ISSN 1561-8358 (Print)
ISSN 2524-244X (Online)

МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ, МЕТАЛЛУРГИЯ

MATERIALS SCIENCES AND ENGINEERING, METALLURGY

УДК 537.622
https://doi.org/10.29235/1561-8358-2022-67-4-351-359

Поступила в редакцию 03.10.2022
Received 03.10.2022

Г. С. Римский[1], А. В. Руткаускас[2], Е. В. Дюжева-Мальцева[3], К. И. Янушкевич[1], Д. П. Козленко[2], В. П. Глазков[3], Туан Ань Чан[4], Нгок Тоан Данг[5], Тронг Фук Хоанг[5]

[1]Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению, Минск, Республика Беларусь
[2]Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Московская область, Российская Федерация
[3]Научно-исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Российская Федерация
[4]Технологический и педагогический университет Хошимина, Хошимин, Вьетнам
[5]Университет Дуй Тан, Дананг, Вьетнам

МАГНИТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Ni_{1-x}M_xMnSb$ (M = Ti, V, Cr)

Аннотация. Представлены результаты эксперимента по изучению кристаллической и магнитной структур твердых растворов замещения систем $Ni_{0,90}M_{0,10}MnSb$ (M = Ti, V, Cr) с помощью дифракции тепловых нейтронов в интервале температур ~ 3–300 К. Обнаружено, что все исследуемые составы обладают ферромагнитным упорядочением вдоль оси *c*. На спектрах твердых растворов $Ni_{0,90}V_{0,10}MnSb$ и $Ni_{0,90}Cr_{0,10}MnSb$ в области 2Θ = 28,6° отмечено появление рефлекса, который указывает на формирование антиферромагнитного упорядочения. Установлено, что данный рефлекс исчезает при температуре T = 75 К в $Ni_{0,90}V_{0,10}MnSb$, а на спектре $Ni_{0,90}Cr_{0,10}MnSb$ он наблюдается во всем исследуемом диапазоне температур. В рамках теории функционала плотности (DFT) проведен *ab initio* расчет кристаллической структуры и магнитных моментов для $Ni_{1-x}M_xMnSb$ (M = Ti, V, Cr; x = 0; 0,125; 0,250). Установлено, что ионы титана, ванадия и хрома участвуют в переносе электрона только с ионами Mn и Sb. Результаты DFT предсказывают существование магнитных моментов у ионов Ti, V и Cr. Обнаружено, что спины ионов Ti, V и Cr антиферромагнитно связаны со спинами ионов Mn и Ni. Полученные результаты представляют интерес для разработки новых концепции и моделей структурного дизайна, при котором возможен синтез принципиально новых функциональных материалов с уже заданными физическими свойствами.

Ключевые слова: интерметаллиды, рентгеновская дифракция, дифракция нейтронов, кристаллическая и магнитная структуры, *ab initio* расчет

Для цитирования: Магнитные характеристики твердых растворов $Ni_{1-x}M_xMnSb$ (M = Ti, V, Cr) / Г. С. Римский [и др.] // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-тэхн. навук. – 2022. – Т. 67, № 4. – С. 351–359. https://doi.org/10.29235/1561-8358-2022-67-4-351-359

Grigory S. Rymski[1], Anton V. Rutkauskas[2], Elena V. Duzeva-Maltseva[3], Kazimir I. Yanushkevich[1], Denis P. Kozlenko[2], Victor P. Glazkov[3], Tuan Anh Tran [4], Ngoc Toan Dang[5], Trong-Phuc Hoang[5]

[1]Scientific-Practical Materials Research Center of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Republic of Belarus
[2]Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Moscow Region, Russian Federation
[3]National Research Center "Kurchatov Institute", Moscow, Russian Federation
[4]Ho Chi Minh City University of Technology and Education, Ho Chi Minh, Vietnam
[5]Duy Tan University, Danang, Vietnam

MAGNETIC CHARACTERISTICS OF SOLID SOLUTIONS $Ni_{1-x}M_xMnSb$ (M = Ti, V, Cr)

Abstract. The results of an experiment on the study of the crystal and magnetic structures of substitutional solid solutions of the $Ni_{0.90}M_{0.10}MnSb$ (M = Ti, V, Cr) systems using thermal neutron diffraction in the temperature range ~ 3–300 K are presented. It is found that all the studied compositions have ferromagnetic ordering along the *c* axis. In the spectra of $Ni_{0.90}V_{0.10}MnSb$ and $Ni_{0.90}Cr_{0.10}MnSb$ solid solutions, a reflection appears in the region 2Θ = 28.6°, which indicates the formation of antiferromagnetic ordering. It has been found that this reflection disappears at a temperature T = 75 K in $Ni_{0.90}V_{0.10}MnSb$, while it is observed in the spectrum of $Ni_{0.90}Cr_{0.10}MnSb$ over the entire temperature range under study. Within the framework of density functional theory (DFT), an ab initio calculation of the crystal structure and magnetic moments for $Ni_{1-x}M_xMnSb$ (M = Ti,

V, Cr; x = 0; 0.125; 0.250) was carried out. It has been established that titanium, vanadium, and chromium ions participate in electron transfer only with Mn and Sb ions. The DFT results predict the existence of magnetic moments for Ti, V, and Cr ions. It was found that the spins of Ti, V, and Cr ions are antiferromagnetically coupled with the spins of Mn and Ni ions. The results obtained are of interest for the development of new concepts and models of structural design, which makes it possible to synthesize fundamentally new functional materials with already specified physical properties.

