

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

УДК 669.74'1'71:538.958

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА, ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА Mn_2MeAl ($\text{Me} = \text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}$)

© 2023 г. Е. И. Шредер^{a, *}, А. Н. Филанович^{a, b}, Е. Д. Чернов^a, А. В. Лукоянов^{a, b},
В. В. Марченков^{a, b}, Л. А. Сташкова^a

^aИнститут физики металлов УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия

^bУральский федеральный университет, ул. Мира, 19, Екатеринбург, 620002 Россия

*e-mail: shreder@imp.uran.ru

Поступила в редакцию 18.04.2023 г.

После доработки 11.05.2023 г.

Принята к публикации 15.05.2023 г.

Представлены результаты расчетов электронной структуры, термоэлектрических характеристик и экспериментального исследования термоэлектрических, электрических, оптических свойств сплавов Гейслера Mn_2MeAl ($\text{Me} = \text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}$). Показано соответствие теории и эксперимента по знаку коэффициента Зеебека. Полученная картина зонного спектра позволяет дать качественное объяснение особенностей температурной зависимости электросопротивления и дисперсии диэлектрической проницаемости.

Ключевые слова: сплавы Гейслера, электронная структура, коэффициент Зеебека, электросопротивление, оптические свойства

DOI: 10.31857/S0015323023600624, **EDN:** DKNQFZ

ВВЕДЕНИЕ

Актуальной проблемой является поиск материалов, эффективных для применения в твердотельных устройствах для выработки электроэнергии, в системах утилизации отработанного тепла. Определяющими служат три параметра, зависящие от материала: коэффициент Зеебека, удельное электрическое сопротивление и теплопроводность. Три отдельных физических свойства, составляющих термоэлектрическую добротность, не являются независимыми друг от друга. Улучшить одно, не вызывая ухудшения другого, сложно или невозможно.

В настоящее время в качестве термоэлектрических материалов используют полупроводниковые соединения, такие как теллуриды и селениды висмута, сурьмы, их твердые растворы. Металлические соединения не привлекали внимание по данной проблеме из-за их низкого коэффициента Зеебека. Однако в последние годы в круг интересов исследователей попали сплавы Гейслера (СГ) X_2MeZ (X и Me — переходные металлы, Z — элемент III–V группы). В настоящее время среди этих сплавов — материалы с уникальными физическими свойствами, включая полуметаллические, высокотемпературные ферри- и ферромагнетики, мультиферроики, сплавы с памятью формы и пере-

страиваемые топологические изоляторы, с высоким потенциалом для многочисленных применений [1]. Теоретически и экспериментально показано, что можно существенно изменять свойства СГ, проводя замену составляющих элементов, наноструктурирование, термообработку и др.

Теоретические исследования показывают, что относительно высокий коэффициент Зеебека могут демонстрировать СГ, классифицируемые как полуметаллические ферромагнетики или спиновые бесщелевые полупроводники [2–12].

Во многих статьях делается упор на взаимосвязь кристаллической структуры и термоэлектрических свойств через электронную структуру (см, напр., [3] и ссылки в ней). Если расчеты выполнены для идеальной кристаллической структуры, то, как правило, рассчитанные значения не отображают экспериментальной зависимости термоэлектрических свойств. Это связано с тем, что реальные образцы сплавов не могут находиться в полностью упорядоченной структуре, например, $L2_1$ для сплавов Гейслера Co_2MeZ , $\text{Me} = \text{Ti}, \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}$, $\text{Z} = \text{Al}, \text{Si}, \text{Sn}$ [3, 4], большинство из них кристаллизуется в структурах $B2$ и/или $A2$. Наличие дефектов и/или беспорядок влияют на температурную зависимость, а также на знак коэффициента Зеебека.

Таблица 1. Кристаллическая структура сплавов

Сплав	Фазовый состав, группа симметрии	Доля фаз, вес. %	Параметр решетки, Å
Mn ₂ TiAl	β-Mn (<i>P</i> 4 ₁ 32)	29	6.439
	Mn ₂ TiAl (<i>P</i> 6/ <i>mmm</i>)	71	4.930/8.012
Mn ₂ VAl	MnAl (<i>Pm</i> -3 <i>m</i>)	100	2.946
Mn ₂ CrAl	β-Mn (<i>P</i> 4 ₁ 32)	50	6.408
	Cr (<i>Im</i> -3 <i>m</i>)	50	2.918

Кроме того, в уравнение для расчета коэффициента Зеебека входят параметры, которые являются функциями времени релаксации $\tau(k, T)$, и расчеты ведутся в предположении, что τ для электронов со спинами ($\uparrow$) и ($\downarrow$) одинаково [3].

Электронная структура материала в первую очередь определяется типом кристаллической структуры. Многочисленными исследованиями показано, что сплавы Гейслера на основе марганца могут иметь β-Mn-структуру (пространственная группа *P*4₁32), либо инверсную X (Hg₂CuTi тип, пространственная группа *F*-43*m*, 216), либо *L*2₁, (Cu₂MnAl тип, пространственная группа *Fm*-3*m*, 225) [3, 6, 13–17]. Химическое или структурное разупорядочение приводит к частично разупорядоченной *B*2- или *A*2-структуре.

