

بهبود ویژگی های مغناطیسی ترکیب هویسلر Co_2FeSi با اصلاح نظم بلوری نمونه ها در فرایندهای مختلف ساخت

مهسا صفری و محسن حکیمی*

گروه تحقیقات و فناوری مغناطیس، دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد

(دریافت مقاله: ۱۳۹۵/۱۲/۴ - دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۷/۹/۱۳)

چکیده- در این پژوهش، با هدف بهبود ویژگی های مغناطیسی، ترکیب هویسلر Co_2FeSi طی فرایندهای آزمایشگاهی مختلف ساخته شد. مقایسه ساختار بلوری نشان داد نمونه های ساخته شده به روش آسیاکاری نسبت به نمونه های ساخته شده از روش ذوب قوسی از نظم بلوری بهتری برخوردارند. پخت نمونه حاصل از آسیاکاری باعث بهبود نظم بلوری و در نتیجه دستیابی به بیشترین مغناطش اشباع برابر با $5/24 \mu\text{B}/\text{F.u.}$ شد. تفاوت در مغناطش اشباع سایر نمونه ها با توجه به مدل هسته- پوسته توضیح داده شد. بررسی رفتار وادارندگی با توجه به سازوکارهای فعال در این نمونه ها نشان داد کوچک شدن اندازه ذرات مهم ترین نقش را در افزایش وادارندگی در نمونه های آسیا شده دارد.

واژه های کلیدی: آلیاژ هویسلر، نظم بلوری، مغناطش، هسته-پوسته، وادارندگی، آسیاکاری، ذوب قوسی.

Improving the Magnetic Properties Co_2FeSi Heusler Compound by Modifying the Crystalline Order in Different Manufacturing Procedures

M. Safari and M. Hakimi*

Research and Technology of Magnetism Lab. physics Department, Yazd University, Yazd, Iran.

Abstract: *In this study, the improvement of the magnetic properties of Co_2FeSi Heusler compound was followed by the utilization of different experimental synthesizing procedures. Comparing the crystal structure showed that the milled samples had a higher crystalline order than the arc-melted ones. Annealing of the milled sample improved the crystalline order, resulting in the highest saturation magnetization ($5/24 \mu\text{B}/\text{F.u.}$). The difference in the saturation magnetization of the other samples was explained by the core-shell model. Comparison of the various coercivity mechanisms showed that the decrease in the size of crystallites played a key role in the higher value of the milled samples coercivity.*

Keywords: *Heusler Alloys, Crystalline ordering, Magnetization, Core-shell, Coercivity milling, Arc-melting.*

*: مسئول مکاتبات، پست الکترونیکی: hakimi.m@yazd.ac.ir

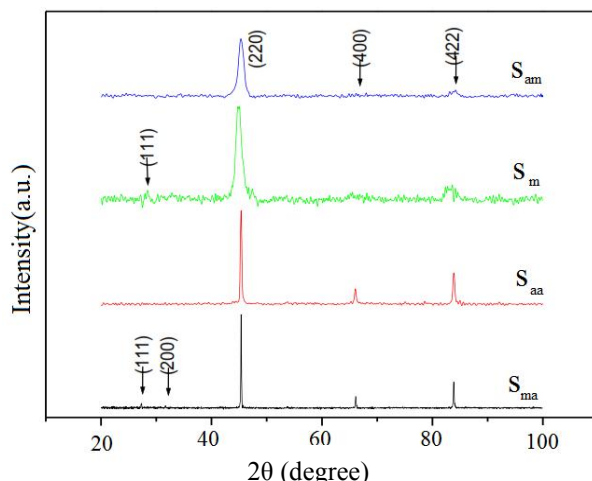
آلیاژهای هویسلر بیش از ۱۵۰۰ ترکیب را شامل می‌شوند. به علت مشاهده ویژگی‌های فیزیکی متعدد از قبیل مغناطو مقاومت بزرگ، مغناطوگرما، پدیده‌های ترموالکتریک، اثر حافظه‌شکلی و خاصیت ابرسانایی در ترکیبات مختلف این خانواده توجه فراوانی را به خود معطوف کرده‌اند [۱-۳]. داشتن خاصیت ویژه نیم‌فلزی دلیل دیگری بر جذابیت این ترکیبات است که مورد توجه بسیاری از محققان علوم و فناوری اسپیترونیک قرار گرفته است [۴]. در این بین آلیاژهای هویسلر بر پایه کبالت به علت قابلیت استفاده‌شان در ابزارهای مبتنی بر پدیده مغناطومقاومت قابل توجه هستند. این دسته از آلیاژهای هویسلر با قطبیدگی اسپینی بزرگ و داشتن دمای کوری بالا و همچنین قابلیت رشد آسان به صورت لایه نازک در ساختارهای چند لایه، نامزدهای خوبی برای کاربرد در حوزه اسپیترونیک هستند [۵]. در حالت ایده‌آل ترکیبات هویسلر ساختار بلوری مکعبی دارند. در این ساختار سلول واحد از چهار شبکه مکعبی وجه مرکزدار (Fcc) تشکیل شده است که هر کدام به اندازه یک چهارم قطر مکعب در راستای قطر اصلی جابه‌جا شده‌اند.

