



Дифракционные исследования сотообразного слоистого $\text{Na}_3\text{Co}_2\text{SbO}_6$

Докладчик:
Подчезерцев С.Ю.

18.02.2016

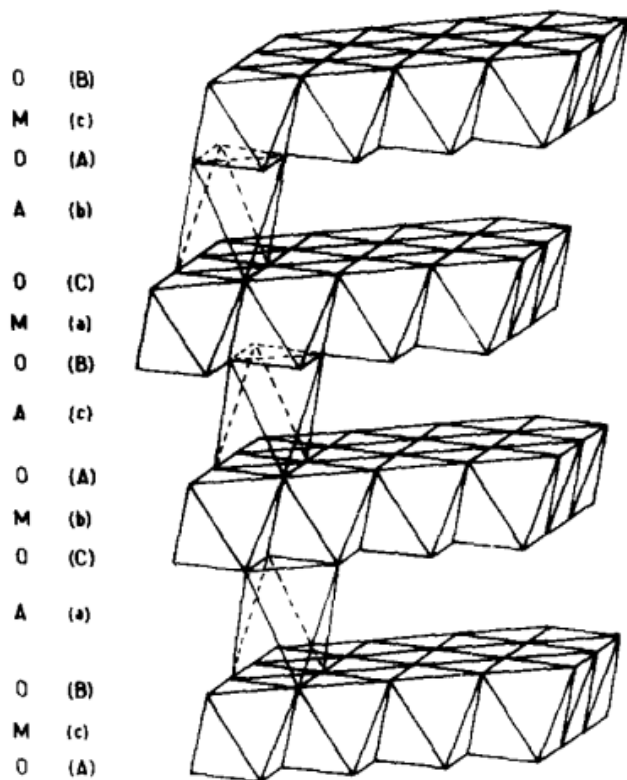
Гатчина

Семейство α - NaFeO_2



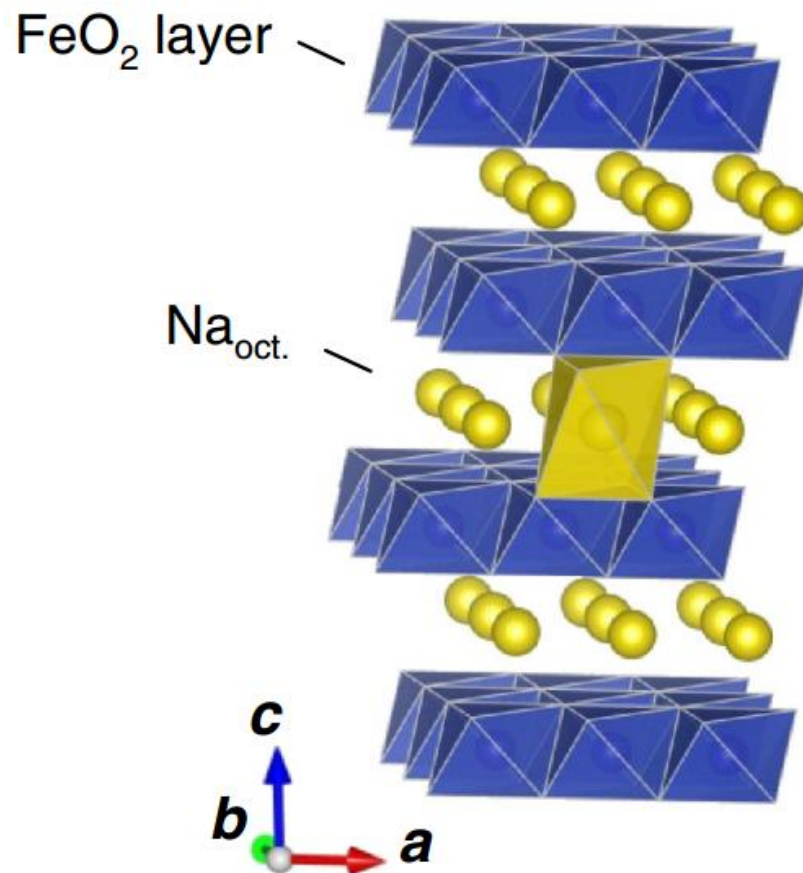
A – щелочной металл

M – металлы в различных степенях окисления



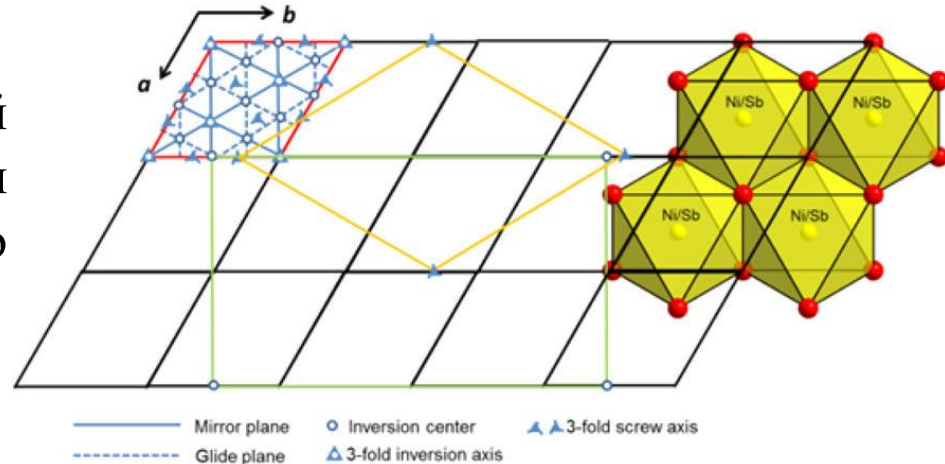
O3 type (ABCABC)

MO_2 слои, образованные MO_6 октаэдрами

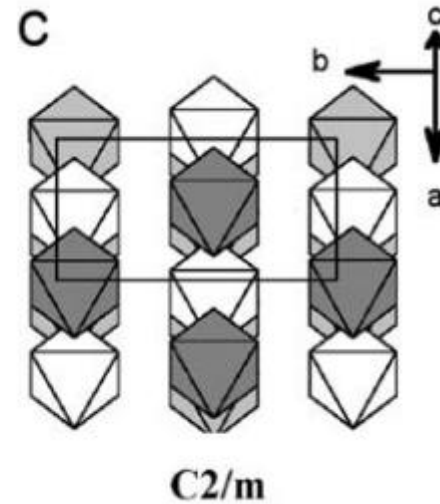
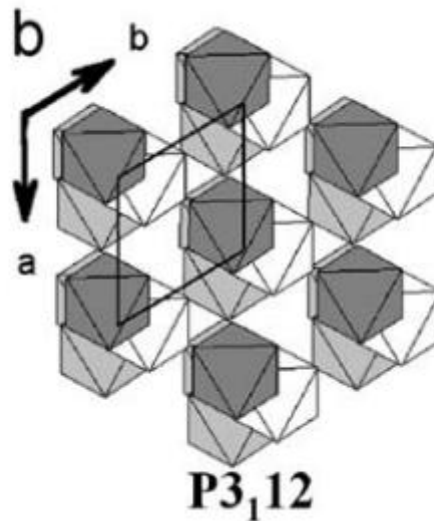
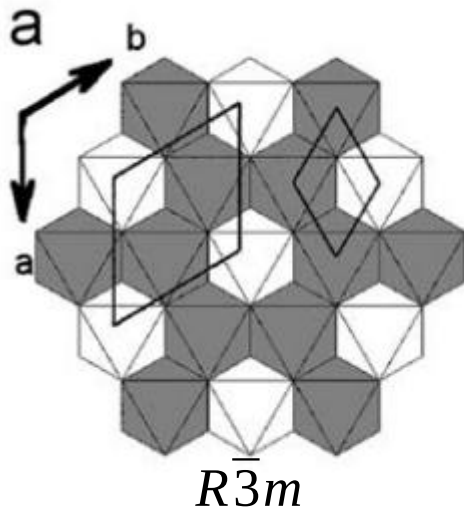