Экспериментальные исследования электрических, магнитных и гальваномагнитных свойств, а также расчеты электронной структуры сплавов Гейслера Mn₂YAl (Y = Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) показали, что в них могут быть реализованы состояния ферро- и антиферромагнетика, компенсированного ферримангнетика и фрустрированного магнетика, возникают фазовые переходы с изменением магнитной структуры [8, 15, 16]. Некоторые сплавы имеют аномальное для металлов поведение электросопротивления – имеются участки положительного, отрицательного или нулевого температурного коэффициента (ТКС) в разных температурных интервалах. Наличие отрицательного ТКС может указывать на близость к состоянию спинового бесщелевого полупроводника с исчезающе малой энергетической щелью.

Цель настоящей работы – получение информации об электронной структуре, термоэлектрических, оптических свойствах сплавов Гейслера Mn₂MeAl (Me = Ti, V, Cr) из теоретических расчетов и экспериментального исследования.

ОБРАЗЦЫ И МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Поликристаллические образцы сплавов Mn₂TiAl, Mn₂VAl и Mn₂CrAl были приготовлены в индукционной печи в атмосфере очищенного аргона. Затем были отожжены в течение 72 ч при

$T = 650^\circ\text{C}$ в атмосфере аргона с последующим охлаждением до комнатной температуры со скоростью 100 град/ч.

Рентгеноструктурные исследования порошковых образцов проведены при комнатной температуре на дифрактометре высокого разрешения Empyrean, в фильтрованном Cu- K_α -излучении ($\lambda = 1.54 \text{ Å}$) в интервале углов 17° – 95° с шагом сканирования 0.02° . Рентгеновский фазовый анализ выполнен в программе HighScore Plus. Первичную обработку, рентгенофазовый анализ, расчет параметров и заполнение узлов решетки проводили в пакете программ HighScore Plus.

Для измерений электросопротивления и термоэдс (коэффициент Зеебека) были приготовлены образцы размером $\sim 1 \times 1 \times 10 \text{ мм}^3$. Измерения электросопротивления выполняли по общепринятой 4-контактной методике на постоянном токе с коммутацией направления тока через образец. Термоэдс (коэффициент Зеебека) измеряли при комнатной температуре, как описано в работе [18].

Зеркальные поверхности для оптических исследований были получены шлифованием образцов на микропорошках карбида бора разной дисперсности и полированием на окиси хрома. Частотная зависимость действительной $\epsilon_1(\omega)$ и мнимой $\epsilon_2(\omega)$ части диэлектрической проницаемости (ω – циклическая частота световой волны) исследована эллипсометрическим методом Битти при комнатной температуре на воздухе в интервале спектра 0.07–5 эВ ($\lambda = 0.25$ –13 мкм). Точность измерений составляла 2–5% в видимой, ультрафиолетовой и инфракрасной областях спектра. Оптическая проводимость вычислена по формуле $\sigma(\omega) = \epsilon_2(\omega)/4\pi$.

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА

Результаты определения структурного состояния сплавов из рентгенографических данных (рис. 1) представлены в табл. 1.

Рентгеновский фазовый анализ показал, что сплав Mn₂VAl является однофазным и имеет ОЦК-кристаллическую структуру. Распределение атомов

по узлам решетки: в позиции 1a – 0.97 Mn, 0.03 Al; в позиции 1b – 0.54 V, 0.46 Al.

Анализ дифрактограммы Mn_2CrAl показал, что сплав кристаллизуется в двухфазном состоянии: помимо кубической фазы типа $\beta\text{-Mn}$ реализуется также ОЦК-структура. Из рентгеновских данных невозможно различить, какой из атомов Mn и Cr занимает определенную позицию, поскольку они имеют близкие амплитуды рассеяния рентгеновских лучей. Поэтому распределение атомов в $\beta\text{-Mn}$ структуре обозначим следующим образом: в позиции 8c: 0.9 Mn(Cr), 0.1 Al в позиции 12d: 0.4 Mn(Cr), 0.43 Al, 0.17 Mn(Cr). Распределение атомов в ОЦК-структуре: в позиции 2a: 0.12 Al, 0.88 Mn(Cr).

Двухфазное состояние отмечено также в сплаве Mn_2TiAl . Доля $\beta\text{-Mn}$ структуры составляет ~29%, и распределение атомов по позициям следующее: в позиции 8c: 0.88 Mn, 0.09 Al; в позиции 12d: 0.36 Mn, 0.64 Al. Доля структуры D6h составляет ~71% и распределение атомов по позициям: 2a: 0.72 Mn, 0.28 Al; 6h: 0.7 Mn, 0.3 Al; 4f: 0.98 Ti.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ

Электронная структура была рассчитана с помощью программного пакета VASP [19, 20], при этом использовали псевдопотенциал электрон-ионного взаимодействия на основе метода проекционных присоединенных волн (PAW [21]), а обменно-корреляционный функционал был выбран в форме GGA PBE [22]. Энергия обрезания плоских волн составляла 500 эВ. Интегрирование в обратном пространстве проведено по сетке k -точек $8 \times 8 \times 8$. Предварительно была выполнена геометрическая оптимизация кристаллической структуры каждого из соединений.

Картина плотности электронных состояний представлена на рис. 2. Для Mn_2VAl видно, что в зоне электронов со спином “вверх” уровень Ферми находится в щели, для противоположного направления спина плотность состояний на уровне Ферми отлична от нуля, что позволяет отнести данный сплав к полуметаллическим ферромагнетикам (рис. 2а). Рассчитанные магнитные моменты на атомах марганца составляют $1.31 \mu_B/\text{атом}$, на атоме ванадия – $0.76 \mu_B/\text{атом}$ и на атоме алюминия – $0.03 \mu_B/\text{атом}$. Полный момент на формульную единицу равен $1.82 \mu_B$, что находится в хорошем согласии с экспериментальным значением $1.98 \mu_B/\text{ф. ед.}$ [16].

