

## **CAPÍTULO 2**

**Relaciones de Fase en el Sistema  $\text{Sc}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2\text{-In}_2\text{O}_3$  a 1300 °C en Aire**

## 2.1 Desarrollo experimental

En el presente trabajo se empleó el mismo equipo y procedimiento experimental descrito en el capítulo anterior. Para establecer el sistema ternario  $\text{Sc}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2\text{-In}_2\text{O}_3$ , fueron preparadas alrededor de 40 mezclas de óxidos. El óxido de indio ( $\text{In}_2\text{O}_3$ , g. e. *Ia3*, No. 206) fue calentado a  $850\text{ }^\circ\text{C}$  en aire por 24 horas antes de su utilización y mostró una estructura cristalina cúbica tipo C.

## 2.2 Resultados y discusión

### 2.2.1 El sistema $\text{Sc}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2\text{-In}_2\text{O}_3$ a $1300\text{ }^\circ\text{C}$ en aire

La tabla 2.1 muestra la composición, el periodo de calentamiento y las fases que resultaron en equilibrio para el sistema  $\text{Sc}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2\text{-In}_2\text{O}_3$  a  $1300\text{ }^\circ\text{C}$  en aire. La figura 2.1 exhibe la representación gráfica de dicha tabla. El máximo número de fases encontradas fue 3, confirmándose así la regla de las fases para un sistema de tres componentes en la región sub-sólida.

#### *El sistema binario $\text{Sc}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$ a $1300\text{ }^\circ\text{C}$*

Los resultados de este sistema son los mismos que aquellos obtenidos y descritos en la sección 1.2 de este trabajo. Los únicos compuestos estables fueron:  $\text{Sc}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$  con estructura cúbica relacionada con la estructura de la fluorita y  $\text{Sc}_2\text{TiO}_5$  con estructura ortorrómbica tipo Pseudobrokita. La fase  $\text{Sc}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  con estructura cúbica tipo Pirocloro no fue obtenida en este trabajo.

#### *El sistema binario $\text{TiO}_2\text{-In}_2\text{O}_3$ a $1300\text{ }^\circ\text{C}$*

En este sistema únicamente la fase  $\text{In}_2\text{TiO}_5$  (g. e. *Pnma*, No. 62) con estructura tipo Pseudobrokita ( $a(\text{Å}) = 7.2391(8)$ ,  $b(\text{Å}) = 3.4990(4)$  y  $c(\text{Å}) = 14.885(2)$ ) es estable. Esta fase ya ha sido previamente reportada por Senegas y col., quienes la sintetizaron a partir de una mezcla de los óxidos de titanio e indio, la cual fue colocada en tubos sellados de platino a  $1250\text{ }^\circ\text{C}$  por 24 horas. También reportaron las constantes de celda, las cuales fueron:  $a(\text{Å}) = 7.237$ ,  $b(\text{Å}) = 3.429$  y  $c(\text{Å}) = 14.86$  [21]. En el presente trabajo,  $\text{In}_2\text{TiO}_5$  fue obtenido a partir de  $\text{In}_2\text{O}_3\text{:TiO}_2=1:1$  (relación molar) a  $1300\text{ }^\circ\text{C}$  en un periodo de 2 días.

Tabla 2.1. Condiciones de síntesis y fases presentes en el sistema  $\text{Sc}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2\text{-In}_2\text{O}_3$  a  $1300\text{ }^\circ\text{C}$  en aire.

Mezcla	Composición $\text{Sc}_2\text{O}_3\text{:TiO}_2\text{:In}_2\text{O}_3 =$ (en relación molar)	Periodo de calentamiento (días)	Fase(s) Obtenida(s)
1	3:4:1	2+2	CRF* (ss) <sup>†</sup>
2	1:1:1	2+2	Tipo C (ss), CRF (ss)
3	40:55:50	2+2	Tipo C (ss), CRF (ss), P <sup>§</sup> (ss)
4	1:0:1	2+2	Tipo C (ss)
5	4:6:0	2+2	$\text{Sc}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$
6	1:1:0	2+2	$\text{Sc}_2\text{TiO}_5$
7	0:1:1	2+2	$\text{In}_2\text{TiO}_5$
8	1:4:3	2+2	P (ss)
9	1:2:1	2+2+2	CRF (ss), P (ss)
10	1:1:2	2+2	Tipo C (ss), P (ss)
11	2:2:1	2+3	Tipo C (ss), CRF (ss)
12	1:2:2	2+3	Tipo C (ss), P (ss)
13	2:1:1	2+3	Tipo C (ss), CRF (ss)
14	5:4:1	2+3	Tipo C, CRF (ss)
15	1:2:0	2+3	$\text{Sc}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$ , $\text{TiO}_2$
16	1:0:3	2+2	Tipo C (ss)
17	3:0:1	2+2	Tipo C (ss)
18	1:3:1	2+2	$\text{X}_1^{\&}$ , CRF (ss), $\text{TiO}_2$
19	45:50:5	2+3	CRF (ss), $\text{Sc}_2\text{TiO}_5$
20	25:65:10	2+3	CRF (ss), $\text{TiO}_2$
21	10:65:25	2+3	$\text{X}_1$ , $\text{TiO}_2$
22	3:6:1	2+3	CRF (ss)
23	0:1:2	2+3	$\text{In}_2\text{O}_3$ , $\text{In}_2\text{TiO}_5$
24	0:2:1	2+2	$\text{In}_2\text{TiO}_5$ , $\text{TiO}_2$
25	2:4:1	2+2	CRF (ss)
26	2:5:2	2+2+2	$\text{X}_1$ , CRF (ss)
27	1:4:1	2+2	$\text{X}_1$ , CRF (ss), $\text{TiO}_2$
28	7:12:3	2+3	CRF (ss)
29	1:4:2	2+3	$\text{X}_1$
30	25:60:15	2+3	CRF (ss)
31	2:5:3	2+3	P (ss)
32	2:3:1	3+2	CRF (ss)
33	5:60:35	3+2	$\text{X}_1$ , $\text{TiO}_2$ , $\text{In}_2\text{TiO}_5$
34	45:55:0	2+2	$\text{Sc}_2\text{TiO}_5$ , $\text{Sc}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$
35	3:8:4	3+2	$\text{X}_1$ , P (ss), CRF (ss)
36	4:6:3	3+2	Tipo C (ss), CRF (ss)
37	15:60:25	3+2	$\text{X}_1$ , $\text{TiO}_2$
38	1:6:3	2+3	$\text{X}_1$ , $\text{TiO}_2$

Tabla 2.1. Continuación.

