

УДК: 546.46

Лагойко А.М., студентка 1 курсу ОС «Бакалавр»

Національний університет біоресурсів і природокористування України

МАГНІТНІ ВЛАСТИВОСТІ В СТРУКТУРІ ФОСФАТУ RbMnP_2O_7 .

Науковий керівник: кандидат хім. наук, доцент Лаврик Р.В.

Ключові слова : дифосфати , магнітна властивість

Визначено кристалічні та магнітні параметри структури RbMnP_2O_7 . Структура кристала має параметри: $a = 7.3672(2)$, $b = 9.6782(2)$, $c = 8.6467(2)$ Å, $\beta = 105.4880$, просторова група $P2_1/c$, була визначена з дифракції рентгенівських та нейтронних порошоків, і виявлено, що вона є ізоструктурною з RbFeP_2O_7 . Вимірювання магнітної сприйнятливості показали, що RbMnP_2O_7 поводить себе як парамагнетик Кюри-Вейса при високих температурах і має антиферомагнітні властивості нижче температури 20 К.

Дифосфати тривалентних перехідних металів стехіометрії AIMPP_2O_7 (A = лужний метал, $M = V, Fe, Mo$) виявляють декілька структурних типів. Рамки цих фаз складаються з коорнер-поділу MO_6 октаедра і групи P_2O_7 . Величина катіонів лужних металів відіграє важливу роль у структурах кристала AIMPP_2O_7 . Дифосфатна група дуже пристосована до вимог зв'язування інших груп у структурі шляхом регулювання кута з'єднання $P-O-P$ та конфігурації двох фосфатів тетраедра. У нашому безперервному вивченні взаємодій магнітного обміну в цих системах дослідили ядерну та магнітну структуру RbMnP_2O_7 , використовуючи дані дифракції нейтронів, записані на HRPT з довжиною хвилі 1,886 Å при 2 К і 100 К. Аналіз проводився за допомогою набору програм GSAS.

Отримана в результаті ядерна структура складалася з структури з кутом розділення MnO_6 октаедральних поліедрів та групи P_2O_7 , створюючи пересічні тунелі з катіоном Rb^+ , розташованим на перетині цих тунелів. Отримано висновок, що восьмикутник MnO_6 відображає нетипове $(2 + 2 + 2)$ спотворене розташування (2 довгі, 2 середні та 2 короткі зв'язки) замість традиційного $(4 + 2)$ – тобто спотворення Яна-Тллера, очікуваного для Mn^{+3} . Дифосфатна група містила два спотворені тетраедри PO_4 , з подовженими зв'язками $P-O$ та коротшими зв'язками до кінцевих атомів O . Довжина зв'язків $P-O$ в фосфорнокисневих тетраедрах двох груп $[P_2O_7]$ лежить у досить широкому інтервалі: 1,495-1,636 Å. При цьому в групі $P(3)P(4)O_7$ довжина зв'язків $P-O$ значно коротша, ніж в групі $P(1)P(2)O_7$.

Після того як ядерний внесок був пристосований для (температура 4К) нейтронної дифракційної картини, додаткові піки та інтенсивність були очевидними і були визначені як магнітна дифракція. Згодом було встановлено, що ядерні та магнітні центри відповідали магнітній просторовій групі $P2_1/c$, магнітні моменти лежали в площині ac , в результаті чого виміряно момент -3,65 мДб. Встановлено, що відносний напрям чотирьох спінів Mn в елементарній комірці $(0,23, 0,90, 0,26) +$, $(0,23, 0,60, 0,76) -$, $(0,77, 0,40, 0,25) +$, $(0,77, 0,10, 0,75) -$, орієнтований близько до двох довгих осьових зв'язків $Mn-O$. Цікаво, що ця магнітна структура складалася як з антиферомагнітної, так і з феромагнітної обмінної взаємодії, опосередкованої через шляхи $Mn-O-Mn-O$.