

ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ ПЕРОВСКИТОПОДОБНЫХ ФЕРРИТОВ, СОДЕРЖАЩИХ ПРИМЕСЬ $\text{SrFe}_{12}\text{O}_{19}$

Никитин С.С.^{1,2}, Меркулов О.В.², Патракеев М.В.²

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Институт химии твердого тела УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: nikitins1997@gmail.com

DEFECT CHEMISTRY STUDY IN PEROVSKITE FERRITES CONTAMINATED WITH $\text{SrFe}_{12}\text{O}_{19}$

Nikitin S.S.^{1,2}, Merkulov O.V.², Patrakeev M.V.²

¹⁾ Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

²⁾ Institute of Solid State Chemistry, RAS, Ekaterinburg, Russia

A strong negative effect of $\text{SrFe}_{12}\text{O}_{19}$ impurity presence in perovskite-type ferrites on the results of the coulometric titration has been revealed. A method has been developed to determine the amount of impurity and recover the oxygen content data in perovskite ferrites contaminated with $\text{SrFe}_{12}\text{O}_{19}$.

Перовскитоподобные оксиды, обладающие кислород-ионной и электронной проводимостью, находят широкое применение в качестве электродов топливных элементов и датчиков, кислородных мембран, катализаторов окисления [1-2].

Термодинамический анализ равновесия дефектов в оксидах, проводимый на основе данных о содержании кислорода в широком диапазоне парциального давления кислорода и температуры, дает ценную информацию об энтальпии и энтропии реакций образования дефектов, что позволяет рассчитать концентрации носителей заряда [3]. Однако в некоторых случаях измерение содержания кислорода в ферритах со структурой перовскита, особенно сильно допированных, приводит к получению искаженных изотерм, которые не могут быть использованы для модельных расчетов. Недавнее исследование показало, что искажение изотерм содержания кислорода часто можно объяснить присутствием в исследуемом феррите небольшого количества примеси гексаферрита $\text{SrFe}_{12}\text{O}_{19}$, имеющего характерную форму изотерм [4]. В таком случае наличие подробных данных о содержании кислорода в примесном оксиде позволит количественно оценить и удалить его вклад в экспериментальные результаты, восстановив тем самым данные исследуемого феррита.

Оксиды $\text{Nd}_x\text{Sr}_{1-x}\text{Fe}_{0.8}\text{Mo}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$ ($x = 0, 0.1$ и 0.2) были синтезированы глицин-нитратным методом. Результаты рентгеновской дифракции показали получение однофазных материалов. Содержание кислорода в оксидах исследовано методом кулонометрического титрования в интервале парциальных давлений кислорода от 10^{-20} до 0.5 атм при 750–950 °С. Форма изотерм для составов $x = 0.1$ и 0.2 обнаружила присутствие $\text{SrFe}_{12}\text{O}_{19}$. Разработан метод восстановления данных

кислородной нестехиометрии перовскитоподобного феррита по результатам измерения оксида, содержащего примесь $\text{SrFe}_{12}\text{O}_{19}$. Метод был проверен на данных по содержанию кислорода, полученных на специально изготовленной смеси $\text{SrFe}_{0.8}\text{Mo}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$ и $\text{SrFe}_{12}\text{O}_{19}$. Метод подтвердил свою пригодность точным определением количества примесной фазы в смеси. Эффективность метода была дополнительно проверена моделированием равновесия дефектов в $\text{Nd}_x\text{Sr}_{1-x}\text{Fe}_{0.8}\text{Mo}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$ ($x = 0, 0.1$ и 0.2) с использованием восстановленных данных. Термодинамические параметры реакций дефектообразования, полученные при моделировании, хорошо согласуются с литературными данными для близких по составу оксидов, что свидетельствует о корректности восстановления данных [5].

Руководителю от УрФУ Денисовой Э.И.

1. D. A. Osinkin, A. A. Kolchugin, N. M. Bogdanovich, S. M. Beresnev, *Electrochim. Acta*. 361, 137058, (2020)
2. L. R. Tarutina, J. G. Lyagaeva, A. S. Farlenkov, A. I. Vylkov, G. K. Vdovin, A. A. Murashkina, A. K. Demin, D. A. Medvedev, *J. Solid State Electrochem.* 24, 1453–1462 (2020)
3. Ø. F. Lohne, T. N. Phung, T. Grande, H. J. M. Bouwmeester, P. Vang Hendriksen, M. Søgaaard, K. Wiik, *J. Electrochem. Soc.* 161, F176-F184 (2014)
4. I. V. Shamsutov, O. V. Merkulov, M. V. Patrakeev, *Materials Letters.* 283, 128753 (2021)
5. O. V. Merkulov, E. N. Naumovich, M. V. Patrakeev, A. A. Markov, H. J. M. Bouwmeester, I. A. Leonidov, V. L. Kozhevnikov, *Solid State Ionics.* 292, 116–121 (2016)