

**СТАНДАРТНЫЙ ОБРАЗЕЦ ПАРАМЕТРОВ
КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ДИОКСИДА ЦЕРИЯ**
Кузнецова Е.А.⁽¹⁾, Бергер И.Ф.⁽²⁾, Пирогов А.Н.^(1,2), Сёмкин М.А.^(1,2)

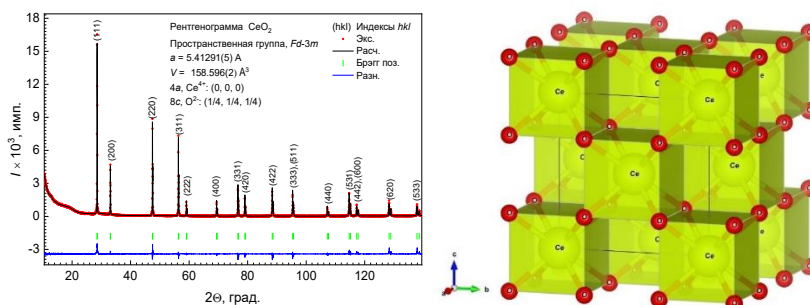
⁽¹⁾ Уральский федеральный университет

620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

⁽²⁾ Институт физики металлов УрО РАН

620137, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, д. 18

Стандартный образец параметров кристаллической структуры представляет собой микрокристаллический порошок из поликристаллов диоксида церия (CeO_2) и предназначен для оценки разрешающей способности и уточнения длины волны нейтронографических установок ИФМ УрО РАН. Сертифицированные (аттестованные) значения параметров кристаллической структуры CeO_2 при комнатной температуре были определены методом рентгеноструктурного анализа с применением дифрактометра высокого разрешения фирмы Bruker. Рентгенограмма CeO_2 (см. рисунок) получена, в геометрии по Брэггу – Брентано (в интервале углов 2Θ от 10° до 140° и шагом $0,03^\circ$, использовалось монохроматическое $\text{Cu K}\alpha$ излучение длиной волны $\lambda_{\text{K}\alpha 1} = 1,540593 \text{ \AA}$ и $\lambda_{\text{K}\alpha 2} = 1,544427 \text{ \AA}$.



Рентгенограмма CeO_2 (слева), модель структуры (справа)

Кристаллическая структура CeO_2 описывается в рамках гранецентрированной кубической пространственной группой $Fm\text{-}3m$, ионы Ce^{4+} занимают позицию $4a$ с координатами: $(0, 0, 0)$; ионы $\text{O}^{2-} - 8c$: $(1/4, 1/4, 1/4)$; размеры элементарной ячейки $a = (5,41291 \pm 0,00005) \text{ \AA}$; длины связей $d(\text{Ce-O}) = (2,3439 \pm 0,0005) \text{ \AA}$; объем $V = (158,596 \pm 0,002) \text{ \AA}^3$. Уточненный параметр кристаллической структуры согласуется с параметром CeO_2 стандартного образца Национального института стандартов и технологий $a = (5,415260 \pm 0,000003) \text{ \AA}$ [1], с точностью менее $\Delta a = 0,04 \text{ \AA}$.

1. SRM674b; X-Ray Powder Diffraction Intensity Set (Quantitative Powder Diffraction Standart; National Institute of Standards and Technology; U.S. Materials Measurement Science Division: Gaithersburg, MD (2017).

Результаты исследований выполнены в рамках государственного задания МИНОБНАУКИ России (тема «ПОТОК», № 122021000031-8).