

ПОЛІГЕДРИЧНА СТРУКТУРА ФЕРОМАГНІТНИХ ФАЗ ТИПУ $Fe_{23}V_3Nd_2$

В.О. Бовда, М.М. Матюшенко, О.М. Бовда

*Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»,
м. Харків, Україна*

Вивчення магнітної структури $Fe_{23}V_3Nd_2$ доповнене координаційним аналізом атомної структури. За нейтронодифрактометричними даними, опублікованими в роботі [3], виведені координаційні поліедри атомів і описана полігедрична структура фази. Розглянута кореляція магнітних моментів з координаційними поліедрами і найкоротшими міжатомними відстанями.

вершин з однаковою (або достатньо наближеною) відстанню від центра.

ВСТУП

У тернарній системі Fe-V-Nd існує фаза $Fe_{23}V_3Nd_2$, стабільна при температурах 908...1013 К [1]. Атомна структура загартованої фази досліджена методами дифрактометрії в характеристичному випромінюванні і виміряні магнітні властивості [2]. Методом порошкової нейтронодифрактометрії визначена магнітна структура – координатні параметри атомів і величина магнітних моментів атомів [3].

Вивчення атомної структури доповнене в даній роботі результатами координаційного аналізу – виведені поліедри атомів й описана полігедрична структура $Fe_{23}V_3Nd_2$.

МЕТОД ДОСЛІДЖЕННЯ

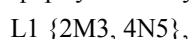
У вивченні фази застосовано метод координаційного аналізу атомної структури [4]. В основу метода покладено принцип першого найбільшого проміжка в послідовності міжатомних відстаней $1/q$.

Координаційний поліедр характеризується геометрією поліедра (*топологічні параметри*, вид симетрії і назва) і розподілом атомів по вершинах поліедра (*координаційна формула*, найкоротша відстань і відносна ширина шару координаційної сфери як ступінь розмитості координації).

Назва поліедру відображає гранні параметри.

Топологічні параметри (цілі числа) включають і вершинні параметри V^n і гранні параметри Γ_r , наприклад, для ікосаедра 12^5 , 20_3 , де V – кількість вершин з індексом v , Γ – кількість граней з індексом g ; v – кількість граней (або рубів), що сходяться в вершині, g – кількість вершин у грані.

Координаційна формула записується в вигляді

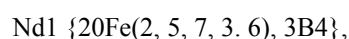


$L1$ – атом, що займає центр поліедра; $M3$, $N5$ – атоми, які займають вершини поліедра (в порядку збільшення відстані вершини від центра); 1, 3, 5 – номери позицій атомів у структурі; 2, 4 – кількість

РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕННЯ

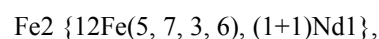
Атомна структура. Атомну структуру фази $Fe_{23}V_3Nd_2$ описують сім позицій різновиду симетрії $I-43d$ (220): дві діагонально моноваріантні $16c$ (x, x, x) і дві моноваріантні $24d$ ($x, 0, 1/4$) та три загальні $48e$ (x, y, z). 13 координатних параметрів атомів подані в табл.1 Перші дві позиції займають атоми Nd і Fe, а дві другі – Fe і V; загальні позиції зайняті атомами Fe. Відтак, 112 атомів складають структурний мотив кубічних ґраток $Fe_{23}V_3Nd_2$ (4I)c.

Координація позиції (табл. 2 і 3). Триконтогекса-тригедр $23,39$ ($3^4 12^5 8^6, 36_3 3_4$) виду симетрії 3 (рис.1,а) утворюють атоми від усіх позицій, за винятком Nd:



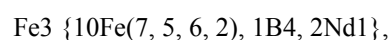
де найкоротша відстань на осі 3 $q=0,3014(2)$ нм і дещо більша для другого атома Fe $q=0,312(2)$ нм; усі інші атоми вкладаються в $dq/q=0,104$.

