

Gd-TGM SISTEMASI UCHUN ALMASHINUV O'ZARO TA'SIRNI YARIM EMPIRIK USULDA O'RGANISH

Xujayarov Farxod Uralovich

Mutaxassislik: Fizika (yo'nalishlar bo'yicha) (2-bosqich)

Ushbu maqolada, Gd-(Fe,Co,Ni) sistemalaridan Gd-Fe sistemasidagi barcha birikmalarda va Gd-Co sistemasidagi $GdCo_5$ va Gd_2Co_{17} birikmalarda f-s o'zaro ta'sir, ya'ni RKKI tipdagi o'zaro ta'sir, Gd-Co sistemasidagi $GdCo_5$ va Gd_2Co_{17} lardan boshqa birikmalarda va Gd-Ni sistemasidagi barcha birikmalarda d-s o'zaro ta'sir boshqa o'zaro ta'sirlardan eng katta hisoblanib, bu o'zaro ta'sirlar shu birikmalarning magnit tartibli holatining hosil bo'lishida hal qiluvchi rolihaqaida fakir va muloxazalar keltirilgan.

Gd-TGM (TGM=Fe,Ni,Co) sistemasidagi Gd va uning temir guruhi metallari (TGM)-Fe,Ni va Co bilan birikmalarida amal qilishi mumkin bo'lgan bilvosita almashinuv o'zaro ta'sir turlari yarim empirik usul bilan birinchi marta o'rganilgan. Gd-Fe sistemasidagi barcha birikmalarda, Gd-Co sistemasidagi $GdCo_5$ va Gd_2Co_{17} birikmalarda f-s o'zaro ta'sir, $GdCo_5$ va Gd_2Co_{17} lardan boshqa birikmalarda va Gd-Ni sistemasidagi barcha birikmalarda esa d-s o'zaro ta'sir boshqa o'zaro ta'sirlardan eng katta ekanligi va bu o'zaro ta'sirlar shu birikmalar magnit tartibli holatining hosil bo'lishida hal qiluvchi rol o'ynashi aniqlangan.

KEM (yoki lantanoidlar) kristall panjarasi tugunlarida, 4f – kechikib to'ladigan elektron qobiqqa ega bo'lgan, KEM^{3+} ionlari joylashadilar. 4f qobiq elektronlari tashqi $5s^25p^6$ qobiqlardagi elektronlar bilan tashqi ta'sirlardan himoyalangan bo'ladi. Shu sababga ko'ra ularning tugunlararo bevosita o'zaro ta'siri (f – f o'zaro ta'sir deb ham ataladigan o'zaro ta'sir) amalga oshmaydi. Ularning magnit tartiblangan holatini 4f – qobiq elektronlarning o'tkazuvchan - $5d^1$ va $6s^2$ -elektronlar (ya'ni tugunlar orasida umumlashgan elektronlar) orqali o'zaro ta'siri hosil qilar ekan. Bunday o'zaro ta'sir f-s-f, qisqacha s-f o'zaro ta'sir yoki **bilvosita almashinuv o'zarota'sir** deyiladi. Bunday o'zaro ta'sir nazariyasi KEM uchun birinchi marta Ruderman, Kittel, Kasuya va Iosidalar tomonidan ishlab chiqilgani[1,2] uchun **RKKI o'zaro ta'siri**, bunga oid nazariya **RKKI nazariyasi** deb yuritiladi.

TGMning kristall panjara tugunlarida joylashgan TGM ionlaridagi 3d qobiq elektronlari „yalang'och" qoladi. Shu tufayli bu qobiq elektronlarining bevosita magnit o'zaro ta'siri yuz berishiga halaqit beradigan, ya'ni ularni ekranlovchi elektron qobiqlar (KEMdagi $5s^25p^6$ larga o'xshash) yo'q. Demak, TGMda bevosita almashinuv o'zaro ta'sir amalga oshadi. Bunga d-d o'zaro ta'sir ham deyiladi. TGMda magnit tartiblangan holatni mana shu bevosita almashinuv o'zaro ta'sir hosil qiladi.