با توجه به مدل اسلیتر-پائولینگ گشتاور مغناطیسی ترکیبات هویسلر بر اساس تعداد الکترون‌های ظرفیت (N_v) آنها به‌ازای واحد فرمول شیمیایی از رابطه $M = N_v - 24$ قابل تخمین است [۶]. گشتاور مغناطیسی ترکیبات هویسلر بر پایه کبالت، مطابقت خوبی با رابطه خطی به‌دست آمده توسط اسلیتر و پائولینگ دارد. با استفاده از این مدل، در میان ترکیبات هویسلر، ترکیب Co_2FeSi بالاترین گشتاور مغناطیسی برابر ۶ مگنتون بوهر به‌ازای واحد فرمول شیمیایی را داراست. مقادیر محاسباتی به‌دست آمده برای گشتاور مغناطیسی این ترکیب به‌روش محاسباتی به‌کار گرفته شده بستگی دارد. کوبلر و همکاران با استفاده از تقریب LSDA^۱ و اعمال تصحیحاتی با کمک تقریب گرادیان تعمیم یافته^۲ (GGA)، مقدار $5.38 \mu_B/F.u.$ را برای مغناطش اشباع این ترکیب گزارش کرده‌اند [۷]. کندپال و همکاران با تقریب^۳ LDA و با دو روش مقادردهی متفاوت

مقادیر $5.59 \mu_B/F.u.$ و $5.29 \mu_B/F.u.$ را برای این کمیت به‌دست آوردند [۸]. همچنین در گزارشی دیگر با محاسبات نظری بر پایه مدل LDA+U مقدار شش مگنتون بوهر به‌ازای واحد فرمول شیمیایی نتیجه شد [۸]. از نظر تجربی تلاش‌های زیادی برای ساخت این ترکیب با بالاترین گشتاور مغناطیسی ممکن صورت گرفته است، به‌عنوان مثال، مقادیر تجربی به‌دست آمده در چند گزارش شامل 5.18 [۹]، 5.73 [۱۰]، 5.91 [۱۱] مگنتون بوهر به‌ازای واحد فرمول شیمیایی بوده و به‌تازگی مقدار 5.97 نیز گزارش شده است که خیلی به عدد ۶ نزدیک است [۱۲]. دلایل متعددی برای تغییر در مقدار این کمیت، در نمونه‌های مختلف شناخته شده مطرح می‌شود. از جمله می‌توان به تغییر در استوکیومتری، نظم بلوری، مورفولوژی و نابجایی‌ها و... اشاره کرد [۱۳]. به‌عبارتی روش ساخت با تأثیر بر این عوامل می‌تواند بر ویژگی‌های مغناطیسی این ترکیب اثر بگذارد [۱۳]. در این تحقیق تأثیر روش ساخت بر ویژگی‌های ساختاری و مغناطیسی ترکیب هویسلر Co_2FeSi مورد بررسی قرار گرفته است. برای این منظور از روش‌های مختلف از جمله آسیاکاری، ذوب‌قوسی و بازپخت برای ساخت نمونه‌ها استفاده شده است.

۲- ساخت و آزمایش

چهار نمونه Co_2FeSi طی فرایندهای مختلف ساخته شد. برای ساخت نخستین نمونه، مواد اولیه به‌صورت پودر فلزی عناصر با خلوص بالا و نسبت وزنی مناسب در یک آسیای لرزشی قرار گرفته و به مدت ۱۵ ساعت در اتمسفر آرگون آسیا شد. نمونه حاصل S_m نامیده شد. به‌منظور بررسی تأثیر پخت، بخشی از نمونه به مدت ۴۸ ساعت در دمای $800^\circ C$ درجه سانتی‌گراد تحت خلاء پخت شده و S_{ma} نام گرفت. برای ساخت دو نمونه بعدی از روش ذوب‌قوسی استفاده شد. در این روش ذرات فلزی با نسبت وزنی مناسب را درون یک محفظه محتوی آرگون قرار داده و فرایند ذوب با عبور یک جریان بزرگ از نمونه صورت می‌گیرد. به دلیل سرعت سردسازی زیاد در این روش، محصول معمولاً از نظر بلوری آمورف است و لازم است فرایندهای



