

УДК-544.169

## СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ОКСИДОВ НА ОСНОВЕ РЗЭ

Я. В. Чекушина, МЕН-360412, 3 курс, Л.В. Хвостова, Н.Е. Волкова,  
В.А. Черепанов

ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»  
г. Екатеринбург

Перовскитоподобные соединения на основе РЗЭ имеют большое применение в различных областях промышленности в качестве катодных материалов, магнитных материалов, катализаторов, кислород проводящих мембран [1-4]. Однако изучение данных веществ не теряет свою актуальность в связи с возможностью образования огромного количества различных соединений.

Целью данной работы является определение области гомогенности и изучение структуры, физико-химических свойств соединений с общей формулой  $Sr_{1-x}Gd_xFeO_3$ .

Синтез образцов общего состава  $Sr_{1-x}Gd_xFeO_3$  проводили по стандартной керамической и глицерин-нитратной технологиям.

Фазовый состав полученных оксидов определяли рентгенографически. Определение параметров элементарных ячеек осуществляли с использованием программы «CelRef 4.0», уточнение – методом полнопрофильного анализа Ритвелда в программе «FullProf 2008».

Рентгенограмма феррита  $GdFeO_{3-\delta}$ , полученного методом твердофазного синтеза, была проиндексирована в рамках орторомбической ячейки пространственной группы  $Pbnm$  с параметрами:  $a = 5.348 \text{ \AA}$ ,  $b = 5.602 \text{ \AA}$ ,  $c = 7.665 \text{ \AA}$ .

Установлено, что твердые растворы  $Sr_{1-x}Gd_xFeO_{3-\delta}$  с  $x = 0.05 - 0.30$  и  $0.8 - 1.0$  кристаллизуются в кубической (пр.гр.  $Pm\bar{3}m$ ) и орторомбической (пр. гр.  $Pbnm$ ) ячейках соответственно.

На рисунке 1 представлена рентгенограмма образца  $Sr_{0.8}Gd_{0.2}FeO_{4-\delta}$ , обработанная по методу полнопрофильного анализа Ритвелда.

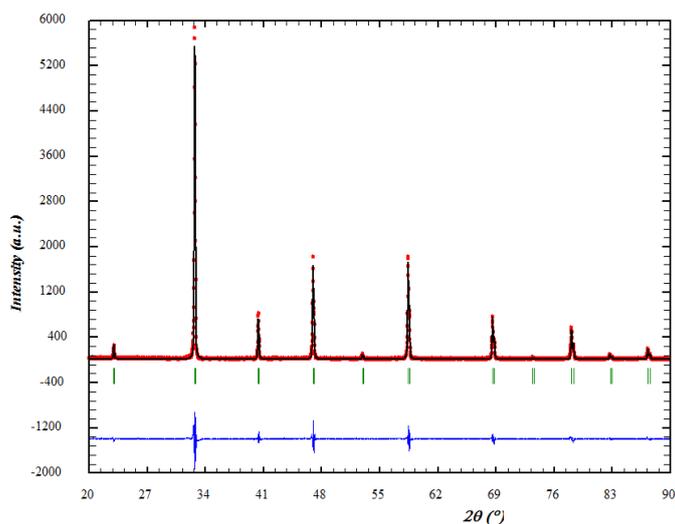
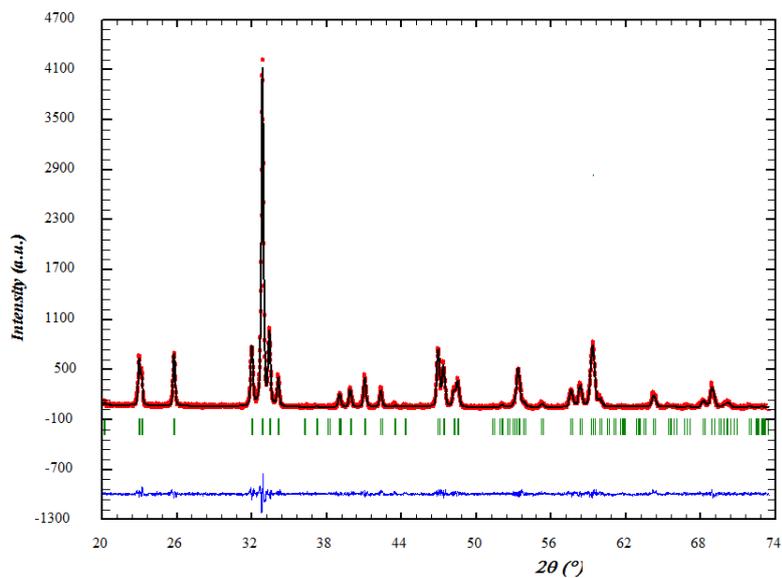