Ікосотетрагедр $14,24$ ($12^5 2^6, 24_3$) виду симетрії 3 (див.рис.1,б) утворюється атомами від усіх позицій, за винятком Fe2, V4:



де кількості атомів трикратні, що зумовлене видом симетрії, і найкоротша відстань $q=0,2558(2)$ нм з $dq/q=0,121$ (для Fe); атоми Nd, розташовані на осі 3 на неоднакових відстанях від центра, центрують тригони Fe5,6 та Fe7,3.

Ікосодигедр $13,22$ ($1^4 10^5 2^6, 22_3$) виду симетрії 2 (див.рис.1,в) утворюється атомами від усіх позицій, за винятком Fe3:



де кількості атомів Fe двократні, що зумовлене видом симетрії, і найкоротша відстань $q=0,2393(2)$ нм (у тетрагедрі) з $dq/q=0,149$ (для Fe); атоми Fe і Nd утворюють *діагональний ікосагедр*

$(12^5, 20_3)$, а з доданою вершиною бору –
ікосодигедр.

Атомна структура фази $\text{Fe}_{23}\text{B}_3\text{Nd}_2$ (4I)с I-43d (220)
 $a=1,4161(1)$ нм, $V=2,8398(3)$ нм³, $\rho=7.5101(9)$ кг/м³, Fe184 B24 Nd16 [3]

| Позиція | | Атом | x | Y | z | M, μ_{B} |
|---------|-----|------|------------|-----------|-----------|---------------------|
| 1 | 16c | Nd | 0.0579(1) | 0.0579(1) | 0.0579(1) | 1,080 |
| 2 | 16c | Fe | 0.1808(1) | 0.1808(1) | 0.1808(1) | 1,957 |
| 3 | 24d | Fe | 0.1657(1) | 0 | 0.25 | 1,550 |
| 4 | 24d | B | -0.0579(1) | 0 | 0.25 | 0 |
| 5 | 48e | Fe | 0.5623(1) | 0.5174(1) | 0.3423(1) | 2,263 |
| 6 | 48e | Fe | 0.6237(1) | 0.6825(1) | 0.3722(1) | 2,145 |
| 7 | 48e | Fe | 0.7273(1) | 0.5339(1) | 0.3967(1) | 1,934 |

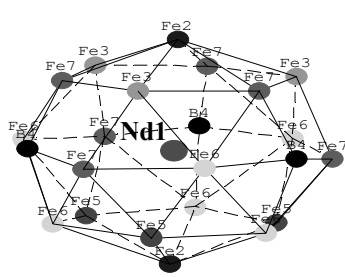
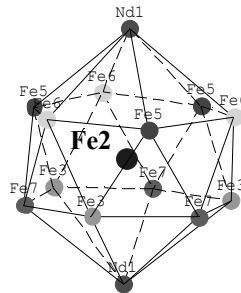
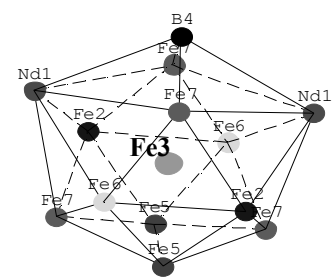
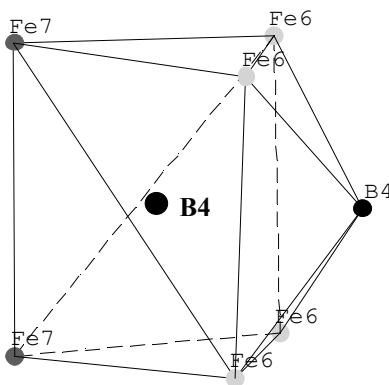
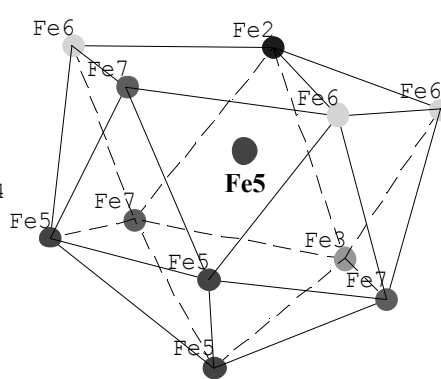
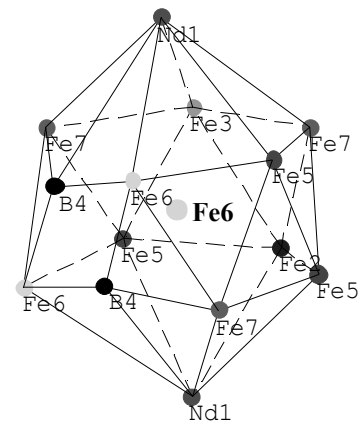
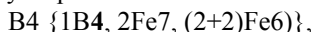
(23,39) *a*(14,24) *б*(13,22) *в*(7,10) *г*(11,17) *д*(14,23) *е*

