn, а также между $3d$ -орбиталями следующих ближайших соседей Mn-Co подзоны с проекцией спина «вниз» из-за расщепления электронных уровней.

Теперь остановимся на ширине запрещенной зоны соединений Mn_2CoZ ($Z = Al, Ga$). Мы ясно видим, что ширина запрещенной зоны структуры $Mn_2Co_{1-x}V_xAl$ (0.457 эВ) при $x=0$ больше, чем ширина запрещенной зоны $Mn_2Co_{1-x}V_xGa$ (0.250 эВ). Лю и др. авторы [22] показали, что чем меньше значение постоянной решетки, тем больше ширина запрещенной зоны и наоборот, что хорошо согласуется с нашим случаем.

Ширина щели в значительной степени зависит от гибридизации делокализованных p -электронов от атомов Z и локализованных d -электронов атомов марганца и кобальта, так ширина запрещенной зоны $Mn_2Co_{1-x}V_xAl$ больше, чем у $Mn_2Co_{1-x}V_xGa$.

Для атомов Z парциальные ПЭС практически идентичны для обоих направлений спина. Эти низко валентные зоны как для состояния спин «вверх», так и для состояния спин «вниз» не подвержены обменному взаимодействию Co-Mn или Mn-Mn. Следовательно, s -электроны мало влияют на магнитный момент и образование полуметаллической запрещенной зоны.

На рисунках 2e, f показаны рассчитанные значения полной и парциальной плотности состояний для сплавов Mn_2VZ (Al, Ga). Состояния около -4 эВ в основном являются p -состояниями атомов Al в занятых валентных состояниях. Над p -электронами находятся d -состояния атомов Mn и V, которые простираются от 4 до 2 эВ и гибридизуются друг с другом. Видно, что d -состояния широки по шкале энергий. В основном это связано с сильной гибридизацией $3d$ -металлов, вкладом от p -электронов Z -атомов.

Ясно, что на уровне Ферми в состоянии спин «вверх» Mn_2VZ (Al, Ga) существуют энергетические щели, а в состоянии спин «вниз» наблюдается большой пик ПЭС. Это приводит к 100%-ной спиновой поляризации на E_F в их спиновых состояниях и делает Mn_2VAl полуметаллическим.

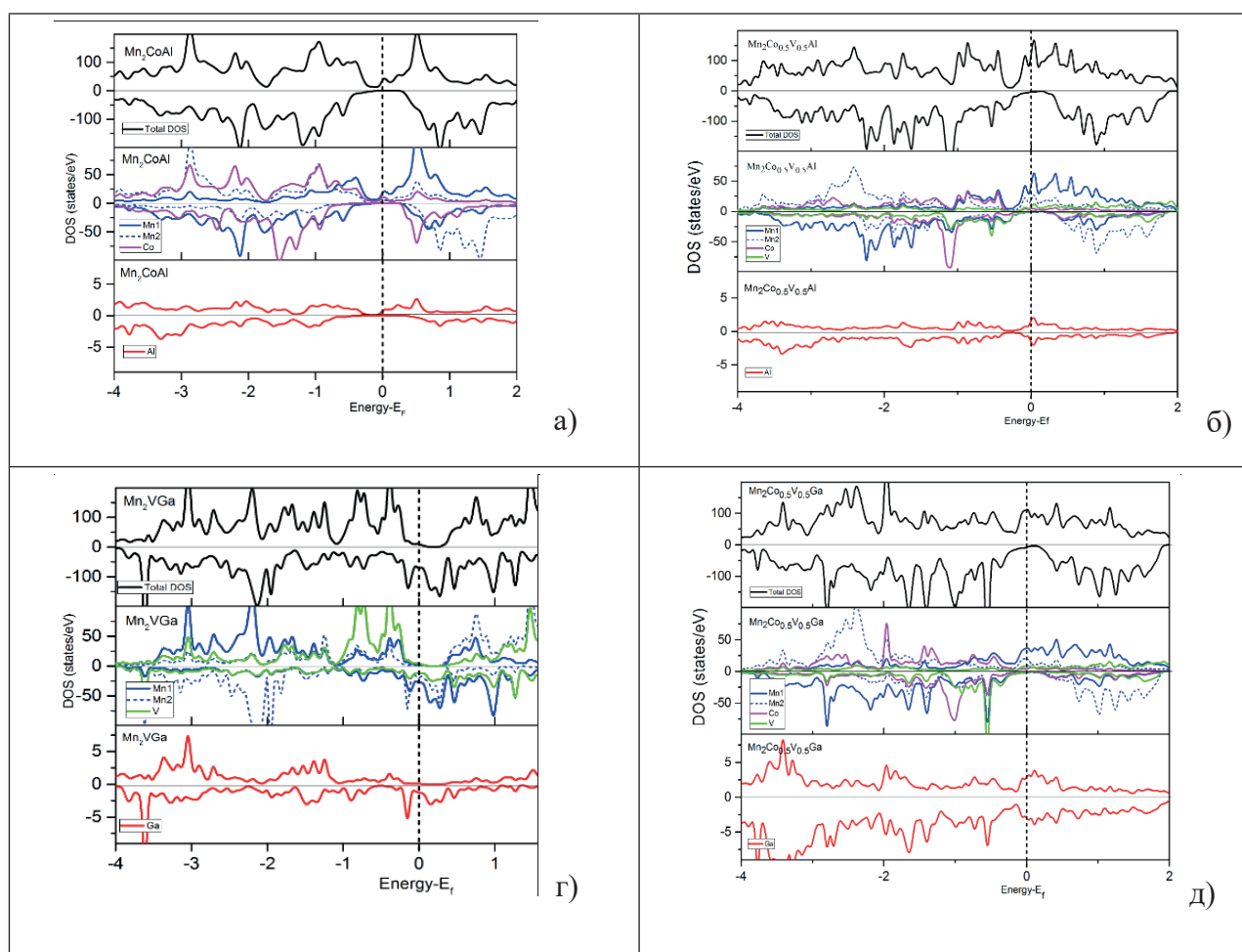


Рис 2. Полные и парциальные ПЭС сплавов Mn_2CoZ ($Z = Al, Ga$ при $x=0$ $Mn_2Co_xV_{1-x}Al$ б) $Mn_2Co_xV_{1-x}Ga$ при $x=0.5$ в) $Mn_2Co_{0.5}V_{0.5}Al$ д) $Mn_2Co_{0.5}V_{0.5}Ga$

Магнитные свойства. Рассчитанные значения намагниченности сплавов $Mn_2Co_{1-x}V_xGa$, (S-P значение) для составов $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75$ и 1 составляет 2.00 (2), 1 (1), 0.06 (0), 1.05 (-1) и 2.01 (-2) $\mu_B/f.u.$, соответственно (таб.2).

