熵调控的 Gd_2Co_{17} 金属间化合物的结构与室温磁性能

董霄鹏 赵兴 殷林瀚 彭思琦 王京南 郭永权†

(华北电力大学能源动力与机械工程学院, 北京 102206)

(2022 年 10 月 18 日收到; 2023 年 2 月 13 日收到修改稿)

熵调控材料因其独特的设计理念和优于传统合金的性能而受到广泛关注. 本文将熵调控的设计理念引入金属间化合物中, 设计并通过真空电弧熔炼的方法制备了一系列熵调控的 Gd_2Co_{17} 金属间化合物, 期望通过熵调控的方法来稳定其结构, 改善其磁性能. 应用热力学理论预言熵调控的 Gd_2Co_{17} 系列金属间化合物具有稳定的单相, 其单相性被 X 射线衍射实验所证实. 通过组态熵调控原子尺寸因素, 获得了菱方和六方两种晶体结构. 熵调控改善了 Gd_2Co_{17} 系列金属间化合物的室温磁性能, 过渡族金属位的熵调控使磁各向异性发生由基面到易轴的转变, 稀土位的熵调控有助于提高其矫顽力, 所有熵调控样品室温时的饱和磁矩均比二元 Gd_2Co_{17} 显著提升, 可能是稀土或过渡族金属子晶格磁矩无序取向削弱了金属间化合物中稀土的 4f 电子与过渡族金属的 3d 电子磁矩之间的反平行交换作用所导致. 磁价模型研究表明: 熵调控设计导致 Gd_2Co_{17} 系列金属间化合物中 $N_{sp}^{\uparrow}$(未极化 sp 导带中的电子数目) 增加, 增加了导带电子作为媒介引发过渡族金属子晶格的 3d 电子与稀土的 4f 电子之间强磁交换作用的概率, 形成以游动的 s 电子为媒介, 使磁性原子中局域的 4f 电子自旋与其近邻磁性原子的 3d 电子自旋产生交换作用, 进而表现出饱和磁矩增大. 本研究有助于提高熵调控的 Gd_2Co_{17} 的潜在应用性.

关键词: Gd_2Co_{17}, 高熵金属间化合物, Rietveld 结构精修, 磁价模型

PACS: 75.50.–y, 61.50.–f, 61.66.Dk, 75.30.Hx **DOI:** 10.7498/aps.72.20221995

1 引 言

2:17 型稀土-过渡族金属 (R-T) 金属间化合物如 R_2Co_{17}[1] 和 R_2Fe_{17}[2,3] 因其优异的磁性能而受到了广泛的关注, 以第二代稀土永磁材料 Sm_2Co_{17}[4] 为例, Sm_2Co_{17} 具有较高的居里温度, 较好的温度稳定性, 较强的抗氧化性及耐腐蚀性等突出优点, 存在高温的 Th_2Ni_{17} 型的六方结构和低温的 Th_2Zn_{17} 型的菱方结构. 而 R_2Fe_{17} 是一种优秀的磁致冷材料, 有着较高的饱和磁矩, 中等的磁热效应值和较低的居里温度, 但因其基面的磁各向异性而无法成为永磁材料. 前期研究表明, 基面为主的易磁化方向和较低矫顽力是限制 2:17 体系进一步发展的主要原因. 目前可以通过吸 N、渗 C 或进行适当元素的替换来改善、调控磁性能[5–10]: 如 Sm_2Fe_{17} 化合物在掺杂 N 原子后可以呈现室温单轴各向异性, 且表现出永磁特性, 其居里温度也因为 N 原子进入间隙位引发的晶胞膨胀而得到提高[3,8]; $Sm_2(Co, Fe, Cu, Zr)_{17}$ 体系永磁体的矫顽力和磁积能可在一定温度区间内随着烧结温度的变化而变化, 且掺杂元素 Cu 的含量对其矫顽力及矫顽力温度系数均可以产生影响[11].

高熵合金的研究起源于 2004 年, 从热力学角度研究发现高组态熵可以稳定多组分固溶体, 其是近 20 年来的研究热点[12], 这种由多种元素 (一般

† 通信作者. E-mail: yqguo@ncepu.edu.cn

© 2023 中国物理学会 Chinese Physical Society http://wulixb.iphy.ac.cn

为 5 种或 5 种以上) 等原子比或近等原子比组成的多主元成分合金被定义为高熵合金, 此后这一新型材料被学者们广泛关注, 并进行了大量的研究工作, 目前主要研究的高熵合金有 FeCrCoNiMn[13,14], FeCoNiMnCuAl[15], AlCoCrFeNi[16], AlCoCrCuFeNi[17] 等, 高熵合金相较于传统合金, 表现出高强度、高硬度、高温稳定性好和耐腐蚀等优异的性能[18], 有着极佳的研究价值. 高熵合金的概念经过不断的研究与发展, 从非晶材料[19]和无序固溶体逐渐扩展到了陶瓷等材料上. 在 2015 年出现了一种多组元熵稳定的氧化物陶瓷[20], 首次提出了高熵陶瓷的概念, 此后高熵的概念进一步延伸到了硅化物、氮化物和碳化物等材料中.

通过引入高熵, 可以得到多主元的高熵金属间化合物[21−25], 高熵金属间化合物是将传统金属间化合物中的晶格进行多主元化处理, 即传统金属间化合物晶格上的原子被组元原子随机占据, 依然保留了传统金属间化合物在晶体结构上长程有序的特性, 是一种原子排列无序和有序的结合. 这种高熵金属间化合物的概念, 可以为 2:17 型体系研究带来新的方向, 高熵化的工艺相较于传统的吸 N、渗 C 工艺更为简单方便, 因此运用高熵化来调控体系的磁性能, 具有充分的研究价值和应用前景.

Gd_2Co_{17} 具有较高饱和磁矩和高居里温度, 通过元素掺杂, 其磁各向异性会发生变化, 居里温度也在 500—1200 K 内变化[26−29], 因此以 Gd_2Co_{17} 为基体, 设计并制备了一系列 2:17 型稀土-过渡族金属金属间化合物, 使用等原子比替换的方式替换重稀土元素或过渡族金属元素以制备熵调控的金属间化合物, 并对其晶体结构与室温磁性能进行了系统的研究.

2 实验过程

实验按照设计成分 $Gd_2(Co, T_1, T_2, \cdots, T_n)_{17}$ 和 $(Gd, R_1, R_2, \cdots, R_n)_2Co_{17}$ 进行原料配比, 所选用的稀土元素和过渡族金属元素的纯度均高于 99.9%(质量分数). 采用非自耗真空电弧炉在高纯氩氛围中进行熔炼, 熔炼后将样品封入含 0.2—0.3 大气压氩气的石英管中进行 1000 ℃×8 d 的均匀化退火, 之后放入冷水中进行淬火.

热处理后的试样进行研磨制粉, 采用 X 射线衍射仪 (XRD, Rigaku D/Max 2500X, 日本理学) 对粉末样品进行物相鉴定, Cu 靶 (λ = 0.154056 nm), 扫描范围 20°— 83°. 采用 TREOR 程序进行指标化, 使用 Rietveld 结构精修技术进一步确定样品晶体结构. 采用场发射扫描电子显微镜 (SEM, JEOL-IT500) 和能谱仪 (EDS) 研究微观组织结构和各组元的化学成分, 验证熵调控设计组分.

将样品粉末与同质量的环氧树脂胶均匀混合, 置于柱状模具中在 10 kOe 磁场下择优取向, 完全凝固后取出样品; 测量柱状样品底面的 XRD 图谱以确定样品的磁各向异性; 使用振动样品磁强计 (VSM) 在外加–15—15 kOe 磁场下分别沿垂直和平行于样品轴线的方向测试样品的室温磁滞回线.