Семейство α -NaFeO₂

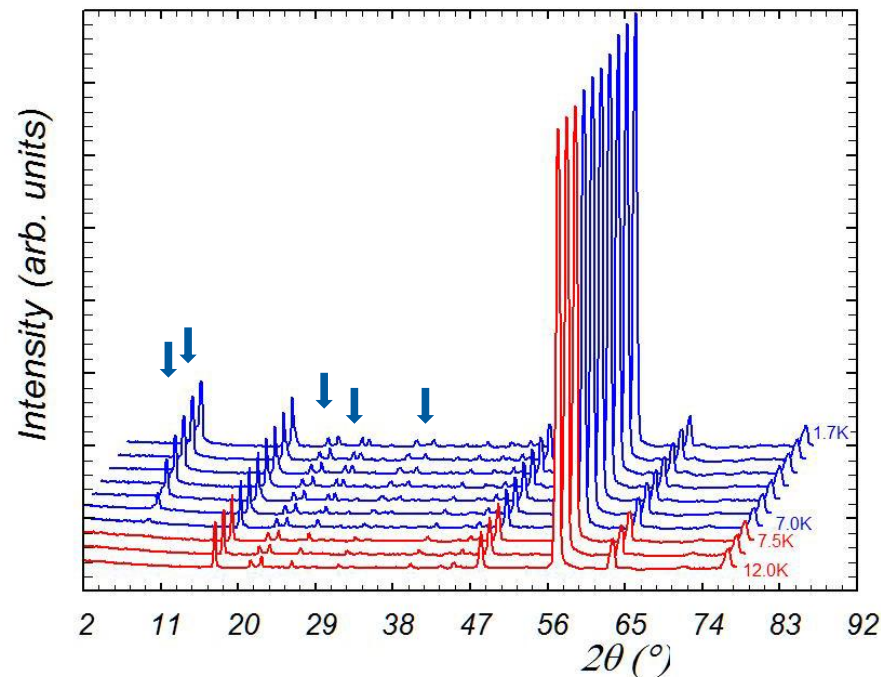
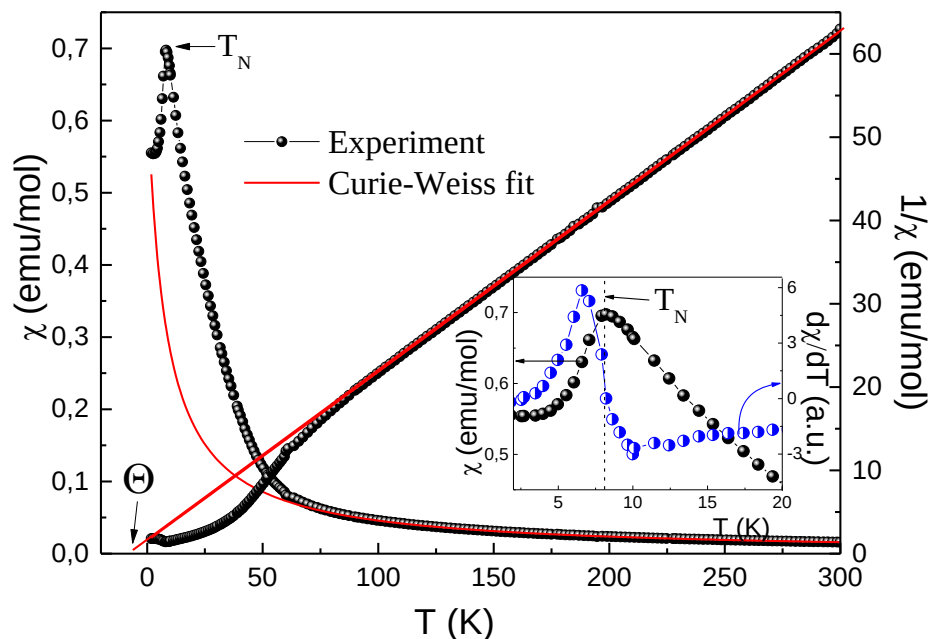
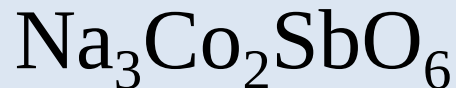
Описывается пространственной группой $R\bar{3}m$. Однако при замещении в подрешетке **M** возможно образование сверхструктур.



Сотообразный ОЗ тип упаковки сохраняется, однако возникают различные варианты упаковки **MO₂** слоев друг относительно друга



Все соединения $A_3^{+1}M_2^{+2}Sb^{+5}O_6^{-2}$ описываются в рамках данных пространственных групп

