

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА СИСТЕМЫ СПЛАВОВ $\text{Co}_x\text{Cu}_{2-x}\text{MnAl}$

Дедов И.С.¹, Лукоянов А.В.²

¹) Уральский Федеральный Университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²) Институт Физики Металлов имени М.Н. Михеева Уральского Отделения Российской
Академии Наук, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: Ilya.Dedov@urfu.me

MAGNETIC PROPERTIES AND ELECTRONIC STRUCTURE OF THE ALLOY SERIES $\text{Co}_x\text{Cu}_{2-x}\text{MnAl}$

Dedov I.S.¹, Lukoyanov A.V.²

¹) Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin,
Yekaterinburg, Russia

²) M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences,
Ekaterinburg, Russia

Theoretical modeling of the Heusler alloys of the $\text{Co}_x\text{Cu}_{2-x}\text{MnAl}$ series for $x = 0 - 2$ was done. It is found that the total magnetic moment is substantially increased in $\text{Co}_{1.5}\text{Cu}_{0.5}\text{MnAl}$ and CoCuMnAl alloys.

Сплавы Гейслера являются перспективными материалами для спинтроники благодаря уникальным магнитным и электрическим свойствам, обусловленным эффектом спиновой поляризации [1]. В них могут быть реализованы состояния полуметаллического ферромагнетика или спинового бесщелевого полупроводника, антиферромагнетика или скомпенсированного ферромагнетика, топологического полуметалла или фрустрированного магнетика, которые зачастую приводят к аномалиям в их электронных и магнитных свойствах. Помимо внешних факторов (температуры, давления, электрических и магнитных полей), свойства сплавов Гейслера существенно зависят от их кристаллической структуры [2]. В работе проведено теоретическое моделирование сплавов Гейслера серии $\text{Co}_x\text{Cu}_{2-x}\text{MnAl}$ для $x = 0 - 2$. В результате выполненных в рамках теории функционала плотности расчетов электронной структуры соединений $\text{Co}_{1.5}\text{Cu}_{0.5}\text{MnAl}$, CoCuMnAl , $\text{Co}_{0.5}\text{Cu}_{1.5}\text{MnAl}$, Cu_2MnAl было получено, что данные соединения являются металлами, а Co_2MnAl – полуметаллом. При анализе магнитных моментов было выявлено, что в серии соединений $\text{Co}_x\text{Cu}_{2-x}\text{MnAl}$ реализуется ферромагнитное упорядочение магнитных ионов марганца и кобальта. Полный магнитный момент для промежуточных сплавов $\text{Co}_{1.5}\text{Cu}_{0.5}\text{MnAl}$, CoCuMnAl значительно больше, чем в сплаве без Co (Cu_2MnAl) и больше, чем в сплаве с полным замещением атомов Cu атомами Co. Проведенные теоретические расчеты показали, что при изменении содержания переходных металлов происходит

существенное изменение магнитных свойств, в частности, полный магнитный момент меняется с изменением концентрации Co и Cu. Вместе с магнитным моментом, в исследованных соединениях выявлено изменение плотностей электронных состояний. Обнаруженные изменения магнитных характеристик и электронной структуры делают систему сплавов $\text{Co}_x\text{Cu}_{2-x}\text{MnAl}$ перспективной для использования в микроэлектронике и других приложениях Co.

Данное исследование поддержано грантом Российского Научного Фонда No 22-42-02021.

1. Felser C., Fecher GH., Balke B. *Angew Chem Int Ed* (2007). – Vol. 46, P. 66
2. Chadov S, Qi X., Fecher GH., Felser C., *Nat. Mat* (2010). – Vol. 9, P. 541.