
Analyse des Spectres M'ossbauer du Grenat d'Yttrium Fer, $Y_3Fe_5O_{12}$, et de ses Solutions Solides avec Substitution Isovalente et Non-isovalente de l'Yttrium

Fernande Grandjean*¹, Gary Long*², and Ravi Kukkadapu³

¹Missouri University of Science and Technology (MST) – 400 W 11th Street Rolla, MO 65409-0010, États-Unis

²Missouri University of Science and Technology – États-Unis

³Environmental Molecular Sciences Laboratory – Richland, WA 99354, États-Unis

Résumé

Plusieurs spectres M'ossbauer de haute résolution du grenat d'yttrium fer, $Y_3Fe_5O_{12}$, ont été analysés en fonction de la température avec un nouveau modèle basé sur une analyse détaillée des changements spectraux, qui résultent d'une descente en symétrie du groupe cubique $Ia-3d$ au groupe rhomboédrique $R-3$. Les ajustements indiquent que la contribution du site $16a$ en symétrie cubique est subdivisée en trois sextets attribués aux sites $6f$, et ($3d$, $3d$), et ($1a$, $1b$, $2c$) en symétrie rhomboédrique. La contribution des sites $24d$ en symétrie $Ia-3d$ est subdivisée en quatre sextets attribués à quatre sites différents $6f$ en symétrie rhomboédrique $R-3$. Ces quatre sites diffèrent seulement par les angles entre l'axe principal du tenseur gradient de champ électrique et le champ magnétique hyperfin supposé parallèle à l'axe de facile aimantation. Cette analyse appliquée aux solutions solides, candidats potentiels comme matériaux de stockage de déchets nucléaires, $Y_{3-x}Ca_{0.5x}Th_{0.5x}Fe_5O_{12}$ and $Y_{3-x}Ca_{0.5x}Ce_{0.5x}Fe_5O_{12}$, démontre l'absence de perturbation des propriétés structurales, électroniques, et magnétiques de $Y_3Fe_5O_{12}$ lors de la substitution de petites quantités de calcium(II) et thorium(IV) ou cerium(IV) sur le site $24c$ de l'yttrium(III). L'élargissement observé des quatre sites différents $6f$ résulte de la substitution isovalente du cation yttrium(III) par les cations calcium(II) et thorium(IV) ou cerium(IV) sur les sites $24c$ seconds voisins. Au contraire, la même analyse appliquée à la substitution non-isovalente, $Y_{2.8}Ce_{0.2}Fe_5O_{12}$, révèle une perturbation locale des échanges magnétiques due à la présence de cerium(IV) sur les sites $24c$ seconds voisins des sites $6f$ occupés par le fer(III).

*Intervenant