Таблица 2 а. Магнитный момент на атомах и ячейке, рассчитанный молекулярный магнитный

момент M_C и экспериментальный молекулярный магнитный момент M_E соединения Mn_2CoGa (a) Mn_2CoAl (b) при легировании V в μ_B .

$Mn_2CoZ(Ga)$	$Mn(1) (\mu_B)$	$Mn(2) (\mu_B)$	$Co (\mu_B)$	$Ga (\mu_B)$	$V (\mu_B)$	$M_C (\mu_B)$	$M_E (\mu_B)$	S/P
X=0	-1.776 (3.26) ² (3.23) ²⁹ (-1.3611) ¹²	2.829 (-2.16) ² (-2.07) ²⁹ (2.4897) ¹²	0.942 (0.90) ² (0.84) ²⁹ (0.9131) ¹²	-0.030 (0.00) ² (-0.02) ²⁹ (-0.0152) ¹²	-	2.00 (2.00) ² (1.90) ²⁹	(1.98) ² (1.97) ²⁹ (2.05) ²⁰	2
X=8	-1,744	2,622	0,927	-0,020	-1,532	1	1.11 ²⁰	1
X=16	-1.649 -2.293	2.444	0.823	-0.015	-1.577	0.06	0.10 ²⁰	0
X=24	1,9692	-1,847	-0,725	-0,017	1,344	1,05	0.97 ²⁰	-1
X=32	2,235	-2,043	-	-0,011	1,646	2,01	1.80 ²⁰	-2

Полученное значение магнитного момента на атомах $Mn1(-1.78\mu_B)$ и $Mn2(2.83\mu_B)$ незначительно выше по сравнению с результатами [4], но оно в сплавах $Mn_2V_{1-x}Co_xGa$ имеет то же направление, что и для $Mn1$, $Mn2$, но по сравнению [22, 23] значение и направление магнитных моментов сильно разнятся. Отметим, что магнитные моменты $Mn2(2.83\mu_B)$, $Co(0.94\mu_B)$ антипараллельны моменту на атомах $Mn1(-1,78\mu_B)$.

Дальнейшее повышение концентрации атомов V приводит к изменению значения магнитного момента на атомах $Mn1 (-1.97 \mu_B)$ и $Mn2 (2.44 \mu_B)$, соответственно. Также уменьшается значение магнитного момента на атомах $Co(0.82 \mu_B)$ и незначительное изменение происходит магнитного момента на атомах $V(-1.58 \mu_B)$, тем самым достигает полностью скомпенсированного магнитного момента на ячейку $0,06\mu_B/f.u.$ (где $S-P0\mu_B/f.u.$ экс. $0,1\mu_B/f.u.$) для сплава $Mn_2Co_{1-x}V_xGa$.

При дальнейшем повышении концентрации для сплава $Mn_2Co_{1-x}V_xGa$ атомов ванадия направление магнитных моментов на атомах $Mn1$ (при $x=0.75:1.96 \mu_B$, при $x=1:2.235\mu_B$) $Mn2$ (при $x=0.75:-1.847 \mu_B$, при $x=1:-2.043 \mu_B$) $Co(x=0.75:-0.725 \mu_B)$ V (при $x=0.75:-1.344 \mu_B$, при $x=1:1.646 \mu_B$) становится антипараллельны к исходному положению в структуре где концентрация атомов кобальта превышает число атомов ванадия (рис.4b).

Обсуждение результатов. В сплавах $Mn_2Co_{1-x}V_xAl$, значение намагниченности для составов $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75$ и 1 со сравнением с экспериментальными (S-P значение) составляет $2.00 (2), 1 (1), 0.06 (0), 0.93 (-1)$ и $1.94 (-2) \mu_B/f.u.$ соответственно. Здесь также наблюдается близкое соответствие между экспериментальными и предсказанными по правилу S-P значениями намагниченности, как показано в таблице 2b. Объяснение компенсации магнитного момента остается таким же, как и для сплавов $Mn_2Co_{1-x}V_xAl$. Следует отметить, что значение скомпенсированного магнитного момента для сплава $Mn_2Co_{0.5}V_{0.5}Al$ меньше, чем у сплава $Mn_2Co_{0.5}V_{0.5}Ga$, что может быть связано со сравнительно меньшим параметром решетки (как показано на рисунке 2), который может быть связан дальнейшим увеличением расстояния $Co-Co$, что привело к уменьшению момента Co от при $x=0: 0.96\mu_B$ до при $x=0.75: -0.832\mu_B$, соответственно, и это привело к уменьшению общего магнитного момента сплавов. Рассчитанные значения магнитных моментов на атомах с различными концентрациями ванадия в сплавах Гейслера представлены в таблице 2b. Для сплава $Mn_2Co_{1-x}V_xAl$ направления магнитных моментов на ионах $Mn1$ и $Mn2$ направлены в противоположные стороны и значения величин магнитных моментов на них равны -1.56 и $2.64 \mu_B$, соответственно. Очевидно, что основной вклад в полный магнитный момент вносят атомы $Mn1$ и $Mn2$ в то время как атомы $Co (0.917 \mu_B)$ несут часть выровненных магнитных моментов.

Таблица 2 б. Магнитный момент на атомах и ячейке, рассчитанный молекулярный магнитный момент M_C и экспериментальный молекулярный магнитный момент M_E соединения Mn_2CoGa (a) Mn_2CoAl (b) при легировании V в μ_B .

$Mn_2CoZ(Al)$	$Mn(1) (\mu_B)$	$Mn(2) (\mu_B)$	$Co (\mu_B)$	$Al (\mu_B)$	$V (\mu_B)$	$M_C (\mu_B)$	$M_E (\mu_B)$	S/P
X=0	-1.56 (3.08) ² (-1.1996) ¹²	2.64 (1.98) ² (2.3152) ¹²	0.96 (0.92) ² (0.9379) ¹²	-0.012 (-0.02) ² (0.03109) ¹²	-	2.00 (2.00) ²	(1.95) ² (2.06) ²⁰	2
X=8	-1,661	2,417	0,917	-0,004	-1.566	1	(1.09) ²⁰	1

X=16	-1.66 -1.892 -1.461	2.2	0.83	-0.001	-1.566	0.06	0.06 ²⁰	0
X=24	1.96	-2,077	-0.832	-0.006	1.445	0,93	0.99 ²⁰	-1
X=32	2.2	-2.00		-0,010	1.51	1.94	1.83 ²⁰	-2

