

مطالعه فاز پروسکایت $Ba(Co_{0.8}Fe_{0.2})O_{3-\delta}$ دپه شده با کاتیون تانتالم

سویل دلجوان^{۱*}، مهدی قاسمی کاکرودی^۱، محمد جواد زرودی^۲ و فیروز رضایی^۱

۱- گروه مواد، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تبریز

۲- گروه خوردگی، دانشکده مهندسی مواد، دانشگاه صنعتی سهند

(دریافت مقاله: ۱۳۹۳/۰۱/۲۴ - دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۴/۰۲/۱۶)

چکیده - پروسکایت‌ها به دلیل داشتن عیوب ذاتی اکسیژن از مهم‌ترین غشاهای هادی اکسیژن هستند که در ساخت راکتورهای غشایی اکسیداسیون جزئی متان مد نظر قرار می‌گیرند. بررسی اثر دپه کردن فاز پروسکایت برای داشتن عیوب اکسیژن بیش‌تر و افزایش سرعت انتشار اکسیژن از غشا، در کنار حفظ پایداری ساختار همواره از محورهای اصلی پژوهش در این زمینه بوده است. در این پژوهش بر اساس محاسبه اثر دپانت بر میزان انحراف از ساختار ایده آل، کاتیون تانتالم به عنوان دپانت مناسب فاز پروسکایت $Ba(Co_{0.8}Fe_{0.2})O_{3-\delta}$ انتخاب شد. بررسی‌ها اثر این دپانت را در افزایش حجم عیوب با وجود بهبود ضریب انبساط حرارتی و بدون کاهش قدرت پیوند نشان می‌دهد. بر اساس نتایج، ترکیب $Ba(Co_{0.7}Fe_{0.2}Ta_{0.1})O_{3-\delta}$ ترکیب مناسبی در ساخت غشاهای راکتورهای اکسیداسیون جزئی متان است.

واژگان کلیدی: غشا، پروسکایت، پایداری، هدایت اکسیژن، حجم عیوب

Investigation of Tantalum Cation Doped Ba (Co_{0.8}Fe_{0.2}) O_{3-δ} Perovskite Phase

S. Deljavan^{1*}, M. G. Kakroudi¹, J. Zaroodi² and F. Rezaei¹

1- Materials Engineering Department, Faculty of Mechanical Engineering, University of Tabriz, Tabriz, Iran

2- Corrosion Department, Faculty of Materials engineering, Sahand University of Technology, Tabriz, Iran

* مسئول مکاتبات پست الکترونیکی: sevil.deljavan@gmail.com

Abstract: Perovskite structures including oxygen vacancies are the most important group of the oxygen preamble membranes. These membranes have potentially attractive applications in the membrane reactors for partial oxidation of methane. Doping Perovskite phase in order to increase the oxygen vacancies and oxygen permeation, besides Perovskite structure stability, has been the main approach of the recent researches. In this research, tantalum was chosen as the appropriate dopant for $Ba(Co_{0.8}Fe_{0.2})O_{3-\delta}$ Perovskite phase, according to the tolerance factor calculations. The X ray patterns of synthesized $Ba(Co_{0.7}Fe_{0.2}Ta_{0.1})O_{3-\delta}$ indicate that the Perovskite structure was formed. Powder density, thermal expansion coefficient measurements and bond strength studies using FT-IR analysis revealed that the chosen dopant not only increases the oxygen vacancies volume but also reduces the thermal expansion coefficient without significant changes of bond strength. Results showed that the novel $Ba(Co_{0.7}Fe_{0.2}Ta_{0.1})O_{3-\delta}$ is a good choice for the membrane fabrication of methane partial reduction reactors.

Keywords: Membrane, Perovskites, Stability, Oxygen permeability, Defect volume

فهرست علائم

شماره معادله	واحد	معنا	علامت
۱	آنگستروم	شعاع یونی	R
۱	بدون دیمانسیون	فاکتور تفرانس یا گلدشمیت	T

۱- مقدمه

انتشار اکسیژن با حفظ پایداری فاز پروسکایت همواره محور اصلی پژوهش در حوزه غشاهای پروسکایتی بوده است. استراتژی دوپه کردن یکی از بهترین راه کارها در افزایش حجم عیوب و بهینه سازی خواص پروسکایت های سنتزی است. نوع دپانت و میزان دپه کردن می تواند به طور قابل ملاحظه ای عمل کرد پروسکایت، هدایت الکتریکی و پایداری این فاز را تحت تأثیر قرار دهد [۳، ۸، ۹].

