Calculation of Saturation Magnetization and Crystal Lattice Stress for $Dy_3Fe_5O_{12}$

Dr. Badr Al-aaraj*
Dr. Ibrhim Ali**
Manar Mayya***

(Received 22 / 10 / 2022. Accepted 21 / 11 /2022)

□ ABSTRACT □

In this article, we have studied some magnetic properties of garnet ferrite $Dy_3Fe_5O_{12}$. Where we calculated the total magnetic moment of the sample under study. We performed calculations on saturation magnetization. Moreover, we applied a gravimetric stress to the sample and then determined the greatest and lowest stress experienced by crystalline levels depending on the diazotization of the tensor stress elements. We reached a maximum stress of 24.0000N/cm^2 when a weight of 4kg is applied to the sample face, and the lowest stress is 6.3431N/cm^2.

Keywords: Garnet ferrite-Saturation magnetization-Crystal lattice stress.

*Professor - department of physics-faculty of science-Tishreen University-Lattakia-Syria.
**Associate professor - department of physics-faculty of science-Tishreen University-Lattakia-Syria.
***Master's student - the department of physics-faculty of science-Tishreen University-Lattakia-Syria.

حسابات في المغنطة الإشباعية وإجهادات الشبكة لفرايت الديسبروسيوم العقيقي

د. بدر الأعرج*

د. إبراهيم علي**

منار رياض ميا***

(تاريخ الإيداع 22 / 10 / 2022. قُبِل للنشر في 21 / 11 /2022)

□ ملخّص □

يهدف هذا البحث إلى دراسة بعض الخواص المغناطيسية لمركب الفرايت العقيقي$Dy_3Fe_5O_{12}$ حيث حسبنا العزم المغناطيسي الكلي للعينة تحت الدراسة، وأجرينا حسابات في المغنطة الإشباعية.

علاوة على ذلك، طبقنا على العينة إجهاد وزني ثم حددنا أعظم وأخفض إجهاد تعانيه المستويات البلورية اعتماداً على تقطير تنسور عناصر الإجهاد، وتوصلنا إلى إجهاد أعظمي قيمته $24.00N/cm^2$ عند تطبيق وزن قدره 4kg على أحد سطوح العينة وإن أخفض إجهاد قيمته $6.3431N/cm^2$.

الكلمات المفتاحية: فرايت عقيقي–مغنطة الإشباع– إجهاد الشبكة.

* أستاذ – قسم الفيزياء –كلية العلوم–جامعة تشرين–اللاذقية–سورية.badr.alaaraj59@gmail.com

**أستاذ مساعد – قسم الفيزياء –كلية العلوم–جامعة تشرين–اللاذقية–سورية.

***طالبة دراسات عليا(ماجستير) في قسم الفيزياء –كلية العلوم–جامعة تشرين–اللاذقية–سورية.manar.mayya@tishreen.edu.sy

مقدمة:

بينت الدراسات[4] أن الفرايت العقيقي يتبلور ببنية بلورية مكعبة ويأخذ الصيغة الكيميائية $Dy_3Fe_5O_{12}$، وتحتوي وحدة الخلية الابتدائية على ثماني صيغ من الصيغة الكيميائية للفرايت العقيقي، أي تحتوي على 24 ايوناً من Dy^{3+} و40أيوناً من Fe^{3+} و96 أيوناً من O^{2-}، وبالتالي يكون مجموع الأيونات في وحدة الصيغة 160 أيوناً.

إن التفاعل المتبادل بين أيونات Fe^{3+} وDy^{3+} يساعد على توضيح الاتجاهات المغناطيسية وقيمة المغنطة ودرجة حرارة كوري.

تتوزع أيونات الفرايت العقيقي على مواقع اثنا عشرية dodecahedral ورمزهاc،

ومواقع ثمانية الوجوه octahedral ورمزها a، ومواقع رباعية الوجوه tetrahedral ورمزها d كما في الصيغة التالية:

$\{\downarrow Dy_3^{3+}\}_{dodeca}$ $[\downarrow Fe_2^{3+}]_{octa}$ $(\uparrow Fe_3^{3+})_{tetra}$

c a d

أكد Neel بأنه يمكن ضم الموقعين aوd بشبكة واحدة ورمزها ad وعزمها المغناطيسي يشكل مع العزم المغناطيسي للشبكة c العزم الكلي لصيغة الفرايت المدروس.

