

NGHIÊN CỨU CÁC TÍNH CHẤT CẤU TRÚC VÀ NHIỆT ĐỘNG CỦA TINH THỂ CERIA PHA TẠP GADOLINIA BẰNG PHƯƠNG PHÁP THỐNG KÊ MOMEN

Lê Thị Thanh Hương
Khoa Toán và KHTN
Email: huongttt69@dhhp.edu.vn

Ngày nhận bài: 05/3/2024
Ngày PB đánh giá: 13/5/2024
Ngày duyệt đăng: 31/5/2024

Tóm tắt: Các tính chất cấu trúc và nhiệt động của tinh thể Ceria pha tạp Gadolinia (GDC) được nghiên cứu bằng phương pháp thống kê momen trong vật lý thống kê lượng tử. Các biểu thức giải tích tường minh xác định hằng số mạng, hệ số giãn nở nhiệt và các nhiệt dung đẳng tích và đẳng áp có tính đến các hiệu ứng phi điều hòa của dao động mạng tinh thể được thiết lập. Nghiên cứu xác định được sự phụ thuộc của khoảng cách lân cận gần nhất, hệ số giãn nở nhiệt và các nhiệt dung vào nhiệt độ và nồng độ tạp chất. Các kết quả tính toán được so sánh với các kết quả thực nghiệm.

Từ khóa: khoảng lân cận gần nhất, hệ số giãn nở nhiệt, nhiệt dung, Ceria pha tạp Gadolinia, phương pháp thống kê momen.

STUDY OF STRUCTURAL AND THERMODYNAMICAL PROPERTIES OF GADOLINIA DOPED CERIA USING THE METHOD OF MOMENTS

Abstract: The structural and thermodynamic properties of Gadolinia-doped Ceria (GDC) are studied using the method of moments in quantum statistical physics. Explicit analytical expressions determining the lattice constant, thermal expansion coefficient and the isochoric and isobaric heat capacities consider the anharmonic effects of the established lattice vibrations. The study determines the dependence of the nearest neighbor distance, thermal expansion coefficient and heat capacities on temperature and impurity concentration. The calculated results are compared with the experimental results.

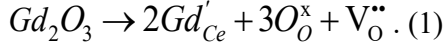
Keyword: the nearest neighbor distance, thermal expansion coefficient, heat capacity, Gadolinia-doped Ceria, the method of moments.

1. GIỚI THIỆU

Ceria (CeO_2) là một loại vật liệu hấp dẫn với các ứng dụng phổ biến trong các chất xúc tác, vật liệu điện phân, sen xơ khí, và các bộ nhớ truy cập ngẫu nhiên từ điện trở [1-4]. Tinh thể Ceria pha tạp Gadolinia (GDC) có

cấu trúc mạng fluorit lập phương gồm các cation Ce^{4+} và Gd^{3+} nằm trên mạng lập phương tâm diện (fcc) và các anion O^{2-} chiếm các vị trí của mạng lập phương con. Thay thế các ion Ce^{4+} bởi các ion Gd^{3+} tại các nút mạng trên mạng fcc sẽ tạo ra các nút khuyết oxy với nồng độ cao để duy trì sự cân bằng

diện tích của mạng tinh thể. Sự tạo thành các nút khuyết oxy được xác định bởi phương trình (1) với kí hiệu Kröger -Vink [5]