3 结果与讨论

3.1 热力学分析

通常, 原子半径差 Δr 和混合焓 $\Delta \boldsymbol{H}_{\rm mix}$ 被作为形成单相高熵合金的判据. 研究表明, 当 $\Delta r < 6\%$, $-15\ {\rm kJ/mol} < \Delta \boldsymbol{H}_{\rm mix} < 5\ {\rm kJ/mol}$ 时[30], 多主元合金倾向于形成单相的高熵合金. 由于高熵金属间化合物存在多个晶位可供高熵化设计, 因此判断高熵金属间化合物的单相性判据 Δr 和 $\Delta \boldsymbol{H}_{\rm mix}$ 需要进行一定的修正, 修正后见 (1) 式和 (2) 式, 根据 (3) 式可计算其混合熵[30]:

$$\Delta r = \sqrt{\sum c_i \left(1 - \frac{r_i}{\sum c_i r_i}\right)^2} \times 100\%, \tag{1}$$

$$\Delta \boldsymbol{H}_{\rm mix} = \sum_{i \neq j} 4 c_i c_j \Delta \boldsymbol{H}_{ij}, \tag{2}$$

$$\Delta \boldsymbol{S}_{\rm mix} = -R \sum_{i=1}^{n} c_i \ln c_i, \tag{3}$$

式中, c_i, c_j 代表对应元素的原子数百分比, r_i 代表对应元素的原子半径, $\Delta \boldsymbol{H}_{ij}$ 代表合金中等原子比的两种元素之间的混合焓, R 为理想气体常数. 本文预期制备样品的热力学参数的计算结果见表 1.

计算表明, 熵调控设计晶位的原子半径差为 0.55%—1.81%, 稀土位和过渡族金属位的混合焓分别为 0 kJ/mol 和–4 至–1 kJ/mol, 符合单相高熵合金的成相规律, 因而稀土元素和过渡族金属元素可以在熵调控设计的各晶位随机固溶; 而稀土位和过渡族金属位间的混合焓为–8.54 至–5.13 kJ/mol, 较大的混合焓使其能够形成 R-T 化合物. 因此, 本

表 1 熵调控 Gd_2Co_{17} 系列样品热力学参数
Table 1. Thermodynamic parameters of entropized Gd_2Co_{17} intermetallic compounds.

样品	原子半径差 Δr /%	混合焓 $\Delta \boldsymbol{H}_{mix}$ /(kJ·mol^{-1})			混合熵 $\Delta S_{mix}/R$
		稀土位	金属位	稀土位-金属位	
Gd_2Co_{17}	—	—	—	–8.29	0
$Gd_2(Co_{1/2}Fe_{1/2})_{17}$	0.79	—	–1.00	–5.13	0.69
$Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$	0.99	—	–1.33	–7.85	1.10
$Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$	1.81	—	–4.00	–8.38	1.39
$(Gd_{1/2}Tb_{1/2})_2Co_{17}$	0.55	0	—	–8.48	0.69
$(Gd_{1/3}Tb_{1/3}Dy_{1/3})_2Co_{17}$	0.69	0	—	–8.54	1.10
$(Gd_{1/4}Tb_{1/4}Dy_{1/4}Ho_{1/4})_2Co_{17}$	0.83	0	—	–8.48	1.39

文设计的熵调控 Gd_2Co_{17} 金属间化合物是满足热力学理论预言的单相成相条件, 具有单相性.

3.2 晶体结构

图 1 为实验样品的 XRD 图谱, 使用 MDI Jade 6 和 PDF-4+2009 软件对其进行寻峰和物相检索, 用 TREOR 程序对衍射峰进行指标化, 结果显示所有样品均为单相, Gd_2Co_{17}, $Gd_2(Co_{1/2}Fe_{1/2})_{17}$, $Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$ 和 $(Gd_{1/3}Tb_{1/3}Dy_{1/3})_2Co_{17}$ 为菱方结构, 空间群 $R\bar{3}m$; $Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$, $(Gd_{1/2}Tb_{1/2})_2Co_{17}$ 和 $(Gd_{1/4}Tb_{1/4}Dy_{1/4}Ho_{1/4})_2Co_{17}$ 为六方结构, 空间群 $P6_3/mmc$.

全系列样品的指标化结果在表 2 列出, 所有衍射峰均被指标化, 品质因子 $M(20)$ 及可信度因子 $F(20)$ 均大于 10, 表明指标化结果可信, 指标化得到的晶格常数可作为 Rietveld 精修的初始参数.

Rietveld 全谱拟合修正的原理是通过结构模型和最小二乘法优化来拟合实验数据. 本文采用 Pseudo-Voigt 函数为峰形函数, 在结构模型的基础上, 通过调整原子位置、各向异性、温度因子等结构参数及峰形函数、背底参数等图形参数来将计算值修正至与实验值相符.

本文选取了菱方的 $Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$ 和六方的 $Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$ 作为代表性实例, 其精修的 XRD 图谱见图 2, SEM 图像和 EDS 图谱如图 3 所示, EDS 实验元素成分测定见表 3.

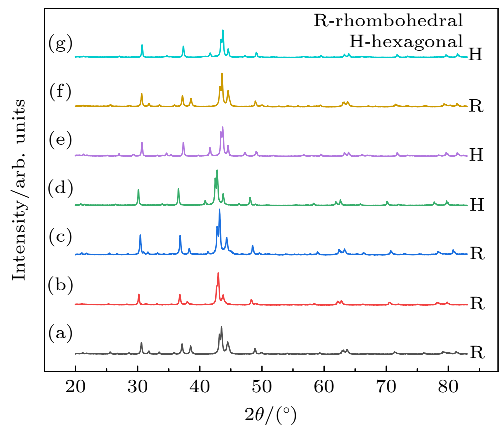

图 1 熵调控 Gd_2Co_{17} 系列样品 XRD 图谱 (a) Gd_2Co_{17}; (b) $Gd_2(Co_{1/2}Fe_{1/2})_{17}$; (c) $Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$; (d) $Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$; (e) $(Gd_{1/2}Tb_{1/2})_2Co_{17}$; (f) $(Gd_{1/3}Tb_{1/3}Dy_{1/3})_2Co_{17}$; (g) $(Gd_{1/4}Tb_{1/4}Dy_{1/4}Ho_{1/4})_2Co_{17}$

Fig. 1. The XRD patterns of the entropized Gd_2Co_{17} intermetallic compounds: (a) Gd_2Co_{17}; (b) $Gd_2(Co_{1/2}Fe_{1/2})_{17}$; (c) $Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$; (d) $Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$; (e) $(Gd_{1/2}Tb_{1/2})_2Co_{17}$; (f) $(Gd_{1/3}Tb_{1/3}Dy_{1/3})_2Co_{17}$; (g) $(Gd_{1/4}Tb_{1/4}Dy_{1/4}Ho_{1/4})_2Co_{17}$.

表 2 熵调控 Gd_2Co_{17} 系列样品晶格参数、品质因子和可信度因子
Table 2. Lattice parameter, merit factors M and smith factor F of entropized Gd_2Co_{17} intermetallic compounds.

样品	a/Å	c/Å	V/Å³	$M(20)$	$F(20)$
Gd_2Co_{17}	8.378(0)	12.206(6)	742.0(0)	28	27
$Gd_2(Co_{1/2}Fe_{1/2})_{17}$	8.458(0)	12.409(6)	768.8(2)	17	14
$Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$	8.444(4)	12.254(1)	756.6(7)	23	23
$Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$	8.507(0)	8. 267(8)	518.1(7)	49	39
$(Gd_{1/2}Tb_{1/2})_2Co_{17}$	8.332(3)	8.133(1)	489.0(1)	46	52
$(Gd_{1/3}Tb_{1/3}Dy_{1/3})_2Co_{17}$	8.363(1)	12.203(0)	739.1(5)	28	28
$(Gd_{1/4}Tb_{1/4}Dy_{1/4}Ho_{1/4})_2Co_{17}$	8.333(6)	8.125(6)	488.7(1)	44	45

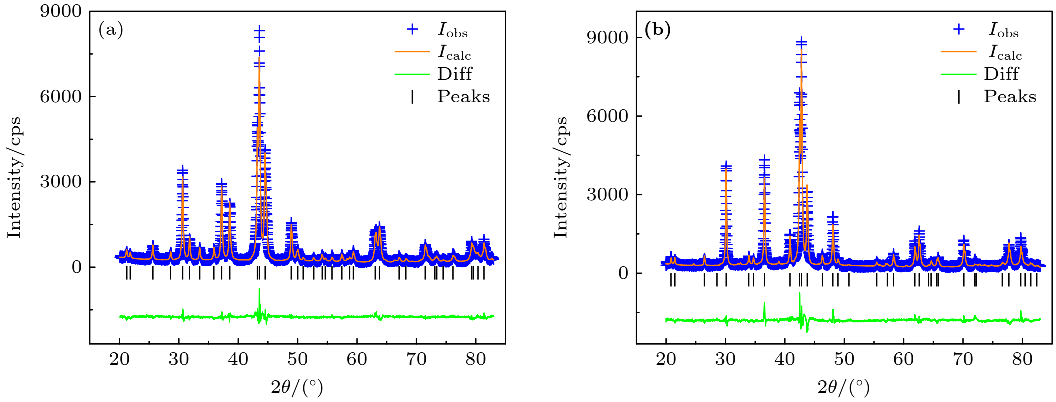

图 2 代表性样品的精修 XRD 图谱 (a) $Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$; (b) $Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$

Fig. 2. Refined XRD pattern of typical samples: (a) $Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$; (b) $Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$.