$\mu=\mu_c-(\mu_d-\mu_a)$

أهمية وأهداف البحث:

تكمن أهمية البحث في النقاط التالية:

1-حساب العزم المغناطيسي لكل أيون من أيونات المركب المدروس

$Dy_3Fe_5O_{12}$ ،ثم حساب العزم المغناطيسي الكلي.

2-إيجاد التمغنط على مستوى وحدة الخلية.

3-دراسة الإجهاد الميكانيكي (إجهاد السحب والكبس أو الانضغاط وإجهاد القص).

4-تحديد التغير الحجمي النسبي لبلورة العينة.

طرائق البحث ومواده:

تم تحضير العينة $Dy_3Fe_5O_{12}$ على هيئة مكعب أبعاده 1x1cm بخلط مسحوق الأكسيدين Dy_2O_3, Fe_2O_3 ذات النقاوة 99% وفق التفاعل الآتي:

$$(3/2)Dy_2O_3+ {}^5\!/_2 Fe_2O_3 \rightarrow Dy_3Fe_5O_{12}$$

لتحضير عينة وزنها 7 غرامات نضرب هذا الوزن بالكسر الوزني لكل أوكسيد لتحديد الوزن اللازم من كل أوكسيد على حدة كما في الجدول(1):

بعد أن نأخذ الأوزان المطلوبة نقوم بطحنها في بوتقة عقيقية للحصول

على مسحوق ناعم للغاية .وتلبيد الخليطة عند درجة

حرارة 1423K لمدة ست ساعات في بوتقة سيلكا باستخدام فرن

كهربائي، ويتم تبريده ببطء إلى درجة حرارة الغرفة .ثم نكرر عملية الطحن للحصول على مسحوق ناعم.

تم ضغط المسحوق الناعم عند درجة حرارة الغرفة على هيئة قطعة النرد $78.4N/cm^2$ في قالب من الفولاذ المقاوم للصدأ.

بعد ذلك تم تلبيد العينة عند 1150 ºC درجة مئوية لمدة ست ساعات
في الهواء وتبريدها ببطء إلى درجة حرارة الغرفة.

الجدول (1): الكسر الوزني لكل أوكسيد:

Oxides	Fe_2O_3	Dy_2O_3
Molar weight(gr)	**159.7**	373.0
Weight of each oxide	$W_1=\frac{5}{2}*159.7=399.25$	$W_2=\frac{3}{2}*373=559.50$
Total weight	$W_{tot}=W_1+W_2=399.25+559.50=958.75$	
Weight Fraction	$W_1/W_{tot}=0.416$	$W_2/W_{tot}=0.583$

النتائج والمناقشة:

حساب العزم المغناطيسي للعينة:

تكتب الصيغة الشاردية للفرايت العقيقي المحضر كما يلي:

$$\{Dy_3^{3+}\uparrow\}_{dodeca}\ [Fe_2^{3+}\downarrow]_{oct}\ (Fe_3^{3+}\uparrow)_{tet}\ O_{12}^{2-}$$

a c d

يحسب عامل لاندي g_{Jls} لكل سوية أساسية للأيونات، وعدد مغناطون بور الفعال P_{eff} كما يلي:

بمساعدة جدول الملحق نحصل على الأعداد الكوانتية J,L,S لأيونات Fe^{3+}،

Dy^{3+} حسب توزعها الإلكتروني في مدارات d و f الذرية ثم ندونها في الجدولين (2)و(3):

من أجل أيون Dy^{3+} :

$$g=\frac{3}{2}+\frac{1}{2}\left[\frac{S(S+1)_L(L+1)}{J(J+1)}\right] \quad (1)$$

$$P_{eff}=g_{(JLS)}\sqrt{J(J+1)} \quad (2)$$

$$g=\frac{3}{2}+\frac{1}{2}\left[\frac{5/2(5/2+1)_5(5+1)}{15/2(15/2+1)}\right]=4/3$$

