



ХҒТАР 29.19.22; 29.19.04

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-151-2-177-191>

Ғылыми мақала

Жартылай Гейслер матрицасындағы толық Гейслер қорытпасының нанобөлшектерін модельдеу: құрылымдық және электрондық қасиеттерін зерттеу

Н.С. Солтанбек¹, Ф.У. Абуова¹, Т.М. Инербаев¹, А.У. Абуова¹, Ж.Е. Зәкиева²,
Т.Н. Жанғазы¹, Б.Н. Нұрмаханбетова¹, Н.А. Мерәлі^{1*}

¹Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

²Астана Халықаралық Университеті, Астана, Қазақстан

(E-mail: nurpeis.93@mail.ru)

Аңдатпа. Материалтану саласында соңғы уақытта Гейслер және жартылай Гейслер типтес қосылыстарға қызығушылық арта түсуде. Себебі олардың магниттік, спинтрондық әрі термоэлектрлік қасиеттері бұл материалдарды болашақ технологиялар үшін перспективті етеді. Осы зерттеу аясында $\text{Ti}_2\text{Pt}_4\text{AlSb}$ және $\text{V}_2\text{Ni}_4\text{AlSb}$ толық фазалы қосылысын жартылай гейслерлік $\text{Ti}_2\text{Pt}_2\text{AlSb}$ және $\text{V}_2\text{Ni}_2\text{AlSb}$ матрицасына енгізу арқылы алынған наноқұрылымның құрылымы мен электрондық қасиеттері жан-жақты қарастырылды. Есептеулер кванттық механикаға негізделген, алғашқы принциптер әдістерімен жүргізілді. Модельдеу кезінде $3 \times 2 \times 1$ өлшемдегі суперұяшық пайдаланылып, нәтижесінде нанобөлшек мөлшері шамамен 8,3%-ды құрады – бұл нақты материалдардағы типтік концентрацияларға сай келеді және бөлшектердің өзара әсерін елемуге мүмкіндік береді. Зерттеу барысында тордың қайта құрылу үдерістері мен электрондық күй тығыздығындағы өзгерістер байқалды. Алынған мәліметтер толық және жартылай фазалар арасындағы шекараның табиғатын тереңірек түсінуге сеп болады әрі олардың өзара әрекеттесу механизмдерін бағалауға жол ашады. Бұл зерттеу Heusler типтес наноқұрылымды материалдарды мақсатты жобалауға бағытталған теориялық база ретінде қызмет етеді. Қорытындылар болашақта жаңа, айрықша қасиеттерге ие материалдар жасауға негіз бола алады. Сонымен қатар, жұмыс материалдардың құрылымдық күрделілігі мен олардың функционалдық мінездемелері арасындағы байланысты терең ұғынуға жол ашады.

Түйін сөздер: Гейслер қорытпалары; электрондық құрылым; наноқұрылымдау; наноқұрылымды Гейслер қосылыстары; жартылай Гейслер қорытпалары; суперұяшық.

Жіберілді 10.05.2025. Өзгертілді 20.05.2025. Қабылданды 29.05.2025. Онлайн қол жетімді 25.06.2025.

¹ *хат-хабар авторы

Кіріспе

Бүгінгі материалтану ғылымында Гейслер және жартылай Гейслер типіндегі қосылыстарға деген қызығушылық айрықша артып отыр. Бұл қосылыстардың магниттік, спинтрондық және термоэлектрлік ерекшеліктері оларды заманауи технологиялық құрылғыларда қолдануға жол ашады [1]. Әсіресе олардың электрондық құрылымын дәл бақылау мүмкіндігі – спинтрондық жады құрылғыларынан бастап, магнит өрісіне сезімтал сенсорлар мен энергияны тиімді түрлендіретін жүйелерге дейін – жаңа буындағы материалдарды жасауда маңызды орын алады [2-4]. Соңғы уақытта бұл бағыттағы зерттеулердің ішінде наноқұрылымды Гейслер материалдары ерекше өзектілікке ие болды. Бір фазалы қосылыстың өте ұсақ бөлшектерін басқа фазалық матрицаға ендіру арқылы алынатын күрделі наноқұрылымдар – қазіргі ғылыми қызығушылықтың өзегіне айналған. Мұндай құрылымдар материалдың ішкі қасиеттеріне – оның торлық құрылымынан бастап, электрондық күйіне және магниттік қасиеттеріне дейін – айтарлықтай әсер етіп, оның жалпы функционалдығын арттыруға мүмкіндік береді.

Осы жұмыста құрылым ретінде $3 \times 2 \times 1$ өлшемді суперұяшық пайдаланылды. Мұндай өлшемді таңдау кездейсоқ емес – бұл жағдайда жүйеде нанобөлшектердің шоғырлану мөлшері шамамен 8,3%-ды құрайды. Аталған мән шынайы материалдардағы нанобөлшектер үлесіне жақын, әрі олардың арасындағы өзара әрекеттесулерді елеусіз деңгейге дейін төмендетеді. Осылайша, жүйеде жеке нанобөлшектің өзіндік қасиеттерін айқын бағалауға мүмкіндік туады. Жобаның басты мақсаты – толық фазалы қосылыстан тұратын нанобөлшектің жартылай гейслерлік матрицаға ықпалын анықтау. Әсіресе, нанобөлшек енгізілген аймақтағы кристалдық тордың құрылымдық өзгерістері, атомаралық байланыстардың қайта қалыптасуы, сондай-ақ жүйедегі жергілікті және жалпы электрондық күй тығыздығындағы ауытқулар негізгі назарда болды [5-9]. Мұндай өзгерістер материалдың магниттік, өткізгіштік және термоэлектрлік сипаттамаларын айтарлықтай өзгертуі мүмкін. Бұл зерттеу нәтижелері толық және жартылай Гейслер фазалары арасындағы шекаралық өзара байланыстардың табиғатын терең түсінуге мүмкіндік береді. Сонымен қатар, нанобөлшек пен матрица арасындағы интерфейстегі құрылымдық сәйкессіздік пен оның туындататын физикалық эффектілері де ерекше назарда болды [10]. Мұндай наноқұрылымданған жүйелердің күрделілігіне қарамастан, оларды мақсатты түрде жобалау арқылы жаңа функционалдық мүмкіндіктерге жол ашылады. Жалпы алғанда, бұл жұмыс наноқұрылымды композиттік материалдарды, соның ішінде Гейслер қосылыстары негізіндегі күрделі жүйелерді жобалаудағы маңызды теориялық қадамдардың біріне жатады. Зерттеу барысында алынған нәтижелер болашақта ерекше қасиеттерге ие материалдарды жасауға, сонымен қатар құрылым мен функция арасындағы терең байланыстарды ашуға үлес қосады деп сеніммен айтуға болады.