ساختار پروسکایتی و حفظ این ساختار در ساخت غشاها اصلیتزین اولویت است، بنابراین پژوهش های زیادی برای معرفی ارتباط بین متغیرهای ساختاری و خواص پروسکایت ها انجام شده است. مهمترین متغیر ساختاری که در بررسی ها مدنظر قرار می گیرد، فاکتور تفرانس یا گلدشمیت^۱ است که به صورت ضریب T در رابطه (۱) تعریف می شود.

$$r(A) + r(X) = T\sqrt{2[r(B) + r(X)]} \quad (1)$$

T برای حالت ایده آل عدد یک و معیاری از تخریب ساختار از حالت ایده آل است [۳، ۱۰-۱۲].

پروسکایت ها موادی با ترکیب ABX_3 هستند که گستره ترکیب شیمیایی وسیعی را شامل می شوند و خواص بسیار متنوع و جالبی از خود نشان می دهند. این مواد با حجم بالایی از جای خالی آنیونی متبلور می شوند. یکی از خواص منحصر به فرد پروسکایت ها، قابلیت هدایت مخلوط یونی و الکتریکی آن ها است. $ABO_{3-\delta}$ به دلیل داشتن هدایت مخلوط که تحت تأثیر حجم جاهای خالی اکسیژنی موجود در ساختار است به عنوان مهم ترین غشاهای سرامیکی هادی اکسیژن مورد بررسی قرار می گیرند [۱-۵].

هدایت الکتریکی پروسکایت ها نقش اساسی در عمل کرد این ترکیب ها به عنوان غشا دارد و به صورت مدار کوتاه داخلی عمل می کند. در نهایت، غشاهایی با هدایت مخلوط نیازی به الکترودها و مدارهای خارجی ندارند. جای خالی یونی تأمین کننده راه عبور برای یون ها است، بنابراین با افزایش تعداد عیوب، جریان اکسیژن قابل افزایش است [۶، ۷].

افزایش حجم عیوب اکسیژن برای داشتن سرعت مناسب

هایاشی و همکاریانش بررسی گسترده‌ای برای معرفی رابطه فاکتورهای ساختاری با یکی از مهمترین خواص پروسکایت‌ها یعنی هدایت یونی انجام داده‌اند. نتیجه این بررسی‌ها نشان داد که بالاترین هدایت یونی به ازای فاکتور تلوئرانس 0.96 و حجم آزاد ویژه بالا (نسبت حجم سلول واحد به حجم یون‌ها) به دست می‌آید. به همین خاطر برای حصول این شرایط انتخاب ترکیب باید به گونه‌ای باشد که در پروسکایت ABX_3 ، جایگاه A با کاتیون‌های بزرگ پر شود و نسبت اندازه دپانت به یون میزبان در جایگاه B $1/0.5$ باشد. بنابراین قابل پیش بینی است که قرارگیری کاتیون بزرگی چون کاتیون باریم در جایگاه A، گروه ویژه‌ای از پروسکایت‌ها را با خواص مطلوب ایجاد نماید [۳، ۴].

نتایج بررسی‌ها نشان می‌دهد که ترکیبات $Ba(Co_{0.8}Fe_{0.2})O_{3-\delta}$ دپه شده، گروهی از غشاهای پروسکایتی را با خواص ویژه و قابلیت بالا در ساخت راکتورهای غشایی اکسیداسیون جزئی متان، نتیجه می‌دهند. در بیش تر پژوهش‌ها، انتخاب دپانت برای این ترکیب پایه به صورت تجربی بوده است و کاتیون‌های مختلفی چون زیرکونیوم، نئوبیم، تیتانیوم مورد بررسی قرار گرفته‌اند. [۱۳-۱۵].

در این تحقیق معیاری برای انتخاب دپانت مناسب معرفی شده است و هم چنین بهبود خواص پیش بینی شده، بر اساس آزمایش تجربی، مورد بررسی قرار گرفته است.

۲- روش محاسبه

برای بررسی میزان انحراف از ساختار ایده‌آل پروسکایتی و انتخاب دپانت مناسب با هدف کاهش میزان انحراف، از بررسی و مطالعه فاکتور ساختاری تلوئرانس^۲ استفاده شد و ترکیب با مقدار بهینه دپانت مورد نظر پیش بینی شد. برای محاسبه فاکتور تلوئرانس از معادله ۱ استفاده شد. اندازه کاتیون‌ها و آنیون‌های استفاده شده برای محاسبه این فاکتور اندازه‌های یونی شانون^۳ می‌باشد است که در جدول ۱ ارائه شده است [۱۶].

