

**ФАЗОВЫЕ РАВНОВЕСИЯ
В СИСТЕМЕ $\text{PrO}_x - \text{BaO} - 1/2\text{Fe}_2\text{O}_3$ ПРИ 1100 °С**

Давыдова М.В., Волкова Н.Е., Черепанов В.А.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

В рамках настоящего исследования были изучены гомогенность и кристаллическая структура твёрдых растворов в системе $\text{PrO}_x - \text{BaO} - 1/2\text{Fe}_2\text{O}_3$ при 1100 °С на воздухе.

Образцы для исследования были получены с использованием глицерин-нитратной технологии. Фазовый состав полученных оксидов контролировался рентгенографически.

На первом этапе было подтверждено образование 4 квазибинарных оксидов: $\text{BaFeO}_{3-\delta}$, BaFe_2O_4 , $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$, PrFeO_3 . В первые был получен твердый раствор $\text{Ba}_{2-t}\text{Pr}_t\text{O}_{2.5\pm\delta}$ ($0.9 \leq t \leq 1.0$), согласно РСА, который кристаллизуется в рамках орторомбической сингонии с пр.гр. *Pnma*.

В квазитройной системе $\text{PrO}_x - 1/2\text{Fe}_2\text{O}_3 - \text{BaO}$ обнаружено образование фаз на основе феррита бария $\text{BaFeO}_{3-\delta}$ и празеодима $\text{PrFeO}_{3-\delta}$, а также оксидов состава $\text{Ba}_3\text{Pr}_{1.05}\text{Fe}_{1.95}\text{O}_{7-\delta}$ и $\text{Ba}_{1.05}\text{Pr}_{1.95}\text{Fe}_2\text{O}_{7\pm\delta}$.

По результатам РФА, твердые растворы $\text{Ba}_{1-x}\text{Pr}_x\text{FeO}_{3-\delta}$ имеют две границы существования. При содержании бария $0.1 \leq x \leq 0.5$ ферриты кристаллизуются кубической ячейке с пр.гр. *Pm3m*. Твердые растворы, обогащенные празеодимом ($0.75 \leq x \leq 1.0$), образуют орторомбическую ячейку с пр. гр. *Pbnt* и являются изоструктурными ферриту празеодима $\text{PrFeO}_{3-\delta}$. Замена иона бария на меньший ион Pr^{3+} приводит к уменьшению размера элементарной ячейки.

Для исследования возможности замещения ионов железа празеодимом в $\text{BaFeO}_{3-\delta}$ были синтезированы составы $\text{BaFe}_{1-k}\text{Pr}_k\text{O}_{3-\delta}$, где $k = 0.05, 0.1, 0.15$ и 0.2 . Только сложный оксид $\text{BaFe}_{0.9}\text{Pr}_{0.1}\text{O}_{3-\delta}$ (пр.гр. *Pm3m*, $a = 4.08276(2)$) не содержит примесные фазы.

Установлено, что в системе образуется только один сложный оксид состава $\text{Ba}_3\text{Pr}_{1.05}\text{Fe}_{1.95}\text{O}_{7-\delta}$ гексагональной структурой (пр. гр. *P6₃mc*) с параметрами элементарной ячейки $a = 11.822(1)$ Å, $c = 7.053(1)$. По данным РФА определено, что образец состава $\text{Ba}_{1.05}\text{Pr}_{1.95}\text{Fe}_2\text{O}_{7\pm\delta}$ является однофазным. Параметры кристаллической структуры, вычисленные из рентгеновских данных, составили $a = 5.55455(3)$ Å, $c = 20.4955(2)$ Å (пр. гр. *P4₂/mnm*). По результатам РФА всех полученных 61 образцов, закаленных на комнатную температуру, фазовая диаграмма квазитройной системы $\text{PrO}_x - \text{BaO} - 1/2\text{Fe}_2\text{O}_3$ при 1100 °С на воздухе была разбита на 19 фазовых полей.