

**КОМПОЗИТНЫЕ КАТОДЫ  $GdBaCo_{1,8}Fe_{0,2}O_{6,8} - Ce_{0,8}Sm_{0,2}O_2$  ДЛЯ  
СРЕДНЕТЕМПЕРАТУРНЫХ ТВЕРДООКСИДНЫХ  
ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ**

*Сарычева Н.С., Цветков Д.С.*

Уральский федеральный университет  
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19, корп. 3

Понижение рабочей температуры твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ) до среднетемпературного интервала (500-800 °С) в настоящее время является принципиальной задачей исследователей, поскольку расширяет выбор функциональных материалов для ТОТЭ и увеличивает срок службы этих устройств. Перспективным катодным материалом с точки зрения его применения в интервале средних температур рассматривают двойной перовскит  $GdBaCo_2O_{6,8}$ , поскольку это соединение обладает комплексом полезных свойств, таких как смешанная электронно-ионная проводимость и быстрый кислородный транспорт. Цель настоящей работы заключается в исследовании физических и электрохимических свойств композитных катодных материалов  $GdBaCo_{1,8}Fe_{0,2}O_{6,8} - x Ce_{0,8}Sm_{0,2}O_2$  ( $x = 10 \div 50$  масс. %) в контакте с твердым электролитом  $Ce_{0,8}Sm_{0,2}O_2$ .

Порошкообразные образцы  $GdBaCo_{1,8}Fe_{0,2}O_{6,8}$  и  $Ce_{0,8}Sm_{0,2}O_2$  синтезировали глицерин-нитратным способом из исходных веществ  $Gd_2O_3$  («ГДО-Г»),  $BaCO_3$  («ос.ч»), металлического  $Co$ ,  $FeC_2O_4 \cdot 2H_2O$  («ч.д.а.»),  $Sm_2O_3$  («ГДО-Г») и  $Ce(NO_3)_3 \cdot 6H_2O$  (99.9%). Полученный после пиролиза двойной перовскит подвергли отжигу при температурах 700 и 900 °С с промежуточным перетирианием, электролит – при температуре 1100 °С. Однофазность образцов была подтверждена рентгенофазовым анализом, проведенным на дифрактометре ДРОН-6 в  $Cu K\alpha$ -излучении.

Композитные электроды  $GdBaCo_{1,8}Fe_{0,2}O_{6,8} - x Ce_{0,8}Sm_{0,2}O_2$  ( $x = 10 \div 50$  масс. %) готовили смешением порошкообразных двойных перовскитов и  $Ce_{0,8}Sm_{0,2}O_2$  в различном массовом соотношении ( $x = 10 \div 50$  масс. %) в агатовой ступке в среде этилового спирта.

Методом высокотемпературной дилатометрии (дилатометр NETZSCH DIL 402 C) для изучаемых образцов, подготовленных в виде керамических брусков, получили зависимость относительного линейного расширения от температуры в интервале 30-1100 °С в воздушной атмосфере и рассчитали значение средних коэффициентов термического расширения.

Общую электрическую проводимость композитов  $GdBaCo_{1,8}Fe_{0,2}O_{6,8} - x Ce_{0,8}Sm_{0,2}O_2$  ( $x = 10 \div 50$  масс. %) измерили

четырёхзондовым методом на постоянном токе в ячейке специальной конструкции; исследование провели в температурном интервале 30-1100 °С в воздушной атмосфере.

Электрохимическое поведение композитных катодов на твердом электролите  $\text{Ce}_{0.8}\text{Sm}_{0.2}\text{O}_2$  исследовали методом импедансной спектроскопии. Измерения осуществили на импедансметре «Элинс Z500-PX» на симметричных ячейках катодный материал | электролит | катодный материал в интервале частот от 10 Hz до 0.5 MHz и температурном интервале 550-750 °С с шагом 50 °С. В результате для катодов исследуемых составов получены температурные зависимости поляризационного сопротивления (ASR). Показано, что введение твердого электролита в катодный материал позволяет значительно снизить значение ASR, минимум которого приходится на содержание электролита в образце, равное 35 масс. %.

*Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2013 гг.»*

## **ЭЛЕКТРОННЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ОКСИАРСЕНИДА**

### **LaFeAs<sub>1-x</sub>O: РОЛЬ As ВАКАНСИЙ**

*Суетин Д.В., Шеин И.Р., Ивановский А.Л.*

Институт химии твердого тела РАН

620990, г. Екатеринбург, ул. Первомайская, д. 91

После обнаружения высокотемпературной сверхпроводимости в  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  значительное внимание уделяется получению новых сверхпроводников на основе базисных FeAs систем. Основными способами регулирования температуры сверхпроводящего перехода являются допирование по различным подрешеткам данных фаз, а также приложение внешнего давления. Вместе с тем, возможное влияние решеточных вакансий на свойства различных FeAs фаз до сих пор остается во многом не изученным. Недавно сообщалось о синтезе допированной фтором «1111» фазы с As вакансиями ( $x \sim 0.06$ ), были изучены также магнитные свойства полученных образцов [1].

В данной работе представлены результаты квантово-химического моделирования свойств базисной фазы  $\text{LaFeAsO}$ , а также фазы нестехиометрического состава  $\text{LaFeAs}_{0.875}\text{O}$  в немагнитном (NM) и двух антиферромагнитных (G-AFM и S-AFM) вариантах. Все вычисления проведены линейным методом присоединенных плоских волн (FLAPW) с обобщенной градиентной аппроксимацией (GGA) обменно-