Как видно из табл. 1, фазовый состав Mn_2TiAl на 71% состоит из структуры типа D6h (пространственная группа имметрии $P63/mmc$) и на 29% из структуры $\beta\text{-Mn}$ (пространственная группа $P4_132$). Результаты расчета плотностей электронных со-

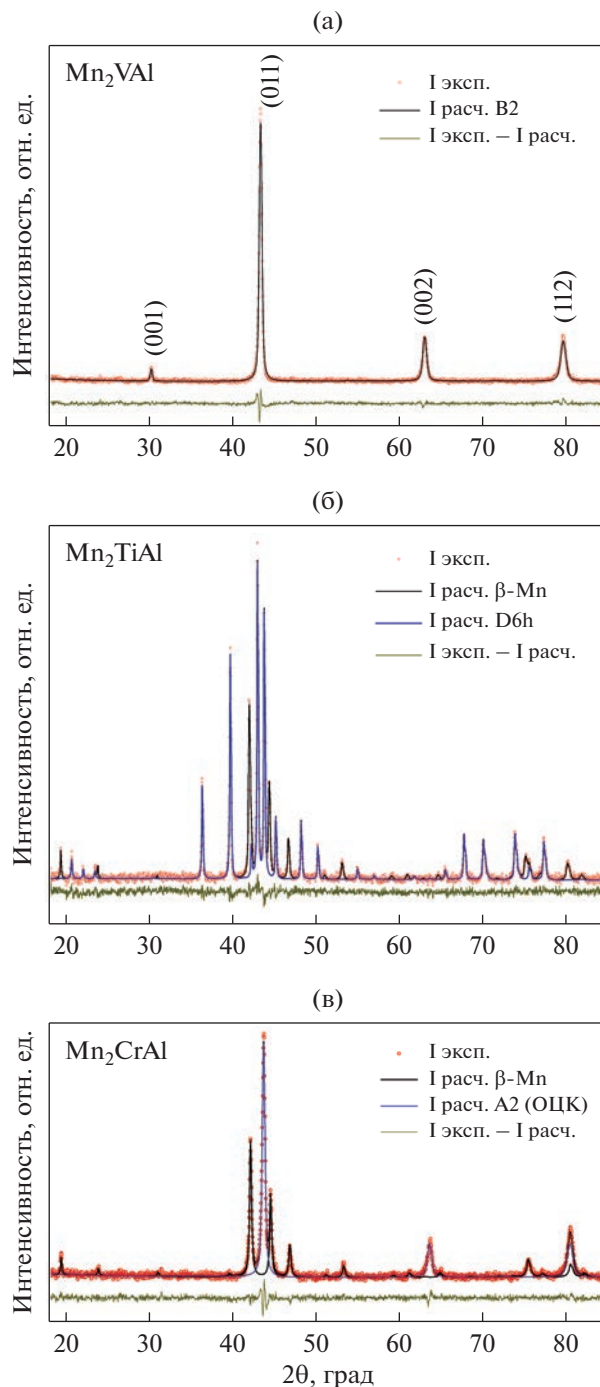


Рис. 1. Экспериментально полученные дифрактограммы (точки), расчет по методу Ритвельда (черная и синяя линии), и разница между расчетной и экспериментальной кривой (зеленая линия).

стояний для обеих фаз представлены на рис. 2б. Можно видеть, что для обеих фаз отмечена высокая плотность состояний на уровне Ферми, а также одинаковая плотность состояний для электронов со спином “вверх” и со спином “вниз”. Последнее подтверждается близкими к нулю значениями