Keywords: intermetallics, X-ray diffraction, neutron diffraction, crystal and magnetic structures, *ab initio* calculation

For citation: Rymski G. S., Rutkauskas A. V., Duzeva-Maltseva E. V., Yanushkevich K. I., Kozlenko D. P., Glazkov V. P., Tuan Anh Tran, Ngoc Toan Dang, Trong-Phuc Hoang. Magnetic characteristics of solid solutions $Ni_{1-x}M_xMnSb$ (M = Ti, V, Cr). *Vestsi Natsyyanal'nai akademii navuk Belarusi. Seryya fizika-technichnych navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physical-technical series*, 2022, vol. 67, no. 4, pp. 351–359 (in Russian). https://doi.org/10.29235/1561-8358-2022-67-4-351-359

Введение. Изучение физических свойств полуметаллических ферромагнетиков как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения является одной из актуальных задач современной физики конденсированного состояния. Это вызвано тем, что подобные материалы проявляют металлические свойства для одной спиновой зоны, а полупроводниковые – для противоположной зоны, что делает перспективным их применение в спинтронике [1]. Благодаря высоким величинам температуры Кюри, удельной намагниченности и спиновой поляризации к таким материалам можно отнести и соединение NiMnSb, имеющее 22 валентных электрона. В полугейслеровских сплавах именно количество валентных электронов отвечает за физические свойства соединений [2]. Поэтому частичное замещение никеля другим переходным элементом может существенно изменить магнитные и транспортные свойства исходного соединения [3–5].

Цель данной работы – изучение влияния замещения переходными элементами на формирование магнитной структуры в системах $Ni_{1-x}M_xMnSb$ (M = Ti, V, Cr) с помощью нейтронной дифракции и расчета функционала плотности.

Синтез образцов и экспериментальные методы. Составы систем $Ni_{1-x}M_xMnSb$ (M = Ti, V, Cr) синтезированы методом твердофазных реакций в вакуумированных кварцевых ампулах. Чистота исходных порошков составляла: для Mn – 99,98 %, для Ni, Ti, V и Cr – 99,99 %, для Sb – 99,999 %. Синтез был проведен при температуре 1020 К в течение 24 ч с последующей закалкой. Изучение кристаллической структуры и оценка фазового состава осуществлены методом дифракции рентгеновских лучей в CuK_α-излучении (длина волны λ = 1,5418 Å) при комнатной температуре. Исследования нейтронной дифракции при комнатной температуре для соединения MnNiSb и $Ni_{0,90}M_{0,10}MnSb$ (M = Ti, V, Cr) проводились на спектрометре ДН-12 импульсного высокопоточного реактора ИБР-2 (Лаборатория нейтронной физики им. И. М. Франка, Объединенный институт ядерных исследований, Россия) [6]. Характерное время измерения одного спектра составляло 2 ч.

Эксперименты по нейтронной дифракции при низких температурах для $Ni_{0,90}M_{0,10}MnSb$ (M = Ti, V, Cr) выполнены на дифрактометре ДИСК (длина волны λ = 2,41 Å) нейтронного исследовательского стационарного реактора ИР-8 (Научно-исследовательский центр «Курчатовский институт», Россия) [7]. Характерное время измерения одного спектра составляло 2 ч. Анализ всех полученных дифракционных данных производился методом Ритвельда с помощью программы FullProf [8]. Расчеты *ab initio* функционала плотности DFT (Density Functional Theory) выполнены с использованием пакета Quantum ESPRESSO [9, 10] с приближением обобщенного градиента GGA (Generalized Gradient Approximation) и параметризации PBE (Perdew–Burke–Ernzerhof) [11]. Псевдопотенциалы ультрамягкого типа Вандербильта (УСПП) [12] трактовались как валентные состояния. Для соединений NiMnSb и $Ni_{0,75}M_{0,25}MnSb$ (M = Ti, V, Cr) использовали 12-атомную элементарную ячейку, а для $Ni_{0,875}M_{0,125}MnSb$ (M = Ti, V, Cr) – 24-атомную. Электронная волновая функция разложена в базисе плоских волн с обрезанием по энергии 80 Ry. Плотность заряда была расширена в базисе с отсечкой плоской волны 500 Ry. В расчете самосогласованного поля использовались k-сетки Монкхорста–Пака 8 × 8 × 8 и 8 × 8 × 4 для 12- и 24-атомной элементарных ячеек соответственно. Расчет и анализ заряда Бейдера выполнен на основе поверхностной плотности заряда с нулевым потоком [13] на оптимизированных структурах. Для расчетов начальной конфигурации использована ферромагнитная конфигурация атомов Mn.

Результаты эксперимента и их обсуждение. Ранее проведены исследования кристаллической структуры и магнитных характеристик твердых растворов систем $Ni_{1-x}M_xMnSb$ (M = Ti,

V, Cr) с помощью рентгеновской дифракции, пондеромоторным и вибрационным методами [14–16]. Численные значения основных величин, описывающих кристаллическую структуру и магнитные характеристики, представлены в табл. 1.

Таблица 1. **Значения параметра (a), расчетной ($d_{расч}$) и экспериментальной ($d_{эксп}$) плотностей кристаллической ячейки, среднего магнитного момента при 80 К μ_{80K} и температур Кюри T_C в твердых растворах $Ni_{1-x}M_xMnSb$ (M = Ti, V, Cr)**

Table 1. **Values of parameter (a), calculated ($d_{расч}$) and experimental ($d_{эксп}$) density of the crystal cell, the average magnetic moment at 80 K μ_{80K} and Curie temperatures T_C in solid solutions $Ni_{1-x}M_xMnSb$ (M = Ti, V, Cr)**

x	a, нм	$d_{расч}$, г/см^3	$d_{эксп}$, г/см^3	μ_{80K}, $\mu_Б$	T_C, К
NiMnSb					
0,00	0,592(6)	7,51	7,19	3,81	725
$Ni_{1-x}Ti_xMnSb$					
0,05	0,592(9)	7,48	7,16	3,77	702
0,10	0,593(2)	7,45	7,10	3,58	664
0,15	0,594(3)	7,39	7,11	3,28	631
0,20	0,595(5)	7,33	6,99	2,94	–
0,25	0,596(0)	7,30	6,99	2,76	–
$Ni_{1-x}V_xMnSb$					
0,05	0,593(0)	7,48	7,13	3,80	673
0,10	0,593(2)	7,46	7,19	3,71	611
0,15	0,593(8)	7,43	7,10	3,62	559
0,20	0,594(5)	7,39	7,08	3,47	–
$Ni_{1-x}Cr_xMnSb$					
0,05	0,592(9)	7,49	7,19	3,92	688
0,10	0,593(2)	7,47	7,10	3,89	659
0,15	0,593(6)	7,44	7,13	3,74	–