Mezcla	Composición Sc <sub>2</sub> O <sub>3</sub> :TiO <sub>2</sub> :In <sub>2</sub> O <sub>3</sub> = (en relación molar)	Periodo de Calentamiento (días)	Fases Obtenidas
39	4:6:1	2+3	CRF (ss)
40	1:5:3	2+2+2	P (ss), X <sub>1</sub>
41	1:7:5	2+3+2	P (ss), X <sub>1</sub>
42	40:55:5	2+3	CRF (ss)
43	55:40:5	2+2	Tipo C, Sc <sub>2</sub> TiO <sub>5</sub> , Sc <sub>4</sub> Ti <sub>3</sub> O <sub>12</sub>
44	2:8:5	2+2	X <sub>1</sub> , P (ss)
45	2:7:4	2+2	X <sub>1</sub> , P (ss)
46	10:58:4	2+3	CRF (ss), TiO <sub>2</sub>
47	20:57:23	2+3	CRF (ss), X <sub>1</sub>

\*: CRF significa estructura Cúbica Relacionada a la Fluorita [17].

§: P significa estructura ortorrómbica tipo Pseudobrokita.

&: X<sub>1</sub> significa estructura tipo InFe<sub>1-x</sub>Ti<sub>x</sub>O<sub>3+x/2</sub> monoclinico [4].

†: ss significa solución sólida.

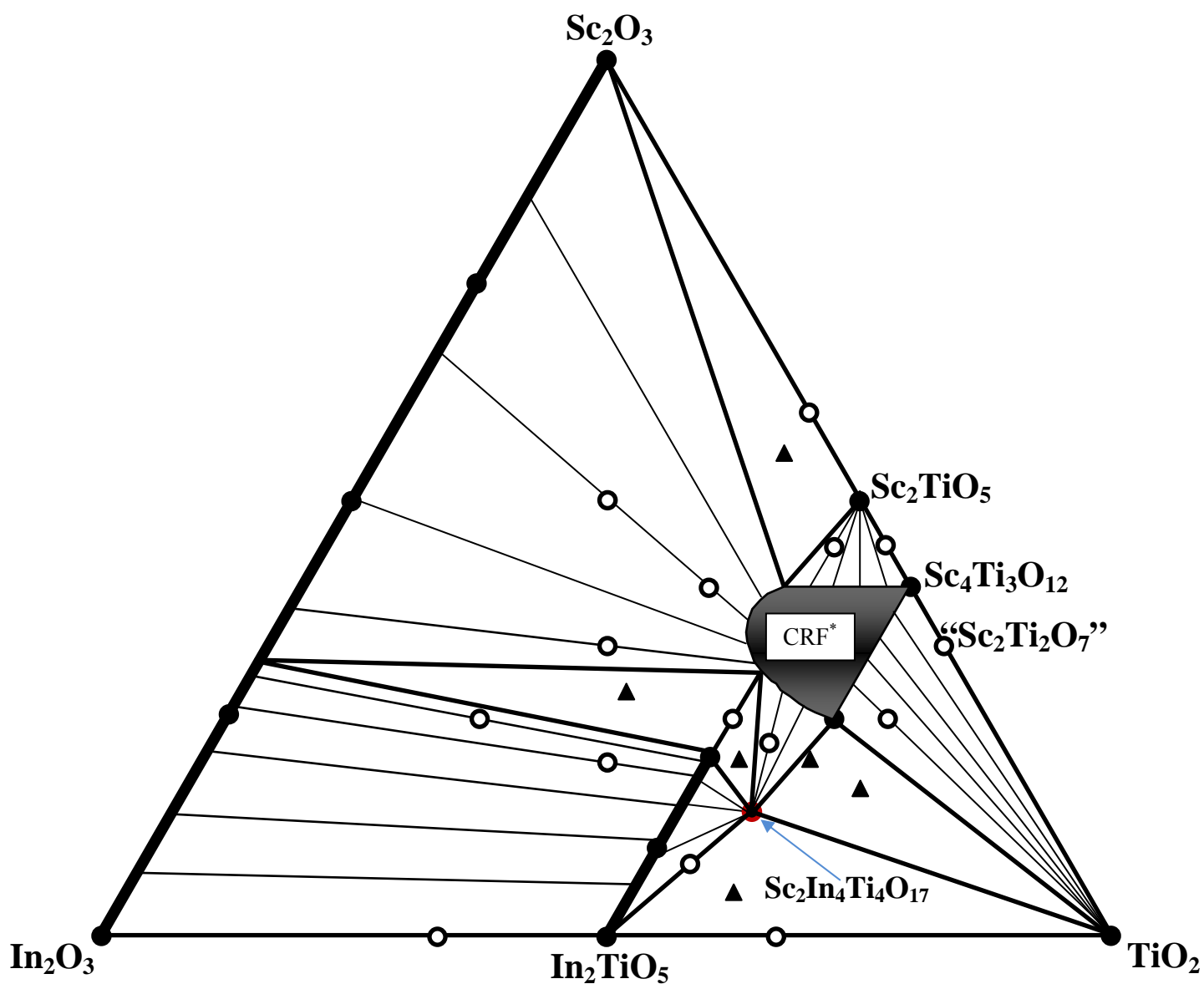


Figura 2.1. Relaciones de fase en el sistema  $\text{Sc}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2\text{-In}_2\text{O}_3$  a 1300 °C en aire.  
 ● : Una fase existe; ○: dos fases coexisten; ▲ : tres fases coexisten. Existe una nueva fase ternaria, de fórmula  $\text{Sc}_2\text{In}_4\text{Ti}_4\text{O}_{17}$ , a lo largo del sistema pseudobinario  $\text{In}_2\text{TiO}_5\text{-“Sc}_2\text{Ti}_2\text{O}_7\text{”}$  ( $\text{In}_2\text{TiO}_5\text{:“Sc}_2\text{Ti}_2\text{O}_7\text{”}=2:1$ , en relación molar).