KEM va TGM orasida hosil bo'ladigan birikmalar magnit tartiblangan holatining hosil bo'lishiga sabab bo'ladigan almashinuv o'zaro ta'sirining tabiati haligacha to'la aniqlanmagan. Ushbu maqola mana shu **dolzarb mavzuga**

bag'ishlangan va undan **maqsad**-Gd-TGM(TGM =Fe,Ni,Co) sistemasida amal qiladigan bilvosita o'zaro ta'sirning tabiatini o'rganishdir

KEM-TGM sistemasidagi birikmalarda quyidagi turdagi o'zaro ta'sirlar amal qilishi mumkin: KEM panjarasi tugunlarida o'troqlashgan 4f-qobiq elektronlarning erkin elektronlar orqali o'zaro (bilvosita f-s) ta'siri, KEM va TGM panjaralari tugunlaridagi o'troqlashgan 4f va 3d qobiqlardagi elektronlarning erkin elektronlar orqali o'zaro (bilvosita f-d) ta'siri va TGM panjarasi tugunlarida o'troqlashgan 3d-qobiq elektronlarining erkin elektronlar orqali (bilvosita d-s) o'zaro ta'siri.

Ma'lumki, $T=\theta_p$ temperaturada birikmaning magnit tartibli holati buzilib magnit tartibsiz holat-paramagnit holatga o'tadi. Demak, KEM-(Fe, Co, Ni) sistemalaridagi bilvosita f-s, f-d va d-s almashinuv o'zaro ta'sirlarining energetik o'lchovi vazifasini shu birikmalarning paramagnit Kyuri temperaturasi- θ_p bajaradi.

Bu na'munalar uchun θ_p ning tajribaviy qiymatlari "Umumiy fizika va magnetizm"

kafedrasining ilmiy laboratoriyasida ularning paramagnet qabul qiluvchanligining temperaturaga bog'lanishini o'lchash orqali bugungi kungacha aniqlangan[3,4]. Na'munalar uchun θ_p ning tajribaviy qiymatlaridan foydalanib shu na'munalarda

amal qiladigan bilvosita almashinuv o'zaro ta'sirning barcha turlarini o'rganish mumkin. Bunday o'rganish usuliga yarim empirik usul deyiladi.

KEM uchun θ_p ning tajribaviy qiymatini tushuntirish uchun quyidagi ifoda olingan[1]:

$$\theta_p = \frac{3\pi^2}{k_B \Omega^2 E_F} A_{sf}^2(0) (g_I - 1)^2 I(I+1) \sum_{n \neq m} F(2\vec{k}_F (\vec{R}_n - \vec{R}_m)), \quad (1)$$

bu yerda n – umumlashgan elektronlar konsentratsiyasi; $A_{sf}(0)$ - bilvosita s-f o'zaro ta'sir doimiysi(integrali); E_F -Fermi sathi energiyasi; k_F – Fermi sirtining to'lqin vektori; $(\vec{R}_n - \vec{R}_m)$ – n - va m -tugunlar orasidagi masofa;

$$F(y) = F(2\vec{k}_F (\vec{R}_n - \vec{R}_m)) = (y \cos y - \sin y) / y^4 \quad (2)$$

– Ruderman – Kittel funksiyasi.(1) ifodadagi

$$G = (g_J - 1)^2 J(J+1) \quad (3)$$

kabi aniqlanuvchi G – kattalikka de Jen faktori deyiladi. Bu ifodadagi g_J -Lande faktori deyilib quyidagicha aniqlanadi:

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}, \quad (4)$$

bundagi L , S va J 4f -qobiqdagi elektronlarning to'la orbital, to'la spin va to'la mexanik moment kvant sonlari.