شکل ۱- الگوهای پراش پرتو ایکس نمونه‌ها (S_m): نمونه در آسیای لرزشی قرار گرفته و به مدت ۱۵ ساعت در اتمسفر آرگون آسیا شده است، S_{ma} : نمونه آسیا شده به مدت ۴۸ ساعت در دمای ۸۰۰ درجه سانتی‌گراد تحت خلأ پخت شده است، S_{am} : نمونه حاصل از فرایند ذوب قوسی به مدت ۱۵ ساعت تحت گاز آرگون آسیا شده است، S_{aa} : نمونه حاصل از فرایند ذوب قوسی به مدت ۴۸ ساعت در دمای ۸۰۰ درجه سانتی‌گراد در کوره خلأ پخت شده است) (رنگی در نسخه الکترونیکی)

پرتو ایکس نمونه‌ها نشان داده شده است. تحلیل این نتایج نشان می‌دهد که هر چهار نمونه از ترکیب Co_2FeSi دارای ساختار بلوری مکعبی با گروه فضایی $Fm3m$ هستند. پارامتر شبکه بلوری نیز با استفاده از الگوهای پراش پرتو ایکس محاسبه شد. پارامتر شبکه نمونه S_m برابر با $5/705$ آنگستروم به دست آمد که نسبت به سایر نمونه‌ها بزرگ‌تر است. مقادیر گزارش شده در مقالات برای این کمیت در نمونه‌های حجمی و لایه نازک ساخته شده به ترتیب برابر با $5/640$ و $5/670$ آنگستروم گزارش شده است [۱۴]. همچنین مقدار این کمیت بر پایه محاسبات تقریب گرادیان تعمیم یافته برابر $5/647$ آنگستروم به دست آمده است [۱۵]. در واقع فاصله اتم‌ها در نمونه ساخته شده به روش آسیاکاری نسبت به سایر روش‌ها، بزرگ‌تر است. هرچند پارامتر شبکه پس از پخت این نمونه در نمونه S_{ma} کاهش یافته با این وجود هنوز هم در مقایسه با نمونه‌های ساخته شده به روش ذوب قوسی بزرگ‌تر است.

در نمونه S_{ma} دو قله (۱۱۱) و (۲۰۰) به ترتیب در زوایای ۲۷ و ۳۱ درجه قابل مشاهده است. در نمونه S_m نیز قله (۱۱۱) در زاویه ۲۷ درجه دیده می‌شود. در ترکیبات با ساختار $L2_1$

تکمیلی برای تبلور صورت گیرد. به این منظور یکی از نمونه‌های حاصل از فرایند ذوب به مدت ۱۵ ساعت تحت گاز آرگون آسیا و S_{am} نامیده شد. نمونه دیگر به مدت ۴۸ ساعت در دمای ۸۰۰ درجه سانتی‌گراد در یک کوره خلأ پخت شد، این نمونه نیز S_{aa} نام گرفت.

ساختار بلوری نمونه‌ها به روش پراش پرتو ایکس^۴ (XRD) بررسی شد و از نرم‌افزار X'Pert برای تحلیل داده‌های پراش پرتو ایکس، استفاده شد. همچنین از رابطه شرر و ویلیامسون-هال برای استخراج میزان کرنش و اندازه متوسط ذرات استفاده شد. برای بررسی مورفولوژی نمونه‌ها از آنها تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی^۵ (SEM) گرفته شدند. برای مطالعه ویژگی‌های مغناطیسی حلقه پسماند مغناطیسی نمونه‌ها نیز در دمای محیط با یک دستگاه مغناطش‌سنج نمونه ارتعاشی^۶ (VSM) اندازه‌گیری شد.

۳- نتایج و بحث

متداول‌ترین روش برای تعیین ساختار بلوری، استفاده از الگوی پراش پرتو ایکس (XRD) است. در شکل (۱) الگوهای پراش

جدول ۱- گروه فضایی، پارامتر شبکه‌ها، اندازه دانه‌ها و کرنش داخلی نمونه‌های مختلف

نام نمونه	Saa	Sma	Sm	Sam
ساختار بلوری	مکعبی	مکعبی	مکعبی	مکعبی
گروه فضایی	Fm3m	Fm3m	Fm3m	Fm3m
پارامتر شبکه (آنگستروم)	۵/۶۳۴	۵/۶۴۹	۵/۷۰۵	۵/۶۳۵
اندازه بلورک (نانومتر) (شرر)	۱۰۴	۶۰	۶/۸	۶/۶
اندازه بلورک (نانومتر) (ویلیامسون-هال)	۱۲۳	۷۳	۱۲	۱۰
کرنش	۰/۰۰۰۷	۰/۰۰۱	۰/۰۱	۰/۰۰۷

بعد از انجام مرحله ذوب‌قوسی، باعث رشد بلورک شده است. همچنین اندازه بلورک آسیا شده از مرتبه ۷ نانومتر محاسبه شد. نکته قابل توجه اینکه در رابطه (۱)، پهن‌شدگی قله‌ها تنها به اندازه بلورک نسبت داده می‌شود درحالی که در شرایط کلی پهنای قله‌ها علاوه بر اندازه بلورک به کرنش‌های شبکه بلوری هم مربوط است. با توجه به احتمال وجود کرنش در نمونه‌های S_{am} و S_m که آخرین فرایند ساخت روی آنها آسیاکاری بوده است، لازم است برای محاسبه اندازه بلورک در این دو نمونه از رابطه ویلیامسون-هال استفاده شود. رابطه ویلیامسون-هال به صورت زیر بیان می‌شود [۱۷]:

$$BCos\theta = \frac{K\lambda}{D} + 2\epsilon Sin\theta \quad (2)$$

که در این رابطه ϵ کرنش نمونه است. اندازه بلورک محاسبه شده با این رابطه، از مقادیر مربوط به مدل شرر بزرگ‌تر است. کمیت‌های محاسبه شده از پراش پرتو ایکس در جدول (۱) خلاصه شده است.

