

**СТРУКТУРА И КИСЛОРОДНАЯ НЕСТЕХИОМЕТРИЯ СЛОЖНЫХ
ОКСИДОВ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ В СИСТЕМЕ « $\text{Ho}_2\text{O}_3 - \text{BaO} - \text{Fe}_2\text{O}_3$ »***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 физико-химических свойств сложных оксидов, образующихся в системе « $\frac{1}{2} \text{Ho}_2\text{O}_3 - \text{BaO} - \frac{1}{2} \text{Fe}_2\text{O}_3$ ».

Образцы для исследования были приготовлены по глицерин-нитратной технологии с последующим отжигом при температуре 1100 °С на воздухе, в течение 120 часов с промежуточными перетираниями в среде этилового спирта и последующей закалкой на 1100 °С. 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: $\text{Ba}_{1-x}\text{Ho}_x\text{FeO}_{3-\delta}$ ($x = 0,1-0,9$), $\text{BaHo}_y\text{Fe}_{1-y}\text{O}_{3-\delta}$ ($y = 0,05; 0,1; 0,15; 0,2; 0,3; 0,4; 0,6$), $\text{HoBaFeO}_{4-\gamma}$ и $\text{Ba}_3\text{HoFe}_2\text{O}_{8-\epsilon}$. По данным рентгенофазового анализа установлено, что твердые растворы $\text{BaHo}_y\text{Fe}_{1-y}\text{O}_{3-\delta}$ (при $y \leq 0,15$) кристаллизуются в кубической элементарной ячейке (пр. гр. $Pm\bar{3}m$) и имеют статистическое распределение атомов железа и гольмия в В-подрешетке перовскита; сложный оксид $\text{HoBaFeO}_{4-\gamma}$ имеет орторомбическую структуру (пр. гр. $Pnma$); индивидуальная фаза $\text{Ba}_3\text{HoFe}_2\text{O}_{8-\epsilon}$ также кристаллизуется в орторомбической ячейке (пр. гр. $Pnma$).

Кислородную нестехиометрию (δ) однофазных образцов $\text{BaFe}_{0,9}\text{Ho}_{0,1}\text{O}_{3-\delta}$, $\text{HoBaFeO}_{4-\gamma}$ и $\text{Ba}_3\text{HoFe}_2\text{O}_{8-\epsilon}$ изучали методом высокотемпературной термогравиметрии (ТГА). Обмен кислородом образцов $\text{BaFe}_{0,9}\text{Ho}_{0,1}\text{O}_{3-\delta}$ и $\text{Ba}_3\text{HoFe}_2\text{O}_{8-\epsilon}$ с газовой фазой начинается выше 400 °С, при этом обмен кислородом с окружающей средой происходит лучше у фазы с кубической структурой, чем с орторомбической. HoBaFeO_4 является стехиометричным по кислороду во всем исследуемом интервале температур.