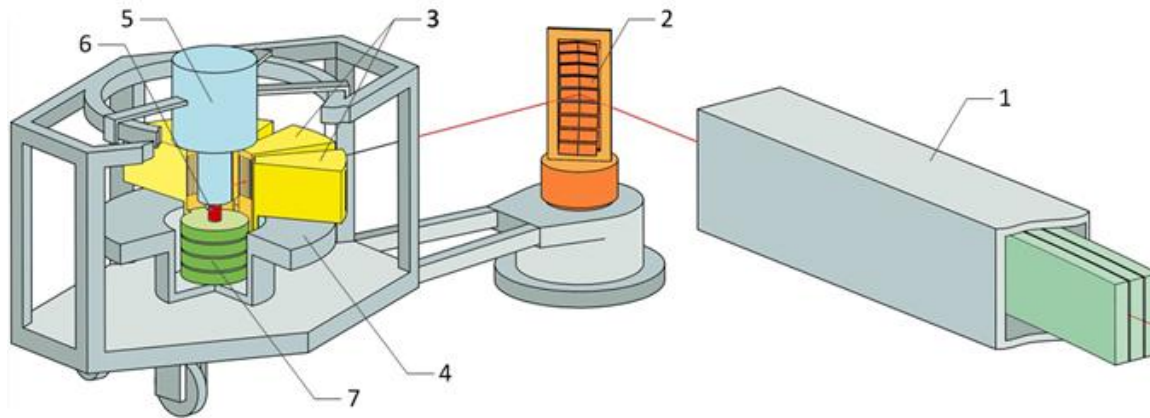


Экспериментально полученное значение температуры Кюри $\Theta = -10 \pm 1$ K указывает на преобладание **АФМ** взаимодействия. Согласно теоретическим расчетам как внутри- так и межслоевые обменные параметры являются **АФМ**