Nhiều nghiên cứu thực nghiệm đã được tiến hành để tìm hiểu về các tính chất cấu trúc và nhiệt động của tinh thể GDC. Sử dụng các phép đo nhiễu xạ tia X, M.G. Chourashiya và các cộng sự [6] đã tìm được hằng số mạng của các mẫu GDC10, GDC20 and GDC30 ở các nhiệt độ nung từ 1473 K đến 1773 K. Kết quả cho thấy hằng số mạng tăng lên cùng với nồng độ Gd_2O_3 . Điều này xác nhận sự hòa tan của tạp chất Gd_2O_3 vào mạng tinh thể fluorit của CeO_2 . Độ rộng tối đa tại nửa cực đại (FWHM) đã được xác định ở các nồng độ tạp chất khác nhau (GDC 10, GDC 30, GDC 50, GDC 70) và nhiệt độ khác nhau (673 K - 873 K) sử dụng các phép đo bức xạ synchrotron Elettra [7]. N. Stelzer và các cộng sự [8] đã đo được nhiệt dung đẳng áp của GDC trong khoảng nhiệt độ từ 300 K - 1200 K với hai điều kiện là làm mát và nung nhiệt. Nhiệt dung đẳng áp tăng cùng với nhiệt độ và có sự khác biệt nhỏ về giá trị giữa hai điều kiện làm mát và nung nhiệt. T. Hisashige cùng các cộng sự [9] đã tính toán được hệ số giãn nở nhiệt và nhiệt độ Debye của CeO_2 và CeO_2 pha tạp các nguyên tố đất hiếm sử dụng phương pháp đầy siêu âm. Họ chỉ ra rằng hệ số giãn nở nhiệt của CeO_2 pha tạp các nguyên tố đất hiếm tăng cùng với nồng độ tạp chất và có giá trị lớn hơn so với CeO_2 .

Hiện nay, đa số các nghiên cứu về các tính chất cấu trúc và nhiệt động của tinh thể GDC là các phép đo thực

thực nghiệm [6-9]. Trong nghiên cứu này, tôi sử dụng phương pháp thống kê momen (PPTKMM) để tính toán các đại lượng liên quan đến các tính chất cấu trúc và nhiệt động của tinh thể GDC, đó là hằng số mạng, hệ số giãn nở nhiệt và các nhiệt dung đẳng tích và đẳng áp. So sánh với các phương pháp lý thuyết khác, PPTKMM sử dụng các biểu thức toán học không phức tạp có thể tính toán được một cách toàn diện các tính chất vật lý của các vật liệu [10]. Tuy nhiên, chưa có nghiên cứu nào sử dụng PPTKMM để nghiên cứu về các tính chất cấu trúc và nhiệt động của tinh thể GDC. Các kết quả tính toán có được trong nghiên cứu này chỉ ra sự phụ thuộc của hằng số mạng, hệ số giãn nở nhiệt và các nhiệt dung đẳng tích và đẳng áp vào nhiệt độ và nồng độ tạp chất.

2. LÝ THUYẾT

Số lượng các nút khuyết oxy tạo ra bởi pha tạp bằng một nửa số lượng các ion tạp chất nên công thức tổng quát của tinh thể GDC tính đến sự có mặt của các nút khuyết oxy là $Ce_{1-x}Sm_xO_{2-x/2}$, với x là nồng độ của các ion Gd^{3+} .

Trong PPTKMM, tinh thể $Ce_{1-x}Sm_xO_{2-x/2}$ được đặc trưng bởi các dao động điều hòa của các ion Ce^{4+} , Gd^{3+} , và O^{2-} với các hằng số lực k_{Ce} , k_{Gd} , k_O , các tần số dao động ω_{Ce} , ω_{Gd} , ω_O , và các tham số phi điều hòa ρ , γ_1^{Ce} , γ_1^{Gd} , γ_1^O , γ_2^{Ce} , γ_2^{Gd} , γ_2^O , γ_{Ce} , γ_{Gd} , γ_O [10,11,12,13]

$$k_{Ce,Gd,O} = \frac{1}{2} \sum_j \left(\frac{\partial^2 \phi_{j0}^{Ce,Gd,O}}{\partial u_{j\alpha}^2} \right)_{eq} = m^* \omega_{Ce,Gd,O}^2, (1)$$

$$\rho = \frac{1}{2} \sum_j \left(\frac{\partial^3 \phi_{j0}^O}{\partial u_{j\alpha} \partial u_{j\beta} \partial u_{j\gamma}} \right)_{eq}, \quad \xi = k_O - \frac{\rho^2}{3\gamma_O}, (2)$$

$$\gamma_1^{\text{Ce,Gd,O}} = \frac{1}{48} \sum_j \left(\frac{\partial^4 \phi_{j0}^{\text{Ce,Gd,O}}}{\partial u_{j\alpha}^4} \right)_{\text{eq}}, \quad \gamma_2^{\text{Ce,Gd,O}} = \frac{1}{8} \sum_j \left(\frac{\partial^4 \phi_{j0}^{\text{Ce,Gd,O}}}{\partial u_{j\alpha}^2 \partial u_{j\beta}^2} \right)_{\text{eq}}, \quad (3)$$

