

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КИСЛОРОДНОЙ НЕСТЕХИОМЕТРИИ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ $\text{SmBaCo}_{2-x}\text{Fe}_x\text{O}_{6-\Delta}$

Закирьянов П.О.¹, Иванов И.Л.¹, Цветков Д.С.¹

¹) ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»,
г. Екатеринбург, Россия
E-mail: petr.zakirianov@urfu.ru

DETERMINATION OF OXYGEN NON-STECHIOMETRY AND MODELLING OF DEFECTIVE STRUCTURE $\text{SmBaCo}_{2-x}\text{Fe}_x\text{O}_{6-\delta}$

Zakiryaynov P.O.¹, Ivanov I.L.¹, Tsvetkov D.S.¹

¹) Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin,
Ekaterinburg, Russia

This work is devoted to the determination of oxygen non-stoichiometry in double perovskites, barium and samarium Fe-doped cobaltites. Also, a successful modeling of defective crystal structure of the compounds under discussion was performed.

В сложнооксидных системах со структурой двойного перовскита $\text{AA}'\text{B}_2\text{O}_6$ реализуется сверхструктура с упорядочением перовскитных групп вдоль кристаллографической оси c . Данное упорядочение характеризуется чередованием слоев перовскитных групп, содержащих в себе только атомы А или А'. Это обеспечивает энергетическую неоднородность, и как следствие неэквивалентность физико-химических свойств данных слоев перовскитных групп. Сообщается [1], что в двойных перовскитах кобальтитах бария и редкоземельных элементов (РЗЭ) кислородная нестехиометрия (при $0 < \delta < 1$) реализуется в основном за счет слоев содержащих атомы РЗЭ [RO].

В рамках данной работы был синтезирован ряд допированных железом двойных перовскитов самария и бария $\text{SmBaCo}_{2-x}\text{Fe}_x\text{O}_{6-\delta}$ ($x = 0,2; 0,4; 0,6$). Методами термогравиметрического анализа и восстановления в токе водорода было определено содержание кислорода в обсуждаемых соединениях. По полученным результатам, было выполнено моделирование дефектной кристаллической структуры исследуемых соединений, с применением модели, учитывающей энергетическую неоднородность кислородной подрешетки допированных образцов.

Полученные данные позволяют судить об влиянии допирования железом в подрешетку кобальта на содержание кислорода и термодинамические параметры основных реакций дефектообразования в $\text{SmBaCo}_{2-x}\text{Fe}_x\text{O}_{6-\delta}$.

Работа была выполнена при поддержке гранта РНФ №22-23-00834

1. Anderson P.S., Kirk C., Knudsen J., Reaney I.M., West A.R. Structural characterization of REBaCo₂O_{6-δ} phases (RE=Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho) // Solid State Sci. – 2005. – V. 7. – № 10. – P. 1149-1156