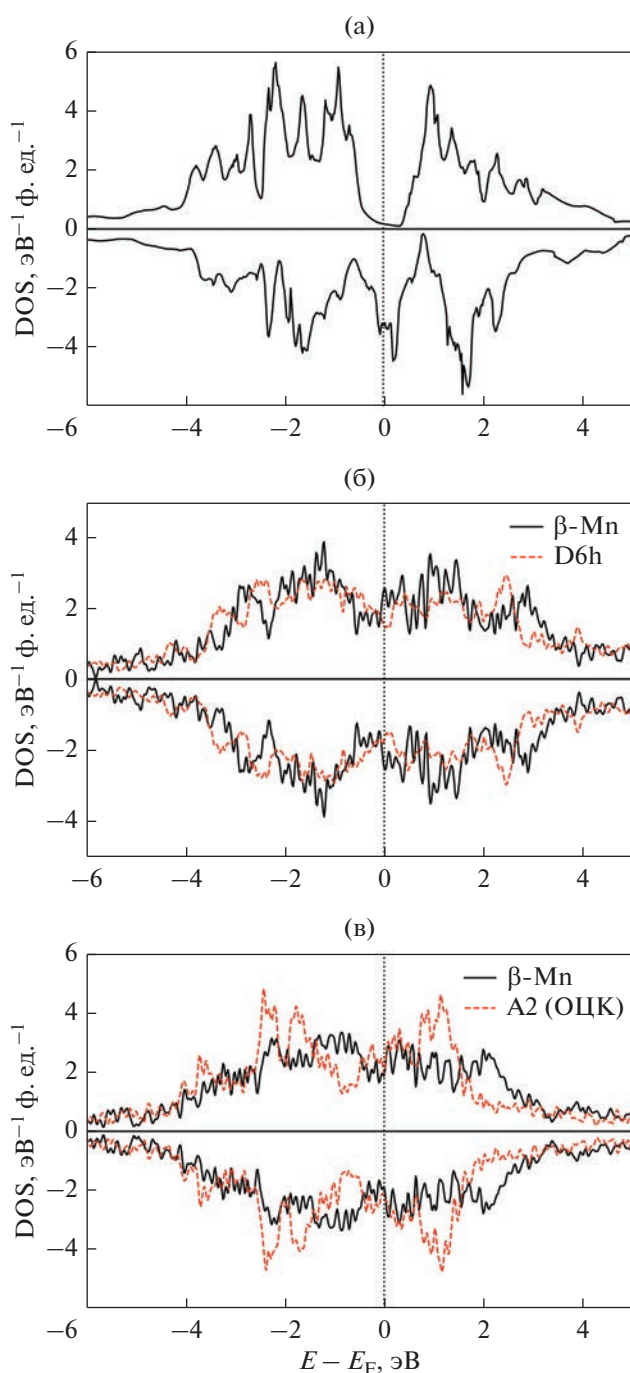


Рис. 2. Кривые плотности электронных состояний Mn_2VAl (а), Mn_2TiAl (б), Mn_2CrAl (в).

магнитных моментов: $0.05 \mu_B/\text{ф. ед.}$ и $0.03 \mu_B/\text{ф. ед.}$ для структуры D6h и $\beta\text{-Mn}$, соответственно. Данные значения находятся в хорошем согласии с экспериментальным значением $0.05 \mu_B/\text{ф. ед.}$ [16].

Аналогичные результаты получены для обеих кристаллических модификаций Mn_2CrAl (рис. 2в). Здесь заметно более сильное отличие плотности состояний упорядоченной ОЦК-фазы по сравне-

нию с фазой, имеющей структуру $\beta\text{-Mn}$. Как и в случае Mn_2TiAl , для обоих типов структур наблюдается одинаково высокая плотность состояний на уровне Ферми для обоих направлений спина. Для ОЦК-структуры наблюдается немагнитное основное состояние с нулевыми значениями магнитных моментов атомов, для структуры $\beta\text{-Mn}$ получено ферромагнитное упорядочение с невысокими значениями моментов на отдельных атомах и результирующим моментом $0.12 \mu_B/\text{форм. ед.}$ Таким образом, Mn_2CrAl является немагнитным, что согласуется с результатами эксперимента [16], согласно которым намагниченность данного соединения равна нулю.

РАСЧЕТНЫЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТА ЗЕЕБЕКА

На основе рассчитанной электронной структуры были выполнены расчеты температурных зависимостей коэффициента Зеебека исследуемых систем в рамках программного пакета Boltztrap2 [23], позволяющего численно решать линеаризованное транспортное уравнение Больцмана (BTE — Boltzmann transport equation). Данный программный пакет предусматривает различные способы задания времени релаксации τ — от приближения постоянного времени релаксации (CRTA — constant relaxation time approximation) до задания значений $\tau(\mathbf{k}, T)$, полученных в расчетах электрон-фононного взаимодействия, которые, однако, требуют значительных вычислительных затрат. С другой стороны, как было показано в работах [23, 24], достаточно точным является модельное приближение вида $\tau^{-1}(E) = cg(E)$, где $g(E)$ — плотность электронных состояний. В настоящей работе для оценки τ мы используем данное приближение. Следует отметить, что расчеты термоэлектрических свойств требуют сведений об электронном спектре с высоким разрешением по $\mathbf{k}$, поэтому были дополнительно выполнены расчеты с k -сеткой $24 \times 24 \times 24$ для всех структур кроме $\beta\text{-Mn}$, для которых использована сетка $16 \times 16 \times 16$ ввиду большего размера элементарной ячейки.

Результаты расчета коэффициента Зеебека $S(T)$ представлены на рис. 3 вместе с экспериментально найденными значениями при комнатной температуре. Для Mn_2VAl можно видеть, что коэффициент Зеебека является положительным в исследуемом интервале температур от 100 до 800 К, отмечаем хорошее согласие с экспериментальным значением при 300 К (рис. 3а).

Согласно измерениям кристаллической структуры (табл. 1), системы Mn_2TiAl и Mn_2CrAl являются двухфазными, поэтому расчет коэффициента Зеебека в их случае был выполнен для обеих кристаллических структур (рис. 3б, 3в). В случае Mn_2TiAl видно, что более хорошее согласие с экс-

