

ӘОЖ 541.1

ХИМИЯЛЫҚ ҚОСПАЛАРДЫҢ ФИЗИКАЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІН САЛЫСТЫРУ, ТАЛДАУ

Әбсәлімова Г.Ш., Кожанова К.Ж., Таласқан Г.

студенттер, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті,
Алматы қ., Қазақстан

Ғылыми жетекші: Мамбаева.А.Ш , PhD докторы

Бұл мақалада химиялық құрамына модификацияланған материалдардың негізгі физикалық қасиеттері салыстырылып, олардың электрөткізгіштігі мен протонөткізгіштігі талдау әдістері арқылы зерттеледі. Жартылай өткізгіш материалдардың электрөткізгіштігіне қоспалаушы элементтердің әсері анықталып, таза күйіндегі жартылай өткізгіштердің протонөткізгіштігі салыстырмалы түрде қарастырылады. Бұл нәтиже жартылай өткізгіштік материалдардың функционалдық сипаттамаларын жақсартуда элементтік модификацияның маңыздылығын дәлелдейді. Мақалада жартылай өткізгіш құрылғылардағы қоспалаушы элементтерді енгізу үрдісінің рөлі жан-жақты талқыланып, сандық модельдеудің материалдардың өткізгіштік қасиеттерін болжаудағы маңыздылығы көрсетіледі.

Кілт сөздер: қоспа, барий цераты, жартылай өткізгіштер, гидратация, электрөткізгіштік, легирлеу.

Кіріспе. ХХІ ғасырда ғылым мен техниканың қарқынды дамуы энергия көздерін тиімді пайдалану, экологиялық қауіпсіз технологияларды енгізу және ұзақ мерзімді жұмыс істейтін материалдарды өндіру міндеттерін алдыңғы қатарға шығарды. Осы орайда, жаңа буын бейорганикалық қоспалардың физикалық қасиеттерін терең зерттеу, олардың құрылымдық тұрақтылығы мен қызметтік мүмкіндіктерін анықтау аса өзекті мәселелердің бірі болып табылады. Әсіресе, перовскит құрылымды қосылыстардың ішінде барий цераты (BaCeO_3) ерекше қызығушылық тудырады. Бұл материал жоғары температурада иондық өткізгіштік қабілетімен, химиялық тұрақтылығымен және фазалық біртұтастығымен ерекшеленеді. Мұндай қасиеттері барий цератын сутегі энергетикасы, қатты оксидті отын элементтері, сенсорлық құрылғылар және газ бөлу жүйелері сияқты жоғары технологиялық салаларда кеңінен қолдануға мүмкіндік береді.

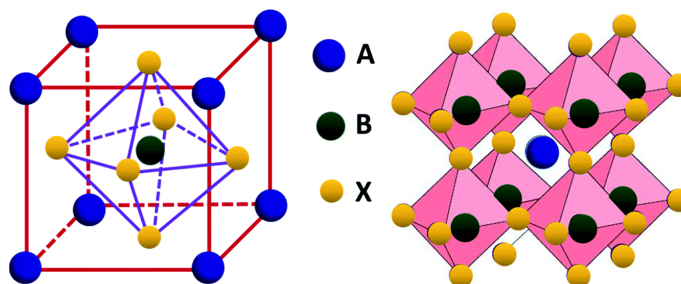
Барий цератының физикалық қасиеттерін жан-жақты зерттеу оның практикалық маңыздылығын арттырып қана қоймай, сондай-ақ жаңа модификацияланған материалдарды жасауға негіз болады. Бұл тұрғыдан алғанда, материалдың тығыздығы, қаттылығы, термиялық кеңею коэффициенті, жылуөткізгіштігі және басқа да негізгі физикалық көрсеткіштерін дәл анықтау қажеттілігі туындайды. Сонымен қатар, осы параметрлерді басқа ұқсас химиялық қоспалардың қасиеттерімен салыстыру материалдың артықшылықтары мен кемшіліктерін айқындауға мүмкіндік береді. Мұндай ғылыми талдаулар нәтижесінде барий цератының қолдану аймағын кеңейтуге, оның сенімділігін арттыруға және өндірістік процестердің тиімділігін жоғарылатуға бағытталған нақты ұсыныстар қалыптасады.

