

Barbara Winiarska
WFIS AGH

Struktura krystaliczna, elektronowa, właściwości elektryczne i magnetyczne silnie magnetostrykcyjnych związków RM_2 (R – ziemia rzadka, M – metal przejściowy 3d)

Promotor: prof. dr hab. Jarosław Pszczoła
Promotor pomocniczy: dr inż. Piotr Guzdek

Przeprowadzono syntezę w łuku elektrycznym serii $Tb_{0.27}Dy_{0.73}(Fe_{1-x}Al_x)_2$, $Tb_{0.27}Dy_{0.73}(Fe_{1-x}Co_x)_2$ i $Tb_{0.27}Dy_{0.73}(Fe_{0.9-x}Ni_{0.1}Co_x)_2$ związków międzymetalicznych, w zakresie niewielkich podstawień metalu przejściowego 3d.

Wykonano pomiary rentgenowskie metodą proszkową z wykorzystaniem promieniowania $Mo K_\alpha$ w temperaturze pokojowej. Uzyskane dyfraktogramy wykazały istnienie czystej struktury regularnej $Fd\bar{3}m$, $C15$, fazy Lavesa typu $MgCu_2$.

Wyznaczono parametry sieci krystalicznej za pomocą analizy numerycznej dyfraktogramów rentgenowskich.

Parametr komórki elementarnej rośnie liniowo, gdy parametr składu x zwiększa się dla związków serii $Tb_{0.27}Dy_{0.73}(Fe_{1-x}Al_x)_2$; maleje nieliniowo, gdy parametr składu x zwiększa się dla związków serii $Tb_{0.27}Dy_{0.73}(Fe_{1-x}Co_x)_2$ i maleje liniowo, gdy zwiększa się parametr składu x dla serii związków $Tb_{0.27}Dy_{0.73}(Fe_{0.9-x}Ni_{0.1}Co_x)_2$.

Metodą *FLAPW* (Full-potential Linear Augmented Plane Waves) przeprowadzono obliczenia struktury elektronowej związków międzymetalicznych serii $Tb_{0.27}Dy_{0.73}(Fe_{1-x}Al_x)_2$ i $Tb_{0.27}Dy_{0.73}(Fe_{0.9-x}Ni_{0.1}Co_x)_2$. Dla wszystkich związków serii $Tb_{0.27}Dy_{0.73}(Fe_{1-x}Al_x)_2$ i $Tb_{0.27}Dy_{0.73}(Fe_{0.9-x}Ni_{0.1}Co_x)_2$ obliczono funkcje gęstości stanów elektronowych w pasmach 3d, 3sp, 4s, 5d i 6s dla podpasz większościowych i mniejszościowych. Obliczono momenty magnetyczne pasm 3d, 4s, 3sp4s, 5d i 6s. Dla pasm 3d, 4s, 3sp4s, 5d i 6s wyznaczono również momenty magnetyczne, energie rozszczepienia, dystrybuanty funkcji gęstości stanów i szerokości połówkowe poszczególnych podpasz.

Przeprowadzono pomiary oporności elektrycznej właściwej dla związków międzymetalicznych serii $Tb_{0.27}Dy_{0.73}(Fe_{1-x}Al_x)_2$ i $Tb_{0.27}Dy_{0.73}(Fe_{0.9-x}Ni_{0.1}Co_x)_2$ w szerokim zakresie temperatur i wydzielono składowe oporności elektrycznej właściwej: oporność resztkową, fononową i magnetyczną. Wyznaczono parametry charakteryzujące zależność oporności od temperatury i parametru składu, w tym temperaturę Debye'a. Różnica magnetycznej składowej oporności elektrycznej właściwej względem temperatury posłużyła do wyznaczenia temperatur Curie badanych związków.

Przeprowadzono pomiary magnetostrykcji metodą tensometryczną. Dla wszystkich związków serii wyznaczono parametry magnetostrykcji wzdłużnej i poprzecznej jako funkcje natężenia przyłożonego zewnętrznego pola magnetycznego. W większości przypadków zostały wyznaczone ogromne wartości parametrów magnetostrykcji.

Przedstawiono i omówiono korelacje wzajemne pomiędzy różnymi parametrami fizycznymi badanych związków międzymetalicznych wraz z danymi literaturowymi.

Częściowe podstawianie żelaza przez aluminium lub kobalt redukuje wprawdzie wartości współczynników magnetostrykcji, przy czym dla niewielkich podstawień wartości te pozostają nadal ogromne.

W ogólności, zmiana średniej liczby n elektronów $3d$ silnie wpływa na pasmową strukturę elektronową, a co za tym idzie wpływa na właściwości krystaliczne, elektryczne i magnetyczne oraz magnetostrykcyjne związków międzymetalicznych.