

**КИСЛОРОД-ИОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ  
ПЕРОВСКИТОВ  $\text{LaInO}_3$  И  $\text{La}_2\text{InZnO}_{5.5}$  :  
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ**

*Егорова А.В.<sup>(1)</sup>, Морхова Е.А.<sup>(2)</sup>, Белова К.Г.<sup>(1)</sup>, Анимица И.Е.<sup>(1)</sup>*

<sup>(1)</sup> Уральский федеральный университет  
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

<sup>(2)</sup> Самарский национальный исследовательский университет  
443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, д. 34

Важной задачей современного неорганического материаловедения является модификация структуры известных соединений и, как следствие, оптимизация их физико-химических свойств. Традиционно, для модификации структуры используются методы катионного допирования. Однако, существует другой способ организации кислородного дефицита – это создание многоподрешеточных структур. В частности, введение в В-подрешетку соответствующих разнозарядных катионов в соотношении 1:1 может привести к ситуации, когда часть позиций кислорода остается не заполненной. Этот метод был подробно исследован для перовскитов состава  $\text{A}^{2+}\text{B}^{4+}\text{O}_3$ . Однако для перовскитов  $\text{A}^{3+}\text{B}^{3+}\text{O}_3$  в литературе такие методы модифицирования структуры не описаны. И в этой связи, имеется широкое поле для кристаллохимического дизайна новых многоподрешеточных структур на основе  $\text{A}^{3+}\text{B}^{3+}\text{O}_3$  и получения новых соединений с улучшенными свойствами.

В настоящей работе в качестве модельной системы выбран перовскитоподобный сложный оксид –  $\text{LaInO}_3$ . Структура индата лантана состоит из наклоненных октаэдров  $[\text{InO}_6]$  с ионами  $\text{La}^{3+}$ , расположенными между соседними октаэдрическими единицами. В качестве второго катиона В-подрешетки используется цинк.

В настоящей работе был получен по стандартной керамической технологии новый кислород-дефицитный ромбический перовскит состава  $\text{La}_2\text{InZnO}_{5.5}$ . Образец  $\text{La}_2\text{InZnO}_{5.5}$  был аттестован методами РСА, СЭМ, ДРС и атомно-эмиссионной спектроскопией. Исследование электрических свойств проводилось с помощью комбинированного теоретического подхода, состоящего из геометрическо-топологического анализа, моделирования энергии валентного центра связи и расчетов теории функционала плотности (DFT). Расчеты DFT показали, что энергия миграции кислорода для цинксодержащего перовскита на 0.2 эВ ниже, чем для  $\text{LaInO}_3$ . Электропроводность измеряли в интервале температур 400–1000 °С и при различных парциальных давлениях кислорода  $10^{-18}$ – $2 \cdot 10^{-1}$  атм. Установлено, что  $\text{La}_2\text{InZnO}_{5.5}$  является кислород-ионным проводником ( $\sigma \approx 10^{-5}$  См/см) при  $T < 550$  °С на воздухе с экспериментальной энергией активации ионов 0.79 эВ по сравнению с 0.97 эВ для  $\text{LaInO}_3$ , что согласуется с теоретическим значением.

*Е.А. Морхова благодарит грант РФФИ 20-33-90018 (выполнение кристаллохимических и квантово-химических расчетов).*