

**Quantitative description of oxygen non-stoichiometry in mixed ionic and electronic conductors  
based on a non-ideal solution approach**

**Ilościowy opis niestechiometrii tlenowej w materiałach o mieszanym przewodnictwie jonowo-  
elektronowym z zastosowaniem podejścia roztworu niedoskonałego**

**Dr. Yevgeniy Naumovich**

**Streszczenie**

Monografia prezentuje zaproponowaną przez autora metodykę opisu ilościowego niestechiometrii tlenowej w złożonych tlenkach o mieszanym przewodnictwie jonowo-elektronowym - MIECs (z ang. *mixed ionic and electronic conductivity*). Materiały te są kluczowe dla wysokotemperaturowych urządzeń elektrochemicznych, w których wykorzystywane są jako warstwy elektrodowe. W stałotlenkowych ogniw paliwowych (ang. *SOFC – solid oxide fuel cell*) pełnią rolę katody, zaś w stałotlenkowych elektrolizerów (ang. *SOE – solid oxide electrolyzers*) pełnią rolę anody. Ponadto tlenki te znajdują zastosowanie jako membrany do separacji tlenu lub częściowego utleniania lekkich węglowodorów.

Kluczową cechą MIECs jest niestechiometria tlenowa. Jest ona skorelowana z temperaturą i ciśnieniem parcjnym tlenu w danych warunkach, a przedstawia się ją w postaci diagramów  $p(\text{O}_2)$ - $T$ - $\delta$ . Zmiana niestechiometrii tlenowej wpływa na decydujące o zastosowaniu właściwości - przewodnictwo elektronowe i jonowe oraz rozszerzalność materiału. Dr Yevgeniy Naumovich przedstawił metody pozwalające na ilościowe oszacowanie równowagi ciśnienia parcjnego tlenu w MIECs z określoną zawartością tlenu w określonej temperaturze, z których najważniejsza stosuje modele bazujące na opisie roztworu niedoskonałego.

Zaproponowane modele znajdują zastosowanie w wyznaczaniu równowagi stężeń defektów punktowych w roztworach stałych. W efekcie, modelowanie diagramów  $p(\text{O}_2)$ - $T$ - $\delta$  pozwala na oszacowanie i analizę właściwości transportowych MIECs, takich jak przewodność jonowa lub przepuszczalność tlenu w przypadku ograniczeń powierzchniowych. Metodyka ta została następnie wykorzystana do opracowania diagramów  $p(\text{O}_2)$ - $T$ - $\delta$  dla materiałów o strukturze perowskitu, brownmillerytu oraz Ruddlesdena-Poppera. Walidacja modeli została przeprowadzona na drodze badań eksperymentalnych i wykorzystania zestawów danych  $p(\text{O}_2)$ - $T$ - $\delta$  pozyskanych podczas analizy transportu jonowego w roztworach stałych  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_{3-\delta}$ ,  $\text{La}_2\text{NiO}_{4+\delta}$  oraz  $\text{LaGa}_{0.65}\text{Mg}_{0.15}\text{Ni}_{0.20}\text{O}_{3-\delta}$ .

Monografia jest cennym źródłem informacji szczególnie dla naukowców, którzy zajmują się projektowaniem i badaniem nowych materiałów tlenkowych o mieszanym przewodnictwie jonowo-elektronowym. Stanowi ona kompendium wiedzy o materiałach, które mogą zostać wykorzystane do budowy urządzeń elektrochemicznych, w tym ogniw SOFC i SOE oraz membran do separacji gazów.