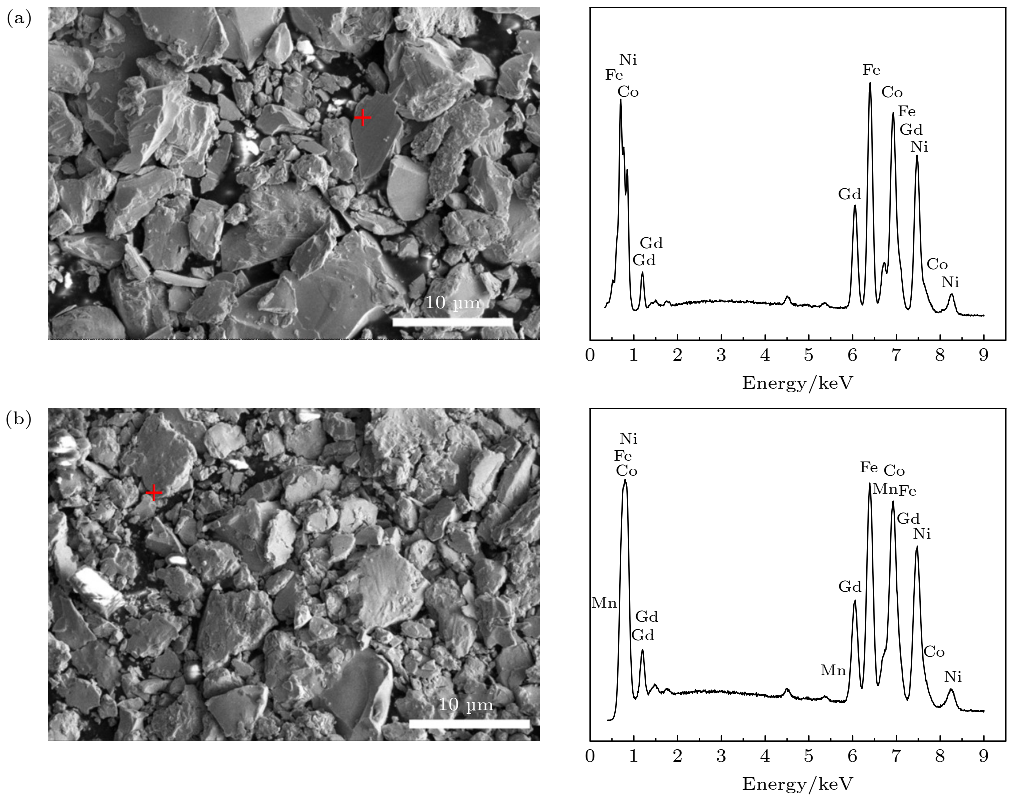

图 3 代表性样品的 SEM 图像、EDS 图谱 (a) $Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$; (b) $Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$

Fig. 3. SEM image and EDS pattern of typical samples: (a) $Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$; (b) $Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$.

表 3 选取样品的元素组成

Table 3. Element compositions of typical samples.

元素	$Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$		$Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$	
	质量百分比/%	原子百分比/%	质量百分比/%	原子百分比/%
Gd	24.5	10.6	26.0	11.3
Co	26.1	30.3	18.9	21.9
Fe	24.0	29.4	16.9	20.7
Ni	25.4	29.6	20.1	23.4
Mn	—	—	18.1	22.7

EDS 成分测试结果表明, 样品各组元成分与设计成分基本一致, 说明实验制备单相的熵调控 Gd_2Co_{17} 与初始成分设计吻合. 通过 Rietveld 结构精修获得的晶体学数据, 包括空间群、点阵参数、原子占位、占位率和剩余 R 因子. 表 4 和表 5 分别列出两种结构模型: 菱方和六方的晶体学数据, 结构精修结果表明: 熵调控的 2:17 型重稀土-过渡族金属金属间化合物存在菱方和六方两种晶体结构, 菱方结构的样品空间群为 $R\bar{3}m$, 存在 5 个非等效原子占位, 其中稀土原子占据 6c 晶位, 金属原子分别占据 6c, 9d, 18f 和 18h 晶位; 六方结构的样品空间群为 $P6_3/mmc$, 存在 6 个非等效原子占位, 其中稀土原子分别占据 2b 和 2d 晶位, 金属原子分别占据 4f, 6g, 12j 和 12k 晶位. 所有熵调控晶位的组元是等原子比的无序占位.

3.3 有效原子半径

研究表明, 二元的 R_2T_{17} 化合物具有菱方和六方两种晶体结构, 其结构受稀土和过渡族金属元素影响. 应用 (4) 式计算样品的有效原子半径 R_A[31]:

$$R_{\mathrm{A}}=\frac{\bar{r}_{\mathrm{R}}}{\bar{r}_{\mathrm{T}}}, \tag{4}$$

式中, $\bar{r}_R$ 为稀土元素平均原子半径和, $\bar{r}_T$ 为过渡族金属元素平均原子半径. 熵调控设计可以通过调控稀土位或者过渡族金属位的平均原子半径, 实现对 R_A 的控制, 影响晶体结构. 各熵调控样品的有效原子半径见表 6, 可以看出, 组态熵通过调控的有效原子半径影响 2:17 型金属间化合物的晶体结构, 当 $R_A>1.4166$ 时, 倾向于形成菱方的晶体结构, $R_A<1.4105$ 时, 倾向于形成六方的晶体结构, 这一结果与二元 R_2T_{17} 化合物的成相规律相符.

3.4 磁性能测试

图 4 和图 5 为磁场取向样品的 XRD 图谱. 可以看出, $Gd_2(T_1, T_2, \cdots, T_n)_{17}$ 系列取向样品呈现出易轴的磁各向异性, $(00l)$ 峰显著增强, 而其余衍射峰则明显变弱甚至消失; 而 $(R_1, R_2, \cdots, R_n)_2Co_{17}$ 系列取向样品仍保持着基面的磁各向异性, 与基体 Gd_2Co_{17} 相同, (300) 和 (220) 峰增强, 其余衍射峰则明显变弱甚至消失, 但整体衍射强度较低, XRD 图谱中背底较为明显. 二元 R_2T_{17} 金属间化合物中除 R = Sm, Er, Tm 外, 均表现为基面的各向异性, 因此, 金属位的熵调控设计可以将磁各向异性由基面转变为易轴, 而稀土位的熵调控设计无明显的影响.

表 4 具有菱方结构的样品的精修晶体学数据

Table 4. Refined crystallographic data of samples with rhombohedral structure.

样品	Gd_2Co_{17}	$Gd_2(Co_{1/2}Fe_{1/2})_{17}$	$Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$	$(Gd_{1/3}Tb_{1/3}Dy_{1/3})_2Co_{17}$
空间群	$R\bar{3}m$	$R\bar{3}m$	$R\bar{3}m$	$R\bar{3}m$
a/Å	8.375(2)	8.454(5)	8.444(7)	8.358(0)
c/Å	12.200(4)	12.413(7)	12.254(3)	12.185(7)
V/Å³	741.131(2)	768.436(1)	756.817(0)	737.200(9)
稀土位	Gd	Gd	Gd	Gd, Tb, Dy
6c (0, 0, z)	(z = 0.34369)	(z = 0.34188)	(z = 0.33731)	(z = 0.34197)
占位率/%	100	100	100	各33.33
金属位	Co	Co, Fe	Fe, Co, Ni	Co
6c (0, 0, z)	(z = 0.09431)	(z = 0.08016)	(z = 0.08100)	(z = 0.09567)
占位率/%	100	各50	各33.33	100
9d (1/2, 0, 1/2)	—	—	—	—
占位率/%	100	各50	各33.33	100
18f (x, 0, 0)	(x = 0.28942)	(x = 0.30352)	(x = 0.30607)	(x = 0.29175)
占位率/%	100	各50	各33.33	100
18h (x, 1−x, z)	(x = 0.16826; z = 0.48728)	(x = 0.50226; z = 0.15830)	(x = 0.16629; z = 0.49090)	(x = 0.16783; z = 0.48701)
占位率/%	100	各50	各33.33	100
R_p/%	5.144	8.110	8.830	5.605
R_{WP}/%	6.865	10.611	12.690	7.057

表 5 具有六方结构的样品的精修晶体学数据

Table 5. Refined crystallographic data of samples with hexagonal structure.

