

PACS number: 64.75. Nx

**МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ОБРАЗОВАНИЯ ТВЕРДЫХ
РАСТВОРОВ В СИСТЕМЕ $\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$ ПРИ НАГРЕВЕ В СРЕДЕ
ВОЗДУХА**

А.Е. Соловьева

Сумской государственной университет
ул. Римского-Корсакова, 2, 40007. Сумы, Украина

Предложенные математические модели, образования твердых растворов в системе $\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$ позволили рассчитать ионные радиусы катионов: индия, циркония, аниона и анионной вакансии. Твердые растворы в данной системе образуются на основе неупорядоченной фазы типа C1 оксида индия. Обнаружено, что в интервале температур 1450, 1600 °C в среде воздуха в данной системе образуются ограниченные твердые растворы типа: вычитания – замещения, вычитания – замещения – внедрения. Размер катионов индия, циркония, количество дефектов определяют тип твердого раствора в системе $\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$. Рассчитаны энергии: образования твердых растворов, электропроводности в этой системе. По данным электропроводности образцов обнаружено, что проводимость тока, концентрация и подвижность носителей заряда зависит от типа твердого раствора, а не от валентности катионов циркония.

Ключевые слова: ОКСИД ИНДИЯ, ДИОКСИД ЦИРКОНИЯ, ТИП ТВЕРДОГО РАСТВОРА, ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ.

(Получено 07.12.2010, в отредактированной форме – 11.12.2011, опубликовано online 30.12.2011)

1. ВВЕДЕНИЕ

Полупроводниковые керамические материалы на основе оксида индия с добавками диоксида циркония, обладают полезными электрическими, термическими, прочностными и другими свойствами. Эти свойства позволяют использовать его в различных областях техники и сельского хозяйства: в виде преобразователей солнечной энергии, как источники энергии, твердого топлива, как элементы памяти для электрически перепрограммируемого постоянного запоминающего устройства с окном памяти $\approx 3\text{В}$ [1-3].

Кристаллическая структура оксидов Me_2O_3 (Sc_2O_3 , In_2O_3 , Y_2O_3 , Ce_2O_3 , Pr_2O_3 , Tb_2O_3 , R_2O_3 – редкоземельные оксиды) с ОЦК решеткой относится к структуре типа С - пироклора и содержит 25 % закономерно упорядоченных анионных вакансий, которые являются элементами структуры. Такая структура является производной от кубической структуры флюорита.

Кубическая ГЦК типа флюорита -F структура, к которой относится стабилизированная двуокись циркония и по этой модификации является структурным аналогом: CeO_2 , PrO_2 , HfO_2 , TbO_2 . При высоких температурах, воздействиях излучений, ударных волн, растворении примесей в таких диоксидах, возникают дефекты – анионные вакансии, которые приводят к изменению химического состава соединения по содержанию

кислорода, сопровождаемого структурными изменениями, а следовательно и всеми свойствами [4, 5].

Переход от структуры флюорита к типу С пироклора сопровождается появлением на рентгенограммах сверхструктурных линий, соответствующих установлению порядка в анионной подрешетке.

Дефекты, которые являются элементами структуры, могут с атомами примеси объединяться и образовывать комплексы дефектов в виде донор – акцепторных пар. Накопление таких дефектов приводит к изменению температур полиморфных превращений, изменению физических свойств, распаду твердых растворов [6, 7].

Термодинамика твердых растворов на основе структуры пироклора с дефектами структуры является сложным процессом выбора правильных моделей образования твердого раствора, поскольку модель твердого раствора определяет запись термодинамического потенциала, тем самым и конечный результат. Расчет энергетических параметров, коэффициентов, определяющих изменение внутренней энергии кристалла, не может быть выполнен с достаточной точностью, и их целесообразно находить путем сравнения с экспериментом [8].