С целью дальнейшего изучения данных соединений методом дифракции тепловых нейтронов на спектрометре ДН-12 выполнены исследования кристаллической и магнитной структур соединения NiMnSb и твердых растворов $Ni_{0,90}M_{0,10}MnSb$ (M = Ti, V, Cr) при T = 300 К (рис. 1). Установлено, что все исследуемые составы обладают кубической структурой с пространственной группой $F\bar{4}3m$, где атомы занимают позиции: Mn 4b (1/2, 1/2, 1/2), Ni/M 4c (1/4, 1/4, 1/4) и Sb 4a (0, 0, 0) (тип MgAgAs ($C1_b$)), а также ферромагнитным упорядочением вдоль оси c. Численные значения параметров элементарной ячейки и магнитных моментов ионов Mn в твердых растворах $Ni_{0,90}M_{0,10}MnSb$ (M = Ti, V, Cr) при 300 К представлены в табл. 2. Для MnNiSb магнитный момент ионов Mn составляет M = 3,8μ_B. Это значение соответствует ранее полученным результатам [17–19]. Для соединений с замещением ионов никеля титаном и ванадием наблюдается уменьшение магнитного момента на ~ 8–9 %, в то время как для ионов хрома значение магнитного момента почти не изменяется.

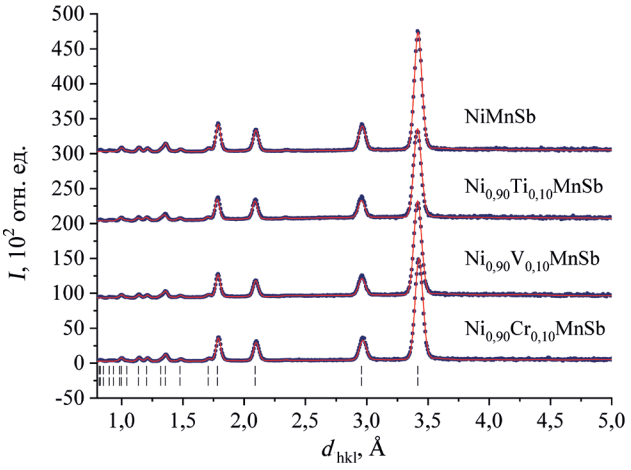

Рис. 1. Фрагменты нейтронных спектров MnNiSb и $Ni_{0,90}M_{0,10}MnSb$ (M = Ti, V, Cr), измеренные на дифрактометре ДН-12 при T = 300 К. Вертикальными штрихами показаны рассчитанные положения пиков для кубической и ферромагнитной фаз; d_{hkl} – межплоскостное расстояние

Fig. 1. Fragments of the neutron spectra of MnNiSb and $Ni_{0.90}M_{0.10}MnSb$ (M = Ti, V, Cr), measured on a diffractometer DN-12 at T = 300 K. Vertical strokes show the calculated peak positions for the cubic and ferromagnetic phases; d_{hkl} – interplane distance

Таблица 2. **Значения параметра (*a*), объемов (*V*) и межатомных расстояний кристаллической ячейки, магнитных моментов ионов Mn в соединениях NiMnSb и $Ni_{0,90}M_{0,10}MnSb$ (M = Ti, V, Cr) при 300 К**

Table 2. **Values of parameter (*a*), volumes (*V*) and interatomic distances of the crystal cell, magnetic moments of Mn ions in NiMnSb and $Ni_{0.90}M_{0.10}MnSb$ (M = Ti, V, Cr) at 300 K**

Соединение	*a*, Å	*V*, Å^3	Mn-Ni/M, Å	Sb-Ni/M, Å	M, $\mu_Б$
NiMnSb	5,928(6)	208,317	2,5668	2,5668	3,8(7)
$Ni_{0,90}Ti_{0,10}MnSb$	5,929(6)	208,422	2,5672	2,5672	3,45(7)
$Ni_{0,90}V_{0,10}MnSb$	5,930(1)	208,528	2,5680	2,5680	3,53(7)
$Ni_{0,90}Cr_{0,10}MnSb$	5,934(1)	208,960	2,5694	2,5694	3,73(7)

