

**КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И КИСЛОРОДНАЯ  
НЕСТЕХИОМЕТРИЯ СЛОЖНЫХ ОКСИДОВ  $Nd_{1-x}Ba_xCo_{1-y}Fe_yO_{3-\delta}$** *Легонькова В.С., Аксенова Т.В.*Уральский федеральный университет  
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Важное место в поиске и создании новых сложнооксидных материалов, перспективных для использования в различных областях техники, занимает группа многокомпонентных твердых растворов на основе частично замещенных кобальтитов/ферритов редкоземельных/щелочноземельных металлов.

Для определения областей гомогенности и кристаллической структуры твердых растворов общего состава  $Nd_{1-x}Ba_xCo_{1-y}Fe_yO_{3-\delta}$  по глицерин-нитратной технологии были получены образцы с  $x = 0.05; 0.1; 0.2; 0.7; 0.8$  и  $0.1 \leq y \leq 0.9$ . В качестве исходных компонентов для синтеза использовали  $Nd_2O_3$  (НО-Л),  $BaCO_3$  (ос.ч.),  $FeC_2O_4 \cdot 2H_2O$  (ч.д.а.) и металлический кобальт. Металлический кобальт получали восстановлением оксида  $Co_3O_4$  при 673–973 К в токе водорода. Заключительный отжиг проводили при 1373 К на воздухе в течение 120 часов с последующим медленным охлаждением образцов до комнатной температуры.

Дифрактограммы медленно охлажденных кобальтитов  $Nd_{1-x}Ba_xCo_{1-y}Fe_yO_{3-\delta}$  с  $x=0.05$  и  $0.6 \leq y \leq 1.0$ , подобно незамещенному  $NdFeO_{3-\delta}$ , были проиндексированы в рамках орторомбически искаженной перовскитоподобной ячейки (пр. гр.  $Pbnm$ ), тогда как барий обогащенные оксиды с  $x=0.7$  и  $0.7 \leq y \leq 1.0$  и  $x = 0.8$  и  $0.4 \leq y \leq 0.9$  кристаллизовались в идеальной кубической структуре (пр. гр.  $Pm\bar{3}m$ ).

Рентгенограммы образцов  $Nd_{1-x}Ba_xCo_{1-y}Fe_yO_{3-\delta}$  с  $x=0.1; 0.2$  и  $0.1 \leq y \leq 0.9$  содержали в равновесии два типа твердых растворов с орторомбической (пр. гр.  $Pbnm$ ) и тетрагональной (пр. гр.  $P4/mmm$ ) структурой, а с  $x = 0.7$  и  $0.2 \leq y \leq 0.6$  и  $x = 0.8$  и  $y = 0.3$  – с кубической (пр. гр.  $Pm\bar{3}m$ ) и тетрагональной (пр. гр.  $P4/mmm$ ) структурой.

Для всех однофазных составов  $Nd_{1-x}Ba_xCo_{1-y}Fe_yO_{3-\delta}$  из рентгенографических данных были рассчитаны параметры элементарных ячеек. Установлено, что замещение кобальта на железо в  $Nd_{0.2}Ba_{0.8}Co_{1-y}Fe_yO_{3-\delta}$  приводит к монотонному уменьшению параметров  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и объема элементарной ячейки.

Методом термогравиметрического анализа для  $Nd_{0.2}Ba_{0.8}Co_{1-y}Fe_yO_{3-\delta}$   $y = 0.5; 0.7$  и  $0.9$  получены зависимости кислородной нестехиометрии от температуры в интервале 298–1373 К на воздухе. Абсолютные значения содержания кислорода в образцах определены методом йодометрического титрования в шести параллелях. Показано, что содержание кислорода в оксидах  $Nd_{0.2}Ba_{0.8}Co_{1-y}Fe_yO_{3-\delta}$  при 298 К на воздухе увеличивается с увеличением содержания железа от  $2.65 \pm 0.03$  для  $y = 0.5$  до  $2.71 \pm 0.03$  для  $y = 0.9$ .

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2019-1924).*