样品	$Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$	$(Gd_{1/2}Tb_{1/2})_2Co_{17}$	$(Gd_{1/4}Tb_{1/4}Dy_{1/4}Ho_{1/4})_2Co_{17}$
空间群	$P6_3/mmc$	$P6_3/mmc$	$P6_3/mmc$
a/Å	8.501(6)	8.329(5)	8.332(9)
c/Å	8.265(3)	8.130(4)	8.124(4)
V/Å^3	517.357(3)	488.512(1)	488.561(0)
稀土位	Gd	Gd, Tb	Gd, Tb, Dy, Ho
2b (0, 0, 1/4)	—	—	—
占位率/%	100	各50	各25
2d (1/3, 2/3, 3/4)	—	—	—
占位率/%	100	各50	各25
金属位	Fe, Co, Ni, Mn	Co	Co
4f (1/3, 2/3, z)	(z = 0.14285)	(z = 0.12127)	(z = 0.13757)
占位率/%	各25	100	100
6g (1/2, 0, 0)	—	—	—
占位率/%	各25	100	100
12j (x, y, 1/4)	(x = 0.32333; y = –0.02248)	(x = 0.33032; y = 0.96090)	(x = 0.32409; y = 0.96806)
占位率/%	各25	100	100
12k (x, $2x$, z)	(x = 0.16182; z = –0.11890)	(x = 0.16585; z = 0.98326)	(x = 0.16655; z = 0.98716)
占位率/%	各25	100	100
R_p/%	7.006	8.07	9.07
R_{WP}/%	8.942	10.50	11.80

表 6 熵调控 Gd_2Co_{17} 系列样品有效原子半径 R_A

Table 6. Effective radius ratio R_A of entropized Gd_2Co_{17} intermetallic compounds.

样品	晶体结构	有效原子半径R_A
Gd_2Co_{17}	菱方	1.4262
$Gd_2(Co_{1/2}Fe_{1/2})_{17}$	菱方	1.4330
$Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$	菱方	1.4334
$Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$	六方	1.3996
$(Gd_{1/2}Tb_{1/2})_2Co_{17}$	六方	1.4166
$(Gd_{1/3}Tb_{1/3}Dy_{1/3})_2Co_{17}$	菱方	1.4105
$(Gd_{1/4}Tb_{1/4}Dy_{1/4}Ho_{1/4})_2Co_{17}$	六方	1.4056

应用振动样品磁强计 VSM 沿易磁化和难磁化方向分别测试取向样品的室温磁化曲线, 如图 6 所示, 黑色实线代表易磁化方向的磁滞回线, 红色实线代表难磁化方向的磁滞回线. 通过插图放大的磁滞回线可以看出, 过渡族金属位熵调控对易磁化方向的矫顽力 H_{c1} 影响不大, 基本为 0.11 kOe, 难磁化方向的矫顽力 H_{c2} 在 0.20—0.21 kOe 之间, 略有增大. 而稀土位熵调控样品则变化明显, 随着 Dy 元素和 Ho 元素的引入, 系统组态熵增加, 矫顽力 H_{c1} 从 0.09 kOe 增至 0.16 kOe, H_{c2} 从 0.14 kOe 增至 0.29 kOe.

由于过渡族金属位熵调控设计的样品表现出了易轴的磁各向异性, 因此通过线性外推法, 评估其磁晶各向异性场 H_A, 如图 7 所示. 可以看出, 金属位熵调控的 H_A 从 19.30 kOe 增至 22.30 kOe, 后又降至 20.0 kOe, 其原因可能是 Mn 元素的引入, 由于不存在 R_2Mn_{17} 金属间化合物, 虽然可以通过熵调控稳定 2:17 相, 但是造成磁性能降低, 影响磁晶各向异性场.

为进一步研究样品的磁化机制, 应用朗之万 (Langevin) 模型[32] 对易磁化方向的初始磁化曲线进行拟合:

$$M = N\mu\left(\coth\frac{\mu H}{k_B T} - \frac{k_B T}{\mu H}\right), \tag{5}$$

式中, M 为磁化强度, N 和 μ 分别为原子个数和原子磁矩, H 为外加磁场强度, k_B 为玻尔兹曼常数, T 为温度.

拟合曲线见图 8, 黑色空心圆圈为实验值, 红色实线为根据朗之万模型拟合的磁化曲线, 拟合值与实验值吻合良好, 拟合度和饱和磁矩见表 7.

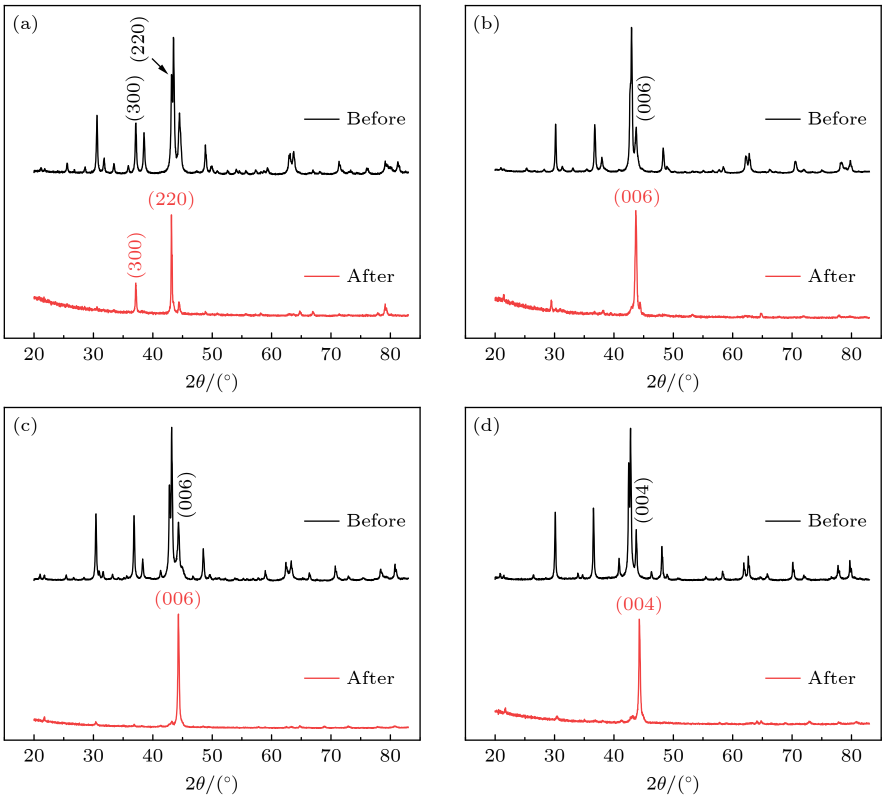

图 4 $Gd_2(T_1, T_2, \cdots, T_n)_{17}$ 系列取向样品 XRD 图谱 (a) Gd_2Co_{17}; (b) $Gd_2(Co_{1/2}Fe_{1/2})_{17}$; (c) $Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$; (d) $Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$

Fig. 4. XRD patterns of aligned $Gd_2(T_1, T_2, \cdots, T_n)_{17}$ intermetallic compounds: (a) Gd_2Co_{17}; (b) $Gd_2(Co_{1/2}Fe_{1/2})_{17}$; (c) $Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$; (d) $Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$.