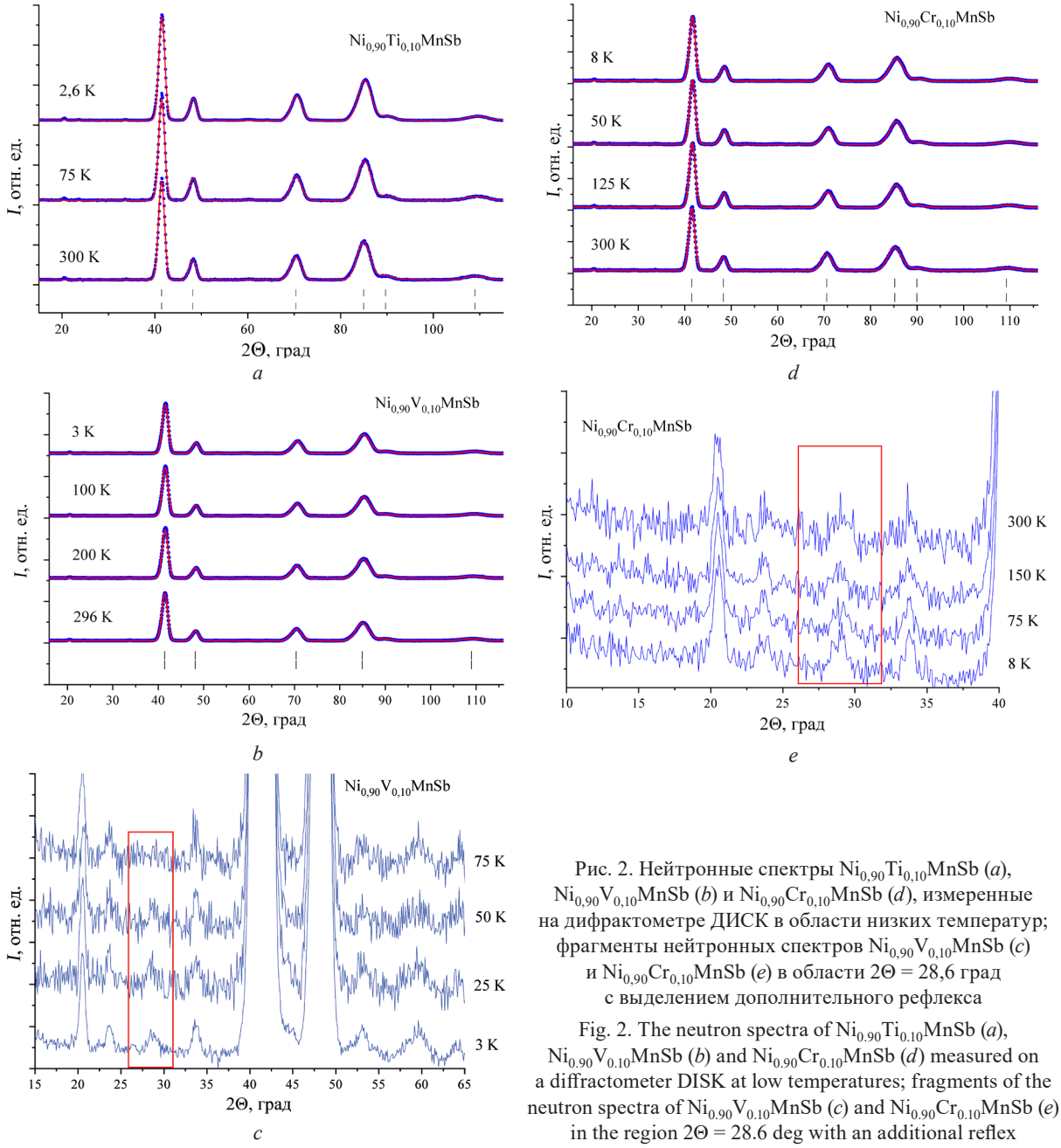

Рис. 2. Нейтронные спектры $Ni_{0,90}Ti_{0,10}MnSb$ (*a*), $Ni_{0,90}V_{0,10}MnSb$ (*b*) и $Ni_{0,90}Cr_{0,10}MnSb$ (*d*), измеренные на дифрактометре ДИСК в области низких температур; фрагменты нейтронных спектров $Ni_{0,90}V_{0,10}MnSb$ (*c*) и $Ni_{0,90}Cr_{0,10}MnSb$ (*e*) в области 2Θ = 28,6 град с выделением дополнительного рефлекса

Fig. 2. The neutron spectra of $Ni_{0.90}Ti_{0.10}MnSb$ (*a*), $Ni_{0.90}V_{0.10}MnSb$ (*b*) and $Ni_{0.90}Cr_{0.10}MnSb$ (*d*) measured on a diffractometer DISK at low temperatures; fragments of the neutron spectra of $Ni_{0.90}V_{0.10}MnSb$ (*c*) and $Ni_{0.90}Cr_{0.10}MnSb$ (*e*) in the region 2Θ = 28.6 deg with an additional reflex

Низкотемпературные исследования соединения $Ni_{0,90}M_{0,10}MnSb$ (M = Ti, V, Cr), проведенные методом нейтронной дифракции на спектрометре ДИСК, показали сохранение исходной кристаллической структуры (рис. 2). В то же время при понижении температуры для всех составов наблюдался небольшой рост интегральной интенсивности структурных пиков, что отра-

`Z_l m_ebq_gb_ fZ]gblguo Mn f_gZh\kib_hdlhZ9o 0Q6E Ni K 0Q6E
\ h[eZklb , f [ueh hlf_q_gh ihy\e_gb_ ^hihegbl_evgh]h j_ne_
nhjfbjh\Zgb_ Zglbn_jjhfZ]gblgh]h mihjy^hq_gby >Zgguc j_ne_dk b
T D Ni 9 0Q6E< ki_dNlj_Cr 0Q6E wlhl j_ne_dk gZ[ex^Zeky \h \k_f ^b
l_fi_jZlmj Qbke_ggu_ agZq_gby iZjZf_ljh\ djbklZeebq_kdhc yq_cdb
bhgZlo \ khklZl\Zlo 0Q6E M Ti 9Cr ij_^klZ\e_gu \ lZ[e

L Z [e b p 3 Значения параметра кристаллической ячейки (*a*) и магнитных моментов ионов Mn (M) в твердых растворах $Ni_{0,90}M_{0,10}MnSb$ (M = Ti, V, Cr) в зависимости от температуры

7 D E O Values of the parameter of the crystal cell (*a*) and of the magnetic moments of Mn ions (M) in $Ni_{0.90}M_{0.10}MnSb$ (M = Ti, V, Cr) solid solutions depending on temperature

T D	D c	9 c	Mn-Ni/ F c	6 E 1 L c	M μ_B
$Ni_{1\pm}Ti_{}$ 0 Q 6 E					
			2 5542	2 5542	3 (1)
	5		2 5552	2 5552	3 (1)
	5 ( )		2	2	3 5(1)
$Ni_{1\pm}9_{}$ 0 Q 6 E					
3	5(8)	6	13	13	(2)
25	8(8)	265			(2)
					(2)
					8(2)
	22(8)	685	43	43	(2)
125	21(8)				(2)
	4(8)		52	52	
	6(8)				6(2)
		528			(2)
$Ni_{1\pm}Cr_{}$ 0 Q 6 E					
8					1(1)
25					4
					4
					1(1)
					(1)
125					1(1)
					(1)
					(1)

L Z [e b p 7 Теоретически рассчитанные значения параметра кристаллической ячейки (*a*), магнитных моментов ионов (μ) и зарядов Бейдера (*E*) в NiMnSb и $Ni_{1-x}M_xMnSb$ (M = Ti, V, Cr) в зависимости от концентрации замещающего элемента

7 D E O Theoretical calculated values of the crystal cell parameter (*a*), magnetic moments of ions (μ) and Bader charges (*E*) in NiMnSb and $Ni_{1-x}M_xMnSb$ (M = Ti, V, Cr) depending on the concentration of the substituting element

o	D c	Mn		Ni		6 E		M	
		σ;	(e	σ;	(e	σ;	(e	σ;	(e
1 L 0 Q 6 E									
			±			±		±	±
$Ni_{1\pm}Ti_{}$ 0 Q 6 E									
125			±			±		±	±
			±			±		±	±
$Ni_{1\pm}9_{}$ 0 Q 6 E									
125		3 4	±	1644		±		±	±
	5	3	±	1213		±		±	±
$Ni_{1\pm}Cr_{}$ 0 Q 6 E									
125	5 1	3 4	±	1883		±		±	±
	5 8	3	±			±		±	±