Цель работы: детальное описание кристаллической структуры соединения

Дифракционный эксперимент

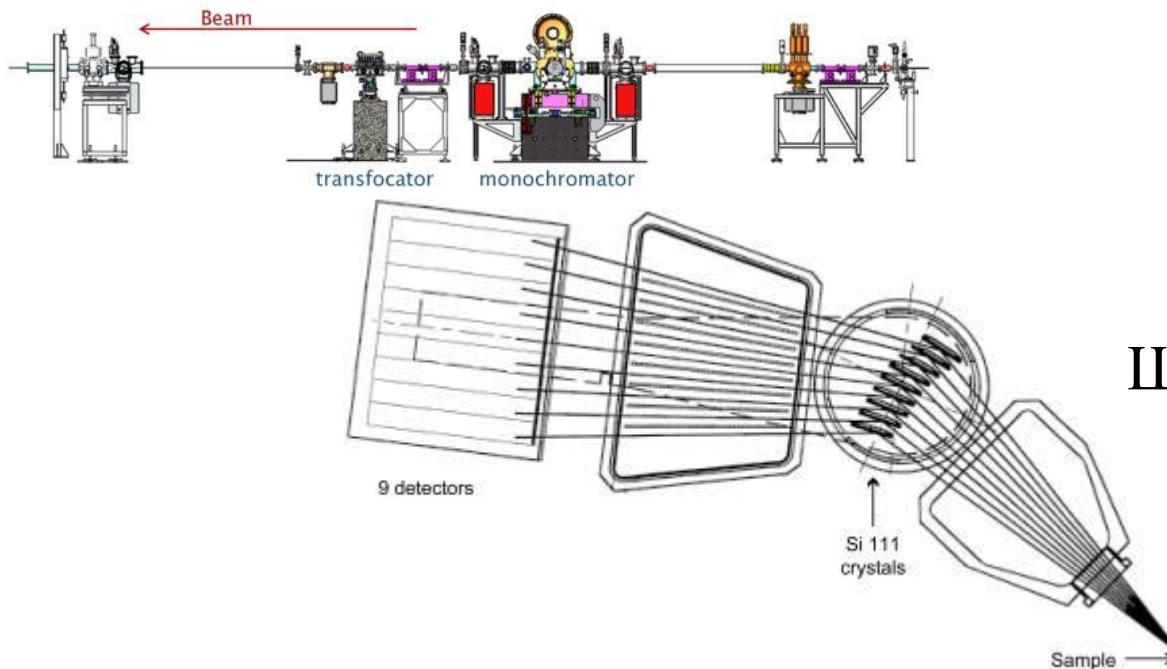
SSPD, ПИЯФ



$$\lambda = 1.7526 \text{ \AA}$$
