بسم الله الرحمن الرحيم

١٢٩٧٧٥

دانشگاه اصفهان

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه‌ی کارشناسی ارشد رشته‌ی فیزیک گرایش آزاد

بررسی خواص ساختاری، الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی ترکیب‌های

Ni_2FeX, $Fe_2NiX(X=Al, Ga)$ و $FeAlX(X=Ni, Co)$

استادان راهنما:

دکتر سید مجتبی مستجاب الدعواتی

دکتر محمد رضا عبدی

استاد مشاور:

دکتر زهرا نوربخش

پژوهشگر:

مریم مقیمی

مدیریت اطلاعات مدارک علمی دانشگاه
تاریخ مدارک
۱۳۸۸/۱۰/۲۷

شهریور ماه ۱۳۸۸

۱۲۹۷۷۵

کلیه‌ی حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات، ابتکارات
و نوآوری‌های ناشی از تحقیق موضوع این پایان نامه
متعلق به دانشگاه اصفهان است.

شیوه نگارش پایان نامه
رعایت شده است.
تحصیلات تکمیلی دانشگاه اصفهان

دانشگاه اصفهان

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه ی کارشناسی ارشد رشته ی فیزیک گرایش آزاد خانم

مریم مقیمی تحت عنوان

بررسی خواص ساختاری، الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی ترکیب‌های

$Ni_2FeX, Fe_2NiX(X=Al, Ga)$

و $FeAlX(X=Ni, Co)$

در تاریخ ۱۳۸۸/۶/۱۸ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه به تصویب نهایی رسید.

۱- استاد راهنمای پایان نامه دکتر مجتبی مستجاب الدعواتی با مرتبه ی علمی استادیار امضا

۲- استاد راهنمای پایان نامه دکتر محمدرضا عبدی با مرتبه ی علمی استادیار امضا

۳- استاد مشاور پایان نامه دکتر زهرا نوربخش با مرتبه ی علمی استادیار امضا

۴- استاد داور داخل گروه دکتر محمدعلی شاهزمانیان با مرتبه ی علمی استاد امضا

۵- استاد داور خارج از گروه دکتر علی مختاری با مرتبه ی علمی استادیار امضا

امضای مدیر گروه

گروه فیزیک
University of Isfahan
Department of Physics

خداوندا

چنان سایه حضورت را در تمام مراحل کارم احساس کرده‌ام که گاه می‌اندیشم کدام لحظه مهربانی‌ات دستگیر نبود؛ که اگر نبود،

آغاز و انجام کار میسر نمی‌گشت.

خداوندا یقین دارم این من، به تنهایی قادر به آفرینش این ذره نبود، ارج می‌نهم حضور و یاری استادان اندیشمند و متعهدم دکتر

مستجاب و دکتر عبدی را که علم و اخلاق را توامان از ایشان آموختم.

تقدیم به

پدرم که چتر سبز محبتش پشتیبان همیشگی من بوده

و

مادرم که زمزمه مناجات های عاشقانه اش برکت زندگی ام بوده

و

همسرم که یار و همراه همیشگی من است.

چکیده

در این کار ساختار الکترونی ترکیب‌های سه‌گانه هاسلر نوع $C1_b$ FeAlX (X= Ni, Co) و ترکیب‌های نوع $L2_1$ Ni_2FeX, Fe_2NiX (X=Al, Ga) بر پایه‌ی روش امواج تخت بهبود یافته‌ی خطی با پتانسیل کامل محاسبه شده است. این روش بر پایه‌ی نظریه‌ی تابعی چگالی و بر اساس تقریب‌های شیب تعمیم یافته GGA، چگالی موضعی LDA وچگالی موضعی به علاوه‌ی پارامتر هابارد LDA+U بنا نهاده شده است. ویژگی‌های الکترونی، ساختاری، مغناطیسی و اپتیکی این ترکیب‌ها با استفاده از نظریه‌ی تابعی چگالی توسط بسته‌ی نرم افزاری wien2k محاسبه شده است. در این کد نرم افزاری سلول واحد به کره‌های مافین تین غیر همپوشاننده به شعاع R_{MT} و یک منطقه‌ی درون شبکه‌ای مجزا شده است، که توابع موج کان- شم بر حسب هارمونیک‌های کروی درون کره‌ها و امواج تخت در فضای باقیمانده‌ی سلول واحد بیان شده است. ویژگی‌های حالت پایه‌ی این ترکیب‌ها با استفاده از محاسبات انرژی کل به صورت تابعی از حجم به دست آمده است. محاسبات نشان می‌دهد در همه‌ی ترکیب‌ها در فشار صفر فاز فرومغناطیس پایدار است. با رسم چگالی حالت‌های الکترونی کل و جزئی و ساختار نواری در حالت فرومغناطیس ویژگی‌های الکترونی در فاز فرومغناطیس محاسبه شده است. ویژگی‌های اپتیکی این ترکیب‌ها با استفاده از نمودارهای بخش حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک وابسته به بسامد و تابع جذب و بازتاب آن‌ها محاسبه شده است. برای بررسی رفتار گشتاور مغناطیسی این ترکیب‌های فرومغناطیس، گشتاور مغناطیسی کل ترکیب‌ها و هر یک از اتم‌های آن را در فشارهای مختلف محاسبه کرده‌ایم. نتایج نشان می‌دهد که اتم Fe نقش عمده‌ای در ایجادگشتاور مغناطیسی دارد.

