

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $\text{BaFe}_{1-x}\text{Gd}_x\text{O}_{3-\delta}$

Гайфутдинова П.М., Волкова Н.Е., Гаврилова Л.Я.

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

Сложные оксиды со структурами перовскита и его производных, образующиеся в системах $\frac{1}{2}\text{Ln}_2\text{O}_3\text{-BaO-}\frac{1}{2}\text{Fe}_2\text{O}_3$, вызывают интерес благодаря высоким значениям смешанной электронной и кислород-ионной проводимости, умеренным значениям коэффициента термического расширения и стабильности в окислительной атмосфере. Такой набор свойств позволяет использовать эти материалы в качестве катодов высокотемпературных твердооксидных топливных элементов, кислородопроницаемых мембран, химических сенсоров и катализаторов и др. Многие важнейшие физико-химические свойства оксидов зависят не только от природы и соотношения катионов, образующих данный оксид, но и от содержания кислорода, которое может существенно изменяться при варьировании температуры и давления кислорода. Настоящая работа посвящена изучению кристаллической структуры, кислородной нестехиометрии и физико-химических свойств твердых растворов $\text{BaFe}_{1-x}\text{Gd}_x\text{O}_{3-\delta}$.

Синтез образцов для исследования общего состава $\text{BaFe}_{1-x}\text{Gd}_x\text{O}_{3-\delta}$ проводили по глицерин-нитратному методу. В качестве исходных компонентов для синтеза использовали Gd_2O_3 , BaCO_3 , $\text{FeC}_2\text{O}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. Полученный порошок, отжигали при 1100°C с промежуточными перетираниями в среде этилового спирта; общее время синтеза составило 120 часов. Фазовый состав синтезированных образцов контролировали методом рентгенофазового анализа с помощью дифрактометра Equinox-3000.

Согласно данным рентгенофазового анализа установлено, что твердые растворы $\text{BaFe}_{1-x}\text{Gd}_x\text{O}_{3-\delta}$ образуются однофазными в интервале составов $0 \leq x \leq 0.15$. Кристаллическая структура однофазных образцов была описана в рамках кубической элементарной ячейки (пр. гр. $Rm\bar{3}m$). Показано, что замещение ионов железа на ионы гадолиния приводит к увеличению параметров и объема элементарной ячейки твердого раствора, что связано с большим радиусом Gd^{3+} по сравнению с Fe^{3+} .

Кислородная нестехиометрия всех однофазных образцов была изучена методами высокотемпературной термогравиметрии. Показано, что образцы $\text{BaFe}_{1-x}\text{Gd}_x\text{O}_{3-\delta}$ начинают обмениваться кислородом с атмосферой при температуре выше 350°C . Абсолютное значение содержания кислорода было определено методом полного восстановления образцов в токе водорода.

Термическое расширение, общая электропроводность и коэффициент термо-ЭДС всех образцов были изучены на воздухе в зависимости от температуры.