По мере замещения атомов Co на атомы V величины магнитных моментов на ионах Mn1 и Mn2 начинают меняться. Для сплава $Mn_2Co_{1-x}V_xAl$ при замещении $0.5 < x \leq 1$ ионы Mn1 и Mn2, и Co меняет направление магнитного момента на противоположное, а при $x=0,5$ замещении Co на V магнитный момент на ионах Mn1 показывает значение равной $-1.67 \mu_B$. Величина магнитного момента на ионах типа Mn2 практически линейно спадает с величины $2.64 \mu_B$ до значения $2.08 \mu_B$ при $0 \leq x \leq 0.5$, и при $0.5 < x \leq 1$ происходит уменьшение значения магнитного момента по модулю с -2.08 до $-2 \mu_B/f.u.$ На ионах V магнитный момент ($-0.566 \mu_B$) не меняется по мере увеличения концентрации ванадия до $x=0.5$, при $0.5 < x \leq 1$ магнитный момент на V меняет свое направление на противоположный и при полном замещении кобальта на ванадий направление магнитного момента на ионах V ($1.51 \mu_B$) становится вверх.

Как было указано выше, правило Слейтера - Полинга (правило S-P) можно использовать для определения полного магнитного момента на формульную единицу ($\mu_B/f.u.$) для полуметаллических сплавов Гейслера. Чтобы проверить, соответствует ли магнитный момент сплавов $Mn_2Co_{1-x}V_xZ$ ($Z = Ga, Al$ при $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) правилу S-P [5], мы сравнили DFT-расчетные значения магнитного момента с рассчитанными с использованием правила S-P. Нами рассчитанные значения намагниченности для структур $Mn_2Co_{1-x}V_xZ$ ($Z = Ga, Al$ и $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) полностью идентичны соответствующим значениям определяемых правилом Слейтера - Полинга и экспериментальным значениям [12] (рис. 3). Поскольку правило Слейтера - Полинга выполняется для идеальной структуры, незначительные отклонения расчетных значений намагниченности от соответствующих значений, определяемой правилом Слейтера - Полинга, объясняется небольшими изменениями состава за счет внедрения ванадия.

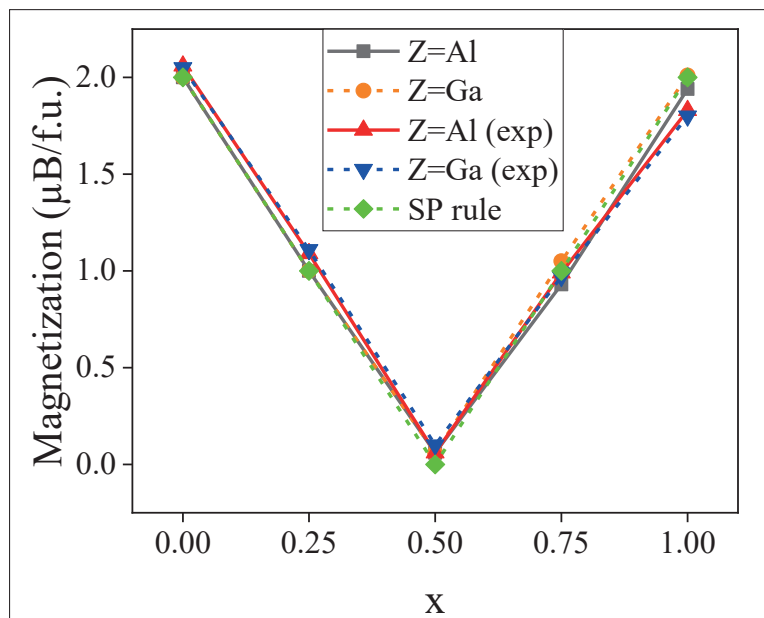


Рис. 3 Изменение намагниченности в зависимости от концентрации V для сплавов Гейслера $Mn_2Co_{1-x}V_xZ$ ($Z = Ga, Al$ и $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$). Значения экспериментальные [12] и предсказанные правилом S-P [5], также отображаются вместе для сравнения.

Таким образом в соответствии конфигурации валентных электронов Mn, V, Co, Ga и Al, которое было указано выше общее количество валентных электронов оказывается равным 26, 25, 24, 23 и 22 для $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75$ и 1 соответственно для обеих серий. Общее количество валентных электронов в $Mn_2Co(Ga/Al)$ равно 26, что является суммой электронов со спином вверх и вниз. Из 26 электронов 12 находятся со спином вниз состояний, тогда как 14 находятся в состояниях со спином

вверх. Эти два нескомпенсированные электроны определяют магнитный момент в сплавах Mn_2Co (Ga/Al) в состояниях со спином вверх. Таким образом, согласно правилу S-P, Mn_2Co (Ga/Al) должен иметь магнитный момент $+2 \mu_B/f.u.$, а для Mn_2V (Ga/Al), он оказывается равным $-2 \mu_B/f.u.$ Теперь при увеличении концентрации V в позиции Co магнитный момент должен уменьшиться до нуля для состава $x = 0.5$, где общее количество валентных электронов является решающим числом 24, которые составляют полностью скомпенсированное магнитное состояние. Можно вычислить, что состав $x = 0.25$ и $x = 0.75$ должен иметь магнитный момент -1 и $+1 \mu_B/f.u.$ соответственно. Таким образом, согласно правилу S-P, магнитный момент сплавов $Mn_2Co_{1-x}V_xZ$ (Ga, Al) должен линейно уменьшаться до нуля при увеличении x от 0 до 0.5 и линейно возрастать при более высоких значениях x ($0.5 < x < 1$), достигая максимума $-2 \mu_B/f.u.$ Отрицательный магнитный момент (рассчитанный по правилу S-P) для состава $x > 0.5$ указывает на то, что полуметаллическая запрещенная зона появляется в зоне со спином вверх.

Таким образом, как видно из энергетических распределений электронных состояний вышеуказанных структур замещение V на Co при уменьшении общего числа электронов от 26 до 22 формирует отрицательный магнитный момент структуры, который в свою очередь приводит к перемещению энергетической щели в высокоспиновую зону.