Для выяснения причины возникновения антиферромагнитной фазы на спектрах нейтронов произведен расчет функционала плотности DFT для соединений NiMnSb и $Ni_{1-x}M_xMnSb$ (M = = Ti, V, Cr). Полученные результаты подтверждают стабильность исходной кубической сингонии Cl_b пространственной группы $F\bar{4}3m$ при замещении атомов никеля титаном, ванадием и хромом в теоретически исследованных пределах ($x \geq 0{,}25$). Теоретически рассчитанные значения параметра элементарной ячейки и магнитных моментов, а также заряда Бейдера в зависимости от концентрации замещения представлены в табл. 4. Установлено, что с увеличением замещения никеля Ti, V и Cr наблюдается расширение элементарной ячейки. Анализ заряда Бейдера показывает, что при замещении Ti, V и Cr заряды атомов Mn и Sb значительно изменяются, в то время как для атомов Ni наблюдаются лишь незначительные изменения. Это означает, что ионы титана, ванадия и хрома участвуют в переносе электрона только с ионами Mn и Sb.

На примере системы $Ni_{1-x}Ti_xMnSb$ (x = 0; 0,25) представлены результаты расчета парциальной плотности состояний (рис. 3, *a*, *c*). Из расчетов PDOS установлено (рис. 3, *b*, *d*), что исходное соединение NiMnSb демонстрирует 100%-ное спин-поляризованное полуметаллическое поведение, область с нижним спином – щель, а область с противоположным спином – нормальное металлическое поведение. Расчеты DFT согласуются с ранее полученными результатами [20]. Ширина щели в полосе нижнего спина составляет около 0,4 эВ, что близко к экспериментально наблюдаемому [21]. PDOS в основном характеризуется большим обменным расщеплением d-состояний Mn, расположенных около –3 эВ. Это создает в значительной степени локализованные спиновые моменты около 3,6 μ_B в узлах Mn, что имеет решающее значение для появления полуметаллических свойств в соединении [22]. Спины Ni ферромагнитно связаны со спинами Mn малыми индуцированными магнитными моментами около 0,2 μ_B из-за слабого обменного расщепления, а спины Sb антиферромагнитно связаны со спинами Mn.

В системах $Ni_{1-x}M_xMnSb$ (M = V, Cr) из расчетов PDOS установлено спин-поляризованное полуметаллическое поведение. В области с нижним спином наблюдается щель, а в области с противоположным спином – нормальное металлическое поведение. Ширина щели в полосе нижнего спина при замещении никеля ванадием составляет около 0,3 эВ для x = 0,125 и 0,24 эВ – для x = 0,250. При замещении никеля хромом ширина щели в полосе нижнего спина равна 0,4 эВ и 0,3 эВ для x = 0,125 и x = 0,250 соответственно.

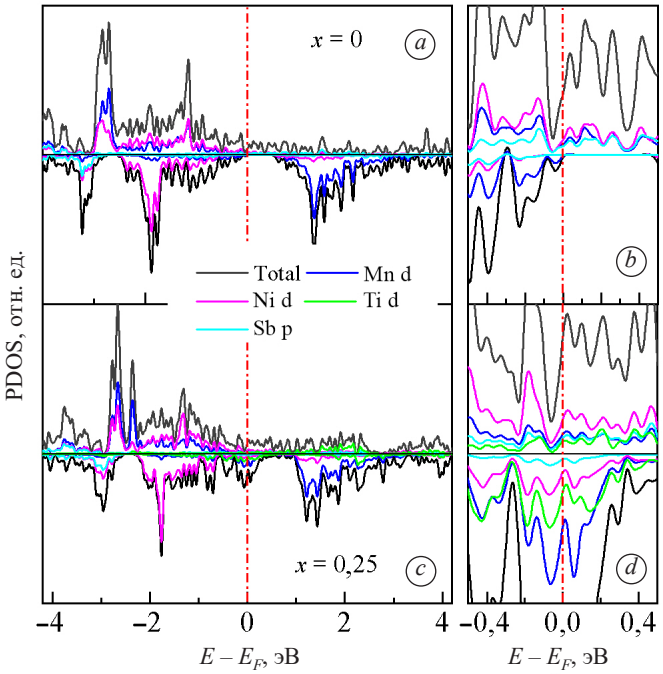

Рис. 3. Парциальная плотность состояний (PDOS) в двух направлениях спина в $Ni_{1-x}Ti_xMnSb$ при x = 0 (*a*) и 0,25 (*c*). На вставках *b* и *d* показана PDOS возле уровня Ферми

Fig. 3. Partial density of states (PDOS) plotted in the two spin directions of $MnNi_{1-x}Ti_xSb$ with x = 0 (*a*) and 0.25 (*c*). The insets *b* and *d* show the enlarged zoom of PDOS around the Fermi

Результаты DFT предсказывают существование магнитных моментов у ионов Ti, V и Cr. Полученное значение магнитного момента для ионов Ti составляет около 0,7 μБ, что сравнимо с полученными ранее значениями для фазы Магнели Ti_5O_9 [23]. Обнаружено, что спины Ti, V и Cr антиферромагнитно связаны со спинами Mn и Ni, что объясняет возникновение антиферромагнитного рефлекса на спектрах нейтронов и может служить причиной снижения общей намагниченности при замещении наблюдаемой при исследовании удельной намагниченности твердых растворов систем $Ni_{1-x}M_xMnSb$ (M = Ti, V, Cr) (см. табл. 1).

Заключение. В результате проведенного эксперимента по изучению магнит-

ных характеристик составов систем $Ni_{1-x}M_xMnSb$ (M = Ti, V, Cr) с применением как расчетных, так и экспериментальных методов получены согласованные значения параметра элементарных ячеек (*a*) и магнитных моментов ионов Mn с погрешностью ~ 4 %, что позволяет относиться с высокой долей доверия к основным результатам. Теоретически предсказано существование магнитных моментов у ионов Ti, V и Cr при замещении никеля в соединении NiMnSb. Обнаружено, что спины Ti, V и Cr антиферромагнитно связаны со спинами Mn и Ni. Установлено, что ионы титана, ванадия и хрома участвуют в переносе электрона только с ионами Mn и Sb. Полученная экспериментальная информация может иметь важное значение для построения моделей формирования уникальных свойств новых типов магнитных материалов.