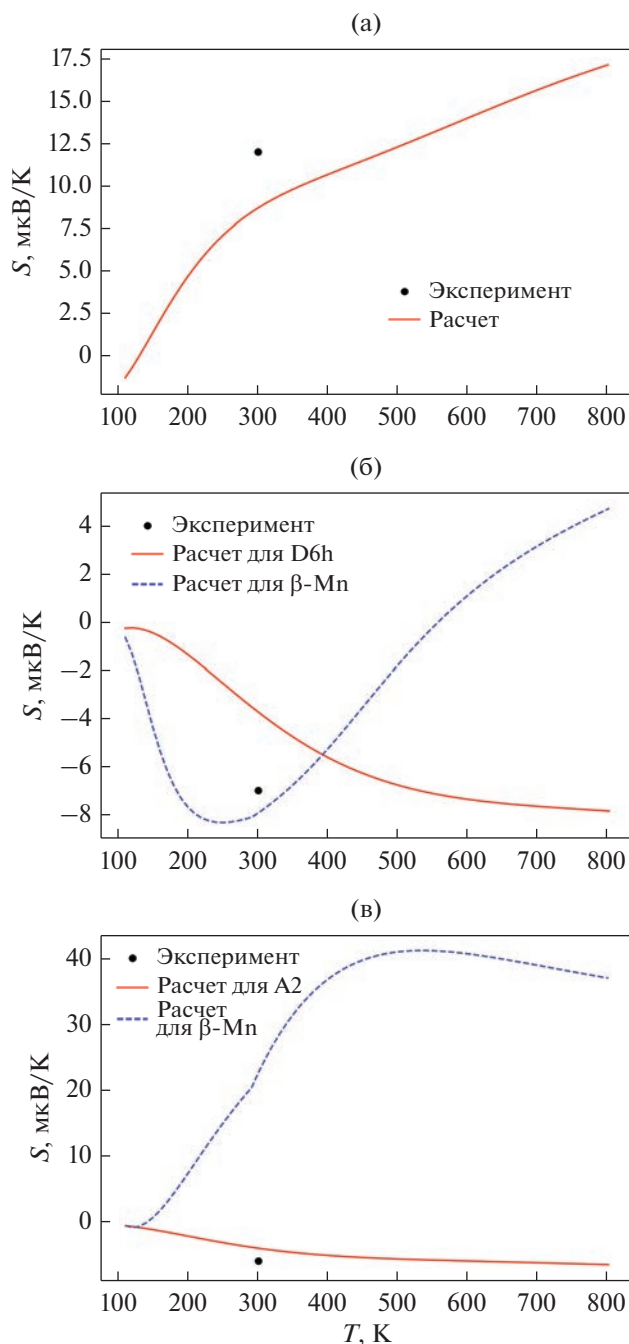


Рис. 3. Температурная зависимость коэффициента Зеебека Mn_2VAl (а), Mn_2TiAl (б), Mn_2CrAl (в).

периментом наблюдается для фазы β -Mn, в то время как в случае Mn_2CrAl — для ОЦК-фазы A2. Наблюдаемая картина может быть обусловлена тем, что для гетерофазных образцов используемое приближение для времени релаксации не является вполне корректным и требуется проведение прямых расчетов $\tau(\mathbf{k}, T)$ через рассмотрение электрон-фононного взаимодействия.

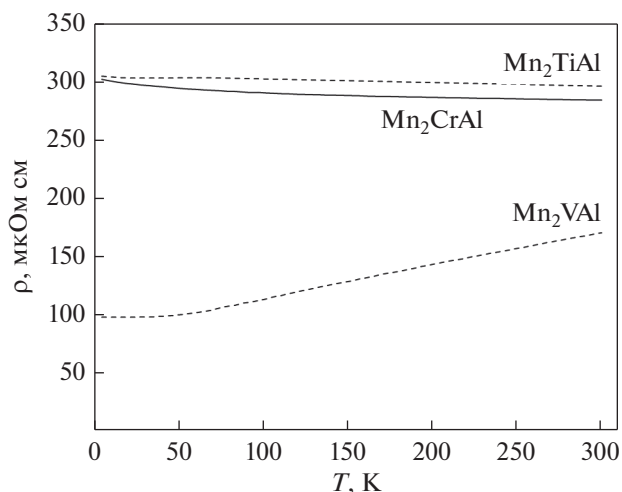


Рис. 4. Температурная зависимость электропроводности сплавов.

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ДОБРОТНОСТЬ

Общий вид температурной зависимости удельного электропроводности исследованных сплавов показан на рис. 4. Сплавы Mn_2CrAl и Mn_2TiAl имеют аномальную температурную зависимость — слабый отрицательный ТКС и высокие значения $\rho(T) \sim 300$ мкОм · см (рис. 4). Только Mn_2VAl имеют слабый положительный ТКС.

По значениям электропроводности и коэффициента Зеебека при комнатной температуре оценим термоэлектрическую добротность $S^2/\rho = (0.13-0.84) \times 10^{-4}$ Ватт/($K^2 \cdot m$). По литературным данным, самые высокие значения термоэлектрической добротности в сплавах Гейслера отмечены в Co_2MnSi : 2.9×10^{-3} Ватт/($K^2 \cdot m$) при 550 K и 1.7×10^{-3} Ватт/($K^2 \cdot m$) при комнатной температуре [4].

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Оптическая проводимость $\sigma(\omega)$ является наиболее информативной функцией для выявления особенностей оптического поглощения. В ИК-области спектра для металлов характерно наличие друдевского подъема на кривой $\sigma(\omega)$, обусловленного вкладом от поглощения энергии падающей волны свободными электронами (внутризонное поглощение) [25]. По мере увеличения частоты падающего света включается, а затем начинает доминировать механизм квантового возбуждения электронов. В оптической проводимости появляется вклад от межзонного поглощения, дающего информацию об электронном энергетическом спектре.

