По результатам РФА установлено, что замещение железа на кобальт привело к образованию твёрдых растворов состава $YFe_{1-x}Co_xO_{3\pm\delta}$ с $0\leq x\leq 0.45$. Дифрактограмма незамещенного феррита иттрия $YFeO_{3\pm\delta}$ была обработана в рамках орторомбической ячейки (пр. гр. Pnma). Подобно незамещенному ферриту иттрия все полученные однофазные твердые растворы так же были описаны в рамках орторомбической ячейки. Показано, что увеличение содержания кобальта в $YFe_{1-x}Co_xO_{3\pm\delta}$ приводит к монотонному уменьшению параметров и объёма ячеек, что можно объяснить размерным эффектом (rCo^{3+} = 0.75 Å, rFe^{3+} =0.785 Å).

Работа выполнена при поддержке совета по грантам Президента Российской Федерации стипендии Президента Российской Федерации молодым ученым и аспирантам (Конкурс СП-2019) № СП-3689.2019.1«Получение новых перспективных материалов для электрохимических устройств на основе феррита иттрия-бария».

1. Motin S. M., Raveau B., Caignaert V., Pralong V. // J. Magnetism and Magnetic Mater., V. 320, P. 2676-2681 (2008)..

2. Volkova N.E., Gavrilova L.Ya., Cherepanov V.A., Aksenova T.V., Kolotygin V.A., Kharton V.V. // J. Solid State Chem., V.204, P. 219-223 (2013).

3. Lebedev O.I., Turner S., Caignaert V., Cherepanov V.A., Raveau B. // Chem. mater., V. 28, P. 2907-2911 (2016).

ФАЗОВЫЙ КОМПЛЕКС ТРЕХКОМПОНЕНТНОЙ СИСТЕМЫ ИЗ ХРОМАТОВ ЛИТИЯ, КАЛИЯ И РУБИДИЯ

Бурчаков А.В.[1], Сидоров А.А.[1]

[1)] Самарский государственный технический университет, г. Самара, Россия
E-mail: turnik27@yandex.ru

PHASE COMPLEX OF A TERNARY SYSTEM OF CHROMATES OF LITHIUM, POTASSIUM AND RUBIDIUM

Burchakov A.V.[1], Sidorov A.A.[1]
[1)] Samara State Technical University, Samara, Russia

In this work, we performed a theoretical and experimental study of phase equilibria and chemical transformations in a three-component system with a common anion of chromates of lithium, potassium, and rubidium, which has not been previously studied.

В настоящей работе выполнено теоретическое и экспериментальное изучение фазовых равновесий и химических превращений в трехкомпонентной системе с общим анионом из хроматов лития, калия и рубидия, которая ранее не была изучена. Вначале изучения выполнен анализ ограняющих двухкомпонентных систем [1, 2]. Конгруэнтно плавящиеся соединения $LiKCrO_4$ и $LiRbCrO_4$ разбивают

фазовый комплекс на два симплекса (рис. 1): стабильный треугольник Li_2CrO_4-D1-D2 (кристаллизующиеся фазы Li_2CrO_4 и непрерывный ряд твердых растворов $LiK_xRb_{1-x}CrO_4$) и стабильная трапеция (кристаллизующиеся фазы - это два непрерывных ряда твердых растворов $LiK_xRb_{1-x}CrO_4$ и $K_yRb_{2-y}CrO_4$). Проведено теоретическое описание химических превращений с помощью математической модели, что позволяет прогнозировать кристаллизующиеся фазы и протекание химических реакций для произвольной смеси системы из порошка исходных компонентов при сплавлении и дальнейшей кристаллизации. Экспериментально методом ДТА исследованы фазовые равновесия в стабильной секущей D_1 и D_2, в системе наблюдается непрерывность твердых растворов $LiK_xRb_{1-x}CrO_4$ и плавное понижение температуры кристаллизации без экстремумов. Фазовые равновесия в тройной системе изучены при помощи политермического разреза Li_2CrO_4 - min 938 (рис. 1). Отмечено стабильность твердых фаз $LiK_xRb_{1-x}CrO_4$ и $K_yRb_{2-y}CrO_4$, отсутствие точек минимума на моновариантных линиях e 402-e 411 и e 532-e 602, а также наблюдается в ликвидусе полиморфное превращение твердого раствора $K_yRb_{2-y}CrO_4$, приводящее к усложнению геометрии поверхности. Для лучшего описания фазового комплекса сконструирована 3D модель в виде пространственной фазовой диаграммы на основе экспериментальных данных о системе [3].

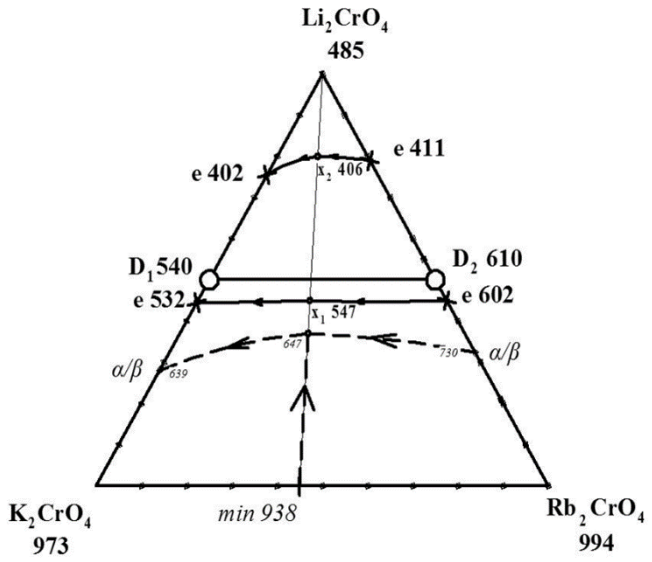

Рис. 1. Поверхность ликвидуса системы Li_2CrO_4-K_2CrO_4-Rb_2CrO_4

1. Бурчаков А.В., Дворянова Е.М. Анализ ряда двухкомпонентных систем Li_2CrO_4 –M_2CrO_4 (M=Na, K, Rb, Cs) и экспериментальное исследование системы Li_2CrO_4–Rb_2CrO_4 Тез. докл. XXXVII Самарск. обл. студ. научной конф. Самара: Министерство спорта, туризма и молодежной политики Самарск. обл., 2011 (12-22 апреля). С. 189

2. Belyaev I. N., Zh. Neorg. Khim., 6 [5] 1178-1188 (1961); Russ. J. Inorg. Chem. (Engl. Transl.), 6 [5] 602-608 (1961).

3. Бурчаков А.В., Гаркушин И.К., Милов С.Н. Компьютерная модель фазового комплекса трехкомпонентной системы LiCl-Li_2MoO_4-Li_2WO_4 Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Химия. Биология. Экология. 2018. Т. 18, вып. 4, С. 370-376