

Исследование методом Ритвельда особенностей кристаллической структуры соединения Zn_2TiO_4

Акимов А.И., Савчук Г.К.

Белорусский национальный технический университет

Синтез тугоплавких соединений с тетрагональной структурой осуществляется различными способами: синтез в водной фазе, метод самораспространяющегося высокотемпературного синтеза, синтез в низкотемпературной плазме водород-кислородного пламени. Указанные методы трудоемкие, требуют специального оборудования и больших затрат энергии.

Данная работа посвящена изучению особенностей кристаллической структуры соединения Zn_2TiO_4 , полученного по керамической технологии с использованием катализатора.

Соединение Zn_2TiO_4 синтезировано из оксидов ZnO и TiO_2 методом твердофазных реакций с использованием катализатора при температуре $850^\circ C$. С целью получения керамик спекание синтезированных порошков производилось при $1100-1200^\circ C$ в течение 2-6 ч в атмосфере воздуха. Средний размер зерен полученных образцов составлял порядка 3-5 мкм. Для уточнения параметров кристаллической структуры использовалась программа "GSAS", работа которой основана на методе Ритвельда. Изучение кристаллической структуры соединения Zn_2TiO_4 осуществлялось в рамках пространственной группы $R4122$.

В результате исследований установлено, что образцы имеют тетрагональную структуру смешанной шпинели вида $Zn(Zn_{0,91}Ti_{0,19})(Ti_{0,91}Zn_{0,19})O_4$ с параметрами элементарной ячейки $a=6.00678 \text{ \AA}$, $c=8.4163 \text{ \AA}$.

Показано, что причиной искажения структуры шпинели является эффект Ян-Теллера. Определены длины межатомных расстояний в октаэдрической А-подрешетке и тетраэдрической В-подрешетке. Установлено, что расстояния между катионами В-В ($B=Ti$) значительно меньше расстояний между катионами А-А ($A=Zn$).

Диэлектрическая проницаемость полученной керамики, измеренная методом плоского конденсатора, составляет порядка 28-29, температурный коэффициент резонансной частоты $<17 \cdot 10^{-6} 1/^\circ C$, добротность составляет $Q \cdot f$ от 10 000 до 25 000 при $f=8,4 \text{ ГГц}$.