کلید واژه‌ها:

نظریه‌ی تابعی چگالی، چگالی حالت‌های الکترونی، نوارهای انرژی، گشتاور مغناطیسی

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل اول زمینه‌ی نظری و تجربی آلیاژهای هاسلر

۱-۱ مقدمه ۱

۱-۲ ویژگی‌های ساختاری ۲

۱-۳ ویژگی‌های مغناطیسی ۴

۱-۳-۱ فرومغناطیس‌ها ۴

۱-۳- ۲ آنتی‌فرومغناطیس و فری‌مغناطیس‌ها ۶

۱-۳-۳ مغناطیس جایگزیده در مقابل مغناطیس سیار ۶

۱-۴ محاسبات ساختار نواری ۷

۱-۴-۱ آرایش گشتاورهای مغناطیسی ۷

۱-۴-۲ فرومغناطیس نیم فلزی ۸

۱-۴-۲-۲ رفتار پائولی– اسلیتر ۱۰

۱-۵ دسته بندی سیستم‌های نیم فلزی ۱۱

۱-۵-۱ منشاء گاف نیم فلزی ۱۲

۱-۵-۱ الف گاف‌های نواری کوالانسی ۱۳

۱-۵-۱ ب گاف‌های نواری حامل بار ۱۴

۱-۵-۱ پ مواد با گاف نواری d-d ۱۴

فصل دوم نظریه‌ی تابعی چگالی

۲-۱ مقدمه ۱۵

۲-۲ نظریه‌ی تابعی چگالی ۱۶

۲-۲-۱ نظریه‌ی کان- هوهنبرگ ۱۶

۲-۲-۱ الف سیستم‌های بس ذره‌ای ۱۶

۲-۲-۲ معادلات کان– شم ۲۰

۲-۳ تقریب چگالی موضعی (LDA) برای تابعی تبادلی- همبستگی ۲۳

۲-۳-۱ سیستم غیر برهم کنشی ۲۴

۲-۴ تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) ۲۵

عنوان | صفحه

۲-۴ -۱ روش پردو ۲۶
۲-۵ تقریب LDA+U ۲۷
فصل سوم خواص ساختاری، الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی ترکیب‌های Ni_2FeX (X= Al, Ga)
۳-۱ مقدمه ۳۰
۳-۲ خواص ساختاری و الکترونی ترکیب‌های Ni_2FeX (X= Al, Ga) ۳۱
۳-۲-۱ خواص ساختاری ترکیب‌های Ni_2FeX (X= Al, Ga) ۳۱
۳-۲-۱ -۱ معادله‌ی حالت مورناگان ۳۱
۳-۲-۱-۱ الف ثابت شبکه‌ی تعادلی ۳۳
۳-۲-۱-۱ ب مدول حجمی ۳۵
۳-۲- ۱-۱ پ مشتق مدول حجمی ۳۵
۳-۳ ویژگی‌های الکترونی ترکیب‌های Ni_2FeX(X= Al, Ga) ۳۵
۳-۳- ۱ نوارهای انرژی ۳۵
۳- ۳-۱-۱ مقایسه‌ی نوارهای انرژی در تقریب‌های GGA و LDA و LDA+U ۳۸
۳- ۳-۲ چگالی حالت‌های الکترونی ۳۹
۳-۴ تعیین پارامتر هابارد ترکیب‌های Ni_2FeAl و Ni_2FeGa ۴۷
۳-۴-۱ پارامتر هابارد U ۴۷
۳-۴-۲ محاسبه‌ی پارامتر هابارد U به صورت ابتدا به ساکن ۴۷
۳-۵ ویژگی‌های مغناطیسی ۵۴
۳-۵-۱ تاثیر فشار بر گشتاور مغناطیسی ۵۴
۳-۶ ویژگی‌های اپتیکی ترکیب‌های Ni_2FeAl و Ni_2FeGa ۵۵
فصل چهارم خواص ساختاری، الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی ترکیب‌های Fe_2NiX(X = Al, Ga)
۴- ۱ مقدمه ۵۷
۴-۲ خواص ساختاری و الکترونی ترکیب‌های Fe_2NiX (X = Al, Ga) ۵۸
۴-۲-۱ خواص ساختاری ترکیب‌های Fe_2NiX (X= Al, Ga) ۵۸
۴-۲-۲ خواص الکترونی ترکیب‌های Fe_2NiX (X= Al, Ga) ۶۱
۴-۲-۲-۱ نوارهای انرژی ۶۱
۴-۲-۲-۲ چگالی حالت‌های الکترونی ۶۳
۴-۳ تعیین پارامتر هابارد ترکیب‌های Fe_2NiAl و Fe_2NiGa ۷۱

