

УДК 539.26

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ КООРДИНАТ ВНУТРЕННИХ АТОМОВ  
ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ ФЕРРИТОВ-ШПИНЕЛЕЙ  
СОСТАВА КОБАЛЬТ-МЕДЬ-ЦИНК (MEFE<sub>2</sub>O<sub>4</sub>)**

<sup>1</sup>Абдрасилова В.О., <sup>1</sup>Адибаев Б.М., <sup>1</sup>Алмабаева Н.М., <sup>2</sup>Назарбек Т.С., <sup>3</sup>Шамбулов Н.Б.

<sup>1</sup>Казахский национальный медицинский университет им. С.Д. Асфендиярова,  
Алматы, e-mail: Cholpan\_69@mail.ru;

<sup>2</sup>Международный казахско-турецкий университет им. Х.А. Яссави;

<sup>3</sup>Казахский национальный исследовательский технический университет им. К.И. Сатпаева, Алматы

В данной статье описывается метод определения координат внутренних атомов и узлов элементарной ячейки кристаллической структуры путём деления вектора трансляции. Приведены рассчитанные координаты окта- и тетраузлов, координаты атомов ГЦК решетки, уравнения плоскостей в которых располагаются эти атомы и расстояния этих плоскостей.

**Ключевые слова:** элементарная ячейка, феррит-шпинели, трансляционный вектор, межатомное расстояние, межплоскостное расстояние, координатная калибровка

**DETERMINING THE COORDINATES OF INTERNAL ATOMS OF THE UNIT CELL  
OF SPINEL FERRITES OF COBALT-COPPER-ZINC (MEFE<sub>2</sub>O<sub>4</sub>)**

<sup>1</sup>Abdrasilova V.O., <sup>1</sup>Adibayev B.M., <sup>1</sup>Almabayeva N.M., <sup>2</sup>Nazarbek T.S., <sup>3</sup>Shambulov N.B.

<sup>1</sup>Kazakh National Medical University named after S.D. Asfendiyarov, Almaty, e-mail: Cholpan\_69@mail.ru;

<sup>2</sup>Turkish-Kazakh International University named after H.A. Yesevi;

<sup>3</sup>Kazakh National Research Technical University named after K.I. Satpayev, Almaty

This article describes the method of determining the coordinates of the internal atoms and the nodes of the unit cell of the crystal structure by dividing the translation vector. Shown the calculated coordinates of octa and tetra nodes, the coordinates of the atoms face-centered cubic lattice, the equations of planes in which atoms are arranged and the distance of these planes.

**Keywords:** Unit cell, spinel-ferrites, translational vector, interatomic distance, interplanar space, coordinate calibration

Структура ферритов-шпинелей составляет кубическую гранецентрированную решетку, которая относится к пространственной группе  $O_h^7$  (Fd3m). Обозначение химической формулы  $MeFe_2O_4$  происходит от минерала  $MgAl_2O_4$ .

Кубическая элементарная ячейка образуется при присоединении восьми кубов (октантов) А и В, которые содержат 8 молекул  $MeFe_2O_4$ . Согласно [1] элементарная трансляция выбрана по направлению  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $a_3$  которые направлены вдоль

$$a_1 = \frac{a}{2} \{1, 1, 0\}; a_2 = \frac{a}{2} \{0, 1, 1\};$$

$$a_3 = \frac{a}{2} \{1, 0, 1\},$$

то окта и тетра узлы описываются координатами

$$\rho_1^A = (0,0,0), \rho_2^A = (0,1,0), \rho_3^A = (1,0,0),$$

$$\rho_4^A = (0,0,1), \rho_5^A = (1,1,0), \rho_6^A = (0,1,1),$$

$$\rho_7^A = (1,0,1), \rho_8^A = (1,1,1), \rho_9^A = (1/2,1/2,0),$$

$$\rho_{10}^A = (0,1/2,1/2), \rho_{11}^A = (1,1/2,1/2),$$

$$\rho_{12}^A = (1/2,0,1/2), \rho_{13}^A = (1/2,1/2,1),$$

$$\rho_{14}^A = (1/2,1,1/2).$$

Для описания положения ионов кислорода вводят гранецентрированную кубическую (ГЦК) решетку с началом в узле  $\frac{1}{8} (1, 1, 1)$ . Поэтому, для нахождения истинного положения ионов кислорода вводят параметр  $u$ , геометрический смысл которого – смещение тетраузла от местоположения на расстояние  $a \left( u - \frac{3}{8} \right) \sqrt{3}$  при  $u > \frac{3}{8}$ .

