

области гомогенности твердых растворов и области существования структурных модификаций. С возрастанием концентрации допанта во всех случаях происходит увеличение симметрии элементарной ячейки до моноклинной. Рассчитаны параметры элементарной ячейки. При помощи высокотемпературной рентгенографии исследована зависимость параметров элементарной ячейки от температуры и установлены температуры полиморфных переходов для $\text{Bi}_{12.8}\text{Mn}_{0.2}\text{Mo}_5\text{O}_{34.5-8}$. Методом сканирующей электронной микроскопии изучена керамика полученных молибдатов висмута, определена низкая пористость, и высокая плотность образцов. Размер частиц порошков измерен при помощи лазерной дифракции. Избранные образцы были аттестованы методом импедансной спектроскопии. Показано существенное увеличение электропроводности по сравнению с матричным соединением.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16-33-60026 и гранта Президента РФ МК-7979.2016.3.

СИНТЕЗ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА

СЛОИСТЫХ ФАЗ $\text{Ba}_{1-x}\text{Gd}_x\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{3-\delta}$

Дмитриева Е.С., Волкова Н.Е., Гаврилова Л.Я.

Уральский федеральный университет

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

Упорядоченные слоистые перовскитоподобные оксиды $\text{Ba}_{1-x}\text{Ln}_x\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{3-\delta}$ ($\text{Ln}=\text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Gd}$) в настоящее время вызывают значительный интерес для исследования в связи с возможностью их потенциального применения в различных областях техники.

Благодаря устойчивости к окислительным средам и высоким температурам, высокой электропроводности и подвижности кислородной подрешетки, данные материалы используются в качестве катодов CO_2 -лазеров, электродов топливных элементов, кислородных мембран и катализаторов дожигания выхлопных газов.

Переходная степень окисления 3-d металла способствует образованию вакансий кислорода, в то время как существенное различие радиусов лантаноида и бария приводит к упорядочению катионов $\text{Ln}^{3+}/\text{Ba}^{2+}$ и вакансий кислорода.

Целью данной работы явились оптимизация условий синтеза и изучение кристаллической структуры твердых растворов состава $\text{Ba}_{1-x}\text{Gd}_x\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{3-\delta}$.

Поликристаллические образцы $\text{Ba}_{1-x}\text{Gd}_x\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{3-\delta}$ ($0.3 \leq x \leq 0.4$, $0 \leq y \leq 0.5$) для исследования были получены по глицерин-нитратной тех-

нологии. В качестве исходных реактивов использовали оксид гадолиния Gd_2O_3 , карбонат бария $BaCO_3$, предварительно прокаленные для удаления адсорбированной влаги и газов, оксалат железа $FeC_2O_4 \times 2H_2O$ и металлический кобальт. Заключительный отжиг проводили при $1100^\circ C$ на воздухе в течение 120 часов с промежуточными перетираниями, с последующим медленным охлаждением образцов до комнатной температуры со скоростью $100^\circ C/час$.

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 программ «CelRef 4.0», уточнение полнопрофильного анализа Ритвелда в программе «FullProf 2008».

Для однофазных образцов из рентгенографических данных рассчитаны параметры элементарной ячейки и координаты атомов.

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

ОЦЕНКА ВЕРОЯТНОСТИ СПИН-ЗАПРЕЩЕННОГО ПЕРЕХОДА В Se-ЗАМЕЩЕННОЙ [NiFe]-ГИДРОГЕНАЗЕ

Еремина А.Д., Кузубов А.А.

Сибирский федеральный университет
660041, г. Красноярск, пр. Свободный, д. 79

Спин-запрещенный переход - это термин, используемый для описания безызлучательных переходов между электронными состояниями с различными спинами. Данный переход играет важную роль в науках, изучающих свойства молекулярных структур. Например, в фотофизике и фотохимии, спин-запрещенный переход наравне с самопроизвольным излучением и внутренней конверсией (безызлучательные переходы между состояниями с одинаковым спином), определяет скорость распада и время жизни возбужденных электронных состояний молекулы. Многие термические активирующиеся реакции протекают по спин-запрещенному механизму, скорость данных реакций сильно зависит от эффективности перехода между различными спиновыми состояниями. Однако, в механизмах каталитических реакций, как правило, предполагается осуществление только одного спинового состояния. Наши работы по биологическим кластерам Fe и FeNi указывают на то, что такие неадиабатические переходы, обусловленные спин-орбитальным взаимо-