عنوان **صفحه**

۴-۴ ویژگی‌های مغناطیسی ۷۶

۴-۴-۱ تاثیر فشار بر گشتاور مغناطیسی ۷۶

۴-۵ ویژگی‌های اپتیکی ترکیب Fe_2NiGa ۷۷

فصل پنجم ویژگی‌های الکترونی، ساختاری، مغناطیسی و اپتیکی ترکیب‌های FeAlX (X= Ni, Co)

۵-۱مقدمه ۷۸

۵- ۲ ویژگی‌های ساختاری ترکیب‌های FeAlX (X= Ni, Co) ۷۹

۵- ۳ ویژگی‌های الکترونی ترکیب‌های FeAlX (X= Ni, Co) ۸۱

۵- ۳-۱ نوارهای انرژی ۸۱

۵- ۳-۲ چگالی حالت‌های الکترونی ۸۳

۵-۳-۲-۱ مقایسه‌ی چگالی حالت‌های الکترونی در تقریب‌های LDA و LDA+U ۹۱

۵-۴ ویژگی‌های مغناطیسی ۹۳

۵-۴-۱ تاثیر فشار بر گشتاور مغناطیسی ۹۳

۵-۵ ویژگی‌های اپتیکی ترکیب‌های FeAlNi و FeAlCo ۹۴

۵-۶ نتیجه گیری ۹۴

منابع و ماخذ ۹۶

فهرست شکل‌ها

عنوان **صفحه**

شکل۱-۱ (a) ساختارهای $C1_b$ و $L2_1$ آلیاژهای نیم و تمام هاسلر. (b) آرایش‌های ممکن برای اشغال زیرشبکه‌های Y و Z در ساختار بی‌نظم ۳

شکل۱-۲ سمت چپ: گشتاورهای مغناطیسی جایگزیده‌ی مربوط به الکترون‌های غیرجایگزیده، سمت راست: نمودار مربوط به چگالی حالت‌های الکترونی d برای Cu_2MnAl ۸

شکل۱-۳ سمت چپ: ساختار نواری فرومغناطیس نیم‌فلزی NiMnSb سمت راست: چگالی حالت‌های الکترونی هر یک از اتم‌های NiMnSb..... ۹

شکل۱-۴ تصویر شماتیک گاف نواری در نوار انرژی با اسپین پایین در آلیاژهای نیم‌هاسلر ۱۲

شکل۱-۵ سمت چپ: گشتاورهای اسپینی کل محاسبه شده برای آلیاژهای نیم‌هاسلر، سمت راست: آلیاژهای تمام هاسلر ۱۱

شکل۲-۱ نمودار n برحسب ε_{XC} ۲۴

شکل۲-۲ نمودارهای چگالی n(r) بر حسب فاصله‌ی r و انرژی تبادلی همبستگی ε_{XC} ۲۵

شکل۳-۱ نمودار تغییرات انرژی بر حسب حجم ترکیب‌های Ni_2FeAl و Ni_2FeGa در تقریب‌های LDA، LDA+U و GGA ۳۳

شکل ۳-۲ الف نمودار نوارهای انرژی ترکیب‌های $Ni_2FeX(X=Al, Ga)$ در فاز فرومغناطیس در تقریب GGA..... ۳۶

شکل۳-۲ب نمودار نوارهای انرژی ترکیب‌های $Ni_2FeX(X= Al, Ga)$ در فاز فرومغناطیس در تقریب LDA.. ۳۷

شکل۳-۲پ نمودار نوارهای انرژی ترکیب‌های $Ni_2FeX(X=Al, Ga)$در فاز فرومغناطیس در تقریب LDA+U ۳۸

شکل ۳-۳ الف نمودار چگالی حالت‌های الکترونی کل هر یک از ترکیب‌های $Ni_2FeX(X= Al, Ga)$ در تقریب‌هایGGA، LDA و LDA+U ۴۰

