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

Archive of SID

مطالعه ساختار کریستالی و مغناطیسی Gd_3In

دادگستر، شبنم[۱]؛ یزدانی، احمد[۲]؛ هوشیار، محبوبه[۳]

[۱و۲] گروه فیزیک دانشگاه تربیت مدرس، بزرگراه جلال آل احمد، تهران

[۳] دانشگاه شهید بهشتی، تهران

چکیده

از آنجا که برای ترکیب Gd_3In یک ساختار کریستالی مخلوط با ترکیب Gd_2In گزارش شده و از سوی دیگر برای آن هیچگونه فاز مغناطیسی مشخصی گزارش نشده، اقدام به ساخت و بررسی ساختار کریسنالی و فاز مغناطیسی این ترکیب شد. با استفاده از طیف XRD، ساختار کریستالی این ترکیب را مشخص شد. ساختار کریستالی مکعبی، به عنوان ساختار کریستالی این ترکیب گزارش می شود. همچنین اندازه گیری پذیرفتاری نشان می دهد که نظام فرو مغناطیس پایدارترین فاز مغناطیسی مربوط به این ترکیب می باشد.

The study of magnetic and crystal structure of Gd_3In

Dadgostar, Shabnam[1]; Yazdani, Ahmad; Houshiar, Mahboobeh[2]

[1]Physics Department, Tarbiyat Modares University, Tehran,
[2]Shahid Beheshti University, Tehran

Abstract

There are not any reports about magnetic phase of Gd3In and it is reported that Gd_3In has a mixture crystal structure whit Gd_2In. Therefore, its crystal structure and magnetic phase are deliberated. By the use of XRD spectrum, crystal structure of Gd_3In is determined. It has cubic structure. Susceptibility measurements also, indicated that Gd_3In has a ferromagnetic transition in T_c=188K.

مقدمه

گادلنیوم یک فلز نادر خاکی فرومغناطیس می باشد. آرایش الکترونی در آن به صورت $4f^7 5d^1 6s^2$ است. به این ترتیب یون Gd^{+3} دارای حالت متقارن کروی است. این تقارن باعث حذف آثار میدان کریستالی می گردد و در ترکیبات بین فلزی با Gd، تنها برهمکنش تبادلی دارای اهمیت است[۱].

اولین بار، هاچسن و همکاران وجود این ترکیب را با یک فاز متامگنت، پیشبینی کردند[۲]. اما مک آلیستر و همکاران در سال ۱۹۸٤ ، عدم شکل گیری کریستالی ترکیب Gd_3In را گزارش

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

Archvie of SID

کرده و آنرا به صورت فازی مخلوط با ترکیب Gd_2In پیش بینی نمودند[۳].

از طرفی،گزارشاتی درباره ترکیباتی نظیر Gd_3Pd و Gd_3Rh که در دیاگرام فاز وجود ندارند، ارائه شده است[۴،۶،۵]. عناصر رودیوم(Rh)، پالادیوم(Pd) و ایندیوم(In)، هر سه در ردیف سوم جدول تناوبی قرار دارند و آرایش الکترونی آنها به ترتیب $[Kr]4d^{8}5s^{1}$ ، $[Kr]4d^{10}$ و $[Kr]4d^{10}5s^{2},5p^{1}$ می باشد.

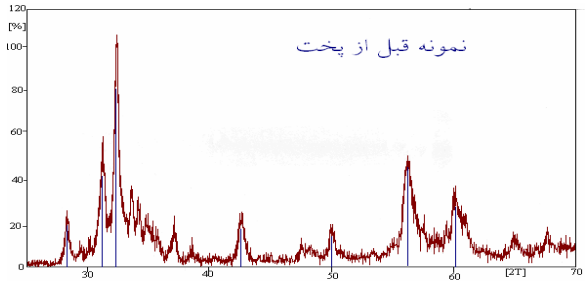
از آنجا که در تمامی این ترکیبات عنصر گادلنیوم به کار رفته است، پس تنها عناصر Rh ، Pd و In هستند که در شکل گیری و یا عدم شکل گیری ترکیبات $Gd_3T(T=Rh, Pd, In)$ اهمیت دارند. در مورد Rh و Pd اثر هیبریداسون در ترکیباتشان وجود دارد در حالیکه در In هیبریداسیون نقشی نداشته و تنها تعداد الکترونهای آزاد دارای اهمیت می باشد. در اینجا دو مسئله مطرح می گردد. اول اینکه آیا ترکیب Gd_3In با یک ساختار کریستالی معین وجود دارد ویا اینکه افزایش تعداد الکترونهای آزاد می تواند باعث عدم شکل گیری این ترکیب گردد؟

برای پاسخ به این دو سؤال ترکیب Gd_3In ساخته شده و مورد بررسی قرار گرفته است.

