



DESCRIPTION OF DOCTORAL DISSERTATION

The Author of the doctoral dissertation: Jagoda Ewa Budnik

Title of doctoral dissertation: Structure, defect chemistry, and charge transport in mixed ionic-electronic conducting perovskites based on $\text{Ba}(\text{Ce},\text{Zr},\text{Y})\text{O}_{3-\delta}$ and $\text{Sr}(\text{Fe},\text{Co})\text{O}_{3-\delta}$

Title of doctoral dissertation in Polish: Struktura, chemia defektów i transport ładunku w perowskitach wykazujących mieszane przewodnictwo jonowo-elektronowe opartych na $\text{Ba}(\text{Ce},\text{Zr},\text{Y})\text{O}_{3-\delta}$ i $\text{Sr}(\text{Fe},\text{Co})\text{O}_{3-\delta}$

Language of doctoral dissertation: English

Supervisor: Prof. Ph.D., D.Sc., Eng. Maria Gazda

Auxiliary supervisor: Ph.D., Eng. Tadeusz Miruszewski

Date of doctoral defense:

Keywords of doctoral dissertation in Polish: perowskity, uwodnienie, chemia defektów, dyfuzja w ciele stałym, wymiana powierzchniowa, tlenki trójprowadzące

Keywords of doctoral dissertation in English: perovskites, water uptake, defect chemistry, diffusion in solids, surface exchange, triple-conducting oxides

Summary of doctoral dissertation in Polish:

Celem niniejszej pracy było zbadanie zależności między składem chemicznym, strukturą krystaliczną a transportem ładunku w perowskitowych tlenkach wykazujących mieszane przewodnictwo jonowo-elektronowe. Analizowano dwie grupy materiałów: $\text{BaCe}_{0.6}\text{Zr}_{0.2}\text{Y}_{0.2-x}\text{M}_x\text{O}_{3-\delta}$ (BCZYM, M = Tb, Pr, Fe), wykazujące wysoką przewodność protonową i jonów tlenu; oraz $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_{3-\delta}$ (SFC) charakteryzujące się dominującą przewodnością elektronową. Synteza w fazie stałej umożliwiła uzyskanie materiałów o wysokiej symetrii, a dodatek NiO zapewnił jednofazowość i wysoką gęstość próbek. W BCZYM, podstawienie Tb zwiększyło całkowitą przewodność elektryczną oraz ruchliwość protonów i wakansów tlenowych, Pr również podwyższało ruchliwości nośników jonowych, natomiast podstawienie Fe prowadziło do obniżenia przewodności i ruchliwości nośników. W SFC kobalt stabilizował wakanse tlenowe, przy zachowywaniu wysokiej symetrii struktury materiałów, a przewodnictwo elektryczne zależało głównie od ruchliwości dziur elektronowych. Obecność pary wodnej zwiększała przewodnictwo jonowe i protonowe w BCZYM oraz modyfikowała właściwości transportowe i wymianę powierzchniową tlenu w SFC, co podkreśla istotną rolę defektów protonowych w mechanizmach transportu zachodzących w mieszanych przewodnikach jonowo-elektronowych.

Summary of doctoral dissertation in English:

The aim of this dissertation was to investigate the relationships between chemical composition, crystal structure, and charge transport in perovskite oxides exhibiting mixed ionic-electronic conductivity. Two groups of materials were studied: $\text{BaCe}_{0.6}\text{Zr}_{0.2}\text{Y}_{0.2-x}\text{M}_x\text{O}_{3-\delta}$ (BCZYM, M = Tb, Pr, Fe), exhibiting high proton and oxygen-ionic conductivity, and $\text{SrFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_{3-\delta}$ (SFC), with predominantly electronic conductivity. Solid-state synthesis enabled obtaining materials of high symmetry, while the addition of NiO sintering aid ensured phase purity and densification of samples. In BCZYM, Tb substitution enhanced total electrical conductivity and mobilities of protons and oxygen vacancies, Pr also improved mobilities of both ionic carriers, whereas the substitution of Fe decreased the conductivity and carrier mobility. In SFC, Co stabilised oxygen vacancies while preserving high structural symmetry. The electrical conductivity of SFC materials was mainly governed by electron-hole mobility. Water vapour increased oxygen-ionic and introduced proton conductivity in BCZYM. It also influenced transport of electronic and ionic charge carriers, as well as oxygen surface exchange in SFC, highlighting the significant role of proton defects in transport mechanisms in mixed ionic-electronic conductors.