Рис.1. Геометричний образ координаційного полігедрa для структури $\text{Fe}_{23}\text{B}_3\text{Nd}_2$:
a - триконтогекса-тригедр (23,39) $3^4 12^5 8^6, 36_3 3_4$ виду симетрії 3;
б - ікосотетрагедр (14,24) $12^5 2^6, 24_3$ виду симетрії 3;
в - ікосодигедр (13,22) $1^4 10^5 2^6, 22_3$ виду симетрії 2;
г - декагедр (7,10) $5^4 2^3, 10_3$ виду симетрії 2;
д - гексодека-моногедр (11,17) $3^4 8^3, 16_3 1_4$ виду симетрії 1;
е - ікосоди-моногедр (14,23) $2^4 10^5 2^6, 22_3 1_4$ виду симетрії 1

Міжатомні відстані та координаційні поліедри у структурі Fe₂₃B₃Nd₂

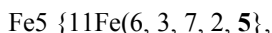
| Симетрія | Позн. | Корд. число | Відстань, нм | Δq/q | Топологічна формула V ^v , F _f | Об'єм, нм ³ |
|----------|-----------|--|---|-------|--|------------------------|
| 3 | Nd1 (16c) | 1Fe2 3Fe5 1Fe2 3Fe7 3Fe3 3Fe6 3B4 3Fe6 3Fe7 | 0.3014(2) 0.3107(2) 0.3118(2) 0.3128(2) 0.3225(2) 0.3255(2) 0.3280(2) 0.3301(2) 0.3329(2) | 0.104 | 3 ⁴ 12 ⁵ 8 ⁶ , 36 ₃ 3 ₄ | 0.1066 |
| 3 | Fe2 (16c) | 3Fe5 3Fe7 3Fe3 3Fe6 1Nd1 1Nd1 | 0.2558(2) 0.2688(2) 0.2750(1) 0.2868(2) 0.3014(2) 0.3118(2) | 0.121 | 12 ⁵ 2 ⁶ , 24 ₃ | 0.0578 |
| 2 | Fe3 (24d) | 2Fe7 2Fe5 2Fe6 2Fe7 2Fe2 1B4 2Nd1 | 0.2393(2) 0.2466(2) 0.2556(1) 0.2616(2) 0.2750(1) 0.3166(2) 0.3225(2) | 0.149 | 1 ⁴ 10 ⁵ 2 ⁶ , 22 ₃ | 0.0511 |
| 2 | B4 (24d) | 1B4 2Fe7 2Fe6 2Fe6 | 0.1900(2) 0.1983(2) 0.2194(2) 0.2228(2) | 0.172 | 5 ⁴ 2 ⁵ , 10 ₃ | 0.0119 |
| 1 | Fe5 (48e) | 1Fe6 1Fe3 1Fe7 1Fe6 1Fe7 1Fe6 1Fe2 2Fe5 1Fe7 1Fe5 | 0.2451(2) 0.2466(2) 0.2471(2) 0.2522(2) 0.2530(2) 0.2530(2) 0.2558(2) 0.2587(2) 0.2619(2) 0.2660(2) | 0.085 | 3 ⁴ 8 ⁵ , 16 ₃ 1 ₄ | 0.0342 |
| 1 | Fe6 (48e) | 1B4 1B4 1Fe5 1Fe5 1Fe5 1Fe3 1Fe7 1Fe7 1Fe7 2Fe6 1Fe2 1Nd1 1Nd1 | 0.2194(2) 0.2228(2) 0.2451(2) 0.2522(2) 0.2530(2) 0.2556(1) 0.2589(2) 0.2638(2) 0.2681(2) 0.2823(2) 0.2868(2) 0.3255(2) 0.3301(2) | 0.170 | 2 ⁴ 10 ⁵ 2 ⁶ , 22 ₃ 1 ₄ | 0.0527 |
| 1 | Fe7 (48e) | 1B4 | 0.1983(2) | – | – | – |