شکل ۳-۴ الف نمودار چگالی حالت‌های الکترونی هر یک از اوربیتال‌های اتم Ni در تقریب GGA ۴۱

شکل ۳-۴ ب نمودار چگالی حالت‌های الکترونی هر یک از اوربیتال‌های اتم Ni در تقریب GGA..... ۴۲

شکل ۳-۴ پ نمودار چگالی حالت‌های الکترونی هر یک از اوربیتال‌های اتم Fe در تقریب GGA..... ۴۳

شکل ۳-۴ ت نمودار چگالی حالت‌های الکترونی هر یک از اوربیتال‌های اتم Fe در تقریب GGA..... ۴۴

شکل ۳-۴ ث نمودار چگالی حالت‌های الکترونی هر یک از اوربیتال‌های اتم‌های Al و Ga در تقریب GGA.... ۴۵

شکل ۳-۴ ی نمودار چگالی حالت‌های الکترونی هر یک از اوربیتال‌های اتم‌های Al و Ga در تقریب GGA... ۴۶

عنوان **صفحه**

شکل ۳-۴ نمودارهای گشتاور مغناطیسی کل و سهم هر یک از اتم‌های ترکیب‌های Ni_2FeX (X=Al, Ga) بر حسب پارامتر هابارد U ۴۹

شکل ۳-۵ الف نمودار چگالی حالت‌های الکترونی الکترون‌های d اتم Ni در ترکیب Ni_2FeGa با تقریب‌های LDA و LDA+U ۵۰

شکل ۳-۵ ب نمودار چگالی حالت‌های الکترونی الکترون‌های d اتمFe در ترکیب Ni_2FeGa با تقریب‌های LDA و LDA+U ۵۱

شکل ۳-۵ پ نمودار چگالی حالت‌های الکترونی الکترون‌های d اتم Ni در ترکیب Ni_2FeAl با تقریب‌های LDA و LDA+U ۵۲

شکل ۳-۵ ت نمودار چگالی حالت‌های الکترونی الکترون‌های d اتم Fe در ترکیب Ni_2FeAl با تقریب‌های LDA و LDA+U ۵۳

شکل۳-۶ نمودار گشتاور مغناطیسی کل و گشتاور مغناطیسی هر یک از اتم‌های ترکیب‌های Ni_2FeAl و Ni_2FeGa ۵۴

شکل ۳-۷ نمودارهای بخش حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، جذب و ضریب بازتاب بر حسب انرژی برای ترکیب‌های Ni_2FeAl و Ni_2FeGa ۵۶

شکل ۴-۱ نمودار تغییرات انرژی بر حسب حجم ترکیب‌های Fe_2NiAl وFe_2NiGa در تقریب‌های LDA، LDA+Uو GGA ۶۰

شکل۴-۲ الف نمودار نوارهای انرژی ترکیب Fe_2NiX (X= Al, Ga) در فاز فرومغناطیس در تقریب GGA... ۶۱

شکل۴-۲ ب نمودار نوارهای انرژی ترکیب Fe_2NiX (X= Al, Ga) در فاز فرومغناطیس در تقریب LDA..... ۶۲

شکل۴-۲پ نمودار نوارهای انرژی ترکیبFe_2NiX (X= Al, Ga) در فاز فرومغناطیس در تقریب LDA+U... ۶۲

شکل ۴-۳ نمودار چگالی حالت‌های الکترونی کل ترکیب‌های Fe_2NiX (X= Al, Ga) در تقریب‌های LDA وLDA+U و GGA ۶۴

شکل ۴-۴ الف نمودار چگالی حالت‌های الکترونی هر یک از اوربیتال‌های اتم Fe در تقریب GGA ۶۵

شکل ۴-۴ ب نمودار چگالی حالت‌های الکترونی هر یک از اوربیتال‌های اتم Fe در تقریب GGA ۶۶

شکل ۴-۴ پ نمودار چگالی حالت‌های الکترونی هر یک از اوربیتال‌های اتم Ni در تقریب GGA ۶۷

شکل۴ -۴ ت نمودار چگالی حالت‌های الکترونی هر یک از اوربیتال‌های اتم Ni در تقریب GGA ۶۸

شکل ۴-۴ ث نمودار چگالی حالت‌های الکترونی هر یک از اوربیتال‌های اتم‌های Al و Ga در تقریب GGA... ۶۹

شکل ۴-۴ ی نمودار چگالی حالت‌های الکترونی هر یک از اوربیتال‌های اتم‌های Al و Ga در تقریب GGA... ۷۰