Таким образом, для описания кристаллической структуры ферритов-шпинелей вводится два вектора элементарной трансляции и координаты анионов и катионов определяются отдельно. Данный метод дает описание элементарной ячейки с выбранной элементарной трансляцией, расстоянием от начального узла с координатами (0, 0, 0) до узла с координатами (1, 1, 1) вдоль на-

правления  $\{111\}$ . Элементарная трансляция – вектор  $\rho$  направлен вдоль направления  $\{111\}$ . Тогда от точки с координатами  $(0, 0, 0)$  до точки  $(1,1,1)$  координаты атомов ГЦК решетки определяются:

$$\begin{aligned} \rho_1^A &= (0,0,0), \rho_2^A = \left(\frac{4}{8}, 0, \frac{4}{8}\right), \\ \rho_3^A &= \left(\frac{4}{8}, \frac{4}{8}, 0\right), \rho_4^A = \left(0, \frac{4}{8}, \frac{4}{8}\right), \\ \rho_5^A &= \left(1, 1, \frac{4}{8}\right), \rho_6^A = \left(\frac{4}{8}, 1, 1\right), \\ \rho_7^A &= \left(1, \frac{4}{8}, 1\right), \rho_8^A = (1,1,1). \end{aligned}$$

ГЦК решетку составляет часть тетраэдрических атомов, и эта элементарная ячейка полностью удовлетворяет трансляционной симметрии ферритов-шпинелей.

Октаионы, остальная часть тетраионов и ионы кислорода находятся внутри данной ГЦК решетки. Чтобы описать координаты внутренних узлов элементарной ячейки кристаллической структуры был предложен метод деления вектора трансляции [2, 3].

В элементарной ячейке диагональ описывается координатами  $(1,1,1)$ , координаты сторон куба определяются как  $a(1, 0, 0)$ ,  $a(0, 1, 0)$ , и  $a(0, 0, 1)$ . Если поделим вектор трансляции на восемь частей, то стороны куба также делятся на восемь частей. И внутри ГЦК решетки появляются восемь плоскостей вдоль направления  $\{0,0,1\}$ ,  $\{0,1,1\}$  а также вдоль  $\{1,1,1\}$ .

Как известно, элементарная ячейка ферритов-шпинелей состоит из 56 атомов, из них ячейкообразующие атомы  $8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$ , а оставшиеся 52 атома располагаются внутри элементарной ячейки с координатами:

1-атом (1/8, 1/8, 1/8)	19-атом (7/8, 7/8, 3/8)	37-атом (5/8, 5/8, 5/8)
2-атом (3/8, 1/8, 1/8)	20-атом (5/8, 7/8, 3/8)	38-атом (3/8, 5/8, 5/8)
3-атом (5/8, 1/8, 1/8)	21-атом (1/8, 7/8, 3/8)	39-атом (2/8, 2/8, 6/8)
4-атом (7/8, 3/8, 1/8)	22-атом (1/8, 3/8, 3/8)	40-атом (6/8, 6/8, 6/8)
5-атом (7/8, 5/8, 1/8)	23-атом (3/8, 3/8, 3/8)	41-атом (3/8, 1/8, 7/8)
6-атом (7/8, 7/8, 1/8)	24-атом (5/8, 3/8, 3/8)	42-атом (5/8, 1/8, 7/8)
7-атом (5/8, 7/8, 1/8)	25-атом (5/8, 5/8, 3/8)	43-атом (7/8, 1/8, 7/8)
8-атом (3/8, 7/8, 1/8)	26-атом (3/8, 5/8, 3/8)	44-атом (7/8, 3/8, 7/8)
9-атом (1/8, 5/8, 1/8)	27-атом (1/8, 1/8, 5/8)	45-атом (7/8, 5/8, 7/8)
10-атом (1/8, 3/8, 1/8)	28-атом (5/8, 1/8, 5/8)	46-атом (5/8, 7/8, 7/8)
11-атом (3/8, 3/8, 1/8)	29-атом (7/8, 1/8, 5/8)	47-атом (3/8, 7/8, 7/8)
12-атом (5/8, 5/8, 1/8)	30-атом (7/8, 3/8, 5/8)	48-атом (1/8, 7/8, 7/8)
13-атом (2/8, 6/8, 2/8)	31-атом (7/8, 7/8, 5/8)	49-атом (1/8, 5/8, 7/8)
14-атом (6/8, 2/8, 2/8)	32-атом (3/8, 7/8, 5/8)	50-атом (1/8, 3/8, 7/8)
15-атом (1/8, 1/8, 3/8)	33-атом (1/8, 7/8, 5/8)	51-атом (3/8, 5/8, 7/8)
16-атом (3/8, 1/8, 3/8)	34-атом (1/8, 5/8, 5/8)	52-атом (5/8, 3/8, 7/8).
17-атом (7/8, 1/8, 3/8)	35-атом (3/8, 3/8, 5/8)	
18-атом (7/8, 5/8, 3/8)	36-атом (5/8, 3/8, 5/8)	

