

**Фазовый состав и дефекты структуры твердых растворов
(ZrO₂)_{0,90}(Sc₂O₃)_{0,09}(Yb₂O₃)_{0,01}.**

Ларина Наталья Анатольевна

Аспирант

Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва, Институт физики и химии,
Саранск, Россия

E-mail: saharova.1996@mail.ru

Твердотельные электролиты на основе диоксида циркония, стабилизированные оксидами редкоземельных ионов, являются перспективными материалами для применения в качестве электролитических мембран твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ) [1, 2].

Среди твердых растворов на основе диоксида циркония высоким значением ионной проводимости и стабильностью свойств после длительного высокотемпературного отжига характеризуется состав (ZrO₂)_{0,90}(Sc₂O₃)_{0,09}(Yb₂O₃)_{0,01} [3-6].

В настоящей работе исследованы фазовый состав и спектрально-люминесцентные характеристики дефектов структуры, связанных с кислородными вакансиями, кристаллов и нанопорошков системы (ZrO₂)_{0,90}(Sc₂O₃)_{0,09}(Yb₂O₃)_{0,01} и проведен их сравнительный анализ. Кристаллы были выращены методом направленной кристаллизации расплава в «холодном» тигле, а нанопорошки были получены методами соосаждения и гидротермального синтеза с микроволновой обработкой.

Результаты работы свидетельствуют о том, что фазообразование твердых растворов (ZrO₂)_{0,90}(Sc₂O₃)_{0,09}(Yb₂O₃)_{0,01} в значительной степени определяется количеством структурных дефектов, формируемых с участием кислородных вакансий. В нанопорошках вследствие развитой поверхности и малого размера частиц количество таких дефектов существенно выше, чем в объемных кристаллах. Именно повышенная дефектность приводит к стабилизации кубической или близкой к ней *t'*-фазы уже на стадии синтеза, до воздействия высоких температур. Это подтверждается результатами рентгенофазового анализа и спектроскопии комбинационного рассеяния света.

Методом оптической спектроскопии исследованы дефекты структуры кристаллов и нанопорошков (ZrO₂)_{0,90}(Sc₂O₃)_{0,09}(Yb₂O₃)_{0,01}, обусловленные кислородными вакансиями. Выявлено, что для данных кристаллов и нанопорошков характерно различное соотношение дефектов структуры V²⁺ и V¹⁺. Для нанопорошков доля поверхностных дефектов (V¹⁺) относительно дефектов структуры (V²⁺) выше, чем для кристаллов. С увеличением размера частиц относительная доля поверхностных дефектов (V¹⁺) в нанопорошках уменьшается.

Результаты данного исследования являются важными для выбора наиболее перспективного метода синтеза частиц (ZrO₂)_{0,90}(Sc₂O₃)_{0,09}(Yb₂O₃)_{0,01} для последующего изготовления из них керамики с оптимальным комплексом физико-механических свойств для ее применения в качестве электролитических мембран ТОТЭ.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (код научной темы FZRS-2025-0001) в рамках государственного задания ФГБОУ ВО "МГУ им. Н.П. Огарёва".

Источники и литература

- 1) Mahato N. et al. Progress in material selection for solid oxide fuel cell technology: A review // Prog. Mater. Sci., 2015. V. 72. P. 141-337.
- 2) Кузьминов Ю.С., Ломонова Е.Е., Осико В.В. Тугоплавкие материалы из холодного тигля. М.: Наука, 2004. 369 с.
- 3) Ларина Н.А. Влияние структурных особенностей кристаллов твёрдых электролитов ZrO_2 - Sc_2O_3 , солегированных редкоземельными ионами, на ионную проводимость. Автореф. дисс. ... канд. физ.-мат. наук. Саранск, 2023.
- 4) Borik M. et al. Phase Stability and Transport Properties of $(ZrO_2)_{0.91-x}(Sc_2O_3)_{0.09}(Yb_2O_3)_x$ Crystals ($x = 0-0.01$). Crystals. 2021. V. 11. P. 83.
- 5) Kulebyakin A.V. et al. Structural characteristics of melt-grown $(ZrO_2)_{0.99-x}(Sc_2O_3)_x(Yb_2O_3)_{0.01}$ solid solution crystals and their effect on ionic conductivity // Journal of Crystal Growth. 2020. V. 547. P. 125808.
- 6) Agarkov D. et al. Stability of the Structural and Transport Characteristics of $(ZrO_2)_{0.99-x}(Sc_2O_3)_x(R_2O_3)_{0.01}$ ($R= Yb, Y, Tb, Gd$) Electrolytic Membranes to High-Temperature Exposure // Membranes. 2023. V. 13. P. 312.