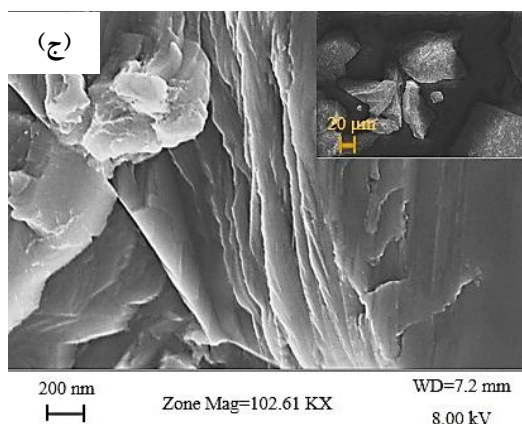
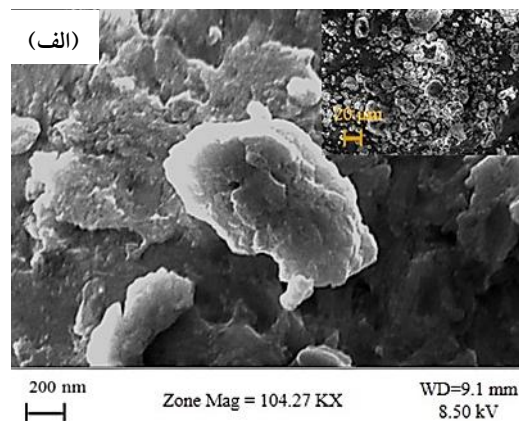
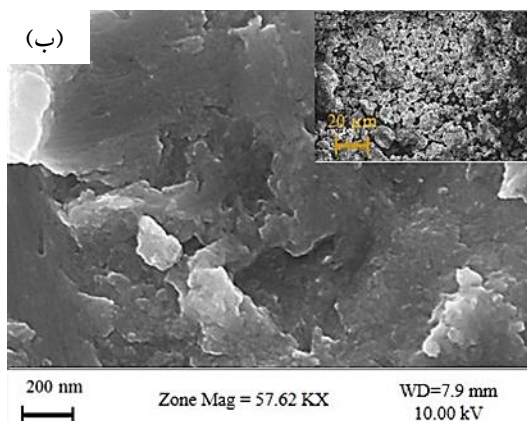
تصاویر میکروسکوپی الکترونی روبشی نمونه‌های S_{aa} ، S_m و S_{am} با دو بزرگنمایی مختلف در شکل (۲) نشان داده شده است. تصویر میکروسکوپی الکترونی روبشی نمونه S_{aa} حاکی از شکل‌گیری نوعی ساختار لایه‌ای با ضخامت‌هایی از مرتبه ۱۰۰ نانومتر در این نمونه است. ذرات مشاهده شده در الحاقی تصویر اشکالی غیرمنتظم داشته و اندازه آنها از مرتبه چند تا چند ده میکرومتر متغیر است. ذرات در نمونه S_{am} دارای

اگر جرم اتمی عناصر تشکیل‌دهنده متفاوت باشد، دو قله موسوم به قله‌های ابر شبکه (super lattice) که حکایت از نظم بلند برد بلوری دارد (۱۱۱) و (۲۰۰) در زوایای حدود ۲۷ و ۳۱ درجه مشاهده می‌شود [۱۶]. وجود این قله‌ها و ارتفاع نسبی آنها می‌تواند ملاکی از میزان و نوع نظم بلوری نمونه باشد. در ترکیبات مورد مطالعه در اینجا به دلیل نزدیک بودن جرم اتمی عناصر کبالت و آهن بی‌نظمی بلوری مربوط به این دو عنصر تأثیر چندانی بر این قله‌ها ندارد. به نظر می‌رسد در نمونه‌های ساخته شده به روش ذوب‌قوسی، هر سه اتم تشکیل‌دهنده ترکیب، کاملاً بی‌نظم در داخل شبکه بلوری قرار گرفته‌اند و حتی آسیا یا پخت نمونه ذوب شده، نتوانسته نظم بلوری را در نمونه‌ها ایجاد کند. اما بروز قله ابر شبکه (۱۱۱) در نمونه آسیا شده S_m حاکی از نظم بلوری نسبی است و همچنین با فرایند پخت توانسته این نظم را بهبود دهد. به طوری که در نمونه S_{ma} هر دو قله ابر شبکه (۱۱۱) و (۲۰۰) ظاهر شده‌اند.

