**Установление заселенностей позиций атомов с близким количеством электронов в структурах с большим числом кристаллографических позиций с помощью метода резонансной рентгеновской дифракции на примере легированных гексаферритов М-типа**

*Султановская А. С. 1, Горбачев Е.А.2, Бете С.3, Диннебир Р.3, Казин П. Е.2*

*1 Факультет наук о материалах**МГУ им. М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Россия*

*2 Химический факультет**МГУ им. М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Россия*

*3 Институт исследований твердого тела им. Макса Планка, 70569, Штутгарт,*

[*sult\_alexa@mail.ru*](mailto:sult_alexa@mail.ru)

Гексаферриты М-типа – это твердые оксидные соединения с общей формулой MFe12O19 (M = Ba, Sr, Pb). Ионы железа расположены в пяти различных кристаллографических позициях: трёх октаэдрических (2a, 4f2, 12k), одной тетраэдрической (4f1) и одной тригонально-бипирамидальной (2b). Вследствие такого распределения магнитных моментов ионов железа в кристаллической структуре, гексаферриты проявляют ферримагнитные свойства, которые можно прецизионно настраивать путем частичного замещения ионов железа. Установление заселенностей легирующих атомов по кристаллографическим позициям позволяет моделировать функциональные свойства соединений. Резонансная рентгеновская дифракция на источнике синхротронного излучения является надежным методом установления позиций элементов, близких по таблице Менделеева, благодаря использованию частоты излучения, близкой к краю поглощения исследуемых атомов.

В представленной работе, с помощью цитратно-нитратного метода были синтезированы образцы гексаферритов, в которых ионы Fe3+ частично замещены ионами Сr3+, Mn3+ Ga3+ и образцы гексаферритов, полученных при одновременном частичном замещении Sr на Ca и Fe3+ на Al3+ (Sr0,66Ca0,33Fe12-хAlxO19). Полученные образцы были исследованы с помощью резонансной рентгеновской дифракции. Согласно уточнению кристаллической структуры по методу Ритвельда для соединений состава Sr0,66Ca0,33Fe6Al6O19 ионы алюминия преимущественно заполняют позиции 2а и 12k. Для соединений SrFe6M6O19 (M = Ga, Cr, Mn) в случае легирования ионами Ga3+ замещение железа происходит преимущественно в позициях 2а, 12k и 4f1. При легировании ионами Cr3+ заместители в основном заполняют позиции 2а и 12k. В случае легирования ионами Mn3+ ионы железа замещаются преимущественно в позициях 2а, 12k и 4f1 (Табл. 1).

Табл. 1. Процент замещения ионов железа в различных кристаллических позициях для степени замещения ионов железа х = 6.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Заместитель | Доля замещения в различных позициях % | | | | |
| 2a | 2b | 4f1 | 4f2 | 12k |
| Al3+ | 90 % | 21 % | 23 % | 26 % | 65 % |
| Ga3+ | 70 % | 42 % | 64 % | 25 % | 52 % |
| Cr3+ | 80 % | 9 % | 8 % | 56 % | 64 % |
| Mn3+ | 59 % | 35 % | 66 % | 18 % | 54 % |

*Работа выполнена при финансовой поддержке* ***гранта РФФИ, проект №21-53-1200****.*