

## РАСЧЕТ ОБЛАСТИ ГОМОГЕННОСТИ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК ОКСИДА ПАЛЛАДИЯ (II)

Самойлов А.М., Рябцев С.В., Ивков С.А. Донцов А.И., Пелипенко Д.И., Шаров М.К.

«ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет»,  
394006, г. Воронеж, Университетская пл., 1,  
e-mail: samoylov@chem.vsu.ru

Наноструктуры на основе оксида палладия (II) зарекомендовали себя как перспективные материалы для создания газовых сенсоров, способных эффективно и надежно определять концентрации токсичных газов в атмосферном воздухе<sup>1-4</sup>. На основании результатов прецизионного рентгенографического анализа микроструктуры наноразмерных пленок PdO характер изменения параметров тетрагональной кристаллической решетки, объема элементарной ячейки и рентгенографической плотности в зависимости от температуры окисливания в сухом кислороде. Полученные результаты позволили предположить, что преобладающими дефектами в структуре, PdO ответственными за *p*-тип проводимости, являются атомы кислорода в междоузлиях. С использованием данных об ионных радиусах представлена модель области гомогенности нанокристаллических пленок оксида палладия (II) (Рисунок 1).

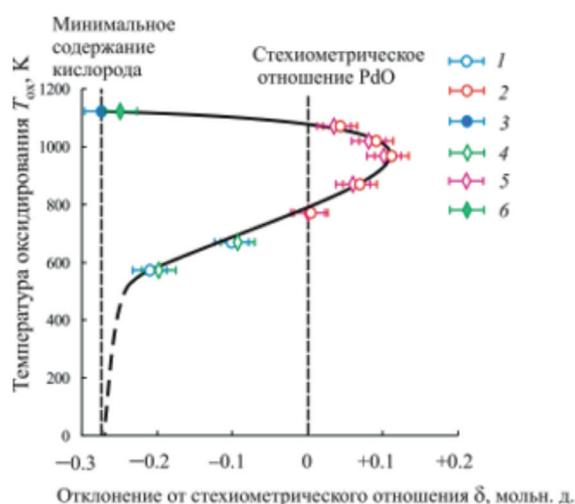


Рисунок 1. Расчетная модель области гомогенности нанокристаллических пленок PdO:  
1–3 – расчеты для радиуса  $R(O^{2-})=0,124$  нм; 4–6 – расчеты для радиуса  $R(O^{2-})=0,14$  нм.

### Литература

1. Ryabtsev S.V., Shaposhnik A.V., Samoylov A.M., Sinelnikov A.A., Soldatenko S.A., Kushev S.B., Ievlev V.M. Doklady Physical Chemistry, 2016, 470, 158 – 161.
2. Ryabtsev S.V., Ievlev V.M., Samoylov A.M., Kushev S.B., Soldatenko S.A. Thin Solid Films, 2017, 636, 751 – 759
3. Ievlev V.M., Ryabtsev S.V., Samoylov A.M., Shaposhnik A.V., Kushev S.B., Sinelnikov A.A. Sensors and Actuators B, 2018, 255, 1335 – 1342.