Осы мақалада барий цератының физикалық қасиеттерін жан-жақты зерттеудің нәтижелері ұсынылып, оның салыстырмалы талдауы жүргізіледі. Сонымен бірге, алынған деректер негізінде материалдың құрылымдық тұрақтылығы мен функционалдық мүмкіндіктеріне баға беріледі. Зерттеу нәтижелері жоғары температуралы құрылғылар мен баламалы энергетикалық жүйелер үшін перспективалы материалдар әзірлеу бағытында ғылыми және практикалық тұрғыдан құнды мәліметтер ұсынады деп күтіледі.

Химиялық қоспалардың физикалық қасиеттерін зерттеу барысында олардың тығыздығы, қаттылығы, жылу өткізгіштігі секілді негізгі параметрлері сандық әдістермен анықталады. Бұл көрсеткіштер материалдың құрылымдық тұрақтылығын, беріктігін және жоғары температура жағдайында жұмыс істеу қабілетін бағалауға мүмкіндік береді.

Барий цераты ($BaCeO_3$) – перовскит құрылымды оксид, оның кристалдық торы жоғары симметриялы және температураның өзгерісіне төзімді болып келеді.

$BaCeO_3$ перовскитті құрылымға ие, яғни оның кристалдық торы орторомбты, барлық қабырғалары мен бұрыштары бір-біріне тең емес ($a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \gamma \neq \beta$). Ол жоғары симметриямен және иондық өткізгіштік қабілетімен сипатталады. Бұл құрылымда барий иондары (Ba^{2+} (A)) текше тордың бұрыштарын алады, ал церий (Ce^{4+} (B)) және оттегі (O^{2-} (X/ O_3)) иондары октаэдрлік координацияларды құрайды (1-сурет). Бұл құрылым кристалдық тордағы бос орындар арқылы иондардың миграциясына мүмкіндік береді.



1-сурет. Перовскиттің кристалдық торы

Ce^{4+} иондары Gd^{3+} сияқты иондармен ауыстырылған кезде электростатикалық бейтараптылықты сақтау үшін оттегі кемтіктері пайда болады. Егер қоспаның концентрациясын x деп белгілесек, онда материалдың стехиометриясы келесідей реттеледі:

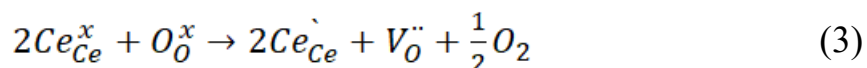


мұндағы, Re – легирленетін элемент.

Мысалы, $x = 0,2$ болғанда (1) формула келесі түрге ауысады:

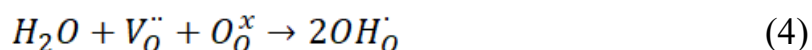


Легирлеу нәтижесінде протон өткізгіштікте негізгі рөл атқаратын $V_O^{\bullet\bullet}$ деп белгіленетін бос вакансии пайда болады:



Бұл $BaCeO_3$ кристалында оттегі ионының орналасуы мүмкін бос орындар пайда болатынын білдіреді. Бұл бос орындар материалдың құрылымына протондардың (H^+) қосылуын жеңілдетеді. Протондар өткізгіштікті қамтамасыз ететін көрші оттегі атомдары арасында секіре отырып, тор бойымен қозғалады.

Гидратация ылғалды атмосферада жүзеге асырылады және су молекулалары кристалдық торға еніп, пайда болған оттегі бос орындарын толтыратын процесс. Бұл процесті келесі реакция арқылы сипаттауға болады:



мұндағы, $V_O^{\bullet\bullet}$ - екі оң заряды бар оттегі кемтігі;

O_O^x - кристалдық торда қалыпты орнында орналасқан оттегі иондары;

$OH_O^{\bullet}$ - тордағы оттегімен байланысқан гидроксил топтары.

Осылайша, гидратация жылжымалы протон тасымалдаушылардың пайда болуына әкеледі, бұл материалдың электр өткізгіштігіне айтарлықтай әсер етеді. Кристалға енгізілген протондар тор бойымен қозғала алады, бұл олардың массасы аз және оксид матрицасымен әрекеттесуінің ерекше сипатымен түсіндіріледі.

Гидратация процесінен өткен перовскит оксидтеріндегі протонның тасымалдануы Гроттус механизмі деп аталатын механизм арқылы жүреді. Бұл механизмнің мәні келесідей: гидроксил тобымен (OH) байланысқан протон уақытша «босатылады» және көрші оттегі ионына ауысып, жаңа гидроксил тобын құрайды. Бұл процесс протонның кристалдық тор бойымен қозғалуына мүмкіндік беретін сутегі байланыстарының жергілікті қайта орналасуымен

бірге жүреді. Бұл тасымалдаудың тиімділігі активтену энергиясы деп аталатын энергетикалық кедергімен анықталады.