Цель данной работы с помощью правильных математических моделей изучить механизм образования твердых растворов в системе $\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

2.1 Математическая модель определения радиусов атомов в соединениях $\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$

Для построения правильной модели механизма образования твердого раствора в системе $\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZrO}$ на основе оксида индия необходимо знать точные значения ионных радиусов катионов индия и циркония, образующих твердый раствор. Причина этого лежит в том, что значения ионных радиусов нельзя рассматривать как абсолютные, и каждая шкала, по-видимому, пригодна лишь для описания определенного структурного типа. Критерием такой пригодности может служить линейность зависимости параметров решетки соединений от радиуса катионов (при фиксированном анионе), приведенных в данной шкале и полученных в зависимости от геометрии данной структуры, при условии наличия плотной упаковки.

Кубическая структура оксида индия типа С – пироклора близка к типу флюорита и отличается от него вакантностью равной $1/4$ анионных позиций и удвоенным параметром решетки. Вакантные и занятые анионные позиции закономерно чередуются. Для этой структуры используется шкала Темплтона и Добена.

Для одного октанта элементарной ячейки, упорядоченной структуры типа С, можно записать параметр решетки оксида индия через ионные радиусы по формуле (1)

$$\frac{a}{2} = D_c(r_k + \frac{3}{4}r_a + \frac{1}{4}r_{v(0)}) \quad (1)$$

где a – параметр решетки, $D_c = 2,336$ - коэффициент для кубических структур редкоземельных оксидов, r_k – радиус катиона, r_a – ионный

радиус кислорода, $r_{v(0)}$ радиус анионной вакансии. По этой шкале необходимо найти значения ионных радиусов индия и циркония.

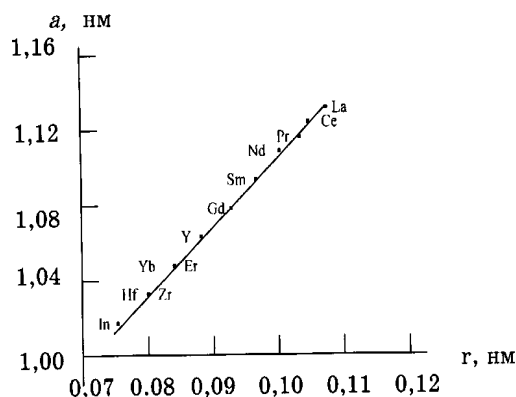


Рис. 1 – Зависимость параметра решёток кубических структур типа C – Me_2O_3 от величины радиуса катиона

По значению параметра решётки оксида индия ($a = 1,0120$ нм), который находится на прямолинейной зависимости (Нис. 1), построенной по известным значениям параметров решеток соединений типа Me_2O_3 от радиусов катионов, определены: катионный радиус индия $r_k = 0,0763$ нм, радиус кислорода $r_{(0)} = 0,1374$ нм, радиус анионной вакансии, определённый по формуле (2) и составляет $r_{v(0)} = 0,1380$ нм.

Поскольку взаимодействие между ионами в кубической решетке типа C является центральным, то направления смещений, вызванные разностью радиусов иона кислорода и анионной вакансии, будут направления $[110]$, $[111]$, $[100]$.

Рассмотрим упаковку атомов в структуре типа C, упорядоченной фазы в плоскости (110) , с учетом, определенных значений радиусов катиона индия, кислорода и анионной вакансии. Она представляет собой распределение атомов в виде неправильного шестигранника.

Кислородные атомы и упорядоченные анионные вакансии образуют искажённую призму, состоящую из шести атомов кислорода и двух упорядоченных анионных вакансий, грани которой центрированы катионами индия или свободны.

