

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И СВОЙСТВА СЛОЖНЫХ ОКСИДОВ В СИСТЕМЕ Gd_2O_3 -BaO- Fe_2O_3

Шулаева Е.В.¹, Волкова Н.Е.¹, Гаврилова Л.Я.¹

¹ Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: shulaeva00@mail.ru

CRYSTAL STRUCTURE AND PROPERTIES OF COMPLEX OXIDES IN THE SYSTEM Gd_2O_3 -BaO- Fe_2O_3

Shulaeva E.V.¹, Volkova N.E.¹, Gavrilova L.Y.¹

¹ Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

Two types of phases: $Ba_{1-x}Gd_xFeO_{3-\delta}$ and $BaGd_yFe_{1-y}O_{3-\delta}$ were obtained. The structural parameters of single-phase samples were refined by the Rietveld analysis. Oxygen content in single-phase oxides is determined by TGA and iodometric titration.

Сложные оксиды со структурами перовскита и его производных, образующиеся в системах $\frac{1}{2}Ln_2O_3$ -BaO- $\frac{1}{2}Fe_2O_3$, вызывают значительный интерес благодаря высоким значениям смешанной электронной и кислород-ионной проводимости, умеренным значениям коэффициента теплового расширения (КТР) и стабильности в окислительной атмосфере. Такой набор свойств позволяет использовать эти материалы в качестве катодов высокотемпературных твердооксидных топливных элементов, кислородопроницаемых мембран, химических сенсоров и катализаторов и др [1]. Перспективы практического использования вышеупомянутых материалов ставят задачи по комплексному изучению условий их получения, областей существования и границ устойчивости, кристаллической структуры и электротранспортных свойств. Многие важнейшие физико-химические свойства оксидов зависят не только от природы и соотношения катионов, образующих данный оксид, но и от содержания кислорода, которое может существенно изменяться при варьировании температуры и давления кислорода. Поэтому целью настоящей работы является исследование фазовых равновесий, кристаллической структуры, кислородной нестехиометрии и физико-химических свойств индивидуальных соединений, образующихся в системе $\frac{1}{2}Gd_2O_3$ -BaO- $\frac{1}{2}Fe_2O_3$.

Синтез образцов осуществлялся по глицерин-нитратной технологии, полученный порошок, отжигали при 1100°C с промежуточными перетирами в среде этилового спирта; общее время синтеза составило 120 часов. Фазовый состав синтезированных образцов контролировали методом рентгенофазового анализа с помощью дифрактометра Equinox-3000 в Cu K α –излучении.

Для определения областей гомогенности и кристаллической структуры твердых растворов, образующихся в системе $\frac{1}{2}Gd_2O_3$ -BaO- $\frac{1}{2}Fe_2O_3$ были синтезированы образцы общего состава $Gd_xBa_{1-x}FeO_{3-\delta}$ и $Gd_yBaFe_{1-y}O_{3-\delta}$.

Согласно данным рентгенофазового анализа установлено, что в указанной системе однофазными являются образцы при $x = 0.1$; $y = 0.15$ и 0.333 . Кристаллическая структура образцов с $x = 0.1$ и $y = 0.15$ была описана в рамках кубической элементарной ячейки (пр. гр. $Rm\bar{3}m$), а образца $y = 0.333$ – в рамках моноклинной ячейки (пр.гр. $P21/c$).

Кислородная нестехиометрия всех однофазных образцов была изучена методами высокотемпературной термогравиметрии и йодометрического титрования. Показано, что образцы с $x = 0.1$ и $y = 0.15$ начинают обмениваться кислородом с атмосферой при температуре выше 350°C .

Методом высокотемпературной дилатометрии были определены КТР всех однофазных образцов. Общая электропроводность и коэффициент термо-ЭДС были определены 4-х контактами методом на воздухе в зависимости от температуры.

1. Dokiya M. SOFC system and technology // Solid State Ionics. 2002. V. 152-153, P. 383-392.