

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА SR-ДОПИРОВАННОГО LaScO_3 ПРИ ИНКОРПОРИРОВАНИИ H_2 И H_2O

Власов М.И.,^{а,б} Зайнуллина В.М.,^{в,г} Коротин М.А.,^в Фарленков А.С.,^{а,б} Ананьев М.В.^{а,б}

^аИнститут высокотемпературной электрохимии, УрО РАН,

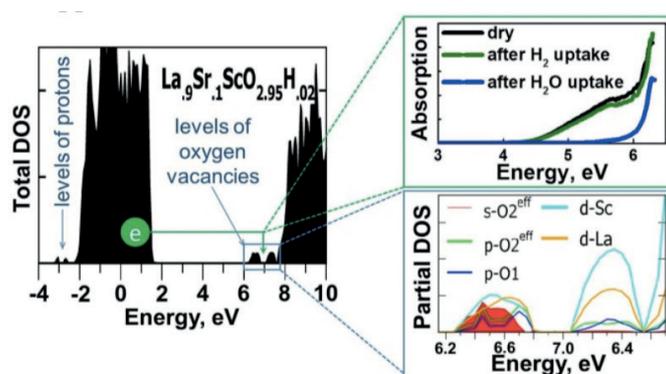
620990, Екатеринбург, ул. Академическая 20, e-mail: maxim.vlsv@yandex.ru

^бУральский федеральный университет, 620002, Екатеринбург, ул. Мира 19

^вИнститут физики металлов им. М.Н.Михеева, УрО РАН, 620108, Екатеринбург, ул. С.Ковалевской 18

^гИнститут химии твердого тела, УрО РАН, 620990, Екатеринбург, ул. Первомайская 91

Sr-допированный LaScO_3 является одним из перспективных материалов для применения в качестве электролита в различных высокотемпературных электрохимических устройствах, основанных на явлении протонной проводимости.¹⁻² В увлажненных атмосферах (пары воды) он способен эффективно поглощать протоны, и его электрохимические свойства в соответствующих условиях достаточно хорошо изучены.³ Недавно с помощью метода изотопного обмена нами было показано, что он также способен поглощать протоны из атмосферы сухого водорода (H_2), хотя эффективность такого процесса практически на порядок ниже.⁴ Чтобы лучше понимать механизмы инкорпорирования протонов из H_2 и H_2O атмосфер в данный оксид и в оксиды со структурой перовскита в целом, мы исследовали для Sr-допированного LaScO_3 соответствующие изменения электронной структуры вблизи запрещенной зоны. Для этого были применены метод когерентного потенциала для расчета электронной структуры и метод спектроскопии диффузного отражения.



Литература

1. Stroeva A. Yu.; Gorelov V. P. Russian Journal of Electrochemistry, 2012, 48 (11), 1079.
2. Liu J.; Chiba Y.; Kawamura J.; et al. Solid State Ionics, 2006, 177, 2329.
3. Farlenkov A. S.; Putilov L. P.; Ananyev M. V.; et.at. Solid State Ionics, 2017, 306, 126.
4. Ananyev M. V.; Farlenkov A. S.; Kurumchin E. Kh. International Journal of Hydrogen Energy, 2018, 43, 13373.

Работа выполнена при поддержке РФФ (Проект № 16-13-00053) и Минобрнауки России (соглашения № АААА-А18-118020190098-5, № АААА-А18-118111290051-4).