$$4^\circ < 2\Theta < 160^\circ$$

Шаг сканирования 0.1°

ID-22, ESRF

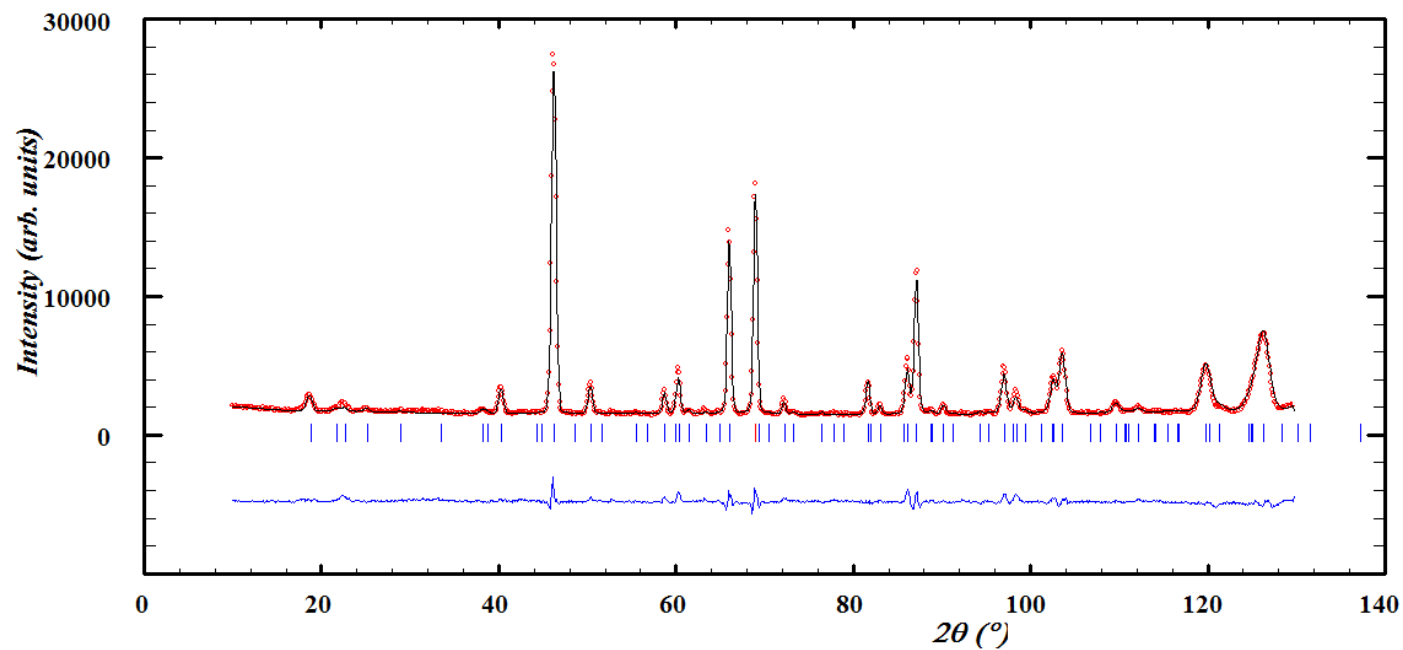
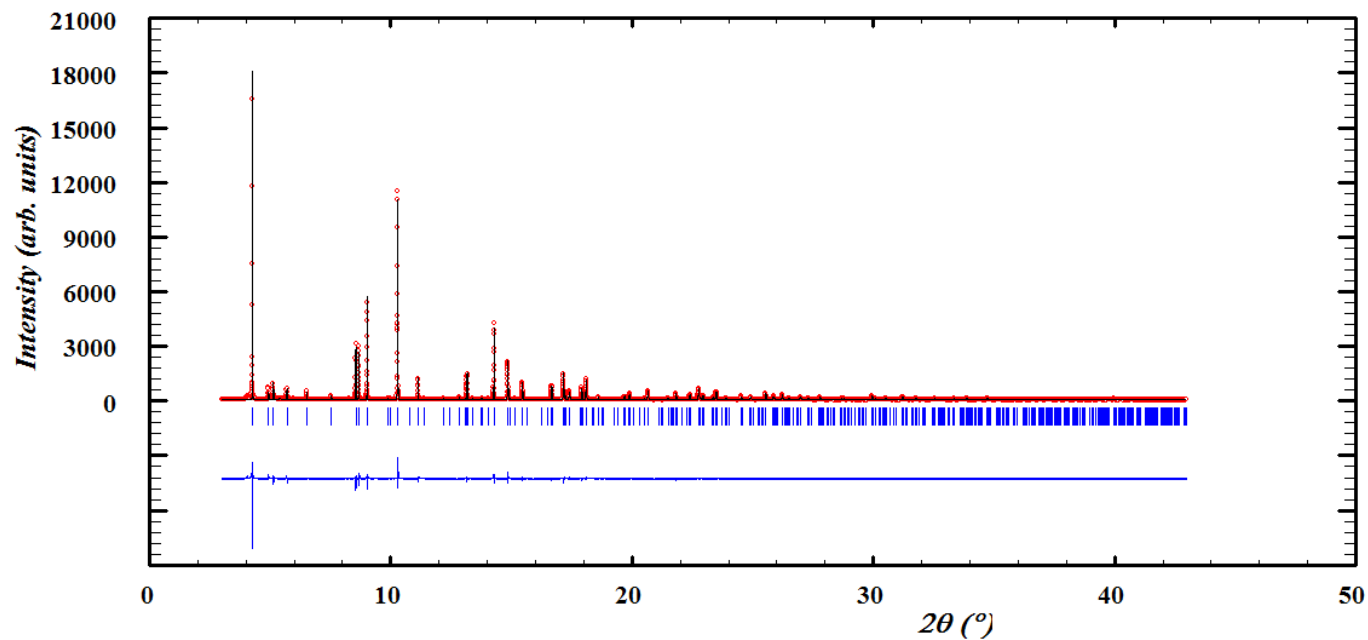


