

$O^{\times}_{\text{O}}$, $V^{\circ\circ}_{\text{O}}$. Следующие квазихимические реакции были предложены нами для описания дефектной структуры $\text{YBaCo}_2\text{O}_{6-\delta}$:

1. $V^{\circ\circ}_{\text{O}} + \text{Ba}'_{\text{Y}} = (V^{\circ\circ}_{\text{O}} - \text{Ba}'_{\text{Y}})^{\circ}$ - реакция упорядочения кислородных вакансий в электростатический кластер $(V^{\circ\circ}_{\text{O}} - \text{Ba}'_{\text{Y}})^{\circ}$

2. $2\text{Co}^{\times}_{\text{Co}} = \text{Co}^{\circ}_{\text{Co}} + \text{Co}^{\backslash}_{\text{Co}}$ - реакция диспропорционирования, определяющая переход электрона между соседними $\text{Co}^{\times}_{\text{Co}}$ местами.

3. $O^{\times}_{\text{O}} + 2\text{Co}^{\circ}_{\text{Co}} = \frac{1}{2}\text{O}_2 + V^{\circ\circ}_{\text{O}} + 2\text{Co}^{\times}_{\text{Co}}$ - реакция выхода кислорода из кристаллической решетки $\text{YBaCo}_2\text{O}_{6-\delta}$

Предложенная модель дефектной структуры $\text{YBaCo}_2\text{O}_{6-\delta}$ прекрасно согласуется с экспериментальными данными.

ВЛИЯНИЕ ДОПИРОВАНИЯ И ТЕМПЕРАТУРЫ НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ И ТЕРМИЧЕСКОЕ РАСШИРЕНИЕ A_2NiMoO_6 ($\text{A} = \text{Sr}, \text{Ba}$)

*Скутина Л.С.⁽¹⁾, Иванов И.Л.⁽²⁾, Вылков А.И.^(1,2),
Чуйкин А.Ю.⁽²⁾, Филонова Е.А.⁽¹⁾*

⁽¹⁾ Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

⁽²⁾ Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН
620137, г. Екатеринбург, ул. Академическая, д. 20

Интерес исследователей к сложным оксидам со структурой двойного перовскита с общей формулой $\text{A}_2\text{NiMoO}_{6-\delta}$ вызван в первую очередь тем, что данные материалы могут быть использованы в качестве анодов в среднетемпературных твердооксидных топливных элементах (ТОТЭ). В связи с этим в настоящей работе поставлена цель по изучению кристаллической структуры и термического расширения образцов состава $\text{Sr}_2\text{Ni}_{1-y}\text{Mg}_y\text{MoO}_6$ ($y = 0.0; 0.25; 0.5; 0.75$); $\text{Sr}_{2-x}\text{Ba}_x\text{NiMoO}_6$ ($x = 0.0; 0.25; 0.5; 0.75; 1.0; 1.25; 1.5; 1.75; 2.0$), $\text{Ba}_2\text{Ni}_{1-z}\text{Mg}_z\text{MoO}_6$ ($z = 0.0; 0.25; 0.5; 1.0$).

Все сложнооксидные материалы были получены глицерин-нитратным методом. Рентгенографические исследования образцов проведены на дифрактометре Inel Equinox 3000, снабженной высокотемпературной приставкой HDK S1. Параметры кристаллической структуры уточняли при помощи программы *Fullprof*. Измерения относительного расширения спеченных образцов были проведены на воздухе на дилатометре NETZSCH DIL 402 C. Коэффициент термического расширения

(ЛКТР) рассчитывали из данных высокотемпературной рентгенографии и дилатометрии.

По результатам рентгенофазового анализа для всех оксидов были рассчитаны параметры и объемы элементарных ячеек и построены их концентрационные зависимости. Установлено, что образцы $\text{Sr}_2\text{Ni}_{1-y}\text{Mg}_y\text{MoO}_6$ ($0.0 \leq x \leq 0.5$), $\text{Sr}_{2-x}\text{Ba}_x\text{NiMoO}_6$ ($0.0 \leq x \leq 0.25$), $\text{Ba}_2\text{MgMoO}_6$ обладают тетрагональной структурой ($I4/m$), образец $\text{Sr}_2\text{Ni}_{0.25}\text{Mg}_{0.75}\text{MoO}_6$ имеет триклинную решетку ($\bar{1}\bar{1}$), а оксиды состава $\text{Sr}_{2-x}\text{Ba}_x\text{NiMoO}_6$ ($0.25 < x \leq 2.0$) и $\text{Ba}_2\text{Ni}_{1-z}\text{Mg}_z\text{MoO}_6$ ($0.0 \leq z \leq 0.25$) кристаллизуются в кубической решетке. На основании температурных зависимостей параметров и объема элементарных ячеек для тетрагональных образцов зафиксированы кристаллоструктурные фазовые переходы в кубическую структуру, что подтверждается дилатометрическими данными. Значения ЛКТР для изученных образцов, вычисленные из данных высокотемпературной рентгенографии и дилатометрии, приведены в таблице ниже.

Значения ЛКТР для образцов составов $\text{Sr}_2\text{Ni}_{1-y}\text{Mg}_y\text{MoO}_6$, $\text{Sr}_{2-x}\text{Ba}_x\text{NiMoO}_6$ и $\text{Ba}_2\text{Ni}_{1-z}\text{Mg}_z\text{MoO}_6$.

Состав	ЛКТР · 10 ⁶ , К ⁻¹			
	Интервал Т, К	Дилатометрия	Интервал Т, К	ВысокоТ рентгенография
y=0.25	298–1375	13.2	300–873	13.5
y=0.5	298–1375	13.8	303–873	13.1
y=0.75	298–1375	13.7	493–873	13.1
x=2.0	340–1163	13.5	298–523	11.5
x=0.25	298–523	10.8	-	-
z=0.25	340–1160	13.7	-	-
z=0.5	340–1160	14	-	-

Результаты работы получены в рамках выполнения государственного задания Министерства образования и науки России.