$\gamma_{\text{Ce,Gd,O}} = 4(\gamma_1^{\text{Ce,Gd,O}} + \gamma_2^{\text{Ce,Gd,O}})$, (4) với $\alpha = x, y$ or z , $u_{j\alpha}, u_{j\beta}$ là các tọa độ Đề các của độ dời của ion thứ j , ϕ_{j0}^{Ce} (or ϕ_{j0}^{Gd} or ϕ_{j0}^{O}) là thế tương tác giữa các ion thứ 0 và các ion Ce^{4+} (or Gd^{3+} , or O^{2-}) thứ j , m là khối lượng ion trung bình.

Năng lượng tự do Helmholtz của tinh thể $\text{Ce}_{1-x}\text{Gd}_x\text{O}_{2-x/2}$ được xác định [10,11]

$$\Psi \approx \Psi_{\text{CeO}_{2-x/2}} + \Psi_{\text{Gd}} - N_{\text{Gd}} u_0^{\text{Ce}} - TS_c^*, \quad (6)$$

$$\Psi_{\text{Ce}} = E_0^{\text{Ce}} + 3N_{\text{Ce}} \theta \left[s_{\text{Ce}} + \ln(1 - e^{-2s_{\text{Ce}}}) \right] + 3N_{\text{Ce}} \left\{ \frac{\theta^2}{k_{\text{Ce}}^2} \left[\gamma_2^{\text{Ce}} S_{\text{Ce}}^2 - \frac{2\gamma_1^{\text{Ce}}}{3} a_1^{\text{Ce}} \right] + \frac{2\theta^3 a_1^{\text{Ce}}}{k_{\text{Ce}}^4} \left[\frac{4}{3} (\gamma_2^{\text{Ce}})^2 S_{\text{Ce}} - 2 \left((\gamma_1^{\text{Ce}})^2 + 2\gamma_1^{\text{Ce}} \gamma_2^{\text{Ce}} \right) (1 + S_{\text{Ce}}) \right] \right\}, \quad (7)$$

$$\Psi_{\text{Gd}} = E_0^{\text{Gd}} + 3N_{\text{Gd}} \theta \left[s_{\text{Gd}} + \ln(1 - e^{-2s_{\text{Gd}}}) \right] + 3N_{\text{Gd}} \left\{ \frac{\theta^2}{k_{\text{Gd}}^2} \left[\gamma_2^{\text{Gd}} S_{\text{Gd}}^2 - \frac{2\gamma_1^{\text{Gd}}}{3} a_1^{\text{Gd}} \right] + \frac{2\theta^3 a_1^{\text{Gd}}}{k_{\text{Gd}}^4} \left[\frac{4}{3} (\gamma_2^{\text{Gd}})^2 X_{\text{Gd}} - 2 \left((\gamma_1^{\text{Gd}})^2 + 2\gamma_1^{\text{Gd}} \gamma_2^{\text{Gd}} \right) (1 + X_{\text{Gd}}) \right] \right\}, \quad (8)$$