۳- روش آزمایش

۳-۱- ساخت ترکیب پایه و ترکیب دپه شده

$Sr(Co,Fe)O_{3-\delta}$ (SCFO) سیستم اصلی ساخت غشاهای سرامیکی است که حجم عیوب بالای اکسیژن دارد. $Ba(Co,Fe)O_{3-\delta}$ (BCFO) سیستم مشتق شده از این سیستم است که به دلیل اندازه بزرگ تر کاتیون باریم در مقایسه با کاتیون استرانسیوم ساختار پروسکایتی پایدارتری دارد و مورد توجه بیش تری است [۱۳-۱۵، ۱۷]. بنابر این در پژوهش حاضر، این سیستم به عنوان سیستم اصلی و ترکیب پایه، مدنظر قرار گرفته است. معیار مشخصی برای انتخاب دپانت پروسکایت‌ها و افزایش حجم عیوب وجود ندارد و عموماً انتخاب دپانت با آزمایش‌های تجربی انجام می‌شود. هم چنین تلاش شده است با محاسبه میزان انحراف از ساختار ایده‌آل پروسکایتی یا فاکتور تلوئرانس و روش‌های تجربی در کنار هم معیاری برای انتخاب دپانت معرفی شود.

فاکتور تلوئرانس ترکیب $Ba(Co_{0.8}Fe_{0.2})O_{3-\delta}$ محاسبه شد و عدد حاصل $1/110$ است. این عدد برای فاکتور ساختاری به معنی این است که کاتیون باریم بزرگ‌تر از کاتیون ایده‌آل جایگاه A و کاتیون‌های کبالت و آهن کوچک‌تر از اندازه کاتیون ایده‌آل جایگاه B است. بنابراین دپانت بایستی در یکی از دو جایگاه A و B به نحوی قرار گیرد که بتواند فاکتور تلوئرانس را به عدد یک نزدیک تر نماید تا ساختار پروسکایت حاصل پایدارتر باشد.

با توجه به اینکه این سیستم خود با جایگزینی کاتیون باریم با استرانسیوم ایجاد و خواص بهبود یافته آن اثبات شده است، در این تحقیق انتخاب دپانت برای جایگاه B بررسی شده است. به عبارت دیگر باید کاتیونی با شعاع یونی بزرگ‌تر از آهن و کبالت برای این سیستم به عنوان دپانت انتخاب شود.

مقایسه اندازه شعاع یونی شانون برای کاتیون تانتالم با کاتیون کبالت و کاتیون آهن، که در جدول ۲ آورده شده است، نشان‌دهنده اندازه کاتیون بزرگ‌تر و مناسب بودن کاتیون تانتالم به عنوان دپانت است. لذا دو ترکیب $Ba(Co_{0.7}Fe_{0.2}Ta_{0.1})O_{3-\delta}$

جدول ۱- اندازه کاتیون‌ها و آنیون‌های شانون برای محاسبه فاکتور تفرانس [۱۶]

شعاع یونی	عدد همسایگی	بار	یون
۱/۶۱	XII	+۲	$r_{Ba} (\text{Å})$
۰/۵۳	VI	+۴	$r_{Co} (\text{Å})$
۰/۵۸۵	VI	+۴	$r_{Fe} (\text{Å})$
۱/۳۵	II	-۲	$r_O (\text{Å})$

جدول ۲- شعاع یونی کاتیون تانتالم انتخاب شده به عنوان آلاینده [۱۶]

شعاع یونی	بار	عدد همسایگی	کاتیون
۰/۷۲	۳	VI	
۰/۶۸	۴	VI	Ta
۰/۶۴	۵	VI	

ترکیب $Ba(Co_{0.8}Fe_{0.2}Ta_{0.1})O_{3-\delta}$ و $Ba(Co_{0.7}Fe_{0.2}Ta_{0.1})O_{3-\delta}$ بدون افزودنی و با حداقل فشار پرس، به صورت قرص شکل داده شد. رژیم گرمایی برای ساخت این دو ترکیب بر اساس نتایج پژوهش‌های یی و همکارانش [۱۴] انتخاب شد که در جدول ۳ آورده شده است. سرمایش نمونه‌ها به صورت سریع انجام شد.