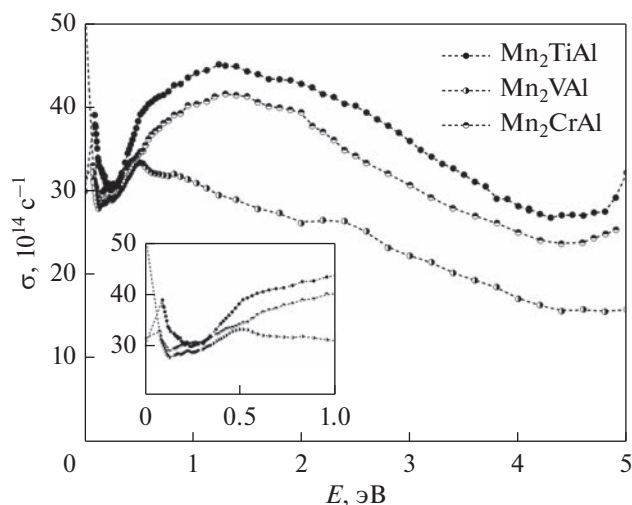


Рис. 5. Дисперсия оптической проводимости сплавов. На вставке — более подробно ИК область.

На всем исследованном участке спектра для всех исследованных сплавов доминирующую роль в формировании оптических свойств играют межзонные переходы, формируя сложную спектральную зависимость $\sigma(\omega)$ (рис. 5). Основная полоса интенсивного межзонного поглощения в сплаве Mn_2TiAl формируется при энергиях $E > 0.23$ эВ, в Mn_2VAl — при энергиях $E > 0.13$ эВ, в Mn_2CrAl — при энергиях $E > 0.14$ эВ. В видимой и УФ области интенсивность межзонного поглощения постепенно снижается до уровня $\sigma(\omega) \sim 22 \times 10^{14} \text{ c}^{-1}$.

Дисперсия оптической проводимости образцов MnTi_2Al , MnCr_2Al , в которых выявлены две фазы, в общих чертах одинакова, отличаясь лишь интенсивностью. Центр основной полосы поглощения находится в области энергий вблизи 1.3 эВ.

Для сплава MnV_2Al со структурой $B2$ оптическая проводимость во всей исследованной области значительно ниже по сравнению с MnTi_2Al , MnCr_2Al . Следует выделить минимум на кривой $\sigma(\omega)$ при энергии 0.13 эВ, пик при энергии 0.5 эВ, “плечо” в окрестности 1 эВ и в области 2–2.5 эВ. Интенсивность межзонного поглощения постепенно уменьшается с увеличением энергии падающего света.

В ИК-области спектра для всех сплавов наблюдается незначительный рост оптической проводимости, который следовало бы связать с началом Друдевского подъема. Однако есть моменты, которые останавливают нас от такого вывода.

В пределе $\omega \rightarrow 0$ оптическая проводимость выходит на значение статической, которую можно получить из измерений удельного электросопротивления. Статическая проводимость при комнатной температуре $\sigma_{\text{ст}}$ имеет значения $30 \times 10^{14} \text{ c}^{-1}$ для

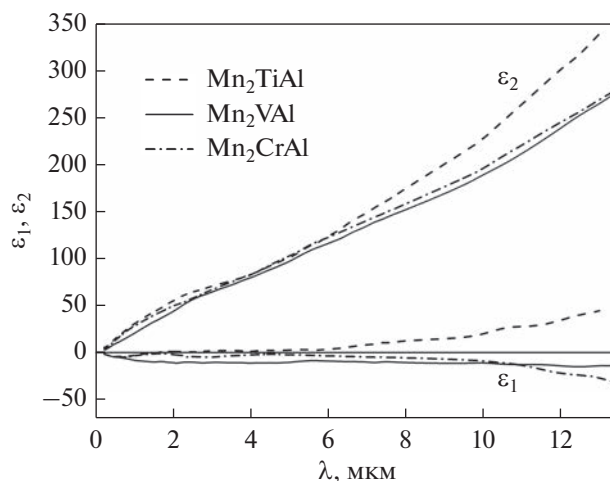


Рис. 6. Дисперсия действительной ϵ_1 и мнимой ϵ_2 части диэлектрической проницаемости сплавов.

Mn_2TiAl , $53 \times 10^{14} \text{ c}^{-1}$ для Mn_2VAl , $31.6 \times 10^{14} \text{ c}^{-1}$ для Mn_2CrAl . Следовательно, в пределе $\omega \rightarrow 0$ оптическая проводимость лишь для Mn_2VAl должна увеличиться, именно в данном сплаве подъем на кривой оптической проводимости можно связать с началом Друдевского подъема. В случае Mn_2TiAl и Mn_2CrAl рост $\sigma(\omega)$ следует связать с выходом на новые пики межзонного поглощения.

Наличие пиков поглощения в ИК-области спектра свидетельствуют о существовании низкоэнергетических щелей в зонном спектре сплавов. Для сплавов Mn_2TiAl , Mn_2CrAl , где уровень Ферми расположен в области высокой плотности состояний для обеих спиновых подсистем, можно ожидать межзонные переходы, начиная практически с нулевой энергии.

Для сплава Mn_2VAl возможны межзонные переходы электронов практически с нулевой энергией в системе зон со спинами против направления намагниченности. В другой системе — при энергиях выше ширины щели, в которой находится уровень Ферми. Заметное уменьшение интенсивности межзонного поглощения в видимой и УФ-областях спектра свидетельствует об ослаблении гибридизации глубоких состояний.

