

PREDICCIONES Y RESULTADOS EXPERIMENTALES DE LA CARACTERIZACIÓN MAGNÉTICA Y ESTRUCTURAL DE LA BaM DOPADA CON UN CATION EN LOS SITIOS DEL HIERRO

PREDICTIONS AND EXPERIMENTAL RESULTS OF MAGNETIC AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF BaM DOPPED WITH ONE CATION IN THE FE SITES

P. A. MARIÑOS-CASTELLANOS^a, C. PUPO-PALMA^a Y J. MATILLAS-ARIAS^b

a) Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba; ap@fisica.cu

b) Facultad de Física, Universidad de Oriente; gutierrez@oriente.cu†

† autor para la correspondencia

En este trabajo, partiendo del modelo de distribución de cationes en hexaferritas dopadas se calculan la magnetización de saturación y la constante de anisotropía magnética, K_1 , en función de la cantidad de dopante por fórmula unidad y en función de su distribución en los sitios del hierro para hexaferritas de Bario tipo M dopadas con Al, Ti, Sn y Co en pequeñas cantidades de estas. Luego los resultados anteriores se comparan con los resultados experimentales de la caracterización magnética y estructural de estos sistemas.

La investigación demostró que la magnetización de saturación y la constante de anisotropía dependen del aporte de cada sitio del hierro a la magnetización de la muestra como un todo tanto en la muestra sin dopar como en las muestras dopadas a pequeñas concentraciones de los iones sustitutos, así como que el comportamiento de otros parámetros magnéticos no intrínsecos están modulados por este comportamiento.

Las muestras fueron obtenidas por el método cerámico tradicional y su caracterización se realizó refinando los patrones de difracción de rayos X para obtener los valores experimentales de la distribución de cationes en cada uno de los sitios cristalográficos del hierro en la celda unidad de la BaM.

La caracterización magnética fue realizada en un magnetómetro de muestra rotante (RSM) para el estudio de la anisotropía magnética de cada una de las muestras que componen cada sistema, y con un magnetómetro de la muestra vibrante para la determinación de los restantes parámetros magnéticos. Los resultados fueron comparados con las predicciones teóricas obtenidas en el modelo sobre distribución de los sitios cristalográficos, aplicado a estos sistemas.

Utilizando el modelo de distribución de cationes en los sitios del hierro en el interior de la estructura de la BaM se calcularon la distribución de cationes [1,2] de hierro y de cada uno de los dopantes, y con ello fue determinado la magnetización de saturación teórica [2], y la constante de anisotropía K_1 [3].

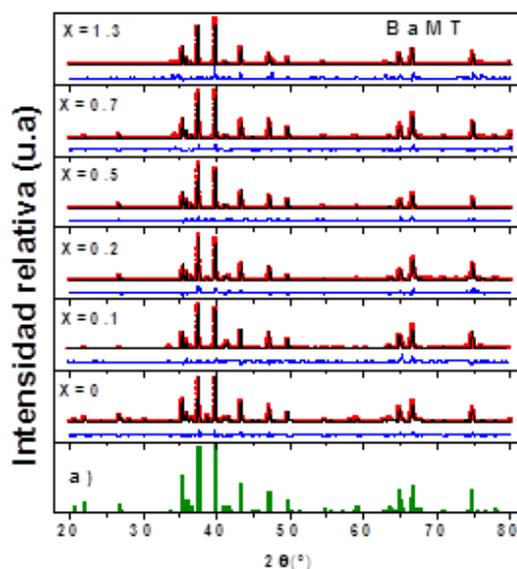


Figura 1. Patrones de difracción de rayos X refinados en función de 2θ utilizando la concentración por fórmula unidad como parámetro para las muestras del sistema BaM+Tix.

En la figura se observa la alta pureza de la fase de hexaferrita de bario tipo M para los compuestos de este sistema, excepto para las muestras ($x = 0.0$ y 1.3). También se pueden observar variaciones de la intensidad relativa respecto a la muestra sin dopar que demuestran la ocurrencia de sustituciones de los iones Fe^{3+} por Ti^{4+} y pequeñas permutaciones en las posiciones de las líneas que implican distorsiones mínimas de la celda

unidad con la concentración del dopante debido a que la diferencia entre el radio iónico del Ti^{4+} respecto al Fe^{3+} es de un 4,5%.

