

**ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ ЖОҒАРЫ БІЛІМ МИНИСТРЛІГІ**

**«Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ» КЕАҚ**

**Студенттер мен жас ғалымдардың  
«GYLYM JÁNE BILIM - 2023»  
XVIII Халықаралық ғылыми конференциясының  
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ  
XVIII Международной научной конференции  
студентов и молодых ученых  
«GYLYM JÁNE BILIM - 2023»**

**PROCEEDINGS  
of the XVIII International Scientific Conference  
for students and young scholars  
«GYLYM JÁNE BILIM - 2023»**

**2023  
Астана**

**УДК 001+37**  
**ББК 72+74**  
**G99**

**«GYLYM JÁNE BILIM – 2023» студенттер мен жас ғалымдардың  
XVIII Халықаралық ғылыми конференциясы = XVIII  
Международная научная конференция студентов и молодых  
ученых «GYLYM JÁNE BILIM – 2023» = The XVIII International  
Scientific Conference for students and young scholars «GYLYM JÁNE  
BILIM – 2023». – Астана: – 6865 б. - қазақша, орысша, ағылшынша.**

**ISBN 978-601-337-871-8**

Жинаққа студенттердің, магистранттардың, докторанттардың және жас ғалымдардың жаратылыстану-техникалық және гуманитарлық ғылымдардың өзекті мәселелері бойынша баяндамалары енгізілген.

The proceedings are the papers of students, undergraduates, doctoral students and young researchers on topical issues of natural and technical sciences and humanities.

В сборник вошли доклады студентов, магистрантов, докторантов и молодых ученых по актуальным вопросам естественно-технических и гуманитарных наук.

**УДК 001+37**  
**ББК 72+74**

**ISBN 978-601-337-871-8**

**©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия  
ұлттық университеті, 2023**

**ӨТПЕЛІ МЕТАЛЛ АТОМДАРЫМЕН ДОПИРЛЕНГЕН Fe-Ga МАГНИТТІК АНИЗОТРОПИЯ ЭНЕРГИЯСЫ МЕН СЕРПІМДІЛІК ҚАСИЕТТЕРІН ЕСЕПТЕУ**

Жуман Бауыржан  
[zhuman9843@gmail.com](mailto:zhuman9843@gmail.com)

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар кафедрасының 1 курс магистранты, Астана, Қазақстан.  
Ғылыми жетекшісі – Абуова Ф.У

Бұл материал өтпелі металл атомдарымен легирленген Fe-Ga қорытпасының магниттік анизотропия энергиясын және серпімділік қасиеттерін есептеуге арналған. Бұл қорытпаға ерекше қызығушылық оның микроэлектроника, энергетика және басқа да көптеген салалардағы әлеуетті қолданылуына байланысты.

Fe-Ga қорытпасының негізгі қасиеттерінің бірі оның магниттік анизотропиясы болып табылады, ол материалдағы магниттік моменттердің қолайлы бағытын анықтайды. Температураның өзгеруі, деформация және легирлеуші элементтердің қосылуы сияқты әртүрлі факторлар қорытпаның магниттік анизотропиясына және басқа серпімді қасиеттеріне әсер етуі мүмкін.

Бұл жұмыста біз ауыспалы металл атомдарымен легирленген Fe-Ga қорытпасының магниттік анизотропия энергиясын және серпімділік қасиеттерін есептеу үшін компьютерлік модельдеуді қолдандық. Бұл тәсіл микродеңгейде қорытпаның қасиеттері туралы егжей-тегжейлі түсінік алуға және осы қасиеттерге әртүрлі факторлардың әсерін бағалауға мүмкіндік береді.

Темір-галий қорытпалары магниттік анизотропия және жоғары магниттік индукция сияқты бірегей магниттік қасиеттеріне байланысты магнитті қолдану үшін перспективалы материалдар болып табылады. Материалдардың магнетизмі мен серпімділік қасиеттері әртүрлі өндірістік және ғылыми салаларда үлкен маңызға ие. Атап айтқанда, магниттік анизотропия энергиясы және серпімді қасиеттері жоғары магниттік материалдар магниттік сенсорлар, күшейткіштер, микромоторлар және т.б. сияқты әртүрлі қолданбаларда негізгі компоненттер болып табылады.