KEM dagi almashinuv o'zaro ta'sirni tavsiflovchi parametr(integral) ni hisoblash uchun RKKI nazariyasi doirasida quyidagi ifoda olingan[1,2]:

$$A = \frac{9\pi^2}{k_B \Omega^2 E_F} A_{sf}^2(0) \sum_{n \neq m} F(2\vec{k}_F (\vec{R}_n - \vec{R}_m)). \quad (5)$$

Buni hisobga olgan holda (1)dan quyidagi ifodani olamiz:

$$\theta_p = \frac{1}{3k_B} AG. \quad (6)$$

Toza gadolinyda amal qiladigan bilvosita f-s o'zaro ta'sir uchun va toza Fe, Co, Ni –larda amal qiladigan bilvosita d-s o'zaro ta'sirlarning parametrini $\frac{A}{k_B}$ hisoblash uchun mos ravishda, (6) dan quyidagi ifodalarni olamiz:

$$\frac{A}{k_B} = \frac{(3\theta_p)}{G_{Gd}} \quad (7)$$

$$\frac{A}{k_B} = \frac{3\theta_p}{G_{TGM}} \quad (8)$$

Gd da 4f-qobiq yarmiga to'lgani uchun Hund qoidasi bo'yicha va TGM da 3d-qobiqning orbital mexanik (va demak orbital magnit) momentning "muzlab qolish" effekti tufayli $L=0$, $J=S$ bo'lishini e'tiborga olsak, (7) va (8) ifodalardagi de Jen faktorlari (3) ifoda bo'yicha quyidagi ifodalar yordamida aniqlanadi:

$$G_{Gd} = (g_s - 1)^2 S(S+1), G_{TGM} = (g_s - 1)^2 S(S+1) \quad (9)$$

Quyidagi mulohazalarga tayanib, o'rganilgan intermetallik birikmalarda amal qiladigan bilvosita f-s, f-d va d-s o'zaro ta'sir parametrini ham (8) ifoda yordamida hisoblash mumkin: 1) Teylor[2] bo'yicha f-d o'zaro ta'sir ham erkin elektronlar orqali amalga oshadi. Bu KEM va TGM ionlaridagi 4f va 3d qobiqlarning magnit momentlari erkin elektronlarni qutblash orqali amalga oshadi. (1) va (5) ifodalardagi $A_{sf}^2(0)$ had o'rniga $A_{sf}(0) \cdot A_{sd}(0)$ ko'paytma olinadi; 2) Birikma uchun de Jen faktorini additivlik qoidasiga asosan hisoblash mumkin:

$$G = (1 - \chi)G_{Gd} + \chi G_{TGM} \quad (10)$$

bundagi χ -TGM ning atom ulushlaridagi konsentratsiyasi.

(9) va (10) ifodalarni hisobga olganda, (6) dan o'rganilgan birikmalarda amal qiluvchi f-s, f-d va d-s bilvosita o'zaro ta'sir parametrini yarim empirik usul bilan hisoblash uchun, mos ravishda, quyidagi ifodalarni olish mumkin:

$$\frac{A}{k_B} = \frac{3\theta_p}{(1 - \chi)G_{Gd}} \quad (11)$$

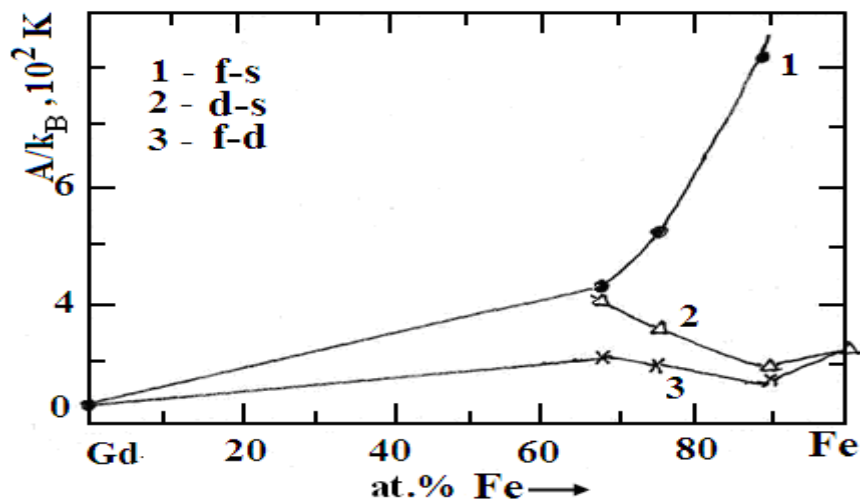
$$\frac{A}{k_B} = \frac{3\theta_p}{(1 - \chi)G_{Gd} + \chi G_{TGM}} \quad (12)$$