Заключение. В данной работе представлено исследование структурных, электронных, магнитных свойств сплавов Гейслера $Mn_2Co_{1-x}V_xZ$ ($Z = Ga, Al$ и $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$), основанное на первопринципных методах. Первопринципные вычисления выполнены с помощью программных пакетов VASP. Почти полная компенсация магнитного момента была достигнута для 50% замещения Co на V в сплавах Гейслера Mn_2CoZ ($Z=Ga,Al$). Скомпенсированный магнитный момент для сплавов $Mn_2Co_{0.5}V_{0.5}Z$ составляет $0.06 \mu_B/f.u.$, для $Z=Ga$ и $0.06 \mu_B/f.u.$, для $Z=Al$. Установлено, что величина полного магнитного момента для сплава $Mn_2Co_{1-x}V_xZ$ ($Z = Ga, Al$), уменьшается с убыванием числа валентных электронов на атом e/a . Рассчитанные значения магнитных моментов сплавов соответствуют ожидаемым значениям для полуметаллических сплавов полного Гейслера по правилу Слейтера-Полинга. Полученные результаты исследования позволили бы избежать практических трудностей при изготовлении спинтронных устройств с использованием полностью скомпенсированных полуметаллических ферромагнетиков на основе Mn_2CoZ ($Z=Ga,Al$).

Данная работа выполнена в рамках грантового проекта AP08957176 «Первопринципный дизайн полностью скомпенсированных ферромагнитных материалов для приложений в спинтронике» на 2020–2022 гг. МОН РК.

Абуова Ф.У.¹, Инербаев Т.М.^{1,2}, Абуова А.У.¹, *Қаптағай Г.Ә.³, Мерәлі Н.¹

¹Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Нұр-Сұлтан, Қазақстан;

²Оңтүстік Қытай педагогикалық университеті, Гуанжоу, Қытай;

³Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан.

E-mail: gulbanu.kaptagai@mail.ru

ВАНАДИЙМЕН ЛЕГИРЛЕНГЕН Mn_2CoZ (Al/Ga) ҚОСПАСЫНЫҢ ҚҰРЫЛЫМДЫҚ, ЭЛЕКТРОНДЫҚ ЖӘНЕ МАГНИТТІК ҚАСИЕТТЕРІ

Аннотация. Бұл жұмыста $Mn_2Co_{1-x}V_xZ$ Гейслер қорытпаларының құрылымдық, электрондық, магниттік қасиеттерін зерттелген ($Z = Ga, Al$ және $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$). Ванадий концентрациясы өскен сайын тордың параметрлері сызықты түрде өсетіні анықталды. Mn_2CoGa және Mn_2VGa қоспасы сәйкесінше 2.00 және 2.01 $\mu_B/f.u.$ магниттелуге ие. $x = 0.5$ кезінде $Mn_2Co_{1-x}V_xZ$ ($Z=Ga, Al$) қорытпасы үшін магниттік моменттің толық компенсациялануына қол жеткізілді. Бұл әсер Mn, V және Co иондарының магниттік моменттерінің ферромагниттік реттелуімен түсіндіріледі. Қоспамен алмастыру нәтижесі

$0 \leq x \leq 0.5$ өскен сайын төмен спинді электрондық күйлер үшін тыйым салынған аймақтың тарылуына әкеледі. x -тың одан әрі өсуі тыйым салынған аймақтың кеңеюіне әкеледі. Зерттелетін жүйелердегі магниттік моменттің толық компенсациялануы кезінде ($x=0.5$) төмен спинді электрондық күйлер үшін Ферми деңгейіне жақын электрондық күйлердің төмен тығыздығы қалыптасады.

Электрондардың жалпы саны 26-дан 22-ге дейін азайған кезде V Co-ға алмастырылғанда

жоғарыда аталған құрылымдардың электрондық күйлерінің энергетикалық таралуы құрылымның теріс магниттік моментке ие болатындығын көрсетеді, бұл өз кезегінде энергия саңылаудың жоғары спинді аймаққа ауысуына әкеледі.

Қорытпалардың магниттік моменттерінің есептелген мәндері Слейтер-Полинг ережесі бойынша толық Гейслер жартылай металл қорытпалары үшін болжанған мәндерге сәйкес келеді. Зерттеу нәтижелері Mn_2CoZ ($Z=Ga,Al$) негізді толық компенсацияланған жартылай металл ферромагнетиктерді қолдана отырып, спинтроникалық құрылғыларды жасауда практикалық қосымшалар үшін маңызды.

Түйінді сөздер: Гейслер қорытпалары, ферромагниттік реттелу, саңылаусыз спиндік өткізгіштер, DFT

Abuova F.¹, Inerbaev T.^{1,2}, Abuova A.¹, *Kaptagay G.³, Merali N.¹

¹L.N. Gumilev Eurasian university, Nur-Sultan, Kazakhstan;

²South China teacher training university, Guanzhou, China;

³Kazakh national women's teacher training university, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: gulbanu.kaptagai@mail.ru

STRUCTURAL, ELECTRONIC AND MAGNETIC PROPERTIES OF VANADIUM DOPED $Mn_2CoZ(Al/Ga)$

Abstract. In this paper, we investigate the structural, electronic, and magnetic properties of $Mn_2Co_{1-x}V_xZ$ Heusler alloys ($Z = Ga, Al$, and $x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$). It was found that as the vanadium concentration increases, the lattice parameters increase linearly. The Mn_2CoGa and Mn_2VGa compounds have a magnetization of 2.00 and 2.01 $\mu B/f. u.$, respectively. Almost complete compensation of the magnetic moment was achieved for the $Mn_2Co_{1-x}V_xZ$ alloy ($Z = Ga, Al$) at $x=0.5$. This effect is explained by the ferrimagnetic ordering of the magnetic moments of Mn, V and Co ions. The substitution effect leads to a narrowing of the band gap for electronic states with spin down as $0 \leq x \leq 0.5$ increases. Further growth of x leads to a broadening of the band gap. When the magnetic moment is fully compensated in the studied systems ($x=0.5$), a region of reduced density of electronic states near the Fermi level is formed for electron states with spin down.

The energy distributions of the electronic states of these structures, when V is replaced by Co, with a decrease in the total number of electrons from 26 to 22, form a negative magnetic moment of the structure, which in turn leads to the movement of the energy gap into the high-spin zone.

The total magnetic moment of the $Mn_2Co_{1-x}V_xZ$ alloy ($Z = Ga, Al$) decreases with decreasing number of valence electrons per e/a atom. The calculated values of the magnetic moments of the alloys correspond to the expected values for semi-metallic full Heusler alloys according to the Slater-Pauling rule. The results of the study are important for practical applications in the manufacture of spintronic devices using fully compensated semi-metallic ferrimagnets based on Mn_2CoZ ($Z=Ga,Al$).

Key words: Heusler alloys, ferrimagnetic ordering, slit-free spin semiconductors, DFT.