Осыған орай, құрамында ванадий немесе титан элементтері бар наноқұрылымды қосылыстарды мақсатты түрде жобалау – қазіргі заманғы материалтанудың маңызды міндеттерінің бірі. Мұндай материалдар болашақта энергияны түрлендіру, магнит

өрісін анықтайтын сенсорлар, сондай-ақ спинтрондық құрылғылар үшін негіз бола алады. Зерттеу бағыты ретінде ванадий енгізілген жартылай гейслерлік құрылымдар мен олардың электрондық және құрылымдық бейімделу ерекшеліктері ерекше назарға алынады. Бұл бағыттағы іргелі түсініктер болашақта жоғары тиімділікке ие жаңа буын құрылғыларын жасауға негіз бола алады.

Әдіснама

Бұл зерттеуде кванттық-механикалық есептеулер тығыздық функционалы теориясы (DFT) әдістемесі негізінде *Vienna Ab-initio Simulation Package* (VASP) бағдарламалық пакеті арқылы жүргізілді. Алмасу-корреляциялық әсерлерді сипаттау үшін *Perdew –Burke –Ernzerhof* (PBE) функционалы шеңберіндегі жалпыланған градиентті жуықтау (GGA) қолданылды [11]. Барлық есептеулерде жазық толқындар негізіндегі энергия кесілу мәні 700 эВ деңгейінде орнатылды [12]. Бриллюэн аймағының интеграциясы *Monkhorst-Pack* схемасы бойынша $3 \times 2 \times 1$ өлшемді k -нүктелер торы арқылы жүзеге асырылды. Бұл параметрлер жиынтығы толық энергия бойынша жақсы шоғырлану (конвергенция) нәтижелерін көрсетті. Энергияның шоғырлану дәлдігі әр атом үшін 10^{-7} эВ шегінде орнатылды.

Бұл әдістер иондардағы локализацияланған зарядтарды дәл бағалауға және жүйедегі электрондық тығыздықтың бөліну сипатын түсінуге мүмкіндік береді. Осы есептеу параметрлері негізінде алынған нәтижелер құрылымдық және электрондық қасиеттерді сенімді сипаттауға мүмкіндік берді.

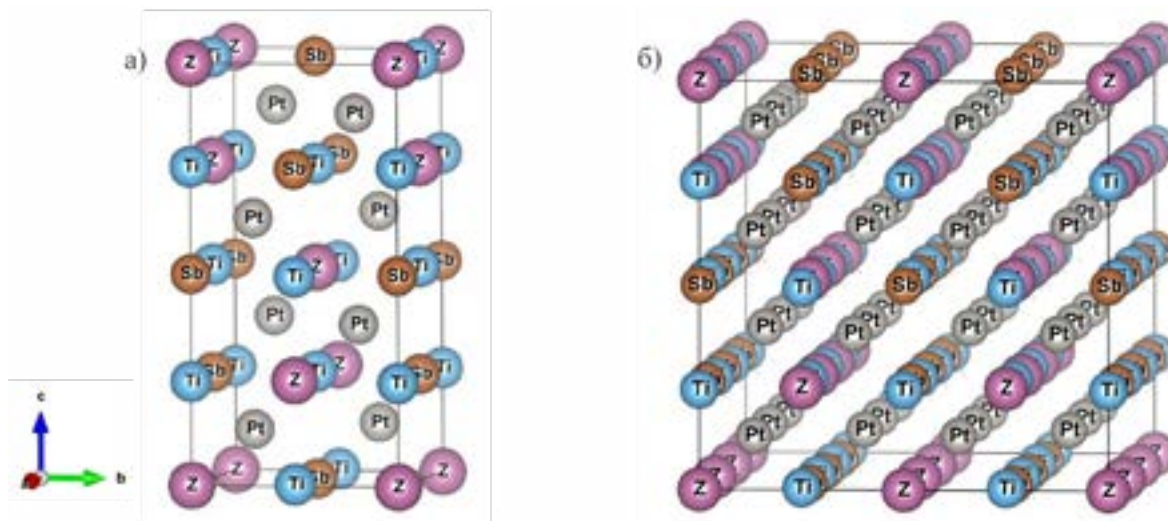
Нәтижелер мен талқылау

Құрылымдық қасиеттері

Құрамында өтпелі металдар, соның ішінде ванадий (V) немесе титан (Ti) бар қосылыстар ерекше зерттеушілік қызығушылық тудырады. Ванадийдің атомдық радиусы, электрондық конфигурациясы мен байланыстыру қабілеті оны қорытпалар құрамында тиімді қоспа ретінде пайдалануға мүмкіндік береді. Ол тор құрылымын тұрақтандырумен қатар, электрондық күй тығыздығына әсер етіп, материалдың өткізгіштік, магниттік және термоэлектрлік сипаттамаларын өзгертеді. Соңғы жылдары ванадий мен титан қосылған нанокұрылымды жүйелердің қасиеттерін модельдеу мен тәжірибелік тұрғыда зерттеу өзекті бағыттардың біріне айналды. Мұндай жүйелерде атомдық деңгейде пайда болатын интерфейстер мен құрылымдық қайта құрулар материалдың жалпы қасиеттеріне тікелей әсер етеді. Мысалы, ванадий мен иондарының матрицадағы орналасуы және олардың айналасындағы атомдармен өзара әрекеттесуі кристалдық тордың симметриясын бұзып, жаңа физикалық құбылыстардың туындауына себеп болуы мүмкін.

Аталмыш жұмыста қарастырылатын Гейслер қорытпаларының құрылымдық сызбалары 1-суретте көрсетілген. Атомдар тікбұрышты параллелепипедтік супер-ұяшықта орналасқан. Әр атом түрі (Ti, Pt, Al, Sb) кеңістікте нақты торлық орындарды

алады. Суперұяшық көлемі $3 \times 2 \times 1$ базалық ұяшыққа сәйкес келеді. Матрицаның көп бөлігін жартылай Гейслер $\text{Ti}_2\text{Pt}_2\text{AlSb}$ құрайды. Матрица ішінде аз көлемде толық қосылыс $\text{Ti}_2\text{Pt}_4\text{AlSb}$ түріндегі нанобөлшек орналасқан. Берілген суперұяшықтың өлшемдері шамамен ($a = 18.35$) Å, ($b = 12.24$) Å және ($c = 12.22$) Å құрайды. Суперұяшықта жалпы 144 атом орналасқан, олардың ішінде: 48 Ti атомы, 24 Sb атомы, 52 Pt атомы, 24 Al атомы. Кристалдық құрылым тікбұрышты тор түрінде, барлық бұрыштары 90° тең, яғни ортогоналды жүйеге жатады.



1-сурет. Гейслер қорытпасының наноқұрылымдануы: а) қос жартылай Гейслер қорытпасы; б) наноқұрылымданған Гейслер қорытпасы.