Активтену энергиясы (E_a) - протонды кристалдық тор арқылы қозғалысы үшін қажетті энергияның ең аз мөлшері. Протон тасымалдаушылардың өткізгіштігі Аррениус теңдеуімен сипатталады:

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right) \quad (5)$$

мұндағы, σ_0 - протон тасымалдаушылардың концентрациясы мен қозғалғыштығына байланысты коэффициент;

k - Больцман тұрақтысы;

T - Температура.

Теңдеуді логарифмдік формаға түрлендіру активтендіру энергиясын $\ln\sigma$ -ден $1/T$ -ге тәуелділік графигінің көлбеуінен анықтауға мүмкіндік береді.

$$\ln\sigma = \ln\sigma_0 - \frac{E_a}{kT} \quad (6)$$

Осы зерттеуде BaCeO₃ құрамындағы тантал (Ta) және неодим (Nd) қоспаларының кристалдық құрылымға, тығыздыққа және өткізгіштікке әсері қарастырылды.

Зерттеу барысында BaCeO₃ үлгілері 1530°C және 1650°C температурада күйдіру арқылы синтезделді. Үлгілердің құрылымы рентгендік фаза талдау (РФА) әдісімен зерттелді. Сонымен қатар, қоспалардың (Ta, Y және Nd) тор параметріне әсері зерттеліп, нәтижелер салыстырылды.

1-кесте.

Қосылатын элемент	Кристалдық құрылымға әсері	Ион өткізгіштігі (S/cm, 800°C)	Термиялық тұрақтылығы (°C дейін)	Химиялық тұрақтылығы
Неодим (Nd)	Кристалдық торда ақаулар түзеді, түйіршіктер өлшемін ұлғайтады	3.2×10^{-3}	1300	Қышқылдық ортада тұрақтылығы артады
Итрий (Y)	Түйіршіктердің өсуін тежейді, құрылымда бос вакансиялар пайда болады	4.1×10^{-3}	1400	Су булары мен CO ₂ -ға төзімділігі жоғары
Тантал (Ta)	Оксидті фаза тұрақтылығын жақсартады, түйіршіктер аралық байланысын нығайтады	2.8×10^{-3}	1450	Ылғал ортаға жоғары төзімді

Барий Цератын Неодиммен допирлеу оның протондық өткізгіштігін жақсартып отырып, түйіршіктер өлшемін үлкейтеді. Итриймен допирлеу керісінше, оттегі иондық өткізгіштігін күшейтіп, құрылымда вакансиялар түзеді. Танталмен допирлеу құрылымдық тұрақтылықты арттырып, материалдың ылғал мен жоғары температураға төзімділігін жақсартады. Зерттеу нәтижелері көрсеткендей, әрбір допирлеуші элемент Барий Цератының белгілі бір қасиеттерін жақсартады, сондықтан оны қолдану саласына байланысты таңдау қажет.

Қорытынды

Осы зерттеу жұмысы барий цератының (BaCeO_3) физикалық қасиеттерін, оның ішінде электрөткізгіштік пен протонөткізгіштігін, әртүрлі легирлеуші элементтермен модификациялау әсерін зерттеуге бағытталды. Алынған нәтижелер көрсеткендей, материалдың құрылымдық тұрақтылығы мен функционалдық сипаттамалары легирлеуші элементтерге байланысты айтарлықтай өзгереді.

Неодим (Nd) қоспасы түйіршіктер өлшемін үлкейтіп, протондық өткізгіштікті арттырса, итрий (Y) құрылымда оттегі иондарының өткізгіштігін күшейтіп, вакансиялар түзілуін қамтамасыз етті. Ал тантал (Ta) материалдың химиялық тұрақтылығын жақсартып, жоғары температура мен ылғалдылыққа төзімділігін арттырды. Бұл зерттеу нәтижелері барий цератының энергетика, сенсорлық құрылғылар және газ бөлу жүйелеріндегі қолдану аясын кеңейтуге ықпал етеді.

Зерттеу нәтижелері көрсеткендей, барий цератының құрылымдық тұрақтылығы мен иондық өткізгіштігі оны баламалы энергетикада, қатты оксидті отын элементтерінде, сенсорлық технологияларда қолдануға мүмкіндік береді. Легирлеуші элементтердің әсерін зерттеу нәтижесінде олардың материалдың өткізгіштік қасиеттеріне ықпалын анықтау мүмкін болды. Бұл материалдардың жаңа функционалдық мүмкіндіктерін ашуға және оларды жоғары технологиялық салаларда қолдануға негізделген ғылыми зерттеулер жүргізуге бағыт береді.