Information about the authors:

Abuova Fatima – PhD on physics, senior lecturer of the International Chair of the Nuclear physics, new materials and technologies of L.N. Gumilev Eurasian university, Nur-Sultan, Kazakhstan, Fatika_82@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6903-2084>;

Inerbaev Talgat – candidate of physics and mathematics science, associated professor of Technical physics Department of L.N. Gumilev Eurasian national university, Nur-Sultan, Kazakhstan, talgat.inerbaev@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-2378-4082>;

Abuova Aisulu – postdoctoral student, PhD on physics, of L.N. Gumilev Eurasian university, Nur-Sultan, Kazakhstan, aisulu-us1980@yandex.kz, <https://orcid.org/0000-0002-0045-7268>;

Kaptagay Gulbanu – PhD on physics, senior lecturer in Physics department of Kazakh national women's teacher training university, Almaty, Kazakhstan, gulbanu.kaptagai@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5586-7339>;

Merali Nurpeis – PhD student on physics of L.N. Gumilev Eurasian university, Nur-Sultan, Kazakhstan, <https://orcid.org/0000-0002-1706-1622>.

REFERENCES

- [1] Jamer M.E., Assaf B.A., Devakul T., Heiman D. (2013) *Magnetic and transport properties of Mn₂CoAl oriented films*, Appl. Phys. Lett., 10:103: DOI <https://doi.org/10.1063/1.4823601> (in Eng.).
- [2] Galanakis I., Ozdoan K., Sasioglu E., Blugel S. (2014) Conditions for spin-gapless semiconducting behavior in Mn₂CoAl inverse heusler compound, Journal of Applied Physics, 115:093908. doi:10.1063/1.4867917 doi: 10.1038/NMAT3861 (in Eng.).
- [3] Galanakis I., Ozdoan K., Aktas B. (2006) Effect of doping and disorder on the half metallicity of full heusler alloys, Applied Physics Letters, 89: 042502. <https://doi.org/10.1063/1.2235913> (in Eng.).
- [4] Dhakal R. and Nepal S., Ray R.B. and Paudel R., Kaphle G.C. (2020) Effect of doping on SGS and weak half-metallic properties of inverse Heusler Alloys, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 503:166588 <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2020.166588> (in Eng.).
- [5] Galanakis I., Dederichs P.H., Papanikolaou N. (2002) Slater-Pauling behavior and origin of the half-metallicity of the full-Heusler alloys, Phys. Rev. B, 66: 174429. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.174429> (in Eng.).
- [6] Galanakis I., Ozdoan K., Sasioglu E., Aktas B. (2007) Doping of Mn₂VAl and Mn₂VSi Heusler alloys as a route to half-metallic antiferromagnetism, Phys. Rev. B, 75:092407. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.092407> (in Eng.).
- [7] Fang L.Q., Zhao H.F., Su J.L. (2012) Co doping effects on structural, electronic and magnetic properties in Mn₂VGa, J. Magn. Magn. Mater., 324: 1463. DOI:10.1016/j.jmmm.2011.12.015 (in Eng.).
- [8] Meinert M., Schmalhorst J.-M., Reiss G., Arenholz E. (2011) Ferrimagnetism and disorder epitaxial Mn_{2-x}Co_xVAl Heusler compound thin films, J. Phys. D: Appl. Phys., 44: 215003. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/44/21/215003> (in Eng.).
- [9] Jiang C., Venkatesan M., Coey J.M.D. (2001) Transport and magnetic properties of Mn₂VAl: search for half-metallicity, Solid State Commun., 118: 513. [https://doi.org/10.1016/S0038-1098\(01\)00151-X](https://doi.org/10.1016/S0038-1098(01)00151-X) (in Eng.).
- [10] Deka B., Srinivasan A., Singh R.K., Varaprasad Ch.S., Takahashi Y.K., Hono K. (2016) Effect of Co substitution for Mn on spin polarization and magnetic properties of ferrimagnetic Mn₂VAl, Journal of Alloys and Compounds, 662 510. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2015.12.089> (in Eng.).
- [11] Stinshoff R., Nayak A.K., Fecher G.H., Balke B., Ouardi S., Skourski Y., Nakamura T., Felser C. (2017) Completely compensated ferrimagnetism and sublattice spin crossing in the half-metallic Heusler compound Mn_{1.5}FeV_{0.5}Al, Phys. Rev. B, 95: 060410. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.060410> (in Eng.).
- [12] Midhunlal P.V., Arout Chelvane J., Arjun Krishnan U.M., Prabhu D., Gopalan R., Harish Kumar N. (2018) Near total magnetic moment compensation with high Curie temperature in Mn₂V_{0.5}Co_{0.5}Z (Z = Ga, Al) Heusler alloys, J. Phys. D: Appl. Phys., 51:075002. <https://doi.org/10.1088/1361-6463/aaa564> (in Eng.).
- [13] Ramesh Kumar K., Arout Chelvane J., Markandeyulu G., Malik S.K., Harish Kumar N. (2010) Effect of Co substitution on the magnetic and transport properties of the half-metallic ferrimagnet Mn₂VGa, Solid State Commun., 150:70. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2009.10.003> (in Eng.).
- [14] Sasioglu E., Galanakis I., Sandratskii L.M., Bruno P. (2005) Stability of ferromagnetism in the half-metallic pnictides and similar compounds: a first-principles study, J. Phys: Condensed Matter, 17: 3915. DOI: 10.1088/0953-8984/17/25/018 (in Eng.).
- [15] Midhunlal P.V. and Venkatesh C., Arout Chelvane J., Babu P.D., Harish Kumar N. (2020) Neutron diffraction and ab initio studies on the fully compensated ferrimagnetic characteristics of Mn₂V_{1-x}CoxGa Heusler alloys, J. Magn. Magn. Mater., 324:1463–7. <https://doi.org/10.1088/1361-6463/aaa564> (in Eng.).
- [16] Blöchl P.E. (1994) Projector augmented-wave method, Phys. Rev., 50(24):17953–17979. doi:10.1103/physrevb.50.17953 (in Eng.).
- [17] Kresse G., Furthmüller J. (1996) *Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set*, Comput. Mater. Sci., 6:15. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169> (in Eng.).
- [18] Kresse G. and Furthmüller J. Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set, J. Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys., 1996, 54:11169. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169> (in Eng.).
- [19] Kresse G. and Joubert D. (1999) From Ultrasoft Pseudopotentials to the Projector Augmented-Wave Method, Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys., 59:1758. doi:10.1103/PhysRevB.59.1758 (in Eng.).
- [20] Perdew J.P., Burke K. and Ernzerhof M. (1996) Generalize gradient approximation made simple, Phys. Rev. Lett., 77, 3865. doi: 10.1103/PhysRevLett.77:3865 (in Eng.).

[21] Kandpal H.C., Fecher G.H., Felser D. (2007) Calculated electronic and magnetic properties of the half-metallic, transition metal based Heusler compounds, *J. Phys. Appl. Phys*, 40:1507. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/40/6/S01> (in Eng.).

