

**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:  $\text{BaFeO}_{3-\delta}$ ,  $\text{BaFe}_2\text{O}_4$ ,  $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$ ,  $\text{PrFeO}_3$ . 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  $\text{Pr}^{3+}$  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. *P6<sub>3</sub>mc*) 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. *P4<sub>2</sub>/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.