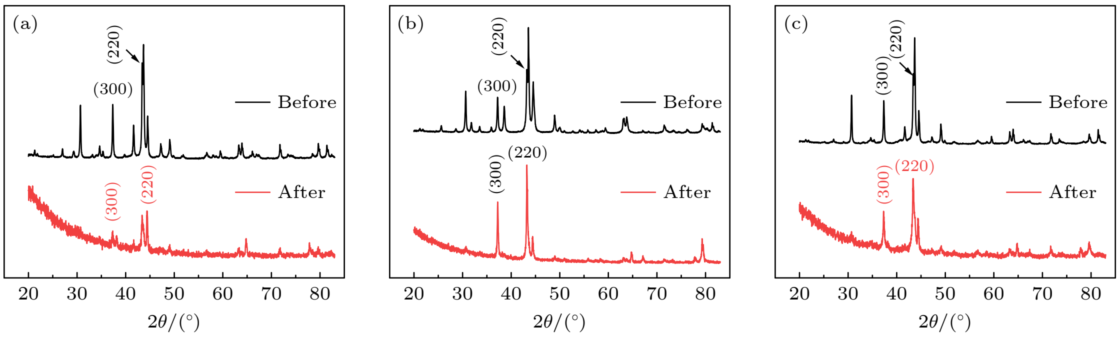

图 5 $(R_1, R_2, \cdots, R_n)_2Co_{17}$ 系列取向样品 XRD 图谱 (a) $(Gd_{1/2}Tb_{1/2})_2Co_{17}$; (b) $(Gd_{1/3}Tb_{1/3}Dy_{1/3})_2Co_{17}$; (c) $(Gd_{1/4}Tb_{1/4}Dy_{1/4}Ho_{1/4})_2Co_{17}$

Fig. 5. XRD patterns of aligned $(R_1, R_2, \cdots, R_n)_2Co_{17}$ intermetallic compounds: (a) $(Gd_{1/2}Tb_{1/2})_2Co_{17}$; (b) $(Gd_{1/3}Tb_{1/3}Dy_{1/3})_2Co_{17}$; (c) $(Gd_{1/4}Tb_{1/4}Dy_{1/4}Ho_{1/4})_2Co_{17}$.

前期研究表明: 二元 R_2T_{17} 体系金属间化合物的磁性能受 R-R、R-T 和 T-T 三种交换耦合作用影响[33], 其中 T-T 相互作用最强, R-T 相互作用居中, R-R 相互作用最弱, 且强的相互作用会表现出高的饱和磁矩和居里温度. 有关可成相的二元 R_2T_{17} 金属间化合物 (不存在二元 R_2Mn_{17}) 的室温磁性能见文献 [2, 29, 33—35], 并根据鸡尾酒效应, 对熵调控 Gd_2Co_{17} 的磁矩进行加权平均估算 (理论磁矩), 见表 8. 根据表 8, 在二元 Gd_2T_{17} 体系中增加了 Ni、Mn 元素后, 削弱了原本表现出较强磁性的 Co-Co 相互作用, 导致饱和磁矩逐渐降低, 但所有熵调控样品的实验磁矩均大于理论磁矩, 且部分样品出现了磁各向异性的转变, 说明熵调控可以改善室温磁性能, 可能是稀土或过渡族金属子晶格磁矩无序取向所导致, 削弱了金属间化合物中稀土的 4f 电子与过渡族金属的 3d 电子磁矩之间的反平行交换作用.

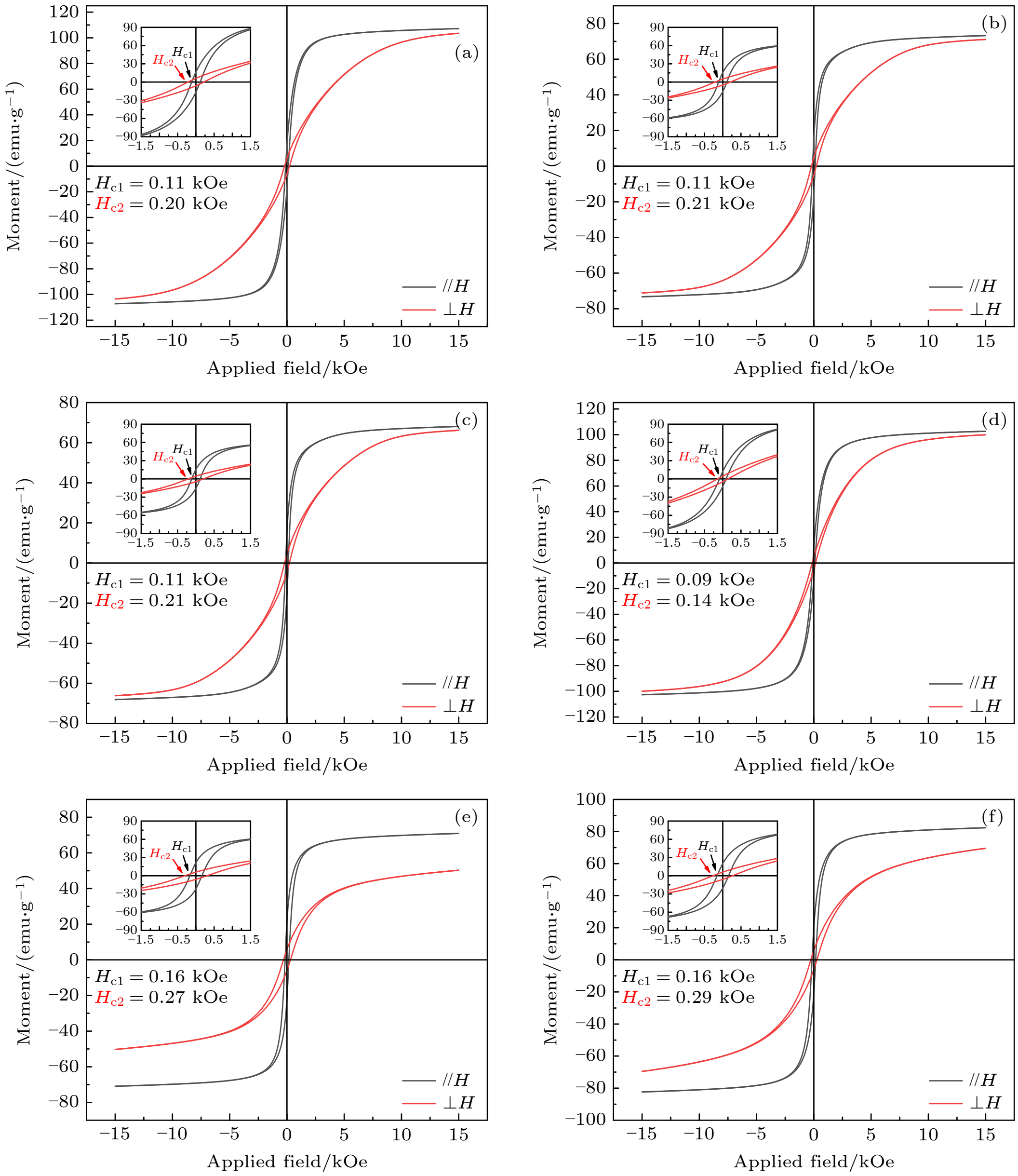

图 6 熵调控 Gd_2Co_{17} 系列取向样品平行和垂直于外加磁场方向的磁滞回线 (a)$Gd_2(Co_{1/2}Fe_{1/2})_{17}$; (b) $Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$; (c) $Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$; (d) $(Gd_{1/2}Tb_{1/2})_2Co_{17}$; (e) $(Gd_{1/3}Tb_{1/3}Dy_{1/3})_2Co_{17}$; (f) $(Gd_{1/4}Tb_{1/4}Dy_{1/4}Ho_{1/4})_2Co_{17}$

Fig. 6. Hysteresis loops of entropized Gd_2Co_{17} samples with magnetic aligned direction parallel and perpendicular to the direction of applied magnetic field: (a) $Gd_2(Co_{1/2}Fe_{1/2})_{17}$; (b) $Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$; (c) $Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$; (d) $(Gd_{1/2}Tb_{1/2})_2Co_{17}$; (e) $(Gd_{1/3}Tb_{1/3}Dy_{1/3})_2Co_{17}$; (f) $(Gd_{1/4}Tb_{1/4}Dy_{1/4}Ho_{1/4})_2Co_{17}$.