$$\Psi_{\text{O}} = E_0^{\text{O}} + 3N_{\text{O}} \theta \left[s_{\text{O}} + \ln(1 - e^{-2s_{\text{O}}}) \right] + 3N_{\text{O}} \left\{ \frac{\theta^2}{k_{\text{O}}^2} \left[\gamma_2^{\text{O}} S_{\text{O}}^2 - \frac{2\gamma_1^{\text{O}}}{3} a_1^{\text{O}} \right] + \frac{2\theta^3 a_1^{\text{O}}}{k_{\text{O}}^4} \left[\frac{4}{3} (\gamma_2^{\text{O}})^2 S_{\text{O}} - 2 \left((\gamma_1^{\text{O}})^2 + 2\gamma_1^{\text{O}} \gamma_2^{\text{O}} \right) (1 + S_{\text{O}}) \right] + 3N_{\text{O}} \left\{ \frac{\theta \rho}{6\xi \gamma_{\text{O}}} \left(\frac{k_{\text{O}}}{\xi} - 1 \right) + \frac{\theta^2 \rho}{\xi} \left[\left(\frac{2\gamma_{\text{O}} a_1^{\text{O}}}{3\xi^3} \right)^{\frac{1}{2}} - \frac{\rho a_1^{\text{O}}}{9\xi^2} + \frac{\rho k_{\text{O}} a_1^{\text{O}}}{9\xi^3} + \frac{\rho k_{\text{O}} a_1^{\text{O}}}{9\xi^3} + \frac{\rho}{6\xi k_{\text{O}}} (S_{\text{O}} - 1) \right] \right\} \right\}, \quad (9)$$

$$s_{\text{Ce,Sm,O}} = \frac{\hbar \omega_{\text{Ce,Sm,O}}}{2}, \quad a_1^{\text{Ce,Sm,O}} = 1 + \frac{S_{\text{Ce,Sm,O}}}{2}, \quad S_{\text{Ce,Sm,O}} = s_{\text{Ce,Sm,O}} \coth s_{\text{Ce,Sm,O}},$$

where Ψ_{Gd} and N_{Gd} are total Helmholtz energy and the number of Gd^{3+} ions, respectively, in $\text{Ce}_{1-x}\text{Gd}_x\text{O}_{2-x/2}$ crystals, S_c^* is the configurational entropy of this crystal, and u_0^{Ce} is the average interaction potential of a Ce^{4+} ion in $\text{Ce}_{1-x}\text{O}_{2-x/2}$ crystal that determined through the Helmholtz free energies of Ce^{4+} and O^{2-} ions [10].

Trong PPTKMM, năng lượng tự do của các ion Ce^{4+} , Gd^{3+} and O^{2-} được xác định bởi các công thức

với $\theta = k_B T$, k_B là hằng số Boltzmann, $\omega_{\text{Ce,Gd,O}}$ là các tần số dao động của các ion, \hbar is hằng số Planck and E_0^{Ce} , E_0^{Gd} , E_0^{O} là các thế năng tương tác của các ion Ce^{4+} , Gd^{3+} , and O^{2-} ở vị trí cân bằng.

Độ dời trung bình của các ion Ce^{4+} , Gd^{3+} , và O^{2-} ra khỏi vị trí cân bằng ở nhiệt độ T được xác định bởi các công thức [11]

$$y_{\text{Ce,Gd}}(T) \approx \sqrt{\frac{2\gamma_{\text{Ce,Gd}}\theta^2}{3k_{\text{Ce,Gd}}^3}} A_{\text{Ce,Gd}}, \quad (10)$$

$$y_{\text{O}} \approx \sqrt{\frac{2\gamma_{\text{O}}\theta^2}{3k_{\text{O}}^3}} A_{\text{O}} - \frac{\rho}{3\gamma_{\text{O}}} + \frac{1}{\xi} \left(1 + \frac{6\gamma_{\text{O}}^2\theta^2}{\xi^4} \right) \left(\frac{1}{3} + \frac{\gamma_{\text{O}}\theta}{3k_{\text{O}}^2} (X_{\text{O}} - 1) - \frac{2\rho^2}{27\gamma_{\text{O}}k_{\text{O}}} \right), \quad (11)$$

với $A_{\text{Ce,Gd}}$ và A_{O} được xác định như trong các tài liệu [10] và [11].