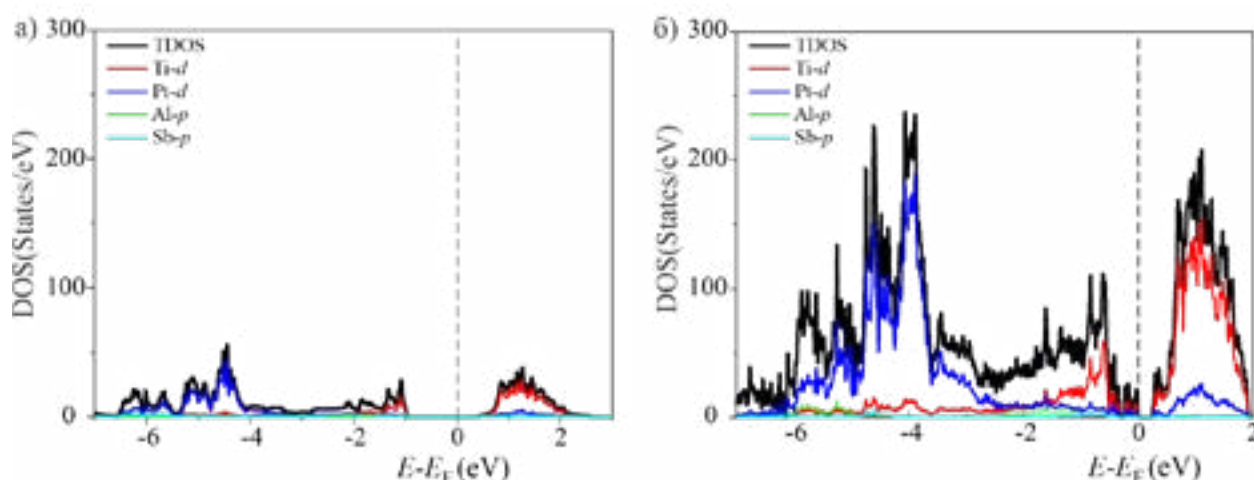
Атомдардың орналасу ерекшеліктеріне келетін болсақ, стандартты жартылай Гейслер құрылымында Ti, Pt және Al/Sb атомдары белгілі бір симметриялық орындарды алып, біркелкі периодтылық құрайды. Бұл жағдайда Pt және Al/Sb атомдары тордағы белгілі бір қабаттарда әртүрлі орналасады. Классикалық жартылай Гейслер қосылыстары (мысалы, TiPtSb) немесе қосарлы Гейслерлер ($\text{Ti}_2\text{Pt}_2\text{Z}$) әдетте біркелкі химиялық құрамы мен жоғары симметриялы құрылымды көрсетеді. Бұл жағдайда ұсынылған жүйе бірнеше ерекшелікке ие: Матрица ішінде локальді фазалық ауысу жүреді (толық қосылыс нанобөлшек пайда болады). Қарастырылатын екінші қос Гейслер құрылымы үшін, 1-суретте көрсетілген Ti атомдары V атомдарымен, Pt атомдары Ni атомдарымен алмастырылады.

Атомдардың орналасу реті бұзылса, нанобөлшек пен матрица шекарасында құрылымдық деформация байқалады. Электрондық қасиеттер локальді түрде өзгеруі мүмкін (мысалы, энергетикалық тыйым салынған аймақтың тарылуы немесе жаңа энергетикалық күйлердің пайда болуы). Құрылымның жалпы симметриясы классикалық фазаларға қарағанда төмендейді. Мұндай наноқұрылымдар материалдың магниттік, спинтрондық және электрондық қасиеттерін бақылау үшін үлкен әлеуетке ие. Әсіресе, наноқұрылымдар арқасында жаңа кванттық эффектілер немесе локальді

өткізгіштік аймақтары пайда болуы мүмкін, бұл болашақ спинтрондық және сенсорлық құрылғылар үшін маңызды.

Электрондық қасиеттері

Зерттелген Гейслер қорытпаларының электрондық құрылымдары 2-суретте көрсетілген. Келтірілген графикте нанокұрылымданған $\text{Ti}_2\text{Pt}_2\text{AlSb}$ қосылысының жартылай гейслерлік $\text{Ti}_2\text{Pt}_4\text{AlSb}$ матрицасындағы күйлік тығыздықтарының (TDOS және PDOS) үлестірімі көрсетілген. Жалпы тығыздықтың күйлік тығыздығы (TDOS) қара сызықпен берілсе, атомдық орбитальдар бойынша проекцияланған тығыздықтар: Ti элементінің d-орбитальдары (қызыл), Pt элементінің d-орбитальдары (көк), Al элементінің p-орбитальдары (жасыл), ал Sb элементінің p-орбитальдары (ашық көк) түрінде көрсетілген.



2-сурет. Нанокұрылымдану үрдісінің Гейслер қорытпасының электрондық қасиеттеріне әсері а) қос жартылай $\text{Ti}_2\text{Pt}_2\text{AlSb}$ Гейслер қорытпасының электрондық құрылымы; б) нанокұрылымданған $\text{Ti}_2\text{Pt}_4\text{AlSb}$ Гейслер қорытпасының электрондық құрылымы.

Энергия диапазонында -6-дан +2 эВ-қа дейінгі аралықта TDOS-тың күрт өзгерістері байқалады. Валенттік зонаның негізгі бөлігін -6-дан 0 эВ-қа дейінгі аралықта Pt-d орбитальдары басым құрайды, бұл Pt элементінің валенттік күйге айтарлықтай үлес қосатынын көрсетеді. Өткізгіштік зонаның төменгі бөлігінде, 0 эВ-тен жоғары аймақта Ti-d орбитальдарының айтарлықтай үлесі байқалады, бұл Ti атомдарының өткізгіштік қасиеттерге әсерін көрсетеді.

Ферми деңгейі маңындағы тығыздықтың жоғары мәні электрондардың жоғары концентрациясын көрсетеді, бұл материалдың металлдық қасиетке ие екенін растайды. Сонымен қатар, нанокұрылымның енгізілуі кезінде пайда болатын электрондық күй тығыздығының асимметриясы нанобөлшек пен матрица арасындағы интерфейстік әсерлерге байланысты болуы мүмкін. Бұл құбылыс Бадер зарядының қайта бөлінуімен және тор құрылымының локалдық бұрмалануымен байланысты.

Осылайша, бұл нәтиже $\text{Ti}_2\text{Pt}_2\text{AlSb}$ нанобөлшектерінің $\text{Ti}_2\text{Pt}_4\text{AlSb}$ матрицасына енгізілуі материалдың электрондық құрылымына елеулі өзгерістер енгізетінін және бұл өзгерістер функционалдық қасиеттерді басқаруда маңызды рөл атқара алатынын көрсетеді.

Алайда ұсынылған суперұяшықта ерекше аймақ – Pt атомдарының жергілікті концентрациясының артуымен сипатталатын нанобөлшек пайда болады. Бұл нанобөлшек көлемі аз ғана (~8,3%) болғанымен, өзінің локальді құрылымын өзгертеді және толық қосылыс $\text{Ti}_2\text{Pt}_4\text{AlSb}$ сипатында болады. Басқаша айтқанда, суперұяшық ішінде жартылай Гейслер матрицасына ендірілген толық қосылыс нанобөлшегі модельденген.