По данным [9], гранецентрированная кубическая структура диоксида циркония типа флюорита -F имеет параметр элементарной ячейки $a = 0,507$ нм и радиус катиона $r_{Zr} = 0,082$. Для структур типа флюорита (F – фаза) по шкале Темплтона и Добена выполняется соотношение (3)

$$\frac{\Delta a_k}{\Delta r_k} = \frac{4}{\sqrt{3}} = 2,3094 = D_F. \quad (2)$$

Расчетный параметр решетки типа флюорита составляет $a_F = 0,5066$ нм. Если значение параметра ячейки диоксида удвоить и добавить анионные вакансии по формуле (3), то получим параметр решетки оксида гафния в структуре типа C

$$a_F \cdot 2 + \frac{r_{v(0)}}{4} = a_c(\text{Zr}_2\text{O}_3) \quad (3)$$

Параметр решетки для Zr_2O_3 в структуре типа С, определенный по формуле (3), составляет $a_c = 1,0477$ нм. Это значение параметра решетки Zr_2O_3 , попадает на линейную зависимость (рис. 1).

Эти расчеты позволяют предположить, что кубическая структура типа С оксида циркония может существовать при испарении кислорода из решетки ZrO_{2-x} при высоких температурах в различных средах, а также при воздействии различных излучений на него и осадений на различные подложки [10]. Согласно этой работе, при лазерной абляции образцов диоксида циркония, авторы наблюдали образование кристаллических структур с кубическим упорядочением, что подтверждается приведенной электроннограммой, на которой присутствует линия между 10° - 11° по θ , а линия на 15° по θ sdвоенная (авторы эти линии не анализировали), наличие этих линий указывает на упорядоченную кубическую структуру типа С в смеси с кубической типа F оксида циркония.

Согласно данным [11] совместно с твердыми растворами на основе полиморфных модификаций диоксида празеодима сосуществуют соединения с кубическими фазами: соединение состава $\text{PrO}_{1,778}$ имеет структуру типа F, соединения состава $\text{PrO}_{1,714}$ – $\text{PrO}_{1,5}$ содержат структуру типа С.

Аналогичные превращения ($F \rightarrow F1 \rightarrow C$) наблюдаются для диоксида церия с малыми добавками примеси других оксидов (рис. 2). Наличие анионных вакансий в структуре диоксида церия, образованных при растворении добавки, а также отклонение от стехиометрии при высоких температурах (CeO_{2-x}), приводят к распаду твердого раствора на его основе и выделением кубической фазы типа С в виде игл по границам зерен, где наиболее напряжений, связанных с наличием дефектов структуры. На рентгенограммах присутствовали линии кубических фаз типа F и типа С.

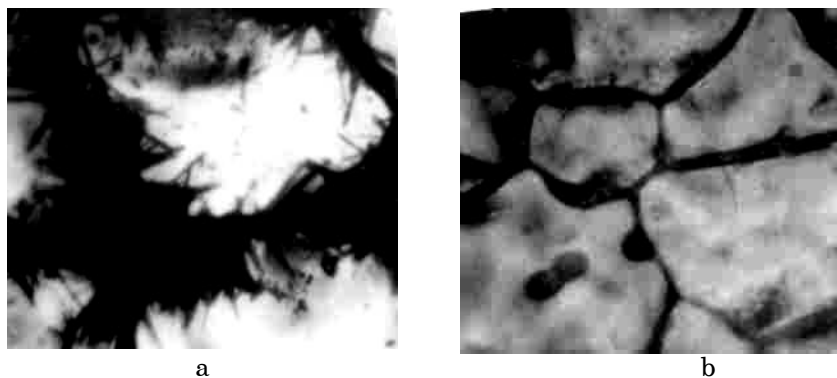


Рис. 2 – а – Образцы состава 99 % CeO_2 + 1 мол. % SrO , спекались при 1900°C (3 ч.) в среде воздуха и содержали однофазный твердый раствор кубической структуры типа флюорита – F^1 , б – Эти образцы после нагрева при 1500°C (0,3 ч. выдержки) в среде воздуха, структура типа флюорита распадается и по границам, где дефектов значительно больше, выделяется кубическая фаза типа С состава Ce_2O_3

По данным работы [12] известно, что в системах $M_2O_3-HfO_2(ZrO_2)$ существует кубическая фаза типа С состава $M_2O_3 \cdot 2HfO_2$, $M_2O_3 \cdot 2ZrO_2$ (М – редкоземельный элемент). Некоторые авторы утверждают, что эти соединения имеют состав $M_2 Hf_2O_7$, другие считают, что это упорядоченные структуры на основе кубических фаз типа флюорита.