حساب عامل لاندي من أجل أيون الحديد Fe^{3+}:

$$g=\frac{3}{2}+\frac{1}{2}\left[\frac{S(S+1)_L(L+1)}{J(J+1)}\right]$$

$$g_{Fe^{3+}}=\frac{3}{2}+\frac{1}{2}\left[\frac{5/2(5/2+1)_0(0+1)}{5/2(5/2+1)}\right]=2$$

الجدول (2): يتضمن قيم L مع الرموز الموافقة لها:

L	0	1	2	3	4	5	6
Symbol	S	P	D	F	G	H	I

بعد ذلك ننظم النتائج في الجدول(3).

الجدول(3): التوزيع الالكتروني للأيونات وأعدادها الكوانتية

Ions	Dy^{3+}	Fe^{2+}	Fe^{3+}
Ion electron configuration	$4f^9$	$3d^6$	$3d^5$
S	5/2	2	5/2
L	5	2	0
J	15/2	4	5/2
g_{JLS}	4/3	3/2	2

استناداً إلى معطيات الجدولين (2), (3) نحسب الأعداد الكوانتية للأيونات الداخلة في تركيب العينة المدروسة.

نعلم أن الطبقات المليئة لا تملك عزوم مغناطيسية [5].

نحسب عدد مغناطون بور الفعال كما يلي:

من أجل أيون Dy^{3+}:

$$P_{eff}=g(JLS)\sqrt{J(J+1)}$$

$$P_{eff}=4/3\sqrt{15/2(15/2+1)}$$

$$P_{eff}=10$$

من أجل أيون الحديد Fe^{3+}:

نحسب عدد مغناطون بور الفعال:

$$P_{eff}=2\sqrt{5/2(5/2+1)}$$

$$P_{eff}=\sqrt{35}$$

وبالتالي يكون العزم المغناطيسي للأيون بدلالة عزم مغناطون بور μ_B

$$\mu_{Ion}=p_{eff}\mu_B$$

نجمع العزوم المتوازية مع بعضها ونطرح المتعاكسة في صيغة الفرايت:

$$\mu_{sample}=3\mu_{dodeca}-(3\mu_{tet}-2\mu_{oct})$$

$$\mu_{sample}=3\mu_{dodeca}-1\mu_{Fe^{3+}}$$

$$\mu_{sample}=3*10\mu_B-1*\sqrt{35}\ \mu_B$$

$$\mu_{sample}=(30-5.91)\mu_B=24.09\mu_B\ ,A.m^2$$

وبالتالي العزم الكلي $\mu_{tot}=\mu_{sample}$ *8لوحدة الخلية

ومنه

$$\mu_{tot}=8x24.09\mu_B=192.72\mu_B\ ,A.m^2$$

ثم نحسب المغنطة Mوهي محصلة العزوم في وحدة حجم الخلية:

$$M=\frac{\mu_{tot}}{a^3}$$

نحسب a بارامتر الشبكة من العلاقة:

$$a=d\sqrt{h^2+k^2+l^2}$$

حيث وجدنا من نمط XRD للبلورة المدروسة أن قرائن ميلر المقابلة للشدة العظمى هي(420)=hkl وتم حساب d (البعد بين المستويات البلورية) من قانون براغ:

$$2d\sin\Theta=\lambda$$

$$d=2.81\ \text{Å}$$

$$a=2.81\times\sqrt{(4)^2+(2)^2+(0)^2}$$

$$a=12.56\text{Å}$$

نحول a إلى المتر من أجل تجانس الواحدات مع واحدة مغناطون بور حيث$\mu_B=9.27*10^{-24}\ A.m^2$