Дисперсионные кривые действительной $\epsilon_1(\omega)$ и мнимой $\epsilon_2(\omega)$ части диэлектрической проницаемости сплавов Mn_2TiAl , Mn_2VAl и Mn_2CrAl приведены на рис. 6. Мы наблюдаем монотонное увеличение $\epsilon_2(\omega)$ с увеличением длины волны падающего света и невысокие отрицательные или положительные значения $\epsilon_1(\omega)$ вплоть до границы исследованного интервала. Из зависимости $(1 - \epsilon_1)^{-1} = f(\omega^2)$ для Mn_2VAl и Mn_2CrAl получены оценки квадрата плазменной частоты $\Omega^2 \sim (0.6 - 0.7) \times 10^{30} \text{ c}^{-2}$ и эффективной концентрации сво-

бодных носителей $N_{\text{эфф}} = \Omega^2 m / 4\pi e^2 \sim 2 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ (e , m – заряд и масса свободного электрона). Значения $N_{\text{эфф}}$ примерно на 2 порядка ниже тех, которые характерны для хороших металлов. Для Mn_2TiAl $\epsilon_1(\omega)$ остается положительным вплоть до длинноволновой границы изученного интервала, оценку Ω^2 и $N_{\text{эфф}}$ сделать невозможно.

Для кубических кристаллов квадрат плазменной частоты Ω^2 определяется скоростью электронов v на поверхности Ферми, которая в свою очередь связана с плотностью состояний на уровне

$$\text{Ферми: } \Omega^2 = \frac{e^2}{3\pi^2\hbar} \int v dS_F, N(E_F) = \frac{1}{4\pi^3\hbar} \int \frac{dS_F}{v} [25].$$

Для Mn_2TiAl и Mn_2CrAl , согласно зонным расчетам, на уровне Ферми отмечена высокая плотность состояний, образованная вкладами d -состояний атомов Mn и Me (рис. 2). Для Mn_2VAl уровень Ферми находится в псевдощели в одной спиновой подсистеме и на пике плотности состояний в другой. Поэтому для всех сплавов естественно ожидать низкие значения квадрата плазменной частоты Ω^2 и эффективной концентрации свободных носителей $N_{\text{эфф}}$.

Еще одной причиной невысоких абсолютных значений $\epsilon_1(\omega)$ и $\epsilon_2(\omega)$ могут быть высокие значения частоты релаксации, которая включает в себя все механизмы рассеяния электронов, в частности, из-за структурного беспорядка. Однако видим, что кривые $\epsilon_1(\omega)$ и $\epsilon_2(\omega)$ близки для всех сплавов, независимо от структуры или степени порядка.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнено комплексное исследование электронной структуры сплавов Гейслера Mn_2MeAl ($\text{Me} = \text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}$) теоретически зонными расчетами и экспериментально методом оптической спектроскопии.

С учетом реальной кристаллической структуры сплавов получены картины плотности электронных состояний. Уровень Ферми находится в области высокой плотности состояний для сплавов Mn_2TiAl и Mn_2CrAl . Сплав Mn_2VAl является полуметаллическим ферромагнетиком.

Расчетные значения коэффициента Зеебека находятся в хорошем согласии с экспериментом в случае однофазного Mn_2VAl , в то же время в случае двухфазных Mn_2CrAl и Mn_2TiAl согласие с экспериментальными значениями наблюдается для одной из фаз.

Сплавы Mn_2CrAl и Mn_2TiAl имеют слабый отрицательный температурный коэффициент и высокие значения остаточного электросопротивления. Сплав Mn_2VAl показывает металлический характер электросопротивления.

Экспериментально показано, что сплавы имеют невысокую термоэлектрическую добротность $(0.72\text{--}1.07) \times 10^{-4} \text{ Ватт}/(\text{К}^2 \cdot \text{м})$.

Обнаружено аномальное поведение оптических свойств сплавов в ИК-области спектра – отсутствие вклада от внутризонного поглощения и наличие интенсивного межзонного поглощения.

Полученная картина зонного спектра позволяет дать качественное объяснение особенностей температурной зависимости электросопротивления и дисперсии диэлектрической проницаемости.

Исследования проведены за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-22-20109 <https://rscf.ru/project/22-22-20109/>, ИФМ УрО РАН).