Зная координаты атомов, несложно найти плоскости, в которых располагаются эти атомы. Основными в кубической решетке являются направления  $\{100\}$ ,  $\{110\}$  и  $\{111\}$ . Вдоль направления  $\{100\}$  расположены 8 параллельных плоскостей, уравнение плоскости

$$\frac{1}{8}(x - n \cdot d_{100}) = 0,$$

где  $x$  – координаты атомов,  $d$  – межплоскостное расстояние равно  $\frac{1}{8}a$ . Также определяется уравнения плоскостей по направлению  $[110]$ , всего 8 плоскости которые описываются в следующем виде:

$$-1(x + z - d) = 0,$$

где  $d$  – межплоскостное расстояние равно  $\frac{\sqrt{2}}{8}a$ ,  $n$  – номер плоскости [2], [3].

Как видно, в плоскости вдоль направления  $[100]$  тетраэдрические атомы составляют отдельную плоскость, а октаионы и ионы кислорода занимают смешанные положения. В семействе плоскостей  $\{110\}$  одну плоскость могут составлять атомы разного сорта.

Наибольший интерес представляют плоскости вдоль направления  $\{111\}$ . В семействе плоскостей  $\{111\}$  в каждой плоско-

сти лежат атомы одного сорта. Количество плоскостей – 8, одна из них пустая плоскость, т.е. в этой плоскости в узлах атомов нет. Можно показать уравнения плоскостей слоев:

1-слой:	$-2(x + y + z) = 0$	(А-атомы)
2-слой:	$\frac{1}{16}(x + y + z - \frac{3}{8}) = 0$	(ионы кислорода).
3-слой:	$\frac{1}{16}(x + y + z - \frac{5}{8}) = 0$	(В-атомы).
4-слой:	$-\frac{1}{16}(x + y + z - \frac{7}{8}) = 0$	(ионы кислорода).
5-слой:	$\frac{1}{4}(x + y + z - 1) = 0$	(А-атомы).
6-слой:	$\frac{1}{16}(x + y + z - \frac{9}{8}) = 0$	(В-атомы).
7-слой:	$\frac{1}{4}(x + y + z - \frac{5}{4}) = 0$	(А-атомы).
8-слой:	$-\frac{1}{16}(x + y + z - \frac{11}{8}) = 0$	(ионы кислорода).
9-слой:	$\frac{1}{16}(-x - y - z + \frac{13}{8}) = 0$	(В-атомы).
10-слой:	$\frac{1}{16}(x + y + z - \frac{15}{8}) = 0$	(ионы кислорода).
11-слой:	$\frac{1}{4}(x + y + z - 2) = 0$	(А-атомы).
12-слой:	$-\frac{1}{16}(x + y + z - \frac{17}{8}) = 0$	(В-атомы).
13-слой:	$\frac{1}{4}(x + y + z - \frac{9}{4}) = 0$	(А-атомы).
14-слой:	$-\frac{1}{16}(x + y + z - \frac{19}{8}) = 0$	(ионы кислорода).

В узлах 15-слоя атомов нет.

Межплоскостные расстояния:

- $d_{1,2} = 0.2165$
- $d_{2,3} = 0.1443$
- $d_{3,4} = 0.1443$
- $d_{4,5} = 0.0722$
- $d_{5,6} = 0.0722$
- $d_{6,7} = 0.0722$
- $d_{7,8} = 0.1443$
- $d_{8,9} = 0.1443$
- $d_{9,10} = 0.0722$
- $d_{10,11} = 0.0722$
- $d_{11,12} = 0.0722$
- $d_{12,13} = 0.0722$
- $d_{13,14} = 0.0722$

Расстояние от 14-плоскости до узла (1,1,1) 0,3608.

$$(1.3712 + 0,3608) \times 8.398 \text{ \AA}^0 = 14.545 \text{ \AA}^0$$

$$R_{\text{диагональ } \{111\}} = a\sqrt{3} = 14.546 \text{ \AA}^0.$$

Для построения рисунка расположения атомов в этих плоскостях используем модель твердых шаров. Модельная элементарная ячейка состоит из целочисленных координат, тогда радиус плотноупакованного шара равен 1, а радиусы ионов металла меньше чем 1. Для нахождения истинного положения атомов необходима калибровка

