

ВЛИЯНИЕ ФАЗОВОГО СОСТАВА И ЛОКАЛЬНОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ НА ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $ZrO_2-Gd_2O_3$

Милович Ф.О.,¹ Ломонова Е.Е.,² Рябочкина П.А.,³ Волкова Т.В.,³ Табачкова Н.Ю.,² Агаркова Е.А.⁴

¹ *Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС", Москва, Россия*
Н.П. Огарева, Саранск, Россия

² *Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия*

³ *Национальный исследовательский Мордовский государственный университет*

⁴ *Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка, Россия*

E-mail: filippmilovich@mail.ru

В настоящее время применение материалов на основе диоксида циркония в качестве твердого электролита для твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ) связано с необходимостью решения целого ряда научных и технологических проблем. Одна из них получение материалов с повышенной проводимостью в диапазоне средних температур (500-700 °С), а также повышение стабильности электрофизических характеристик твердого электролита при рабочих температурах в течение длительного времени. В соответствие с этим, выявление различных факторов таких, как фазовый состав и локальная кристаллическая структура, влияющих на величину кислород-ионной проводимости твердых растворов на основе диоксида циркония, является актуальной темой исследования.

Выполнены комплексные исследования фазового состава и локальной структуры кристаллов диоксида циркония, стабилизированного оксидом гадолиния в широком диапазоне составов от 2.7 до 38 мол.% Gd_2O_3 и установлено влияние Gd_2O_3 на транспортные характеристики кристаллов этих твердых растворов.

Присутствие трансформируемой t и нетрансформируемой t' тетрагональных фаз установлено в кристаллах диоксида циркония, частично стабилизированных оксидом гадолиния, с концентрацией 2.7 и 3.6 мол.% Gd_2O_3 , методом рентгеновской дифракции и определены параметры их кристаллической структуры.

Наличие двойниковой структуры, образующейся при переходе высокотемпературной кубической фазы в тетрагональную фазу, показано в кристаллах ZrO_2 с содержанием 8 мол.% Gd_2O_3 , при их исследовании методами просвечивающей электронной микроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния света. Установлено, что двойниковая структура отсутствует при таком же содержании оксида иттрия в кристаллах ZrO_2 -8 мол.% Y_2O_3 , а структура кристаллов соответствует структуре t'' -фазы.

Исследования особенностей их локальной кристаллической структуры были проведены с использованием методов оптической спектроскопии. В качестве спектроскопического зонда использовался Eu_2O_3 . Установлено, что локальная структура твердых растворов $ZrO_2-Gd_2O_3$ определяется, главным образом, концентрацией стабилизирующих оксидов Gd_2O_3 . Показано, что снижение величины ионной проводимости в интервале концентраций стабилизирующих оксидов выше 12 мол.% Gd_2O_3 обусловлено увеличением относительной доли катионов Gd^{3+} с кислородной вакансией в ближайшем кристаллическом окружении, а в интервале концентраций выше 20 мол.% Gd_2O_3 уменьшению величины ионной проводимости способствует образование двух анионных вакансий в ближайшем кристаллическом окружении ионов Gd^{3+} .

Работа проведена при поддержке гранта РФФ (№ 18-79-00323).