[22] Liu G.D., Dai X.F., Liu H.Y., Chen J.L., Li Y.X., Xiao G., Wu B. (2008) Mn_2CoZ ($Z=Al, Ga, In, Si, Ge, Sn, Sb$) compounds: Structural, electronic, and magnetic properties, *Phys. Rev. B*, 77:014424. DOI <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.014424> (in Eng.).

[23] Zhang Y., Li G., Enke L., Wenhong C.W., Wu G. (2012) Ferromagnetic structures in Mn_2CoGa and Mn_2CoAl doped by Co, Cu, V, and Ti, *Journal of Applied Physics*, 113:.DOI:10.1063/1.4796097 (in Eng.).

МАЗМҰНЫ

ФИЗИКА

Абуова Ф.У., Инербаев Т.М., Абуова А.У., Қаптағай Г.Ә., Мерәлі Н. ВАНАДИЙМЕН ЛЕГИРЛЕНГЕН $Mn_2CoZ(Al/Ga)$ ҚОСПАСЫНЫҢ ҚҰРЫЛЫМДЫҚ, ЭЛЕКТРОНДЫҚ ЖӘНЕ МАГНИТТІК ҚАСИЕТТЕРІ.....	6
Алдақұлов Е., Темірбек Ә.М., Муратов М.М., Молдабеков Ж., Рамазанов Т.С. КРИОГЕНДІК ЖАҒДАЙДАҒЫ ТОЗАҢДЫ ПЛАЗМА БӨЛШЕКТЕРДІҢ ЖҰПТЫҚ КОРРЕЛЯЦИЯЛЫҚ ФУНКЦИЯСЫНА ТЕРМОФОРЕТИКАЛЫҚ КҮШНІҢ ӘСЕРІ.....	17
Калжигитов Н.К., Василевский В.С., Такибаев Н.Ж., Курмангалиева В.О. 6Li ЯДРОСЫНДАҒЫ КЛАСТЕРЛІК ПОЛЯРИЗАЦИЯ ЭФФЕКТІЛЕРІН ЗЕРТТЕУ.....	25
Курбаниязов А.К., Сырлыбекқызы С., Джаналиева Н.Ш., Аккенжеева А.Ш., Кабылова А.Р. ОРТА КАСПИЙДІҢ ТЕҢІЗ АҒЫНЫН МЕН ТЕРМОХАЛИН ҚҰРЫЛЫМЫН ТІКЕЛЕЙ ӨЛШЕУ...33	
Мейрамбекұлы Н., Карибаев А.В., Темирбаев А.А. ЖЕРДІ БАРЛАУШЫ КІШІ ҒАРЫШ АППАРАТТАРЫНА АРНАЛҒАН АНИЗАТРОПТЫ ФРАКТАЛДЫҢ ЕКІНШІ БУЫНЫНА НЕГІЗДЕЛГЕН КӨПДИАПАЗОНДЫ АНТЕННА.....	42
Мұсабек Г.Қ., Садықов Ғ.Қ., Бақтыгерей С.З., Задерко А.Н., Лесняк В.В. ТЕРМОМЕТРИЯҒА АРНАЛҒАН ФОТО ЛЮМИНЦЕНЦИЯЛЫҚ НАНОМАТЕРИАЛДАР: КРЕМНИЙ ЖӘНЕ КӨМІРТЕКТІ НАНОБӨЛШЕКТЕР.....	54

ИНФОРМАТИКА

Джусупбекова Г.Т., Жидебаева А.Н., Изтаев Ж.Д., Шаймерденова Г.С., Тастанбекова Б.О. DELPHI ОРТАСЫНДА «БАНК ЖҮЙЕСІНДЕГІ НЕСИЕЛЕР МЕН ДЕПОЗИТТЕРДІ АВТОМАТТАНДЫРУ» ЖҰМЫС ОРЫНДАРЫН ҚҰРУ.....	61
Ерасыл К., Ахметов И., Джаксылықова А. KASPI ӨНІМДЕРІ ТУРАЛЫ ПІКІРЛЕРДЕГІ КӨҢІЛ-КҮЙДІ ТАЛДАУ.....	68
Мауленов Қ.С., Кудубаева С.А. НААР, НОГ, CNN БЕТ ДЕТЕКТОРЛАРЫН САЛЫСТЫРМАЛЫ ТАЛДАУ.....	74
Сейлова Н.А., Журынтаев Ж.З., Мамырбаев О.Ж., Батыргалиев А.Б., Тұрдалыұлы М. ПСЕВДО КЕЗДЕЙСОҚ ИМПУЛЬСТАР ТІЗБЕГІНІҢ САНДЫҚ ГЕНЕРАТОРЛАРЫ ЖӘНЕ ОЛАРДЫ CAD QUARTUS II ОРТАСЫНДА FPGA КӨМЕГІМЕН МОДЕЛЬДЕУ.....	83
Сымагулов А., Кучин Я., Елис М., Жумабаев А., Абдуразаков А. МАШИНАЛЫҚ ОҚЫТУДЫҢ ҚАРА ЖӘШІКТЕРІН ТҮСІНДІРУ ӘДІСТЕРІ ЖӘНЕ ШЕШІМ ҚАБЫЛДАУДЫ ҚОЛДАУ ЖҮЙЕЛЕРІН ҚҰРУ ҮШІН ОЛАРДЫ ҚОЛДАНУ.....	91
Усатова О.А., Бегимбаева Е.Е., Нысанбаева С.Е., Усатов Н.С. ХЕШ ФУНКЦИЯ ӘДІСТЕРІН ТАЛДАУ ЖӘНЕ ПРАКТИКАЛЫҚ ҚОЛДАНУ.....	100