Roth [22] reportó la síntesis de  $R_2Ti_2O_7$  (R: Sm, Gd, Dy, Yb o Y) con estructura cúbica tipo pirocloro a partir de polvos de  $R_2O_3$  y  $TiO_2$  a temperaturas de 1425-1550 °C por 0.5-1 hora en aire. También reportó que no obtuvo la fase  $In_2Ti_2O_7$  mediante la reacción de polvos de  $In_2O_3$  y  $TiO_2$  a 1550 °C por 3 horas. Asimismo, Brixner [18] sintetizó las fases  $R_2Ti_2O_7$  (R: Sm-Lu, Y, o Sc) a 1200-1350 °C por 10-14 horas en aire y determinó los parámetros de celda unitaria, resistividades y constante dieléctrica. En el presente estudio a 1300 °C, las fases  $In_2Ti_2O_7$  y  $Sc_2Ti_2O_7$  no fueron formadas; sin embargo, como se describe más adelante, existe una fase con una estructura cristalina similar a  $In(Fe_{0.333}Ti_{0.667})O_{3.333}$  monoclinico, el cual presenta una estructura cristalina relacionada con aquella de pirocloro [11].

Las constantes de celda unitaria y de celda unitaria de  $In_2O_3$  en equilibrio con  $In_2TiO_5$  se presentan en la tabla 2.2.

#### *El sistema binario $Sc_2O_3$ - $In_2O_3$ a 1300 °C*

En este sistema binario existe una solución sólida total,  $Sc_{2-2x}In_{2x}O_3$  ( $0 \leq x \leq 1$ ), con estructura cúbica tipo C. En la figura 2.2 se muestran los parámetros de red de esta solución sólida. Puede observarse que satisfacen la ley de Vegard. Debido a que el radio iónico de Sc(III) es menor que el radio de In(III), es razonable que tanto el parámetro de red, como el volumen de celda unitaria de  $Sc_{2-2x}In_{2x}O_3$  aumenten conforme se incrementa el contenido de In(III). Este sistema binario ha sido estudiado por Ambrosini y col.[23], quien dio a conocer la formación de una solución sólida, de fórmula  $Sc_{2-2x}In_{2x}O_{3-\delta}$ , a 1250-1400 °C por 2-4 días.

#### *El sistema $Sc_2O_3$ - $TiO_2$ - $In_2O_3$ a 1300 °C*

En este sistema se encontró una nueva fase ternaria de fórmula  $Sc_2In_4Ti_4O_{17}$  en una composición  $Sc_2O_3:TiO_2:In_2O_3 = 1:4:2$  (en relación molar). Esta nueva fase resultó ser isoestructural a  $In(Fe_{1-x}Ti_x)O_{3+x/2}$  (Unison  $X_1$ ) con estructura monoclinica (g. e.  $C2/m$ . No. 12) [4].  $Sc_2In_4Ti_4O_{17}$ , es transparente en el rango visible y se localiza sobre la línea que une a  $In_2TiO_5$  y “ $Sc_2Ti_2O_7$ ”. Para confirmar la existencia de esta nueva fase, se comparó su difractograma de rayos X de polvos con los de los materiales de inicio y con aquellos de las fases obtenidas en los sistemas binarios.

