化学学报 2001 59 (4): 566-570 ISSN: 0567-7351 CN: 31-1320/06

M，W型六角钡铁氧体化学键性质和穆斯堡尔谱位移研究

高发明,李东春

燕山大学材料化工学院

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 利用电介质的平均能带模型研究了M型、W型六角铁氧体的化学成键性质，
计算了各晶位的共价性的穆斯堡尔同质异能位移，结果与实验值一致，确定了Fe^2+在W型铁氧体中所占晶位。

关键词 铁氧体 化学键 穆斯堡尔谱法

分类号 064

Investigation of chemical bond properties and mossbauer isomer shifts in M-,W-type hexagonal barium ferrites

Gao Faming,Li Dongchun

Abstract By using the average band-gap model, chemical bond properties of M-, W-type hexagonal barium ferrites have been studied. Mossbauer isomer shifts of^57 Fe in BaFe12O19 and BaFe18O27 are calculated by using the chemical surrounding factor, h, definited bycovalency and electronic polarizability. The calculation results of the Mossbauer isomer shifts in various crystallographic positions are in agreement with their experimental values. It is verified that the Fe^2+ ions exist in 4f3, site of W- type hexagonal barium ferrite. Special attention is given to the anisotropy of the bond susceptibilities of^57 Fe nuclei in 2b position. This theoretical method allows us to calculate accurately the bond structure and the isomer shifts of complex hexagonal ferrites.

Key words FERRITE CHEMICAL BONDS MOSSBAUER SPECTROMETRY

DOI:

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(0KB)

[HTML全文](0KB)

参考文献

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

复制索引

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

相关信息

本刊中 包含“铁氧体”的相关文章

本文作者相关文章

· 高发明

· 李东春

通讯作者