

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ТВЁРДЫХ РАСТВОРОВ $\text{Sr}_{1-x}\text{Sm}_x\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{3-\delta}$

Власенко Д.А., Волкова Н.Е.

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

Сложные оксиды на основе РЗЭ и 3d-переходных металлов со структурой перовскита широко используются в качестве компонентов различных электрохимических устройств, например кислородных мембран и электродных материалов для твердооксидных топливных элементов. Для практического применения данных материалов необходимо знать условия их получения, кристаллическую структуру и физико-химические свойства. Объектами настоящего исследования были выбраны оксиды с перовскитоподобной структурой общего состава $\text{Sr}_{1-x}\text{Sm}_x\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{3-\delta}$. Целью настоящей работы стало определение области гомогенности изучение кристаллической структуры и физико-химических свойств $\text{Sr}_{1-x}\text{Sm}_x\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{3-\delta}$ при $x = 0.1; 0.3$; $y = 0.1 - 0.9$, $\Delta y = 0.2$.

Синтез образцов осуществлялся по глицерин-нитратной технологии на воздухе, с промежуточными перетираниями в среде этилового спирта в течение 120 часов. Заключительный отжиг сопровождался медленным охлаждением до комнатной температуры со скоростью 100 °С в час. Фазовый состав полученных оксидов установлен с помощью рентгенофазового анализа. Параметры элементарной ячейки уточнены методом Ле-Бейла, структурные параметры – методом Ритвельда с использованием пакета «FullProf».

По результатам РФА установлено, что все полученные оксиды являются однофазными. Оксиды $\text{Sr}_{1-x}\text{Sm}_x\text{Fe}_{0.1}\text{Co}_{0.9}\text{O}_{3-\delta}$ ($x = 0.9; 0.7$) кристаллизуются в тетрагональной ячейке (пр. гр. $I4/mmm$), остальные в – кубической (пр. гр. $Pm3m$). Для всех однофазных образцов определены параметры элементарной ячейки и координаты атомов. Установлено, что увеличение содержания железа приводит к увеличению параметров элементарной ячейки, что связано с размерным фактором.

Методом полного восстановления образцов в токе водорода определено абсолютное значение кислородной нестехиометрии δ во всех однофазных оксидах. Установлено, что содержание кислорода ($3-\delta$) увеличивается с ростом содержания железа в образцах, что можно объяснить большей электроотрицательностью кобальта по сравнению с железом. По температурным зависимостям содержания кислорода в $\text{Sr}_{1-x}\text{Sm}_x\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{3-\delta}$, установлено, что выход кислорода в газовую фазу начинается при температуре выше 400 °С.

Четырёх-контактным методом на постоянном токе изучена электропроводность керамических образцов $\text{Sr}_{0.9}\text{Sm}_{0.1}\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{3-\delta}$ ($y = 0.5; 0.7$). Полученная зависимость имеет экстремальный характер и достигает своего максимального значения около 400 °С. По положительному значению коэффициента термоЭДС установлено, что изучаемые оксиды обладают преимущественно дырочным характером проводимости.