

**ОСОБЕННОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ
И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА УПОРЯДОЧЕННЫХ ОКСИДОВ
ИЗ ОБЛАСТИ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $\text{Sr}_{4-x}\text{Y}_x\text{Co}_4\text{O}_{12-\delta}$ ($x = 0-0.5$)**

Шадрина М.А.^(1,2), Сунцов А.Ю.^(1,2), Кожевников В.Л.⁽²⁾

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

⁽²⁾ Институт химии твердого тела УрО РАН
620990, г. Екатеринбург, ул. Первомайская, д. 91

Соединения на основе $\text{SrCoO}_{3-\delta}$ вызывают большой интерес благодаря уникальному сочетанию характеристик, таких как широкая область кислородной нестехиометрии, высокий уровень проводимости и электрокаталитическая активность. Эти свойства открывают перспективы для применения данных оксидов в качестве катодов ТОТЭ, в каталитических реакциях и в электронике. Эффективным методом модификации свойств данных оксидов является частичное замещение катионов в одной из подрешеток, что может улучшать кристаллическую структуру и, как следствие, функциональные характеристики. В связи с этим, цель данной работы заключается в детальном исследовании кристаллической структуры $\text{Sr}_{4-x}\text{Y}_x\text{Co}_4\text{O}_{12-\delta}$ ($x = 0-0.5$), а также в анализе кислородной нестехиометрии и физико-химических свойств.

Для определения фазового состава и проведения структурных исследований, съемку образцов проводили на дифрактометре Shimadzu XRD – 7000 (CuK_α -излучение, $2\theta = 20^\circ - 90^\circ$, шаг 0.03°). Идентификацию фаз проводили с использованием картотеки JCPDS и программы “freak”. Параметры элементарных ячеек уточнены методом бесструктурного анализа Ле-Бейла в «FullProf». Рентгенограммы оксидов с $x=0.0$ и 0.1 были проиндексированы в гексагональной ячейке (пр. гр. $R32$), тогда как образцы с $x \geq 0.2$ принимают кубическую структуру с пространственной группой $Pm3m$.

Для изучения кислородной нестехиометрии использовали метод термогравиметрического анализа. Измерения проводили на воздухе и в потоке H_2 при скорости нагрева и охлаждения $5^\circ\text{C}\cdot\text{мин}^{-1}$ с выдержкой в течение 2 часов при 1223 К. Заметные потери массы образца фиксируются уже при 600К, что связано с началом выхода кислорода из структуры.

Температурные зависимости электропроводности были получены 4-х контактным методом при температурах 273–1223 К на воздухе. Зависимости электропроводности показывают экстремальный характер с максимумом в диапазоне 873–923 К. Образец с $x=0.1$ демонстрирует резкое увеличение проводимости при 1000 К, в отличие от более концентрированных образцов. На основе температурных зависимостей были рассчитаны энергии активации проводимости. Для всех образцов коэффициент Зеебека имеет положительные значения, что указывает на доминирование электронных дырок как носителей заряда.

Работа выполнена в рамках реализации темы ФНИ № 124020600008-5 для ИХТТ УрО РАН.