

Исследование выполнено при поддержке РФФИ и Фонда «Национальное интеллектуальное развитие» в рамках научного проекта № 16-33-80042 мол_эв_а.

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И СВОЙСТВА СЛОЖНЫХ ОКСИДОВ В СИСТЕМЕ Gd–Sr–Co–O

Маклакова А.В., Волкова Н.Е., Гаврилова Л.Я.

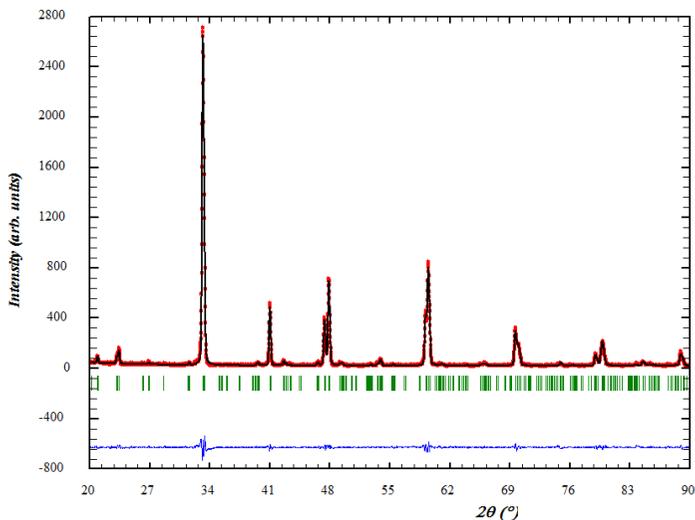
Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Обширный класс сложных оксидов, каковым являются кобальтиты редкоземельных и других металлов, представляет собой основу многих материалов с удачным сочетанием электрических, магнитных и каталитических свойств. Данные материалы используются в качестве электродов высокотемпературных топливных элементов, катализаторов дожигания выхлопных газов, кислородных мембран.

Поэтому целью данной работы явились оптимизация условий синтеза, изучение кристаллической структуры и физико-химических свойств сложнооксидных соединений, образующихся в системе Gd–Sr–Co–O.

Синтез образцов проводили по стандартной керамической и глиcerin-нитратной технологиям. Заключительный отжиг проводили при 1100°C на воздухе в течение 240 часов с промежуточными перетираниями 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 «CeIRef 4.0», уточнение полнопрофильного анализа Ритвелда в программе «FullProf 2008».

Согласно результатам РФА в системе Gd–Sr–Co–O на воздухе установлено образование двух типов твердых растворов: $Sr_{1-x}Gd_xCoO_{3-\delta}$ и $Sr_{2-y}Gd_yCoO_{4-\delta}$. Установлено, что однофазные сложные оксиды $Sr_{1-x}Gd_xCoO_{3-\delta}$ образуются при $0.1 \leq x \leq 0.4$ и $Sr_{2-y}Gd_yCoO_{4-\delta}$ - в интервале составов $0.8 \leq y \leq 1.2$. Рентгенограммы всех однофазных оксидов удовлетворительно описываются в рамках тетрагональной ячейки пространственной группы $I4/mmm$ (см. рисунок).



Рентгеновские данные для $\text{Sr}_{0.6}\text{Gd}_{0.4}\text{CoO}_{4-\delta}$

Для всех однофазных оксидов были рассчитаны параметры элементарной ячейки и координаты атомов. Показано, что при увеличении концентрации ионов Gd наблюдается уменьшение параметров и объема элементарной ячейки для сложных оксидов, что связано с размерными эффектами.

Величину содержания кислорода однофазных оксидов $\text{Sr}_{1-x}\text{Gd}_x\text{CoO}_{3-\delta}$ определяли методом дихроматометрического титрования. Установлено, что при увеличении содержания гадолиния в $\text{Sr}_{1-x}\text{Gd}_x\text{CoO}_{3-\delta}$ величина δ уменьшается.

Исследована химическая совместимость образцов с материалом твердого электролита ($\text{Ce}_{0.8}\text{Sm}_{0.2}\text{O}_{2-\delta}$ и $\text{Zr}_{0.85}\text{Y}_{0.15}\text{O}_{2-\delta}$) в температурном интервале 800-1100 °С.

Исследование выполнено при поддержке РФФИ и Фонда «Национальное интеллектуальное развитие» в рамках научного проекта № 16-33-80042 мол_эв_а.