$$\lambda = 0.4 \text{ \AA}$$

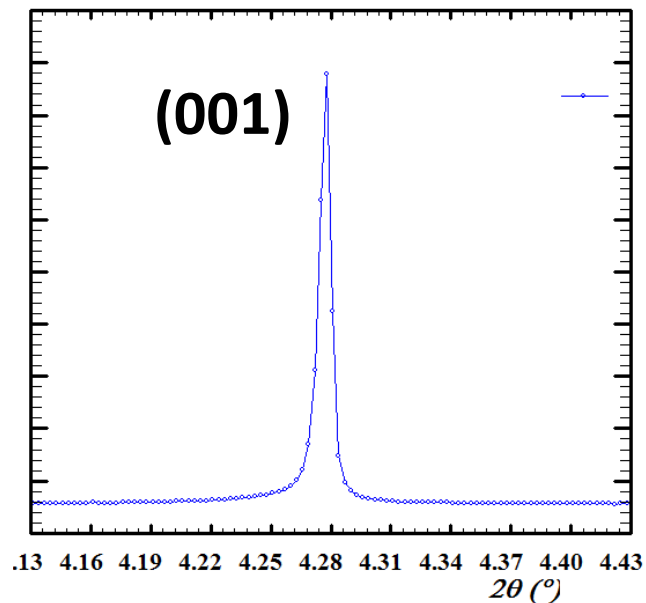
$$3^\circ < 2\Theta < 43^\circ$$

Шаг сканирования 0.003°

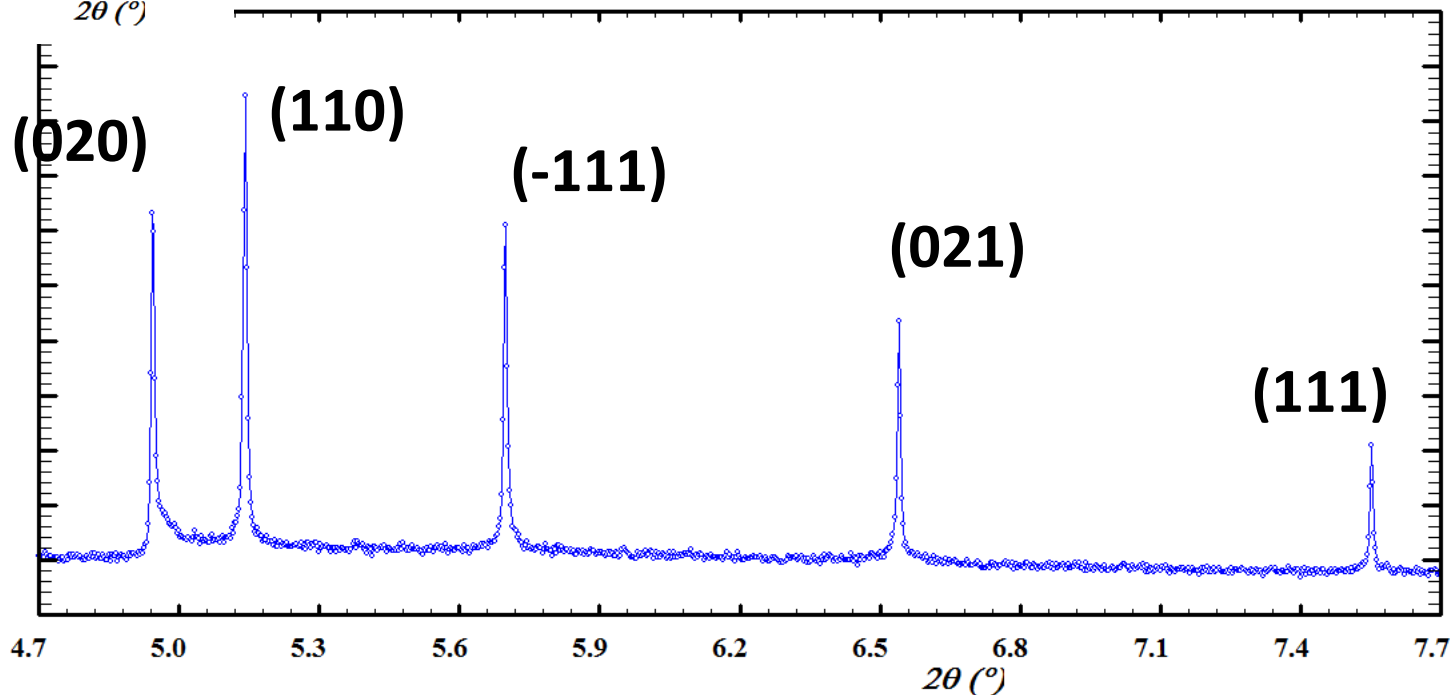
Результаты



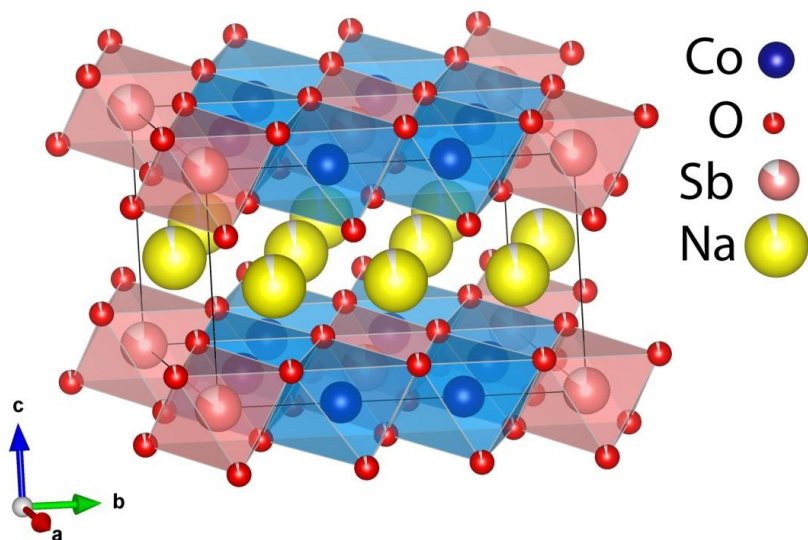
Результаты



Анизотропия формы пиков и их FWHM для различных систем плоскостей



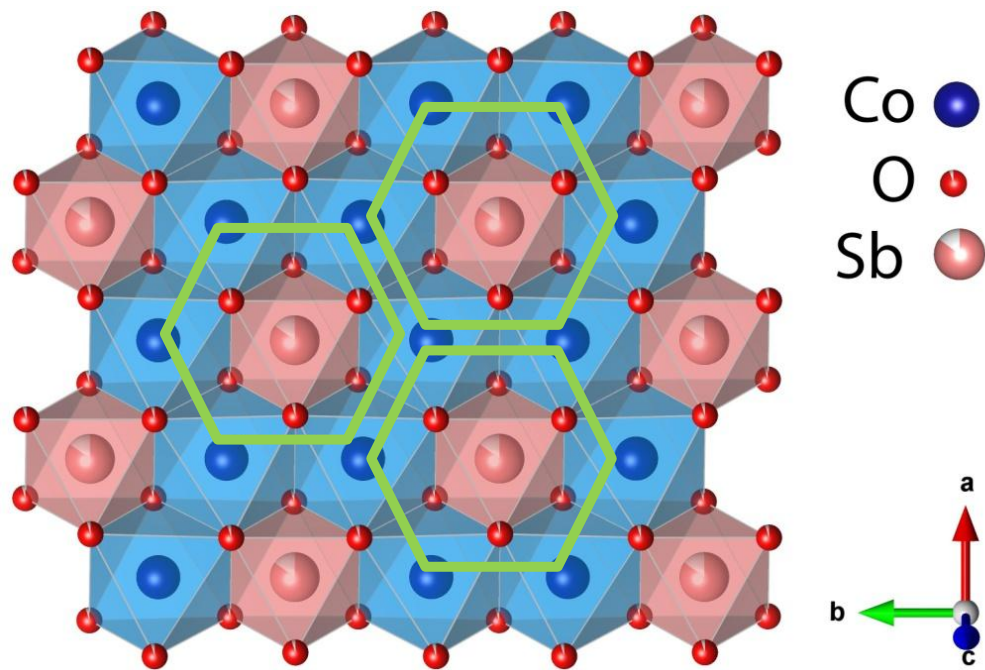
Результаты