Қарапайым Ti_2PtAlSb қосылысының электрондық құрылымынан көрініп тұрғандай, Ферми деңгейі маңында айқын электрондық күй тығыздығы жоқ, бұл материалдың жартылайөткізгіштік қасиеттерге ие екенін көрсетеді. Энергетикалық тыйым салынған аймақ шамамен 0.4-0.5 эВ шамасында, бұл валенттік және өткізгіштік зоналар арасында нақты энергетикалық алшақтық бар екенін білдіреді. Бұл құрылымда Pt-d орбитальдары валенттік зонаның төменгі бөлігінде басым болса, Ti-d орбитальдары өткізгіштік зонада маңызды рөл атқарады. Ал нанокұрылымданған $\text{Ti}_2\text{Pt}_2\text{AlSb}/\text{Ti}_2\text{Pt}_4\text{AlSb}$ жүйесінде Ферми деңгейінде айқын TDOS мәндері байқалады, бұл материалдың жартылайөткізгіштік қасиеттерінің жойылып, металлдық сипатқа ие болғанын көрсетеді. Сонымен қатар, TDOS максимумдары жоғарылаған, бұл электрон күй тығыздығының артқанын білдіреді. Бұл құбылыс нанокұрылымдар мен матрица арасында пайда болатын интерфейстік әсерлер мен құрылымдық ауытқуларға байланысты.

Сондай-ақ, нанокұрылымдық жүйеде Ферми деңгейінің маңында Ti-d орбитальдарының басымдығы артып, өткізгіштікке қосатын үлесі айқын байқалады. Бұл электрондардың локализациясының төмендеуіне және тасымал сипаттамаларының жақсаруына ықпал етеді.

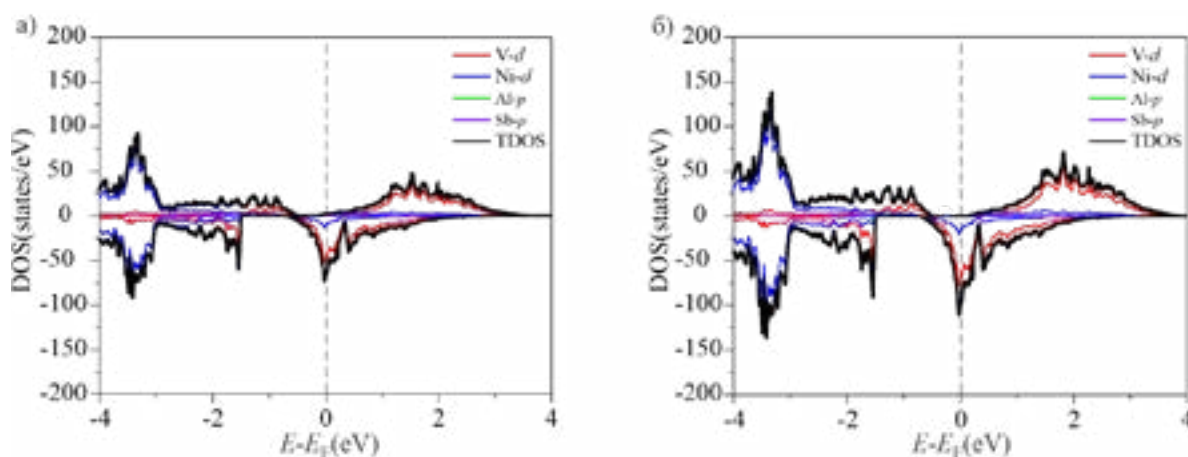
Нанокұрылымдандыру Ti_2PtAlSb қосылысының электрондық құрылымын елеулі өзгертеді: жартылайөткізгіштік қасиеттер біртіндеп жойылып, материал металл тәрізді күйге көшеді. Бұл өзгеріс электрондық күй тығыздығының өсуімен, интерфейстік аймақтардағы күй тығыздығының қосылуымен және орбитальдық будандасудың өзгеруімен байланысты. Мұндай ерекшеліктер бұл жүйені электрондық құрылғыларда, әсіресе термоэлектрлік және спинтроникалық құрылымдарда қолдану үшін әлеуетті кандидат ретінде қарастыруға мүмкіндік береді.

Ti_2PtAlSb негізіндегі материалдарды нанокұрылымдандыру олардың бастапқы электрондық қасиеттерін түбегейлі өзгерте алады. Бұл процесс нәтижесінде жартылайөткізгіштік сипаттар біртіндеп әлсіреп, материал электр өткізгіштігі жоғары, металл тәрізді күйге ауысады. Мұндай түрлену – тек құрылымдық деңгейде емес, сонымен қатар электрондық күй тығыздығының өзгеруі арқылы да іске асады. Атап айтқанда, нанокұрылымданған аймақтарда интерфейстер шегінде күй тығыздықтарының қабаттасуы байқалады, бұл өз кезегінде орбитальдық будандасу механизмінің қайта құрылуына ықпал етеді.

Мұндай өзгерістер кездейсоқ емес – олар материал ішіндегі атомаралық байланыстардың конфигурациясымен және энергетикалық деңгейлердің қайта бөлінуімен тығыз байланысты. Интерфейстік аймақтарда байқалатын электрондардың жинақталуы, әсіресе, электрон тасымалдануы мен заряд бөліну үдерістерінде ерекше рөл атқарады. Бұл жағдай материалдың энергетикалық спектрін кеңейтіп, оны таза жартылайөткізгіштерге тән шектеулерден шығарып, металдық сипатқа біртіндеп

жақындатады. Осылайша алынған құрылымдық-электрондық бейімделу материалды практикалық тұрғыдан алғанда тартымды етеді. Әсіресе, бұл ерекшеліктер термоэлектрлік және спинтроникалық құрылғыларда жоғары тиімділікпен жұмыс істеуге қабілетті материалдарды жасауға жол ашады. Электрон ағынын дәл бақылау, спин күйін тұрақты басқару, және жылу мен электр энергиясы арасындағы түрлендіру тиімділігін арттыру – осы бағыттағы негізгі міндеттердің бірі. Ti_2PtAlSb қосылысына жүргізілген наноқұрылымдық бейімдеулер нәтижесінде мұндай міндеттерді орындауға лайық платформалар қалыптасуы әбден мүмкін. Осы себепті, бұл материалды әрі қарай да зерттеу – тек академиялық қызығушылық қана емес, сонымен бірге нақты қолданбалы инженерлік мақсаттарға бағытталған маңызды қадам болып саналады. Нәтижесінде, Ti_2PtAlSb сияқты жүйелердің наноқұрылымдық модификациясы олардың функционалдық мүмкіндіктерін кеңейтіп, жаңа буын құрылғыларын жобалауда теориялық және практикалық негіз қалыптастыра алады.