عنوان **صفحه**

شکل ۴-۵ نمودارهای گشتاور مغناطیسی کل و سهم هر یک از اتم‌های ترکیب‌های $Fe_2NiX(X=Al, Ga)$ بر حسب پارامتر هابارد U ۷۱

شکل۴-۶ الف نمودار چگالی حالت‌های الکترونی الکترون‌های d اتم Fe در ترکیب Fe_2NiAl با تقریب‌های LDA و LDA+U ۷۲

شکل۴-۶ ب نمودار چگالی حالت‌های الکترونی الکترون‌های d اتم Ni در ترکیب Fe_2NiAl با تقریب‌های LDA و LDA+U ۷۳

شکل۴-۶ پ نمودار چگالی حالت‌های الکترونی الکترون‌های d اتم Fe در ترکیب Fe_2NiGa با تقریب‌های LDA و LDA+U ۷۴

شکل۴-۶ ت نمودار چگالی حالت‌های الکترونی الکترون‌های d اتم Ni در ترکیب Fe_2NiGa با تقریب‌های LDA و LDA+U ۵۷

شکل۴-۷ نمودار گشتاور مغناطیسی کل و گشتاور مغناطیسی هر یک از اتم‌های ترکیب‌های Fe_2NiGa و Fe_2NiAl ۷۶

شکل ۴-۸ نمودارهای بخش حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، جذب و ضریب بازتاب بر حسب انرژی برای ترکیب Fe_2NiGa ۷۷

شکل ۵-۱ نمودار تغییرات انرژی بر حسب حجم ترکیب‌های FeAlNi و FeAlCo در تقریب GGA و LDA ... ۷۹

شکل ۵-۲ الف نمودار نوارهای انرژی ترکیب $FeAlX(X= Ni, Co)$ در فاز فرومغناطیس در تقریب GGA ۸۱

شکل ۵-۲ ب نمودار نوارهای انرژی ترکیب $FeAlX(X= Ni, Co)$ در فاز فرومغناطیس در تقریب LDA ۸۲

شکل ۵-۲ پ نمودار نوارهای انرژی ترکیب $FeAlX(X= Ni, Co)$ در فاز فرومغناطیس در تقریب LDA +U .. ۸۲

شکل۵-۳ نمودار چگالی حالت‌های الکترونی کل ترکیب‌های $FeAlX (X=Ni, Co)$ در سه تقریب LDA و LDA+U و GGA ۸۴

شکل ۵-۴ الف نمودار چگالی حالت‌های الکترونی جزئی اتم Fe ترکیب‌های $FeAlX (X=Ni, Co)$ در تقریب GGA ۸۵

شکل ۵-۴ ب نمودار چگالی حالت‌های الکترونی جزئی اتم Fe ترکیب‌های $FeAlX (X=Ni, Co)$ در تقریب GGA ۸۶

شکل ۵-۴ پ نمودار چگالی حالت‌های الکترونی جزئی اتم Al ترکیب‌های $FeAlX (X=Ni, Co)$ در تقریب GGA ۸۷

شکل ۵-۴ ت نمودار چگالی حالت‌های الکترونی جزئی اتم Al ترکیب‌های $FeAlX (X=Ni, Co)$ در تقریب GGA ۸۸

عنوان **صفحه**

شکل ۵-۴ ث نمودار چگالی حالت‌های الکترونی جزئی اتم‌های Ni و Co ترکیب‌های FeAlX (X=Ni, Co) در تقریب GGA ۸۹

شکل ۵-۴ ی نمودار چگالی حالت‌های الکترونی جزئی اتم‌های Ni و Co ترکیب‌های FeAlX (X=Ni, Co) در تقریب GGA ۹۰

شکل ۵-۵ الف نمودار چگالی حالت‌های الکترونی الکترون‌های d اتم Ni و Fe در ترکیب FeAlNi با تقریب-های LDA و LDA+U

..... ۹۱

شکل ۵-۵ ب نمودار چگالی حالت‌های الکترونی الکترون‌های اتم‌های d اتم Co و Ni ترکیب FeAlCo در تقریب LDA و LDA+U ۹۲

شکل۵-۶ نمودار گشتاور مغناطیسی کل و گشتاور مغناطیسی هر یک از اتم‌های ترکیب‌های FeAlCo و FeAlNi ۹۴

شکل ۵-۷ نمودارهای بخش حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، جذب و ضریب بازتاب بر حسب انرژی برای ترکیب‌های FeAlNi و FeAlCo ۹۵

فهرست جدول‌ها

عنوان **صفحه**

جدول ۱-۱ ترکیب، آرایش مغناطیسی و ساختار بلوری آلیاژهای هاسلر ۵

جدول۳-۱ مقایسه‌ی پارامتر شبکه، مدول حجمی و مشتق آن در دو فاز فرومغناطیسی و غیرمغناطیسی برای ترکیب‌های Ni_2FeGa و Ni_2FeAl ۳۴

