

СИНТЕЗ И СТРУКТУРА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ**BaFe_{1-x}M_xO_{3-δ} (M = Mn, Zn)***Иванова А.К., Косарева А.А., Ткаченко М.А., Волкова Н.Е.*

Уральский федеральный университет

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

Твердые растворы на основе феррита бария BaFeO_{3-δ} привлекают внимание из-за их потенциального применения в качестве кислород-проводящих мембран и электродных материалов для твердооксидных топливных элементов благодаря их высокой смешанной ионно-электронной проводимости. Целью данной работы явился синтез, определение областей гомогенности и кристаллической структуры оксидов общего состава BaFe_{1-x}M_xO_{3-δ} (M = Mn, Zn).

Синтез образцов для исследования проводили по цитратно-нитратной технологии на воздухе при температуре 1200-1300°C, с последующим медленным охлаждением до комнатной температуры. Фазовый состав образцов был определен методом рентгенофазового анализа на дифрактометре Inel (CuKα-излучение, интервал углов 2Θ = 10-90°), уточнение параметров элементарной ячейки проводилось методом Ле-Бейла с помощью программы “Fullprof 2008”.

Для исследования возможности образования твердых растворов общего состава BaFe_{1-x}M_xO_{3-δ} (M = Mn, Zn) были синтезированы образцы при $x = 0.2-0.8$, Δ $x=0.2$.

По данным РФА установлено, что все марганец-замещенные образцы BaFe_{1-x}Mn_xO_{3-δ} являются однофазными. Оксиды BaFe_{0.8}Mn_{0.2}O_{3-δ} и BaFe_{0.6}Mn_{0.4}O_{3-δ} имеют гексагональную кристаллическую решетку пространственной группы R $\bar{6}3/mmc$. Увеличение содержания марганца до $x = 0.6$ в BaFe_{1-x}Mn_xO_{3-δ} приводит к изменению пространственной группы оксида на R $\bar{6}m2$. При дальнейшем введении марганца в твердый раствор наблюдается смена кристаллической структуры на орторомбическую.

При замещении ионов железа на ионы цинка образуется единственный однофазный оксид состава BaFe_{0.8}Zn_{0.2}O_{3-δ}, обладающего кубической перовскитоподобной структурой (пр.гр. R $\bar{m}3m$). Образцы с большей концентрацией цинка были неоднородными и содержали в своем составе кубическую фазу BaFe_{0.8}Zn_{0.2}O_{3-δ} и Ba₂ZnO₃.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ №24-23-00487.