

ПЕРЕДБАЧЕННЯ ПОВЕДІНКИ КРИСТАЛІЧНИХ СТРУКТУР ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ $R_{1-x}R'_xAlO_3$

Т. В. Басюк, Л.О. Василечко

*Кафедра напівпровідникової електроніки, Інститут телекомунікацій,
радіоелектроніки та електронної техніки, Національний університет
“Львівська політехніка”, вул. С. Бандери 12, 79013, Львів, Україна*

Алюмінати рідкісноземельних елементів (РЗЕ, R) зі структурою перовскиту завдяки своїм властивостям набули широкого технологічного застосування, що викликає постійне зацікавлення у структурних дослідженнях цих матеріалів. Дана робота присвячена аналізу структурної та фазової поведінки твердих розчинів, що утворюються у системах $RAIO_3-R'AlO_3$. На основі власних експериментальних результатів та літературних даних, побудовано фазові діаграми, на яких представлені області існування різних типів твердих розчинів $R_{1-x}R'_xAlO_3$ в залежності від значень іонних радіусів катіонів РЗЕ та їх різниці. Показано, що при кімнатній температурі в системах $LaAlO_3-RAIO_3$ (R=Pr, Nd) та $PrAlO_3-NdAlO_3$ утворюються неперервні тверді розчини заміщення із ромбоєдричною структурою перовскиту. Починаючи із самарію, у відповідних системах існують два типи твердих розчинів – із ромбоєдричною (ПГ $R\bar{3}c$) і ромбічною (ПГ $Pbmn$) структурами. Ще один тип твердих розчинів із ромбічною структурою (ПГ $Imma$) знайдено в системах $PrAlO_3-RAIO_3$ із R=Tb–Tm та Y. Фази із тетрагональною структурою існують лише в деяких системах на основі $CeAlO_3$. Встановлено, що в усіх системах $R_{1-x}R'_xAlO_3$ між різними перовскитоподібними фазами існують області незмішуваності, ширина яких змінюється від 1-2 до 65 ат. % РЗЕ. При високих температурах в твердих розчинах $La_{1-x}R_xAlO_3$ із R=Pr, Ce і Nd спостерігається плавний фазовий перехід $R\bar{3}c \leftrightarrow Pm\bar{3}m$, тоді як в системах $La(Pr)_{1-x}R_xAlO_3$ із R=Sm–Tb знайдено ще один перехід $Pbmn \leftrightarrow R\bar{3}c$. Обидва ці переходи пов'язані із ступенем перовскитної деформації і їх температури систематично зростають зі зменшенням радіусу катіонів РЗЕ. Низькотемпературні фазові переходи, спричинені електронними ефектами, спостерігаються лише у системах на основі алюмінатів церію та празеодиму.

У даній роботі проаналізовано понад 30 твердих розчинів $R_{1-x}R'_xAlO_3$ та сполук $RAIO_3$. Побудовано залежності температур фазових перетворень від вмісту та середнього радіусу R-катіонів, а також структурних параметрів, таких як об'єм та відношення параметрів перовскитної комірки. Показано, що ці залежності можуть використовуватися для передбачення кристалічної структури та фазових перетворень рідкісноземельних алюмінатів різних складів в широкому діапазоні температур.