

**ОБЛАСТИ СУЩЕСТВОВАНИЯ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА
ФАЗ $\text{La}_{2-x}\text{A}_x\text{Ni}_{1-z}\text{Cu}_z\text{O}_{4+\delta}$, $\text{A} = \text{Pr}, \text{Nd}$,
ОБРАЗУЮЩИХСЯ ПРИ 900 °С НА ВОЗДУХЕ**

Соболь М.Е., Суханов К.С., Гилев А.Р., Киселев Е.А., Черепанов В.А.

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

Целью работы является изучение фазовых равновесий и кристаллической структуры новых сложнородных фаз $\text{A}_2\text{BO}_{4+\delta}$ образующихся в системах $\text{La}_2\text{NiO}_{4+\delta}$ – $\text{A}_2\text{NiO}_{4+\delta}$ – $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ – $\text{A}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ ($\text{A}=\text{Pr}, \text{Nd}$), которые перспективны как катодные материалы среднетемпературных ТОНЭ [1].

Синтез образцов проводили по цитратно-нитратной технологии с конечной температурой отжига 900 °С на воздухе. Фазовый состав определяли методом порошковой рентгеновской дифракции.

По результатам РФА были уточнены области гомогенности твердых растворов $\text{La}_{2-x}\text{A}_x\text{Ni}_{1-y}\text{Cu}_y\text{O}_{4+\delta}$ ($\text{A} = \text{Pr}$ или Nd). В обеих системах были обнаружены протяженные области существования твердых растворов с тетрагональной T – структурой. Другие виды твердых растворов: со структурой T' , пр. гр. $I4/mmm$, образуются вблизи фаз $\text{Pr}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ и $\text{Nd}_2\text{CuO}_{4+\delta}$; с орторомбической структурой, пр. гр. $Fmmm$ – вблизи фазы $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$. Экспериментально полученные результаты для обеих систем удовлетворительно согласуются с расчетными значениями фактора толерантности Поля-Пуа t , который для тетрагональных T -фаз находится в пределах $0.85 \leq t \leq 1.02$.

Основываясь на граничных значениях фактора толерантности, были синтезированы образцы сложных оксидов $\text{La}_{2-x-y}\text{Pr}_x\text{Nd}_y\text{Ni}_{1-z}\text{Cu}_z\text{O}_{4+\delta}$ ($x=0.7, 0.8, 0.9, 1.2, 1.3, y=0.2, 0.1, 0.3, z=0.4, 0.6$) с тетрагональной T – структурой. Согласно РФА, образец с $x=0.9, y=0.1, z=0.6$ содержал следовые количества фазы PrO_x . Остальные оксиды оказались однофазными.

Результаты обработки дифрактограмм методом Ритвелда для всех однофазных образцов показали, что концентрационные изменения параметров элементарных ячеек, их объема и длин связей металл-кислород хорошо коррелируют с размерным фактором.

1. Gilev A.R., Sukhanov K.S., Kiselev E.A., M.E. et al. Increasing thermodynamic stability and electrochemical performance of IT-SOFC cathodes based on Ln_2MO_4 ($\text{Ln} = \text{La}, \text{Pr}$; $\text{M} = \text{Ni}, \text{Cu}$) // *Ceram. Int.* – 2024 – V. 50. – P. 40453-40463.

2. Aguadero A., Alonso J. A., Escudero M. J. et al. Evaluation of the $\text{La}_2\text{Ni}_{1-x}\text{Cu}_x\text{O}_{4+\delta}$ system as SOFC cathode material with 8YSZ and LSGM as electrolytes // *Solid State Ionics.* – 2008. – V. 179, №. 11-12. – P. 393-400.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-23-00128, <https://rscf.ru/project/24-23-00128/>