۲-۳- شناسایی فاز پروسکایت

برای شناسایی و بررسی فازها از دستگاه پراش پرتو ایکس^۴ (Siemens-D500)، استفاده شد. شناسایی فازها از روی PDF کارت X'pert Highscore Plus مربوط به هر فاز و با استفاده از نرم افزار صورت گرفت.

۳-۳- اندازه‌گیری چگالی

پس از ساخت پودر به شکل قرص، قرص‌ها با استفاده از هاون چینی پودر شد. چگالی به روش غوطه‌وری بر اساس استاندارد D 854-05 از سری استانداردهای ASTM اندازه‌گیری شد. چگالی نظری ترکیبات محاسبه و با نتایج حاصل از اندازه‌گیری تجربی مقایسه شد.

$Ba(Co_{0.8}Fe_{0.1}Ta_{0.1})O_{3-\delta}$ پیش بینی شد. فاکتورهای تفرانس برای دو ترکیب به ترتیب برابر با ۱/۰۹ و ۱/۱۰ است. همان‌طور که عدد حاصل از محاسبه فاکتور تفرانس برای دو ترکیب نشان می‌دهد، دپه کردن ترکیب با کاتیون تانتالم، فاکتور تفرانس را کاهش می‌دهد و به سمت ۱ نزدیک تر می‌نماید. از طرفی دپانت تانتالم به جای کاتیون کبالت بیشترین تأثیر را بر کاهش فاکتور تفرانس به سمت ۱ دارد و در نهایت ترکیب $Ba(Co_{0.7}Fe_{0.2}Ta_{0.1})O_{3-\delta}$ به عنوان ترکیب منتخب انتخاب شد.

باریم از پودر $BaCO_3$ (Merck 1714)، کبالت از پودر Ta_2O_5 (99.99%, Aldrich)، تانتالم از Co_3O_4 (99.995%, Aldrich) و آهن از $\alpha-Fe_2O_3$ (Merck, 99.9%) که دارای ذراتی با اندازه متوسط ۴ میکرومتر بود، تامین شد. مواد اولیه بر اساس استوکیومتری دو ترکیب با ترازوی دیجیتالی با دقت ۰/۰۰۱ گرم توزین و با واسط اتانول به روش مغناطیسی به مدت ۴ ساعت مخلوط شد. پس از مخلوط‌سازی، برای خروج اتانول، پودر به مدت ۲۴ ساعت، در خشک کن در دمای ۸۰ درجه سانتی‌گراد قرار گرفت. در نهایت پس از مخلوط‌سازی در درون هاون چینی، پودر اولیه آماده شد. مخلوط مواد اولیه مربوط به دو

جدول ۳- رژیم گرمایی ساخت دو ترکیب مورد استفاده

شماره مرحله	بازه دمایی (°C)	سرعت حرارت دهی (°C/min)	زمان نگهداری در حداکثر دما (ساعت)
۱	[۲۵ - ۶۰۰]	۱۰	صفر
۲	[۶۰۰ - ۱۱۰۰]	۵	۲

۴-۳- بررسی پیوند و تحلیل FT-IR

برای بررسی اثر کاتیون تانتالم به عنوان دپانت بر قدرت پیوند فاز پروسکایت از طیف‌سنجی FT-IR^۵ (Company Tensor 27 Bruker) استفاده شد. در طیف‌سنجی FT-IR نمونه‌ها پس از پودر شدن با مقدار مشخصی از پودر KBr مخلوط شده، سپس به صورت قرص درآمدند و مورد سنجش قرار گرفتند.

۴- نتایج و بحث

تحلیل فازی دو ترکیب به روش پراش اشعه ایکس با هدف بررسی تشکیل ساختار پروسکایتی انجام شد. الگوی XRD ترکیب پایه $Ba(Co_{0.8}Fe_{0.2})O_{3-\delta}$ در شکل ۱ نشان داده شده است. این الگوی پراش نشان‌دهنده ساختار پروسکایت مکعبی با بیشترین شدت قله در $2\theta=32^\circ$ است. الگوی XRD ترکیب $Ba(Co_{0.7}Fe_{0.2}Ta_{0.1})O_{3-\delta}$ که در شرایط یکسانی ساخته شده نیز در شکل ۲ نشان داده شده است. این الگوی پراش نیز نشان دهنده تشکیل ساختار پروسکایت مکعبی با بیشترین شدت قله در $2\theta=32^\circ$ مشابه $Ba(Co_{0.8}Fe_{0.2})O_{3-\delta}$ است. بنابراین در صورت دپه کردن ترکیب با کاتیون تانتالم ساختار پروسکایت به دست می‌آید.

