

УДК-54-165.2

**КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ГОМОЛОГИЧЕСКОГО РЯДА
РАДЛЕСДЕНА-ПОППЕРА ПРИ $n=2$: $Sr_{3-z}Sm_zFe_2O_{7-\delta}$**

**Л.В. Хвостова, аспирант, Н.Е. Волкова, к.х.н., доцент, В.А. Черепанов,
профессор, профессор**

Уральский федеральный университет имени первого президента России Б.Н.
Ельцина
г. Екатеринбург

Оксиды переходных металлов со смешанной кислород-ионной и электронной проводимостью находят уникальные применения, такие как электродные материалы для твердооксидных топливных элементов и кислородпроводящих мембран. Для этих применений материалы должны обладать важным набором свойств: высокая электронная и кислород-ионная проводимость, структурная и химическая стабильность при высоких температурах. Для этих целей перспективными являются перовскитоподобные оксиды переходных металлов.

Один из классов материалов, привлечших внимание в последние годы, являются перовскитоподобные оксиды, принадлежащие к ряду Раддлесдена-Поппера.

Целью данной работы является определение кристаллической структуры, кислородной нестехиометрии $Sr_{3-z}Sm_zFe_2O_{7-\delta}$.

Синтез образцов проводили по стандартной керамической и глицерин-нитратной технологиям. Фазовый состав полученных оксидов контролировали рентгенографически. Определение параметров элементарных ячеек осуществляли с использованием программы «CelRef 4.0», уточнение – методом полнопрофильного анализа Ритвелда в программе «FullProf 2008». Кислородную нестехиометрию (δ) сложных оксидов изучали методом термогравиметрического анализа (ТГА) как функцию температуры (в интервале 25 – 1100°C) на воздухе.

Сложные оксиды $Sr_{3-z}Sm_zFe_2O_{7-\delta}$ были получены однофазными в интервале составов $0 \leq z \leq 0.3$. $Sr_{3-z}Sm_zFe_2O_{7-\delta}$ ($0 \leq z \leq 0.3$) кристаллизуются в тетрагональной ячейке пространственной группы $I4/mmm$. На рисунке 1 представлена рентгенограмма $Sr_{2.7}Sm_{0.3}Fe_2O_{7-\delta}$, обработанная по методу полнопрофильного анализа Ритвелда. Параметры элементарных ячеек твердых растворов $Sr_{3-z}Sm_zFe_2O_{7-\delta}$ с $0 \leq z \leq 0.3$, рассчитанные из рентгенографических данных, приведены в таблице 1.

Таблица 1

Параметры и объем элементарных ячеек сложных оксидов $Sr_{3-z}Sm_zFe_2O_{7-\delta}$ ($0 \leq z \leq 0.3$)

x	структура	$a, \text{Å}$	$b, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	$V, (\text{Å})^3$
0	тетрагональная	3.866(1)	3.866(1)	20.152(1)	301.25(2)
0.3	пр.гр. $I4/mmm$	3.869(1)	3.869(1)	20.081(1)	300.57(2)

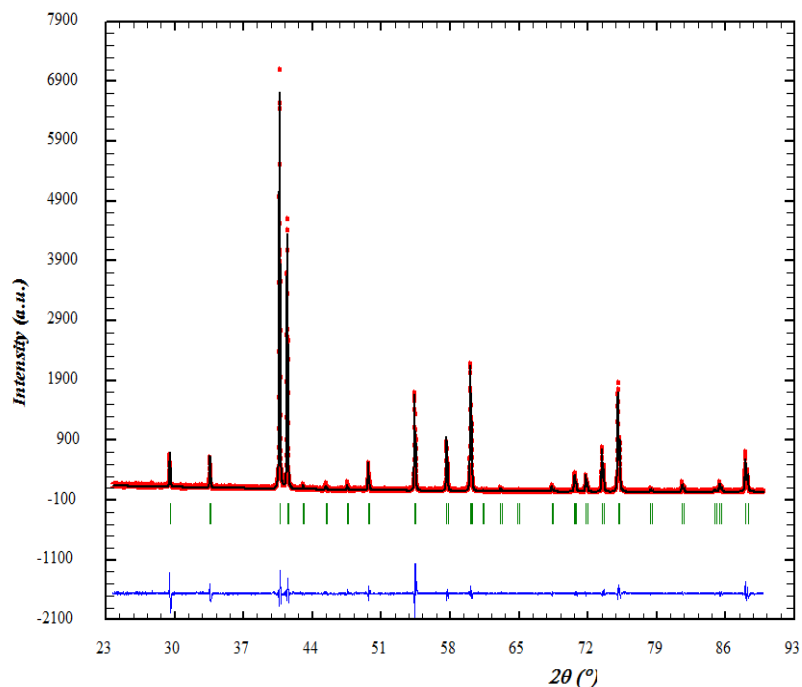


Рис. 1. Рентгенограмма $\text{Sr}_{2.7}\text{Sm}_{0.3}\text{Fe}_2\text{O}_{7-\delta}$, обработанная по методу Ритвелда

Для подтверждения возможности использования данных соединений в качестве катодных материалов необходимы дальнейшие исследования.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-73-00159)