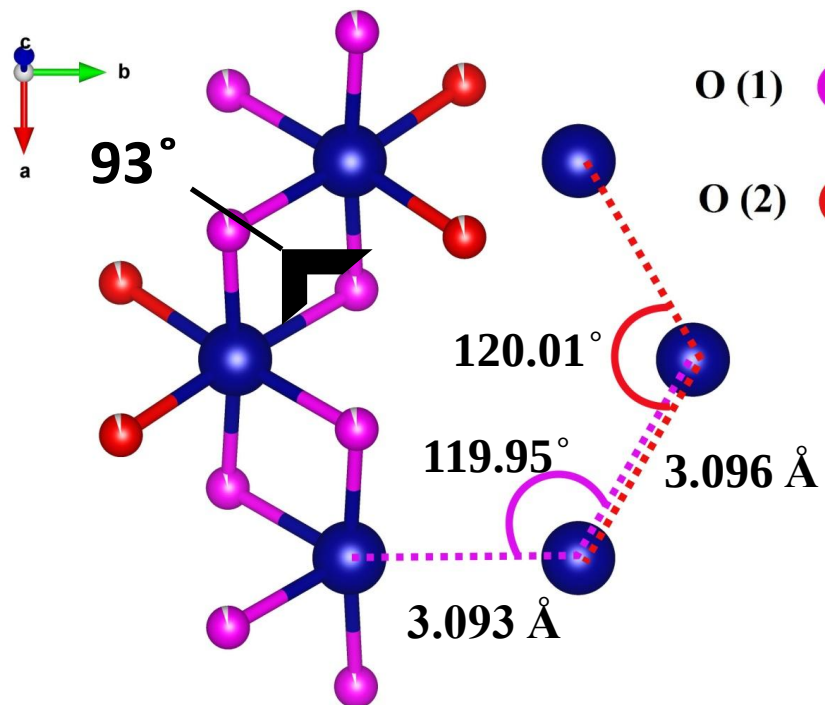
Ат.	x	y	z	B, Å ²
Co	0	2/3	0	0.128(4)
Sb	0	0	0	0.223(4)
O(1)	0.267(2)	0.342(1)	0.795(8)	0.129(5)
O(2)	0.252(2)	0.5	0.5	1.596(6)
Na(1)	0	0.5	0.5	0.394(8)
Na(2)	0.5	0.332(1)	0.5	0.842(7)

$a = 536479(3) \text{ \AA}$, $b = 9.27899 \text{ \AA}$, $c = 5.65544 \text{ \AA}$,
 $\beta = 108.4938(4)^\circ$

