

УДК 539.26

РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЛЕГИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛОВ БОРАТА ЖЕЛЕЗА

Макимова Е.М.

Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского, Симферополь, Украина

Методом рентгеноструктурного анализа изучается кристаллическая решетка бората железа с примесями галлия.

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ, борат железа, примесь.

ВВЕДЕНИЕ

Легированные кристаллы бората железа FeBO_3 являются интересными объектами для изучения взаимосвязи магнитной и кристаллической структур, когда часть магнитных атомов Fe заменяется диамагнитными атомами Ga, In, Cu, Zn и другими. Для выявления характера замещений был использован метод рентгеноструктурного анализа, позволяющий обнаружить даже небольшие изменения параметров элементарной ячейки.

Чистые кристаллы бората железа кристаллизуются с образованием ромбоэдрической структуры типа кальцита CaCO_3 [1]. Точечная группа симметрии кристалла FeBO_3 $\bar{3}m$ (D_{3d}), пространственная группа симметрии $R\bar{3}c$ (D_{3d}^6). Кристаллы имеют зелёный цвет, твёрдость по *Могу* 5-6. Борат железа является антиферромагнетиком с лёгкой плоскостью, имеющей спонтанную намагниченность при 300°К, около 10 Гс в лёгкой плоскости (0001).

В элементарной ячейке с параметрами $a=5.52 \text{ \AA}$, $\alpha=49.54^\circ$, $V=89.58 \text{ \AA}^3$ (ромбоэдрическая установка) содержится 2 формульные единицы: 2 атома железа, 2 атома бора и 6 атомов кислорода. В гексагональной установке параметры элементарной ячейки: $a=4.624 \text{ \AA}$, $c=14.473 \text{ \AA}$, $V=268.57 \text{ \AA}^3$. Число формульных единиц 6.

Целью данной работы являлось выяснение влияния на кристаллическую структуру FeBO_3 атомов галлия, замещающих атомы железа.

ЭКСПЕРИМЕНТ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Рентгеноструктурные исследования выполнялись на дифрактометре ДРОН-3 методом порошков для образцов $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x\text{BO}_3$, где $x=0; 0,3; 0,44; 0,5; 0,6; 0,8; 0,9$ (содержание по шихте).

Сдвиг дифракционных картин влево по отношению к положению пиков на дифрактограммах чистого бората железа без изменения взаимного расположения этих пиков свидетельствует о том, что замещение носит изоморфный характер,

т.е. не изменяет симметрию решетки, а только уменьшает величину постоянных решетки для исследованных образцов.

Для расчета параметров кристаллических решеток легированных образцов был применен метод экстраполяционной функции, выражающей зависимость величины поправки от угла дифракции θ и позволяющей экстраполировать значение параметра решетки до угла 90° , где ошибка определения межплоскостных расстояний сводится к нулю, рис.1. В качестве экстраполяционной функции использовалась функция Нельсона-Райли [2, 3]:

$$f(\theta) = \frac{1}{2} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin^2 \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$$

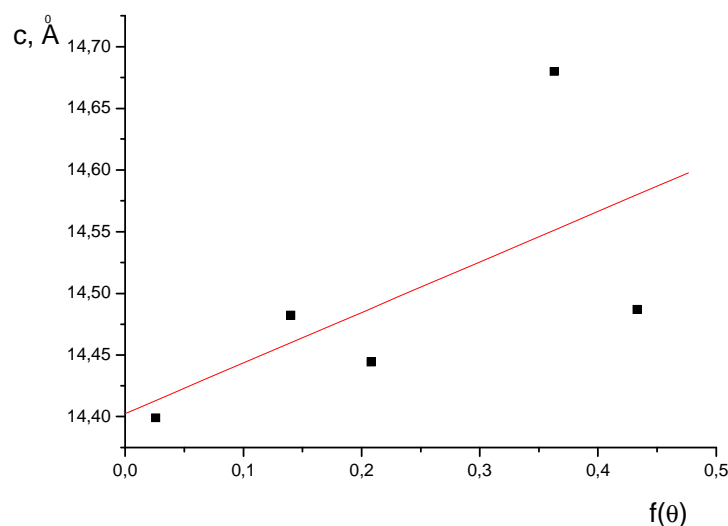


Рис. 1. Линейная аппроксимация и экстраполяция параметра c (гексагональная установка) для образца $\text{Fe}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{VO}_3$. Значение $c=14.4024\pm 0.0006 \text{ \AA}$.

Аналогичным образом были получены параметры a и c кристаллических решеток для всех образцов. Результирующая зависимость величины a легированных образцов от количества введенной примеси галлия приведена на рис.2.

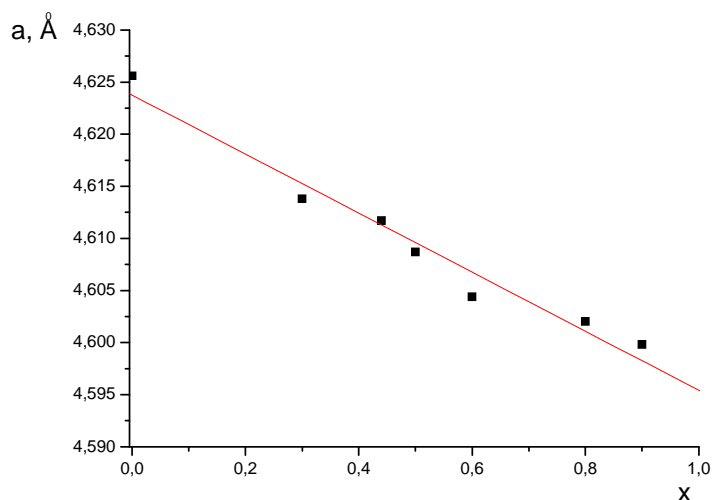


Рис. 2. Зависимость параметра a (гексагональная установка) легированных кристаллов бората железа от содержания примеси галлия.

Полученный результат уменьшения параметров элементарных ячеек, по-видимому, объясняется различием радиусов атомов железа и галлия.

Список литературы

1. Diehl R. Crystal Structure Refinement of Ferrite Borate, FeBO_3 . —Sol. Stat. Com. 1975,V.17,№6.P.743-745.
2. Г.Липсон, Г.Стипл. Интерпретация порошковых рентгенограмм, «Мир», Москва, 1972.-270 с.
3. Руководство по рентгеновскому исследованию минералов. Под редакцией В.А. Франк-Каменецкого. Ленинград, «Недра»,1975.-350 с.

Максимова О.М. Рентгеноструктурне дослідження кристалів бората заліза. // Учені записки Таврійського національного університету ім. В. І. Вернадського. – 2007. – Серія «Фізика». - Т. 20 (59). - № 1. - С. 105 - 107.

Методом рентгеноструктурного аналізу вивчається кристалева ґратка бората заліза з домішками галія.

Ключові слова: рентгеноструктурний аналіз, борат заліза, домішка.

Maksimova E.M. X-rays structure analyses of ferrite borate crystals with additions. // Uchenye zapiski Tavricheskogo Natsionalnogo Universiteta im. V.I. Vernadskogo. – 2007. – Series «Fizika». – V. 20 (59). - № 1. – P. 105 - 107.

By using of X-rays structure method the crystal structure of ferrite borate crystals with addition of gallium have been investigating.

Keywords: X-rays structure analyses, ferrite borate, additions.

Поступила в редакцію 5.02.2007 г.