

**КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА
И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЁРДЫХ РАСТВОРОВ
В СИСТЕМЕ $\text{PrO}_x - \text{SrO} - \text{Fe}_2\text{O}_3 - \text{CoO}$**

Райда М.К., Власова М.А., Волкова Н.Е.

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

В качестве потенциальных среднетемпературных катодов для ТОТЭ рассматриваются различные перовскитоподобные материалы отличающихся высокой стабильностью структуры ABO_3 , что позволяет проводить допирование катионами в А- и/или В-позициях решетки с минимальным изменением структуры и варьировать состав по кислороду в широком диапазоне. Данная работа посвящена получению сложных оксидов, образующихся в системе $\text{PrO}_x\text{-SrO-Fe}_2\text{O}_3\text{-CoO}$, определению областей гомогенности, кристаллической структуры, исследованию кислородной нестехиометрии и изучению электротранспортных и термических свойств на воздухе. Синтез образцов проводили по стандартной глицерин-нитратной технологии. Заключительный отжиг проводили при 1100 °С на воздухе в течение 240 часов с промежуточными перетирами и последующим медленным охлаждением на комнатную температуру. Фазовый состав полученных оксидов контролировали рентгенографически. Идентификацию фаз проводили при помощи картотеки JCPDS и программного пакета «freak». Определение параметров элементарных ячеек из дифрактограмм осуществляли с использованием программ «CelRef 4.0», уточнение полнопрофильного анализа Ритвелда в программе «FullProf 2008». Абсолютное значение содержания кислорода полученных образцов определяли методом полного восстановления образцов в токе водорода. Для изучения зависимости содержания кислорода в сложных оксидах от температуры использовали метод термогравиметрического анализа (ТГА). По данным РФА установлено, что сложные оксиды $\text{Pr}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{3-\delta}$ являются однофазными в интервалах $x = 0.1$ $y = 0-1$; $x = 0.3$ $y = 0-0.5$, 1; $x = 0.5$ $y = 0-0.5$; $x = 0.7$ $y = 0-1$; $x = 0.9$ $y = 0-0.7$. В сложных оксидах состава $\text{Pr}_{0.3}\text{Sr}_{0.7}\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{3-\delta}$ ($0 \leq y \leq 1$), $\text{Pr}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{3-\delta}$ ($0 \leq y \leq 0.5$) наблюдается уменьшение параметра и объема элементарной ячейки при увеличении содержания кобальта. Для составов ряда $\text{Pr}_{0.1}\text{Sr}_{0.9}\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{3-\delta}$ ($0 \leq y \leq 1$) и $\text{Pr}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{O}_{3-\delta}$ ($0 \leq x \leq 1$) зависимости не являются монотонными. На основании ТГА были рассчитаны абсолютный индекс кислородной нестехиометрии (δ) и средняя степень окисления 3d-металлов (n_{Me}) в $\text{Pr}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{O}_{3-\delta}$ ($0 \leq x \leq 1$), $\text{Pr}_{0.1}\text{Sr}_{0.9}\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{3-\delta}$ ($0 \leq y \leq 1$), $\text{Pr}_{0.3}\text{Sr}_{0.7}\text{Fe}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{3-\delta}$ ($0 \leq y \leq 1$) на воздухе при 25 °С. Установлено, что увеличение концентрации ионов Со приводит к уменьшению содержания кислорода в образцах. Из данных ТГА также установлено, что обмен кислородом между образцами и газовой фазой начинается при температуре выше 300 °С. Гетеровалентное замещение Pr^{3+} на Sr^{2+} приводит к уменьшению содержания кислорода. При увеличении содержания кобальта величина кислородной нестехиометрии и средняя степень окисления 3d-металла также уменьшается.