Декагедр 7,10 ($5^4 2^5, 10_3$) виду симетрії Γ_1 (див.рис.1,г) утворюється атомами Fe і В:



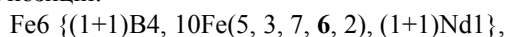
де кількості атомів Fe двократні, що зумовлене видом симетрії, і найкоротша відстань до вершини, еквівалентної центрові, $q=0,1900(2)$ нм по осі 2; атоми Fe займають вершини деформованого *ди-тригедра* (6,5) з $dq/q=0,172$.

Гексодека-моногедр 11,17 ($3^4 8^5, 16_3 1_4$) виду симетрії Γ_1 (див.рис.1,д) утворюється атомами лише Fe:



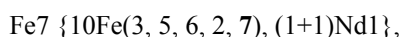
де кількості атомів Fe однократні, що зумовлене видом симетрії, і найкоротша відстань $q=0,2451(2)$ нм (у фазі α -Fe $q=0,2483$ нм) і $dq/q=0,085$; еквівалентні центрові вершини складають *вакантний тетрагедр* з центром в позиції 12а (3/8 0 1/4) на осі 2.

Ікосоди-моногедр 14,23 ($2^4 10^5 2^6, 22_3 1_4$) виду симетрії Γ_1 (див.рис.1,е) утворюється атомами від усіх позицій:



де кількості атомів однократні, що зумовлене видом симетрії, і найкоротші відстані до атомів бору ті, що в декагедрі (7,10) з $dq/q=0,170$ (для Fe); еквівалентні центрові вершини складають *вакантний тригон*.

Ікосагедр 12,20 ($12^5, 20_3$) виду симетрії Γ_1 утворюється атомами від усіх позицій (у другій координаційній сфері) і блокується атомом бору:



де найкоротша відстань $q=0,239(2)$ нм (у фазі α -Fe $q=0,2483$ нм) і $dq/q=0,255$ (для Fe).

Відношення між полігедами (табл. 4). Атомні структури, що описуються різними комбінаціями (кількості і способів з'єднання) полігедрів з топологічними параметрами виду

$$(B, \Gamma) = 12^5 n^6, (20+2n)_3, \quad (1)$$

де $n=0, 2, 3, 4$ - кількість вершин, доданих до ікосагедра, відносяться до простих структур тетради Франка-Каспера. Полігедр з $n=1, 5$ і вище геометрично неможливі [8].

Реально існують ікосагедри ($n=0$) й ікосодигедри ($n=1$), топологічні параметри яких підлягають умові:

$$(B, \Gamma) = m^4 (12-2m)^5 (m+n)^6, (20+2n)_3, \quad (2)$$

де $m=0, 1, \dots, 6$ для $n=0, 1, 2, 3, 4$ і 8.

а) *Полігедр з $\Gamma_3 > 20_3$ ($n > 0$).*

На прикладі структури $Fe_{23}B_3Nd_2$ (4I)c, в якій є, зокрема, ікосотетрагедр (14,24) з $n=2$, видно, що існує триконтогексагедр (20,36) з $n=8$ за формулою (1). Без врахування трьох вершин, зайнятих бором, триконтогекса-тригедр (23,39) набуває вигляду

$$3^4 12^5 8^6, 36_3 3_4 = 3^4 <12^5 8^6, 36_3> 3_4,$$

де за дужки $< >$ винесені однакові вершинні і гранні параметри з однаковими індексами, що означає вилучення по вершині з трьох тетрагонів даного полігедра.

