

увеличением количества меди от 0,1 до 0,6 в их составе. Дефектную структуру синтезированных образцов проанализировали с использованием данных по кислородной нестехиометрии.

ФАЗОВЫЕ РАВНОВЕСИЯ, КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И КИСЛОРОДНАЯ НЕСТЕХИОМЕТРИЯ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ В СИСТЕМЕ Sm–Sr–Fe–Co–O

Бобина Е.В., Волкова Н.Е., Гаврилова Л.Я.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Материалы со структурой перовскитов ($AA'BO_3$, где А - РЗЭ, А' - ЩЗЭ, В - 3-d металл) имеют широкое применение, обусловленные высокой стабильностью структуры перовскита, что позволяет проводить легирование катионами в А- и В-позициях решетки с минимальным изменением структуры. Указанные соединения могут служить электродами топливных элементов, катодами CO_2 -лазеров, катализаторами дожигания выхлопных газов и пр. Поэтому необходимо знать способы и условия их синтеза, свойства. Целью данной работы являлось исследование областей существования, кристаллической структуры, и кислородной нестехиометрии сложнооксидных фаз общего состава $Sr_{1-x}Sm_xCo_yFe_{1-y}O_{3-\delta}$ в зависимости от внешних условий.

Синтез образцов проводился глицерин-нитратным методом с промежуточными перетираниями, заключительным и отжигом при 1100 °С на воздухе и последующей закалкой на комнатную температуру.

Фазовый состав полученных оксидов контролировали рентгенографически. Идентификацию фаз осуществляли при помощи картотеки JCPDS и программного пакета «fpeak». Определение параметров элементарных ячеек из дифрактограмм осуществляли с использованием программы «CelRef 4.0», уточнение – методом полнопрофильного анализа Ритвелда в программе «FullProf 2008». Содержание кислорода в образцах определено методами высокотемпературной термогравиметрии и йодометрического титрования.

По результатам РФА установлено, что твердые растворы $Sr_{1-x}Sm_xCo_yFe_{1-y}O_{3-\delta}$ (при $x = 0.1-0.3$) образуются в интервале составов $0 \leq y \leq 1$, оксиды $Sr_{0.6}Sm_{0.4}Co_{1-y}Fe_yO_{3-\delta}$ существуют при $y < 0.5$ и $y < 0.7$, а в ряду $Sr_{0.5}Sm_{0.5}Co_{1-y}Fe_yO_{3-\delta}$ образуются лишь два оксида с $y = 0$ и 0.1. Рентгенограммы незамещенных кобальтитов $Sr_{1-x}Sm_xCoO_{3-\delta}$ и образцов $Sr_{1-x}Sm_xCo_{1-y}Fe_yO_{3-\delta}$ ($x = 0.3, 0.4$; $y = 0.1$) удовлетворительно описываются в рамках тетрагональной ячейки пространственной группы $I4/mmm$.

Рентгенограммы сложных оксидов с большим содержанием железа были проиндексированы в рамках кубической ячейки пространственной группы $Pm\bar{3}m$.

Для всех однофазных образцов определены параметры элементарной ячейки и координаты атомов. Установлено, что параметры элементарной ячейки увеличиваются с ростом концентрации стронция и железа в образцах. Подобные тенденции можно объяснить с точки зрения размерных эффектов ($r_{Sm^{3+}}=1.38 \text{ \AA}$; $r_{Sr^{2+}}=1.58 \text{ \AA}$, к.ч. 12; $r_{Fe^{3+}}/r_{Fe^{4+}}=0.785/0.725 \text{ \AA}$; $r_{Co^{3+}}/r_{Co^{4+}}=0.75/0.67 \text{ \AA}$).

Показано, что величина содержания кислорода в $Sr_{1-x}Sm_xCo_{1-y}Fe_yO_{3-\delta}$ увеличивается с увеличением концентрации самария и железа в образцах и уменьшением температуры.

Исследование выполнено при поддержке РФФИ и Фонда «Национальное интеллектуальное развитие» в рамках научного проекта № 16-33-80042 мол_эв_а.

СИНТЕЗ И АТТЕСТАЦИЯ НИЗКОСИММЕТРИЧНЫХ МОЛИБДАТОВ ВИСМУТА $Bi_{13-x}A_xMo_{5-y}B_yO_{34\pm\delta}$ (A-Ba, Mn; B-Fe)

Аришина К.В., Михайловская З.А.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Работа посвящена исследованию возможности получения и установлению свойств кислородно-ионных проводников на основе молибдата висмута $Bi_{13}Mo_5O_{34\pm\delta}$, замещенного марганцем и железом, а также с одновременным допированием подрешетки висмута барием и позиций молибдена железом. Матричное соединение $Bi_{13}Mo_5O_{34\pm\delta}$ содержит в своей структуре уникальные для твердых оксидов колончатые фрагменты $[Bi_{12}O_{14}]_n^{8n+}$, ориентированные вдоль оси u , и окруженные кислородно-молибденовыми полиэдрами и изолированными ионами висмута. $Bi_{13}Mo_5O_{34\pm\delta}$ кристаллизуется в триклинной симметрии, переходя при 310°C в устойчивую моноклинную модификацию и проявляет себя как перспективный одномерный кислород-ионный проводник: перенос заряда в структуре осуществляется анизотропно, вдоль колонок. Целью направленного допирования молибдата висмута является увеличение общей электропроводности и удаление критического для материала фазового перехода из триклинной полиморфной модификации в моноклинную.

Образцы были синтезированы по стандартной керамической технологии, фазовый состав контролировали методом РФА. Определены