Благодарности

Работа выполнена в рамках совместного гранта для молодых ученых «БРФФИ–РФФИ М-2021» (грант № T21PM-029 и № 20-52-04003 Бел_мол_а).

Acknowledgements

The work was carried out within the framework of a joint grant for young scientists “BRFFR–RFFR M-2021” (grant no. T21RM-029 and no. 20-52-04003 Bel_mol_a).

Список использованных источников

1. Review on spintronics: Principles and device applications / A. Hirohata [et al.] // J. Magn. Magn. Mater. – 2020. – Vol. 509. – Art. ID 166711. https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2020.166711

2. Graf, T. Simple rules for the understanding of Heusler compounds / T. Graf, C. Felser, S. S. P. Parkin // Progress in Solid State Chemistry. – 2011. – Vol. 39, № 1. – P. 1–50. https://doi.org/10.1016/j.progsolidstchem.2011.02.001

3. Effects of substitution of Zn for Ni in NiMnSb alloys / S. K. Ren [et al.] // J. Alloys Compd. – 2004. – Vol. 384, № 1–2. – P. 22–24. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2004.03.118

4. Magnetic behavior of half-Heusler alloy $Cu_xNi_{1-x}MnSb$ / S. K. Ren [et al.] // J. Magn. Magn. Mater. – 2005. – Vol. 288. – P. 276–281. https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2004.09.107

5. Crossover from antiferromagnetic to ferromagnetic ordering in the semi-Heusler alloys $Cu_{1-x}Ni_xMnSb$ with increasing Ni concentration / M. Halder [et al.] // Phys. Rev. B. – 2011. – Vol. 84, № 9. – Art. ID 094435. http:// doi.org/10.1103/PhysRevB.84.094435

6. DN-12 time-of-flight high-pressure neutron spectrometer for investigation of microsamples / V. L. Aksenov [et al.] // Physica B: Phys. Condens. Matter. – 1999. – Vol. 265, № 1–4. – P. 258–262. https://doi.org/10.1016/S0921-4526(98)01392-1

7. Superposition Many-Detector Systems and Neutron Diffraction of Microsamples / V. P. Glazkov [et al.] // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A. – 1988. – Vol. 264, № 2–3. – P. 367–374. https://doi.org/10.1016/0168-9002(88)90925-4

8. Rodriguez-Carvajal, J. Recent advances in magnetic structure determination by neutron powder diffraction / J. Rodriguez-Carvajal // Physica B: Phys. Condens. Matter. – 1993. – Vol. 192, № 1–2. – P. 55–69. https://doi.org/10.1016/0921-4526(93)90108-I

9. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / P. Giannozzi [et al.] // J. Phys.: Condens. Matter. – 2009. – Vol. 21, № 39. – Art. ID 395502. https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502

10. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO / P. Giannozzi [et al.] // J. Phys.: Condens. Matter. – 2017. – Vol. 29, № 46. – P. 465901. https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa8f79

11. Perdew, J. P. Generalized Gradient Approximation Made Simple / J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // Phys. Rev. Let. – 1996. – Vol. 77, № 18. – P. 3865–3868. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865

12. Vanderbilt, D. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism / D. Vanderbilt // Phys. Rev. B. – 1990. – Vol. 41, № 11. – P. 7892–7895. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.41.7892

13. Bader, R. F. W. A quantum theory of molecular structure and its applications / R. F. W. Bader // Chem. Rev. – 1991. – Vol. 91, № 5. – P. 893–928. https://doi.org/10.1021/cr00005a013

14. Римский, Г. С. Кристаллическая структура и магнитные характеристики твердых растворов $Ni_{1-x}Cr_xMnSb$ / Г. С. Римский, К. И. Янушкевич, А. В. Руткаускас // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-техн. навук. – 2021. – Т. 66, № 6. – С. 263–269. https://doi.org/10.29235/1561-8358-2021-66-3-263-269

15. Римский, Г. С. Особенности кристаллической структуры и магнитных характеристик твердых растворов $Ni_{1-x}Ti_xMnSb$ ($0.00 \le x \le 0.50$) / Г. С. Римский, К. И. Янушкевич, А. В. Руткаускас // Вестн. Фонда фундамент. исследований. – 2021. – Т. 95, № 1. – С. 34–41.

16. Римский, Г. С. Влияние катионного замещения на кристаллическую структуру и магнитные характеристики твердых растворов $MnNi_{1-x}V_xSb$ / Г. С. Римский, К. И. Янушкевич // Весн. Брэсц. ун-та. Сер. 4, Фізіка. Матэматыка. – 2021. – № 1. – С. 34–40.

17. Tuning the magnetocaloric response in half-Heusler/Heusler $MnNi_{1+x}Sb$ solid solutions / E. E. Levin [et al.] // Phys. Rev. Mat. – 2017. – Vol. 1, № 7. – Art. ID 075003. https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials

18. De Groot, R. A. FeMnSb: A half-metallic ferrimagnet / R. A. De Groot, A. M. van der Kraan, K. H. J. Buschow // J. Magn. Magn. Mater. – 1986. – Vol. 61, № 3. – P. 330–336. https://doi.org/10.1016/0304-8853(86)90046-6

19. Atomic and magnetic structure of the heusler alloys NiMnSb and CoMnS / Z. Szytula [et al.] // Phys. Stat. Sol. (a). – 1972. – Vol. 9, № 57. – P. 97–103. https://doi.org/10.1002/pssa.2210090109

20. Electronic and magnetic properties of $NiMn_{1-x}Ho_xSb$ compounds / R. Grasin [et al.] // Phys. Stat. Sol. (b). – 2012. – Vol. 249, № 9. – P. 1779–1783. https://doi.org/10.1002/pssb.201147553