همچنین از طریق معادله شرر، اندازه تقریبی بلورک محاسبه شد. در این مدل اندازه بلورک از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$D = \frac{0.9\lambda}{BCos\theta} \quad (1)$$

که در آن D اندازه بلورک، B عرض قله در نصف شدت بیشینه، θ_B زاویه براگ مربوط به قله و λ طول موج پرتو ایکس است. اندازه بلورک نمونه S_{aa} برابر با ۱۰۴ نانومتر به دست آمد که از سایر نمونه‌ها بزرگ‌تر است. می‌توان گفت بازپخت نمونه

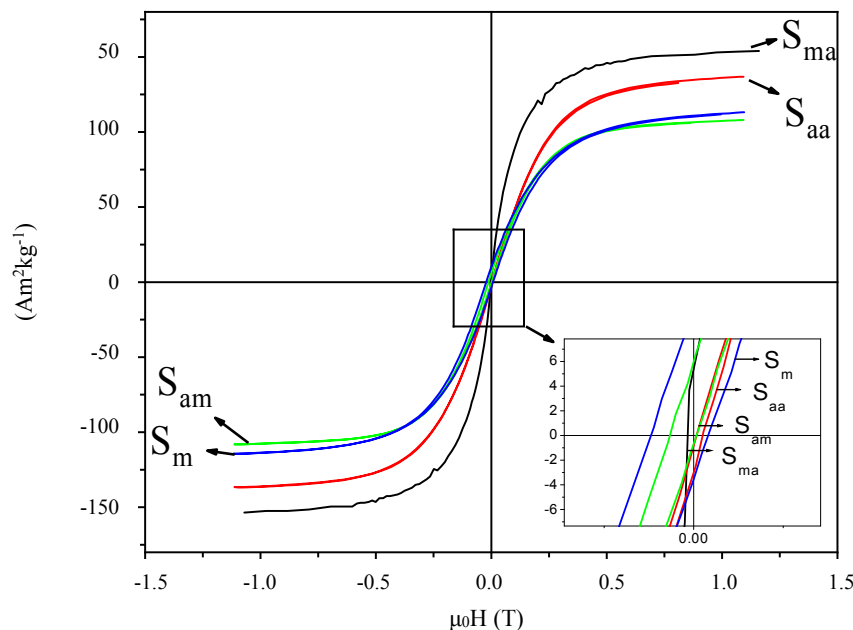


شکل ۲- تصاویر میکروسکوپی الکترونی روبشی نمونه‌های: الف) S_m ، ب) S_{am} و ج) S_{aa}

نشان می‌دهند و با توجه به مایل بودن حلقه‌های پسماند می‌توان گفت که این ماده مغناطیسی نرم، پس از حذف میدان مغناطیسی، خاصیت مغناطیسی خود را به‌طور کامل از دست می‌دهد. همان‌گونه که قبلاً نیز اشاره شد بر اساس مدل اسلیتر-پائولینگ مغناطش اشباعی برابر با شش مگنتون بوهر به‌ازای واحد فرمولی برای این ترکیب پیش‌بینی می‌شود. علاوه بر این با توجه به دمای کوری بالای مورد انتظار برای این ترکیب و وابستگی دمایی ناچیز مغناطش اشباع در محدوده زیر دمای کوری، مقدار مغناطش اشباع این ترکیب در دمای محیط کاهش چندانی نسبت به حالت پایه در دمای صفر مطلق ندارد [۱۸]. مقادیر مغناطش اشباع این نمونه‌ها در واحد مگنتون بوهر به‌ازای فرمول شیمیایی با توجه به جرم اتم‌های موجود در سلول واحد محاسبه و همراه با سایر کمیت‌های

اشکالی متقارن با ابعادی از مرتبه یک تا ۲۰ میکرومتر هستند و سطح ذرات دانه‌بندی با ابعاد تقریبی ۲۰ نانومتر را دارد. نکته قابل توجه اینکه دانه‌های مشاهده شده در سطح کاملاً درهم تنیده شده‌اند. شکل ظاهری ذرات در نمونه S_m مشابه نمونه S_{am} است. با این تفاوت که از نظر اندازه ذرات ناهمگنی بیشتر شده است. دانه‌بندی‌های سطحی نیز مشابه است، به‌جز اینکه این نمونه دارای تخلخل بیشتری بوده و تیدگی ذرات در هم کمتر است.