Khoảng cách lân cận gần nhất giữa hai nguyên tử ở nhiệt độ T được xác định bởi biểu thức

$$r_1(T) = r_1(0) + c_{\text{Ce}}y_{\text{Ce}}(T) + c_{\text{Gd}}y_{\text{Gd}}(T) + c_{\text{O}}y_{\text{O}}(T). \quad (12)$$

Hệ số giãn nở nhiệt của tinh thể GDC được tính toán dựa vào các đóng góp hệ số giãn nở nhiệt của các ion Ce^{4+} , Gd^{3+} , và O^{2-} [10,11]

$$\alpha(T) = c_{\text{Ce}}\alpha_{\text{Ce}}(T) + c_{\text{Gd}}\alpha_{\text{Gd}}(T) + c_{\text{O}}\alpha_{\text{O}}(T), \quad (13)$$

với c_{Ce} , c_{Gd} , c_{O} là nồng độ của các ion Ce^{4+} , Gd^{3+} , và O^{2-} và

$$\alpha_{\text{Ce,Gd,O}}(T) = \frac{k_B}{r_1(0)} \frac{\partial y_{\text{Ce,Gd,O}}(T)}{\partial \theta}. \quad (14)$$

Các nhiệt dung đẳng tích C_V^{Ce} , C_V^{Gd} , C_V^{O} của các ion Ce^{4+} , Gd^{3+} , và O^{2-} có thể được xác định bằng cách lấy đạo hàm

năng lượng từ do của các ion trong các phương trình (7) - (9). Do đó, nhiệt dung đẳng tích được xác định bởi biểu thức [10,11]

$$C_V = c_{\text{Ce}}C_V^{\text{Ce}} + c_{\text{Gd}}C_V^{\text{Gd}} + c_{\text{O}}C_V^{\text{O}}, \quad (15)$$

với

$$C_V^{\text{Ce}} = -T \left(\frac{\partial^2 \Psi_{\text{Ce}}}{\partial T^2} \right), \quad C_V^{\text{Gd}} = -T \left(\frac{\partial^2 \Psi_{\text{Gd}}}{\partial T^2} \right),$$

$$C_V^{\text{O}} = -T \left(\frac{\partial^2 \Psi_{\text{O}}}{\partial T^2} \right).$$

Nhiệt dung đẳng áp được xác định từ mối quan hệ [10,11]

$$C_p = C_V + 9\alpha^2 B_T V T, \quad (16)$$

ở đây, B_T kí hiệu modun khối đẳng nhiệt của tinh thể GDC.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Để mô tả tương tác giữa các ion trong ceria pha tạp, nghiên cứu này sử dụng thể Coulomb và thể Buckingham gồm các tương tác ngắn [14]

$$\phi_{mn}(r) = \frac{q_m q_n}{r} + A_{mn} e^{-\frac{r}{B_{mn}}} - \frac{C_{mn}}{r^6}, \quad (18)$$

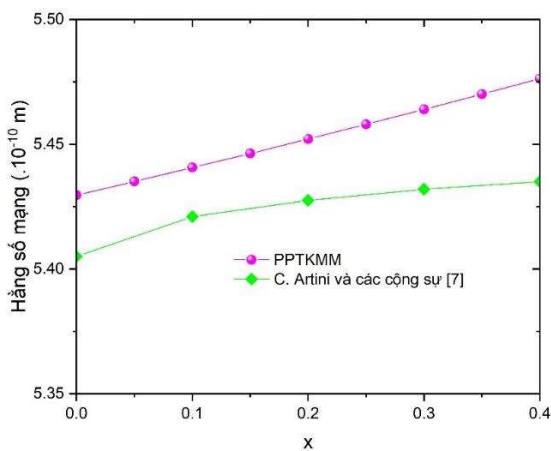
với q_m , q_n là các điện tích hiệu dụng của các ion thứ m và thứ n , r là khoảng cách giữa các ion, và các tham số thể A_{mn} , B_{mn} , C_{mn} được trình bày trong Table 1.

Bảng 1. Các tham số của thể Buckingham trong tinh thể GDC [14].

