

СИНТЕЗ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА $\text{PrBaCo}_{2-x}\text{Fe}_x\text{O}_{6-\delta}$ *Ерёмина П.Д., Волкова Н.Е., Малышкин Д.А.*Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Сложные оксиды со структурой двойного перовскита состава $\text{PrBaCo}_{2-x}\text{Fe}_x\text{O}_{6-\delta}$ обладают высокой смешанной электронно-ионной проводимостью и термической стабильностью в окислительной среде. По этой причине становится возможным их применение в качестве материалов для электродов твердооксидных топливных элементов, газовых сенсорах, а также в качестве катализаторов дожигания выхлопных газов. Известно, что в зависимости от концентрации 3d-металлов твердые растворы $\text{PrBaCo}_{2-x}\text{Fe}_x\text{O}_{6-\delta}$ могут кристаллизоваться в кубической и тетрагональной симметрии. В рамках настоящей работы было проведено определение границы существования кубического твердого раствора $\text{PrBaCo}_{2-x}\text{Fe}_x\text{O}_{6-\delta}$ с целью обнаружения состава, обладающего высокой концентрацией дефектов и, следовательно, наивысшей электропроводностью.

Синтез образцов $\text{PrBaCo}_{2-x}\text{Fe}_x\text{O}_{6-\delta}$ ($x = 1.0 - 1.7$) проводился по глицерин-нитратной технологии на воздухе. В качестве исходных веществ были использованы Pr_6O_{11} , $\text{FeC}_2\text{O}_4 \times 2\text{H}_2\text{O}$, BaCO_3 и Co . Оксид празеодима Pr_6O_{11} и карбонат бария BaCO_3 были предварительно прокалены до постоянной массы; металлический кобальт Co получали из оксида Co_3O_4 восстановлением в токе водорода. Полученные прекурсоры были подвергнуты ступенчатому нагреванию в температурном интервале $900-1100^\circ\text{C}$ в течение 50 ч с промежуточными перетираниями с добавлением этанола в агатовой ступке. Заключительный отжиг проводился при 1100°C с последующим медленным охлаждением до комнатной температуры и перетиранием в среде этанола. Фазовый состав образцов был определен с помощью метода рентгенофазового анализа. Идентификацию выявленных фаз проводили с помощью картотеки JCPDS и программного пакета “freak”. Дальнейшее уточнение параметров элементарной ячейки проводилось по методу Ле-Бейла с помощью программы “Fullprof 2023”.

Исходя из данных РФА установлено, что оксиды $\text{PrBaCo}_{2-x}\text{Fe}_x\text{O}_{6-\delta}$, обогащенные железом (при $x = 1.5, 1.7$) кристаллизуются в кубической структуре, а с большим содержанием кобальта – являются двухфазными и содержат в своем составе фазы со структурой двойного перовскита и с кубической структурой. Дополнительно фазовый состав образцов был исследован при помощи метода сканирующей электронной микроскопии. Для этого предварительно поликристаллические образцы были спрессованы в керамические таблетки. Методом СЭМ были получены микрофотографии поверхности $\text{PrBaCo}_{0.5}\text{Fe}_{1.5}\text{O}_{6-\delta}$ и карты распределения элементов. Методом EDX-анализа был подтвержден его качественный и количественный состав. Далее образцы $\text{PrBaCo}_{2-x}\text{Fe}_x\text{O}_{6-\delta}$ ($x = 1.0 - 1.7$) были подвергнуты отжигу в атмосфере азота при 1000°C .