Нет конфликтов интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Марченков В.В., Ирхин В.Ю. Полуметаллические ферромагнетики, спиновые бесщелевые полупроводники и топологические полуметаллы на основе сплавов Гейслера: теория и эксперимент // ФММ. 2021. Т. 122. № 12. С. 1221–1246.
2. Lue C.S., Kuo Y.-K. Thermoelectric properties of the semimetallic Heusler compounds $\text{Fe}_{2-x}\text{V}_{1+x}\text{M}$ ($\text{M} = \text{Al}, \text{Ga}$) // Phys. Rev. B. 2002. V. 66. P. 085121 (4).
3. Hayashi K., Li H., Eguchi M., Nagashima Y., Miyazaki Y. Magnetic Full-Heusler Compounds for Thermoelectric Applications // Magn. Mater. Magn. Levitation (ed. D.R. Sahu and V.N. Stavrou). <https://doi.org/10.5772/intechopen.92867>
4. Hayashi K., Eguchi M., Miyazaki Y. Structural and Thermoelectric Properties of Ternary Full-Heusler Alloys // J. Electronic Mater. 2017. V. 46. P. 2710.
5. Li H., Hayashi K., Nagashima Y., Yoshioka S., Dong J., Li J.-F., Miyazaki Y. Effects of Disorder on the Electronic Structure and Thermoelectric Properties of an Inverse Full-Heusler Mn_2CoAl Alloy // Chem. Mater. 2021. V. 33. P. 2543–2547.
6. Jum'h I., Sâad Essaoud S., Baaziz H., Charifi Z., Telfah A. Electronic and Magnetic Structure and Elastic and Thermal Properties of Mn2-Based Full Heusler Alloys // J. of Supercond. Novel Magn. 2019. V. 32. P. 3915–3926.
7. Korobeynikov I.V., Usik A.Yu., Govorkova T.E., Emelyanova S.M., Marchenkov V.V. Nonstoichiometric Fe–V–Al full Heusler alloys under high pressure: thermoelectric properties: High Pressure Research // High Pressure Research. 2021. V. 41. P. 184–197.
8. Gavrikov I., Seredina M., Zheleznyy M., Shchetinin I., Karpenkov D., Bogach A., Chatterjee R., Khovaylo V. Magnetic and transport properties of Mn_2FeAl // JMMM. 2019. V. 478. № 1. P. 55–58.
9. Voronin A.I., Zueva V.Yu., Karpenkov D.Yu., Moskovskikh D.O., Novitskii A.P., Miki H., Khovaylo V.V. Preparation and study of the thermoelectric properties of $\text{Fe}_2\text{TiSn}_{1-x}\text{Si}_x$ Heusler alloys // Semiconductors. 2017. V. 51. P. 891–893.
10. Mokhtari D.J., Jum'h I., Baaziz H., Charifi Z., Ghellab T., Telfah A., Hergenröder R. Structural, electronic, mag-

- netic and thermoelectric properties of inverse Heusler alloys Ti_2CoSi , Mn_2CoAl and Cr_2ZnSi by employing Ab initio calculations // *Philosoph. Magazine*. 2020. V. 100. № 12. P. 1636–1661.
11. Li H., Hayashi K., Nagashima Y., Yoshioka Sh., Dong J., Li J.-F., Miyazaki Yu. Effects of Disorder on the Electronic Structure and Thermoelectric Properties of an Inverse Full-Heusler Mn_2CoAl Alloy // *Chem. Mater*. 2021. V. 33. № 7. P. 2543–2547.
 12. Yousuf S., Gupta D.C. Investigation of electronic, magnetic and thermoelectric properties of Zr_2NiZ ($\text{Z} = \text{Al, Ga}$) ferromagnets // *Mater. Chem. Physics*. 2017. V. 192. P. 33–40.
 13. Buschow K.H.J., Van Engen P.G. Magnetic and magneto-optical properties of Heusler alloys based on aluminium and gallium // *JMMM*. 1981. V. 25. P. 90–96.
 14. Wollmann L., Chadov S., Kubler J., Felser C. Magnetism in cubic manganese-rich Heusler compounds // *Phys. Rev. B*. 2014. V. 90. P. 214420.
 15. Dash Sh., Lukoyanov A.V., Nancy, Mishra D., Mohammed Rasi U.P., Gangineni R.B., Vasundhara M., Patra A.K. Structural stability and magnetic properties of Mn_2FeAl alloy with a β -Mn structure // *JMMM*. 2020. V. 513. P. 167205.
 16. Марченко В.В., Ирхин В.Ю., Перевозчикова Ю.А., Терентьев П.Б., Семянникова А.А., Марченко Е.Б., Eisterer M. Кинетические свойства и полуметаллический магнетизм в сплавах Гейслера Mn_2YAl // *ЖЭТФ*. 2019. Т. 155. Вып. 6. С. 1083–1090.
 17. Шредер Е.И., Лукоянов А.В., Мухачев Р.Д., Филанович А.Н., Даш Ш., Патра А.К., Васундхара М. Электронная структура и оптические свойства сплавов гейслера $\text{Mn}_{2-x}\text{Fe}_x\text{Al}$ ($x = -0.5, 0, 0.5, 1$) // *ФММ*. 2023. Т. 124. С. 257–263.
 18. Коуров Н.И., Марченко В.В., Королев А.В., Сташкова Л.А., Емельянова С.М., Weber H.W. Особенности свойств полуметаллических ферромагнитных сплавов Гейслера: Fe_2MnAl , Fe_2MnSi и Co_2MnAl // *ФТТ*. 2015. Т. 57. Вып. 4. С. 684–691.
 19. Kresse G., Hafner J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals // *Phys. Rev. B*. 1993. V. 47. P. 558.
 20. Kresse G., Furthmüller G. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // *Phys. Rev. B*. 1996. V. 54. P. 11169.
 21. Blöchl P.E., Jepsen O., Andersen O.K. Improved tetrahedron method for Brillouin-zone integrations // *Phys. Rev. B*. 1994. V. 49. P. 16223.
 22. Perdew J., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // *Phys. Rev. Lett*. 1996. V. 77. P. 3865.
 23. Madsen G.K.H., Carrete J., Verstraete M.J. BoltzTraP2, a program for interpolating band structures and calculating semi-classical transport coefficients // *Computer Phys. Commun*. 2018. V. 231. P. 140–145.
 24. Антонов А.С., Новиков С.В., Пшенай-Северин Д.А., Бурков А.Т. Термоэлектрические свойства моноцилинда кобальта и сплавов на его основе // *Физика и техника полупроводников*. 2019. Т. 53. Вып. 5. С. 674–679.
 25. Соколов А.В. Оптические свойства металлов. М.: ГИФМЛ, 1961. 464 с.