Tương tác	A_{mn} (eV)	B_{mn} (Å)	C_{mn} ($eV \cdot \text{Å}^6$)
$\text{O}^{2-} - \text{O}^{2-}$	9547,96	0,2192	32,00
$\text{Ce}^{4+} - \text{O}^{2-}$	1809,68	0,3547	20,40
$\text{Gd}^{3+} - \text{O}^{2-}$	1885,75	0,3399	20,34

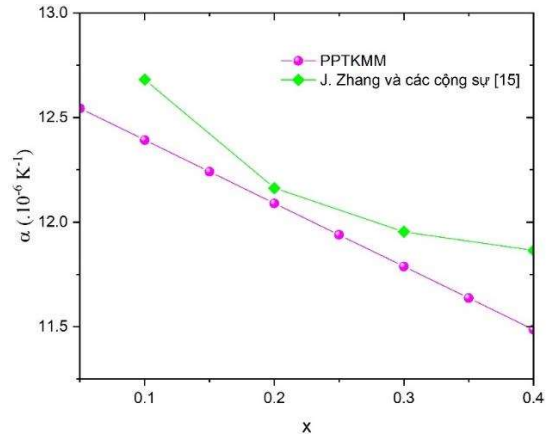
Hình 1 chỉ ra hằng số mạng của tinh thể GDC ở nhiệt độ phòng là một hàm của nồng độ tạp chất. Có thể thấy rằng hằng số

mạng lớn hơn không nhiều so với hằng số mạng của tinh thể CeO_2 ($x = 0$). Hằng số mạng của tinh thể GDC tăng lên khi nồng độ tạp chất tăng. Sự giãn nở mạng bởi pha tạp sinh ra do bán kính của các ion Gd^{3+} lớn hơn so với bán kính của các ion Ce^{4+} . Các tính toán lý thuyết của tôi phù hợp tốt với các kết quả thực nghiệm [7]. Các kết quả hằng số mạng có được từ thực nghiệm tăng nhanh cùng với nồng độ tạp chất ở $x \leq 0.1$ nhưng lại biến đổi chậm khi nồng độ tạp chất gần tới giới hạn tan, $x = 0.4$.



Hình 1. Sự phụ thuộc của hằng số mạng của tinh thể GDC vào nồng độ tạp chất. Các kết quả thực nghiệm của C. Artini và các cộng sự [7] được trình bày để so sánh.

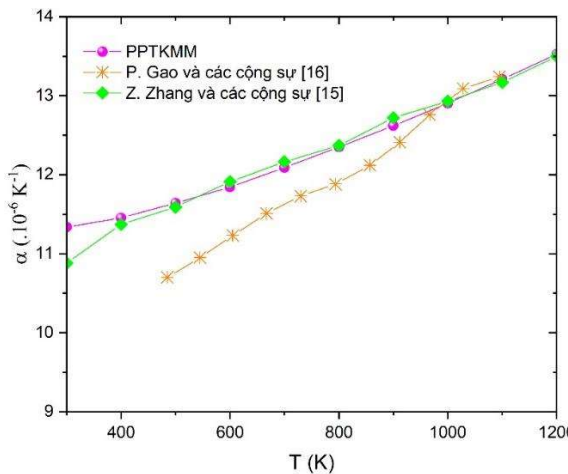
Các kết quả tính toán của hệ số giãn nở nhiệt của tinh thể GDC ở 600 K được trình bày trong Hình 2. Có thể thấy rằng hệ số giãn nở nhiệt tăng tuyến tính cùng với sự tăng lên của nồng độ tạp chất. Sự phụ thuộc này chỉ ra giá trị lớn hơn của hệ số giãn nở nhiệt của tinh thể GDC so với tinh thể CeO_2 . Sự thay thế các ion Ce^{4+} bởi các ion Gd^{3+} thúc đẩy các dao động nhiệt của các ion và do đó, các ion dao động mạnh hơn dưới ảnh hưởng của nhiệt độ. Các kết quả đo được sử dụng nhiễu xạ tia X [15] được chỉ ra trong Hình 2. Các kết quả hệ số giãn nở nhiệt tính toán được phù hợp tốt với các kết quả thực nghiệm với sai số chỉ khoảng 3 - 5 %.



