

碱土金属氧化物掺杂氧化铈基电解质材料中的晶格缺陷

马志芳; 梁广川; 梁金生

河北工业大学能源与环保材料研究所, 天津 300130

摘要:

基于能量最小化算法,对碱土金属氧化物(MgO、CaO、SrO、BaO)掺杂的氧化铈基电解质缺陷进行模拟计算.研究了掺杂离子与空位缺陷形成能和氧空位跃迁能之间的关系.结果说明,在碱土金属氧化物掺杂氧化铈的固溶反应中,氧空位缺陷是电荷补偿缺陷的首选形式,CaO和SrO较MgO和BaO易溶于CeO₂;Ca²⁺掺杂离子与氧空位缺陷对[CaCe^{••}•VO^{••}]_x的结合能最高;复合缺陷[VO^{•••}MCe^{••}•VO^{••}]_{••}在CeO₂中的状态不稳定;氧空位在次近邻间的跃迁能最低,因此最容易实现跃迁.

关键词: 能量最小化算法 氧化铈 固体电解质 晶格缺陷 碱土金属氧化物

收稿日期 2004-11-04 修回日期 2005-02-07 网络版发布日期 2005-06-15

通讯作者: 梁广川 Email: nyhbyjs@eyou.com

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(246KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 能量最小化算法

▶ 氧化铈

▶ 固体电解质

▶ 晶格缺陷

▶ 碱土金属氧化物

本文作者相关文章

▶ 马志芳

▶ 梁广川

▶ 梁金生