جدول۳-۲ گشتاور مغناطیسی کل و جزئی هر یک از ترکیب های Ni_2FeAl و Ni_2FeGa ۵۴

جدول۴-۱مقایسه‌ی پارامتر شبکه، مدول حجمی و مشتق آن در دو فاز فرومغناطیسی و غیرمغناطیسی برای ترکیب‌های Fe_2NiGa و Fe_2NiAl ۵۹

جدول ۴-۲ گشتاور مغناطیسی کل و جزئی هر یک از ترکیب‌های Fe_2NiGa و Fe_2NiAl در فشار صفر ۷۶

جدول۵-۱مقایسه‌ی پارامتر شبکه، مدول حجمی و مشتق آن در دو فاز فرومغناطیسی و غیرمغناطیسی برای ترکیب‌های FeAlNi و FeAlCo ۸۰

جدول ۵-۲ گشتاور مغناطیسی کل و جزئی هر یک از ترکیب‌های FeAlNi و FeAlCo در فشار صفر ۹۳

فصل اول

زمینه‌ی نظری و تجربی آلیاژهای هاسلر

۱-۱ مقدمه

کشف آلیاژهای هاسلر به سال ۱۹۰۳میلادی برمی‌گردد. فردریک هاسلر شیمیدان و مهندس معدن آلمانی گزارش داد افزودن عناصر sp (Al, In, Sn, Sb or Bi) به آلیاژ Cu-Mn با وجود آن‌که آلیاژ شامل هیچ یک از عناصر فرومغناطیسی نیست، آن را به یک ماده‌ی فرومغناطیس تبدیل می‌کند. مفهوم پایه‌ای ساختار بلوری و ترکیب این آلیاژها هنوز پس از سال‌های طولانی ناشناخته باقی مانده است. در سال ۱۹۲۹میلادی اندازه گیری اشعه‌ی x پاتر[1] بر روی Cu-Mn-Al معلوم کرد همه‌ی اجزای این سیستم بر اساس یک ابر شبکه‌ی fcc نظم گرفته‌اند. برادلی و ردگرز[2] جزئیات سیستم Cu-Mn-Al را با استفاده از اشعه‌ی X و پراکندگی محاسبه کردند و رابطه‌ی بین ترکیب، مرتبه‌ی شیمیایی و ویژگی‌های مغناطیسی را ثابت کردند. بعد از درک ساختار بلوری محاسبات بسیاری انجام شد و معلوم شد ساختار هاسلر در اصل از ترکیب منظم ترکیب دوتایی B_2ی XY و XZ شکل گرفته است[۱]. هر دو ترکیب‌می‌توانند

---

[1] Potter

[2] Bradley and Rodgers

ساختار بلوری نوع CsCl داشته باشند، به عنوان مثال CoMn و CoAl ترکیب Co_2MnAl را تشکیل می‌دهند. پس توانایی ترکیب‌ها برای شکل دادن ساختارB_2 امکان تشکیل ترکیب‌های هاسلر جدید را نشان می‌دهد. مطالعات تجربی نشان می‌دهد که اغلب ترکیب‌های هاسلر با استوکیومتری فرومغناطیسی نظم می‌گیرند. ساختار بلوری، ترکیب و رفتار گرمایی عامل‌های مهمی در تعیین ویژگی‌های مغناطیسی هستند. با کشف فرومغناطیس-های نیم‌فلزی در NiMnSb و اثر shape memory [۲]در ترکیب Ni_2MnGa آلیاژهای هاسلر به طرز چشم‌گیری مورد توجه مطالعات نظری و تجربی قرار گرفتند. در این فصل خلاصه‌ای از مطالعات نظری و تجربی پیشین که بر روی ویژگی‌های مغناطیسی و ساختاری آلیاژهای هاسلر انجام گرفته است را ارائه می‌کنیم. امروزه به دو دسته از مواد آلیاژهای هاسلر گفته می‌شود:

۱- آلیاژهای نیم هاسلر با فرمول عمومی XYZ

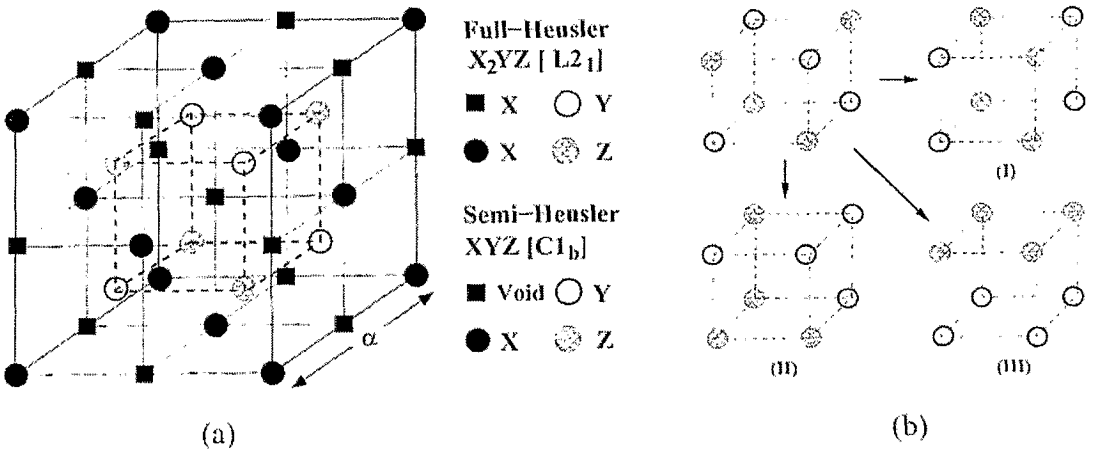
۲- آلیاژهای تمام هاسلر با فرمول عمومی X_2YZ

عناصر X و Y از گروه فلزات واسطه هستند در حالی‌که مولفه‌ی Z عنصری از گروه III-V است. آلیاژهای نیم و تمام هاسلر به ترتیب با ساختارهای $C1_b$ و $L2_1$ نمایش داده می‌شوند. این ترکیب‌ها رفتار مغناطیسی بسیار قوی نشان می‌دهند. در خانواده‌ی یکسان آلیاژها پدیده‌های مغناطیسی متفاوتی وجود دارد.

۱-۲ ویژگی‌های ساختاری

آلیاژهای هاسلر به عنوان ترکیب‌های بین فلزی سه‌گانه تعریف می‌شوند. در ترکیب استوکیومتری، آلیاژهای هاسلر کامل X_2YZ و آلیاژهای نیم هاسلر XYZ به ترتیب در ساختارهای $L2_1$ و $C1_b$ به بلور تبدیل می‌شوند (شکل ۱-۱ را ببینید[۳]). عناصر معمولا با X ، Y و Z نشان داده می‌شوند که در جدول ۱-۱ نشان داده شده‌اند. سلول واحد شامل چهار زیر شبکه‌ی در هم آمیخته‌ی fcc است که مکان‌های آنها (0,0,0) و $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$برای اتم X، $(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4})$برای اتم Y و $(\frac{3}{4},\frac{3}{4},\frac{3}{4})$برای اتم Z است. مکان $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$در ترکیب‌های نیم هاسلر خالی است. ساختار $C1_b$ می‌تواند از ساختار $L2_1$ با جاگذاری نصف مکان‌های X به یک روش منظم به دست آید. در اغلب آلیاژهای هاسلر عنصر Mn به جای عنصر Y قرار می‌گیرد. ترکیب‌هایی که در آنها عنصر Mn در مکان‌های X قرار می‌گیرد، نادر هستند.

تاکنون فقط دو سیستم از این نوع به صورت آزمایشگاهی مطالعه شده‌اند، Mn_2VAl و Mn_2VGa[۴]. در ترکیب استوکیومتری، بی‌نظمی به شکل تغییر جزئی اتم‌ها در زیرشبکه‌های مختلف می‌تواند وجود داشته باشد.



شکل ۱-۱ (a) ساختارهای $C1_b$ و $L2_1$ آلیاژهای نیم و تمام هاسلر. شبکه شامل ۴ شبکه‌ی نفوذی fcc است. در آلیاژهای نیم‌هاسلر(XYZ) یکی از چهار زیرشبکه خالی است. در صورت یکسان بودن همه‌ی اتم‌ها شبکه bcc است.(b) سه آرایش ممکن برای اشغال زیرشبکه‌های Y و Z در ساختار بی‌نظم B_2

جانستون و هال[۳] پیشنهاد کردند فقط یک پارامتر بی‌نظمی α، اثرات انواع معین بی‌نظمی موثر در بزرگی ساختار آلیاژهای نوع X_2YZ را توضیح دهد. برای آلیاژهای نظم گرفته در ساختار $L2_1$، α به صورت کسری از اتم-های Y یا Z که در جای درست خود نیستند تعریف می‌شود. اشغال جزئی اتم‌های Y یا Z روی هر زیر شبکه‌ی دیگر منجر به بی‌نظمی نوع $L2_1$-B_2 می‌شود. ساختار نوع B_2 با تغییر مکان نیمی از اتم‌های Y و Z به دست می-آید. نسبت $L2_1/B2$ به رفتار گرما بستگی دارد. به دلیل فاصله‌های بین اتمی کوچک‌تر در ساختار نوع B_2، یک نظم آنتی‌فرومغناطیس شکل می‌گیرد.