حلقه پسماند مغناطیسی نمونه‌های S_m ، S_{aa} ، S_{am} و S_{ma} در دمای محیط در شکل (۳) نمایش داده شده است. در الحاقی این شکل محدوده نزدیک به میدان صفر مغناطش در یک بزرگنمایی بیشتر مشاهده می‌شود. با توجه به باریک بودن حلقه‌های پسماند هر چهار نمونه رفتار مغناطیسی نرم از خود



شکل ۳- حلقه پسماند مغناطیسی نمونه‌ها

جدول ۲- ویژگی‌های مغناطیسی نمونه‌ها

نمونه	M _s (μB/F.u.)	M _r (μB/F.u.)	H _c (Oe)
S _m	۳/۵۷	۰/۲۸	۱۴۲
S _{am}	۳/۵۷	۰/۱۳	۶۷
S _{aa}	۴/۳۴	۰/۴۰	۱۶
S _{ma}	۵/۲۴	۰/۲۲	۲۰

افزایش نسبت سطح به حجم است که در نتیجه آن مغناطش اشباع و همچنین دمای کوری کاهش می‌یابد. از آنجا که نمونه‌های S_{aa} و S_{am} به ترتیب اندازه دانه‌ای برابر با ۱۰۴ و ۶/۶ نانومتر دارند تفاوت مغناطش قابل درک است. مغناطش اشباع در نمونه S_m برابر ۳/۵۷ μB/F.u. است. این مقدار با مقدار اندازه‌گیری شده برای نمونه S_{am} برابر است. با توجه به اینکه اندازه دانه‌ها در این دو نمونه به‌طور تقریبی یکسان است این رفتار نیز با مدل هسته- پوسته قابل انتظار است. علاوه بر این تغییر جزئی پارامتر شبکه محاسبه شده از طیف پراش پرتو ایکس و تفاوت در نظم بلوری نمونه‌ها که در بخش پیشین ذکر شد نیز ممکن است بر مغناطش نمونه‌ها تأثیر داشته باشد [۲۰].

به‌دست آمده از حلقه پسماند نمونه‌ها در جدول (۲) گزارش شده است.

نمونه S_{aa} در مقایسه با نمونه S_{am} مغناطش اشباع بزرگ‌تری دارد. مقدار این کمیت در نمونه S_{aa} برابر با ۴/۳۴ μB/F.u. است. عمده‌ترین عاملی که می‌تواند در این تفاوت نقش داشته باشد تفاوت در اندازه ذراتی این دو نمونه است.

در واقع بر اساس مدل هسته- پوسته، یک دانه را می‌توان متشکل از دو بخش هسته و پوسته در نظر گرفت. بر اساس این مدل ویژگی‌های فیزیکی هسته مشابه نمونه حجمی است ولی سطوح دانه‌ها نسبت به مغزه به‌لحاظ ساختاری بی‌نظم‌تر بوده و مغناطش کمتری نیز دارد [۱۹]. کوچک شدن اندازه دانه به معنی

البته تأثیر این عوامل در اینجا ناچیز است و یا این دو اثر همدیگر را خنثی کرده‌اند. در واقع دور شدن اتم‌های مغناطیسی در نمونه آسیا شده می‌تواند منجر به کاهش مغناطش شود و در مقابل بهبود نظم بلوری این کاهش را جبران کرده است. بیشترین مقدار مغناطش مشاهده شده در این نمونه‌ها به نمونه S_{ma} مربوط می‌شود و مقدار آن به‌ازای واحد فرمول شیمیایی برابر $5/24$ مگنتون بوهر است که از پیش‌بینی مدل اسلیتر و پائولینگ کمی کوچک‌تر است. با توجه به تحلیل ساختاری این نمونه بهبود نظم بلوری طی فرایند پخت و همچنین رشد دانه‌ها دلیل مناسبی برای این افزایش مغناطش است.

بیشترین وادارندگی به نمونه S_m با مقدار $1420e$ مربوط می‌شود. این مقدار در نمونه S_{am} که آخرین فرایند تولید روی آن آسیاکاری است به‌طور نسبی بزرگ و برابر $670e$ است. عوامل مختلفی بر اندازه وادارندگی تأثیر دارند. در واقع هر چه ناهمسانگردی مغناطیسی در نمونه بزرگ‌تر باشد، انتظار می‌رود مقدار وادارندگی افزایش یابد. از طرفی در نمونه‌های بس‌بلور، ریزساختار نمونه نیز بر وادارندگی تأثیر می‌گذارد. وجود ناخالصی‌ها و نقص‌های بلوری (ناجایی‌ها) ممکن است با فراهم آوردن بستر شکل‌گیری حوزه‌هایی با جهت مخالف و یا از طریق جلوگیری از حرکت دیواره حوزه‌ها به‌ترتیب باعث کاهش و یا افزایش وادارندگی شود. همچنین دیواره حوزه‌های بلوری می‌تواند نقش مشابهی را بازی کند، در واقع با تغییر اندازه ذرات و در نتیجه تغییر حجم دیواره حوزه‌های بلوری، وادارندگی تحت تأثیر قرار می‌گیرد. این نکته را می‌توان به اندازه ذرات در نمونه‌های پودری نیز تعمیم داد [۲۱].