Таблиця 3

| Кількість певних полігедрів у вершинах даного полігедра | | | | | | | | | |
|---|-----|-----|----|-----|-------|-------|-------|-------|----------------|
| Поз. | Nd | Fe | Fe | B | Fe | Fe | Fe | (B,Γ) | q_{min} , нм |
| 1 | 0 | 1+1 | 3 | 3 | 3 | 3+3 | 3+3 | 23,39 | 0,3014 |
| 2 | 1+1 | 0 | 3 | = | 3 | 3 | 3 | 14,24 | 0,2558 |
| 3 | 2 | 2 | 0 | 1 | 2 | 2 | 2+2 | 13,22 | 0,2393 |
| 4 | = | = | = | 1 | = | 2+2 | 2 | 7,10 | 0,1900 |
| 5 | = | 1 | 1 | = | 2+1 | 1+1+1 | 1+1+1 | 11,17 | 0,2451 |
| 6 | 1+1 | 1 | 1 | 1+1 | 1+1+1 | 2 | 1+1+1 | 14,23 | 0,2199 |
| 7 | = | = | = | 1 | = | = | 0 | 1,0 | 0,1983 |

1, 2, 3 – кількість вершин розташованих найближче до центра.

У рамці по діагоналі позначена кількість вершин, еквівалентних центрові,

= означає несумісність полігедрів

Таблиця 4

| Відношення між координаційними полігедами структури $Fe_{23}B_3Nd_2$ (4I)c | | | | | | |
|--|-------|------------------------|--|-----------------------------|-------------------|----------|
| Поз. | B,Γ | n, m | $m^4 (12-2m)^5 (m+n)^6, (20+2n)_3$ | $\langle B, \Gamma \rangle$ | Назва | B,Γ * |
| 1 | 23,39 | $\langle 8, 0 \rangle$ | $3^4 12^5 8^6, 36_3 3_4$ $= 3^4 \langle 12^5 8^6, 36_3 \rangle 3_4$ | $\langle 20, 36 \rangle$ | триконтогексагедр | 20,36 ** |
| 2 | 14,24 | 2,0 | $12^5 2^6, 24_3$ | | | 14,24 |
| 3 | 13,22 | 1,1 | $1^4 10^5 2^6, 22_3$ | | | 12,20 |
| 4 | 7,10 | -5,5 | $5^4 2^5, 10_3$ | | | |
| 5 | 11,17 | $\langle -$ 2,2> | $3^4 8^5, 16_3 1_4$ $= 1^4 \langle 2^4 8^5, 16_3 \rangle 1_4$ | $\langle 10, 16 \rangle$ | гексодекагедр | 12,20 |
| 6 | 14,23 | $\langle 1, 1 \rangle$ | $2^4 10^5 2^6, 22_3 1_4$ $= 1^4 \langle 1^4 10^5 2^6, 22_3 \rangle 1_4$ | $\langle 13, 22 \rangle$ | ікосодигедр | 12,20 |
| 7 | 1,0 | | | | | 12,20 |

* У структурі $Fe_{23}B_3Nd_2$ (4I)c без позиції бору.

** У структурі $Fe_{14}Nd_2$ B (4P)t триконтогексагедр (20,36) у модифікованому вигляді $1^4 10^5 9^6, 36_3$ ($n=8, m=1$).

