جهت تهیه فایل WORD این مقاله به سایت DaneshResan.com مراجعه نمایید و عنوان مقاله را جستجو کنید
بیش از ۲ میلیون مقاله فارسی در این سایت موجود میباشد

مدلبندی آماری کریستال $Ce(Pd_{1-x}Cu_x)_3$

هوشیار، محبوبه

گروه فیزیک دانشکده علوم پایه دانشگاه شهید بهشتی اوین تهران

چکیده

با استفاده از یک مدل آماری، تعداد همسایه های اتم Ce در ترکیب $Ce(Pd_{1-x}Cu_x)_3$ برای غلظتهای مختلف محاسبه شد. در این محاسبه با توجه به فرض همگنی کامل، تعداد همسایه های Ce در یک راس مکعب، به عنوان یک متغیر تصادفی در نظر گرفته شده و نتایج این محاسبه برای بررسی اندازه گیری تجربی مقاومت الکتریکی این آلیاژها مورد استفاده قرار داده شده است.

Statistical Model for $Ce(Pd_{1-x}Cu_x)_3$ Crystals

Houshiar, Mahboubeh

Physics Department, Ffaculty of Science, ,Shahid Beheshti University, Evin Tehran.

Abstract

Based on a statistical model, the probability of the number of neighbours for a Ce atom in the compound $Ce(Pd_{1-x}Cu_x)_3$ was calculated for different concentrations. In this computation, based on the assumption of complete homogeneity, the number of neighbours, for a Ce atom considered as a random variable and the results were used for the empirical measurements of the electrical resistivity of the alloys.

PACS No. 71.15

مقدمه

مطالعه آلیاژ $CePd_3$ به عنوان یک ترکیب والانس میانی تا به حال به طور وسیعی مورد بررسی قرار گرفته است [۱]. از طرف دیگر دیده شده که اضافه کردن دیگر عناصر [۲] و یا جایگزین کردن برخی عناصر دیگر به جای عنصر Pd [۳] باعث تغییر حالت این ترکیب از حالت والانس میانی به حالت سه گانه شبه کاندو می گردد. مطالعات تجربی ترابردی و مغناطیسی این ترکیب با نشاندن عنصر Cu به جای Pd در گزارشهای پیشین ارایه گردیده است [٤]. در ادامه این مطالعات و به منظور بررسی علت تغییر مقاومت الکتریکی $Ce(Pd_{1-x}Cu_x)_3$ با استفاده از یک مدل آماری، تعداد همسایه های اتم Ce در ترکیب $Ce(Pd_{1-x}Cu_x)_3$ برای غلظتهای مختلف محاسبه شده است.

روش محاسباتی- مدلبندی آماری

برای مدلبندی آماری از مدل توزیع دو جمله ای استفاده میکنیم. توزیع دو جمله ای براساس آزمایشهایی به نام آزمایشهای برنولی شکل گرفته است.

آزمایش برنولی- عبارتست از آزمایشی که نتیجه آن فقط دو حالت دارد، مثل پرتاب سکه [۵].

اگر چنین آزمایشی را مستقلا n بار تکرار کنیم با فرض اینکه احتمال پیشامد مورد نظر در هر بار تکرار آزمایش ثابت باشد، در این صورت y تعداد دفعاتی که در n بار تکرار آزمایش پیشامد مورد نظر، رخ دهد، یک متغیر تصادفی است موسوم به متغیر دو جمله ای که توزیع احتمال آن را توزیع دو جمله ای می نامند.

میتوان نشان داد که احتمال وقوع مقادیر مختلف y از فرمول زیر تبعیت می کند.

$$\Pr(y=j)=\frac{n!}{j!(n-j)!}p^j(1-p)^{n-j} \qquad (۱)$$

واضح است که مقادیر متغیر تصادفی y (تعداد رخداد پیشامد مورد نظر) از صفر تا n تغییر می کند و احتمالهای مربوط به آنها از فرمول توزیع دو جمله ای (۱) به دست می اید.