نعوض في علاقة المغنطة:

$$M=\frac{\mu}{a^3}=\frac{192.72\times9.27\times10^{-24}}{1981.385\times10^{-30}}$$

$$M=0.9\times10^6 A/m$$

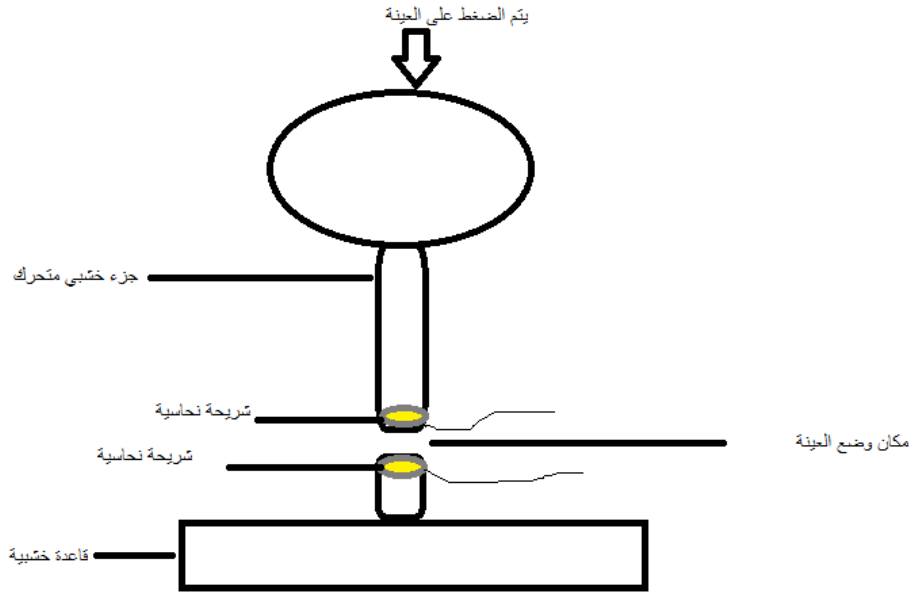
تنسور إجهاد البلورة:

يعرف الإجهاد Stress [6,7] بأنه القوة المؤثرة على السطح ويقسم إلى نوعين:

- ❖ إجهاد ناظمي وفيه تكون القوة المطبقة عمودية على أحد المستويات الأساسية للبلورة بحيث تؤثر (سحب أو كبس).
- ❖ إجهاد قص وفيه تكون القوة مطبقة بشكل مائل على المستويات الأساسية.

تم تصنيع أداة لتطبيق الإجهاد على العينة

حيث توضع العينة في مكانها المخصص ثم يوضع على المكبس المخصص أوزان بحدود 4كيلو غرام وذلك لتطبيق الإجهاد على العينة وفق المحاور الأساسية ويمكننا وضع مخطط لشكل هذا الجهاز كالتالي:



الشكل (1): مخطط يوضح آلية الإجهاد وموصول مع حساس لقياس الإجهاد

وصف جهاز تحديد الإجهاد البلوري:

يتكون جهاز تحديد إجهاد الشبكة من قاعدة خشبية مركب عليها قطب ثابت مغطى بشريحة من النحاس، وقطب متحرك مغطى أيضاً بشريحة نحاسية، وكلا القطبين موصولين إلى حساس تحديد الإجهاد Stress-Sensor.

تطلى وجوه العينة المكعبية ذات الأبعاد $1x1x1cm^3$ بطبقة رقيقة من الفضة ثم توضع في مكانها المناسب، ويطبق أوزان حتى أربعة كيلو غرام على القطب المتحرك، ونسجل قيمة مؤشر الحساس، وندون النتائج في هيئة تنسور.

وهنا سنميز بين إجهاد السحب باتجاه المحاور الأساسية وإجهاد القص، ثم إجهاد الكبس.

ونصطلح أن إشارة إجهاد الكبس سالبة وإجهاد السحب أو الشد موجبة.

تنسور الإجهاد يكتب بالصيغة العامة التالية:

$$\overleftrightarrow{\sigma}=[\sigma_{ij}]=\begin{bmatrix}\sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz}\\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz}\\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz}\end{bmatrix}$$

من خلال التجربة نسجل قيم الإجهاد وفق التنسور التالي:

$$\overleftrightarrow{\sigma}=[\sigma_{ij}]=\begin{bmatrix}8 & -4 & 0\\ -4 & 16 & 0\\ 0 & 0 & 24\end{bmatrix}$$