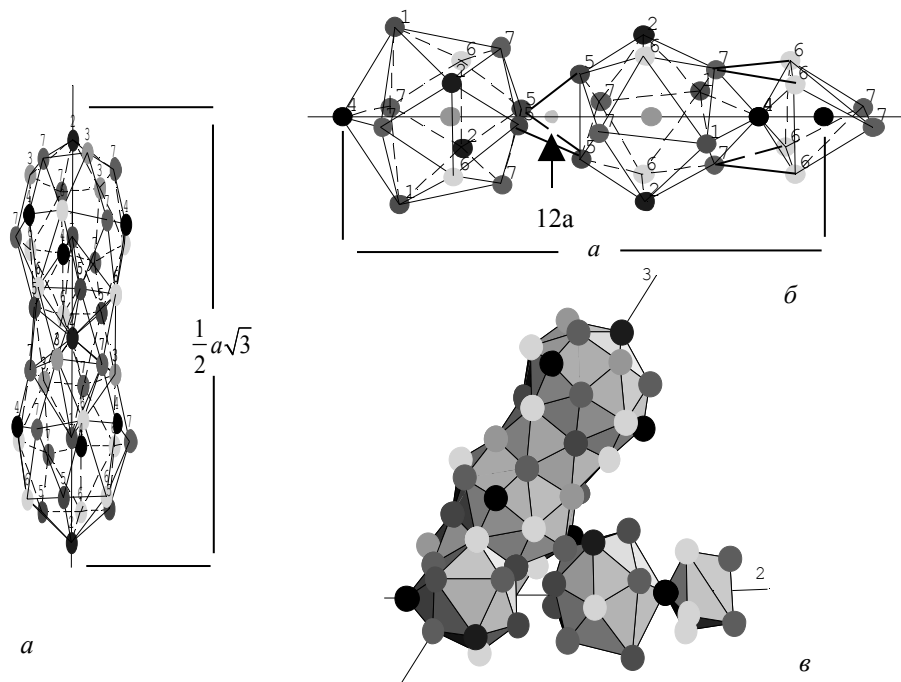


Рис. 2. Конформація координаційних полієдрів у структурі $Fe_{23}B_3Nd_2$:

a - трансляція, утворена триконтогекса-триєдрами (20,39) з суміжними вершинами, що в центрах ікосотетраєдрів (14,24); *б* - трансляція з періодом *a* уздовж осі 2, утворена двома ікосодигедрами (13,22) з гексодека-моноєдрами (11,17) і двома боровими декаєдрами (7,10); *в* - структурний мотив фази $Nd_2Fe_{23}B_3$

Триконтогексаєдр $\langle 20,36 \rangle$ спостерігається у структурах $Ni_{17}Th_2$ (2P)h, Co_3B_2Zr (3Rh) [7] та ін.

Виокремлення вершини 1^4 тетрагона 1_4 з ікосоди-моноєдра (14,23)

$$2^4 10^5 2^6, 22_3 1_4 = 1^4 \langle 1^4 10^5 2^6, 22_3 \rangle 1_4$$

дає $\langle 13,22 \rangle$ ікосодигедр, який існує в даній структурі. Отже, ікосоди-моноєдр є ікосодигедр з доданою вершиною бору, яка утворює тетрагон. Триангулювання тетрагона може привести до ікосотетраєдра (14,24). Ікосоди-моноєдр (14,23) має відношення до ікосотетраєдра (14,24) з виродженням рубом. З вилученням із структури позиції бору випадає вершина з ікосодигедра (13,22), а з ікосоди-моноєдра (14,23) – дві вершини, й обидва полієдри стають ікосаєдрами. Топологічні параметри ікосодигедра не підлягають умові (1) для $n=1$.

б). Полієдри з $\Gamma_3 \langle 20_3 \rangle$ ($n < 0$).

Зменшення кількості тригонних граней означає віднімання вершин від ікосаєдра (вершина виходить з координації) і в топологічній формулі (2) $n < 0$.

Зокрема, в гексодека-моноєдрі (11,17) вилучення вершини 1^4 засвічує складовий полієдр

$$3^4 8^5, 16_3 1_4 = 1^4 \langle 2^4 8^5, 16_3 \rangle 1_4,$$

де в дужках є гексодекаєдр (10,16) з $m=2$ для $n=-2$.

Гексодека-моноєдр (11,17) з доданою вершиною атома Nd1 переходить в ікосаєдр ($12^5, 20_3$), коли вилучить із структури позицію, зайняту бором.

Боровий декаєдр (7,10) підлягає умові (2) з $m=5$ для $n=-5$.