Приведенные результаты указывают на возможность существования в природе структурных аналогов состава Zr_2O_3 , Hf_2O_3 . Однако, соединения Zr_2O_3 , Hf_2O_3 в кубической структуре типа С в литературе не обнаружены.

Найденные значения радиусов: катионов, индия и циркония, кислорода, анионных вакансий, позволяют построить модель образования твердых растворов в системе $In_2O_3-ZrO_2$, при условии наличия кубических фаз, данных оксидов и известных фазовых превращений в них, в заданном интервале температур.

2.2 Математические модели образования твердых растворов в системе $In_2O_3-ZrO_2$ в интервале температур 1450-1600 °С в среде воздуха

Для исследования взаимодействия в системе $In_2O_3-ZrO_2$, образцы готовили из порошков In_2O_3 марки ос.ч., ZrO_2 – марки (ос. ч). Добавки вводили в оксид индия в количестве (0,5-50) мол. % ZrO_2 . Образцы спекали в интервале температур 1450-1600 °С в среде воздуха, с последующей закалкой на воздухе. Все параметры образцов, данной системы, определяли по аналогии работы [8].

Полученные значения ионных радиусов катионов индия и циркония, позволили предположить, что в данной системе, возможно образование ограниченных твердых растворов типа: замещения – вычитания, замещения – внедрения – вычитания.

Механизм образования твердых растворов в данной системе должен осуществляться по следующей схеме: диоксид циркония стабилизируется до кубической структуры типа F, а возможно и до кубической структуры типа С, затем растворяется в нестехиометрической фазе типа C^1 оксида индия.

Полученные значения параметров решеток твердых растворов образцов при спекании приведены на (рис. 3). На данной зависимости наблюдаются изломы при концентрациях добавки циркония (0,5-10 mole. % ZrO_2), (10 – 25 mole. % ZrO_2).

Экстраполяция прямолинейной зависимости параметра решетки твердого раствора к нулевой концентрации добавки диоксида циркония указывает на степень восстановления чистого оксида индия и твердых растворов с малыми добавками диоксида циркония при различных температурах. Твердые растворы в данной системе образуются на основе неупорядоченной фазы типа C^1 оксида индия.

После спекания образцов при 1600 °С на воздухе, аналогичные изломы наблюдаются и на зависимости удельного электрического сопротивления в данном интервале концентраций диоксида циркония (рис.4).

Аналогичные изменения в образцах наблюдали и на зависимости концентрации носителей заряда и их подвижности от состава твердого раствора (таблица 1).

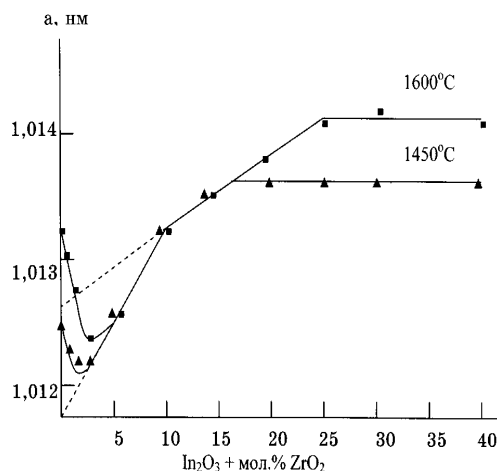
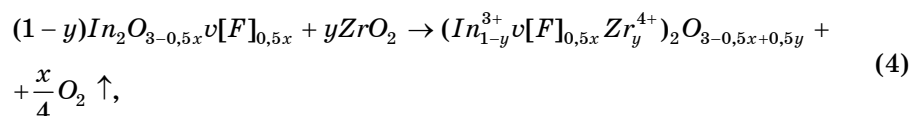


Рис. 3 – Зависимость параметров решёток твердых растворов на основе оксида индия от концентрации добавки диоксида циркония после спекания образцов

В системе $\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$ образуется твердый раствор типа вычитания – замещения на основе нестехиометрической фазы типа C^1 оксида индия с (0,5- 10 мол. %) добавками ZrO_2 . Математическая модель образования твердого раствора определяется по формуле (4)



где y – добавка ZrO_2 , x – отклонение от стехиометрии.