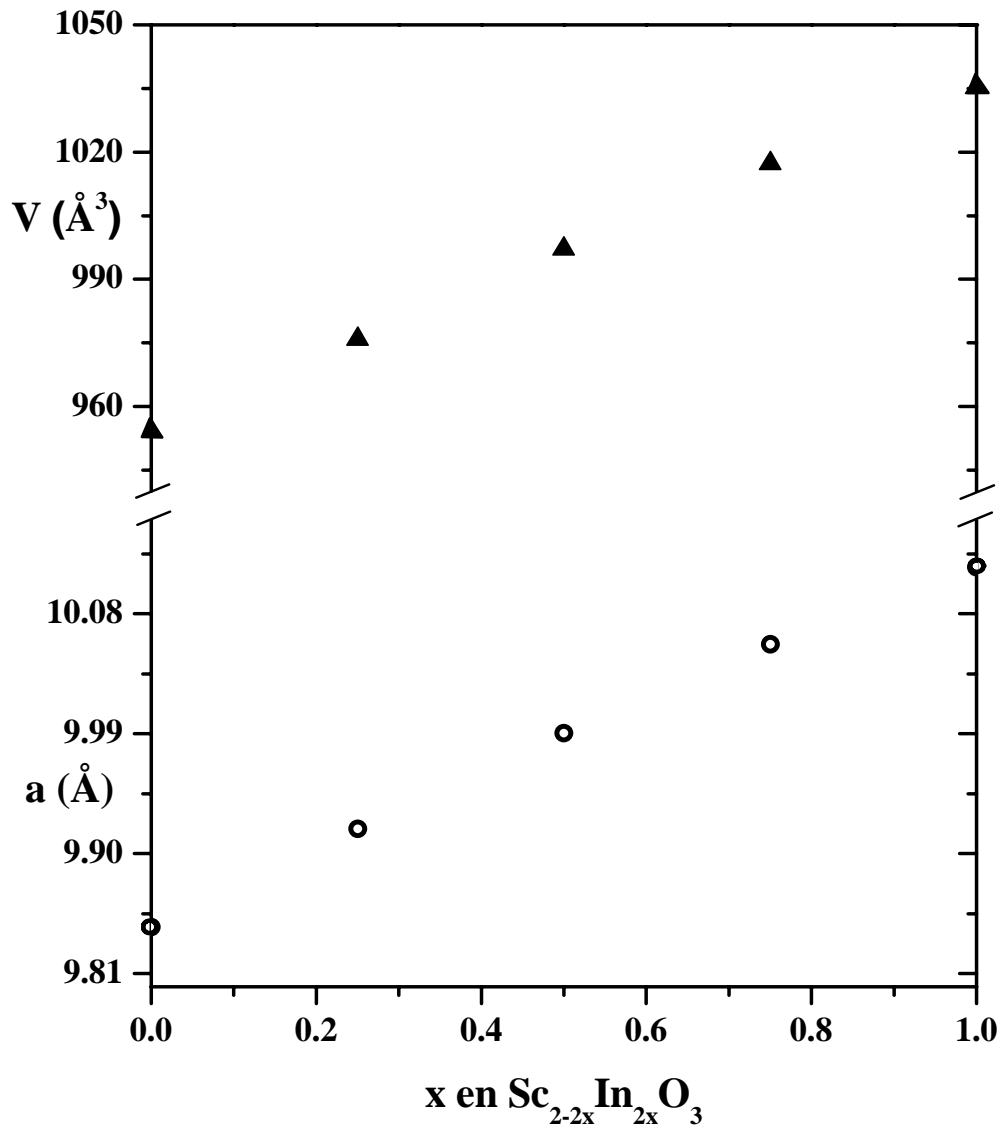


Figura 2.2 Variación de los parámetros de red de Sc<sub>2-2x</sub>In<sub>2x</sub>O<sub>3</sub> con respecto a la composición.

Tabla 2.2. Parámetros de la celda unitaria de  $\text{In}_2\text{O}_3$  en equilibrio con  $\text{In}_2\text{TiO}_5$ .

	$\text{In}_2\text{TiO}_5$	Compuesto de inicio	ICDD [6-416]
$a$ (Å)	10.1165 (6)	10.115 (1)	10.118
$V$ (Å <sup>3</sup> )	1035.4	1035.2	1035.8



En este sistema ternario, al igual que en el sistema  $\text{Sc}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2\text{-Ga}_2\text{O}_3$  [24], también se forma una solución sólida ternaria de la fase  $\text{Sc}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$ , de estructura cristalina cúbica relacionada. Los límites de esta solución sólida fueron determinados con ayuda del método paramétrico.

Existe una solución sólida, de fórmula  $\text{In}_{2-2x}\text{Sc}_{2x}\text{TiO}_5$  ( $0 \leq x \leq 0.42$ ) con estructura tipo pseudobrookita a lo largo de la línea de unión entre los compuestos  $\text{Sc}_2\text{TiO}_5$  e  $\text{In}_2\text{TiO}_5$ .

En el sistema ternario existen seis regiones en las cuales coexisten dos fases: (1) tipo C (ss) e  $\text{In}_2\text{TiO}_5$  (ss); (2) tipo C (ss) y  $\text{Sc}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$  (ss); (3)  $\text{Sc}_2\text{TiO}_5$  y  $\text{Sc}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$  (ss); (4)  $\text{Sc}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$  (ss) y  $\text{TiO}_2$ ; (5)  $\text{Sc}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$  (ss) y  $\text{Sc}_2\text{In}_4\text{Ti}_4\text{O}_{17}$ ; y (6)  $\text{Sc}_2\text{In}_4\text{Ti}_4\text{O}_{17}$  e  $\text{In}_2\text{TiO}_5$  (ss); tal y como se muestra en la figura 2.1. En este sistema ternario también se tienen cinco sub-áreas donde coexisten tres fases: en la primera coexisten  $\text{Sc}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Sc}_2\text{TiO}_5$  y  $\text{Sc}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$  (ss); en la segunda se tiene tipo C (ss),  $\text{Sc}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$  (ss) e  $\text{In}_2\text{TiO}_5$  (ss); en una tercera coexisten  $\text{Sc}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$  (ss),  $\text{In}_2\text{TiO}_5$  (ss) y  $\text{Sc}_2\text{In}_4\text{Ti}_4\text{O}_{17}$ ; en la cuarta coexisten  $\text{Sc}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$  (ss),  $\text{Sc}_2\text{In}_4\text{Ti}_4\text{O}_{17}$  y  $\text{TiO}_2$ ; y en una quinta sub-área coexisten  $\text{In}_2\text{TiO}_5$ ,  $\text{Sc}_2\text{In}_4\text{Ti}_4\text{O}_{17}$  y  $\text{TiO}_2$ .