در دو نمونه اخیر به‌نظر می‌رسد کوچک بودن اندازه بلورک رابطه مستقیمی با افزایش وادارندگی نمونه دارد. البته در نمونه S_m می‌توان گفت تخلخل مشاهده شده در تصاویر میکروسکوپی الکترونی روبشی نیز به افزایش بیشتر وادارندگی منجر شده است؛ مشاهده این رفتار در کامپوزیت‌های $CoFe_2O_4$

[۲۲] و نانوذرات اکسید آهن [۲۳] نیز مشاهده شده است. البته این امکان وجود دارد که تفاوت در ویژگی‌های ذاتی ساختار همچون پارامتر شبکه و نظم بلوری نیز با تأثیر بر ناهمسانگردی ذاتی نمونه در این رفتار مؤثر باشد. در نمونه S_{ma} افزایش اندازه بلورک در طول فرایند پخت، وادارندگی را کاهش داده است. وادارندگی خیلی کوچک مشاهده شده در نمونه S_{aa} نیز با مباحث فوق همخوانی دارد.

۴- نتیجه‌گیری

برای ساخت نمونه‌های Co_2FeSi از دو روش آسیاکاری و ذوب‌قوسی همراه با فرایندهای تکمیلی آسیاکاری و پخت استفاده شد. اندازه‌گیری طیف پراش پرتو ایکس نمونه‌ها حاکی از مکعبی بودن ساختار بلوری است. وجود قله‌های (۱۱۱) و (۲۰۰) در زوایای 27° و 31° درجه نشان داد که نمونه‌های ساخته شده به‌روش آسیاکاری دارای نظم بلوری هستند و عدم وجود این قله‌ها در نمونه‌های ساخته شده به‌روش ذوب قوسی نشان‌دهنده بی‌نظمی بلوری در این نمونه‌ها بود. این نظم با پخت نمونه آسیاکاری بهبود یافت. حلقه‌های پسماند مغناطیسی نمونه‌ها از یک رفتار مغناطیسی نرم حکایت دارد. در تمامی نمونه‌ها مغناطش اشباع از پیش‌بینی اسلیتر و پائولینگ کمتر بود. این رفتار طبق مدل هسته- پوسته و همچنین مسئله بی‌نظمی بلوری توضیح داده شد. همچنین عوامل مختلف تأثیرگذار بر میدان وادارنده، از جمله وجود ناخالصی‌ها و نقص‌های بلوری، تغییر در اندازه ذرات، تخلخل نمونه‌های پودری و همچنین تغییر در ناهمسانگردی‌های ذاتی با تغییر در پارامتر شبکه و نظم بلوری بررسی شد. در این بین نمونه حاصل از پخت پودر تولید شده با روش آسیاکاری بیشترین مغناطش اشباع برابر با $5/24 \mu_B/F.u.$ را داشت.

1. local spin density approximation
2. generalized gradient approximation
3. local density approximation

