

**ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ ФАЗОВЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ $\text{BaSn}_{1-x}\text{In}_x\text{O}_{3-\delta}$
В ШИРОКОМ ДИАПАЗОНЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ИНДИЯ***Акопян М.Т.^(1,2), Маткин Д.Е.^(1,2), Медведев Д.А.^(1,2)*⁽¹⁾ Уральский федеральный университет

620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

⁽²⁾ Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН

620137, г. Екатеринбург, ул. Академическая, д. 20

Область гомогенности хорошо известных протонпроводящих [1] материалов, например BaCeO_3 , часто ограничена 20 мол. % акцепторного допанта [2]. Однако станнаты бария формируют однофазные твердые растворы вплоть до 50 мол. % допирования [3], что предоставляет возможность для исследования области высоких концентраций дефектов. Изучение термохимического поведения данных материалов позволяет изучить процесс гидратации. Именно этот процесс обеспечивает образование протонных дефектов в структуре перовскита при повышенной температуре [1], определяя тем самым величину протонной проводимости и другие функциональные характеристики материала.

В данной работе был использован метод высокотемпературной порошковой рентгеновской дифракции (ВТ-РФА). Порошки $\text{BaSn}_{1-x}\text{In}_x\text{O}_{3-\delta}$ ($x = 0.05-0.60$) были синтезированы твердофазным методом. ВТ-РФА подтвердил формирование однофазных керамических материалов с кубической структурой перовскита (пр. гр. Pm-3m) во всем исследуемом диапазоне концентраций индия. Для сильнодопированных образцов ($x \geq 0.30$) в интервале 200–450 °С обнаружено химическое сжатие, а при комнатной температуре зафиксирована вторая, более гидратированная фаза. того же катионного состава. На основе температурных зависимостей параметров решетки были рассчитаны относительные изменения размеров параметра решетки ($\Delta a/a_0$). Коэффициент термического расширения (КТР), возрастает с $11.0 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ для $x = 0$ до $13.5 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ для $x = 0.60$.

В работе впервые систематически изучено термохимическое поведение $\text{BaSn}_x\text{In}_{1-x}\text{O}_{3-\delta}$ в широком диапазоне концентраций допанта. Обратимая гидратация индуцирует значительное химическое расширение, которое для сильнолегированных составов отклоняет параметры решетки от линейного тренда.

1. Kreuer K.D. Proton-conducting Oxides // Annual Review of Materials Research, 2003. 33, 1, 333–359 <https://doi.org/10.1146/annurev.matsci.33.022802.091825>

2. Yamazaki Y., Yang C.K., Haile S.M. Unraveling the defect chemistry and proton uptake of yttrium-doped barium zirconate // Scripta Materialia, 2011. 65, 2, 102–107 <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2010.12.034>

3. Wang Y., Chesnaud A., Bevillon E., Dezanneau G. Properties of Y-doped BaSnO_3 proton conductors // Solid State Ionics, 2012. 214, 45–55 <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2012.02.045>