Michiue y col. [11] reportó que la estructura cristalina de  $\text{In}(\text{Fe}_{0.333}\text{Ti}_{0.667})\text{O}_{3.333}$  (Unison- $X_1$ ) monoclinico es inmensurable en forma de capas y que está relacionada con la estructura cúbica tipo pirocloro. La estructura promedio de Unison- $X_1$  monoclinico puede concebirse como una deformación del compuesto hipotético  $\text{InFeO}_3$  con simetría romboédrica, el cual se exhibe en la figura 2.3. Puede observarse que dicha estructura consiste de dos capas de poliedros apiladas de forma alternada a lo largo del eje romboédrico  $c$ : una capa de  $\text{InO}_2^{1-}$  (conformada por poliedros octaédricos de  $\text{InO}_6$ ) y la otra capa de  $\text{FeO}^{1+}$  (formada por poliedros bipiramidales de  $\text{FeO}_5$ ). En este apilamiento, tanto la posición entre sí de los iones  $\text{In}(\text{III})$ , como de los iones  $\text{Fe}(\text{III})$  poseen un empaquetamiento del tipo ABCABC..., tal como se muestra en la misma figura. La figura 2.4 muestra la estructura promedio de  $\text{In}(\text{Fe}_{0.333}\text{Ti}_{0.667})\text{O}_{3.333}$  (Unison- $X_1$ ) monoclinico. En ella puede verse que el empaquetamiento tanto de los iones  $\text{In}(\text{III})$  como el de los iones  $\text{Ti}/\text{Fe}$  es igual al que presenta  $\text{InFeO}_3$  romboédrico. Debido a que una considerable cantidad de  $\text{Fe}(\text{III})$  es sustituido por iones  $\text{Ti}(\text{IV})$ , un exceso de iones oxígeno es introducido dentro del plano trigonal  $\text{Fe-O}$  para mantener la electroneutralidad del cristal [9, 19]. En la fase  $\text{In}(\text{Fe}_{0.333}\text{Ti}_{0.667})\text{O}_{3.333}$  monoclinico, la relación de cationes en sitios octaédricos y de cationes en sitios bipirámide trigonal es 1:1, respectivamente.

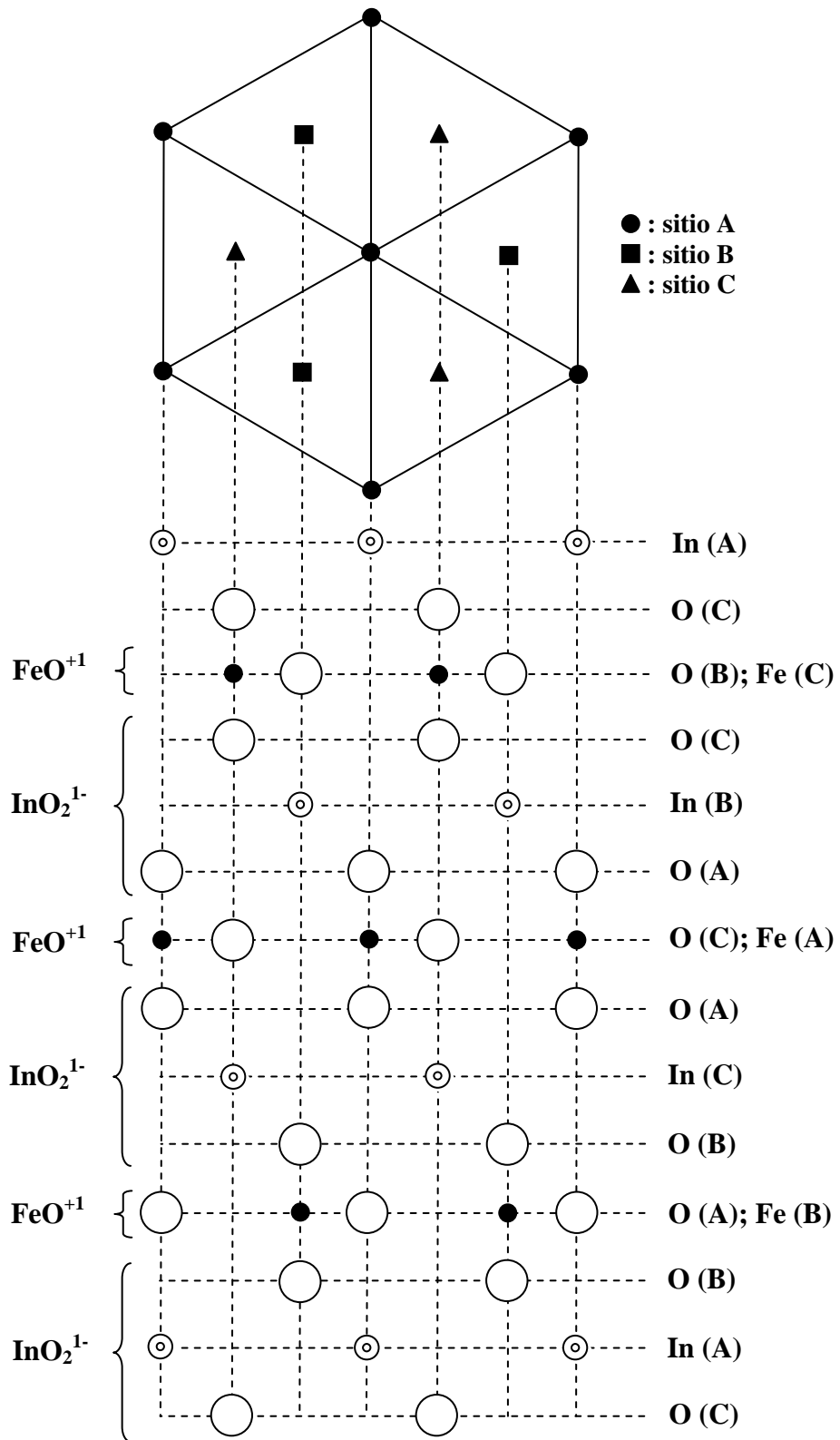


Figura 2.3 Estructura hipotética de InFeO<sub>3</sub> romboédrico.  
 ⊙:In; ●:Fe; ○:O

