

**КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И СВОЙСТВА
ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $\text{BaMn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_{3-\delta}$** *Иванова А.К., Волкова Н.Е.*Уральский федеральный университет
620062, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Сложные оксиды на основе ферритов и манганитов щелочноземельных металлов с перовскитоподобной структурой являются перспективными материалами для создания высокоэффективных электродов твердооксидных и протонно-керамических топливных элементов. Оксиды на основе $\text{BaFeO}_{3-\delta}$ и $\text{BaMnO}_{3-\delta}$ проявляют приемлемые значения электропроводности и низкую склонность к деградации при работе в окислительных средах при повышенной температуре. Однако, кристаллическая структура незамещенных $\text{BaFeO}_{3-\delta}$ и $\text{BaMnO}_{3-\delta}$ в значительной мере определяется содержанием кислорода ($3-\delta$), а, следовательно, и условием их получения. Поэтому целью данной работы являлся синтез твердых растворов $\text{BaMn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_{3-\delta}$, изучение их кристаллической структуры и физико-химических свойств в широком диапазоне температур.

Синтез $\text{BaMn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_{3-\delta}$ ($x = 0.1 - 0.9$) проводили по цитратно-нитратной технологии. Заключительный отжиг проводили при температуре 1300 °С с последующим медленным охлаждением до комнатной температуры. Фазовый состав образцов был определен методом рентгенофазового анализа с использованием дифрактометра Inel, уточнение кристаллической структуры проводилось методом Ритвелда с помощью программы “Fullprof 2019”.

По данным рентгенофазового анализа установлено, что оксиды $\text{BaMn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_{3-\delta}$ обладают слоистой гексагональной структурой (пр. гр. $R\bar{6}_3/mmc$). Для всех образцов из рентгеновских данных рассчитаны параметры элементарной ячейки.

Содержание кислорода $\text{BaMn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_{3-\delta}$ образцов было изучено методом окислительное восстановительного титрования и термогравиметрического анализа в диапазоне 25-1100 °С. Установлено, что обмен кислородом оксидов с газовой фазой происходит выше 400 °С.

Для изучения термического расширения и электротранспортных свойств из образцов состава $\text{BaMn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_{3-\delta}$ ($x = 0.2, 0.6$) была спрессована керамика. Общая электропроводность обоих образцов увеличивается с ростом температуры. Коэффициент термо-ЭДС оксида $\text{BaMn}_{0.4}\text{Fe}_{0.6}\text{O}_{3-\delta}$ остается положительным во всем исследованном интервале температур, что указывает на преимущественно дырочный тип проводимости. Для $\text{BaMn}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$ в интервале температур 500-800 °С происходит смена типа проводимости от дырочной к электронной. Зависимости относительного удлинения образца $\text{BaMn}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$, полученные в режиме нагревания и охлаждения совпадают, а для $\text{BaMn}_{0.4}\text{Fe}_{0.6}\text{O}_{3-\delta}$ - проявляет значительный гистерезис. Средний КТР для обоих соединений составляет около $15 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$.