

**Количественный анализ твердых растворов  $Mg_{1-x}Me_xO$  ( $Me = Zn, Cu$ ) по данным порошковых дифрактограмм**

**Гурский С.И., Тафеенко В.А., Баранов А.Н.**

*студент*

*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Химический факультет*

*E-mail: staswise@mail.ru*

Использование дифракционных методов при проведении твердофазных реакций по сути является обязательным этапом исследования, поскольку данный метод позволяет определить как фазовый состав продуктов твердофазных реакций, так и микроструктурные особенности кристаллитов (анизотропию формы, микронапряжения). Гораздо реже данный метод используется для определения процентного содержания компонентов в образующихся фазах. Основная причина этого, по-видимому, заключается в корреляции уточняемых параметров (заселенность позиций, тепловые параметры атомов, параметры профильных функций) при использовании общепринятого метода их уточнения – метода Ритвельда.

В данной работе мы провели анализ возможности использования интегральных интенсивностей дифрактограмм твердых растворов  $Mg_{1-x}Zn_xO$  для решения практически важной задачи – эффективного и корректного извлечения информации о содержании компонентов твердых растворов.

Для поликристаллических образцов твердых растворов  $Mg_{1-x}Zn_xO$  ( $x = 0.3, 0.5, 0.6, 0.7$ ), полученных ранее, были сняты дифрактограммы. Для рефлексов с индексами Миллера (111) и (002) была построена теоретическая зависимость отношения интегральных

интенсивностей  $\frac{I_{111}^{интегр\ расч.}}{I_{002}^{интегр\ расч.}}$  от содержания цинка в твердом растворе. На основании

сравнения  $\frac{I_{111}^{интегр\ расч.}}{I_{002}^{интегр\ расч.}}$  и  $\frac{I_{111}^{интегр\ эксп.}}{I_{002}^{интегр\ эксп.}}$  был сделан вывод, что построенная теоретическая

кривая  $\frac{I_{111}^{интегр\ расч.}}{I_{002}^{интегр\ расч.}} = f(\omega_{Zn})$  может быть использована в качестве градуировочного графика

для определения содержания цинка в твердых растворах  $Mg_{1-x}Zn_xO$  с кубической структурой. Было показано, что на значение  $\frac{I_{111}^{интегр}}{I_{002}^{интегр}}$  влияет преимущественная ориентация

кристаллитов в порошке, что необходимо учитывать при интерпретации экспериментальных данных. Также для определения содержания цинка в поликристаллических образцах твердых растворов  $Mg_{1-x}Zn_xO$  была опробована методика выделения интегральных интенсивностей из спектра порошковых дифрактограмм по процедуре Ле Бейла с дальнейшим их использованием в комплексе программ SHELX97.