

ВЛИЯНИЕ ВЕЛИЧИНЫ ЗАМЕЩЕНИЯ И ТЕМПЕРАТУРЫ НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ



Носенко А.М., Скутина Л.С., Филонова Е.А.

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

Материалы, проявляющие одновременно диэлектрическое и магнитное упорядочение являются весьма востребованными при создании различных электронных устройств. Двойные перовскиты с общей формулой A_2NiMoO_6 ($\text{A}=\text{Sr}, \text{Ba}$) являются перспективными кандидатами, которые удовлетворяют данным требованиям. Кроме того, эти материалы находят применение в качестве анодов среднетемпературных топливных элементов.

В настоящей работе методом пиролиза полимерно-солевых композиций проведён синтез сложных оксидов состава $\text{Sr}_{2-x}\text{Ba}_x\text{NiMoO}_6$ ($x=0.0; 0.25; 0.5; 0.75; 1.0; 1.25; 1.5; 1.75; 2.0$). Стехиометрические количества SrCO_3 , BaCO_3 и $\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ были растворены в разбавленной азотной кислоте и затем смешаны с водным раствором $(\text{NH}_4)_6\text{Mo}_7\text{O}_{24} \cdot 4\text{H}_2\text{O}$. После добавления раствора поливинилового спирта раствор был выпарен до образования порошка, который затем прокален в три стадии по 24 часа при 1173, 1273 и 1373 К. Заключительный отжиг проводили при 1373 К в течение 48 часов с последующей закалкой на комнатную температуру. Рентгенографические исследования образцов были проведены на дифрактометре Inel Equinox 3000, снабжённом высокотемпературной приставкой HDK S1 (Edmund Buechler GmbH). Уточнение параметров кристаллической структуры образцов было проведено методом полнопрофильного анализа Ритвелда с использованием программы *Fullprof*.

Образцы $\text{Sr}_{2-x}\text{Ba}_x\text{NiMoO}_6$ при 298 К в интервале составов $0.0 \leq x \leq 0.25$ обладали перовскитоподобной тетрагональной решёткой, изоструктурной граничному $\text{Sr}_2\text{NiMoO}_6$, тогда как в интервале составов $0.25 < x \leq 2.0$ образцы обладали кубической решёткой, изоструктурной граничному $\text{Ba}_2\text{NiMoO}_6$. На основании анализа концентрационных зависимостей параметров и объёма элементарной ячейки ряда показано, что замещение стронция на барий в $\text{Sr}_{2-x}\text{Ba}_x\text{NiMoO}_6$ приводит к увеличению элементарной ячейки, обусловленное размерным эффектом. Анализ температурных зависимостей параметров и объёма элементарной ячейки $\text{Sr}_{1.75}\text{Ba}_{0.25}\text{NiMoO}_6$ в интервале температур позволяет сделать вывод о наличии кристаллоструктурного перехода из тетрагональной в кубическую структуру при температуре 380 К, что ниже температуры кристал-

лоструктурного перехода (508 К) граничного $\text{Sr}_2\text{NiMoO}_6$. Таким образом, тетрагональные искажения перовскитной структуры у $\text{Sr}_{1.75}\text{Ba}_{0.25}\text{NiMoO}_6$ снимаются при более низкой температуре, чем у $\text{Sr}_2\text{NiMoO}_6$.

Для ряда двойных перовскитов $\text{Sr}_{2-x}\text{Ba}_x\text{NiMoO}_6$ по данным о величинах ионных радиусов, приведённых в [1], были вычислены факторы толерантности t [2]. Полученные результаты хорошо иллюстрируют геометрическую природу структурного перехода из тетрагональной в кубическую фазу для ряда $\text{Sr}_{2-x}\text{Ba}_x\text{NiMoO}_6$; при $y \approx 0.3$.

1. Shannon R. D., Prewitt C. T. Effective ionic radii in oxides and fluorides // Acta Cryst. 1969. V. 25B. P. 925–946.

2. Howell T.G., Kuhnell C.P., Reitz T.L. et al. A_2MgMoO_6 (A=Sr, Ba) for use as sulfur tolerant anodes // J. Power Sources. 2013. V. 221. P. 217–227.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований 13-03-00065.

СИНТЕЗ, ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЛОЖНООКСИДНЫХ КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА ЦЕРИЯ

Чумак Н.А., Русских О.В., Чезганов Д.С., Остроушко А.А.

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

Актуальной проблемой в настоящее время является защита окружающей среды от техногенного воздействия. Реализация решения данной проблемы состоит как в уменьшении выбросов путем модернизации производств или транспортных средств, так и их очистки с использованием каталитических методов.

К одним из перспективных материалов, для создания каталитических устройств дожига углеродсодержащих веществ, относятся сложнооксидные композиции на основе диоксида церия, использование которых позволяет уменьшить содержание металлов платиновой группы в готовом изделии [1].

В настоящей работе методом пиролиза полимерно-солевых композиций был проведен синтез сложнооксидных материалов на основе диоксида церия $\text{Ce}_{1-x}\text{M}_x\text{O}_2$ ($x=0 - 0.4$). Для дальнейшего изучения влияния природы допирующего иона на каталитические свойства были выбраны металлы I группы (Na, K, Cs, Ag) и d-металлы (Fe, Ni, Co). Для