

ESTUDO ESTRUTURAL DOS COMPOSTOS MAGNETOCALÓRICOS (R_{1-x}R'_x)Al₂ (R, R' = Nd, Gd, Dy, Pr) POR DIFRAÇÃO DE RAIOS-X

A. W. Spengler (Bolsista CNPQ), A. O. dos Santos (Pós-doutorando), L. P. Cardoso (Professor),
 IFGW - UNICAMP, Campinas, SP
 andersonws@gmail.com



Palavras Chave: Difração de Raios-X - Método de Rietveld - Materiais Magnetocalóricos.

RESUMO: Neste trabalho realizou-se o estudo estrutural de compostos magnetocalóricos da série (R_{1-x}R'_x)Al₂ (R, R' = Pr, Dy, Nd e Gd) utilizando o método de Rietveld da Difração de Raios-X.

O efeito magnetocalórico corresponde à variação de temperatura que é observada quando um corpo magneticamente ordenado sofre uma variação na sua magnetização. Se esta é aumentada adiabaticamente, a entropia do corpo diminui devido ao ordenamento dos spins (mantendo constante a entropia total), e a temperatura do sistema aumenta.

A motivação do trabalho está no estudo estrutural dos compostos (R_{1-x}R'_x)Al₂ (R, R' = terras-raras), de modo que pouco se sabe sobre a evolução do parâmetro de rede e das mudanças nas propriedades magnéticas provocadas por essas substituições, foram observados principalmente as evolução dos parâmetros de rede, o modo que se comportavam perante as mudanças em R e R' e a dependência dos valores de x.

A caracterização das amostras mostrou variação linear do volume da célula unitária com x dentro de cada série e também do volume com o raio atômico da terra rara.

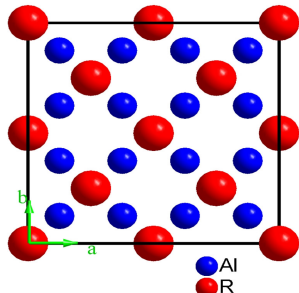


Fig. 1 – Célula Unitária para os compostos RAl₂ (Fd $\bar{3}m$).

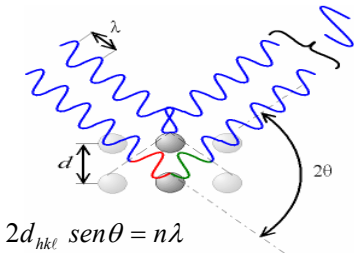


Figura 2 – Representação da difração de Raios-X por dois planos paralelos de átomos separados por uma distância d.

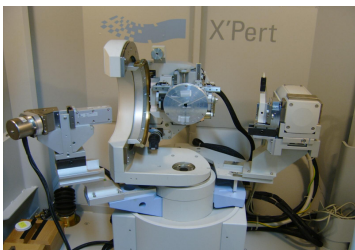


Fig. 3 – Difratômetro de Raios-X modelo X'Pert Pro MRD para policristais e filmes finos.

MÉTODO DE RIETVELD

$$\text{R - perfil } R_p = \frac{\sum |y_{io} - y_{ic}|}{y_{io}}$$

$$\text{R - perfil ponderado } R_{wp} = \sqrt{\frac{\sum w_i (y_{io} - y_{ic})^2}{\sum w_i y_{io}^2}}$$

$$\text{R - esperado } R_{exp} = \sqrt{\frac{N - P}{\sum w_i y_{io}^2}}$$

$$\text{"Goodness of Fit" = GOF } S = \frac{R_{wp}}{R_{exp}}$$

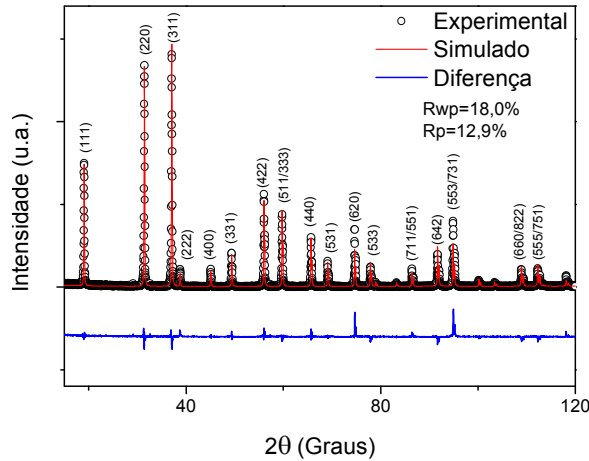


Fig. 4 - Difratogramas experimental e simulado da amostra PrAl₂ usando o método Rietveld. Abaixo mostra-se o diagrama da diferença entre eles.