21. Interband Optical Absorption and Plasma Effects in Half-Metallic XMnY Ferromagnets / M. M. Kirillova [et al.] // Phys. Stat. Sol. (b). – 1995. – Vol. 187, № 1. – P. 231–240. https://doi.org/10.1002/pssb.2221870122

22. Galanakis, I. Origin and properties of the gap in the half-ferromagnetic Heusler alloys / I. Galanakis, P. H. Dederichs, N. Papanikolaou // Phys. Rev. B. – 2022. – Vol. 66, № 13. – Art. ID 134428. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.134428

23. Slipukhina, I. Electronic and magnetic properties of the Ti_5O_9 Magnéli phase / I. Slipukhina, M. Lezaic // Phys. Rev. B. – 2014. – Vol. 90, № 15. – Art. ID 155133. https://doi.org/10.1103/physrevb.90.155133

References

1. Hirohata A., Yamada K., Nakatani Y., Prejbeanu I.-L., Dieny B., Pirro P., Hillebrands B. Review on spintronics: Principles and device applications. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials,* 2020, vol. 509, art. ID 166711. https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2020.166711

2. Graf T., Felser C., Parkin S. S. P. Simple rules for the understanding of Heusler compounds. *Progress in Solid State Chemistry,* 2011, vol. 39, no. 1, pp. 1–50. https://doi.org/10.1016/j.progsolidstchem.2011.02.001

3. Ren S. K., Gao J., Jiang X. L., Ji G. B., Zou W. Q., Zhang F. M., Du Y. W. Effects of substitution of Zn for Ni in NiMnSb alloys. *Journal of Alloys and Compounds*, 2004, vol. 384, no. 1–2, pp. 22–24. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2004.03.118

4. Ren S. K., Zou W. Q., Gao J., Jiang X. L., Zhang F. M., Du Y. W. Magnetic behavior of half-Heusler alloy $Cu_xNi_{1-x}MnSb$. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials,* 2005, vol. 288, pp. 276–281. https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2004.09.107

5. Halder M., Yusuf S. M., Kumar A., Nigam A. K., Keller L. Crossover from antiferromagnetic to ferromagnetic ordering in the semi-Heusler alloys $Cu_{1-x}Ni_xMnSb$ with increasing Ni concentration. *Physical Review B*, 2011, vol. 84, no. 9, art. ID 094435. http://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.094435

6. Aksenov V. L., Balagurov A. M., Glazkov V. P., Kozlenko D. P., Naumov I. V., Savenko B. N., Sheptyakov D. V. [et al.] DN-12 time-of-flight high-pressure neutron spectrometer for investigation of microsamples. *Physica B: Physics of Condensed Matter*, 1999, vol. 265, no. 1–4, pp. 258–262. https://doi.org/10.1016/S0921-4526(98)01392-1

7. Glazkov V. P., Naumov I. V., Somenkov V. A., Shilshtein S. Sh. Superposition Many-Detector Systems and Neutron Diffraction of Microsamples. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research – section A*, 1988, vol. 264, no. 2–3, pp. 367–374. https://doi.org/10.1016/0168-9002(88)90925-4

8. Rodriguez-Carvajal J. Recent advances in magnetic structure determination by neutron powder diffraction. *Physica B: Physics of Condensed Matter*, 1993, vol. 192, no. 1–2, pp. 55–69. https://doi.org/10.1016/0921-4526(93)90108-I

9. Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., Calandra M., Car R., Cavazzoni C., Ceresoli D. [et al.]. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2009, vol. 21, no. 39, art. ID 395502. https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502

10. Giannozzi P., Andreussi O., Brumme T., Bunau O., Buongiorno Nardelli M., Calandra M., Car R. [et al.]. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2017, vol. 29, no. 46, pp. 465901. https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa8f79

11. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, 1996, vol. 77, no. 18, pp. 3865–3868. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865

12. Vanderbilt D. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism. *Physical Review B*, 1990, vol. 41, no. 11, pp. 7892–7895. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.41.7892

13. Bader R. F. W. A quantum theory of molecular structure and its applications. *Chemical Review*, 1991, vol. 91, no. 5, pp. 893–928. https://doi.org/10.1021/cr00005a013

14. Rymski G. S., Yanushkevich K. I., Rutkauskas A. V. Crystal structure and magnetic characteristics of solid solutions $Ni_{1-x}Cr_xMnSb$. *Vestsi Natsyyanal'nai akademii navuk Belarusi. Seryya fizika-technichnuch navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physical-technical series*, 2021, vol. 66, no. 3, pp. 263–269 (in Russian). https://doi.org/10.29235/1561-8358-2021-66-3-263-269

15. Rymski G. S. Yanushkevich K. I. Features of the Crystal Structure and Magnetic Characteristics of Solid Solutions $Ni_{1-x}Ti_xMnSb$ ($0.00 \leq x \leq 0.50$). *Vestnik Fonda fundamental'hykh issledovanii = Bulletin of the Foundation for Fundamental Research*, 2021, vol. 95, no. 1, pp. 34–41 (in Russian).

16. Rymski G., Yanushkevich K. Effect of Cationic Substitution on the Crystal Structure and Magnetic Properties of Solid Solutions $MnNi_{1-x}V_xSb$. *Vesnik Brestskaga ўniversiteta. Seryya 4. Fizika. Matematyka = Vesnik of Brest University. Series 4. Physics. Mathematics*, 2021, no. 1, pp. 30–40 (in Russian).