افزایش مقدار d از $2/855$ به $2/880$ انگستروم در الگوی پراش اشعه ایکس ترکیب $Ba(Co_{0.7}Fe_{0.2}Ta_{0.1})O_{3-\delta}$ در مقایسه با ترکیب پایه، نشان‌دهنده افزایش حجم سلول واحد است. گفتنی است که برای اطمینان از نتایج، الگوی پراش اشعه ایکس برای هر نمونه سه بار تکرار و اعداد به صورت میانگین گزارش شده است. هرچند دپه کردن با هدف افزایش حجم عیوب انجام می‌شود، اما افزایش حجم سلول واحد به معنای عدم موفقیت این ساز و کار در افزایش حجم عیوب نیست، چرا که

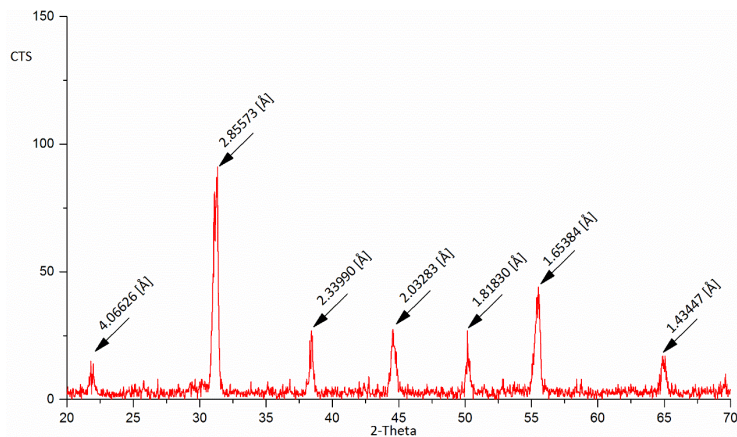
کاتیون آلانده، در مقایسه با کاتیون میزبان اندازه بزرگ‌تری دارد و پیش‌بینی می‌شود این اندازه بزرگ‌تر بر اثر کاهش حجم سلول واحد بر اثر افزایش حجم عیوب اکسیژن چیره شود. البته بررسی‌های دیگری نیز بایستی انجام شود. مطمئن‌ترین روش بررسی حجم عیوب استفاده از میکروسکوپ‌های الکترونی عبوری است که معمولاً به دلیل هزینه‌بر بودن، دشواری تحلیل و در دسترس نبودن این روش، از روش‌های دیگری، تغییر حجم عیوب نتیجه‌گیری می‌شود. یکی از رایج‌ترین و آسان‌ترین آزمایش‌های مکمل برای بررسی افزایش حجم عیوب و غیر استوکیومتری بودن ترکیب، اندازه‌گیری چگالی و مقایسه آن با چگالی نظری است.

جدول ۴ نشان دهنده چگالی اندازه‌گیری و چگالی محاسبه شده به روش نظری برای دو ترکیب مورد نظر است. انحراف بالای چگالی پودری اندازه‌گیری شده از چگالی محاسبه شده به‌ویژه برای ترکیب $Ba(Co_{0.7}Fe_{0.2}Ta_{0.1})O_{3-\delta}$ نشان‌دهنده انحراف قابل توجه ترکیب از ترکیب استوکیومتری است. از سوی دیگر نتایج، نشان دهنده افزایش انحراف چگالی پودری از چگالی نظری در صورت دپه شدن است که خود می‌تواند نشانه‌ای از تأثیر دپانت در افزایش حجم عیوب باشد. برای حصول از صحت نتیجه‌گیری در خصوص افزایش حجم عیوب که بر اساس اندازه‌گیری چگالی انجام شد، طیف‌سنجی به‌عنوان تحلیل تکمیلی انجام شد.