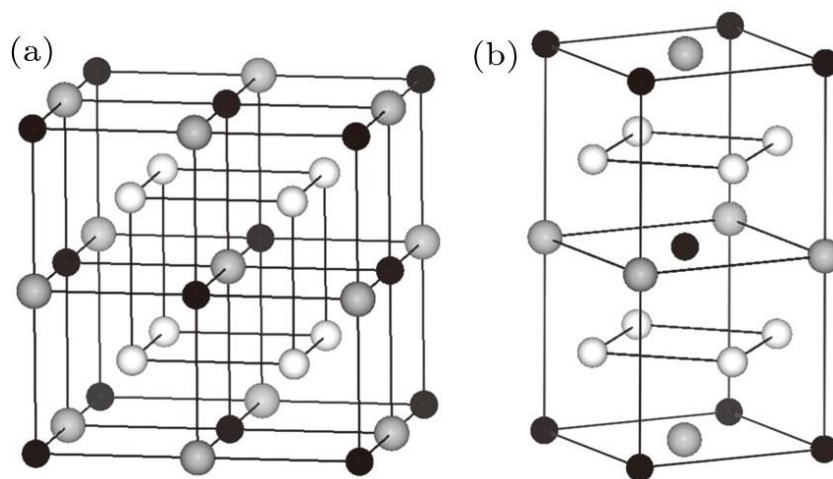
Магниттік анизотропия энергиясы – материалдың магниттік моментін белгілі бір оське айналдыруға қажетті энергия. Ол кристалдық тордың құрылымына байланысты және тығыздықтың функционалдық теориясы (DFT) және бірінші принциптер әдістері сияқты әртүрлі әдістермен есептелуі мүмкін [1].

Материалдардың серпімділік қасиеттері олардың механикалық жүктемелердегі әрекетін анықтайды. Олар материалдың қалай деформацияланатынын және оның ішінде энергияның қалай бөлінетінін сипаттайды. Серпімді қасиеттерді әртүрлі әдістермен есептеуге болады, мысалы, бірінші принциптер әдістері, молекулалық динамика (MD) әдістері және Монте-Карло әдістері.

Есептеулер тығыздықтың функционалдық теориясына негізделген Vena ab initio (VASP) модельдеу пакеті арқылы жүзеге асырылды. Электрон алмасуы мен корреляциясы Пурдю, Берк және Эрнзерхоф (PBE) ұсынған функцияның көмегімен спин-поляризацияланған жалпыланған градиент жуықтауында (GGA) сипатталған. Монхорст – Пак сұлбасы бойынша ұйымдастырылған  $11 \times 11 \times 11$  к-нүктелерден тұратынарнайы тор, ал шекті энергия 470 эВ деп белгіленді. Электрондық-иондық әрекеттесу жобаланатын күшейтілген толқын (PAW) формализмі тұрғысынан сипатталды, ал Ni (3d84s2), Fe (3d74s1) және Ga (3d104s24p1) валенттік күйлер ретінде қарастырылды. Магнитокристалды анизотропияның энергиясын есептеу үшін спин-орбиталық қосылыстардың әсері ескерілді және симметрия өшірілді. Спин-орбитаның өзара әрекеттесуінің толық өзіндік дәйекті есебі

бұрын Hobbs және т.б іске асырған коллинеарлық емес модельде орындалды. және VASP-те Марсман мен Хафнер [2].

Фонндық есептеулер фонопиялық кодпен ақырлы орын ауыстыру тәсілдерін қолдану арқылы жүргізілді [36,37]. Хеллман-Фейнман күштері VASP коды арқылы және  $4 \times 4 \times 4$  күктелік торға  $\sigma = 0,1$  эВ бұлыңғырлық параметрі бар Метфессель-Пакстон бұлдырын қолдану арқылы есептелді. Аустенит фазасы үшін  $2 \times 2 \times 2$  суперклетка кәдімгі бірлік ұяшықты (1(a)-сурет) әр бағытта екі рет және модуляцияланбаған (НМ) мартенситтік фаза үшін  $3 \times 3 \times 2$  суперклеткасын қайталау арқылы жасалды. суретте көрсетілген кәдімгі тетрагональды ұяшықтың көмегімен жасалды. 1(b).

