

**КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И СВОЙСТВА
СЛОЖНЫХ ОКСИДОВ $\text{LnBaCu}_{1-x}\text{Fe}_{1+x}\text{O}_{5+\delta}$ ($\text{Ln} = \text{Sm}, \text{Gd}$)***Баженова П.А.^(1,2), Волкова Н.Е.⁽¹⁾, Сунцов А.Ю.⁽²⁾*⁽¹⁾ Уральский федеральный университет

620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

⁽²⁾ Институт химии твердого тела УрО РАН

620990, г. Екатеринбург, ул. Первомайская, д. 91

Сложные оксиды с перовскитоподобной структурой общего состава $\text{A}_{1-x}\text{A}'_x\text{BO}_{3-\delta}$ (где А - редкоземельный элемент, А' - щелочноземельный элемент, В - 3d металл), обладают рядом уникальных физико-химических свойств, реализация которых, достигается за счет гетеровалентного замещения А и/или В катионов. Дефицит по кислороду, возникающий в условиях, когда катион в В подрешетке имеет более одной устойчивой степени окисления, способствует осуществлению быстрого транспорта ионов кислорода, что позволяет конструировать на основе данных соединений кислород-проводящие мембраны и датчики кислорода. Высокая смешанная электронно-ионная проводимость перовскитов делает их перспективными при разработке материалов для электродов твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ). Целью настоящей работы стало получение и определение кристаллической структуры сложных оксидов $\text{LnBaCu}_{1-x}\text{Fe}_{1+x}\text{O}_{5+\delta}$ ($\text{Ln}=\text{Sm}, \text{Gd}$), ($x = -0.2, 0, 0.2$).

Синтез образцов осуществляли по глицерин-нитратной технологии. Кристаллическую структуру исследуемых образцов изучали методом РФА. Идентификацию фаз осуществляли при помощи картотеки ICDD и программного пакета "Фреак" (ИЕНиМ, УрФУ). Уточнение структурных параметров анализируемых сложных оксидов проведено методом полнопрофильного анализа Ритвелда в программе «Fullprof-2008». Кислородную нестехиометрию образцов определяли методами термогравиметрического анализа и йодометрического титрования как функцию от температуры на воздухе. Определение КТР образцов осуществляли из дилатометрических данных.

Методом РФА установлено, что все исследованные образцы являются однофазными. Кристаллическая структура всех оксидов описана в рамках тетрагональной ячейки пространственной группы $P4/mmm$. Следует отметить, что параметры элементарной ячейки слабо изменяются с концентрацией меди, что может быть связано с близкими радиусами ионов железа и меди. Содержание кислорода в образцах $\text{LnBaCu}_{1-x}\text{Fe}_{1+x}\text{O}_{5+\delta}$ уменьшается с увеличением концентрации ионов меди. Это связано с тем, что медь становится полностью или частично акцептором электронов (Cu_{Fe}^{\prime}) ($\text{ЭО}_{\text{Cu}}=1.75$) и способствует возникновению кислородных вакансий ($V_{\text{O}}^{\bullet\bullet}$) и/или электронных дырок. Из данных дилатометрического анализа установлено, что наименьшее значение ЛКТР имеет образец $\text{GdBaCu}_{1.2}\text{Fe}_{0.8}\text{O}_{5+\delta}$.