$$\frac{A}{k_B} = \frac{3\theta_p}{\chi G_{TGM}} \quad (13)$$

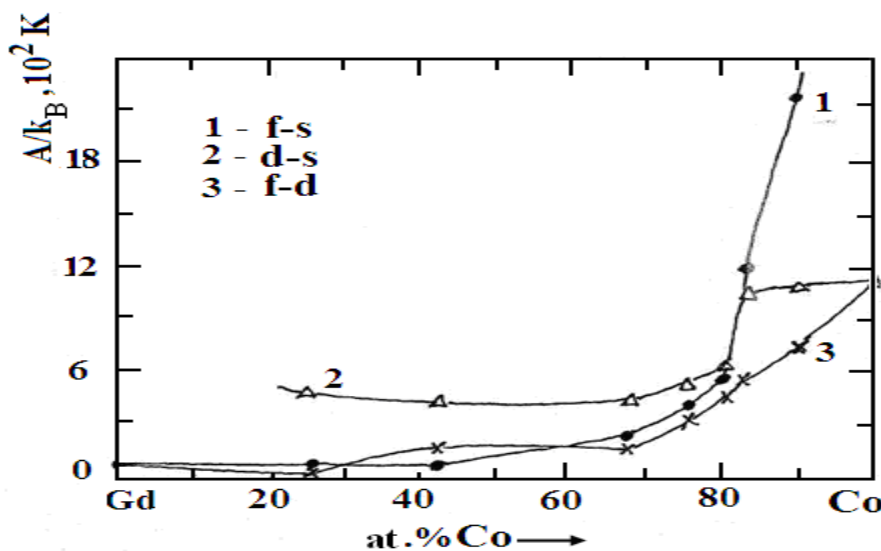
Shunday qilib, (7) va (8) ifodalar toza Gd va toza TGMda amal qiladigan bilvosita almashinuv o'zaro ta'sir parametrini $\frac{A}{k_B}$, (11), (12) va (13) ifodalar esa Gd

va TGM orasidagi birikmalarda amal qiladigan bilvosita almashinuv o'zaro ta'sir parametrini $\frac{A}{k_B}$ yarim empirik usulda hisoblash imkoniyatini beradi.

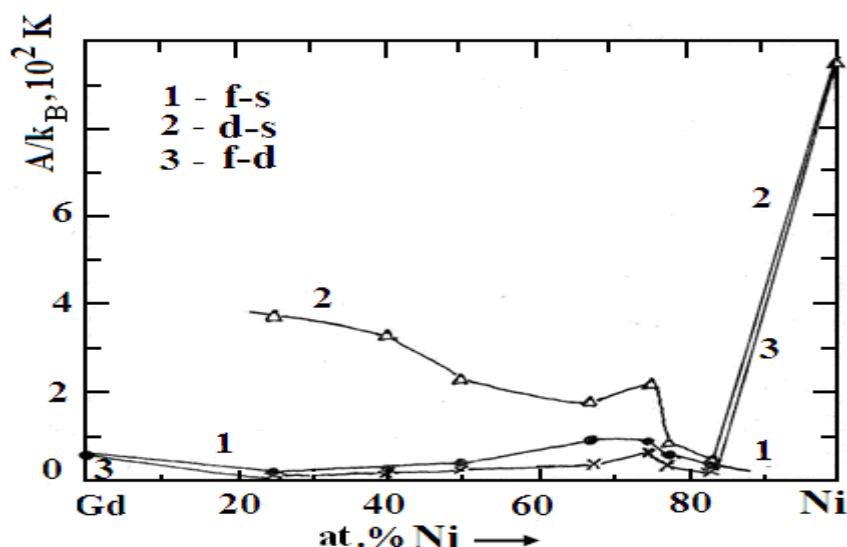
De Jen faktorlarini (9) ifodalar bo'yicha hisoblashda $Gd^{3+}, Fe^{3+}, Co^{2+}$ va Ni^{2+} ionlari asosiy energetik holati uchun S ning (Gd^{3+} uchun $7/2$, Fe^{3+}, Co^{2+} va Ni^{2+} uchun mos ravishda $7/2, 3/2$ va 1) va g_s ning ($g_s=2$) qiymatlaridan foydalanildi. Hisoblash natijalari ko'rgazmali ravishda 1-3-rasmlarda keltirilgan.