4. X-ray diffraction
5. scanning electron microscope
6. vibration sample magnetometer

مراجع

1. Miura, Y., Nagao, K., and Shirai, M., "Atomic Disorder Effects on Half-metallicity of the Full-Heusler Alloys $\text{Co}_2(\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{Al}$: A First-principles Study", *Physical Review B*, Vol. 69, p. 144413, 2004.
2. Kudryavtsev, Y. V., Uvarov, V. N., Oksenenko, V. A., Lee, Y. P., Kim, J. B., Hyun, Y. H., Kim, K. W., Rhee, J. Y., and Dubowik, J., "Effect of Disorder on Various Physical Properties of Co_2CrAl Heusler Alloy Films: Experiment and Theory", *Physical Review B*, Vol. 77, p. 195104, 2008.
3. Kobayashi, K., Umetsu, R. Y., Kainuma, R., Ishida, K., Oyamada, T., Fujita, A., and Fukamichi, K., "Phase Separation and Magnetic Properties of Half-metal-type $\text{Co}_2\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Al}$ Alloys", *Applied Physics Letters*, Vol. 85, p. 4684, 2004.
4. Wurmehl, S., Fecher, G. H., Kandpal, H. C., Ksenofontov, V., Felser, C., and Lin, H. J., "Investigation of Co_2FeSi : The Heusler Compound with Highest Curie Temperature and Magnetic Moment", *Applied Physics Letters*, Vol. 88, p. 032503-5, 2006.
5. Umetsu, R. Y., Okubo, A., and Kainuma, R., "Magnetic and Chemical Order-disorder Transformations in $\text{Co}_2\text{Fe}(\text{Ga}_{1-x}\text{Si}_x)$ and $\text{Co}_2\text{Fe}(\text{Al}_{1-y}\text{Si}_y)$ Heusler Alloys", *Journal of Applied Physics*, Vol. 111, p. 073909, 2012.
6. Graf, T., Felser, C., and Stuart, S., "Simple Rules for the Understanding of Heusler Compounds", *Progress in Solid State Chemistry*, Vol. 39, p.1, 2011.
7. Kübler, J. J., Fecher, G. H., and Felser, C., "Understanding the Trend in the Curie Temperatures of Co_2 -based Heusler Compounds: Ab Initio Calculations", *Physical Review B*, Vol. 76, p. 024414, 2007.
8. Kandpal, H. C., Fecher, G. H., Felser, C., and Schönhense G., "Electron Correlations in $\text{Co}_2\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$ Heusler Compounds", *Physical Review B*, Vol. 73, p. 094422, 2006.
9. Buschow, K. H. J., Van Engen, P. J., Jongebreur, R., "Magneto-Optical Properties of Metallic Ferromagnetic Materials", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Vol. 38, p. 1, 1983.
10. Nakatani, T. M., Rajanikanth, A., Gercsi, Z., Takahashi, Y. K., Inomata, K., and Hono, K., "Structure, Magnetic Property, and Spin Polarization of $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ Heusler Alloys", *Journal of Applied Physics*, Vol. 102, p. 033916, 2007.
11. Niculescu, V., Burch, T. J., Raj, K., and Budnick, J. I., "Properties of Heusler-type Materials Fe_2TSi and FeCo_2Si ", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Vol. 5, p. 60, 1977.
12. Wurmehl, S., Fecher, G. H., Kandpal, H. C., Ksenofontov, V., Felser, C., Lin, H. J., and Morais, J., "Geometric, Electronic, and Magnetic Structure of Co_2FeSi : Curie Temperature and Magnetic Moment Measurements and Calculations", *Physical Review B*, Vol. 72, p. 184434, 2005.
13. Hakimi, M., Kameli, P., and Salamati, H., "Structural and Magnetic Properties of Co_2CrAl Heusler Alloys Prepared by Mechanical Alloying", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Vol. 322, p. 3443, 2010.
14. Inomata, K., Okamura, S., Miyazaki, A., Kikuchi, M., Tezuka, N., Wojcik, M., and Jedryka, E., "Structural and Magnetic Properties and Tunnel Magnetoresistance for $\text{Co}_2(\text{Cr,Fe})\text{Al}$ and Co_2FeSi Full-Heusler Alloys", *Journal of Physics D: Applied Physics*, Vol. 39, p. 816, 2006.
15. Kumar, M., Nautiyal, T., and Auluck, S., "First-principles Calculations of Electronic and Optical Properties of $\text{Fe}_{3-x}\text{V}_x\text{Al}$ ($x = 0-3$) Compounds", *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 21, p. 196003, 2009.
16. Hakimi, M., Khajeh Aminian, M., "Effect of Extra Nonmagnetic Ga Atoms on Lattice Ordering and Magnetic Properties of Fe_2CoGa and Co_2FeGa Heusler Compounds", *Iranian Journal of Physics Research*, Vol. 14, pp. 1-7, 2014.
17. Williamson, G. K., and Hall, W. H., "X-ray Line Broadening from Filled Aluminium and Wolfram", *Acta Metall*, Vol. 1, p. 22, 1953.
18. Balke, B., Ouardi, S., Graf, T., Barth, J., Blum, C. G. F., Fecher, G. H., Shkabko, A., Weidenkaff, A., and Felser, C., "Seebeck Coefficients of Half-metallic Ferromagnets", *Solid State Communication*, Vol. 150, pp. 529-532, 2010.
19. Khani, O., Zargar Shooshtari, M., Farbod, M., and Shams, M., "Synthesis and Study of the Structural and Electromagnetic Properties of Iron-carbon Core-shell Nanoparticles", *Journal of Research on Many-body Systems*, Vol. 4, No. 8, pp. 13-20, 2015.
20. Toomver, T. T., and Ross, H. U., "Effect of Impurity Additions on the Remanence and Coercivity of Reduced Hematite Ores", *Journal of Canadian Metallurgical Quarterly*, Vol. 9, pp. 365-371, 2013.
21. Buschow, K. H. J., and De Boer, F. R., *Physics of Magnetism and Magnetic Materials*, Kluwer Academic Publishers, 2003. Translated to Persian by

- Hakimi M., Shahidani M., Yazd University Publishers.
22. Zhang, Sh., Qi, Z., Zhao, Y., Jiao, Q., Ni, X., Wang, Y., Chang, Y., and Ding, C., "Core/Shell Structured Composites of Hollow Spherical CoFe_2O_4 and CNTs as Absorbing Materials", *Journal of Alloys and Compounds*, Vol. 694, pp. 309-312, 2017.
23. Mahdavi Matin, M., Hakim,i M., Mazloun-Ardakani, M., "Improvement of Magnetic Properties of Iron Oxide by Addition of Impurity in Coprecipitation and Hydrothermal Process and Study of Annealing Effect", *Journal of Research on Many-body Systems*, submitted.