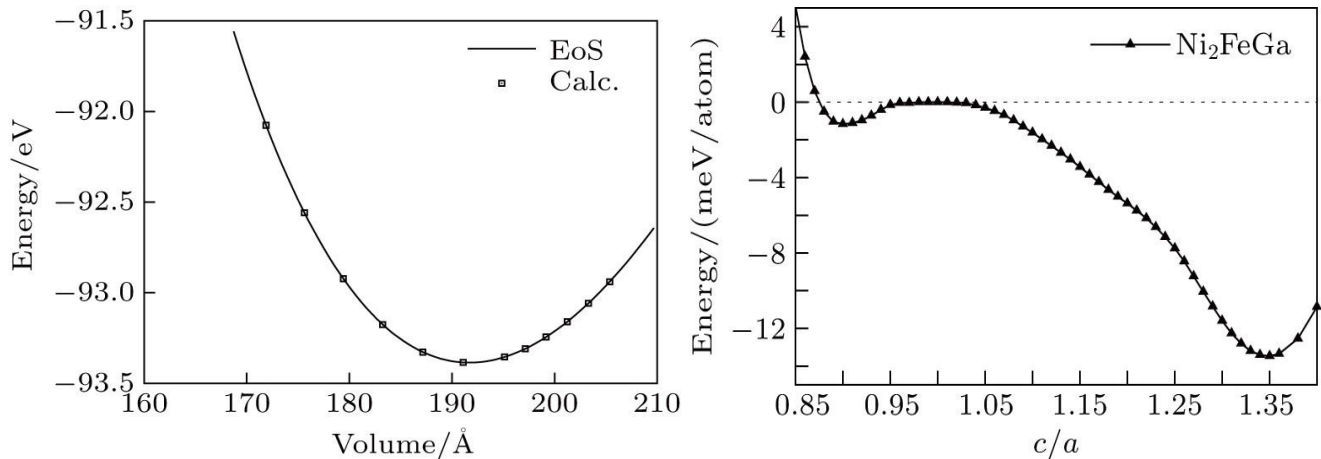


(a) кәдімгі бірлік ұяшықпен жасалған Ni<sub>2</sub>FeGa L21 Heusler құрылымы және (b) фонндық есептеулерде қолданылатын кәдімгі тетрагональды ұяшық. Суреттердегі қара, сұр және ақ шеңберлер сәйкесінше Ni, Fe және Ga атомдарын білдіреді.

Суретте. 1(a) Ni<sub>2</sub>FeGa қорытпаларының аустениттік фазасын көрсететін кәдімгі ұяшықты көрсетілген. Ni<sub>2</sub>FeGa стехиометриялық қосылысы L21 құрылымына ие, мұнда Ni атомдары (0,25, 0,25, 0,25) және (0,75, 0,75, 0,75), Ga атомдары (0, 0, 0) және Fe атомдары (0,5, 0,5) позицияларды алады. 0,5), ұяшық бірлігіне 16 атом. Аустенит фазасының тепе-теңдік құрылымын алу үшін, біз қорытпаның әртүрлі көлемдеріне арналған жалпы бірлік ұяшық энергиясын есептеп, оны 4-ші ретгі Берч-Мурнаган күй теңдеуіне (OSE) орнаттық. Аустенит фазасы үшін есептелген E-V тәуелділігі күріште көрсетілген. 2. 1-кестеде тепе-теңдік торының параметрі, а, көлемдік модуль, В және қысым туындысы, В' қоса алғанда, күй параметрлерінің бекітілген теңдеуі келтірілген. Аустенит фазасының болжамды тор константасы 5,77 Å және эксперименттік мәнге 5,76 Å және басқа теориялық 5,76 Å [17] және 5,77 Å сәйкес келеді. Болжамды көлемді модуль В 166,2 ГПа құрайды, ол 165,1 ГПа және 164,7 ГПа басқа теориялық мәндермен жақсы сәйкес келеді. Аустениттік фазаның жалпы магниттік моменті 3,3 мкБ/фу.у, ол бұрын алынған теориялық 3,29 мкБ/фу.у мәніне жақсы сәйкес келеді [3].

