

Определение коэффициентов взаимной диффузии катионов РЗЭ, входящих в состав сложных оксидов  $\text{RBaCo}_2\text{O}_{6-d}$  ( $R = \text{Gd}, \text{Pr}$ ) и твердого электролита  $\text{Ce}_{0.8}\text{Sm}_{0.2}\text{O}_{1.9}$ , проводили методом диффузионных отжигов в диффузионных парах  $\text{RBaCo}_2\text{O}_{6-d}$  ( $R = \text{Gd}, \text{Pr}$ ) –  $\text{Ce}_{0.8}\text{Sm}_{0.2}\text{O}_{1.9}$ ;  $\text{RBaCo}_2\text{O}_{6-d}$  ( $R = \text{Gd}, \text{Pr}$ ) –  $\text{SmBaCo}_2\text{O}_{6-d}$ ;  $\text{Ce}_{0.8}\text{Sm}_{0.2}\text{O}_{1.9}$  –  $\text{Ce}_{0.8}\text{R}_{0.2}\text{O}_{1.9}$  ( $R = \text{Gd}, \text{Pr}$ ) в зависимости от температуры (800–1000 °С) и парциального давления кислорода ( $10^{-4}$ –1 атм). Микроструктуру и концентрационный профиль распределения элементов на поперечном срезе диффузионных пар определяли с помощью сканирующего электронного микроскопа AURIGA CrossBeam (FIB-SEM) Workstation (Carl Zeiss SMT), оснащенного приставкой для энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии. Концентрационные профили были описаны с использованием решения уравнения второго закона Фика, в результате были определены коэффициенты взаимной диффузии катионов РЗЭ.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16-33-00188.*

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ  
И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НОВЫХ  
КИСЛОРОД-АККУМУЛИРУЮЩИХ МАТЕРИАЛОВ  
НА ОСНОВЕ СЛОЖНОГО ОКСИДА  $\text{YBaCo}_4\text{O}_{7+\delta}$   
СО СТРУКТУРОЙ СВЕДЕНБОРГИТА**

*Цветкова Н.С., Цветков Д.С., Зувев А.Ю.*

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

Сложный оксид  $\text{YBaCo}_4\text{O}_{7+\delta}$  со структурой сведенборгита интересен уникальной способностью к большой кислородной сверхстехиометрии ( $\delta \approx 1.5$ ), которая реализуется в интервале низких температур (200–400 °С). Вместе с этим, применение  $\text{YBaCo}_4\text{O}_{7+\delta}$  ограничено низкотемпературным режимом, поскольку в интервале средних температур (600 – 900 °С) рассматриваемое соединение является термически нестабильным. Для понимания особенностей физико-химических свойств оксидных материалов и успешного разрешения практических задач основополагающее значение имеет знание реальной (дефектной) структуры соединения. Целью настоящей работы, таким образом, выступает определение дефектной структуры сложного оксида  $\text{YBaCo}_4\text{O}_{7+\delta}$ , стабилизированного Zn, путем моделирования зависимости его кислородной нестехиометрии от парциального давления кислорода и температуры, а также

описание зависимости коэффициента Зеебека от указанных параметров в рамках разработанной модели дефектной структуры.

Поликристаллические образцы  $\text{YBaCo}_{4-x}\text{Zn}_x\text{O}_{7+\delta}$  ( $x = 0, 1, 3$ ) получали стандартным керамическим методом из исходных веществ  $\text{Y}_2\text{O}_3$  («Ито-В»),  $\text{BaCO}_3$  («ос.ч»),  $\text{Co}_3\text{O}_4$  («ч.д.а.») и  $\text{ZnO}$  (99.9 %). Синтез проводили ступенчато в воздушной атмосфере в температурном интервале 900 – 1100 °С с промежуточными перетираниями. После каждой стадии отжига образцы закачивали на комнатную температуру. Фазовый состав образцов контролировали методом рентгенофазового анализа на дифрактометре Shimadzu XRD-7000 в  $\text{Cu K}\alpha$  – излучении.

Относительную кислородную нестехиометрию сложных оксидов  $\text{YBaCo}_{4-x}\text{Zn}_x\text{O}_{7+\delta}$  ( $x = 0, 1, 3$ ) в зависимости от парциального давления кислорода  $p_{\text{O}_2}$  определяли методом кулонометрического титрования в автоматизированной установке. Абсолютное значение содержания кислорода определяли методом окислительно-восстановительного титрования.

Общую электропроводность и термо-ЭДС  $\text{YBaCo}_{4-x}\text{Zn}_x\text{O}_{7+\delta}$  ( $x = 0, 1, 3$ ), приготовленных в виде керамических брусков, измеряли 4-х зондовым методом на постоянном токе в ячейке специальной конструкции, помещенной в высокотемпературную печь. Термо-ЭДС исследуемых оксидов измеряли на естественном температурном градиенте печи.

В результате работы для сложных оксидов  $\text{YBaCo}_{4-x}\text{Zn}_x\text{O}_{7+\delta}$  ( $x = 0, 1, 3$ ) были построены  $p_{\text{O}_2}$ -Т-х диаграммы зависимости кислородной нестехиометрии от парциального давления и температуры, и подобрана модель дефектной структуры, позволяющая адекватно описывать физико-химические свойства  $\text{YBaCo}_{4-x}\text{Zn}_x\text{O}_{7+\delta}$  ( $x = 0, 1, 3$ ) в интервале температур 800–1050 °С и парциальных давлений кислорода  $10^{-5}$ –0.21 атм.

## ХИМИЧЕСКОЕ РАСШИРЕНИЕ И ДЕФЕКТНАЯ СТРУКТУРА

### $\text{SrFeO}_3$

*Серета В.В., Цветков Д.С., Зуев А.Ю.*

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

Различные замещенные по А- и В-подрешеткам ферриты стронция привлекают повышенное внимание исследователей на протяжении последних нескольких десятилетий. Эти соединения могут применяться в качестве материалов для резистивных датчиков кислорода, фотокатализаторов, катодов твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ) и