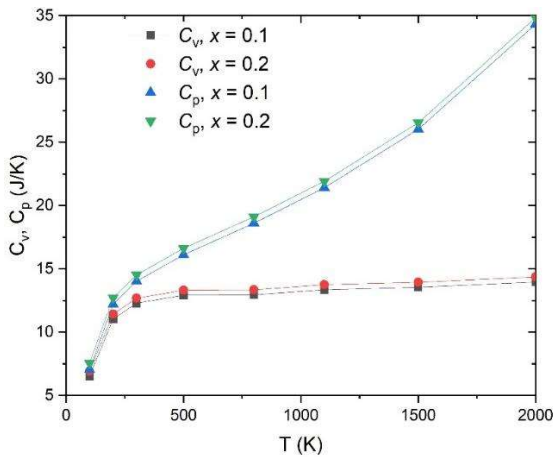
Hình 2. Sự phụ thuộc của hệ số giãn nở nhiệt của tinh thể GDC vào nồng độ tạp chất. Các kết quả thực nghiệm của J. Zhang và các cộng sự [15] được trình bày để so sánh.

Hình 3 trình bày các kết quả tính toán của hệ số giãn nở nhiệt của tinh thể GDC ở $x = 0.2$. Hệ số giãn nở nhiệt tính toán được là một hàm của nồng độ tạp chất. Hệ số giãn nở nhiệt tăng khi nhiệt độ tăng. Đáng chú ý, hệ số giãn nở nhiệt tăng nhanh trong vùng nhiệt độ cao, $T > 2000$ K. Tính chất này sinh ra từ các dao động phi điều hòa của các dao động nhiệt mạng. P. Gao cùng các cộng sự [16] và J. Zhang cùng các cộng sự [15] đã đo hệ số giãn nở nhiệt của tinh thể GDC sử dụng các phép đo nhiễu xạ tia X. Các kết quả đo được rất gần với các tính toán của tôi sử dụng PPTKMM.

Trong Hình 4, các kết quả tính toán các nhiệt dung đẳng tích C_V và đẳng áp C_P được trình bày. Có thể thấy rằng nhiệt dung đẳng tích phụ thuộc yếu vào nhiệt độ nhưng nhiệt dung đẳng tích lại thay đổi nhanh cùng với nhiệt độ và trở thành một hàm phi tuyến của nhiệt độ. Các dao động phi điều hòa mạnh dưới nhiệt độ cao là lý do chính dẫn đến sự tăng lên bất thường của nhiệt dung đẳng tích gần nhiệt độ nóng chảy. Tính chất này cũng đã được tìm thấy trong các tinh thể kim loại như Cu, Pd, Ag, ... [17]. Các nhiệt dung ở các nồng độ khác nhau ($x = 0.1$; $x = 0.2$) chỉ ra sự phụ thuộc vào nồng độ tạp chất. Các nhiệt dung trở nên lớn hơn khi nồng độ tạp chất tăng.



Hình 3. Sự phụ thuộc của hệ số giãn nở nhiệt của tinh thể GDC vào nhiệt độ. Các kết quả thực nghiệm của J. Zhang và các cộng sự [15], P. Gao và các cộng sự [16] được trình bày để so sánh.



Hình 4. Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của nhiệt dung đẳng tích và nhiệt dung đẳng áp của tinh thể GDC ở $T = 100 - 2000 \text{ K}$ at $x = 0.2$.