3.5 磁价模型

为进一步分析熵调控对磁性能的影响, 使用磁价模型[36]计算了熵调控样品的饱和磁化强度:

$$Z_{\mathrm{m}}=\sum_{i=1}^{n_1}c_iZ_{\mathrm{m}}^{R_i}+\sum_{j=1}^{n_2}c_jZ_{\mathrm{m}}^{T_j}+2N_{\mathrm{sp}}^{\uparrow}C, \tag{6}$$

式中, c 为化学式中元素的原子数目, $Z_{\mathrm{m}}^{R_i}$, $Z_{\mathrm{m}}^{T_j}$ 代表元素的磁价态, 其中重稀土的磁价为负, $N_{\mathrm{sp}}^{\uparrow}$ 代表未极化 sp 导带中的电子数目, C 代表原子总数. 表 9 为样品的饱和磁矩计算结果, 结果表明, 熵调控设计导致 Gd_2Co_{17} 系列金属间化合物中 $N_{\mathrm{sp}}^{\uparrow}$ 增大, 增大了导带电子作为媒介引发过渡族金属亚晶格的 3d 电子与稀土的 4f 电子之间强磁交换作用的概率. 稀土的 f 电子是局域的, 导带中的 s 电子是游动的, f 电子与 s 电子发生交换作用, 使 s 电子发生极化, 极化了的 s 电子的自旋对 f 电子自旋取向有影响, 形成以游动的 s 电子为媒介, 使磁性原子中局域的 4f 电子自旋与其近邻磁性原子的 3d 电子自旋产生交换作用, 造成磁矩增大.

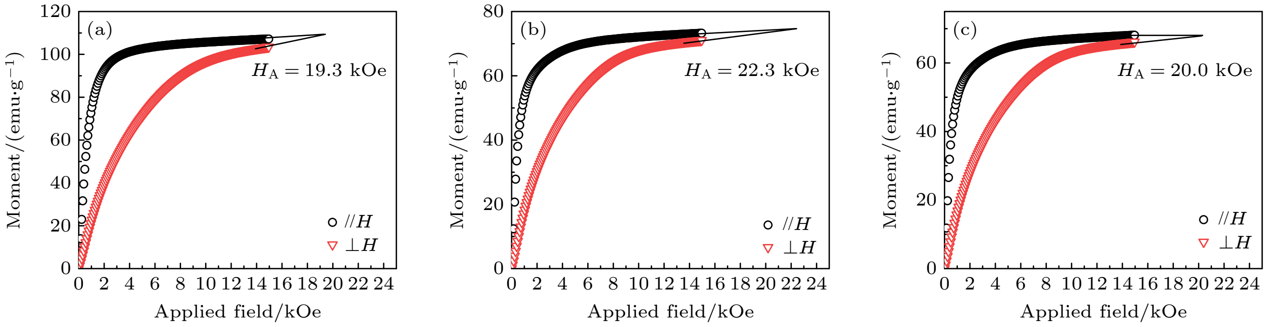

图 7 $Gd_2(T_1, T_2, \cdots, T_n)_{17}$ 系列取向样品的磁晶各向异性场 (a) $Gd_2(Co_{1/2}Fe_{1/2})_{17}$; (b) $Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$; (c) $Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$

Fig. 7. Magnetic anisotropy field of field aligned $Gd_2(T_1, T_2, \cdots, T_n)_{17}$: (a) $Gd_2(Co_{1/2}Fe_{1/2})_{17}$; (b) $Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$; (c) $Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$.

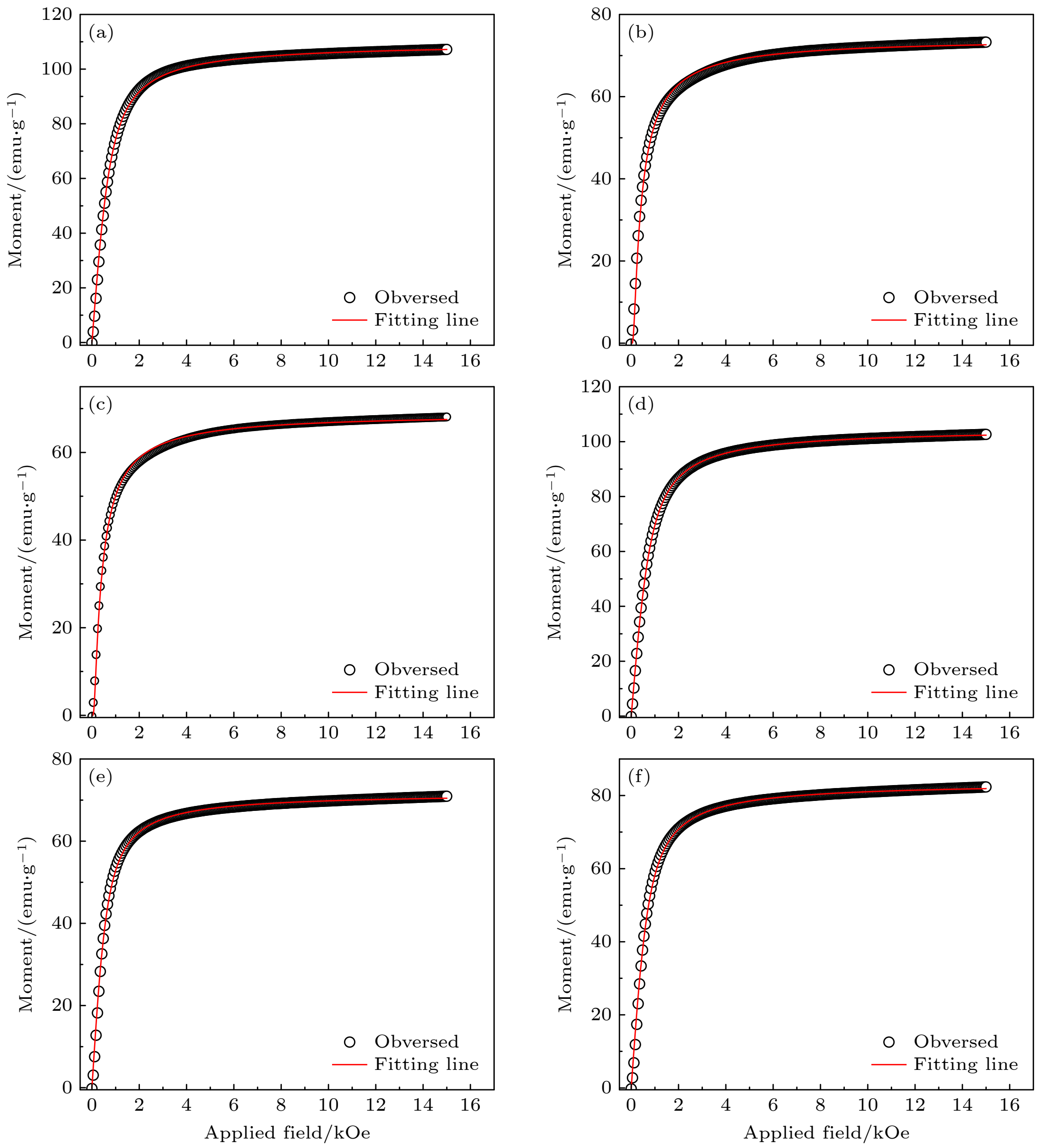

图 8 Gd_2Co_{17} 系列取向样品的拟合磁化曲线 (a) $Gd_2(Fe_{1/2}Co_{1/2})_{17}$; (b) $Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$; (c) $Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$; (d) $(Gd_{1/2}Tb_{1/2})_2Co_{17}$; (e) $(Gd_{1/3}Tb_{1/3}Dy_{1/3})_2Co_{17}$; (f) $(Gd_{1/4}Tb_{1/4}Dy_{1/4}Ho_{1/4})_2Co_{17}$

Fig. 8. Fitted magnetization curves of field aligned entropized Gd_2Co_{17}: (a) $Gd_2(Co_{1/2}Fe_{1/2})_{17}$; (b) $Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$; (c) $Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$; (d) $(Gd_{1/2}Tb_{1/2})_2Co_{17}$; (e) $(Gd_{1/3}Tb_{1/3}Dy_{1/3})_2Co_{17}$; (f) $(Gd_{1/4}Tb_{1/4}Dy_{1/4}Ho_{1/4})_2Co_{17}$.

表 7 熵调控 Gd_2Co_{17} 系列取向样品磁化曲线拟合参数
Table 7. Results of fitted magnetization parameters of field aligned entropized Gd_2Co_{17}.