جهت تهیه فایل WORD این مقاله به سایت DaneshResan.com مراجعه نمایید و عنوان مقاله را جستجو کنید
بیش از ۲ میلیون مقاله فارسی در این سایت موجود میباشد

آلیاژهای $Ce(Pd_{1-x}Cu_x)_3$ با غلظتهای x=0,0.017, 0.033, 0.133 تهیه و ساختار کریستالی آنها در گزارشهای قبلی آمده است [٤]. این آلیاژها دارای ساختار مکعبی مرکز وجهی میباشند. در این ساختار اتم Ce در هر راس مکعب واقع شده و اتمهای Pdدر مرکز هر وجه قرار میگیرند. با توجه به فرض همگنی کامل، تعداد همسایه های یک اتم در یک راس مکعب یک متغیر تصادفی است با پارامترهای p=0.017 و n=12. بدین معنا که شانس اینکه در هر وجه یک همسایه وجود داشته باشد برابر با 0.017 است. بنابراین مقادیر ممکن yاعداد بین صفر تا ۱۲ می باشند و احتمالهای مربوط به آنها دز فرمول توزیع دوجمله ای (۱) به این ترتیب به دست می آید: مثلا برای x=0.017 ، p=0.017 و n=12 خواهیم داشت،

$$pr(y=0)=\binom{12}{0}0.017^0(1-0.017)^{12}=0.814$$

که این بدان معنی است که 81.4% اتمهای Ce فاقد همسایه Cu می باشند.

و یا مثلا

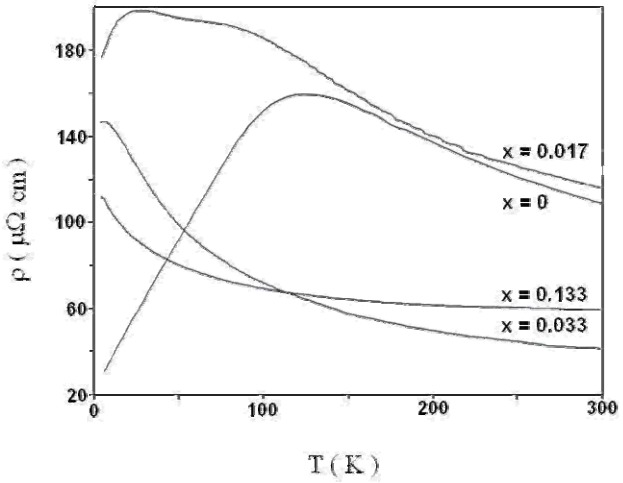
$$pr(y=1)=\binom{12}{1}0.017^1(1-0.017)^{11}=0.169$$

یعنی که 16.9% اتمهای Ce دارای تنها یک همسایه Cu می باشند. پس 1.7% بقیه حالات، مواردی است که اتمهای Ce دارای بیش از یک همسایه هستند. به این ترتیب این محاسبه برای سایر غلظتهای x انجام شده و نتایج در جدول (۱) ارایه میگردد.

جدول(۱): نتایج محاسبات آماری درصد همسایه های اتم Ce در آلیاژ $Ce(Pd_{1-x}Cu_x)_3$ برای غلظتهای مختلف x

x=0.017		x=o.o33		x=0.133	
٪همسایهCe	همسایهCu	٪همسایهCe	همسایهCu	٪همسایهCe	همسایهCu
81.4%	0	66.8%	0	18%	0
16.9%	1	27.4%	1	33.2%	1
1.7%	>1	5.8%	>1	48.8%	>1

اندازه گیریهای مقاومت الکتریکی، پذیرفتاری مغناطیسی، قدرت حرارتی و مقاومت مغناطیسی [٤] و همچنین پراکنش نوترونی این آلیاژها در غلظتهای مختلف نشان میدهد که با افزایش غلظت Cu حالت ترکیب از والانس میانی به وضعیت شبه کاندو تبدیل می گردد. شکل (۱) مقاومت الکتریکی این آلیاژها را با ی غلظتهـا مختلف x=0.0, 0.017, 0.033, 0.133 در دماهای بین صفر تا ۳۰۰ درجه کلوین نشان می دهد.



شکل (۱)-مقاومت الکتریکی آلیاژهای $Ce(Pd_{1-x}Cu_x)_3$ برحسب دما[٤].

