

KONFERENSIYALAR COM

ANJUMANLAR PLATFORMASI

**XX RESPUBLIKA ILMIY-
AMALIY KONFERENSIYASI**

**YANGI DAVR ILM-
FANI: INSON UCHUN
INNOVATSION G'OYA
VA YECHIMLAR**

OKTYABR, 2026

ISSN 3093-8791

ELEKTRON NASHR:

<https://konferensiyalar.com>



Yangi davr ilm-fani: inson uchun innovatsion g'oya va yechimlar.
XX Respublika ilmiy-amaliy konferensiyasi materiallari to'plami.
2-jild, 20-son (28-oktyabr, 2026-yil).– 66 bet.

Mazkur nashr ommaviy axborot vositasi sifatida 2025-yil, 8-iyulda
C-5669862 son bilan rasman davlat ro'yaxatidan o'tkazilgan.

Elektron nashr: <https://konferensiyalar.com>

ISSN: 3093-8791 (onlayn)

Konferensiya tashkilotchisi: "Scienceproblems Team" MChJ

Konferensiya o'tkazilgan sana: 2026-yil, 26-oktyabr

Mas'ul muharrir:

Isanova Feruza Tulqinovna

Annotatsiya

Mazkur to'plamda "Yangi davr ilm-fani: inson uchun innovatsion g'oya va yechimlar" mavzusidagi XX Respublika ilmiy-amaliy konferensiyasi materiallari jamlangan. Nashrda respublikaning turli oliy ta'lim muassasalari, ilmiy markazlari va amaliyotchi mutaxassislari tomonidan tayyorlangan maqolalar o'rin olgan bo'lib, ular ijtimoiy-gumanitar, tabiiy, texnik va yuridik fanlarning dolzarb muammolari va ularning innovatsion yechimlariga bag'ishlangan.

Ushbu nashr ilmiy izlanuvchilar, oliy ta'lim o'qituvchilari, doktorantlar va soha mutaxassislari uchun foydali qo'llanma bo'lib xizmat qiladi.

Kalit so'zlar: ilmiy-amaliy konferensiya, innovatsion yondashuv, zamonaviy fan, fanlararo integratsiya, ilmiy-tadqiqot, nazariya va amaliyot, ilmiy hamkorlik.

Barcha huquqlar himoyalangan.

© Scienceproblems team, 2026-yil

© Mualliflar jamoasi, 2026-yil

FIZIKA-MATEMATIKA FANLARI

GA-GD INTERMETALLIK BIRIKMALARINING KRISTALL TUZILISHI VA MAGNIT XOSSALARINI NAZARIY TADQIQ ETISH

Sharipova Mehrinoz Zarif qizi

Buxoro davlat universiteti, magistranti

Annotatsiya. Ushbu tezisda Gd - Ga tizimiga mansub GdGa, GdGa₂, GdGa₃, GdGa₆, Gd₃Ga va Gd₃Ga₂ intermetallik birikmalarining kristall tuzilishi, termodinamik barqarorligi, zichligi hamda magnit xossalari nazariy hisoblashlar asosida tahlil qilindi. Hisoblashlar zichlik funksionali nazariyasi (DFT) doirasida spin-polarizatsiyalangan holatda amalga oshirildi. Strukturaviy optimallashtirish orqali birikmalarning panjara parametrlari va kristall simmetriyasi aniqlandi. Shakllanish energiyasining manfiy qiymatlari barcha ko'rib chiqilgan fazalarning termodinamik jihatdan barqaror ekanligini ko'rsatdi. Magnit xossalarni hisoblash natijasida Gd atomlari konsentratsiyasining ortishi bilan umumiy magnit momentning sezilarli oshishi va ferromagnit tartiblanishning kuchayishi aniqlandi.

Kalit so'zlar: Gd - Ga birikmalari, gadolinii, galliy, DFT, kristall tuzilma, shakllanish energiyasi, ferromagnetizm, spin-polarizatsiya, magnit moment.

THEORETICAL INVESTIGATION OF THE CRYSTAL STRUCTURES AND MAGNETIC PROPERTIES OF GA-GD INTERMETALLIC COMPOUNDS

Sharipova Mehrinoz Zarif qizi

Master's Student, Bukhara State University

Annotation. This thesis presents a theoretical analysis of the crystal structures, thermodynamic stability, densities, and magnetic properties of the intermetallic compounds GdGa, GdGa₂, GdGa₃, GdGa₆, Gd₃Ga, and Gd₃Ga₂ in the Gd-Ga system. The calculations were performed using spin-polarized density functional theory (DFT). Structural optimization was employed to determine the lattice parameters and crystal symmetries of the compounds. The negative values of the formation energies indicate that all the investigated phases are thermodynamically stable. The magnetic property calculations revealed a significant increase in the total magnetic moment and an enhancement of ferromagnetic ordering with increasing Gd concentration.