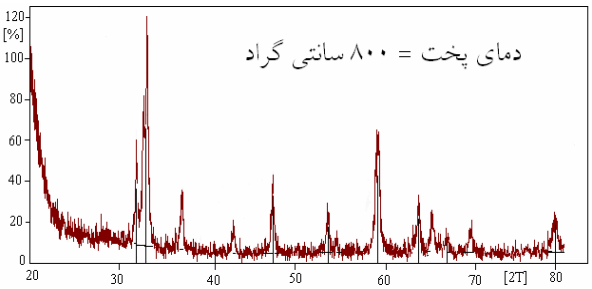
کارهای تجربی

ترکیب Gd_3In به روش استوکیومتری،از عناصر Gd و In ، با درجه خلوص ۹۹,۹٪ ساخته شده است. این ترکیب به وسیله کوره قوس الکتریکی، درون محیط آرگون و در فشار یک اتمسفر تهیه شده است. نمونه حاصل توسط دستگاه Micro MT به چندین قسمت برش داده شده است. دو قسمت از ترکیب در دماهای ۸۰۰ و ۸۵۰ درجه سانتیگراد به ترتیب به مدت ۱۱۰ و ۹۶ ساعت تحت عملیات حراراتی قرار گرفته اند. بخشی از دو نمونه پخت شده و یک نمونه قبل از پخت به صورت پودر در آمدند و در آزمایشگاه زمین شناسی دانشگاه تربیت مدرس طیف XRD مربوط به آنها اندازه گیری شده است. باقیمانده نمونه پخت نشده به صورت یک مکعب مستطیل تهیه شده و بر روی آن اندازه گیری های مقاومت و پذیرفتاری در دماهای پایین انجام گرفته شده است.

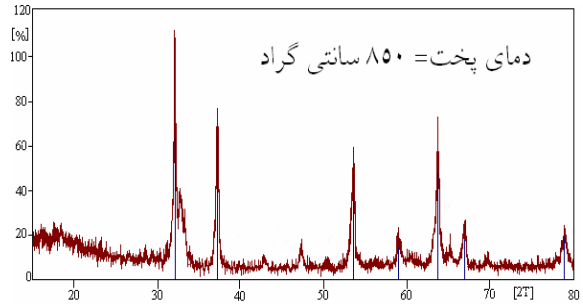
نتایج و توضیحات



شکل ۱- طیف XRD مربوط به Gd_3In ، قبل از پخت



شکل ۲- طیف XRD مربوط به Gd_3In که به مدت ۱۱۰ ساعت در دمای ۸۰۰ سانتیگراد پخت شده است



شکل ۳- طیف XRD مربوط به Gd_3In که به مدت ۹۶ ساعت در دمای ۸۵۰ سانتیگراد پخت شده است

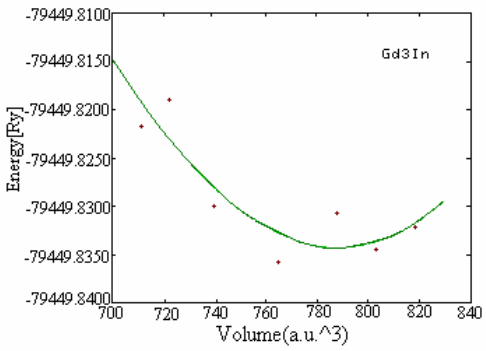
شکلهای ۱ ، ۲ و۳ به ترتیب طیف XRD مربوط به نمونه قبل از پخت، نمونه ای که در دمای ۸۰۰ درجه سانتیگراد به مدت ۱۱۰ ساعت پخت شده و نمونه ای که در دمای ۸۵۰ درجه سانتیگراد به مدت ۹۶ ساعت پخت شده، می باشند.

با مقایسه طیفهای حاصل و طیف ساختارهای شاخص، پیشنهاد می شود که، ترکیب Gd_3In دارای ساختار مکعبی با گروه فضایی Pm3m(221) و ساختار شاخص Cu_3Au می باشد. با استفاده از

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

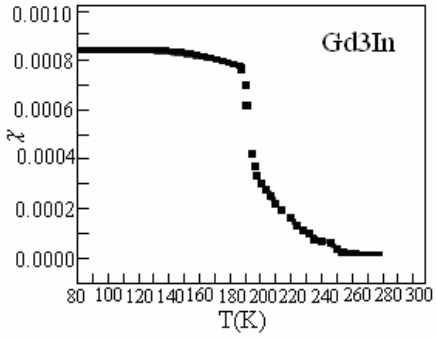
Archive of SID

h,k,l حاصل از طیف XRD ، زوایای پراکندگی و طول موج مربوط به پرتوی X ، ثوابت شبکه این ترکیب برابر با $a = b = c = 4.839A^{\circ}$ به دست آمدند. از مقایسه طیفهای به دست آمده، مشاهده می شود که قله ها در شکل ۳ تیزتر از بقه می باشد و از میزان نویزها در آن کاسته شده است. این به معنی قرار گرفتن اتمها در بهترین جایگاه های فضاییشان و شکل گیری مناسب ساختار کریستالی است. به نظر می رسد که بهترین دمای پخت برای این ترکیب ۸۵۰ درجه سانتیگراد باشد.