Жалпы, зерттеу барысында алынған мәліметтер материалтану саласындағы жаңа перспективалы шешімдер ұсынуға негіз бола алады. Алдағы уақытта жоғары өткізгіштікке ие жаңа қоспаларды қолдану арқылы барий цератының функционалдық сипаттамаларын одан әрі жетілдіру мүмкіндіктері қарастырылуы тиіс. Сонымен қатар, бұл материалдардың ұзақ мерзімді тұрақтылығын, олардың жұмыс істеу шарттарына бейімделуін зерттеу маңызды болып табылады. Легирлеу әдістерін жетілдіру және эксперименттік мәліметтерді сандық модельдеу әдістерімен толықтыру материалдардың практикалық қолдану аясын кеңейтуге мүмкіндік береді.

Пайдаланылған әдебиеттер тізімі

1. Kreuer K.D. Proton Conductivity in Perovskites: Materials and Applications. *Annual Review of Materials Research*, 2003.
2. Iwahara H. Protonic Conduction in Perovskite-Type Oxides and its Applications. *Solid State Ionics*, 1996.
3. Steele B.C.H., Heinzel A. Materials for Fuel-Cell Technologies. *Nature Materials*, 2004.
4. Shao Z., Haile S.M. A High-Performance Cathode for the Next Generation of Solid-Oxide Fuel Cells. *Nature*, 2004.
5. Phair J.W., Badwal S.P.S. Materials for Separation Membranes in Hydrogen and Oxygen Production. *Science and Technology of Advanced Materials*, 2006.
6. Sun C., Stimming U. Recent Anode Advances in Solid Oxide Fuel Cells. *Journal of Power Sources*, 2007.

СРАВНЕНИЕ И АНАЛИЗ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Әбсәлімова Г.Ш., Қожанова К.Ж., Таласқан Г.

Научный руководитель: Мамбаева А.Ш., PhD доктор

В данной статье сравниваются основные физические свойства модифицированных материалов по их химическому составу, исследуются методы анализа их электропроводности и протонной проводимости. Определяется влияние легирующих элементов на электропроводность полупроводниковых материалов, а также проводится сравнительный анализ протонной проводимости чистых полупроводников. Полученные результаты подтверждают важность элементной модификации для улучшения функциональных характеристик полупроводниковых материалов. В статье всесторонне рассматривается роль внедрения легирующих элементов в структуру полупроводниковых устройств, а также подчеркивается значение численного моделирования в прогнозировании проводящих свойств материалов.

Ключевые слова: добавка, церат бария, полупроводники, гидратация, электропроводность, легирование.

COMPARISON AND ANALYSIS OF PHYSICAL PROPERTIES OF CHEMICAL COMPOUNDS

Absalimova G.Sh., Kozhanova K.Zh., Talaskan G.

Scientific advisor: Mambaeva A.Sh., PhD

This article compares the main physical properties of modified materials based on their chemical composition and explores methods for analyzing their electrical and proton conductivity. The influence of doping elements on the electrical conductivity of semiconductor materials is identified, and a comparative analysis of proton conductivity in pure semiconductors is carried out. The obtained results confirm the significance of elemental modification in improving the functional characteristics of semiconductor materials. The article comprehensively examines the role of introducing doping elements into semiconductor devices and highlights the importance of numerical modeling in predicting the conductive properties of materials.

Keywords: dopant, barium cerate, semiconductors, hydration, electrical conductivity, doping.

REFERENCES

1. Kreuer K.D. Proton Conductivity in Perovskites: Materials and Applications. *Annual Review of Materials Research*, 2003.
2. Iwahara H. Protonic Conduction in Perovskite-Type Oxides and its Applications. *Solid State Ionics*, 1996.
3. Steele B.C.H., Heinzel A. Materials for Fuel-Cell Technologies. *Nature Materials*, 2004.
4. Shao Z., Haile S.M. A High-Performance Cathode for the Next Generation of Solid-Oxide Fuel Cells. *Nature*, 2004.
5. Phair J.W., Badwal S.P.S. Materials for Separation Membranes in Hydrogen and Oxygen Production. *Science and Technology of Advanced Materials*, 2006.
6. Sun C., Stimming U. Recent Anode Advances in Solid Oxide Fuel Cells. *Journal of Power Sources*, 2007.