

**СТРУКТУРНЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ОКСИДЕ $\text{NdSr}_2\text{Mn}_2\text{O}_7$
В ИНТЕРВАЛЕ ТЕМПЕРАТУР 20-1200°C**

Федорова О.М., Ведмидь Л.Б., Димитров В.М.

*Институт металлургии УрО РАН,
620016, Екатеринбург, ул.Амундсена, 101,
e-mail: fom55@mail.ru*

Методами высокотемпературной рентгенографии и дифференциальной сканирующей калориметрии изучены структурные изменения, происходящие в сложном оксиде $\text{NdSr}_2\text{Mn}_2\text{O}_7$ при воздействии на него высоких температур. Определение структурных параметров проведено методом Ритвелда с использованием программного комплекса GSAS. Исходный оксид $\text{NdSr}_2\text{Mn}_2\text{O}_7$ имеет тетрагональную структуру (пространственная группа $I4/mmm$) с параметрами элементарной ячейки: $a=3.8507(4)$, $c=19.967(8)$ Å. В структуре $\text{NdSr}_2\text{Mn}_2\text{O}_7$ атомы марганца окружены шестью атомами кислорода, четыре из которых располагаются в плоскости Mn-O (они обозначаются O3), один над плоскостью (обозначен O1), еще один под плоскостью (O2), образуя таким образом октаэдр MnO_6 . При комнатной температуре длина связи Mn-O1 равна 2.04 Å, а $\text{Mn-O}_2 = 1.8$ Å, т.е. октаэдр MnO_6 испытывает ян-теллеровское искажение, вызванное наличием ионов Mn^{3+} . В интервале температур 220-300°C на температурных зависимостях параметров и объема элементарной ячейки $\text{NdSr}_2\text{Mn}_2\text{O}_7$ наблюдаются изломы, свидетельствующие о структурной перестройке в этом сложном оксиде. Расчет длин связей Mn-O показал, что при этих температурах уменьшается расстояние Mn-O1, увеличивается длина связи Mn-O2, они становятся практически равными (≈ 2.02 Å), что свидетельствует о снятии ян-теллеровского искажения. На кривой ДСК в этом интервале температур наблюдается эндотермический пик, не связанный с потерей массы, что также свидетельствует о ян-теллеровском переходе. Дальнейшее повышение температуры вызывает плавное увеличение длины связи Mn-O1, а расстояние Mn-O2 остается практически постоянным. Атомы Nd/Sr находятся в двух позициях. В перовскитоподобных блоках атомы Nd/Sr(1) окружены 12 атомами кислорода (восемь атомов O3 и четыре атома O1), в блоках типа каменной соли атомы Nd/Sr(2) окружены 9 атомами кислорода (4 атома O3 и 5 атомов O2, один из которых апикальный). Установлено, что с ростом температуры увеличиваются длины связей (Nd/Sr)1-O1 и (Nd/Sr)2-O3 и резко уменьшаются расстояния (Nd/Sr)1-O3 и (Nd/Sr)2-O2, что свидетельствует о деформации этих структурных фрагментов.

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН в рамках Программы фундаментальных исследований государственных академий с использованием оборудования ЦКП Урал-М.