1-rasm. Gd-Fe-sistemasida $\frac{A}{k_B}$ ning Fe konsentratsiyasiga bog'lanishlari.



2-rasm. Gd-Co-sistemasida $\frac{A}{k_B}$ ning Co konsentratsiyasiga bog'lanishlari.



3-rasm. Gd-Ni sistemasida $\frac{A}{k_B}$ ning Ni konsentratsiyasiga bog'lanishlari.

1-3 rasmlardan ko'rinib turibdiki, o'rganilgan uchta sistemada amal qiluvchi o'zaro ta'sirlardan eng kichigi f-d o'zaro ta'siridir.

Gd-Fe sistemasida (1-rasm) f-s o'zaro ta'sir eng kuchli bo'lib, u Fe konsentratsiyasining oshishi bilan oshadi. d-s o'zaro ta'sir, kattaligi bo'yicha, f-s va f-d o'zaro ta'sirlar oralig'ida yotadi.

Gd-Co sistemasida (2-rasm), Co ning magnit momenti Gd nikidan kichik bo'lishiga qaramasdan, Co ning konsentratsiyasi 80 at.% dan kichik bo'lgan birikmalarda, d-s o'zaro ta'sir f-s o'zaro ta'sirdan kuchliroq bo'ladi. Bu birikmalarda f-d va f-s o'zaro ta'sirlar qariyb teng kuchli bo'lib, Co konsentratsiyasi deyarlik bog'liq emas. GdCo₅ va Gd₂Co₁₇ birikmalarda f-s o'zaro ta'sir, ularning magnit tartibli holatining hosil bo'lishida hal qiluvchi rol o'ynaydi. Bu birikmalarda d-s o'zaro ta'sir f-d va f-s o'zaro ta'sirlar oralig'ida joylashadi.

Gd-Ni sistemasida (3-rasm) d-s o'zaro ta'sir eng kuchli hisoblanib, u Ni konsentratsiyasi oshishi bilan susayadi. f-s o'zaro ta'sir f-d va d-s o'zaro ta'sirlar oralig'ida joylashadi.

Xulosa: Shunday qilib, Gd-(Fe,Co,Ni) sistemalaridan Gd-Fe sistemasidagi barcha birikmalarda va Gd-Co sistemasidagi GdCo₅ va Gd₂Co₁₇ birikmalarda f-s o'zaro ta'sir, ya'ni RKKI tipdagi o'zaro ta'sir, Gd-Co sistemasidagi GdCo₅ va Gd₂Co₁₇lardan boshqa birikmalarda va Gd-Ni sistemasidagi barcha birikmalarda d-s o'zaro ta'sir boshqa o'zaro ta'sirlardan eng katta hisoblanib, bu o'zaro ta'sirlar shu birikmalarning magnit tartibli holatining hosil bo'lishida hal qiluvchi rol o'ynaydi deb aytish mumkin.

Adabiyotlar:

1. Вонсовский С.В. «Магнетизм». – М.: Наука, 1971 – 1032с,
2. Тейлор К. Интерметаллических соединений редкоземельных металлов. – М.: Мир, 1974 – 374с.

3. Kuvandikov O.K., Shakarov H.O., Salakhitdinova M.K. Magnetic properties of intermetallics of REM-TM systems of high temperatures//Uzbek journal of physics. – 2001.– v.3.– №1-2.– pp.67-74.
4. Kuvandikov O.K., Shakarov H.O., Saifullaeva D., Salakhitdinova M.K. Investigations of magnetic properties of compounds of rare-earth metals with metals of the iron group in the range of the solid-liquid phase transition//The physics of metals and metalography. 2002.– V.93.– supp.1.– pp.548-553.

Ilmiy rahbar: F.-m.n. dots. Shakarov X.O

Magistrantlarning XV ilmiy konferensiyasi materiallari-2015