取向样品	拟合度	$N\mu/(emu{\cdot}g^{-1})$	$N\mu/\mu_B$
$Gd_2(Co_{1/2}Fe_{1/2})_{17}$	0.99887	109.56395±0.02882	25.30
$Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$	0.99630	74.23084±0.03279	17.19
$Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$	0.99644	68.97675±0.02946	15.87
$(Gd_{1/2}Tb_{1/2})_2Co_{17}$	0.99985	104.73245±0.01038	24.71
$(Gd_{1/3}Tb_{1/3}Dy_{1/3})_2Co_{17}$	0.99844	71.71314±0.01977	16.96
$(Gd_{1/4}Tb_{1/4}Dy_{1/4}Ho_{1/4})_2Co_{17}$	0.99837	83.60305±0.02565	19.81

表 8 R_2T_{17} 金属间化合物的室温磁性能
Table 8. Magnetic properties of R_2T_{17} at room temperature.

二元R_2T_{17}	晶体结构	饱和磁矩$N\mu/\mu_B$	居里温度T_c/K	磁各向异性
Gd_2Co_{17}	菱方	13.5—14.4	1209—1240	基面
Gd_2Fe_{17}	六方	21—21.5	460—485	基面
Gd_2Ni_{17}	六方	8.8—9.36	187—205	—
Tb_2Co_{17}	菱方	8.4—10.7	1180—1195	基面
Dy_2Co_{17}	六方	7—8.3	1152—1188	基面
Ho_2Co_{17}	六方	5.8—7.7	1173—1183	基面
熵调控Gd_2Co_{17}	晶体结构	饱和磁矩$N\mu/\mu_B$	理论磁矩$N\mu/\mu_B$	磁各向异性
$Gd_2(Co_{1/2}Fe_{1/2})_{17}$	菱方	25.30	17.25—17.95	易轴
$Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$	菱方	17.19	14.43—15.09	易轴
$Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$	六方	15.87	—	易轴
$(Gd_{1/2}Tb_{1/2})_2Co_{17}$	六方	24.71	10.95—12.55	基面
$(Gd_{1/3}Tb_{1/3}Dy_{1/3})_2Co_{17}$	菱方	16.96	9.63—12.87	基面
$(Gd_{1/4}Tb_{1/4}Dy_{1/4}Ho_{1/4})_2Co_{17}$	六方	19.81	8.68—10.28	基面

表 9 熵调控 Gd_2Co_{17} 系列样品饱和磁矩计算结果
Table 9. Calculated moments of entropized Gd_2Co_{17} intermetallic.

样品	实验磁矩/μ_B	理论磁矩/μ_B	$N_{sp}^{\uparrow}$
Gd_2Co_{17}	13.5—14.4	14.40	0.30
$Gd_2(Co_{1/2}Fe_{1/2})_{17}$	25.30	26.70	0.40
$Gd_2(Co_{1/3}Fe_{1/3}Ni_{1/3})_{17}$	17.19	18.20	0.40
$Gd_2(Co_{1/4}Fe_{1/4}Ni_{1/4}Mn_{1/4})_{17}$	15.87	13.95	0.40

4 结 论

本文用真空电弧炉熔炼制备了熵调控的 $Gd_2(Co, T_1, T_2, \cdots, T_n)_{17}$ 和 $(Gd, R_1, R_2, \cdots, R_n)_2Co_{17}$ 系列合金, 热力学计算表明, 熵调控设计晶位内的原子半径差、混合焓符合单相高熵合金的形成判据, 因此多种元素可在熵调控设计的晶位内随机固溶, 熵调控金属间化合物符合单相高熵合金的形成判据, 其单相性可被理论预言. XRD 物相鉴定与分析、SEM-EDS 分析和 Rietveld 精修结果证实所有熵调控的金属间化合物符合预期设计, 且均为单相, 并具有菱方和六方两种晶体结构, 空间群分别为 $R\bar{3}m$ 和 $P6_3/mmc$. 其晶体结构受熵调控的有效原子半径 R_A 影响, 当 $R_A>1.416$ 时, 化合物倾向于形成菱方的晶体结构, $R_A<1.4105$ 时, 化合物倾向于形成六方的晶体结构. 熵调控改善了 Gd_2Co_{17} 的室温磁性能: 过渡族金属位的熵调控, 导致磁各向异性由基面转变到易轴, 稀土位的熵调控有助于提高矫顽力. 同时, 所有熵调控设计都让室温的饱和磁矩获得了显著提升, 这可能是稀土或过渡族金属子晶格磁矩无序取向所导致, 削弱了金属间化合物中稀土的 4f 电子与过渡族金属的 3d 电子磁矩之间的反平行交换作用. 磁价模型研究表明: 熵调控设计导致 Gd_2Co_{17} 系列金属间化合物中 $N_{sp}^{\uparrow}$ 增大, 增大了导带电子作为媒介引发过渡族金属亚晶格的 3d 电子与稀土的 4f 电子之间强磁交换作用的概率, 形成以游动的 s 电子为媒介, 使磁性原子中局域的 4f 电子自旋与其近邻磁性原子的 3d 电子自旋产生交换作用, 进而表现出磁矩增大.

参考文献

[1] Yin L H, Guo Y Q, Guo X P 2022 *Inorg. Chem.* **61** 2402

[2] Shen B G, Cheng Z H, Liang B, Guo H Q, Zhang J X, Gong H Y, Wang F W, Yan Q W, Zhan W S 1995 *Appl. Phys. Lett.* **67** 1621

[3] Coey J M D, Sun H 1990 *J. Magn. Magn. Mater.* **87** L251

[4] Yi J H, Peng Y D 2004 *Rare Metal Mat. Eng.* **33** 337 (in Chinese) [易健宏, 彭元东 2004 稀有金属材料与工程 **33** 337]

[5] Cheng Z H, Shen B G, Liang B, Zhang J X, Wang F W, Zhang S Y, Zhao J G, Zhan W S 1995 *J. Appl. Phys.* **78** 1385

[6] Hasebe A, Imai T, Otsuki E 1994 *Electr. Eng. Jpn.* **114** 15

[7] Girt E, Altounian Z, Swainson I P 1997 *Phys. B Condens. Matter* **234** 637

[8] Girt E, Guillot M, Swainson I P, Krishnan K M, Altounian Z, Thomas G 2000 *J. Appl. Phys.* **87** 5323

[9] Liang J K, Huang Q, Santoro A, Liu Q L, Chen X L 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 1226

[10] Wang S, Fang Y K, Song K K, Zhu X Y, Wang L, Sun W, Pan W, Zhu M G, Li W 2020 *J. Rare Earths* **38** 1224

[11] Wen X P, Yi J H, Peng Y D, Li L Y, Ye T M, Xia Q L 2005 *Mater. Sci. Eng. Powder Metall.* **10** 236 (in Chinese) [文雪萍, 易健宏, 彭元东, 李丽娅, 叶途明, 夏庆林 2005 粉末冶金材料科学与工程 **10** 236]

[12] Yeh J W, Chen S K, Lin S J, Gan J Y, Chin T S, Shun T T, Tsau C H, Chang S Y 2004 *Adv. Eng. Mater.* **6** 299

[13] Cantor B, Chang I T H, Knight P, Vincent A J B 2004 *Mater. Sci. Eng. A* **375** 213

[14] Shen T Z, Song H Y, An M R 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 186201 (in Chinese) [申天展, 宋海洋, 安敏荣 2021 物理学报 **70** 186201]

[15] Zhou N X, Jiang S C, Huang T, Qin M D, Hu T, Luo J 2019 *Sci. Bull.* **64** 856

[16] Zhang Y, Yang X, Liaw P K 2012 *JOM* **64** 830

[17] Wang J, Zhang Y, Xiao H X, Li L Y, Kou H C, Li J S 2019 *Mater. Lett.* **240** 250

[18] Lu Y D, Zhang X Y, Hou S, He W F, Wang H, Lü Z P 2021 *Rare Metal Mat. Eng.* **50** 333 (in Chinese) [鲁一荻, 张骁勇, 侯硕, 何卫锋, 王辉, 吕昭平 2021 稀有金属材料与工程 **50** 333]

[19] Li R X, Zhang Y 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 177101 (in Chinese) [李蕊轩, 张勇 2017 物理学报 **66** 177101]

[20] Rost C M, Sachet E, Borman T, Moballegh A, Dickey E C, Hou D, Jones J L, Curtarolo S, Maria J P 2015 *Nat. Commun.* **6** 8485

[21] Yadav T P, Mukhopadhyay S, Mishra S S, Mukhopadhyay N K, Srivastava O N 2017 *Philos. Mag. Lett.* **97** 494