[3] Johnston and Hall

۱-۳ ویژگی‌های مغناطیسی

آلیاژهای هاسلر ویژگی‌های مغناطیسی بسیار جالبی دارند. در خانواده‌ای از آلیاژهای یکسان پدیده‌های مغناطیسی متفاوتی مانند مغناطیس جایگزیده و سیار، آنتی‌فرومغناطیس، هلی مغناطیس[۴]، پارامغناطیس پائولی یا رفتار فرمیونی سنگین را می‌توان مطالعه کرد[۵].

۱-۳-۱ فرومغناطیس‌ها

بیشتر آلیاژهای هاسلر آرایش فرومغناطیسی می‌گیرند و در یک میدان اعمال شده‌ی مغناطیسی ضعیف اشباع می‌شوند. اگر گشتاور مغناطیسی توسط اتم‌های Mn ایجاد شده باشد، همان طور که اغلب در آلیاژهای X_2MnZ این‌گونه است، معمولا مقداری نزدیک به $4\mu_B$ برای آن مشاهده می‌شود[۵]. با وجود آن‌که این ترکیب‌ها فلزند، ویژگی‌های مغناطیسی جایگزیده دارند و دستگاه‌هایی ایده‌آل برای مطالعه‌ی اثرات بی‌نظمی اتمی و تغییرات غلظت الکترون بر روی ویژگی‌های مغناطیسی‌اند. برای تعیین قانون حاکم بر اتم‌های (X) ۳d و اتم‌های (Z) sp درمورد ویژگی‌های مغناطیسی آلیاژهای هاسلر اندازه‌گیری‌های زیادی بر روی آلیاژهای هاسلر چهارگانه انجام شد[۵] و دیده شد که غلظت الکترون sp در تایید ویژگی‌های مغناطیسی، شکل گشتاور مغناطیسی و نوع نظم مغناطیسی مهم است. در جدول ۱-۱ آلیاژهای هاسلر مغناطیسی که شامل فلزات واسطه‌ی ۳d (V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) هنگامی‌که به جای Y و عناصر ۳d، ۴d و ۵d هنگامی‌که به جای X قرار می‌گیرند نشان داده شده است.

---

[4] Helimagnetism

جدول ۱-۱ ترکیب، آرایش مغناطیسی و ساختار بلوری آلیاژهای هاسلر. اطلاعات آزمایشگاهی از مرجع [۵] گرفته شده‌اند.

Y	X	Z	Magnetic order	Crystal structure
V	Mn	Al, Ga	FM*	$L2_1$
	Fe	Al, Ga	FM	$L2_1$
	Fe	Si	PM	$L2_1$
	Co	Al, Ga, Sn	FM	$L2_1$
Cr	Co	Al, Ga	FM	$L2_1$
	Fe	Al, Ga	FM	$L2_1$
Mn	Cu	Al, In, Sn	FM	$L2_1$
	Cu	Sb	AFM	$C1_b$
	Ni	Al	AFM	B2
	Ni	Sb	FM	$C1_b$
	Ni	Al, Ga, In, Sn, Sb	FM	$L2_1$
	Co	Al, Si, Ga, Ge, Sn	FM	$L2_1$
	Co	Sb	FM*	$C1_b$
	Fe	Al, Si	FM	$L2_1$
	Pd	Al	AFM	B2
	Pd	In	AFM	$L2_1$-B2
	Pd	Ge, Sn, Sb	FM	$L2_1$
	Pd	Sb	FM	$C1_b$
	Pd	Te	AFM	$C1_b$
	Rh	Al, Ga, In	FM	B2
	Rh	Ge, Sn, Pb	FM	$L2_1$
	Rh	Sb	FM	$C1_b$
	Ru	Ga	FM	$C1_b$
	Au	Zn, Cu	AFM	B2
	Au	Al, Ga, In	AFM	$L2_1$
	Au	Sb	FM	$C1_b$
	Pt	Al, Ga	AFM	$L2_1$
	Pt	Ga	FM	$C1_b$
	Ir	Al	AFM	$L2_1$
	Ir	Ga	AFM	$C1_b$
Fe	Fe	Al, Si	FM	$D0_3$
	Co	Al, Si, Ga	FM	$L2_1$
Co	Fe	Ga	FM	$L2_1$
Ni	Fe	Al, Ga	PM	$L2_1$

FM*:Ferrimagnetic