$\text{V}_2\text{Ni}_2\text{AlSb}$ қос жартылай Гейслер қорытпасы қазіргі заманғы функционалды материалдар қатарына жатады және оның электрондық, магниттік және құрылымдық қасиеттері перспективалы технологиялық салаларда кеңінен қолдануға мүмкіндік береді. Электрондық құрылым сипаттамасы 3-суретте көрсетілген. Бұл зерттеу жұмысында аталмыш қорытпаның электрондық құрылымы наноқұрылымдандыру процесінен кейінгі жағдайында талданып, оның қасиеттеріндегі өзгерістер ғылыми тұрғыда сипатталды. Алғашқы фазада алынған $\text{V}_2\text{Ni}_2\text{AlSb}$ қорытпасының электрондық құрылымы симметриялы жартылай металлдық сипатқа ие екендігі белгілі болды. Электрондық тасымалдың әртүрлілік қасиеттері спин-жоғары және спин-төмен бағыттарында анық байқалады. Спиндік поляризацияның айқын көрінісі бұл материалдың спинтроникалық құрылғыларға лайық екенін көрсетеді. Қалыпты жағдайда бұл қорытпа толықтай жартылай металл болып табылмаса да, оның энергетикалық аймақтарында өтпелі энергетикалық тыйым салынған аймақ байқалады, бұл оның термоэлектрлік құрылғыларда да тиімді қолданылатынын дәлелдейді.



3-сурет. Наноқұрылымдану үрдісінің Гейслер қорытпасының электрондық қасиеттеріне әсері а) $\text{V}_2\text{Ni}_2\text{AlSb}$ қос жартылай Гейслер қорытпасының электрондық құрылымы; б) наноқұрылымданған $\text{V}_2\text{Ni}_2\text{AlSb}$ Гейслер қорытпасының электрондық құрылымы.

Зерттеудің келесі кезеңінде аталмыш қорытпаға нанокұрылымдандыру әдісі қолданылды. Бұл әдіс құрылымдық өлшемдердің наноөлшем деңгейіне дейін төмендетілуін және нәтижесінде электрондық тасымал мен тығыздық күйінің (DOS) күрделі өзгерістерге ұшырауын қамтиды. Жүргізілген есептеулер бойынша, нанокұрылымдандырылған V_2Ni_2AlSb қорытпасында электрондық тығыздықтың өсуі байқалды, әсіресе Ферми деңгейі маңында. Бұл жағдай кванттық шектеулердің әсерінен энергетикалық деңгейлердің тығыз орналасуымен түсіндіріледі. Сонымен қатар, нанокұрылымдандырудың тағы бір маңызды әсері – энергетикалық тыйым салынған аймақтың (band gap) кеңеюі немесе пайда болуы. Егер бастапқы фазада бұл аймақ кең емес немесе мүлде байқалмаса, нанокұрылымдан кейінгі құрылымда спин-төмен бағытында айқын тыйым салынған аймақ пайда болғаны анықталды. Бұл жағдай қорытпаның жартылай металдық қасиетін күшейтіп, оны жоғары тиімділікпен спинтрондық құрылғыларда қолдануға мүмкіндік береді.

Орбитальдық проекцияларды (PDOS) талдау нәтижелері көрсеткендей, Ферми деңгейі маңындағы күй тығыздығының артуына негізінен Ti және Pt элементтерінің *d*-орбитальдарының будандасуы әсер етеді. Атап айтқанда, Ti-*d* және Pt-*d* орбитальдарының арасында энергетикалық деңгейлердің тығыздығының артуы байқалады. Бұл құбылыс нанокұрылымдандыру нәтижесінде пайда болған жергілікті құрылымдық бұзылыстармен және интерфейстік аймақтағы электрондардың локализациясымен тікелей байланысты. Мұндай қайта құрылулардың нәтижесінде жаңа энергетикалық күйлер қалыптасып, күй тығыздығы артады.

Электрондық тасымалдау сипаттамаларынан бөлек, нанокұрылымдандырылған V_2Ni_2AlSb қорытпасы өткізгіштік қасиеттері бойынша да оң өзгерістер көрсетті. Мұндай нанокұрылымдандырылған Гейслер қорытпаларының қолдану салалары өте кең: Спинтроника: Спин-тәуелді өткізгіштік пен жоғары спиндік поляризациясы бұл материалды спиндік инжекторлар, магниттік туннельдік қосқыштар және MRAM құрылғыларына пайдалануға мүмкіндік береді. Термоэлектрлік құрылғылар: Ферми деңгейіндегі күй тығыздығының артуы және торлық жылу өткізгіштіктің азаюы нәтижесінде, бұл қорытпа энергияны жылудан электр энергиясына түрлендіру құрылғыларында (мысалы, қалдық жылу энергиясын пайдаланатын генераторлар) тиімді болады. Нанозлектроника: Нанокұрылымдандыру нәтижесінде алынған жоғары электрондық қозғалғыштық пен энергетикалық күй тығыздығының өзгерісі бұл материалды жоғары өнімді транзисторлар мен сенсорларға бейімдеуге мүмкіндік береді. Кванттық құрылғылар: Энергетикалық аймақтардың кванттық өлшемдерге сәйкес өзгеруі нәтижесінде, бұл материал кванттық компьютерлер мен басқа да кванттық құрылғыларда қолдануға бейімделуі мүмкін.

Жоғарыда келтірілген нәтижелер V_2Ni_2AlSb қорытпасының нанокұрылымдық модификациясы оның электрондық құрылымын айтарлықтай өзгертетінін, және бұл өзгерістер практикалық қолдану үшін қолайлы екендігін дәлелдейді. Бұған дейінгі зерттеулерде де нанокұрылымдау әдетте Ферми деңгейі маңындағы саңылаудың кішіреюіне әкеліп соғатыны анықталған [13,14]. Сонымен қатар, бұл қорытпа болашақта жаңа буынды функционалды материалдарды әзірлеу үшін негіз бола алады.

Осылайша, жүргізілген зерттеу жұмысы наноқұрылымдандыру әдісінің Гейслер типті қорытпалардың электрондық қасиеттеріне айтарлықтай әсер ететіндігін көрсетіп қана қоймай, оның функционалдық қолдану мүмкіндіктерін кеңейтетінін де дәлелдейді. Болашақ зерттеулер бұл бағытты одан әрі тереңдетіп, нақты құрылғылар деңгейінде іске асыруға мүмкіндік береді.

Қорытынды

Осы жұмыста алғашқы принциптерге негізделген есептеулер арқылы Ti_2Pt_2ZSb ($Z = Al, Ga, In$) қос металдық жартылай Гейслер қорытпаларының құрылымдық, электрондық, серпімділік және термодинамикалық қасиеттері жан-жақты зерттелді. Зерттеу нәтижелері бұл қорытпалардың барлығы да термодинамикалық және механикалық тұрғыдан тұрақты екенін көрсетті. Олардың барлығы да оң энергия мен тұрақты Фон күй қисықтарына ие, бұл динамикалық тұрақтылықты дәлелдейді.