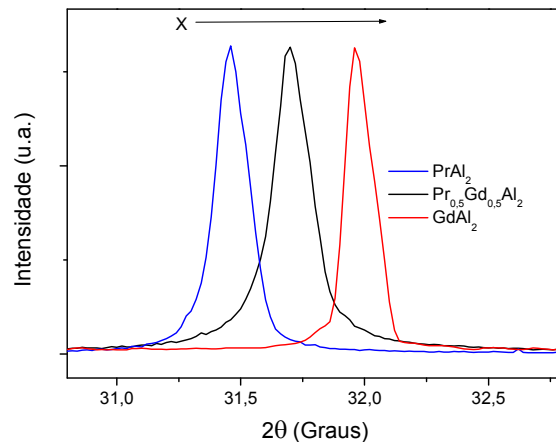


Fig. 5 – Efeito da concentração de Gd na liga Pr_{1-x}Gd_xAl₂ através do pico (220).

REFERÊNCIAS

- CULLITY, B. D. *Elements of X-ray Diffraction*. 2nd ed. Addison-Wesley : 1978.
 DOS SANTOS, Adenilson. Difração de raios-X de n-fleixes na caracterização estrutural de monocristais sob a ação de temperatura e campo elétrico externo. UNICAMP, 2006. Tese de Doutorado.
 STOUT, G. H. JENSEN, L. H. *X-ray Structure Determination*. Macmillan Company : New York, 1965.
 YOUNG, R.A. *The Rietveld Method*. Oxford University Press : New York, 1996.

Tabela 1 – Parâmetros de rede obtidos para as amostras analisadas a partir do método de Rietveld, e seus respectivos fatores R_{wp}.

Amostra	Parâmetro de Rede (Å)	Ajuste da Simulação (Rwp)
NdAl ₂	8,0003(5)	14,9%
DyAl ₂	7,8412(6)	11,7%
GdAl ₂	7,9036(5)	11,6%
PrAl ₂	8,0322 (3)	18,0%
Pr _{0,5} Nd _{0,5} Al ₂	8,0164(5)	13,4%
Pr _{0,5} Gd _{0,5} Al ₂	7,9676(5)	14,8%
Gd _{0,5} Dy _{0,5} Al ₂	7,8712(5)	16,6%

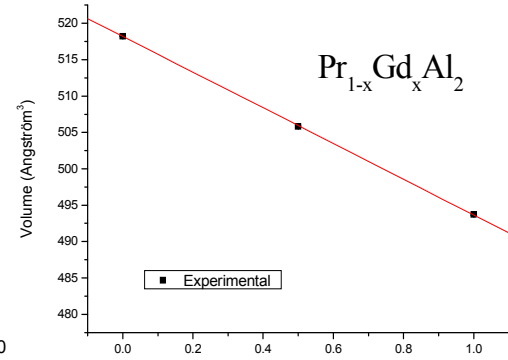


Fig. 6 – Efeito de Gd (x) no volume da série Pr_{1-x}Gd_xAl₂.

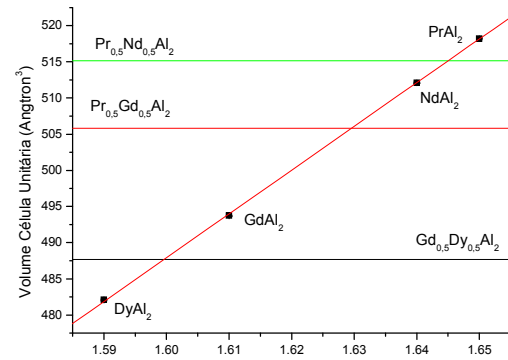


Fig. 7 – Volume da célula unitária em função do raio atômico dos átomos de terra rara nas amostras.

CONCLUSÕES

Como resultado foi obtida a caracterização estrutural das amostras, foi observada a linearidade entre o volume da célula unitária e o valor de x dentro de uma série (R_{1-x}R'_x)Al₂ (R, R' = Pr, Dy, Nd e Gd), e também a relação linear entre o raio atômico e o volume da célula unitária.