Тетрагональды деформацияларға қатысты аустениттік фазаның тұрақтылығы зерттелген және күріш. 3. Әртүрлі тетрагональды деформацияларға қатысты есептелген аустениттің Ni<sub>2</sub>FeGa толық энергиясы екі минимумға ие: біреуі  $c/a = 0,9$ , модуляцияланған мартенситтік құрылымға сәйкес, екіншісі  $c/a = 1,35$ , NM мартенситіне сәйкес. фазасы. Екі минимуммен ұсынылған құрылымдар кубтық құрылымға қарағанда төмен энергияға ие, бұл текше фазаның тұрақсыз екенін және тетрагональды бұрмалану фазаның тұрақтылығын арттырады.  $c/a = 0,9$  және 1,35 кезінде кубтық және NM-тетрагональды құрылымдардың энергияларының арасындағы айырмашылықтар сәйкесінше шамамен 1,2 және 13,5 меВ/атомды құрайды. Біздің есептелген энергия айырмашылықтары бұрын жарияланған

10,5 және 11 меВ/атом нәтижелеріне сәйкес келеді [4].



Есептелген энергия мен көлем арасындағы байланыс. Тұтас қисық 4-ші ретті Берч-Мурнаган күй теңдеуіне (EoS) сәйкес орнатылған E-V қисық деректерін білдіреді. Нүктелер нақты есептелген нәтижелерді білдіреді.

Ni<sub>2</sub>FeGa аустенитінің жалпы энергиясы әртүрлі тетрагональды штаммдарға қатысты есептеледі, c/a.

Бұл жұмыста Ni<sub>2</sub>FeGa жүйесінің серпімділік, магниттік серпімділік және фонндық қасиеттері зерттеліп, қолда бар теориялық және тәжірибелік мәліметтермен салыстырылды. Берч-Мурнаган күй теңдеуін қолданып, жалпы энергияны көлемнің функциясы ретінде сәйкестендіріп, көлемдік модуль мен тепе-теңдік торының параметрін береді. Ni<sub>2</sub>FeGa массасының көлемдік модулі (B), ығысу модулі (G), Янг модулі (E) және Пуассон қатынасы (ν) Voigt-Reuss-Hill әдісі арқылы анықталды және нәтижелер алдыңғы

есептеулермен жақсы сәйкес келеді. Аустениттік және мартенситті фазалардағы Ni<sub>2</sub>FeGa-ның Дебай температурасы сәйкесінше 344 және 392 К болды. Магнитосерпімділік коэффициенті  $-5,3 \times 10^6$  Дж/м<sup>3</sup>, ал Ni<sub>2</sub>FeGa аустениттік фазасының магнитострикция коэффициенті магнитокристалдық анизотропия энергиясын есептеу арқылы алынған 135-тен 55 ppm-ге дейін, бұл фазалық өрісті модельдеу жұмыстары үшін пайдалы нұсқаулық бола алады. Фонндық дисперсия қисықтары және аустениттік және мартенситтік фазалар күйлерінің тербеліс тығыздықтары берілген.

### Пайдаланылған әдебиеттер тізімі

1. Уллакко К Хуанг Дж. К Кантнер С О'Хэндли РК Кокорин V V 1996 Appl. Физ. Летт. 69 1966 ж
2. Созинов А Лихачев А А Ланска Н Уллакко К 2002 Қолданба. Физ. Летт. 80 1746
3. Sozinov A Lanska N Soroka A Zou W 2013 Appl. Физ. Летт. 102 021902
4. Masdeu F Pons J Cesari E Kustov S Чумляков Y I 2008 Appl. Физ. Летт. 93 152503