Keywords: Gd-Ga compounds, gadolinium, gallium, density functional theory (DFT), crystal structure, formation energy, ferromagnetism, spin polarization, magnetic moment.

DOI: <https://doi.org/10.47390/ydif-y2026v2i20/n01>

Kirish

Bugungi kunda yangi funksional materiallarni izlash va ularning fizik xossalarini nazariy hamda eksperimental jihatdan o'rganish materialshunoslikning muhim yo'nalishlaridan biri hisoblanadi. Galliy asosidagi intermetallik birikmalar mikroelektronika va yuqori samarali materiallar yaratishda qo'llanish imkoniyatlari bilan qiziqish uyg'otadi. Gadolinii esa kuchli magnit xossalari bilan ajralib turuvchi noyob yer elementi bo'lib, uning birikmalari magnit va magnetokalorik materiallar sifatida tadqiq qilinmoqda.

Gd-Ga tizimining fizik xossalarini o'rganish kristall tuzilma, kimyoviy tarkib va magnit xususiyatlar o'rtasidagi bog'liqlikni aniqlash imkonini beradi. Shu sababli mazkur ishning maqsadi Gd-Ga tizimiga mansub intermetallik birikmalarning strukturaviy, energetik va magnit xossalarini nazariy jihatdan tahlil qilishdan iborat.

Tadqiqot metodologiyasi

Nazariy hisoblashlar zichlik funksionali nazariyasi (Density Functional Theory – DFT) asosida bajarildi. Hisoblashlarda Gd va Ga atomlarining elektron konfiguratsiyalari hisobga olindi. Gadoliniy uchun 4f-elektronlarning kuchli lokal magnit moment hosil qilishi, galliy atomlarining esa metall tipidagi bog'lanishda ishtirok etishi e'tiborga olindi.

Boshlang'ich kristallografik ma'lumotlar **Materials Project** ma'lumotlar bazasidan olindi. Strukturaviy optimallashtirish jarayonida panjara parametrlari va atom koordinatalari to'liq relaksatsiya qilinib, tizimning energetik minimum holati aniqlandi. Hisoblashlar spin-polarizatsiyalangan holda bajarildi. Kristall strukturalarni vizualizatsiya qilish va tahlil qilishda **VESTA** dasturidan foydalanildi.

Termodinamik barqarorlik shakllanish energiyasi orqali baholandi. Shakllanish energiyasining manfiy qiymati tegishli fazaning termodinamik jihatdan barqarorligini ko'rsatadi.

Natijalar va muhokama

Tadqiqot davomida GdGa, GdGa₂, GdGa₃, GdGa₆, Gd₃Ga va Gd₃Ga₂ birikmalarining optimallashtirilgan kristall tuzilmalari o'rganildi. Strukturaviy tahlil Gd va Ga atomlarining turli stexiometrik nisbatlari kristall panjara va koordinatsion muhitning sezilarli o'zgarishiga olib kelishini ko'rsatdi. Gd konsentratsiyasi ortishi bilan fazoviy tarmoqning zichlashishi kuzatildi.

Hisoblash natijalariga ko'ra, GdGa ortorombik, GdGa₂ va GdGa₃ olti burchakli, GdGa₆ va Gd₃Ga₂ to'rtburchak, Gd₃Ga esa kubik kristall fazada barqarorlashadi. Barcha birikmalarda shakllanish energiyasi manfiy qiymatga ega bo'ldi. Eng past shakllanish energiyasi GdGa₂ uchun **-0.655 eV/atom**, GdGa uchun esa **-0.631 eV/atom** qiymatlarni tashkil etdi. GdGa₆ fazasida ushbu qiymat **-0.324 eV/atom** bo'lib, ko'rib chiqilgan fazalar orasida nisbatan kichik manfiy qiymat qayd etildi.

Magnit xossalarni tahlil qilish Gd atomlarining tizimdagi magnit xususiyatlarning asosiy manbai ekanligini ko'rsatdi. GdGa, GdGa₂ va GdGa₃ birikmalarida umumiy magnitlanish mos ravishda **7.69, 7.26 va 7.06 $\mu\text{B/f.u.}$** ni tashkil etdi. Gd₃Ga va Gd₃Ga₂ birikmalarida Gd atomlari ulushining ortishi natijasida magnit moment keskin oshib, mos ravishda **23.25 va 22.25 $\mu\text{B/f.u.}$** qiymatlarga yetdi.

