ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫЕ ОКСИДЫ НА ОСНОВЕ Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO₃

Музурантова А.Е.^(1,2), Вдовина М.А.⁽¹⁾, Буянова Е.С.⁽¹⁾, Петрова С.А.^(1,2)

⁽¹⁾ Уральский федеральный университет 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

⁽²⁾ Институт металлургии УрО РАН 620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д.101

В настоящее время актуальными являются исследования, направленные на изучение высокоэнтропийных материалов, в частности, значительное внимание уделяется высокоэнтропийным оксидам (ВЭО). Многокомпонентные оксиды на основе титаната натрия-висмута $Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO_3$ (NBT) с перовскитоподобной структурой зарекомендовали себя как перспективные материалы для хранения энергии и твердотельного охлаждения; как мультисегнетоэлектрические материалы; как диэлектрические материалы в конденсаторах; как материалы для фотоэлектрических устройств и т.д.

Целью данной работы является синтез высокоэнтропийных твердых растворов на основе $Na_{0,5}Bi_{0,5}TiO_3$, расчёт критериев их устойчивости, исследование характеристик полученных образцов в сравнении с матричным соединением.

При выборе допантов были рассчитаны определённые параметры, подтверждающие возможность образования однофазного высокоэнтропийного состава, кристаллизующего в структурном типе перовскита: конфигурационная энтропия (S_{config}), фактор толерантности (t), валентный фактор ($\delta(V)$), размерный фактор ($\delta(r)$). Для оценки влияния вводимого в NBT числа катионов на характеристики твердых растворов, получены составы с постепенным увеличения количества и концентрации допантов в кристаллической решётке.

Образцы, спрессованные в таблетки, синтезировали по стандартной керамической технологии в температурном интервале 800-900 °C с последующим охлаждением в печи. Аттестацию синтезированных соединений проводили методом рентгенофазового анализа с помощью рентгеновского автоматизированного дифрактометра D8 Advance (CuKα-излучение, Ni-фильтр, позиционночувствительный многоканальный детектор VÅNTEC-1). По результатам РФА основной фазой для $Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO_3$ является $Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO_3$ (пр.гр. Pm-3m), для $Na_{0.25}K_{0.25}Bi_{0.5}TiO_{3-\delta}$ $K_{0.5}Bi_{0.5}TiO_3$ (пр.гр. Pm-3m),образцов это для $Na_{0.35}K_{0.15}Bi_{0.35}Sr_{0.15}TiO_{3-\delta}$, $Na_{0.25}K_{0.25}Bi_{0.25}Sr_{0.25}TiO_{3-\delta}$ основная фаза $Na_{0.25}Sr_{0.5}TiO_3$ (пр.гр. Pm-3m). Образцы, с содержанием P3Э: $Na_{0.25}K_{0.25}Bi_{0.30}Sr_{0.10}Nd_{0.10}TiO_{3-\delta}$, $Na_{0.25}K_{0.25}Bi_{0.20}Sr_{0.15}Nd_{0.15}TiO_{3-\delta}$, $Na_{0.20}K_{0.20}Bi_{0.20}Sr_{0.20}Nd_{0.20}TiO_{3-\delta}$ имеют некоторое количество примесных фаз, но было установлено, что общей для них является основная фаза $Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO_3$ (пр.гр. R3c).