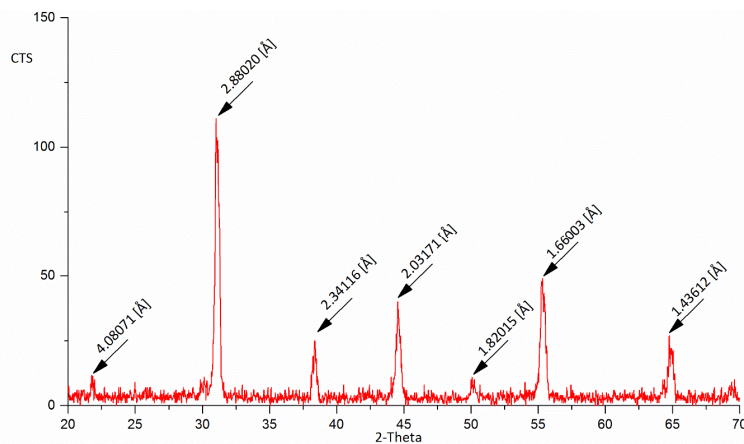
شکل ۳ نشان‌دهنده طیف FT-IR این دو ترکیب است. با توجه به تک‌فاز بودن سیستم، قله عمده شناسایی شده در طیف‌سنجی متعلق به فاز پروسکایت است. در هر دو طیف، قله در بازه عدد موج $750-500\text{ cm}^{-1}$ قرار دارد. جا به جایی اندک قله به سمت راست و طول موج کمتر را می‌توان نشانه‌ای از

جدول ۴- چگالی اندازه گیری شده و محاسبه شده برای ترکیب

ترکیب	چگالی g/cm^3	محاسبه شده	اندازه گیری شده	میزان انحراف از چگالی نظری
$\text{Ba}(\text{Co}_{0.7}\text{Fe}_{0.2}\text{Ta}_{0.1})\text{O}_{3-\delta}$		۶/۸۷	۶/۳۲	٪۸/۰۰۵
$\text{Ba}(\text{Co}_{0.8}\text{Fe}_{0.2})\text{O}_{3-\delta}$		۶/۲۴	۶/۱۲	٪۱/۹۲۳۰



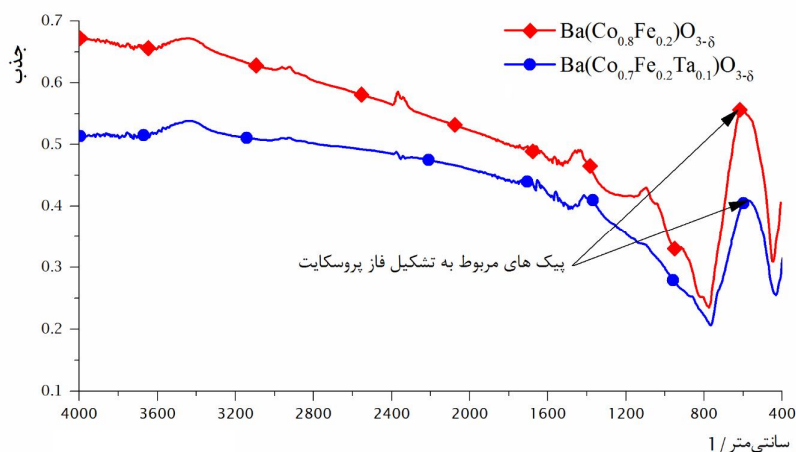
شکل ۱- الگوی پراش اشعه ایکس $\text{Ba}(\text{Co}_{0.8}\text{Fe}_{0.2})\text{O}_{3-\delta}$ انطباق طرح پراش با طرح پراش پروسکایت $\text{Ba}(\text{Co}_{0.8}\text{Fe}_{0.2})\text{O}_{3-\delta}$ نشان دهنده تک فاز بودن سیستم است. تمامی قله‌ها مربوط به فاز پروسکایت است.



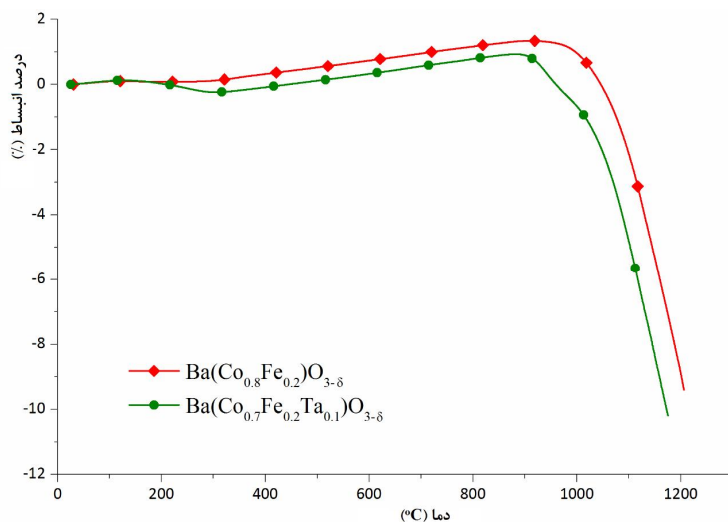
شکل ۲- طرح پراش اشعه ایکس $\text{Ba}(\text{Co}_{0.7}\text{Fe}_{0.2}\text{Ta}_{0.1})\text{O}_{3-\delta}$ سیستم تک فاز و پیک‌ها مربوط به فاز پروسکایت است.

