

СТРУКТУРА И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЛОЖНЫХ ОКСИДОВ $Y_{1.2}Ba_{1.8}Fe_{3-x}Co_xO_{8+\Delta}$ ($X=1.02, 1.05$ И 1.08)

Соломахина Е.Е.¹, Брюзгина А.В.¹, Урусова А.С.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

E-mail: el.sol.11.12.1998@gmail.com

STRUCTURE AND PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES OF COMPLEX OXIDES $Y_{1.2}Ba_{1.8}Fe_{3-x}Co_xO_{8+\Delta}$ ($X = 1.02, 1.05$ AND 1.08)

Solomakhina E. E.¹, Bryuzgina A. V.¹, Urusova A. S.¹

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The purpose of the study is to determine the structure, oxygen nonstoichiometry and physicochemical properties of complex oxides with the general formula $Y_{1.2}Ba_{1.8}Fe_{3-x}Co_xO_{8+\delta}$, where $x = 1.02, 1.05$, and 1.08 .

Подробное изучение твердого раствора состава $Y_2Ba_3Fe_{5-y}Co_yO_{13-\delta}$ началось после получения оксида $Y_2Ba_3Fe_3Co_2O_{13-\delta}$ со слоистой упятеренной структурой типа « $a_p \times a_p \times 5a_p$ » в работе [1]. Изначально было установлено, что однофазные оксиды тетрагональной симметрии образуются при $1.7 \leq y \leq 2.1$. Однако дальнейшие исследования кристаллической структуры показали, что тетрагональная структура типа « $a_p \times a_p \times 5a_p$ » наблюдается только при $1.9 \leq y \leq 2.1$, а при $1.7 \leq y \leq 1.8$ образуются оксиды с упорядочением вдоль оси с типа « $a_p \times a_p \times 3a_p$ ». Номинальный состав последних может быть записан следующим образом $Y_{1.2}Ba_{1.8}Fe_{3-x}Co_xO_{8+\delta}$.

Синтез образцов проводился на воздухе путем пиролиза глицерин-нитратных композиций. В качестве исходных веществ были взяты следующие реактивы: оксид иттрия Y_2O_3 (ИтО-В), карбонат бария $BaCO_3$ (ос.ч.), оксалат железа $FeC_2O_4 \cdot 2H_2O$ (ч.д.а) и металлический кобальт Со и глицерин (ч.д.а.). Перед проведением синтеза оксид иттрия и карбонат бария прокачивали для удаления адсорбированной влаги и газов.

Фазовый состав полученных оксидов был исследован методом рентгенофазового анализа. Результаты РФА показали, что в данных условиях синтеза все образцы являются однофазными. Кислородная нестехиометрия на воздухе была определена методом потенциометрического титрования на автоматическом титраторе «Аквилон АТП-02».

Кристаллическая структура всех однофазных оксидов была описана в рамках тетрагональной элементарной ячейки типа $a_p \times a_p \times 3a_p$ (пр. гр. $P4/mmm$). Уточнение параметров элементарных ячеек проводили с помощью полнопрофильного анализа Ритвельда в программе «FullProf».

Установлено, что при введении кобальта в подрешетку железа наблюдается уменьшение параметров элементарной ячейки и небольшому уменьшению кислорода в образцах. Это связано с размерным фактором: ион железа $Fe^{3+}(0.55\text{Å})$,

LS, 0.645 Å, HS, к.ч.=6) больше иона кобальта Co^{3+} (0.545 Å, LS, 0.61 Å, HS, к.ч. = 6) [2].

Для изучения транспортных свойств и КТР порошки однофазных образцов прессовали в виде брусков (5×5×25 мм) и спекали при температуре 1150 °С в течение 20 часов на воздухе.

Исследование изменения удлинения образца от температуры проводили на dilatометре Netzsch DIL 402C в интервале температур 25–1100 °С на воздухе. В результате dilatометрического анализа была получена температурная зависимость относительного линейного расширения оксидов. Из полученных данных были рассчитаны коэффициенты термического расширения (КТР).

Общую электропроводность и термо-ЭДС измеряли 4-х контактным методом при постоянном токе в интервале температур 25–1100 °С на воздухе.

Работа выполнена при поддержке совета по грантам Президента Российской Федерации стипендии Президента Российской Федерации молодым ученым и аспирантам (Конкурс СП-2019) № СП-3689.2019.1 «Получение новых перспективных материалов для электрохимических устройств на основе феррита иттрия-бария».

1. Lebedev O.I., Turner S., Caignaert V., Cherepanov V.A., Raveau B. Chemistry of Materials, V. 28(9), p. 2907–2911, (2016).
2. Shannon R.D. Revised Effective Ionic Radii and Systematic Studies of Intera-tomic Distances in Halides and Chalcogenides // Acta Cryst. 1976. V. A32. P. 751.