

## 用中子衍射方法分析 $Y_2Fe_{17-x}Si_x$ ( $X = 2$ ) 的结构

陈东风 丁永凡

(中国原子能科学研究院核物理所, 北京, 102413)

在研究稀土永磁材料  $Y_2Fe_{17-x}Si_x$  ( $X = 2$ ) 的磁性时, 发现用 Si 取代 Fe 后, 对提高  $T_c$  的效果很明显。中子衍射证明: Si 择优占据 4f 晶位(哑铃位置), 且 Fe 的磁矩平行于 b 轴。

**关键词** 中子衍射 磁结构

稀土永磁材料磁性能优异, 在航天、航空、仪器、仪表方面具有重要的应用价值, 但其性能仍然不能满足尖端技术日益增长的需要, 尚有待于进一步的开发, 而研究其结构和磁性能的关系具有重要的理论与实际的意义。在研究  $Y_2Fe_{15}Si_2$  的磁结构时, 发现用 Si 取代 Fe 对提高居里温度  $T_c$  的效果很明显<sup>[1,2]</sup>。Cubbens 等<sup>[3]</sup>对 Mössbauer 谱的分析得到, Si 是无规则分布, 没有优先占位。这与通常认为  $R_2Fe_{17}$  的居里点低是由于存在哑铃对 Fe 原子的观点相矛盾。为了进一步了解这个性质, 本实验用中子衍射方法测定了 Si 的占位和样品的磁结构。

### 1 实验和结果

将配制好的原料放入真空电弧炉中熔炼而得到块状样品, 再将其研磨成粉状小颗粒。经 X 射线衍射相分析, 证明样品是单相的  $Th_2Ni_{17}$  型结构。然后, 放入钒制样品盒中进行中子衍射测量。测量是在中国原子能科学研究院二轴中子衍射仪上进行的。中子波长  $1.184 \times 10^{-10}m$ , 探测器从  $8^\circ \sim 96^\circ$  以步进  $0.2^\circ$  采用定计数方式收集衍射数据, 在室温(20℃)下, 时间约为 43h。图 1 是所测得的  $Y_2Fe_{15}Si_2$  的中子衍射曲线。

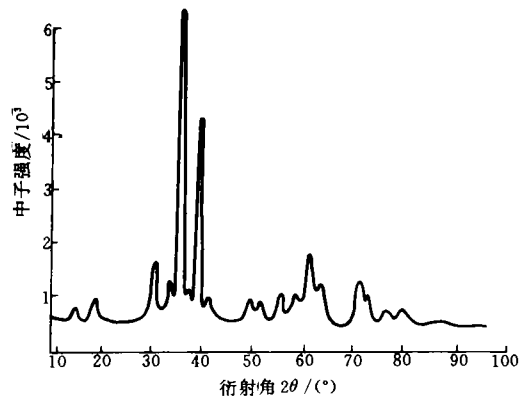


图 1  $Y_2Fe_{15}Si_2$  的衍射图

Fig. 1 Neutron diffraction pattern for  $Y_2Fe_{15}Si_2$

### 2 讨论

中子衍射数据的处理是用国际通用的衍射峰形状分析法(Profile)<sup>[4]</sup>进行的。假定该结构为

收稿日期: 1992-06-22 收到修改稿日期: 1993-11-03

$Th_2Ni_{17}$ 型, Y 占 2b、2d 晶位, 作为初始结构参数进行数据处理, 经过多次拟合, 得到结果列于表 1。表 1 中  $x$ 、 $y$ 、 $z$  为坐标参数,  $N$  为原子数目,  $K_y$  为  $y$  轴方向的磁矩值,  $\mu_B$  为玻尔磁子,  $R_N$  和  $R_M$  为核和磁衍射强度一致性因子,  $R$  为总的一致性因子,  $\chi^2$  为残差值。由表 1 可见, Si 原子进入 6g 晶位较少, 而择优占据 4f (即哑铃) 晶位, Fe 的磁矩平行于  $b$  轴。这些结果与 Mössbauer 的结果<sup>[3]</sup>不一致, 但 Si 的择优进入 4f 晶位, 使 Fe 的负磁交换作用减弱, 相对增强了正的交换作用, 从而使  $T_c$  得到提高, 这是完全合理的。

实验中得到了杨继廉和张百生副研究员的指导, 北京大学林勤副教授提供实验样品, 特此致谢。

表 1  $Y_2Fe_{15}Si_2$  的结构参数  
Table 1 Structure parameters for  $Y_2Fe_{15}Si_2$

原子	位置	$x$	$y$	$z$	$N$	$K_y/\mu_B$
Y	2b	0.00000	0.00000	0.25000	2.00000	0.00000
Y	2d	0.33333	0.66666	0.75000	2.00000	0.00000
Fe	4f	0.33333	0.66666	0.11255	2.902	2.189
Si	4f	0.33333	0.66666	0.11255	1.098	0.00000
Fe	6g	0.50000	0.00000	0.00000	5.768	2.869
Si	6g	0.50000	0.00000	0.00000	0.232	0.00000
Fe	12K	0.16666	0.33333	-0.01028	10.656	1.845
Si	12K	0.16666	0.33333	-0.01028	1.344	0.00000
Fe	12j	0.33235	-0.02807	0.25000	10.674	2.469
Si	12j	0.33235	-0.02807	0.25000	1.326	0.00000

空间群  $63/mmc$ ,  $a = 8.4939 \times 10^{-10}m$ ,  $c = 8.3595 \times 10^{-10}m$ ;

$R = 2.55\%$ ,  $R_N = 2.45\%$ ,  $R_M = 4.92\%$ ,  $\chi^2 = 1.933$ 。

### 参 考 文 献

- 1 Pedziwiatr AT, Wallace WE, Burzo E, et al. Magnetic Properties of  $Y_2Fe_{14-x}M_xB$  Compounds Where  $M = Si$  or  $Cu$ . Solid State Commun, 1987, 61:61.
- 2 Abache C, Oesterreicher H. Structural and Magnetic Properties of  $R_2Fe_{14-x}T_xB$  ( $R = Nd, Y$ ;  $T = Cr, Mn, Co, Ni, Al$ ). J Appl Phys, 1986 60:1114.
- 3 Cubbens PCM, Van der Kraan AM, Jacobos TH, et al.  $^{57}Fe$  and  $^{169}Tm$  Mössbauer Effect and Magnetic Properties of  $Tm_2Fe_{15}M_2$  ( $M = Al, Ca, Si$ ). J Less-common Metal, 1990, 159:173.
- 4 Rietveld HM. A Profile Refinement Method for Nuclear and Magnetic Structure. J Appl Cryst, 1969, 2:65.

## NEUTRON DIFFRACTION STUDY OF $Y_2Fe_{17-x}Si_x$ ( $X = 2$ )

CHEN DONGFENG    DING YONGFAN

(China Institute of Atomic Energy, P. O. Box 275(30), Beijing, 102413)

### ABSTRACT

Crystallographic and magnetic properties of  $Y_2Fe_{17-x}Si_x$  ( $X = 2$ ) are investigated. The substitution of Si for Fe enhances the curie temperature remarkably. Neutron diffraction study on  $Y_2Fe_{15}Si_2$  indicates that there is preferential occupation of Si atoms into the dumbbell Fe site in the structure, and the magnetic moment of Fe is parallel to the b axis.

**Key words**    Neutron diffraction    Magnetic structure