Изменение свободной энергии образования твердого раствора типа вычитания – замещения на основе нестехиометрического типа C^1 оксида индия с (0,5-10 мол. %) добавками ZrO_2 . определяется по формуле (5)

$$\Delta\Phi(x, y) = \left[\frac{1}{2}\phi_{v(\text{O})} - \frac{1}{2}\phi_{v(\text{F})} + A - \frac{F}{4} \right] (x) + \phi_{\text{зам}}(y) - T\Delta S(x, y), \quad (5)$$

где $\phi_{v(\text{O})}$ – свободная энергия образования анионных вакансий, $\phi_{v(\text{F})}$ – свободная энергия образования центров окраски, A – энергия сродства аниона к электрону, F – энергия перехода кислорода в газовую среду, $\phi_{\text{зам}}(y)$ – свободная энергия замещения катионов $\text{In}^{\text{3+}}$ на $\text{Zr}^{\text{4+}}$, $\Delta S(x, y)$ – изменение энтропии образования твердого раствора.

В образцах состава $\text{In}_2\text{O}_3 + (0 - 3)$ мол. % ZrO_2 существует однофазная область твердого раствора типа вычитания – замещения, в которой происходит уменьшение: параметра решетки, электрического сопротивления, увеличение концентрации зарядов и их подвижности.

В однофазной области твердого раствора образцов состава $\text{In}_2\text{O}_3 + (3 - 10)$ мол. % ZrO_2 происходит увеличение: параметра решетки, удельного электрического сопротивления, уменьшение концентрации и подвижности зарядов. Изменения свойств образцов, содержащий твердый

раствор типа вычитания – замещения можно объяснить тем, что увеличение концентрации диоксида циркония в растворе, приводит к уменьшению концентрации дефектов по содержанию кислорода и стабилизации раствора.

Таблица 1 – Экспериментальные значения концентрации носителей заряда и их подвижности в образцах, содержащие добавки ZrO_2 , после спекания при $1600\text{ }^\circ\text{C}$

mole. % ZrO_2 в растворе	$n, 10^{19}\text{ см}^{-3}$	$\mu, \text{см}^2/Vc$
0,5	10,6	53
1,0	11	58
1,5	13	65
3,0	14	80
5,0	12	59
10	10	19
15	9,5	15
20	9,3	13
25	9,2	10
30	8,1	9
40	5,7	6

Вероятно, что энергия изменения структуры, связанная с образованием в ней дефектов, определяется уравнением Больцмана при различных состояниях системы [13]. Для двух состояний твердого тела при температурах T_1, T_2 относительная вероятность нахождения энергии состояний твердого тела может рассчитываться формулой (6).

$$\phi = \frac{T_1 T_2}{T_2 - T_1} k \ln \frac{V_1}{V_2}, \quad (6)$$

где V_1, V_2 – объемы элементарных ячеек твердого раствора типа вычитания – замещения, определенные при различных температурах.

Энергия образования этого раствора, определенная по формуле (6), составляет $\phi = 1,26\text{ eV}$.

В образцах состава $In_2O_3 + (10-25)\text{ мол. \% } ZrO_2$ при спекании в указанных температурах, происходит дальнейшее увеличение: параметра решетки, удельного электрического сопротивления, уменьшение концентрации и подвижности носителей заряда. В данных составах на зависимостях параметра решетки и удельного электрического сопротивления меняются наклон однофазного твердого раствора. Такое изменение свойств раствора указывает на образование другого твердого раствора типа вычитания – замещения – внедрения.

Избыточные катионы циркония, по величине радиуса катионов, могут внедряться в неструктурные позиции и образовывать дефекты типа Френкеля. Эти дефекты являются дополнительными источниками уменьшения количества и подвижности свободных зарядов.