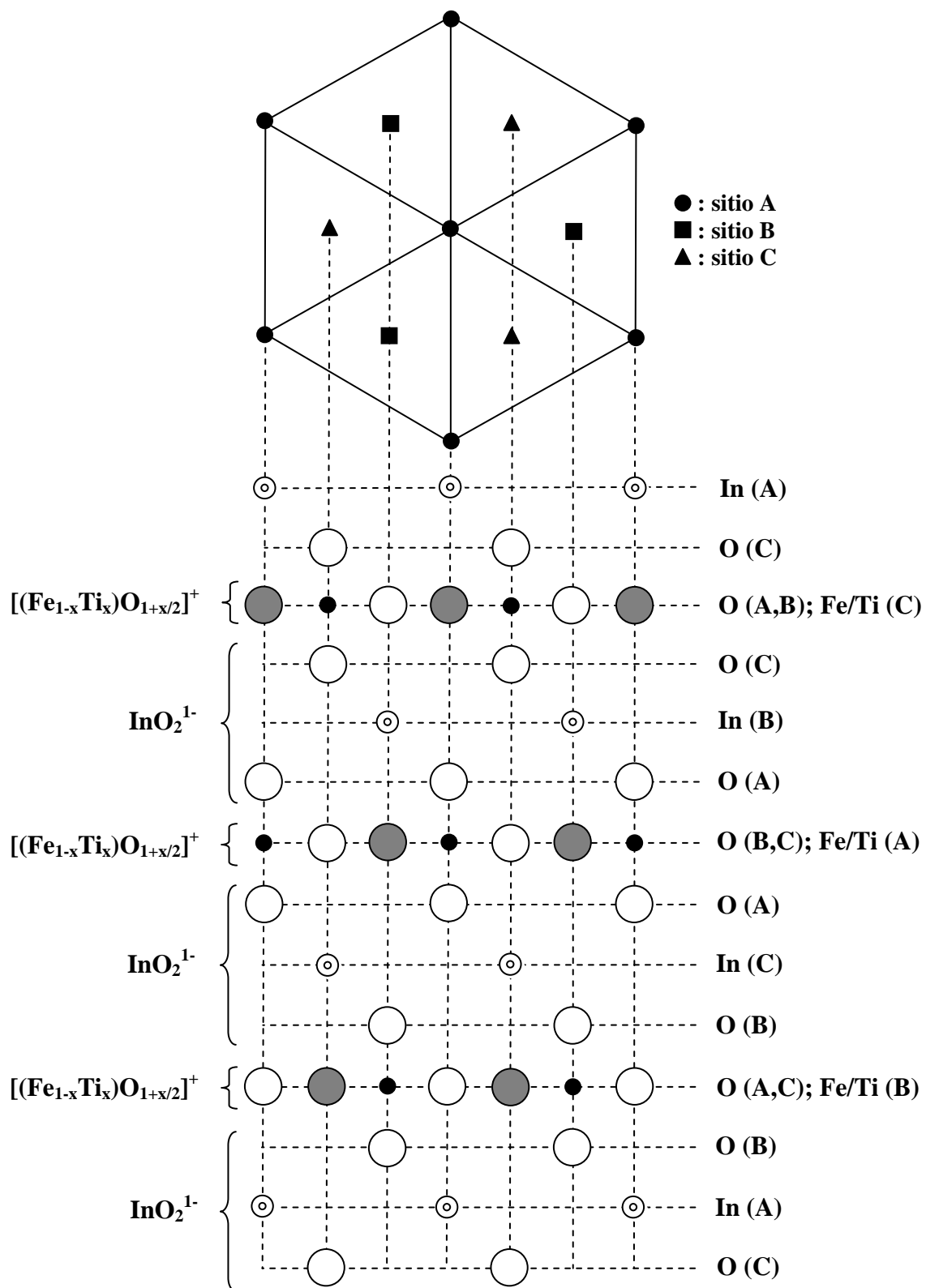


Figura 2.4 Estructura promedio de  $\text{In}(\text{Fe}_{0.333}\text{Ti}_{0.667})\text{O}_{3.333}$  monoclinico (Unison- $X_1$ ).  
 ⊙ : In; ● : Fe/Ti; ○ : O; ● : exceso de oxígeno

En la figura 2.5 se muestran los patrones de difracción de rayos X de polvos de  $\text{In}(\text{Fe}_{0.333}\text{Ti}_{0.667})\text{O}_{3.333}$  (Unison- $X_1$ ) monoclinico y el de la nueva fase  $\text{Sc}_2\text{In}_4\text{Ti}_4\text{O}_{17}$  obtenida en este trabajo. La similitud de dichos patrones de difracción es evidente. Nosotros concluimos que la nueva fase  $\text{Sc}_2\text{In}_4\text{Ti}_4\text{O}_{17}$  es isoestructural a Unison- $X_1$ .

Los datos cristalográficos de  $\text{In}(\text{Fe}_{0.333}\text{Ti}_{0.667})\text{O}_{3.333}$  monoclinico [4] sirvieron de base para la indización de los picos de difracción de la fase  $\text{Sc}_2\text{In}_4\text{Ti}_4\text{O}_{17}$ . La tabla 2.3 presenta los datos de difracción de rayos X de polvos de  $\text{Sc}_2\text{In}_4\text{Ti}_4\text{O}_{17}$ . Se emplearon 4 parámetros de indización:  $h$ ,  $k_1$ ,  $l$  y  $k_2$ , donde  $k_1$  es un índice para la periodicidad de  $b^*$  y  $k_2$  es un índice para la periodicidad de  $q$  x  $b^*$  a lo largo del eje  $b^*$ , donde  $q = 2/5$  ( $= 0.40$ ).