МАТЕМАТИКА

Абдраманова Г.Б., Имамбек О., Белисарова Ф.Б. p^7B СЕРПИМДІ ШАШЫРАУ ҚИМАСЫНЫҢ ЕСЕПТЕУЛЕРІ ҮШІН ГЛАУБЕР ТЕОРИЯНЫҢ НЕГІЗІНДЕГІ МАТЕМАТИКАЛЫҚ ФОРМАЛИЗМ.....	111
Адилова А.Қ., Жүзбаев С.С., Ахметжанова Ш.Е. КОМПОЗИЦИЯЛЫҚ МАТЕРИАЛДАР ҚҰРЫЛЫМЫ ЖӘНЕ КОМПОЗИТТЕР МЕХАНИКАСЫНЫҢ ЕСЕПТЕРІ.....	119
Иванов К.С., Тулекенова Т.Д. ТҮЙІСУ МЕХАНИЗІМІНІҢ БЕЙІМДЕЛГЕН ЖЕТЕГІНІҢ ДИНАМИКАСЫ.....	131
Исраилова С.Т., Муханова А.А., Сатыбалдиева А.Ж. ТЕҢГЕРІМДІ КӨРСЕТКІШТЕР ЖҮЙЕСІ БОЙЫНША КӘСІПОРЫННЫҢ БИЗНЕС ПРОЦЕСТЕРІНІҢ ТИІМДІЛІГІН БАҒАЛАУ АЛГОРИТМІ.....	137
Оразбаев Б.Б., Жумадиллаева А.К., Дюсекеев К.А., Сантеева С.Ә., Xiao-Guang Yue ЖҮЙЕЛІК ТӘСІЛДЕМЕ НЕГІЗІНДЕ ЛГ-35-11/300-95 ҚОНДЫРҒЫСЫНЫҢ БЕНЗИНДІ РИФОРМИНГТЕУ РЕАКТОРЛАРЫНЫҢ МАТЕМАТИКАЛЫҚ МОДЕЛЬДЕРІН ҚҰРУ.....	145

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

Абуова Ф.У., Инербаев Т.М., Абуова А.У., Каптагай Г.А., Мерәлі Н. СТРУКТУРНЫЕ, ЭЛЕКТРОННЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА $Mn_2CoZ(Al/Ga)$ ПРИ ЛЕГИРОВАНИИ ВАНАДИЕМ.....	6
Алдакулов Е., Темірбек Ә.М., Муратов М.М., Молдабеков Ж., Рамазанов Т.С. ВЛИЯНИЕ СИЛЫ АТОМНОГО УВЛЕЧЕНИЯ НА ПАРНУЮ КОРРЕЛЯЦИОННУЮ ФУНКЦИЮ ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЫ В КРИОГЕННЫХ УСЛОВИЯХ.....	17
Калжигитов Н.К., Василевский В.С., Такибаев Н.Ж., Курмангалиева В.О. ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТОВ КЛАСТЕРНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ В ЯДРЕ 6Li	25
Курбаниязов А.К., Сырлыбеккызы С., Джаналиева Н.Ш., Аккенжеева А.Ш., Кабулова А. ПРЯМОЕ ИЗМЕРЕНИЕ МОРСКОГО ТЕЧЕНИЯ И ТЕРМОХАЛИНОВОЙ СТРУКТУРЫ СРЕДНЕГО КАСПИЯ.....	33
Мейрамбекұлы Н., Карибаев Б.А., Темирбаев А.А. МНОГОДИАПАЗОННАЯ АНТЕННА НА БАЗЕ ВТОРОГО ПОКОЛЕНИЯ АНИЗОТРОПНОГО ФРАКТАЛА ДЛЯ МАЛЫХ КОСМИЧЕСКИХ АППАРАТОВ ДИСТАНЦИОННОГО ЗОНДИРОВАНИЯ И НАБЛЮДЕНИЯ ЗЕМЛИ.....	42
Мусабек Г.К., Садыков Г.К., Бактыгерей С.З., Задерко А.Н., Лесняк В.В. ФОТОЛЮМИНЦЕНТНЫЕ НАНОМАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕРМОМЕТРИИ: КРЕМНИЙ И УГЛЕРОДНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ.....	54

ИНФОРМАТИКА

Джусупбекова Г.Т., Жидебаева А.Н., Изтаев Ж.Д., Шаймерденова Г.С., Тастанбекова Б.О. СОЗДАНИЕ АВТОМАТИЗИРОВАННЫХ РАБОЧИХ МЕСТ ДЛЯ «КРЕДИТОВАНИЕ И ДЕПОЗИТЫ В БАНКОВСКОЙ СИСТЕМЕ» В СРЕДЕ DELPHI.....	61
Ерасыл К., Ахметов И., Джаксылыкова А. ТОНАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ОТЗЫВОВ О ТОВАРАХ KASPI.....	68
Мауленов Қ.С., Кудубаева С.А. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ДЕТЕКТОРОВ ЛИЦ HAAR, HOG, CNN.....	74
Сейлова Н.А., Джурунтаев Д.З., Мамырбаев О.Ж., Батыргалиев А.Б., Тұрдалыұлы М. ЦИФРОВЫЕ ГЕНЕРАТОРЫ ПСЕВДОСЛУЧАЙНОЙ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ ИМПУЛЬСОВ И ИХ МОДЕЛИРОВАНИЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПЛИС В СРЕДЕ САПР QUARTUSII.....	83
Сымагулов А., Кучин Я., Елис М., Жумабаев А., Абдуразаков А. МЕТОДЫ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ЧЕРНЫХ ЯЩИКОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ СОЗДАНИЯ СИСТЕМ ПОДДЕРЖКИ ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЙ.....	91
Усатова О.А., Бегимбаева Е.Е., Нысанбаева С.Е., Усатов Н.С. АНАЛИЗ МЕТОДОВ И ПРАКТИЧЕСКОЕ ПРИМЕНЕНИЕ ХЕШ-ФУНКЦИЙ.....	100

МАТЕМАТИКА

Абдраманова Г.Б., Имамбек О., Белисарова Ф.Б. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ФОРМАЛИЗМ ДЛЯ РАСЧЕТОВ СЕЧЕНИЯ УПРУГОГО p^7Be -РАССЕЯНИЯ В РАМКАХ ТЕОРИИ ГЛАУБЕРА.....	111
Адилова А.К., Жузбаев С.С., Ахметжанова Ш.Е. СТРУКТУРА КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА И ЗАДАЧИ МЕХАНИКИ КОМПОЗИТОВ..	119
Иванов К.С., Тулекенова Т.Д. ДИНАМИКА АДАПТИВНОГО ПРИВОДА СТЫКОВОЧНОГО МЕХАНИЗМА.....	131
Исраилова С.Т., Муханова А.А., Сатыбалдиева А.Ж. СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ ОЦЕНКИ БИЗНЕС-ПРОЦЕССОВ ПРЕДПРИЯТИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СБАЛАНСИРОВАННОЙ СИСТЕМЫ ПОКАЗАТЕЛЕЙ.....	137
Оразбаев Б.Б., Жумадилаева А.К., Дюсекеев К.А., Сантеева С.А., Xiao-Guang Yue РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ РЕАКТОРОВ РИФОРМИНГА БЕНЗИНА УСТАНОВКИ ЛГ-35-11/300-95 НА ОСНОВЕ СИСТЕМНОГО ПОДХОДА.....	145