GdGa₆ fazasida esa umumiy magnitlanish **0 $\mu\text{B/f.u.}$** ga teng bo'ldi. Bu holat kompensatsiyalangan magnit holat yoki antiferromagnit tartiblanish bilan bog'liq bo'lishi mumkin. Umuman olganda, hisoblash natijalari Gd atomlari konsentratsiyasi va magnit moment o'rtasida sezilarli bog'liqlik mavjudligini ko'rsatdi.

Hisoblangan zichlik qiymatlari **7.17–8.34 $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$** oralig'ida bo'lib, eng yuqori zichlik Gd₃Ga fazasida — **8.34 $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$** kuzatildi. Bu natija Gd atomlari konsentratsiyasining ortishi va kristall strukturaning zichlashuvi bilan izohlanadi.

Xulosa

Gd–Ga tizimiga mansub intermetallik birikmalarning kristall tuzilishi, termodinamik barqarorligi, zichligi va magnit xossalari DFT asosida nazariy jihatdan tadqiq qilindi. Olingan natijalarga ko'ra, ko'rib chiqilgan barcha fazalar manfiy shakllanish energiyasiga ega bo'lib, ularning termodinamik barqarorligini ko'rsatadi. Kristall tuzilmaning stexiometrik tarkibga bog'liq ravishda o'zgarishi aniqlandi.

Magnit xossalari tarkibga sezilarli darajada bog'liq bo'lib, Gd konsentratsiyasining ortishi ayrim fazalarda umumiy magnit momentning oshishi va ferromagnit tartiblanishning kuchayishiga olib keladi. Ayniqsa, Gd₃Ga va Gd₃Ga₂ fazalarida yuqori magnit moment qiymatlari

qayd etildi. Olingan nazariy natijalar Gd–Ga tizimining magnit va funksional material sifatidagi xususiyatlarini chuqurroq o'rganish uchun asos bo'lib xizmat qiladi. Shu bilan birga, ularning amaliy qo'llanish imkoniyatlarini aniqlash uchun qo'shimcha eksperimental tadqiqotlar talab etiladi.

Adabiyotlar/Литература/References:

1. Khokhlova, Yu. A., & Khokhlov, M. 3D-visualization of magnesium strengthening mechanisms for a description of experimentally obtained data of alloying effect in Mg-Ga system. Journal of Magnesium and Alloys, 2020, 8(2), 546.
2. Liu, S., Sweatman, K., McDonald, S. D., & Nogita, K. Ga-Based Alloys in Microelectronic Interconnects: A Review. Materials, 2018, 11(8), 1384.
3. Chen, H. L., Lin, L., Mao, P., & Liu, Z. Phase stability, electronic, elastic and thermodynamic properties of Al-RE intermetallics in Mg-Al-RE alloy: A first principles study. Journal of Magnesium and Alloys, 2015, 3(3), 197.
4. Khadhraoui, S., Kaouach, H., Zaidi, N., & Baazaoui, M. Investigating the Magnetocaloric Effect of GdGaAl Alloys Using Mean-Field Theory. Research Square, 2024.

YANGI DAVR ILM-FANI: INSON UCHUN INNOVATSION G'OYA VA YECHIMLAR

XX RESPUBLIKA ILMIY-AMALIY KONFERENSIYASI MATERIALLARI
2026-yil, oktyabr

Mas'ul muharrir: *F.T.Isanova*
Texnik muharrir: *N.Bahodirova*
Diszayner: *I.Abdihakimov*

Yangi davr ilm-fani: inson uchun innovatsion g'oya va yechimlar.
XX Respublika ilmiy-amaliy konferensiyasi materiallari to'plami.
2-jild, 20-son (28-oktyabr, 2026-yil). – 66 bet.

Mazkur nashr ommaviy axborot vositasi sifatida 2025-yil, 8-iyulda
C-5669862 son bilan rasman davlat ro'yaxatidan o'tkazilgan.

ISSN: 3093-8791 (onlayn)

Elektron nashr: <https://konferensiyalar.com>

Konferensiya tashkilotchisi: "Scienceproblems Team" MChJ

Konferensiya o'tkazilgan sana: 2026-yil, 26-oktyabr.

Barcha huquqlar himoyalangan.
© Science problems team, 2026-yil.
© Mualliflar jamoasi, 2026-yil.