MO₂ слои представляют собой гексагонально упакованные **CoO₆** октаэдры, в центре каждого гексагона расположен октаэдр **SbO₆**

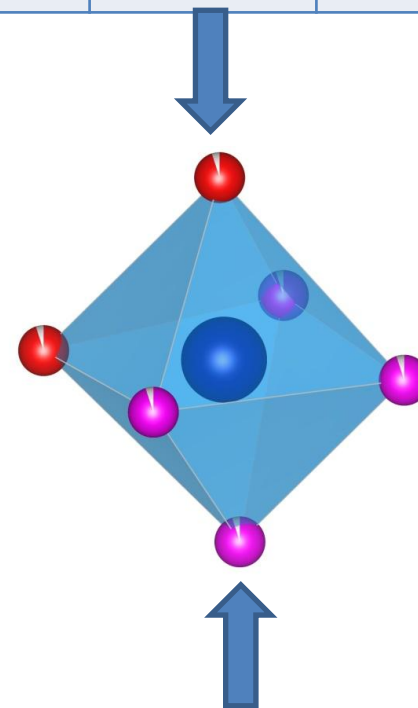
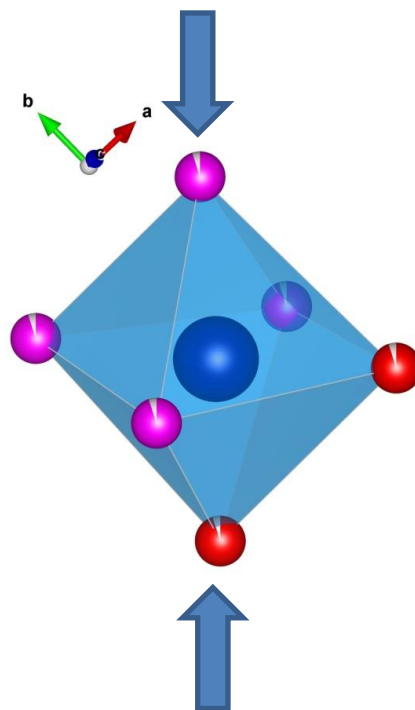


Результаты



Co-O(1)	2.112(6)	Sb-O(1)	2.031(5)
Co-O(2)	2.151(5)	Sb-O(2)	2.045(8)
Co-O(1)	2.149(6)	Sb-O(1)	2.031(5)

Локальное искажение окружения ионов Co: Тетрагональное увеличение CoO₆ октаэдров.



Спасибо за внимание!