Considerando que Sc(III) tiene una marcada tendencia a tomar números de coordinación 6 y 8 en compuestos óxidos [19] y que el radio iónico de Sc(III) (N.C. = 6, 0.745 Å) es mayor al radio iónico de Ti(IV) (N.C. = 6, 0.605 Å), nosotros postulamos la siguiente distribución de cationes para la fase  $\text{Sc}_2\text{In}_4\text{Ti}_4\text{O}_{17}$ :  $(\text{In}_{0.80}\text{Sc}_{0.20})[\text{Sc}_{0.20}\text{Ti}_{0.80}]\text{O}_{3.40}$ , donde el paréntesis significa el sitio octaédrico y el corchete denota el sitio bipirámide trigonal en la estructura de  $\text{In}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_{3+x/2}$  monoclinico (Unison  $X_1$ ). Con esta distribución de cationes podemos observar que en esta nueva fase también se tiene una relación 1:1 de cationes en sitio octaédrico: sitio bipirámide trigonal, así como también del valor de  $q$  ( $= 0.40$ ) con el valor de  $x/2$  en la fórmula para Unison- $X_1$   $\text{In}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_{3+x/2}$ .

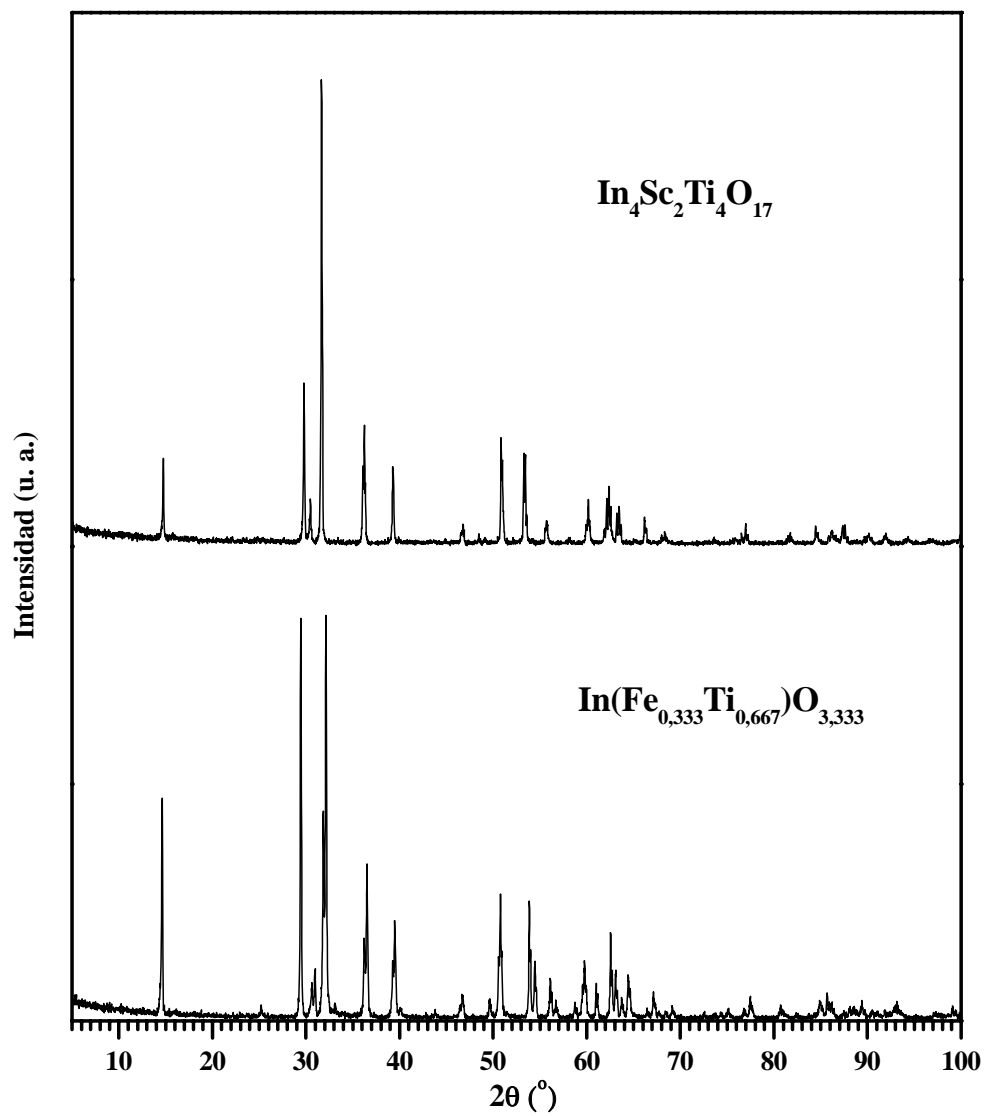


Figura 2.5. Patrones de difracción de rayos X de polvos de  $\text{In}_4\text{Sc}_2\text{Ti}_4\text{O}_{17}$  e  $\text{InFe}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_{3+x/2}$ .

Tabla 2.3. Datos de difracción de rayos X de polvos de  $\text{Sc}_2\text{In}_4\text{Ti}_4\text{O}_{17}$  ( $\text{Sc}_2\text{O}_3:\text{TiO}_2:\text{In}_2\text{O}_3=1:4:2$ , en relación molar) en el sistema  $\text{Sc}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2\text{-In}_2\text{O}_3$  a  $1300\text{ }^\circ\text{C}$  en aire.<sup>a</sup>