Твердый раствор типа вычитания – замещения – внедрения можно представить математической моделью (7)

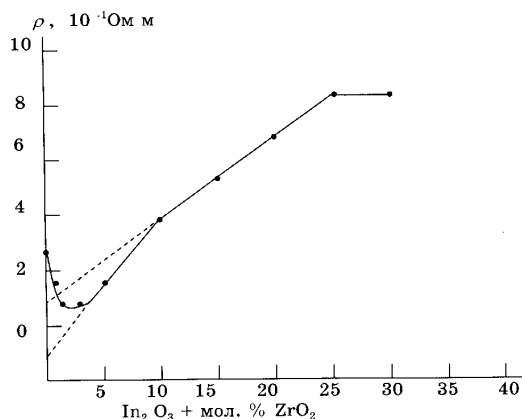
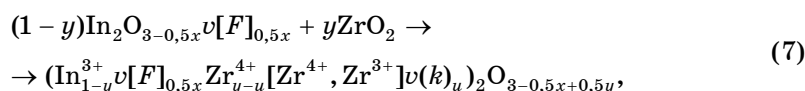


Рис. 4 – Зависимость удельного электрического сопротивления образцов от концентрации добавки диоксида циркония, после спекания их при 1600 °С



где u – концентрация катионов Zr^{4+} , Zr^{3+} – внедренных в неструктурные позиции, $\nu(k)$ – дефекты типа Френкеля.

Зависимость u от температуры T и состава (y) твердого раствора определяется минимумом свободной энергии по формуле (8)

$$\Delta\Phi(x, y, u) = \left[\frac{1}{2}\phi_{\nu(O)} - \frac{1}{2}\phi_{\nu(F)} + A - \frac{F}{4} \right](x) + \phi_{\text{зам}}(y - u) +$$

$$+ \phi_{\text{внед.}}(u) - T\Delta S(x, y, u),$$
(8)

где $\phi_{\text{зам.}}(y - u)$ – свободная энергия замещения катионов In^{3+} на Zr^{4+} , Zr^{3+} , $\phi_{\text{внед.}}(u)$ – свободная энергия внедрения катионов Zr^{4+} , Zr^{3+} в неструктурные позиции решетки оксида индия, $\Delta S(x, y, u)$ – изменение энтропии твердого раствора.

Энергия образования этого типа твердого раствора на основе оксида индия с добавками диоксида циркония, равна $\phi = 0,94$ eV. Уменьшение энергии образования этого твердого раствора компенсируется выигрышем энергии за счет образования твердого раствора типа вычитания – замещения. Энергия внедрения катионов циркония в неструктурные положения (дефекты типа Френкеля) составляет $\phi = 0,32$ eV.

Энергетические параметры электропроводности образцов, содержащих твердый раствор типа вычитания – замещения имеют $\phi = 0,33$ eV, а образцы, содержащие твердый раствор вычитания – замещения – внедрения – $\phi = 0,76$ eV. Внедренные катионы циркония значительно увеличивают энергию проводимости зарядов, это увеличение энергии связано с ростом количества рассеяния свободных зарядов. В образцах, содержащих добавки диоксида циркония больше, чем 25 mole. % ZrO_2 , на рентгенограммах присутствовали линии, характерные для двух твердых

растворов на основе фазы типа C^1 окиси индия и кубическую типа C диоксида гафния (рис.5). Рентгенограмма состоит из 2 участков: из углов 20° - 38° и 42° - 62° по 2θ .

Параметр элементарной ячейки твердого раствора типа C : на основе диоксида циркония составляет $a = 1,0226$ нм, а на основе оксида индия $a = 1,0141$ нм. Эти величины параметров решеток указывают, что существует область смесимости двух твердых растворов на основе оксида индия и диоксида циркония с решеткой типа C .