وبالتالي للحصول على أقصى وأدنى إجهاد عمودي نعين الإجهادات وفق المحاور الرئيسية وذلك بوساطة تقطير تنسور الإجهاد diagonalizableوالحصول على تنسور المحاور الرئيسية الذي يتمثل بـ b_{11},b_{22},b_{33} أو $(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3)$:

لسهولة كتابة الكود اللازم لحل المحدد نفرض أن $\overleftrightarrow{\sigma}$ Ξ A Ξλb:

$$\det(\overleftrightarrow{\sigma}-\lambda\overleftrightarrow{I})=0$$

$$\overleftrightarrow{I}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}$$

حيث $\overleftrightarrow{I}$ هو للتنسور المحايد

إن الكود الذي يعطي التنسور المحايد ;[I]=eye(3)

تعطي جذورΞ أقصى و أدنى إجهاد عمودي، ويكتب الكود وفق برنامج:

```
clear
syms b % bΞλ
A=[8 −4 0;−4 16 0;0 0 24];% tensor of stress components
I=eye(3);% unit tensor
D=det(A−b*I);%determent
C=double (solve(D));%gives b11,b22,b33
Orientation crystal planes code
```

%the first case

syms x_1 x_2 x_3

b_{22}=6.3431; % b _ min=b_{22}

r_1=[x_1;x_2;x_3];%vector in direction of one main crystal axes

A=[8−b_{22} −4 0;−4 16−b_{22} 0;0 0 24−b_{22}];

F=(A*r_1)

% Equations of first case

$1.6569x_1-4x_2=0$

$-4x_1+9.6569x_2=0$

$17.6569x_3=0$

%solution these equations gives

r_1=[1 0.4142 0];

mag_{-r1}=sqrt(dot(r_1,r_1));

u_1−vector=r_1/mag_{-r1};%u_1−vector=(0.9239,0.3827,0)

%the second case

syms x_1 x_2 x_3

b_{33}=17.6569;% b _med=b_{33}

r_2=[x_1;x_2;x_3];

A=[8−b_{33} −4 0;−4 16−b_{33} 0;0 0 24−b_{33}];

F=(A*r_2)

%solution these equations gives r_2(1,−2.4142,0)

r_2=[1 −2.4142 0];

mag_{-r2}=sqrt(dot(r_2,r_2));

u_2−vector=r_2/mag_{-r2};%u_2−vector=(0.3827,−0.9239,0)

%Equations of second case

$-9.6569x_1-4x_2=0$

$-4x_1-1.6569x_2=0$

$6.3431x_3=0$

%the third case

syms x_1 x_2 x_3

b_{11}=24.0000;%b _ max=b_{11};

r_3=[x_1; x_2; x_3];

A=[8−b_{11} −4 0;−4 16−b_{11} 0;0 0 24−b_{11}];

F=(A*r_3)

%solution these equations gives r_3(0,0,1)

r_3=[0 0 1];

mag_{-r3}=sqrt(dot(r_3,r_3));

u_3−vector=r_3/mag_{-r3};%u_3−vector=(0,0,1)

%Equations of third case

$-16x_1-4x_2=0$

$-4x_1-8x_2=0$

$0x_3=0$

نستنتج من القيم التي حصلنا عليها أن أعظم إجهاد عمودي يعانيه المستوي ذو العمود أو الاتجاه [001]،وأدنى إجهاد عمودي يعانيه المستوي (0.9239,0.3827,0)

ملحق

السويات الأساسية للأيونات ذات الطبقات f,d الممتلئة جزئياً حسب قواعد Hund

d-shell ($l = 2$)									
n	$l_z = 2,$	$1,$	$0,$	$-1,$	-2	S	$L = \lvert\Sigma l_z\rvert$	J	SYMBOL
1	↓					1/2	2	3/2	$^2D_{3/2}$
2	↓	↓				1	3	2	$^3F_2$
3	↓	↓	↓			3/2	3	3/2	$^4F_{3/2}$
4	↓	↓	↓	↓		2	2	0	$^5D_0$
5	↓	↓	↓	↓	↓	5/2	0	5/2	$^6S_{5/2}$
6	↕	↑	↑	↑	↑	2	2	4	$^5D_4$
7	↕	↕	↑	↑	↑	3/2	3	9/2	$^4F_{9/2}$
8	↕	↕	↕	↑	↑	1	3	4	$^3F_4$
9	↕	↕	↕	↕	↑	1/2	2	5/2	$^2D_{5/2}$
10	↕	↕	↕	↕	↕	0	0	0	$^1S_0$