Электрондық құрылымдарды зерттеу барысында Ti_2Pt_2ZSb қорытпаларының жартылай өткізгіштік немесе металдық қасиет көрсетуі химиялық құрам мен құрылымға тәуелді екендігі анықталды. Ерекше назар наноқұрылымданған Ti_2Pt_2AlSb қорытпасына аударылды. Оның электрондық күй тығыздығы (DOS) мен тасымал сипаттамалары кәдімгі $Ti_2PtAlSb$ қосылысына қарағанда айтарлықтай өзгергені байқалды. Наноқұрылымдандыру нәтижесінде Ферми деңгейінің маңындағы электрон күй тығыздығы артқан және тыйым салынған аймақ жойылып, металдық қасиет қалыптасқан. Бұл құбылыс құрылымдағы интерфейстік әсерлер мен орбитальдық будандасу салдарынан туындайды. Бұл қасиеттер электрон тасымалдаудың жоғарылауына және спинтрондық құрылғыларға бейімділікке оң әсер етеді.

Жалпы алғанда, жүргізілген зерттеу жұмысы Ti_2Pt_2ZSb қосылыстарының құрылымдық, электрондық және механикалық сипаттамаларының жан-жақты бейнесін ұсынды және олардың термоэлектрлік және спинтроникалық құрылғыларда қолдану үшін әлеуетті материалдар екенін көрсетті. Сонымен қатар, наноқұрылымдандырудың электрондық қасиеттерге тигізетін әсері ғылыми тұрғыдан дәлелденіп, болашақ зерттеулер үшін бағыт беретін маңызды нәтижелер ұсынылды. Бұл зерттеу нәтижелері болашақта жаңа функционалдық материалдарды жобалау мен жетілдіруде ғылыми негіз бола алады.

Алғыс айту, мүдделер қақтығысы

Бұл зерттеу жұмысы Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігі 2024-2026 жылдарға арналған «Жас Ғалым» AP22683528 «Гейслер қорытпалары негізінде термоэлектрлік және спинтрондық материалдарды компьютерлік жобалау» жобасы аясында қаржыландырылды. Авторлар осы мақалада баяндалған жұмысқа әсер етуі мүмкін белгілі бәсекелес қаржылық мүдделері немесе жеке қарым-қатынастары жоқ екенін хабарлайды.

Авторлардың қосқан үлесі

Солтанбек Н.С. – мақаланың тұжырымдамасына немесе рәсімделуіне елеулі үлес қосу, мәтін жазу және оның мазмұнын сыни тұрғыдан қайта қарау;

Мерәлі Н.С. – зерттеу нәтижелерін жинау, мәтін жазу және оның мазмұнын сыни тұрғыдан қайта қарау;

Зәкиева Ж.Е., Жанғазы Т.Н., Нұрмаханбетова Б.Н. – алынған нәтижелерді талдау және түсіндіру;

Абуова А.У., Инербаев Т.М. – жариялау үшін мақаланың соңғы нұсқасын бекіту;

Абуова Ф.У. – жұмыстың барлық аспектілері үшін жауапты болуға келісім беру, деректердің дұрыстығына және мақаланың барлық бөліктерінің тұтастығына байланысты мәселелерді зерттеу және шешу.

Әдебиеттер тізімі

1. S. Anand, M. Wood, Y. Xia, C. Wolverton, G. J. Snyder, *Double half-Heuslers*, *Joule* 3(5), p. 1226–1238 (2019)
2. W.G. Zeier, J. Schmitt, G. Hautier, U. Aydemir, Z.M. Gibbs, C. Felser, G.J. Snyder, *Engineering half-Heusler thermoelectric materials using Zintl chemistry*, *Nature Reviews Materials* 1(6), p. 1–10 (2016)
3. T. Zhu, Y. Liu, C. Fu, J.P. Heremans, J.G. Snyder, X. Zhao, *Compromise and synergy in high-efficiency thermoelectric materials*, *Advanced Materials* 29(14), p. 1605884 (2017), Wiley Online Library
4. Y. Rached, M. Caid, M. Merabet, S. Benalia, H. Rached, L. Djoudi, M. Mokhtari, D. Rached, *A comprehensive computational investigations on the physical properties of $TiX_{1-x}Sb_x$ ($X: Ru, Pt$) half-Heusler alloys and $Ti_2RuPtSb_2$ double half-Heusler*, *International Journal of Quantum Chemistry* 122(9), p. e26875 (2022), Wiley Online Library
5. K. Bouhadjer, M. Boudjelal, M. Matougui, S. Bentata, T. Lantri, M. Batouche, T. Seddik, R. Khenata, B. Bouadjemi, S. Bin Omran et al., *Structural, optoelectronic, thermodynamic and thermoelectric properties of double half-Heusler (DHH) $Ti_2FeNiSb_2$ and Ti_2Ni_2InSb compounds: A TB-mBJ study*, *Chinese Journal of Physics* 85, p. 508–523 (2023), Elsevier
6. H. Ding, X. Li, Y. Feng, B. Wu, *Electronic structure, magnetism and disorder effect in double half-Heusler alloy $Mn_2FeCoSi_2$* , *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 555, p. 169367 (2022), Elsevier
7. O. Douinat, A. Boucherdoud, A. Seghier, M. Houari, S. Mesbah, T. Lantri, B. Bestani, *Theoretical investigation of the physical, mechanical, and thermal properties of $Zr_2XB_{1-x}Ni_x$ ($X: Al, Ga$) double half-Heusler alloys*, *Journal of Materials Research* 38(20), p. 4509–4521 (2023), Springer
8. R. Hasan, T. Park, S. Kim, H.-S. Kim, S. Jo, K.H. Lee, *Enhanced Thermoelectric Properties of $Ti_2FeNiSb_2$ Double Half-Heusler Compound by Sn Doping*, *Advanced Energy and Sustainability Research* 3(4), p. 2100206 (2022), Wiley Online Library
9. M.A. Hassan, A. El-Khouly, E.M. Elsehly, E.N. Almutib, S.K. Elshamndy, I. Serhienko, E.V. Argunov, A. Sedegov, D. Karpenkov, D. Pashkova et al., *Transport and thermoelectric properties of melt spinning synthesized $M_2FeNiSb_2$ ($M= Ti, Hf$) double half-Heusler alloys*, *Materials Research Bulletin* 164, p. 112246 (2023), Elsevier
10. M. Diaf, H. Righi, H. Rached, D. Rached, R. Beddiaf, *Ab initio study of the properties of $Ti_2PdFe(Ru)Sb_2$ double half-Heusler semiconducting alloys*, *Journal of Electronic Materials* 52(10), p. 6514–6529 (2023), Springer

