

А. С. ИЛЮШИН

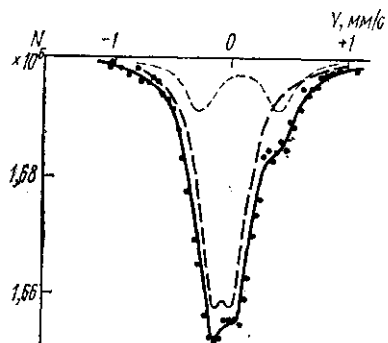
СВЕРХТОНКАЯ СТРУКТУРА МЁССБАУЭРОВСКОГО СПЕКТРА ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКОГО СОЕДИНЕНИЯ FeMn_2Al

В работе [1] было установлено, что при температуре 650° интерметаллическое соединение FeMn_2Al изоструктурное $\beta\text{-Mn}$ (пространственная группа $R4_13$) и его мёссбауэровский спектр обладает сверхтонкой структурой (СТС), однако детальной интерпретации СТС мёссбауэровского спектра интерметаллида FeMn_2Al в [1] сделано не было.

В настоящей работе была проведена расшифровка СТС мёссбауэровского спектра интерметаллида FeMn_2Al на основе данных о его кристаллической структуре.

Методика синтеза интерметаллидов заданной стехиометрии подробно описана в работах [1, 2]. Мёссбауэровские спектры были получены при комнатной температуре на порошковых образцах интерметаллида FeMn_2Al в ЯГР-спектрометре «Эльрон» с источником $\text{Co}^{57}(\text{Pd})$. Калибровка спектрометра производилась по эталонному образцу карбонильного $\alpha\text{-Fe}$.

Типичный мёссбауэровский спектр интерметаллида FeMn_2Al показан на рисунке. Видно, что он обладает сверхтонкой структурой и содержит по крайней мере три линии различной интенсивности. Данные магнитных измерений, проведенных в работе [2] на интерметаллидах изоструктурных $\beta\text{-Mn}$, свидетельствуют о том, что все эти соединения парамагнетики. Это показывает, что при интерпретации СТС мёссбауэровских спектров интерметаллида FeMn_2Al следует учитывать только квадрупольное взаимодействие и тип кристаллической структуры.



Мёссбауэровский спектр поглощения интерметаллида FeMn_2Al (нуль скорости соответствует центру мёссбауэровского спектра $\alpha\text{-Fe}$ при комнатной температуре)

Из работ [3—5] известно, что $\beta\text{-Mn}$ обладает сложной атомно-кристаллической структурой и содержит в кубической элементарной ячейке 20 атомов, находящихся в двух структурно-неэквивалентных позициях I и II. В позициях типа I размещено 8 атомов, а в позициях типа II—12 атомов, причем и в той и в другой позициях атомы не имеют сферически-симметричного окружения. Вследствие этого можно ожидать появления СТС мёссбауэровского спектра из-за квадрупольного взаимодействия. Известно [6], что квадрупольное взаимодействие в парамагнетиках дает симметричный дублет в мёссбауэровских спектрах, если отсутствует кристаллическая анизотропия.

Анализ экспериментальных мёссбауэровских спектров интерметаллида FeMn_2Al проводился в предположении, что атомы железа могут занимать как позиции типа I, так и позиции типа II. Каждой позиции соответствует свой мёссбауэровский спектр с соответствующей

щим изомерным химическим сдвигом δ_I или δ_{II} . Кроме того, предполагалось, что в обеих позициях имеет место квадрупольное расщепление мёссбауэровских линий. При построении теоретических спектров варьировались такие параметры, как величины изомерных химических сдвигов δ_I и δ_{II} , величины квадрупольного расщепления дублетов ΔE_I и ΔE_{II} , а также относительная интенсивность спектральных дублетов I_I/I_{II} . Наилучшее согласие расчета с экспериментом было получено при следующих параметрах теоретического спектра (см. таблицу).

На рисунке пунктиром показаны дублеты, отвечающие позициям I и II структуры β -Mn, а сплошной линией изображен теоретический мёссбауэровский спектр для выбранной модели. Видно, что он достаточно хорошо согласуется с экспериментом.

Позиция	δ , мм/с	ΔE , мм/с	Интегральные интенсивности дублетов, от.ед
I	+0,053	0,69	300
II	-0,069	0,12	1000

Приведенные в таблице данные о величинах изомерного химического сдвига линий мёссбауэровского спектра интерметаллида $FeMn_2Al$ свидетельствуют о том, что электронные состояния атомов железа, занимающих позиции типа I и II, отличаются как друг от друга, так и от электронного состояния атомов железа в эталонном образце α -Fe с ОЦК структурой. Величины квадрупольного расщепления дублетов I и II также отличаются друг от друга, причем в позиции типа I величина квадрупольного расщепления ΔE_I больше, чем в позиции типа II. Этот факт хорошо согласуется с данными об атомно-кристаллической структуре β -Mn. Действительно, в позициях типа I атомное окружение сильнее отличается от сферически-симметричного по сравнению с позициями типа II.

При хаотическом распределении атомов железа по позициям I и II в интерметаллиде $FeMn_2Al$ отношение интегральных интенсивностей мёссбауэровских дублетов I и II пропорционально отношению числа позиций типа I к числу позиций типа II в структуре β -Mn, которое равно $8/12=0,667$. Для экспериментального спектра это отношение оказалось равным 0,3. Такой результат показывает, что в интерметаллиде $FeMn_2Al$ атомы железа преимущественно сосредоточены в позициях типа II, т. е. наблюдается упорядочение атомов железа в структуре β -Mn. Полученная в данной работе расшифровка СТС мёссбауэровского спектра интерметаллида $FeMn_2Al$ позволяет экспериментально изучать явление упорядочения атомов железа в соединениях и сплавах, изоструктурных β -Mn.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wallace W. E., Ilyushin A. S., Lopez D. Proc. Intern. Conf. in Mössbauer Spectroscopy (Poland), 1975, 2, 99.
2. Ilyushin A. S., Wallace W. E. J. Sol. Stat. Chem., 1976, 17, 385.
3. Preston G. D. Phil. Mag., 1928, 5, 1207.
4. Крипьякевич П. И. Кристаллография, 1960, 5, 273.
5. Kimball C. W., Tison J. K., Nevitt M. V. J. Appl. Phys., 1967, 38, 1153.
6. Химические применения мёссбауэровской спектроскопии. Под ред. В. И. Гольданского. М., 1970.

Поступила в редакцию
21.03.79