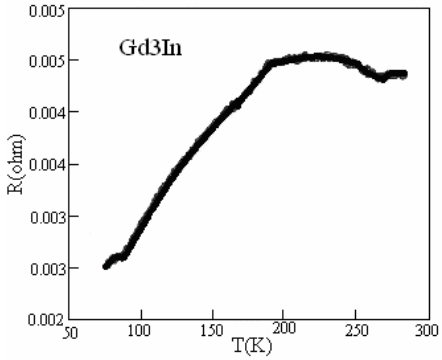
شکل 4- بهینه سازی حجم Gd_3In بر حسب انرژی

در شکل ٤، به منظور سنجش نتایج آزمایش، با استفاده از نرم افزار wien2k و به کارگیری گروه فضایی و ساختار شاخص به دست آمده، حجم ترکیب را بر حسب انرژی بهینه سازی شده است. محاسبات نشان می دهند که، ترکیب Gd_3In در حالتی که مقدار a برابر با $٤,٨٣٩^{0}A$ است، پایین ترین انرژی خود را دارد. این بدان معنی است که ثوابت شبکه حاصل از آزمایش مقادیر صحیحی هستند، زیرا ساختار Gd_3In با این ثوابت شبکه پایدارترین حالت خود را دارد .



شکل ٥- تابعیت دمایی پذیرفتاری Gd_3In . گذار فاز فرو در 188K قابل مشاهده است.

بررسی ساختار مغناطیسی Gd_3In با استفاده از اندازه گیری پذیرفتاری در دماهای پایین انجام شده است. در شکل ٥ تابعیت دمایی پذیرفتاری ترکیب، در بازه دمایی K ۳۰۰-۸۰ نشان داده شده است. مشاهده می شود که ، یک گذار فاز فرومغناطیس در حدود T_c = ۱۸۸ K انجام می شود و در زیر دمای T_c ، منحنی پذیرفتاری به حالت اشباع می رسد.



شکل ٦- مقاومت الکتریکی Gd_3In قبل از پخت

شکل ٦ نشان دهنده مقاومت ترکیب Gd_3In در بازه دمایی K ۳۰۰-۵۰ است. منحنی مقاومت این ترکیب، از حدو۱۸۸K = T_c شروع به کاهش می کند. این کاهش با افت مربوط به مقاومت ترکیبات مغناطیسی در زیر دمای نظم همخوانی دارد. به این ترتیب افت مقاومت در حدود T_c = ۱۸۸ K با گذار فازی که در همین دما، در منحنی پذیرفتاری این ترکیب مشاهده شد، موافق است.

همچنین، مقاومت Gd_3In در بالای دمای کوری به حالت اشباع می رسد. پس تابعیت دمایی این ترکیب، در دماهای بالا از قانون اهم پیروی نمی کند و به نظر می رسد که در حوزه پارامغناطیس هنوز اثر یونها بر روی الکترونهای آزاد از بین نرفته است.

نتیجه گیری

ما برای ترکیب Gd_3In یک ساختار کریستالی مکعبی را گزارش می کنیم که این بر خلاف گفته مک آلیستر می باشد که

Archvie of SID

این ترکیب را به صورت فازی مخلوط با ترکیب Gd_2In هگزاگونال گزارش می کند. همچنین پذیرفتاری ترکیب Gd_3In گذار فاز پادفرومغناطیس را نشان نمی دهد و در حدود دمای K ۱۰۰ ، که تقریبا برابر با دمای نیل Gd_2In می باشد، در فاز فرومغناطیس و در حالت اشباع قرار دارد.

مراجع

[۱] C. Santos & W. Nolting, V. Eyert, **Ferromagnetic and temperature- dependent electronic structure of hcp gadolinium**, PHYSICAL REWIEW B 69, 214412(2004)

[۲] *Hutchens. R.D, Wallace. W. E, Nereson. N, 1974* **J. Solid State Chem. 9 152**

[۳] S.P.McAlister, *Magnetic and electrical properties of Gd_2In*, **J. Phys, Met. Phys. 14 (1984) 2167-2175.**

[٤] E.Talki, a.Slebarski, *Properties of Gd_3T compounds (T = Rh, Ir, Pd)*, **Journal of Alloys and Compounds 233(1995) 87-90**

[٥] J.Le Roy, J.M.Moreau, D.Paccard & E.Parthe, *Rare- Earth(and Yttrium)- Iridium and –Platinum Compounds with Fe3C structure type*, **Acta Cryst. (1979). B35, 1437-1439.**

[٦] N.V.Baranov, K.Inove, H.Michor, G.Hilscher and A.A.Yermakov, Spin fluctuations in Gd_3Rh induced by f-d exchange: the influence on the T-linear specific heat, J. Physc: Condense Matter 15(2003) 531-538