11. Z. Charifi, H. Baaziz, Ş. Uğur, G. Uğur, *Prediction of the electronic structure, optical and vibrational properties of $\text{ScXCo}_2\text{Sb}_2$ ($X = \text{V, Nb and Ta}$) double half-Heusler alloys: a theoretical study*, Indian Journal of Physics 97(2), p. 413–428 (2023), Springer
12. M. Boudjelal, K. Bouhadjer, M. Matougui, S. Bentata, V. Srivastava, S. Bin-Omran, R. Khenata, *Ab initio prediction of the structural, optoelectronic and thermoelectric properties of double half-Heusler (DHH) $\text{ScXRh}_2\text{Bi}_2$ ($X = \text{Nb, Ta}$) alloys DFT study results*, Indian Journal of Physics, p. 1–14 (2024), Springer
13. J. Carrete, N. Mingo, S. Wang, S. Curtarolo, *Nanograined Half-Heusler Semiconductors as Advanced Thermoelectrics: An Ab Initio High-Throughput Statistical Study*, Advanced Functional Materials 24(47), p. 7427–7432 (2014), Wiley Online Library
14. C. Wang, J. Meyer, N. Teichert, A. Auge, E. Rausch, B. Balke, A. Hütten, G.H. Fecher, C. Felser, *Heusler nanoparticles for spintronics and ferromagnetic shape memory alloys*, Journal of Vacuum Science & Technology B 32(2), p. 1–10 (2014), AIP Publishing

Н.С. Солтанбек¹, Ф.У. Абуова¹, Т.М. Инербаев¹, А.У. Абуова¹, Ж.Е. Закиева², Т.Н. Жангазы¹,
Б.Н. Нурмаханбетова¹, Н.А. Мерали^{1*}

¹Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева,
Астана, Казахстан

²Международный университет Астана, Астана, Казахстан
(E-mail: nurpeis.93@mail.ru)

Моделирование наночастиц полного соединения Гейслера в матрице сплава полу-Гейслера: исследование структурных и электронных свойств

Аннотация. Гейслер и полугейслеровские соединения находятся в центре внимания современной материаловедческой науки благодаря своим уникальным магнитным, спинтронным и термоэлектрическим свойствам. Основной целью данной работы является исследование структуры и электронной природы наноструктуры, полученной путем внедрения полной фазы $\text{Ti}_2\text{Pt}_4\text{AlSb}$ в матрицу $\text{Ti}_2\text{Pt}_2\text{AlSb}$ полугейслеровского типа. Исследование выполнено методами первого принципа с использованием квантово-механического моделирования. В качестве модели использована суперячейка размером $3 \times 2 \times 1$, позволяющая смоделировать концентрацию наночастиц около 8,3%, что соответствует реальным условиям наноструктурированных материалов.

В ходе работы проанализированы особенности перестройки кристаллической решетки вокруг наночастицы, перераспределение Бадер-зарядов, а также локальные и общие изменения плотности электронных состояний. Полученные результаты позволяют глубже понять характер интерфейса между фазами и дают представление о механизмах взаимодействия. Работа вносит вклад в развитие подходов к целенаправленному проектированию композитных наноструктурированных материалов на основе гейслеровских соединений с улучшенными функциональными характеристиками. Кроме того, данные расчетные результаты могут быть полезны при разработке новых материалов с заданными магнитными, электронными и тепловыми свойствами, а также для понимания связи между структурной сложностью и функциональностью материала.

Ключевые слова: сплавы Гейслера; электронная структура; наноструктура, наноструктурированные соединения Гейслера; сплавы полу-Гейслера; суперячейка.

N.S. Soltanbek¹, F.U. Abuova¹, T.M. Inerbayev¹, A.U. Abuova¹, Zh.Y. Zakiyeva², T.N. Zhangazy¹,
B.N. Nurmakhambetova¹, N.A. Merali*¹

¹L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

²Astana International University, Astana, Kazakhstan

(E-mail: nurpeis.93@mail.ru)

Modeling of full-Heusler alloy nanoparticles embedded in a half-Heusler matrix: Investigation of structural and electronic properties

Abstract. Heusler and half-Heusler compounds are at the forefront of modern materials science due to their unique magnetic, spintronic, and thermoelectric properties. The main objective of this work is to investigate the structure and electronic nature of a nanostructure formed by embedding a full-Heusler $\text{Ti}_2\text{Pt}_4\text{AlSb}$ phase into a $\text{Ti}_2\text{Pt}_2\text{AlSb}$ half-Heusler matrix. The study was conducted using first-principles methods based on quantum-mechanical modeling. A $3 \times 2 \times 1$ supercell was used as the model, allowing for the simulation of a nanoparticle concentration of approximately 8.3%, which corresponds to realistic conditions in nanostructured materials.

During the study, the features of crystal lattice reconstruction around the nanoparticle, Bader charge redistribution, as well as local and total changes in the electronic density of states were analyzed. The obtained results provide deeper insight into the nature of the interface between the phases and offer an understanding of the interaction mechanisms. This work contributes to the development of approaches for the targeted design of composite nanostructured materials based on Heusler compounds with enhanced functional properties. Furthermore, the computational results may be useful in the development of new materials with tailored magnetic, electronic, and thermal properties, as well as for understanding the relationship between structural complexity and material functionality.

Keywords: Heusler alloys; electronic structure; nanostructure; nanostructured Heusler compounds; half-Heusler alloys; supercell.

References

1. S. Anand, M. Wood, Y. Xia, C. Wolverton, G. J. Snyder, *Double half-Heuslers*, *Joule* 3(5), p. 1226–1238 (2019)
2. W.G. Zeier, J. Schmitt, G. Hautier, U. Aydemir, Z.M. Gibbs, C. Felser, G.J. Snyder, *Engineering half-Heusler thermoelectric materials using Zintl chemistry*, *Nature Reviews Materials* 1(6), p. 1–10 (2016)
3. T. Zhu, Y. Liu, C. Fu, J.P. Heremans, J.G. Snyder, X. Zhao, *Compromise and synergy in high-efficiency thermoelectric materials*, *Advanced Materials* 29(14), p. 1605884 (2017)
4. Y. Rached, M. Caid, M. Merabet, S. Benalia, H. Rached, L. Djoudi, M. Mokhtari, D. Rached, *A comprehensive computational investigations on the physical properties of TiXSb (X: Ru, Pt) half-Heusler alloys and $\text{Ti}_2\text{RuPtSb}_2$ double half-Heusler*, *International Journal of Quantum Chemistry* 122(9), p. e26875 (2022)