17. Levin E. E., Bocarsly J. D., Wyckoff K. E., Pollock T. M., Seshadri R. Tuning the magnetocaloric response in half-Heusler/Heusler $MnNi_{1+x}Sb$ solid solutions. *Physical Review Materials*, 2017, vol. 1, no. 7, art. ID 075003. https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.1.075003

18. De Groot R. A., Kraan A. M. van der, Buschow K. H. J. FeMnSb: A half-metallic ferrimagnet. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials,* 1986, vol. 61, no. 3, pp. 330–336. https://doi.org/10.1016/0304-8853(86)90046-6

19. Szytula A., Dimitrijevic Z., Todorovic J., Kolodziejczyk A., Szelag J., Wanic A. Atomic and magnetic structure of the heusler alloys NiMnSb and CoMnS. *Physica Status Solidi (a),* 1972, vol. 9, no. 57, pp. 97–103. https://doi.org/10.1002/pssa.2210090109

20. Grasin R., Rusu C., Laslo A., Dudric R., Mican S., Neumann M., Tetean R. Electronic and magnetic properties of $NiMn_{1-x}Ho_xSb$ compounds. *Physica Status Solidi (b)*, 2012, vol. 249, no. 9, pp. 1779–1783. https://doi.org/10.1002/pssb.201147553

21. Kirillova M. M., Makhnev A. A., Shreder E. I., Dyakina V. P., Gorina N. B. Interband Optical Absorption and Plasma Effects in Half-Metallic XMnY Ferromagnets. *Physica Status Solidi (b)*, 1995, vol. 187, no. 1, pp. 231–240. https://doi.org/10.1002/pssb.2221870122

22. Galanakis I., Dederichs P. H., Papanikolaou N. Origin and properties of the gap in the half-ferromagnetic Heusler alloys. *Physical Review B*, 2022, vol. 66, no. 13, art. ID 134428. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.134428

23. Slipukhina I., Lezaic M. Electronic and magnetic properties of the Ti_5O_9 Magnéli phase. *Physical Review B*, 2014, vol. 90, no. 15, art. ID 155133. https://doi.org/10.1103/physrevb.90.155133

Информация об авторах

Римский Григорий Семенович – научный сотрудник лаборатории физики магнитных материалов, Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению (ул. П. Бровки, 19, 220072, Минск, Республика Беларусь). https://orcid.org/0000-0001-9958-092X. E-mail: rimskiy@physics.by

Руткаускас Антон Владимирович – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Лаборатории нейтронной физики им. И. М. Франка, Объединенный институт ядерных исследований (ул. Жолио-Кюри, 6, 141980, Дубна, Московская область, Российская Федерация). https://orcid.org/0000-0001-8463-928X. E-mail: ranton@nf.jinr.ru

Дюжева-Мальцева Елена Вадимовна – лаборант-исследователь отдела нейтронных экспериментальных станций, Научно-исследовательский центр «Курчатовский институт» (ул. Академика Курчатова, 1, 123182, Москва, Российская Федерация). E-mail: elena.dujewa@yandex.ru

Янушкевич Казимир Иосифович – доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией физики магнитных материалов, Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению (ул. П. Бровки, 19, 220072, Минск, Республика Беларусь). https://orcid.org/0000-0003-3763-6582. E-mail: k.yanushkevitch@yandex.by

Козленко Денис Петрович – доктор физико-математических наук, начальник научно-экспериментального отдела нейтронных исследований конденсированных сред, Лаборатория нейтронной физики им. И. М. Франка, Объединенный институт ядерных исследований (ул. Жолио-Кюри, 6, 141980, Дубна, Московская область, Российская Федерация). E-mail: denk@nf.jinr.ru

Глазков Виктор Павлович – ведущий специалист отдела нейтронных экспериментальных станций, Научно-исследовательский центр «Курчатовский институт» (ул. Академика Курчатова, 1, 123182, Москва, Российская Федерация). E-mail: vivadin@yandex.ru

Туан Ань Чан – доктор технических наук, факультет прикладных наук, Технологический и педагогический университет Хошимина (ул. Во Ван Нган, 1, 70000, Хошимин, Вьетнам). E-mail: anhtt@hcmute.edu.vn

Нгок Тоан Данг – доктор физико-математических наук, факультет экологических и естественных наук, Университет Дуй Тан (ул. Нгуен Ван Линь, 254, 550000, Дананг, Вьетнам). E-mail: dangtoan2107@gmail.com

Тронг Фук Хоанг – доктор физико-математических наук, факультет экологических и естественных наук, Университет Дуй Тан (ул. Нгуен Ван Линь, 254, 550000, Дананг, Вьетнам). E-mail: htphuc90@gmail.com

Information about the authors

Grigory S. Rimskiy – Researcher of the Laboratory of Physics of Magnetic Materials, Scientific-Practical Materials Research Center of the National Academy of Sciences of Belarus (19, P. Brovka Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). https://orcid.org/0000-0001-9958-092X. E-mail: rimskiy@physics.by

Anton V. Rutkauskas – Ph. D. (Physics and Mathematics), Researcher of the Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research (6, Joliot-Curie Str., Dubna, Moscow Region, Russian Federation). https://orcid.org/0000-0001-8463-928X. E-mail: ranton@nf.jinr.ru

Elena V. Duzeva-Maltseva – Research Laboratory Assistant of the Department of Neutron Experimental Facilities, National Research Center "Kurchatov Institute" (1, Kurchatov Str., 123182, Moskow, Russian Federation). E-mail: elena.dujewa@yandex.ru.

Kazimir I. Yanushkevich – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Head of the Laboratory of Physics of Magnetic Materials, Scientific-Practical Materials Research Center of the National Academy of Sciences of Belarus (19, P. Brovka Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). https://orcid.org/0000-0003-3763-6582. E-mail: k.yanushkevitch@yandex.by

Denis P. Kozlenko – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Head of the Scientific and Experimental Department of Neutron Investigations of Condensed Matter, Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research (6, Joliot-Curie Str., Dubna, Moscow Region, Russian Federation). E-mail: denk@nf.jinr.ru

Victor P. Glazkov – Chief Specialist of the Department of Neutron Experimental Facilities, National Research Center "Kurchatov Institute" (1, Kurchatov Str., 123182, Moskow, Russian Federation). E-mail: vivadin@yandex.ru

Tuan Anh Tran – Dr. Sc. (Engineering), Aplied Sciences Faculty, Ho Chi Minh City University of Technology and Education (1, Vo Van Ngan Str., 70000, Ho Chi Minh, Vietnam). E-mail: anhtt@hcmute.edu.vn

Ngoc Toan Dang – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Faculty of Environmental and Natural Sciences, Duy Tan University (254, Nguyen Van Linh Str., 550000, Danang, Vietnam). E-mail: dangtoan2107@gmail.com

Trong-Phuc Hoang – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Faculty of Environmental and Natural Sciences, Duy Tan University (254, Nguyen Van Linh Str., 550000, Danang, Vietnam). E-mail: htphuc90@gmail.com