همانطور که در شکل دیده می شود، در غلظت x=0 مقاومت، رفتار والانس میانی را نشان میدهد. دراین غلظت، یک قله در حدود دمای ۱۵۰ درجه کلوین مشاهده می شود که با جایگزینی ۱/۷٪ Cu محل قله به دمای پایینتر حدود ۳۰ درجه کلوین منتقل می شود. این نشاندهنده این است که برای ترکیب با غلظـت کمتر از۱/۷٪ رفتار مقاومت شبیه ترکیب $CePd_3$ است اما در مقیاس دمایی کاهش یافته. این انتقال دمایی قله در مقاومت برای ترکیب با غلظت x=0.008 نیز مشاهده شده است[٦]. همانطور که در شکل (۱) دیده میشود، مقاومت ترکیب با ۱/۷٪ Cu در واقع با دو قله ظاهر میشود. یک قله در حدود ۳۰ درجه کلوین و دیگری در حدود ۷۵ درجه کلوین. رفتار مشابهی نیز در ترکیب $CePd_3Si_x$ با x=0.01 در مقاومت الکتریکی با دو قله مشاهده شده است[۷] که شبیه ترکیب $Ce(Pd_{0.83}Cu_{0.017})_3$ می باشد. با مدلبندی آماری انجام شده و با فرض همگنی کامل آلیاژها، طبق نتایج نشان داده شده در جدول (۱)، به نظر می رسد که برای غلظت x=0.017، 81.4% اتمهای Ce هیچ همسایه Cu ندارند

جهت تهیه فایل WORD این مقاله به سایت DaneshResan.com مراجعه نمایید و عنوان مقاله را جستجو کنید
بیش از ۲ میلیون مقاله فارسی در این سایت موجود میباشد

حال آنکه 16.9% اتمهای Ce یک اتم Cu همسایه دارند. احتمال اینکه اتمهای Ce بیش از یک همسایه Cu داشته باشند، تنها 1.7% است. بنابراین ممکن است که دو قله مشاهده شده در مقاومت الکتریکی ناشی از وجود این دو نوع Ce محلی باشد. در نتیجه این امکان وجود دارد که شاید قله دیده شده در ۷۵ درجه کلوین مربوط به اتمهای Ce بدون هیچ همسایه Cu باشد و اتمهایی که دارای یک همسایه Cu هستند باعث ایجاد رسیدن به دمای کاندو می شوند، پس ممکن است دلیل وجود قله دوم در دمای پایینتر به خاطر رفتار یون منفرد کاندو باشد. برای غلظت x=0.033 احتمال اینکه اتمهای Ce بدون هیچ همسایه Cu کمتر می شود (٪٦٦/٨). اما در اینجا اثر افزایش Cu در ترکیب این است که قله مقاومت در دمای به مراتب پایینتر منتقل می شود که به حالت متفرد کاندو بسیار نزدیک می شود. با افزایش غلظت x، ترکیب هیچ قله ای در مقاومت نشان نمی دهد. در واقع مقاومتهای x=0.033 و x=0.133 نشان داده شده در شکل (۱) با افزایش دما به طور یکنواخت بر حسب قانون ln(T)– بین ۱۰ تا ۱۰۰ درجه کلوین کاهش نشان می دهند.

نتیجه گیری

تغییر غلظت x در آلیاژهای $Ce(Pd_{1-x}Cu_x)_3$ در نتایج تجربی مقاومت رفتارهای متفاوتی را نشان می دهد که از جمله وجود دو قله در غلظت x=0.017% است. با استفاده از مدلبندی آماری در ساختار کریستالی و محاسبه احتمال وجود همسایه های جایگزین شده Cu با اتم Pd در این ترکیبها، دلیل وجود دو قله بررسی شد. به نظر می رسد با افزودن x، اتمهای محلی Ce به دو نوع تبدیل می شوند؛ یکی اتمهای Ce بدون همسایه Cu و دیگری اتمهای Ce با یک همسایه Cu. پس دلیل وجود دو قله در مقاومت الکتریکی می تواند به خاطر وجود این دو نوع Ce محلی باشد.

مرجع‌ها

[۱] E. Wuilloud, et al; J. Phys. C. Vol. 17, No. 27, p. 4799-4806 (1984).
[۲] J. P. Kappler, et al; JMMM 47 & 48 p 111-114 (1985).
[۳] Adroja D.T., et al; Physica B 186-188, 566 (1994).
[٤] M. Houshiar et al, Proceedings of the 6th Annual Condensed Matter Conference, Yazd, Iran, P.63 (20030.547
[٥] M. Evans, N. Hosting, B. Peacock, "Statistical Distributions"3rd edition, John Wiley (2000).
[٦] T Kasuya, et al;J. Less Common Met, 127,337 (1987).
[٧] D.T. Adroja, et al ;JMMM 161,157 (1996).