**Синтез, локальная и протяженная структура четверных оуэнситов с медью и железом**

***Полевик А.О.***

*Аспирант, 2 год обучения*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail:* *a.o.polevik@mail.ru*

Актуальной задачей является поиск новых термоэлектрических материалов, не содержащих в своём составе дорогих и токсичных элементов. Одним из классов таких соединений являются синтетические аналоги медь-сульфидных минералов, содержащие в своём составе атомы тяжелых элементов [1]. Сочетание в структуре электропроводящего каркаса из тетраэдров CuS4 и крупных колеблющихся атомов, которые способствуют рассеянию тепла, может привести к высоким значениям термоэлектрической добротности [2]. Таким требованиям отвечают твердые растворы на основе минерала оуэнсита (Ba,Pb)6(Cu,Fe,Co,Ni)25S27, поэтому актуальной задачей является изучение особенностей их локальной и протяженной структуры с целью выявления взаимосвязи с термоэлектрическими свойствами.

Нами разработана методика синтеза как поликристаллических образцов четверных оуэнситов составов Ba6Cu25‑xFexS27 (x = 8 – 25), так и монокристаллов. По результатам рентгенофазового и локального рентгеноспектрального анализа порошков установлена область гомогенности твёрдых растворов. Рентгеноструктурный анализ как порошков, так и монокристаллов показал, что в оуэнситах всех составов в октаэдрической позиции находится только железо, а в тетраэдрической позиции смешиваются медь и железо. При этом по данным РСА в структуре оуэнситов нет вакансий, тогда как ЛРСА основной фазы в образцах с высоким содержанием железа (х = 20 – 25) указывает на небольшой дефицит атомов железа (≈ 1-2 ат. на ф.е.).

Для серии однофазных образцов составов Ba6Cu25-xFe­xS27 (x = 9 – 17) были записаны 57Fe мессбауэровские спектры при комнатной температуре. На основании кристаллографических данных была предложена модель, позволившая описать все полученные спектры. Анализ зависимостей сверхтонких параметров подтверждает понижение средней степени окисления железа и уменьшение степени искажения тетраэдров при увеличении содержания железа.

*Работа поддержана Министерством науки и высшего образования РФ, грант № 075-15-2021-1353.*

**Литература**

1. Powell A. J. Powell A. V. Recent developments in Earth-abundant copper-sulfide thermoelectric materials // Appl. Phys. 2019. V. 126. Is. 10. P. 100901-1 – 100901-20

2. Sales B. C., Mandrus D., Williams R. K. Filled skutterudite antimonides: a new class of thermoelectric materials // Science. 1996. V. 272. Is. 5266. P. 1325-1328.