CONTENTS

PHYSICS

Abuova F., Inerbaev T., Abuova A., Kaptagay G., Merali N. STRUCTURAL, ELECTRONIC AND MAGNETIC PROPERTIES OF VANADIUM DOPED Mn ₂ CoZ(Al/Ga).....	6
Aldakulov Ye., Temirbek A.M., Muratov M.M., Moldabekov Z., Ramazanov T.S. INFLUENCE OF THE NEUTRAL SHADOWING FORCE ON THE PAIR CORRELATION FUNCTION OF THE DUSTY PLASMA UNDER CRYOGENIC CONDITIONS.....	17
Kalzhitov N., Vasilevsky V.S., Takibayev N. Zh., Kurmangaliyeva V.O. A STUDY OF THE EFFECTS OF CLUSTER POLARIZATION IN THE 6Li NUCLEUS.....	25
Kurbaniyazov A.K., Syrlybekkyzy S., Janaliyeva N.Sh., Akkenzheyeva A., Kabylova A. DIRECT MEASUREMENT OF SEA CURRENTS AND THERMOHALINE STRUCTURE OF THE MIDDLE CASPIAN.....	33
Meirambekuly N., Karibayev B.A., Temirbayev A.A. MULTI-BAND ANTENNA BASED ON THE SECOND GENERATION OF ANISOTROPIC FRACTAL FOR SMALL REMOTE SENSING AND EARTH OBSERVING SPACECRAFTS.....	42
Mussabek G.K., Sadykov G.K., Baktygeray S.Z., Zaderko A.N. Lisnyak V.V. PHOTOLUMINESCENT NANOMATERIALS FOR THERMOMETRY: SILICON AND CARBON NANOPARTICLES.....	54

COMPUTER SCIENCE

Jussupbekova G.T., Zhidebayeva A.N., Iztayev Zh.D., Shaimerdenova G.S., Tastanbekova B.O. CREATION OF AUTOMATED JOBS FOR "LOANS AND DEPOSITS IN THE BANKING SYSTEM" IN THE DELPHI ENVIRONMENT.....	61
Yerassyl K., Akhmetov I, Jaxylykova A. SENTIMENT ANALYSIS OF KASPI PRODUCT REVIEWS.....	68
Maulenov K.S., Kudubaeva S.A. COMPARATIVE ANALYSIS OF FACE DETECTORS HAAR, HOG, CNN.....	74
Seilova N.A., Dzhuruntaev D.Z., Mamyrbayev O.Zh., Batyrgaliev A.B., Turdalyuly M. DIGITAL GENERATORS OF A PSEUDORANDOM PULSES SEQUENCE AND THEIR MODELING WITH USE OF FPGA IN THE ENVIRONMENT CAD QUARTUS II.....	83
Symagulov A., Kuchin Ya., Yelis M., Zhumabayev A., Abdurazakov A. METHODS FOR INTERPRETING MACHINE LEARNING BLACK BOXES AND THEIR APPLICATION TO DECISION SUPPORT SYSTEMS.....	91
Ussatova O., Begimbayeva Ye., Nyssanbayeva S., Ussatov N. ANALYSIS OF METHODS AND PRACTICAL APPLICATION OF HASH FUNCTIONS.....	100

MATHEMATICS

Abdramanova G.B., Imambek O., Belisarova F.B. MATHEMATICAL FORMALISM FOR CALCULATIONS OF THE ELASTIC p ₇ Be SCATTERING CROSS SECTION IN THE FRAMEWORK OF GLAUBER THEORY.....	111
Adilova A.K., Zhuzbayev S.S., Akhmetzhanova S.E. COMPOSITE MATERIAL STRUCTURE AND PROBLEMS OF COMPOSITE MECHANICS.....	119
Ivanov K.S., Tulekenova T.D. DYNAMICS OF THE ADAPTIVE DRIVE OF THE DOCKING MECHANISM.....	131
Israilova S., Mukhanova A., Satybaldiyeva A. MODERN METHODS FOR EVALUATING BUSINESS PROCESSES OF AN ENTERPRISE USING A BALANCED SCORECARD.....	137
Orazbayev B., Zhumadillayeva A., Dyussekeyev K., Santeyeva S., Xiao-Guang Yue DEVELOPMENT MATHEMATICAL MODELS OF PETROL REFORMING REACTORS OF THE LG-35-11 / 300-95 INSTALLATION BASED ON A SYSTEM APPROACH.....	145

Publication Ethics and Publication Malpractice in the journals of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan

For information on Ethics in publishing and Ethical guidelines for journal publication see <http://www.elsevier.com/publishingethics> and <http://www.elsevier.com/journal-authors/ethics>.

Submission of an article to the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan implies that the described work has not been published previously (except in the form of an abstract or as part of a published lecture or academic thesis or as an electronic preprint, see <http://www.elsevier.com/postingpolicy>), that it is not under consideration for publication elsewhere, that its publication is approved by all authors and tacitly or explicitly by the responsible authorities where the work was carried out, and that, if accepted, it will not be published elsewhere in the same form, in English or in any other language, including electronically without the written consent of the copyright-holder. In particular, translations into English of papers already published in another language are not accepted.

No other forms of scientific misconduct are allowed, such as plagiarism, falsification, fraudulent data, incorrect interpretation of other works, incorrect citations, etc. The National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan follows the Code of Conduct of the Committee on Publication Ethics (COPE), and follows the COPE Flowcharts for Resolving Cases of Suspected Misconduct (http://publicationethics.org/files/u2/New_Code.pdf). To verify originality, your article may be checked by the Cross Check originality detection service <http://www.elsevier.com/editors/plagdetect>.

The authors are obliged to participate in peer review process and be ready to provide corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. All authors of a paper should have significantly contributed to the research.

The reviewers should provide objective judgments and should point out relevant published works which are not yet cited. Reviewed articles should be treated confidentially. The reviewers will be chosen in such a way that there is no conflict of interests with respect to the research, the authors and/or the research funders.

The editors have complete responsibility and authority to reject or accept a paper, and they will only accept a paper when reasonably certain. They will preserve anonymity of reviewers and promote publication of corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. The acceptance of a paper automatically implies the copyright transfer to the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan.

The Editorial Board of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan will monitor and safeguard publishing ethics.

Правила оформления статьи для публикации в журнале смотреть на сайтах:

www.nauka-nanrk.kz

<http://physics-mathematics.kz/index.php/en/archive>

ISSN 2518-1726 (Online),

ISSN 1991-346X (Print)

Редакторы: *М.С. Ахметова, А. Ботанқызы, Д.С. Аленов, Р.Ж. Мрзабаева*
Верстка на компьютере *Г.Д. Жадыранова*

Подписано в печать 15.10.2021.

Формат 60x881/8. Бумага офсетная. Печать – ризограф.

4,6 п.л. Тираж 300. Заказ 5.