4. KẾT LUẬN

Trong nghiên cứu này, PPTKMM đã được sử dụng để nghiên cứu các tính chất nhiệt động học của tinh thể GDC. Hệ số giãn nở nhiệt, các nhiệt dung được tính toán là các hàm của nồng độ tạp chất và nhiệt độ. Sự tăng lên bất thường của hệ số giãn nở nhiệt và nhiệt dung đẳng tích gần nhiệt độ nóng chảy sinh ra từ các dao động phi điều hòa của mạng tinh thể. Các kết quả tính toán được so sánh với các kết quả thực nghiệm.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. R. Di Monte, J. Kaspar (2004), *On the Role of Oxygen Storage in Three-Way Catalysis*, Topic in Catalysis 28, pp. 47-57.
2. M. Sugiura, O. Masakuni, S. Akihiko, S. Tadashi (2005), *Development of Innovative Three-Way Catalysts Containing Ceria-Zirconia Solid Solutions with High Oxygen Storage/Release Capacity*, Catal. Surv. Asia 78 (5), pp. 752-767.
3. S. Bernal, G. Blanco, J.J. Calvino, J.M. Gatica, J.A. Perez-Omil, J.M. Pintado (2004), *Characterisation of three-way automotive aftertreatment catalysts and related model systems*, Top. Catal. 28 (1-4), pp. 31-45.
4. J. Kaspar, P. Fornasiero (2003), *Nanostructured materials for advanced automotive de pollution catalysts*, J. Solid State Chem. 171, pp. 19-29.
5. M. Coduri, S. Checchia, M. Longhi, D. Ceresoli, M. Scavini (2018), *Rare Earth Doped Ceria: The Complex Connection Between Structure and Properties*, Front. Chem. 6, pp. 526-1-526-23.
6. M.G. Chourashiya, J.Y. Patil, S.H. Pawar, L.D. Jadhav (2008), *Studies on structural, morphological and electrical properties of $Ce_{1-x}Gd_xO_{2-x/2}$* , Materials Chemistry and Physics 109, pp.39-44.
7. C. Artini, M. Pani, A. Lausi, R. Masini, G.A. Costa (2014), *High Temperature Structural Study of Gd-Doped Ceria by Synchrotron X-ray Diffraction ($673 \text{ K} \leq T \leq 1073 \text{ K}$)*, Inorg. Chem. 53, pp. 10140-10149.
8. N. Stelzer and J. Nolting (1995), *Phase diagram of nonstoichiometric 10 mol % Gd_2O_3 -doped cerium oxide determined from specific heat measurements*, Journal of solid state chemistry 117, pp. 392-397.
9. T. Hisashige, Y. Yamamura, T. Tsuji (2006), *Thermal expansion and Debye temperature of rare earth-doped ceria*, Journal of Alloys and Compounds 408, pp. 1153-1156.

10. V.V. Hung, L.T.M. Thanh, K. Masuda-Jindo (2010), *Study of Thermodynamic Properties of Cerium Dioxide under High Pressures*, *Comp. Mater. Sci.* **49** (4), pp. S355-S358.
11. V. V. Hung, J. Lee, K. Masuda-Jindo (2006), *Investigation of Thermodynamic Properties of Cerium Dioxide by Statistical Moment Method*, *J. Phys. and Chem. Solids* **67** (4), pp. 682-689.
12. D.T. Hai, V.V. Hung, Pham Ngoc Thu, Lo Ngoc Dung, L.T.T. Huong, H.T.M Anh, L.T. Lam (2022), *Structural and Electrical Properties of Samarium-doped Ceria Electrolyte*, *VNU Journal of Science: Mathematics - Physics* **38**, pp. 65-75
13. Le Thu Lam (2022), *Effects of temperature on the electrical properties of samaria-doped ceria predicted with the statistical moment method*, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **170**, pp. 110907
14. L. Minervini, R. W. Grimes, K. E. Sickafus (2000), *Disorder in Pyrochlore Oxides*, *J. Am. Ceram. Soc.* **83** (8), pp. 1873-1878.
15. J. Zhang, C. Ke, H. Wu, J. Yu, J. Wang, Y. Wang (2017), *Solubility limits, crystal structure and lattice thermal expansion of Ln_2O_3 ($Ln = Sm, Eu, Gd$) doped CeO_2* , *Journal of Alloys and Compounds* **718**, pp. 85-91.
16. P. Gao, A. Bolon, M. Taneja, Z. Xie, N. Orlovskaya, M. Radovic (2017), *Thermal expansion and elastic moduli of electrolyte materials for high and intermediate temperature solid oxide fuel cell*, *Solid State Ionics* **300**, pp. 1-9.