

ФАЗОВЫЕ РАВНОВЕСИЯ В СИСТЕМЕ «Pr₂O₃ – BaO – CoO»*Беляева М.В., Базуева М.В., Волкова Н.Е., Гаврилова Л.Я.*Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

В настоящее время сложные оксиды с перовскитоподобной структурой, обладающие высокой электронной и ионной проводимостью, находят широкое применение в качестве компонентов топливных элементов, кислородных мембран, катализаторов, газовых сенсоров. В связи с этим целью данной работы является изучение фазовых равновесий и установление кристаллической структуры индивидуальных фаз в системе «Pr₂O₃ – BaO – CoO» при $T=1100$ °С на воздухе.

Образцы для исследования были получены по глицерин-нитратной технологии. Отжиг прекурсоров проводили при 1100 °С на воздухе с последующей закалкой на комнатную температуру. Фазовый состав был охарактеризован методом рентгенофазового анализа.

В квазибинарных системах «Pr – Ba – O» и «Ba – Co – O» было подтверждено образование двух индивидуальных фаз составов PrBaO_{2.5} и BaCoO₃ соответственно. Из рентгенографических данных установлено, что оба сложных оксида кристаллизуются в орторомбической ячейке пространственной группы *Pbnm*. Из РФА установлено, что образец Ba_{1.5}Pr_{0.5}CoO₄ содержит две фазы: BaCoO₃ с параметрами $a = 6.1765(4)\text{\AA}$, $b = 6.2118(4)\text{\AA}$, $c = 8.7196(6)\text{\AA}$ и кубический Ba_{1.5}Pr_{0.5}CoO₄ (пр.гр. *Pm3m*) с размером ячейки $a = 4.1089(2)\text{\AA}$.

Согласно результатам РФА образцов в системе « $\frac{1}{2}$ Pr₂O₃ – BaO – CoO» при 1100 °С на воздухе было установлено, что образуются три однофазных соединения: PrBaCo₂O_{6-δ} со структурой двойного перовскита, Pr_{2.8}Ba_{1.2}Co₃O_{10-δ}, относящиеся к гомологическому ряду Раддлесдена – Поппера и соединение неустоенного состава. Содержание кислорода в образце Pr_{2.8}Ba_{1.2}Co₃O_{10-δ} определяли методами окислительно-восстановительного титрования, прямого восстановления образца в токе водорода и термогравиметрического анализа. Показано, что обмен кислорода образца с газовой фазой начинается выше 400 °С.

По результатам РФА всех полученных образцов, закаленных на комнатную температуру, была проведена первичная триангуляция фазовой диаграммы квазитройной системы « $\frac{1}{2}$ Pr₂O₃ – BaO – CoO» при 1100 °С на воздухе, при этом диаграмма была разбита на 9 фазовых полей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение №075-15-2019-1924).