برای داشتن طول عمر بالا غشا بسیار حائز اهمیت است و واضح است که پایداری شیمیایی، پایداری ساختار را تحت تأثیر قرار می‌دهد [۱۸، ۱۹]. هم‌چنین در انتخاب دپانت، علاوه بر حفظ ساختار

افزایش حجم عیوب اکسیژن و کاهش انسجام بلوری (انسجام ساختاری) دانست. هر چند این دپانت تغییر عمده‌ای در قدرت و نوع پیوند ایجاد نمی‌کند و به همین خاطر موجب کاهش پایداری شیمیایی نمی‌شود. پایداری شیمیایی ترکیب



شکل ۳- طیف سنجی FT-IR برای ترکیب پایه و دپه شده



شکل ۴- نمودار دیلاتومتری ترکیب پایه و دپه شده با کاتیون تانتالم

نمودار دیلاتومتری نمونه‌ها است.

بررسی نتایج نشان می‌دهد دیانت تانتالم موجب کاهش ضریب انبساط حرارتی می‌شود. هر چند دپه کردن بر تغییر حجم عیوب تأثیر دارد و می‌تواند موجب افزایش میزان انبساط حرارتی شود، اما نتایج تجربی نشان می‌دهد که اثر تغییر ترکیب بر اثر افزایش حجم عیوب اثر غالب است و تغییر ترکیب موجب بهبود ضریب انبساط حرارتی شده است. بنابراین از نقطه نظرهای بررسی شده در این پژوهش، تانتالم دیانت مناسبی برای ترکیب $Ba(Co_{0.8}Fe_{0.2})O_{3-\delta}$ شناخته می‌شود.

پروسکایت درکنار افزایش حجم عیوب بایستی تأثیر آن بر ضریب انبساط حرارتی نیز بررسی شود. ضریب انبساط حرارتی یکی از مهم‌ترین خواص پروسکایت‌ها است. پروسکایت‌ها دارای ضریب انبساط حرارتی بالا هستند و همواره دیانت‌ها به نحوی انتخاب می‌شوند تا ضریب انبساط حرارتی را کاهش دهند. از سوی دیگر افزایش حجم عیوب اکسیژن نیز بر ضریب انبساط حرارتی تأثیر می‌گذارد. افزایش حجم عیوب اکسیژن با افزایش ضریب انبساط حرارتی همراه است [۲۰]. برای بررسی اثر دیانت بر ضریب انبساط حرارتی، نمودار دیلاتومتری در اتمسفر هوا برای هر دو ترکیب به‌دست آمد. شکل ۴ نشان‌دهنده

۵- نتیجه گیری

نیست، هم‌چنین نشان می‌دهد این دپانت با وجود افزایش حجم عیوب، قدرت پیوند را دست‌خوش کاهش قابل توجه نمی‌نماید. بررسی نمودار دیلاتومتري دو ترکیب نشان دهنده اثر مطلوب این دپانت در کاهش ضریب انبساط حرارتی است. بنابراین کاتیون تانتالم، دپانت مناسبی برای ترکیب $Ba(Co_{0.8}Fe_{0.2})O_{3-\delta}$ پیش‌بینی می‌شود و به نظر می‌رسد ترکیب $Ba(Co_{0.7}Fe_{0.2}Ta_{0.1})O_{3-\delta}$ پتانسیل بالایی در ساخت غشاهای هادی اکسیژن به‌ویژه غشاهای مورد نیاز در ساخت راکتورهای غشایی اکسیداسیون جزئی متان داشته باشد.

پس از انتخاب دپانت مناسب بر اساس فاکتور تلرانس برای ترکیب پایه $Ba(Co_{0.8}Fe_{0.2})O_{3-\delta}$ ، ترکیب $Ba(Co_{0.7}Fe_{0.2}Ta_{0.1})O_{3-\delta}$ به‌روش مخلوط جامد ساخته شد. الگوی پراش اشعه ایکس تشکیل فاز پروسکایت برای ترکیب منتخب را نشان می‌دهد.