Рис. 1 – Рентгенограмма, обработанная по методу Ритвелда сложного оксида  $\text{Sr}_{0.8}\text{Gd}_{0.2}\text{FeO}_{4-\delta}$

В качестве примера для  $x = 0.8 - 1.0$  на рисунке 2 приведена рентгенограмма образца  $\text{Sr}_{0.2}\text{Gd}_{0.8}\text{FeO}_{4-\delta}$ , кристаллизующегося в орторомбической ячейке (пр. гр.  $Pbnm$ ) с параметрами элементарной ячейки:  $a = 5.377(1) \text{ \AA}$ ,  $b = 5.561(1) \text{ \AA}$ ,  $c = 7.678(1) \text{ \AA}$ .



a)

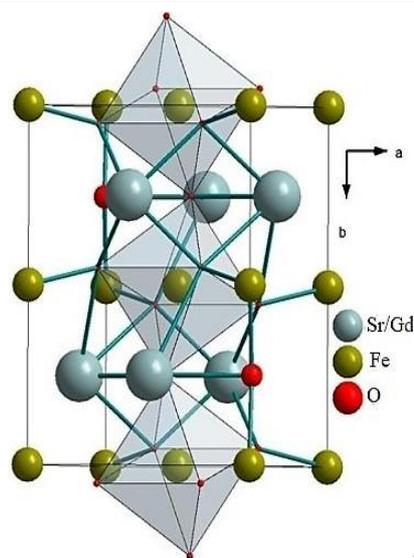


Рис. 2 – Рентгенограмма, обработанная по методу Ритвелда, (a) и структурная модель элементарной ячейки (b) сложного оксида  $\text{Sr}_{0.2}\text{Gd}_{0.8}\text{FeO}_{3-\delta}$

Из рентгеновских данных были рассчитаны параметры элементарной ячейки всех однофазных образцов (таблица 1).

Таблица 1

Параметры и объем элементарной ячейки сложных оксидов  $\text{Sr}_{1-x}\text{Gd}_x\text{FeO}_{3-\delta}$ , ( $0.05 \leq x \leq 0.30$  и  $0.80 \leq x \leq 1.0$ )

$x$	структура	$a, \text{Å}$	$b, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	$V, (\text{Å})^3$	$R_{Br}, \%$	$R_f, \%$
0	тетрагональная пр.гр. $I4/mmm$	10.942(1)	7.707(1)		922.712(2)	3.49	4.09
0.1	кубическая пр.гр. $Pm\bar{3}m$	3.871(1)			58.00(3)	2.02	1.30
0.2		3.866(1)			57.80(3)	2.14	1.62
0.3		3.868(1)			57.87(2)	1.55	0.918
0.8	орторомбическая пр.гр. $Pbnm$	5.361(1)	5.589(1)	7.672(1)	229.6(4)	0.506	0.536
0.9		5.377(1)	5.562(1)	7.678(1)	229.8(2)	0.489	0.580
1.0		5.348(1)	5.602(1)	7.665(1)	229.6(1)	1.56	2.02

По данным РФА образцы  $\text{Sr}_{1-x}\text{Gd}_x\text{FeO}_{3-\delta}$  с  $0.3 \leq x \leq 0.8$  являются многофазными и в равновесии содержат граничные твердые растворы составов  $\text{Sr}_{0.7}\text{Gd}_{0.3}\text{FeO}_{3-\delta}$  и  $\text{Sr}_{0.2}\text{Gd}_{0.8}\text{FeO}_{3-\delta}$ .

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

#### Список литературы:

1. Sangbeom, J. Electrochemical properties of electrospinning-fabricated layered perovskite used in cathode materials for a low temperature-operating solid oxide fuel cell // J. Sangbeom, W. Seok Choi, Seung-Wook Baek, T.

- Ho Shin, Jun-Young Park, J. Hyun Kim. - Thin Solid Films, vol. 660, 2018, P. 663-671
2. *Park H.J.* A promising high-performance lanthanum ferrite-based composite cathode for intermediate temperature solid oxide fuel cells // H.J.Park, J.Y.Park - Solid State Ionics, vol. 244, P. 30-34
  3. *Vereshchagin S.N.* Phase transformation behavior of  $\text{Sr}_{0.8}\text{Gd}_{0.2}\text{CoO}_{3-\delta}$  perovskite in the vicinity of order-disorder transition // S.N. Vereshchagin, V.A. Dudnikov, N.N. Shishkina, L.A. Solovyov. - Thermochemica Acta, vol. 655, 2017, P. 34-41
  4. *Michel C.R.* Carbon dioxide gas sensing behavior of nanostructured  $\text{GdCoO}_3$  prepared by a solution-polymerization method // C.R. Michel, A.H. Martínez, F.Huerta-Villalpando, J.P. Morán-Lázaro. - Journal of Alloys and Compounds, vol. 484, 2009, P. 605-611