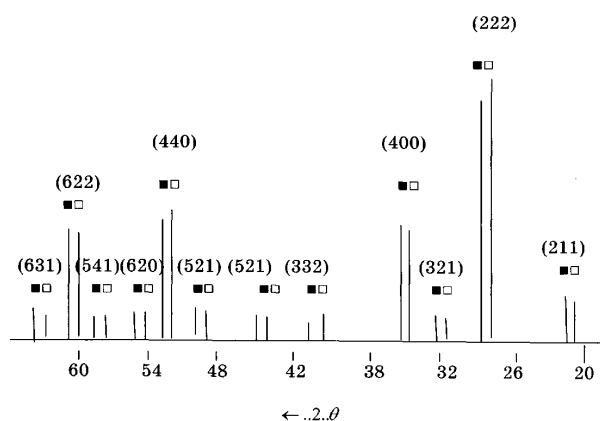


Рис. 5 – Штрих рентгенограммы образцов состава 60 мол. % In_2O_3 + 40 мол. % ZrO_2 , полученные после спекания при $1600^\circ C$ на воздухе: □ – твердый раствор на основе диоксида циркония типа C , ■ – твердый раствор на основе оксида индия типа C

Относительные потери массы образцов данной системы изменяются от 4 % для твердого раствора состава 90 % мол. In_2O_3 + 3 мол. % ZrO_2 (образцы имеют однофазный твердый раствор типа вычитания - замещения с высокой электропроводностью, большой подвижностью носителей заряда) до 1% для образцов состава 80 мол. % In_2O_3 + 20 мол. % ZrO_2 (образцы содержали однофазный твердый раствор типа вычитания - замещения - внедрения, с низкой электропроводностью, с малой подвижностью носителей заряда) и снижается до 0,4 % для образцов состава 60 мол. % In_2O_3 + 40 мол. % ZrO_2 (образцы этого состава содержат смесь двух кубических фаз типа C).

Полученные результаты позволяют утверждать, что механизм образования структуры типа C оксида циркония, можно объяснить тем фактом, что удаление кислорода из решетки диоксида циркония, который растворяется в решетке оксида индия и приводит к стабилизации кубической типа C оксида индия по содержанию кислорода в решетке и появлению нестехиометрической фазы типа C диоксида циркония (ZrO_{2-x}) с растворенными катионами индия.

В данной системе определенные концентрации дефектов контролируют образование разных типов твердых растворов, что приводит к изменению структурных, физических свойств образцов на основе оксида индия с добавками диоксида циркония.

3. ВЫВОДЫ

Образование твердых растворов в системе $\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$ происходят по сложному механизму растворения катионов циркония в решетке оксида индия.

По шкале ионных радиусов Темплтона и Добена построена математическая модель определения радиусов катионов In^{3+} , Zr^{4+} , радиуса кислорода, анионной вакансии и просчитана возможность существования оксида циркония состава Zr_2O_3 с решеткой типа С при отклонении его от стехиометрии. Существование соединения состава Zr_2O_3 подтверждаются приведенными литературными и экспериментальными сведениями структурных аналогов.

По рассчитанным математическим моделям образования твердого раствора на основе оксида индия с добавками диоксида циркония, а также по экспериментальным данным, определены энергии образования твердых растворов, энергии электропроводности растворов типа: вычитания – замещения, вычитания – замещения – внедрения.

На основе полученных данных, можно утверждать, что проводимость образцов данной системы, не зависит от валентности растворенных катионов циркония в решетке оксида индия, а зависит от типа твердого раствора.

THE MODELLING OF THE SOLIDS SOLUTION FORMATION MECHANISM IN SYSTEMS $\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$ AT HEATING IN AIR

A.E. Soloviova

Sumy State University,
2, Rimsky-Korsakov Str., 40007 Sumy, Ukraine

The mathematical model for the simulation of the formation and dissociation processes of solid solutions in $\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$ system are proposed. It permit us to calculate the ionic radii of cations: indium, zirconium, anion and anion vacancy. Solid solutions in the system formed by the disordered phase of indium oxide type C1. It was revealed that at temperatures 1450, 1600° C in air d of the system formed limited solid solutions such as: subtraction – substitution, subtraction – replacement – introduction. It was established, the size of the cations of indium, zirconium, and the number of defects determines the type of solid solution in the system $\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$. The energies of the formation of solid solutions, energy of the electrical conductivity in this system were calculated. Using the sale conductivities data it was revealed that the conduction current density and charge carrier mobility depends on the type of solid solution, rather than on the valence of the cations of zirconium.