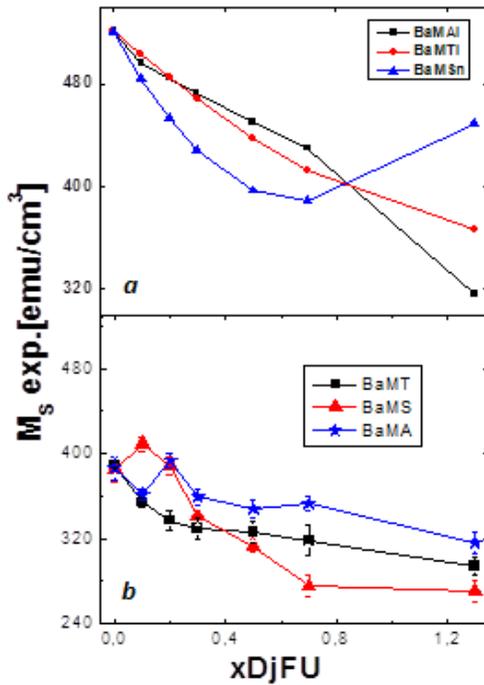


Figura 2. a) Comparación entre las dependencias de la magnetización de saturación teórica con x para los tres sistemas y b) comparación entre las dependencias de la magnetización de saturación experimental con x para los tres sistemas.

En la figura se observa un comportamiento polinomial, cuyo grado depende de la Z del dopante, disminuyendo la magnetización de saturación con el número atómico, excepto para el dopaje con Sn, que tiende a aumentar a partir de $x=0.7$ debido a la disminución entre las distancias interatómicas como consecuencia del mayor radio iónico del Sn^{4+} .

Comparando las figuras 2a y 2b es notorio que en los resultados experimentales y teóricos se mantiene el mismo orden de disminución de la magnetización de saturación con el dopante hasta $x=0.3$; a partir de ahí la magnetización de saturación del Sn decrece más rápidamente debido a la mayor fracción de poro para este sistema. Valores experimentales menores que los predichos teóricamente se deben a la presencia de poros en todas las muestras para todos los sistemas.

En esta figura se aprecia que el comportamiento de este parámetro, de acuerdo a las predicciones teóricas, depende del número atómico del dopante incluido, que en todos los casos aumenta polinomialmente con la cantidad de dopante y el valor de n de la aproximación polinomial depende del radio

iónico del catión sustituto considerado. En el caso del dopaje con Sn, la tendencia a disminuir a partir de $x=0.5$ se debe a que a partir de este valor las tensiones en el interior de la red cristalina son tales que tienden a disminuir la constante de anisotropía.

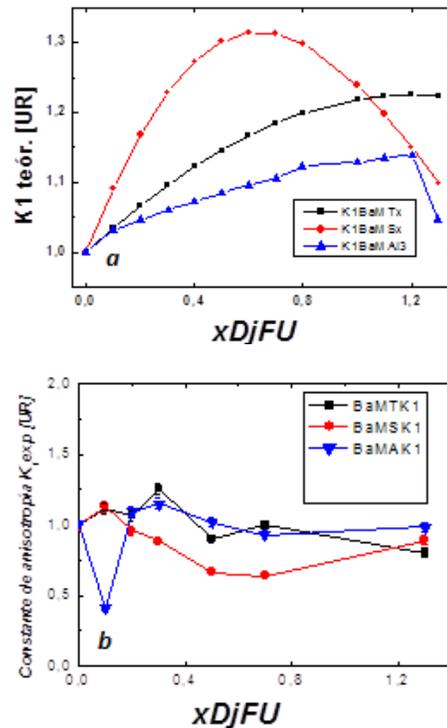


Figura 3. a) Comparación entre las dependencias de la constante de anisotropía K_1 teórica con x para los tres sistemas y b) comparación entre las dependencias de las constantes de anisotropía K_1 experimentales con x para los tres sistemas.

Comparando las figuras 3 a) y 3 b) se observa que existe una diferencia importante en su comportamiento respecto a las predicciones teóricas, lo cual se debe a que estas últimas solo tienen en cuenta la constante de anisotropía magnética intrínseca del material y los resultados experimentales son la superposición de la anisotropía magnética intrínseca y la anisotropía magnética extrínseca, formada por tensiones entre granos, inclusiones y otras fases presentes.

[1] P.A. Mariño-Castellanos, A.C. Moreno-Borges, G. Orozco-Melgar, J.A. García, E.Govea-Alcaide, *Physica B* 406 (2011) 3130–3136.
 [2] P. A. Mariño-Castellanos, C. Pupo-Palma, R. Ladrón de Guevara-Viltres, Y. Guerra-Dávila, *Revista Cubana de Química*, Vol. XXV, N° 3, 2013.
 [3] J. Qiu, Q. Zhang, M. Gu, *Journal of Applied Physics* 98, 103905 (2005).