Структурний мотив (рис.2). Триконтогекса-триєдри (23,39) атомів Nd укладаються на осі 3 суміжними вершинами (Fe2), які є центрами ікосотетраєдрів (14,24). Послідовне чергування даних полієдрів утворює трансляцію з періодом $\frac{1}{2}a\sqrt{3}$ ($=1,226$ нм). Такий полієдричний блок можна розцінювати, як укладання суміжними гексагонами *додєка-дигедрів* (12,14), центри яких зайняті атомом Fe2 або атомом Nd1, яким замінена пара атомів Fe2 (див.рис.2,а).

Трансляція вздовж осі 2 може бути описана додаванням вакантної позиції 12а, координаційним полієдром якої є *тетраєдр* (див.рис.2,б). Боровий декаєдр та два ікосодигедри (13,22), що з'єднуються через вакантний тетраєдр, утворюють трансляцію вздовж осі 2.

Тип структури представлений шістьма фазами, що в табл. 5.

Магнітна структура. Термодинамічно стабільна в інтервалі 908...1013К фаза $Fe_{23}B_3Nd_2$ перебуває в парамагнітному стані ($T_c=659$ К). Феромагнетизм мегастабільної фази визначається її магнітною структурою і величинами моментів полієдрів (див.табл.1).

Магнітний момент насичення, віднесений до формульної одиниці $\Gamma_{23} B_3 Nd_2$, для $T=Fe$ дорівнює $48,79\mu_B$ [3] чи $50,65\mu_B$ [2], для $T=Co$ – $34,0\mu_B$ і $4,0\mu_B$ для $T=Ni$ [6]. У фазах $(Fe, Co)_{23}B_3Nd_2$ температура Кюрі монотонно підвищується від 659 К для $x=0$ до 1218 К для $x=1$ і магнітний момент атома Fe збільшується від $2,02\mu_B$ для $x=0$ до $2,17\mu_B$ для $x=0,8$

[5]. Магнітний добуток у фазі $Fe_{23}B_3Pr_2$, рівний $(BH)_{max} = 1,7 \text{ МГсЕ}$ ($B_r=6,7 \text{ кГс}$, $H_c = 1,5 \text{ кЕ}$), підвищується на порядок (до $15,0 \text{ МГсЕ}$) під впливом доданого титану [6].

Таблиця 5

| Фази типу $Fe_{23}B_3Nd_2$ (4D)c і магнітні властивості | | | | |
|---|----------|--------------------|--------------------------|------|
| Склад | a, 10 нм | T _c , К | M _s , μB/f.u. | Літ. |
| $Fe_{23}B_3Nd_2$ | 14,16 | 659 | 48,79 | 2, 3 |
| | 14,19 | 655 | | 1 |
| $Fe_{23}B_3Pr_2$ | 14,18 | 644 | - | 1 |
| $Fe_{23}B_3Sm_2$ | 14,18 | 663 | - | 1 |
| $Fe_{23}B_3Gd_2$ | 14,11 | 689 | - | 1 |
| $Co_{23}B_3Nd_2$ | 13,84 | 1218 | 34,0 | 6 |
| | 13,86 | 1218 | | 5 |
| $Ni_{23}B_3Nd_2$ | 13,79 | 12 | 4,0 | 6 |

Каталог координаційних полієдрів для $Fe_{23}B_3Nd_2$ (за числом Г)