اندازه‌گیری چگالی پودر و مقایسه آن با چگالی نظری، افزایش حجم عیوب را بر اثر دپه کردن ترکیب پیش‌بینی می‌نماید. از طرفی بررسی مشخصه پیوند دو ترکیب به‌روش طیف‌سنجی FT-IR، که مغایر با پیش‌بینی افزایش حجم عیوب

واژه‌نامه

1. Goldschmidt factor
2. tolerance
3. Shanon ionin radii

4. X-ray diffraction
5. Fourier transform infrared spectroscopy

مراجع

1. Vladislav, V.K., *Solid State Electrochemistry II: Electrodes, Interfaces and Ceramic Membranes*, Vol. 2, pp. 240-242, John Wiley & Sons, 2011.
2. Hsieh, H.P., *Inorganic Membranes for Separation and Reaction*, pp. 330-331, Elsevier, 1996.
3. Kang, L., *Ceramic Membranes for Separation and Reaction*, p. 211, John Wiley & Sons, 2007.
4. Ishihara, T., *Perovskite Oxide for Solid Oxide Fuel Cells*, p. 2, Springer, 2009.
5. Müller, K.A. and Kool, T.W., *Properties of Perovskites and Other Oxides*, p. 36, World Scientific, 2010.
6. Mogensen, M., Armstrong, T., Gur, T. and Yokokawa, H., *Ionic and Mixed Conducting Ceramics*, p. 178, The Electrochemical Society, 2008.
7. Grinberg, F. and Heitjans, P., *Diffusion Fundamentals*, Vol. 1, p. 246, Leipziger Universität, 2007.
8. Hahn, H.W., Sidorenko, A. and Tiginyanu, I., *Nanoscale Phenomena: Fundamentals and Applications*, Springer, p. 75, 2009.
9. Sharma, T., *Electrochemical Devices: Application of Nano Size Perovskite Oxides*, p. 46, LAP LAMBERT Academic Publishing, 2011
10. Putnis, A., *An Introduction to Mineral Sciences*, p. 138, Cambridge University Press, 1992.
11. Johnston, M. and Lemmens, P., "Crystallography and Chemistry of Perovskites", <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0506606> Accessed on 2 May 2012.
12. Muller, U., *Inorganic Structural Chemistry*, p. 203, John Wiley and Sons, 1993.
13. Yang, L., Wu, Z., Jin, W. and Xu, N., "Structure and Oxygen Permeability of $BaCo_{0.4}Fe_{0.6-x}Zr_xO_{3-\delta}$ Oxide: Effect of the Synthesis Method", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Vol. 43, pp 2747-2752, 2004.
14. Yi, J., "Behavior of Ba (Co, Fe, Nb) $O_{3-\delta}$ Perovskite in CO_2 -Containing Atmospheres: Degradation Mechanism and Materials Design", *American Chemical Society, Chemistry of Materials*, Vol. 22 (23), pp. 6246-6253, 2010.
15. Lu, H.U., "Structural, Sintering and Oxygen Sorption Properties of a Novel Fe/Nb Co-Doped Perovskite $Ba(Co_{0.8}Fe_{0.1}Nb_{0.1})O_{3-\delta}$ Oxide", *Functional Materials Letters*, Vol. 4, pp. 37-40, 2011.
16. [Http://abulafia.mt.ic.ac.uk/shannon/ptable.php](http://abulafia.mt.ic.ac.uk/shannon/ptable.php) Accessed on 9 July 2012.
17. Tong, J., "Investigation of Ideal Zirconium-Doped Perovskite-Type Ceramic Membrane Materials for Oxygen Separation", *Journal of Membrane Science*, Vol. 203, pp 175-189, 2002.
18. Fernando, C. and Londoño-Badillo, A., "Effect of Atmosphere on the Perovskite Phase Stability",

- Revista Cubana de Química*, Vol 23, pp. 19-26, 2012.
19. Taniguchi, S. and Aniya, M., "Relationship between Thermal Expansion, Ionic Conduction and Ionicity in Perovskite-Type Oxides", *Integrated Ferroelectrics*, Vol. 115, pp.18-24, 2010.
20. Smith, B.C., *Fundamentals of Fourier Transform Infrared Spectroscopy*, p. 155, CRC press, 2011.