

**КИСЛОРОДНАЯ НЕСТЕХИОМЕТРИЯ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЛОЖНОГО ОКСИДА  $\text{BaCo}_{0.4}\text{Fe}_{0.4}\text{Y}_{0.1}\text{Zr}_{0.1}\text{O}_{3-\delta}$** 

*Шадрина М.А.<sup>(1)</sup>, Гробовой И.С.<sup>(1)</sup>, Андреев Д.Д.<sup>(1)</sup>,  
Резницких О.Г.<sup>(1)</sup>, Наумов С.П.<sup>(2)</sup>, Сунцов А.Ю.<sup>(1)</sup>*

<sup>(1)</sup> Институт химии твердого тела УрО РАН

620990, г. Екатеринбург, ул. Первомайская, д. 91

<sup>(2)</sup> Институт физики металлов УрО РАН

620137, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, д. 18

Сложный оксид  $\text{BaCo}_{0.4}\text{Fe}_{0.4}\text{Y}_{0.1}\text{Zr}_{0.1}\text{O}_{3-\delta}$  со смешанной электропроводностью, включающей электронный, кислород-ионный и протонный транспорт, рассматривается как перспективный электродный материал как для протонпроводящих, так и для классических твердооксидных топливных элементов. Несмотря на высокий потенциал практического применения и широкий масштаб экспериментальных и теоретических исследований в литературе отсутствует информация о термодинамике образования электронных и ионных дефектов при повышенных температурах, а также их влиянии на особенности протонирования оксида при параметрах внешней среды, сопоставимых с условиями эксплуатации электрохимических устройств. В связи с этим, цель данной работы заключается в детальном исследовании кристаллической структуры, а также в термодинамике дефектообразования в  $\text{BaCo}_{0.4}\text{Fe}_{0.4}\text{Y}_{0.1}\text{Zr}_{0.1}\text{O}_{3-\delta}$ .

Сложный оксид указанного состава был синтезирован путем сжигания цитрат-нитратных прекурсоров. Термообработку образцов проводили в условиях выдержки при 1100°C в течение 15 ч в воздушной атмосфере, с последующим медленным охлаждением до комнатной температуры. Фазовый состав и параметры структуры определяли с помощью дифрактометра Shimadzu XRD – 7000. Экспериментальная дифрактограмма была описана в модели кубической структуры (пр. гр. *Pm3m*). Для изучения кислородной нестехиометрии использовали методы термогравиметрического анализа и кулонометрического титрования. Способность оксида к гидратации исследовали путем отжига во влажном воздухе и атмосфере водяного пара. Отожжённые образцы демонстрировали локальные изменения в состоянии ионов железа методом Мёссбауэровской спектроскопии. Общую электропроводность и коэффициент Зеебека измеряли 4-х контактным методом на воздухе в интервале температур 298–1223 К. Показано, что отжиг оксида во влажной среде вызывает значительные изменения в состоянии ионов железа, приводя к изменению параметров элементарной ячейки, определяет особенности дефектной структуры и характер электропроводности.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках гранта 25-19-00917.*