

**СИНТЕЗ И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА КИСЛОРОД-
ДЕФИЦИТНЫХ ПЕРОВСКИТОПОДОБНЫХ
ФАЗ $Ba_2MZrO_{5,5}$ (M – Er, Yb)**

Андреев Р.Д.^{1,2}, Коровин С.А.¹, Анимица И.Е.^{1,2}

¹⁾ Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ ИВТЭ УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: andreev.roman@urfu.ru

**SYNTHESIS AND TRANSPORT PROPERTIES OF THE PEROVSKITE-
LIKE OXYGEN-DEFICIENT COMPOUNDS $Ba_2MZrO_{5,5}$ (M – Er, Yb)**

Andreev R.D.^{1,2}, Korovin S.A.¹, Animitsa I.E.^{1,2}

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Institute of High Temperature Electrochemistry, Yekaterinburg, Russia

The goal of the work is to investigate physico-chemical properties of the oxygen-deficient complex oxides $Ba_2MZrO_{5,5}$ (M – Er, Yb). The compositions were obtained through the combustion route. Structure, process of hydration and transport properties were investigated.

Поиск соединений, способных проявлять высокие значения протонной проводимости, по-прежнему является важной материаловедческой задачей. Протонные проводники находят широкое применение в качестве компонентов различных электрохимических устройств: топливных элементов, газовых сенсоров, водородных насосов и т.д. [1] Возникновение протонной проводимости в сложных оксидах обусловлено процессом диссоциативного поглощения молекул воды из газовой фазы. Возможность инкорпорирования паров воды в свою очередь обуславливается наличием вакантных позиций в кислородной подрешётке сложных оксидов. Среди соединений, потенциально способных проявлять протонную проводимость, определённый интерес представляют фазы со структурным разупорядочением кислородной подрешётки; в них кислородный дефицит обусловлен отсутствием части атомов кислорода в кристаллической решётке. В частности, интересны для исследования фазы с общей формулой $A_4B_4O_{11}$. В данных фазах реализуется наиболее оптимальное соотношение между возможным количеством поглощаемой воды, то есть концентрацией протонных носителей заряда и величинами их подвижностей [2]. В свою очередь, путём гетеровалентного замещения катионов в В-подрешётке можно добиться упорядочения разноразмерных катионов в структуре сложного оксида. Это будет способствовать статистическому распределению кислородных вакансий и, как следствие, реализации более высоких значений проводимости.

Цель настоящей работы – физико-химическое исследование двойных перовскитов состава $Ba_2ErZrO_{5,5}$ и $Ba_2YbZrO_{5,5}$. Возможность проявления соединени-

ями протонной проводимости, а также потенциально высокие значения подвижностей протонов позволяют рассматривать исследуемые фазы в качестве перспективных материалов для протонообменных мембран в топливных элементах.

В настоящей работе методом сжигания нитрат-органических прекурсоров были получены соединения состава $Ba_2ErZrO_{5,5}$ и $Ba_2YbZrO_{5,5}$, также была проведена их рентгенофазовая аттестация. Установлено, что соединения имеют структуру двойного кубического перовскита и описываются пространственной группой $Fm-3m$. Параметры элементарной ячейки соединений состава $Ba_2ErZrO_{5,5}$ и $Ba_2YbZrO_{5,5}$ равны $a=8.489 \text{ \AA}$ и $a=8.467 \text{ \AA}$ соответственно. На рисунке 1 представлены рентгенограммы полученных соединений.

Методом термогравиметрического анализа впервые были исследованы процессы гидратации образцов. Было установлено, что исследуемые соединения способны к обратимому диссоциативному поглощению паров воды из газовой фазы. Методом импедансной спектроскопии впервые были исследованы транспортные свойства соединений в широком диапазоне температур при различных значениях парциальных давлений кислорода и паров воды. Было установлено, что исследуемые соединения способны проявлять протонную проводимость в атмосферах с высоким содержанием паров воды.

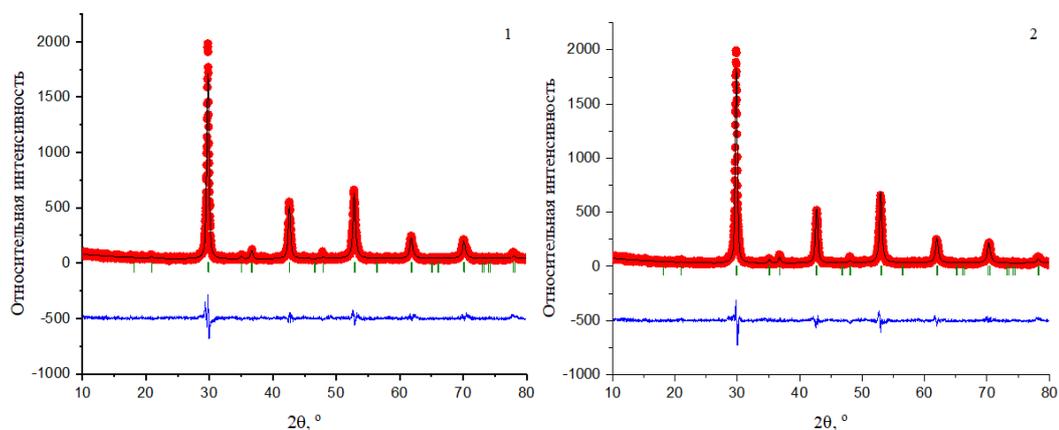


Рис. 1. Рентгенограммы образцов состава $Ba_2ErZrO_{5,5}$ (1) и $Ba_2YbZrO_{5,5}$ (2)

1. (Reijers R., Haije W.), (Energy research Centre of the Netherlands), (8), (1–58), (2008)
2. (Hagenmuller P., Pouchard M., Grenier J. C.), (J. Mater. Educ.), (12), (297–324), (1990)