5. K. Bouhadjer, M. Boudjelal, M. Matougui, S. Bentata, T. Lantri, M. Batouche, T. Seddik, R. Khenata, B. Bouadjemi, S. Bin Omran et al., *Structural, optoelectronic, thermodynamic and thermoelectric properties of double half-Heusler (DHH) $Ti_2FeNiSb_2$ and Ti_2Ni_2InSb compounds: A TB-mBJ study*, Chinese Journal of Physics 85, p. 508–523 (2023)
6. H. Ding, X. Li, Y. Feng, B. Wu, *Electronic structure, magnetism and disorder effect in double half-Heusler alloy $Mn_2FeCoSi_2$* , Journal of Magnetism and Magnetic Materials 555, p. 169367 (2022)
7. O. Douinat, A. Boucherdoud, A. Seghier, M. Houari, S. Mesbah, T. Lantri, B. Bestani, *Theoretical investigation of the physical, mechanical, and thermal properties of Zr_2XBiNi_2 (X: Al, Ga) double half-Heusler alloys*, Journal of Materials Research 38(20), p. 4509–4521 (2023)
8. R. Hasan, T. Park, S. Kim, H.-S. Kim, S. Jo, K.H. Lee, *Enhanced Thermoelectric Properties of $Ti_2FeNiSb_2$ Double Half-Heusler Compound by Sn Doping*, Advanced Energy and Sustainability Research 3(4), p. 2100206 (2022)
9. M.A. Hassan, A. El-Khouly, E.M. Elsehly, E.N. Almutib, S.K. Elshamndy, I. Serhienko, E.V. Argunov, A. Sedegov, D. Karpenkov, D. Pashkova et al., *Transport and thermoelectric properties of melt spinning synthesized $M_2FeNiSb_2$ (M= Ti, Hf) double half-Heusler alloys*, Materials Research Bulletin 164, p. 112246 (2023)
10. M. Diaf, H. Righi, H. Rached, D. Rached, R. Beddiaf, *Ab initio study of the properties of Ti_2PdFe (Ru) Sb_2 double half-Heusler semiconducting alloys*, Journal of Electronic Materials 52(10), p. 6514–6529 (2023),
11. Z. Charifi, H. Baaziz, Ş. Uğur, G. Uğur, *Prediction of the electronic structure, optical and vibrational properties of $ScXCo_2Sb_2$ (X= V, Nb and Ta) double half-Heusler alloys: a theoretical study*, Indian Journal of Physics 97(2), p. 413–428 (2023)
12. M. Boudjelal, K. Bouhadjer, M. Matougui, S. Bentata, V. Srivastava, S. Bin-Omran, R. Khenata, *Ab initio prediction of the structural, optoelectronic and thermoelectric properties of double half-Heusler (DHH) $ScXRh_2Bi_2$ (X= Nb, Ta) alloys DFT study results*, Indian Journal of Physics, p. 1–14 (2024)
13. J. Carrete, N. Mingo, S. Wang, S. Curtarolo, *Nanograined Half-Heusler Semiconductors as Advanced Thermoelectrics: An Ab Initio High-Throughput Statistical Study*, Advanced Functional Materials 24(47), p. 7427–7432 (2014)
14. C. Wang, J. Meyer, N. Teichert, A. Auge, E. Rausch, B. Balke, A. Hütten, G.H. Fecher, C. Felser, *Heusler nanoparticles for spintronics and ferromagnetic shape memory alloys*, Journal of Vacuum Science & Technology B 32(2), p. 1–10 (2014)

Авторлар туралы мәлімет:

Солтанбек Н.С. – докторант, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар кафедрасының докторанты, Қажымұқан, 11, 010000, Астана, Қазақстан

Мерәлі Н.А. – хат-хабар авторы, жоба жетекшісі, PhD, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия Ұлттық Университеті, техникалық физика кафедрасының аға оқытушысы, Қажымұқан көшесі, 11, 010000, Астана, Қазақстан

Абуова Ф.У. – PhD, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар кафедрасының қауымдастырылған профессоры, Қажымұқан, 11, 010000, Астана, Қазақстан

Абуова А.У. – PhD, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия Ұлттық Университеті, техникалық физика кафедрасының қауымдастырылған профессоры, Қажымұқан, 11, 010000, Астана, Қазақстан

Инербаев Т.М. – ф-м.ғ.к., Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия Ұлттық Университеті, техникалық физика кафедрасының доценті, Қажымұқан, 11, 010000, Астана, Қазақстан

Жакиева Ж.Е. – PhD, Астана Халықаралық университетінің оқытушысы

Жанғазы Т.Н. – Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия Ұлттық Университеті, ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар кафедрасының магистранты, Қажымұқан, 11, 010000, Астана, Қазақстан

Нұрмаханбетова Б.Н. – Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия Ұлттық Университеті, ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар кафедрасының студенті, Қажымұқан, 11, 010000, Астана, Қазақстан

Солтанбек Н.С. – докторант, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул.Кажымукана, 11, 010000, Астана, Казахстан

Мерәли Н.А. – автор для корреспонденции, руководитель проекта, PhD, старший преподаватель кафедры технической физики, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул. Кажымукана, 11, 010000, Астана, Казахстан

Абуова Ф.У. – PhD, ассоциированный профессор кафедры ядерной физики, новых материалов и технологий, Евразийский национальный университет имени Л. Н. Гумилева, ул. Кажымукана, 11, 010000, Астана, Казахстан

Абуова А.У. – PhD, ассоциированный профессор кафедры технической физики, Евразийский национальный университет имени Л. Н. Гумилева, ул.Кажымукана, 11, 010000, Астана, Казахстан

Инербаев Т.М. – к. ф-м. н., доцент кафедры технической физики, Евразийский национальный университет имени Л. Н.Гумилева, ул.Кажымукана, 11, 010000, Астана, Казахстан

Закиева Ж.Е. – PhD, преподаватель, Международный университет Астана

Жанғазы Т.Н. – магистрант, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул.Кажымукана, 11, 010000, Астана, Казахстан

Нұрмаханбетова Б.Н. – студент-бакалавр, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул. Кажымукана, 11, 010000, Астана, Казахстан

Soltanbek N.S. – doctoral student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 11 Kazhymukan str, 010000, Astana, Kazakhstan

Merali N.A. – corresponding author, project leader, PhD in technical science, senior lecturer, department of technical physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 11 Kazhymukan str, 010000, Astana, Kazakhstan

Abuova F.U. – PhD, Associate Professor, Department of Nuclear Physics, New Materials and Technologies, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 11 Kazhymukan str, 010000, Astana, Kazakhstan

Abuova A.U. – PhD, Associate Professor, Department of Technical Physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 11 Kazhymukan str, 010000, Astana, Kazakhstan

Inerbaev T.M. – Associate Professor, Department of Technical Physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 11 Kazhymukan str, 010000, Astana, Kazakhstan

Zakiyeva Zh.Y. – PhD, Lecturer, Astana International University

Zhangazy T.N. – master's student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 11 Kazhymukan str., 010000, Astana, Kazakhstan

Nurmakhambetova B.N. – bachelor student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 11 Kazhymukan str., 010000, Astana, Kazakhstan



Copyright: © 2025 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).