| В,Г | Назва | Рис. | Топологічна формула | Вид сим | Назва російською |
|-------|---------------------------|------|-----------------------------|---------|---------------------------|
| 4, 4 | тетраєдр | | $4^3, 4_3$ | 2 | тетраэдр |
| 6, 5 | ди-триєдр | | $6^3, 2_3, 3_4$ | -6 | тригональная призма |
| 7,10 | декаєдр | 1,Г | $5^4, 2^5, 10_3$ | 2 | |
| 12,14 | додека-дигедр гексагонний | | $12^4, 12_3, 2_6$ | | гексагональная антипризма |
| 10,16 | гексодекаєдр | | $2^4, 8^5, 16_3$ | | |
| 11,17 | гексодека-моноєдр | 1,д | $3^4, 8^5, 16_3, 1_4$ | 1 | |
| 12,20 | ікосаєдр | | $12^5, 20_3$ | | икосаэдр |
| 13,22 | ікосодигедр | 1,в | $1^4, 10^5, 2^6, 22_3$ | 2 | КМ13 |
| 14,23 | ікосоди-моноєдр | 1,е | $2^4, 10^5, 2^6, 22_3, 1_4$ | 1 | |
| 14,24 | ікосотетраєдр | 1,б | $12^5, 2^6, 24_3$ | 3 | КМ14 |
| 20,36 | триконтогексаєдр | | $12^5, 8^6, 36_3$ | | |
| 23,39 | триконтогекса-триєдр | 1,а | $3^4, 12^5, 8^6, 36_3, 3_4$ | 3 | |

ЛІТЕРАТУРА

1. K.H.J. Buschow, D.B. de Mooij, R. Coehoorn. Metastable ferromagnetic materials for permanent magnets. // *J. of the Less-Common Metals*. 1988, v. 145, p. 601-611.
2. Shen Bao-gen, Yang L.-y., Cao L., Yang H.-y., Zhao J.-g., Yang F.-m. Magnetic properties of metastable $R_2 Fe_{23} B_3$ compounds with R – Ce, Pr and Nd. // *J. of Magnetism and Magnetic Materials*. 1992, v.104-107(2), p.1281-1282.
3. C. Gou, Z.X. Cheny, D.F. Chen et al. A powder neutron diffraction study of magnetic structure of metastable $Nd_2 Fe_{23} B_3$ compound. // *J. of Magnetism and Magnetic Materials*. 1993, v.128, p.26-28.
4. Ю.Г. Титов. Программный комплекс “Поликристалл” // *Вопросы атомной науки и техники. Серия: «Ядерно-физические исследования (теория и эксперимент)»*. 1990, в.9(17), с.70.
5. Bao-gen Shen, B. Zhang, Fang-wei Wang, et al. Metastable $Nd_2 (Fe_{1-x} Co_x)_{23} B_3$ ($0 < x < 1.0$) compounds with the 2:23:3 – type structure. // *J. Appl. Phys.* 1994, v.76(10), p.6763-6765.
6. Bao-gen Shen, F.-w.Wang, S.-y.Zhang, et al. Metastable ternary $Nd_2 M_{23} B_3$ compounds with M–Co and Ni // *Proc. of the International Conference on Magnetism, Cairns, Australia*. 1997, abstract Q3-64.
7. Ю.Б. Кузьма. *Кристаллохимия боридов*. Львов: «Вища школа», 1983.
8. У. Пирсон. *Кристаллохимия и физика металлов*. Ч. 1, М.: «Мир», 1977, 419 с.

ПОЛИЭДРИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ФЕРРОМАГНИТНЫХ ФАЗ ТИПА $Fe_{23}B_3Nd_2$

В.А. Бовда, Н.Н. Матюшенко, А.М. Бовда

Изучение магнитной структуры $Fe_{23}B_3Nd_2$ дополнено координационным анализом атомной структуры. Согласно нейтроннодифрактометрическим данным, опубликованным в работе [3], выведены координационные полиэдры атомов и описана полиэдрическая структура фазы. Рассмотрена корреляция магнитных моментов с координационными полиэдрами и наименьшими межатомными расстояниями.

POLYHEDRAL STRUCTURE OF $Fe_{23}B_3 Nd_2$ -TYPE FERROMAGNETIC PHASES

V.O. Bovda, M.M. Matyushenko, O.M. Bovda

Studying of $\text{Fe}_{23}\text{B}_3\text{Nd}_2$ magnetic structure has been supplied with coordination analyses of atomic structure. Coordination polyhedra and polyhedral structure of the phase have been constructed by using neutron diffraction data [3]. Analyses of shortest interatomic distances and correlations between magnetic moments and coordination polyhedra have been considered.