$J = |L - S|$ — 3/2, 2, 3/2, 0

$J = L + S$ — 4, 9/2, 4, 5/2

f-shell ($l = 3$)										
n	$l_z = 3,$	$2,$	$1,$	$0,$	$-1,$	$-2,$	-3	S	$L = \lvert\Sigma l_z\rvert$	J	
1	↓							1/2	3	5/2	$^2F_{5/2}$
2	↓	↓						1	5	4	$^3H_4$
3	↓	↓	↓					3/2	6	9/2	$^4I_{9/2}$
4	↓	↓	↓	↓				2	6	4	$^5I_4$
5	↓	↓	↓	↓	↓			5/2	5	5/2	$^6H_{5/2}$
6	↓	↓	↓	↓	↓	↓		3	3	0	$^7F_0$
7	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓	7/2	0	7/2	$^8S_{7/2}$
8	↕	↑	↑	↑	↑	↑	↑	3	3	6	$^7F_6$
9	↕	↕	↑	↑	↑	↑	↑	5/2	5	15/2	$^6H_{15/2}$
10	↕	↕	↕	↑	↑	↑	↑	2	6	8	$^5I_8$
11	↕	↕	↕	↕	↑	↑	↑	3/2	6	15/2	$^4I_{15/2}$
12	↕	↕	↕	↕	↕	↑	↑	1	5	6	$^3H_6$
13	↕	↕	↕	↕	↕	↕	↑	1/2	3	7/2	$^2F_{7/2}$
14	↕	↕	↕	↕	↕	↕	↕	0	0	0	$^1S_0$

$J = |L - S|$ — 5/2, 4, 9/2, 4, 5/2, 0

$J = L + S$ — 7/2, 6, 15/2, 8, 15/2, 6, 7/2, 0

[a] ↑ = spin $\frac{1}{2}$; ↓ = spin $-\frac{1}{2}$.

الاستنتاجات والتوصيات:

نستنتج من هذا البحث النقاط التالية:

- استناداً إلى التفاعلات المتبادلة بين العزوم المغناطيسية للأيونات في مواقعها في شبكة الفرايت العقيقي فإن حسابات التمغنط أعطت القيمة M=900kA/m.
- إن أعظم إجهاد تعانيه البلورة يبلغ $b_{11}=24.0000N/cm^2$،وأدنى إجهاد قيمته $b_{22}=6.3431N/cm^2$.
- ثم كتابة كود بلغة Matlab للحصول على قيم الإجهادات بطريقة تقطير تنسور مركبات الإجهاد، أي تحويل التنسور إلى تنسور قطري مركباتهb_{11},b_{22},b_{33} وفق المحاور البلورية الأساسية.

References:

[1]Zhigang Chen ,Haihua Li,Journal of Shanghai Jiaotong University (Science)(2022).
[2]Angila Maria Merals .*Evaluation of the Substituting Cation on the Structural and Morphological Properties of the new garnet*,No26-85,November 14,2019.
[3]Carmen-Gabriela Stefanita,*"Magnetism:Basics and Applications"*,Springer(2012).
[4] NguyetThiThuyDao,DouongPhucNguyen and HienDucThan.*Preparationand study of ferrite Garnet $R_3Fe_5O_{12}$ (R=Y,Gd,Dy) nanoparticles*.Vol:15 No:2(2012) Natural Sciences.
[5]J.M.D.Coey,*"Magnetism and Magnetic Materials"*
Cambridge University Press,(2009).
[6]Neil W.Ashcroft ,N.David Mermin,Cornell University*"Solid State Physics"*
[7]J.SMIT and H.P.J.WIJN,Ferrites*"physical properties of ferromagnetic oxides in relation to their technical applicathions"*,(1959).
[8]S.Geller and M.A.Gilleo,Acta cryst.10,239,1957,*structure and Ferrimagnetism of Yttrium and rare earth Iron Garnet.*