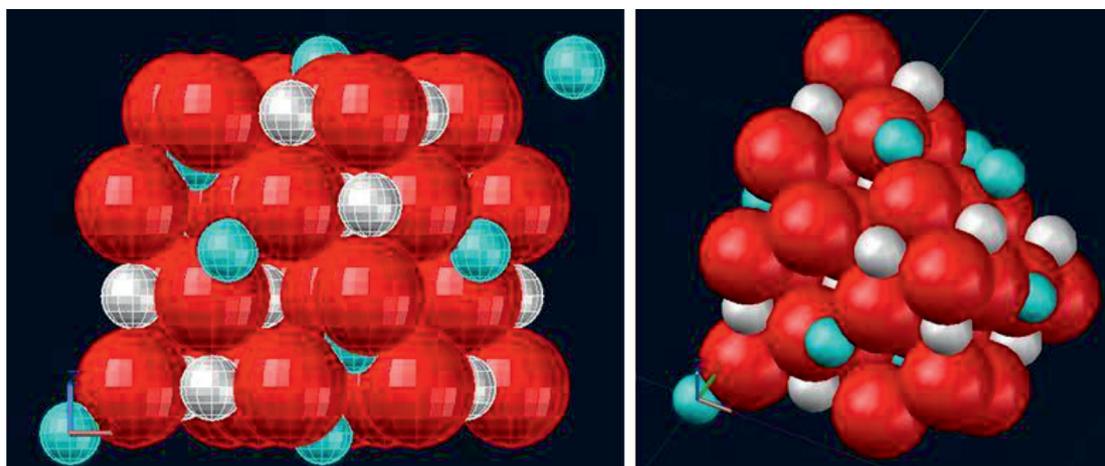
элементарной ячейки. Нам известны экспериментальные значения постоянной решетки из рентгеноструктурного анализа [4]. Например, для ионов  $Co_{0,675}Cu_{0,225}Zn_{0,1}Fe_2O_4$  значение постоянной решетки  $a = 8,398 \text{ \AA}$ . Тогда радиус плотноупакованного иона равен  $a/8 = 1,049 \text{ \AA}$ . Это же является межплоскостным расстоянием  $d$ .

Узловой тетраэдрический атом металла с координатой  $(0,0,0)$  берем как 0-слой, тогда первый слой образуют атомы кислорода в центре с координатой  $(1,1,1)$ , вокруг которой во втором круге лежат шесть атомов кислорода с координатами  $(-1,3,1)$ ,  $(-1,1,3)$ ,  $(1,-1,3)$ ,  $(3,-1,1)$ ,  $(3,1,-1)$ ,  $(3,1,-1)$  и  $(1,3,-1)$ .

В этой плоскости следующие 12 атомов кислорода занимают два круга, т.е. третий круг с радиусом  $r < 2r_0$ , и четвертый круг с радиусом  $r = 2r_0$ , где  $r_0$  – радиус атома кислорода (рисунок).

Второй слой образуют атомы октаэдрических ионов металла. Центр не занят, первый круг образован тремя атомами металла, второй круг не занят и т.д. Строение тетраэдрической плоскости напоминает круг из шести атомов с вакантным местом в центре.

Третий слой образованный атомами кислорода является плотноупакованным, атомы этого слоя расположены над лунками атомов 1-го кислородного слоя.



*Построение кристаллографических плоскостей атомами элементарной ячейки ферритов-шпинелей в направлении  $[111]$*

Четвертый слой образован тетраэдрическими атомами металла, в центре тетраэдрический атом с координатой  $(3,3,3)$ . Пятый слой образуют октаэдрические атомы металлов, шестой слой образован тетраэдрическими атомами. Межплоскостные расстояния этих слоев  $d_{4-5} = 0.0722a$ ,  $d_{5-6} = 0.0722a$ ,  $d_{6-7} = 0.0722a$  в три раза меньше по сравнению с межплоскостным расстоянием кислорода  $d_{2-4} = 0.2165a$ . Седьмой слой образован плотноупакованными атомами кислорода, координаты атома в центре  $(5,5,5)$ , и повторяет расположение атомов кислорода третьего слоя. Восьмой слой образован октаэдрическими атомами металлов, а следующий девятый слой плотноупакованными атомами кислорода. После девятого слоя опять идут три слоя образованные октаэдрическими и тетраэдрическими ионами метал-

лов. Но расположение атомов металлов в 10-, 11-, 12-слоях не совпадают с расположением атомов металлов в 4-, 5-, 6- слоях. В 12-слое расположены тетраэдрические атомы металлов, координаты атома в центре  $(6,6,6)$ . Очередной В-слой образован плотноупакованными атомами кислорода. Последний 15-слой не занят атомами, т.е. пустой слой. Дальнейшее движение вдоль направления  $\{111\}$  приводит к повторению этих 15-ти слоев в обратном порядке.

#### Список литературы

1. Крупичка С. Физика ферритов и родственных им магнитных окислов. – М.: Мир, 1976. – Т. 1. – С. 98-105.
2. Ильин В.А., Позняк Э.Г. Аналитическая геометрия. – Москва: Наука, 1981. – С.47-81.
3. Жидков Н.П., Щедрин Б.М. Геометрия кристаллического пространства. – Москва: МГУ, 1988. – С. 192-198.
4. Шаскольская М.П. Кристаллография. – Москва: Высшая школа, 1976. – С. 97-132, 169-171.