## СТРУКТУРА И КИСЛОРОДНАЯ НЕСТЕХИОМЕТРИЯ СЛОЖНЫХ ОКСИДОВ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ В СИСТЕМЕ «Ho<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – BaO – Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>»

Воробьева А.В., Бастрон И.А., Волкова Н.Е. Уральский федеральный университет 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

В настоящее время многих исследователей привлекают сложные оксиды с перовскитоподобной структурой в связи с их успешным применением в различных областях науки и техники. Благодаря их высокой химической и термической стабильности, уникальным электрическим и магнитным свойствам данные соединения находят применение в создании электродов ТОТЭ, газовых сенсоров и кислородных мембран. Поэтому целью данной работы является изучение возможности получения, изучение кристаллической структуры и физикохимических свойств сложных оксидов, образующихся в системе «½  $Ho_2O_3 - BaO - \frac{1}{2}$   $Fe_2O_3$ ».

Образцы для исследования были приготовлены по глицерин-нитратной технологии с последующим отжигом при температуре 1100 °C на воздухе, в течение 120 часов с промежуточными перетираниями в среде этилового спирта и последующей закалкой на 1100 °C. Фазовый состав полученных оксидов устанавливали методом порошковой рентгеновской дифракции. Идентификацию фаз осуществляли при помощи картотеки ICDD и программного пакета "Fpeak" (ИЕНиМ, УрФУ). Уточнение структурных параметров анализируемых сложных оксидов проведено методом Ритвелда в программе «FullProf 2023».

По описанному выше методу были синтезированы образцы следующих составов:  $Ba_{1-x}Ho_xFeO_{3-\delta}$  (x=0,1-0,9),  $BaHo_yFe_{1-y}O_{3-\delta}$  ( $y=0,05;\ 0,1;\ 0,15;\ 0,2;\ 0,3;\ 0,4;\ 0,6$ ),  $HoBaFeO_{4-\gamma}$  и  $Ba_3HoFe_2O_{8-\epsilon}$ . По данным рентгенофазового анализа установлено, что твердые растворы  $BaHo_yFe_{1-y}O_{3-\delta}$  (при  $y\le0,15$ ) кристаллизуются в кубической элементарной ячейке (пр. гр.  $Pm\overline{3}m$ ) и имеют статистическое распределение атомов железа и гольмия в B-подрешетке перовскита; сложный оксид  $HoBaFeO_{4-\gamma}$  имеет орторомбическую структуру (пр. гр. Pnma); индивидуальная фаза  $Ba_3HoFe_2O_{8-\epsilon}$  также кристаллизуется в орторомбической ячейке (пр. гр. Pnma).

Кислородную нестехиометрию ( $\delta$ ) однофазных образцов  $BaFe_{0,9}Ho_{0,1}O_{3-\delta}$ ,  $HoBaFeO_{4-\gamma}$  и  $Ba_3HoFe_2O_{8-\epsilon}$  изучали методом высокотемпературной термогравиметрии ( $T\Gamma A$ ). Обмен кислородом образцов  $BaFe_{0,9}Ho_{0,1}O_{3-\delta}$  и  $Ba_3HoFe_2O_{8-\epsilon}$  с газовой фазой начинается выше 400 °C, при этом обмен кислородом с окружающей средой происходит лучше у фазы с кубической структурой, чем с ортором-бической.  $HoBaFeO_4$  является стехиометричным по кислороду во всем исследуемом интервале температур.