[22] Yang T, Zhao Y L, Tong Y, Jiao Z B, Wei J, Cai J X, Han X D, Chen D, Hu A, Kai J J, Lu K, Liu Y, Liu C T 2018 *Science* **362** 933

[23] He Q, Guo Y Q, Zheng Z Z 2013 *Appl. Mech. Mater.* **455** 66

[24] Yin L H, Guo Y Q, Guo X P 2022 *J. Magn. Magn. Mater.* **563** 169883

[25] Guo X P, Guo Y Q, Wang J N, Yin L H 2021 *J. South China Norm. Univ. , Nat. Sci. Ed.* **53** 1 (in Chinese) [郭新鹏, 郭永权, 王京南, 殷林瀚 2021 华南师范大学学报 (自然科学版) **53** 1]

[26] Cheng Z H, Shen B G, Zhang J X, Liang B, Guo H Q, Kronmüller H 1997 *Appl. Phys. Lett.* **70** 3467

[27] Wei X Z, Hu S J, Zeng D C, Liu Z Y, Brück E, Klaasse J C P, de Boer F R, Buschow K H J 1999 *Phys. B Condens. Matter* **266** 249

[28] Sun Z G, Zhang S Y, Zhang H W, Shen B G 2001 *J. Alloys Compd.* **322** 69

[29] Fuquan B, Tegus O, Dagula W, Brück E, Klaasse J C P, Buschow K H J 2007 *J. Alloys Compd.* **431** 72

[30] Yang X, Zhang Y 2012 *Mater. Chem. Phys.* **132** 233

[31] Guo Y Q, Li W, Feng W C, Luo J, Liang J K, He Q J, Yu X J 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 192513

[32] Bean C P, Livingston J D, Rodbell D S 1959 *J. Phys. Radium* **20** 298

[33] Buschow K H J 1980 *Handb. Ferromagn. Mater.* (Vol. 1) (Amsterdam: Elsevier) pp297–414

[34] Gu Z F, Zeng D C, Liu Z Y, Liang S Z, Klaasse J C P, Bru E, de Boer F R, Buschow K H J 2001 *Physica B* **304** 289

[35] Wang J Y, Shen B G, Zhang S Y, Sun Z G, Zhan W S 1999 *J. Phys. Appl. Phys.* **32** 2371

[36] Guo Y Q, Feng W C, Li W, Luo J, Liang J K 2007 *J. Appl. Phys.* **101** 023919

Structures and room-temperature magnetic properties of entropy-modulated Gd_2Co_{17} based intermetallic compounds

Dong Xiao-Peng Zhao Xing Yin Lin-Han Peng Si-Qi
Wang Jing-Nan Guo Yong-Quan[†]

(*School of Energy Power and Mechanical Engineering, North China Electric Power University, Beijing* 102206, *China*)

(Received 18 October 2022; revised manuscript received 13 February 2023)

Abstract

The entropy-modulated material has been a hot topic due to its unique design concept and excellent properties. However, previous studies of entropy-modulated materials mainly focused on the alloys with simple face-centered cubic, or body-centered cubic, or hexagonal close-packed structures. In this work, the design concept of entropy-modulation is introduced into Gd_2Co_{17} based intermetallic compound, and the effect of high configuration entropy on the structural stabilization and room-temperature magnetic properties of Gd_2Co_{17} based intermetallic compound are studied systematically.

The samples are prepared by vacuum Arc melting technology in an ultrahigh-purity Ar atmosphere and followed by annealing at 1000 ℃ for 8 days and finally by quenching in cool water. The fine powders are prepared by grinding the ingots in an agate mortar. The powder XRD and SEM-EDS are used to check the crystal structures and chemical compositions. To study the magnetic properties, the column-like samples are prepared by mixing the fine powder and epoxy with a weight ratio of 1∶1, and then aligned under an applied field of 1 T at room temperature.

The high configuration entropy is found to play an important role in the structural stabilization and magnetic properties of Gd_2Co_{17} based medium- and high-entropy intermetallic compounds. The XRD patterns and Rietveld structural refinement results confirm that all the samples are single-phase. The structure depends on the effective atomic radius R_A, the structure of entropized Gd_2Co_{17} based intermetallics can be stabilized into rhombohedral Th_2Zn_{17}-type with $R_A > 1.416$ or hexagonal Th_2Ni_{17}-type with $R_A < 1.4105$. According to thermodynamic calculations of entropized Gd_2Co_{17} intermeatllics, the atomic radius difference Δr ranges from 0.55% to 1.81%, and the mixing enthalpy $\Delta \boldsymbol{H}_{mix}$ is corresponding to 0 for the rare earth site, –4 to –1 kJ/mol for the transition metal site, and –8.54 to –5.13 kJ/mol between rare earth and transition metal sites. It is suggested that all the thermodynamic parameters meet the criteria for the formation of single-phase medium- and high-entropy intermetallic compounds. The configuration entropy changes from 0.69R to 1.39R. The room temperature magnetic properties are significantly improved by the modulation of entropized design at rare earth and transition metal sublattices. The entropization enhances the saturation moments of all samples, which can be explained with a modified magnetic valence model. The value of $N_{sp}^{\uparrow}$ (the number of the electrons in the unpolarized sp conduction bands) increases from 0.3 to 0.4 after entropization, the indirect interaction between rare earth and transition metal sublattice is increased, the spin moment of s conducting electron as a medium of two sublattices is enhanced, and the magnetic moment is increased. The entropization also induces magnetic anisotropy to transform from basal plane to easy axis for the entropized design at transition metal sublattice and the coercivity of rare earth to increase.

Keywords: Gd_2Co_{17}, high entropy intermetallic compound, Rietveld refinement, magnetic valence model

PACS: 75.50.–y, 61.50.–f, 61.66.Dk, 75.30.Hx **DOI:** 10.7498/aps.72.20221995

† Corresponding author. E-mail: yqguo@ncepu.edu.cn

物理学报 Acta Physica Sinica

Chinese Physical Society

Institute of Physics, CAS

熵调控的Gd_2Co_{17}金属间化合物的结构与室温磁性能

董霄鹏 赵兴 殷林瀚 彭思琦 王京南 郭永权

Structures and room-temperature magnetic properties of entropy-modulated Gd_2Co_{17} based intermetallic compounds

Dong Xiao-Peng Zhao Xing Yin Lin-Han Peng Si-Qi Wang Jing-Nan Guo Yong-Quan

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica, 72, 107501 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20221995

在线阅读 View online: https://doi.org/10.7498/aps.72.20221995

当期内容 View table of contents: http://wulixb.iphy.ac.cn

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

深过冷条件下Co7Mo6金属间化合物的枝晶生长和维氏硬度研究

Dendrite growth and Vickers microhardness of Co7Mo6 intermetallic compound under large undercooling condition

物理学报. 2018, 67(4): 046402 https://doi.org/10.7498/aps.67.20172156

烧结过程中Ni–Al金属间化合物形成的内耗

Internal friction of Ni–Al intermetallic compound formation in sintering process

物理学报. 2021, 70(5): 056102 https://doi.org/10.7498/aps.70.20201422

系列CoMnZn*Z*四元Heusler化合物的结构和半金属铁磁性

Structure and half–metallic ferromagnetism of quaternary Heusler compounds CoMnZn*Z*

物理学报. 2019, 68(15): 157501 https://doi.org/10.7498/aps.68.20190207

过渡金属硫族化合物柔性基底体系的模型与应用

Model and applications of transition metal dichalcogenides based compliant substrate epitaxy system

物理学报. 2018, 67(21): 218102 https://doi.org/10.7498/aps.67.20181571

非晶态$Gd_{45}Ni_{30}Al_{15}Co_{10}$合金的制备与磁热性能

Preparation and magnetocaloric properties of $Gd_{45}Ni_{30}Al_{15}Co_{10}$ amorphous alloy

物理学报. 2022, 71(2): 026102 https://doi.org/10.7498/aps.70.20211530

间隙原子H,B,C对LaFe11.5Al1.5化合物磁性和磁热效应的影响

Influences of interstitial atoms H, B and C on magnetic properties and magnetocaloric effect in LaFe11.5Al1.5 compound

物理学报. 2018, 67(7): 077501 https://doi.org/10.7498/aps.67.20172250