Keywords: OXIDE INDIUM, DIOXIDE ZIRCONIUM, TYPE SOLED SOLUTION, PHASE TRANS FORMATION.

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ УТВОРЕННЯ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ У СИСТЕМІ $\text{In}_2\text{O}_3\text{-HfO}_2$ ПРИ НАГРІВІ У СЕРЕДОВИЩІ ПОВІТРЯ

O.O. Соловійова

Сумський державний університет,
Вул. Римського – Корсакова, 2, 40007 Суми, Україна

Запропоновані математичні моделі, утворення твердих розчинів у системі $\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$ дозволили розрахувати іонні радіуси катіонів: індію, цирконію, аніона і аніонної вакансії. Тверді розчини в даній системі утворюються на основі неупорядкованою фази типу C1 оксиду індію. Виявлено, що в інтервалі температур 1450, 1600 °С в середовищі повітря в даній системі утворюються обмежені тверді розчини типу: вирахування - заміщення, вирахування - заміщення - впровадження. Розмір катіонів індію, цирконію, кількість дефектів визначають тип твердого розчину в системі $\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$. Розраховані енергії: утворення твердих розчинів, електропровідності в цій системі. За даними електропровідності зразків виявлено, що провідність струму, концентрація і рухливість носіїв заряду залежить від типу твердого розчину, а не від валентності катіонів цирконію.

Ключові слова: ОКСИД ІНДІЮ, ДИОКСИД ЦИРКОНІЮ, ТИП ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ, ФАЗОВІ ПЕРЕТВОРЕННЯ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. В.Я. Шевченко, С.М. Баринов, *Техническая керамика* (Москва, Наука: 1993).
2. В.Г. Заводинский, *ФТТ* **46**, 441 (2004). (V.G. Zavodinsky, *Phys. Solid State* **46**, 653 (2004)).
3. В.А. Гриценко, К.А. Насыров, Д.В. Гриценко и др., *ФТП* **39**, 748 (2005) (V.A. Gritsenko, K.A. Nasyrov, D.V. Gritsenko, *Semiconductors* **39**, 716 (2005)).
4. Г.Я. Акимов, Г.А. Маринин, Каменева В.Ю. *ФТТ* **48**, 1590 (2006) (G.Ya. Akimov, G.A. Marinin, V.Yu. Kameneva, *Phys. Solid State* **46**, 254 (2006)).
5. А.Е. Соловьева, ДАН Украины № 1, 62 (2004).
6. А.Е. Соловьева, *СНАУ*, №13, 18 (2005).
7. М.Д. Глинчук, П.И. Быков, Б. Хилчер, *ФТТ* **48**, 2079 (2006) (M.D. Glinchuk, P.I. Vukov, B. Hilczer, *Phys. Solid State* **48**, 2199 (2006)).
8. А.Е. Соловьева, *Ж. Нано-Электрон. Физ.* **2** №3, 103 (2010).
9. Г.В. Самсонов, *Физико-химические свойства окислов* (Москва, Металлургия: 1978).
10. Н.А. Кузменко, А.П. Кузменко, М.В. Петерсон, *Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы* **5**, 1 (2008).
11. D.A. Burnham, L.R. Eyring *J. Phys. Chem.* **72**, №13, 4415 (1968).
12. В.Б. Глушкова, М.В. Кравчинская, А.К. Кузнецов, П.А. Тихонов, *Диоксид гафния и его соединения с оксидами редкоземельных элементов* (Ленинград, Наука: 1984).
13. Ч. Уэрт, Р. Томсон, *Физика твердого тела* (Москва, Мир: 1969).