$h$	$k_1$	$l$	$k_2$	$d_{\text{obs.}} (\text{Å})$	$d_{\text{calc.}} (\text{Å})$	I (%)
0	0	1	0	5.9929	5.9915	18
1	1	1	$\bar{1}$	3.0346	3.0311	2
0	0	2	0	2.9947	2.9958	35
$\bar{2}$	0	1	0	2.9295	2.9552	7
$\bar{1}$	1	1	0	2.8212	2.8240	100
$\bar{2}$	0	0	$\bar{1}$	2.6767	2.6779	1
$\bar{2}$	0	2	0	2.4881	2.4953	13
1	1	1	0	2.4735	2.4779	25
$\bar{1}$	1	2	0	2.2890	2.2928	16
1	1	0	1	2.2560	2.2442	1
1	1	1	1	2.0167	2.0160	1
0	2	1	$\bar{1}$		2.0160	
$\bar{2}$	0	3	0	1.9478	1.9521	2
0	0	3	1	1.9447	1.9451	3
1	1	2	0	1.9376	1.9420	3
$\bar{3}$	1	1	$\bar{1}$	1.8751	1.8731	2
$\bar{1}$	1	3	0	1.7916	1.7938	15
2	0	2	1	1.7519	1.7506	1
3	1	1	$\bar{1}$	1.5861	1.5848	1
0	2	0	0	1.7129	1.7125	18
$\bar{3}$	1	2	0	1.6525	1.6586	3
3	1	0	0	1.6475	1.6563	4
0	2	1	0	1.6459	1.6466	4
$\bar{2}$	0	4	0	1.5418	1.5432	4
1	1	3	0	1.5367	1.5372	9
0	0	4	0	1.4980	1.4979	2
$\bar{3}$	1	3	0	1.4924	1.4964	8
3	1	1	0	1.4872	1.4931	11
0	2	2	0		1.4868	
$\bar{4}$	0	1	0	1.4829	1.4917	8
$\bar{4}$	0	2	0	1.4699	1.4776	5
2	2	0	0	1.4645	1.4663	7
$\bar{4}$	0	1	1	1.4599	1.4598	4
$\bar{4}$	0	1	$\bar{1}$		1.4598	
0	2	3	$\bar{1}$		1.4604	
$\bar{1}$	1	4	0	1.4331	1.4329	1
$\bar{2}$	2	2	0	1.4107	1.4120	6
$\bar{4}$	0	3	0	1.3773	1.3836	2

Tabla 2.3. Continuación.

$h$	$k_1$	$l$	$k_2$	$d_{\text{obs.}} (\text{Å})$	$d_{\text{calc.}} (\text{Å})$	I (%)
2	2	1	0	1.3710	1.3731	3
$\bar{2}$	2	3	0	1.2858	1.2874	1
1	1	4	0	1.2522	1.2530	1
$\bar{4}$	0	4	0	1.2433	1.2477	2
2	2	2	0	1.2375	1.2390	3
$\bar{1}$	1	5	0	1.1795	1.1793	2
2	0	4	0	1.1766	1.1788	3
$\bar{2}$	2	4	0	1.1458	1.1464	4
$\bar{3}$	1	5	0	1.1309	1.1324	2
0	2	4	0	1.1275	1.1275	3
$\bar{4}$	2	1	0	1.1208	1.1248	1
$\bar{1}$	3	1	0	1.1126	1.1129	3
$\bar{5}$	1	3	0	1.0919	1.0972	2
4	2	0	0	1.0878	1.0927	2
1	3	1	0		1.0876	
$\bar{4}$	2	3	0	1.0726	1.0762	1
5	1	0	0	1.0708	0.9286	2
$\bar{1}$	3	2	0		1.0708	
$\bar{2}$	0	6	0	1.0528	1.0529	1
1	1	5	0	1.0501	1.0504	2
$\bar{4}$	2	4	0	1.0062	1.0084	2

<sup>a</sup> $k_2$  es un índice para el vector a lo largo del eje  $b^*$  con una periodicidad de  $q (= 0.40) \times b^*$ .  $a$ ,  $b$ ,  $c$  y  $\beta$  fueron calculados a partir de las distancias interplanares de  $hk_1l0$ . Las distancias interplanares  $hk_1l k_2$  fueron calculadas a partir de  $a$ ,  $b$ ,  $c$  y  $\beta$ , así como  $q = 0.40$ .

## 2.2.2 Conclusiones

Se estableció el diagrama de fases para el sistema  $\text{Sc}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2\text{-In}_2\text{O}_3$  a  $1300\text{ }^\circ\text{C}$  en aire. En el sistema binario  $\text{In}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$  únicamente la fase  $\text{In}_2\text{TiO}_5$  es estable, mientras que en el sistema  $\text{Sc}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2$  se tienen las fases  $\text{Sc}_2\text{TiO}_5$  y  $\text{Sc}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$ .  $\text{Sc}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$  presenta una solución sólida que se extiende en un área del sistema ternario. En el sistema  $\text{Sc}_2\text{O}_3\text{-In}_2\text{O}_3$  se tiene una solución sólida total, de fórmula  $\text{Sc}_{2-2x}\text{In}_{2x}\text{O}_3$  ( $0 \leq x \leq 1$ ), con estructura cúbica tipo C, la cual satisface la ley de Vegard.

Existe una solución sólida, de fórmula  $\text{In}_{2-2x}\text{Sc}_{2x}\text{TiO}_5$  ( $0 \leq x \leq 0.42$ ) con estructura tipo Pseudobrookita a lo largo de la línea de unión entre los compuestos  $\text{Sc}_2\text{TiO}_5$  e  $\text{In}_2\text{TiO}_5$ .

El compuesto  $\text{Sc}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  es inestable a  $1300\text{ }^\circ\text{C}$ . No obstante, existe una nueva fase isoestructural a  $\text{InFe}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_{3+x/2}$  (Unison- $X_1$ ) monoclinico, de fórmula  $\text{Sc}_2\text{In}_4\text{Ti}_4\text{O}_{17}$ , en el sistema pseudobinario “ $\text{Sc}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ ”- $\text{In}_2\text{TiO}_5$  (relación molar  $\text{Sc}_2\text{O}_3\text{:TiO}_2\text{:In}_2\text{O}_3 = 1\text{:}4\text{:}2$ ). Se propone que la distribución de cationes para esta nueva fase es la siguiente:  $(\text{In}_{0.80}\text{Sc}_{0.20})[\text{Sc}_{0.20}\text{Ti}_{0.80}]\text{O}_{3.40}$ , donde el paréntesis significa el sitio octaédrico y el corchete denota el sitio bipirámide trigonal en la estructura de  $\text{In}(\text{Fe}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_{3+x/2}$  monoclinico (Unison  $X_1$ ).