

ISSN (Print) 2616-6836
ISSN (Online) 2663-1296

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің

ХАБАРШЫСЫ

BULLETIN

of L.N. Gumilyov
Eurasian National University

ВЕСТНИК

Евразийского национального
университета имени Л.Н. Гумилева

ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы

PHYSICS. ASTRONOMY Series

Серия ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ

№1(150)/ 2025

1995 жылдан бастап шығады

Founded in 1995

Издается с 1995 года

Жылына 4 рет шығады

Published 4 times a year

Выходит 4 раза в год

Астана, 2025

Astana, 2025

Бас редакторы:
Жумадилов К.Ш.,
PhD, проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан

Бас редактордың орынбасары: Абуова Ф.У., PhD, доц., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан

Редакция алқасы:

Ержанов Қ.Қ.	PhD, Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан
Кайнарбай А.Ж.	ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан
Козловский А.Л.	PhD, Ядролық физика институты, Астана, Қазақстан
Морзабаев А.К.	ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан
Салиходжа Ж.М.	ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан
Усеинов А.Б.	PhD, Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан
Джансейтов Д.М.	PhD, Ядролық физика институты, Астана, Қазақстан
Шункеев К.Ш.	ф.-м.ғ.д., Қ.Жұбанов ат. АӨУ, Ақтөбе, Қазақстан
Исадықов А.Н.	PhD, Біріккен ядролық зерттеулер институты, Дубна, Ресей
Шарафуллин И.Ф.	ф.-м.ғ.д., Башқұрт мемлекеттік университеті, Уфа, Ресей
Сакута С.Б.	ф.-м.ғ.д., Ұлттық зерттеу институты Курчатов институты, Мәскеу, Ресей
Лущик А.Ч.	ф.-м.ғ.д., Тарту университеті, Тарту, Эстония
Попов А.И.	ф.-м.ғ.д., Латвия университеті, Рига, Латвия
Хоши М.	PhD, Хиросима Университеті, Хиросима, Жапония
Тойода Ш.	PhD, Окаяма Ғылым Университеті, Окаяма, Жапония
Ертурк С.	PhD, Нийде Университеті, Нийде, Түркия
Килин Д.	PhD, Солтүстік Дакота мемлекеттік университеті, Фарго, АҚШ
Юлун Хан	PhD, Солтүстік Дакота мемлекеттік университеті, Фарго, АҚШ

Редакцияның мекенжайы: **010008, Қазақстан, Астана қ., Сәтбаев к-сі, 2**
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, 402 б.
Тел.: +7 (7172) 709-500, (ішкі 31-410).
E-mail: vest_phys@enu.kz

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің Хабаршысы ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы
Меншіктенуші: КеАҚ "Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті"
Мерзімділігі: жылына 4 рет
Қазақстан Республикасының Ақпарат және коммуникациялар министрлігімен тіркелген
02.02.2021ж. № KZ66VPY00031918 қайта есепке қою туралы куәлігі
Типографияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Астана қ., Қажымұқан к-сі 13/1
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті
Тел: +7 (7172)709-500 (ішкі 31-410). Сайт: <http://bulphysast.enu.kz>

Editor-in-Chief:

K. Zhumadilov,

PhD, Prof., L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Deputy Editor-in-Chief: F. Abuova, PhD, Ass. Prof., L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Editorial board:

K. Yerzhanov	PhD, L.N. Gumilyov ENU, Astana, Kazakhstan
A. Qainarbai	Candidate of Phys.-Math. Sciences, L.N. Gumilyov ENU, Astana, Kazakhstan
A. Kozlovskiy	PhD, Institute of Nuclear Physics», Astana, Kazakhstan
A. Morzabaev	Candidate of Phys.-Math. Sciences, L.N. Gumilyov ENU, Astana, Kazakhstan
Zh. Salikhodzha	Candidate of Phys.-Math. Sciences, L.N. Gumilyov ENU, Astana, Kazakhstan
A. Useinov	PhD, L.N. Gumilyov ENU, Astana, Kazakhstan
D. Dzhanseytov	PhD, Institute of Nuclear Physics, Astana, Kazakhstan
K. Shunkeyev	Doctor of Phys.-Math. Sciences, K. ZHubanov University, Aktobe, Kazakhstan
A. Isadykov	PhD, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia
I. Sharafullin	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Bashkir State University, Ufa, Russia
S. Sakuta	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Kurchatov Institute, Moscow, Russia
A. Lushchik	Doctor of Phys.-Math. Sciences, University of Tartu, Tartu, Estonia
A. Popov	Doctor of Phys.-Math. Sciences., University of Latvia, Riga, Latvia
M. Hoshi	PhD, Hiroshima University, Hiroshima, Japan
Sh. Toyoda	PhD, Okayama University of Science, Okayama, Japan
S. Yerturk	PhD, Niğde Ömer Halisdemir University, Niğde, Turkiye
Dmitri Kilin	PhD, North Dakota State University, Fargo, USA
Yulun Han	PhD, North Dakota State University, Fargo, USA

Editorial address: **2, Satpayev str., of. 402**

L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan, 010008

Tel.: **+7 (7172) 709-500, (ext. 31-410),**

E-mail: **vest_phys@enu.kz**

Bulletin of L.N. Gumilyov Eurasian National University. PHYSICS. ASTRONOMY Series

Owner: Non-profit joint-stock company «L.N. Gumilyov Eurasian National University»

Periodicity: 4 times a year

Registered by the Ministry of Information and Communication of the Republic of Kazakhstan

Rediscount certificate № KZ66VPY00031918 from 02.02.2021

Address of Printing Office: 13/1 Kazhimukan str., Astana, Kazakhstan 010008

L.N. Gumilyov Eurasian National University

Tel: +7 (7172) 709-500, (ext.31-410). Website: <http://bulphysast.enu.kz>

Главный редактор:
Жумадилов К.Ш.,
PhD, проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

Зам. главного редактора: Абуова Ф.У., PhD, доцент, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

Редакционная коллегия:

Ержанов К.К.	PhD, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
Кайнарбай А.Ж.	к.ф.-м.н., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
Козловский А.Л.	PhD, РГП «Институт ядерной физики», Астана, Казахстан
Морзабаев А.К.	к.ф.-м.н., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
Салиходжа Ж.М.	к.ф.-м.н., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
Усеинов А.Б.	PhD, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
Джансейтов Д.М.	PhD, РГП «Институт ядерной физики», Астана, Казахстан
Шункеев К.Ш.	д.ф.-м.н., Актюбинский региональный государственный университет имени К. Жубанова, Актобе, Казахстан
Исадыков А.Н.	PhD, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
Шарафуллин И.Ф.	д.ф.-м.н., Башкирский государственный университет, Уфа, Россия
Сакута С.Б.	д.ф.-м.н., Национальный исследовательский институт Курчатовский институт, Москва, Россия
Луцник А.Ч.	д.ф.-м.н., Тартуский университет, Тарту, Эстония
Попов А.И.	д.ф.-м.н., Латвийский университет, Рига, Латвия
Хоши М.	PhD, Университет Хиросимы, Хиросима, Япония
Тойода Ш.	PhD, Университет Науки Окаямы, Окаяма, Япония
Ертурк С.	PhD, Университет Нийде, Нийде, Турция
Килин Д.	PhD, Государственный университет Северной Дакоты, Фарго, США
Юлун Хан	PhD, Государственный университет Северной Дакоты, Фарго, США

Адрес редакции: **010008, Казахстан, г. Астана, ул. Сатпаева, 2**
Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, каб. 402
Тел.: **+7(7172) 709-500, (вн. 31-410),**
E-mail: **vest_phys@enu.kz**

Вестник Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева

Серия ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ

Собственник: НАО «Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева» Периодичность: 4 раза в год
Зарегистрирован Министерством информации и коммуникаций Республики Казахстан Свидетельство о постановке на переучет № KZ66VPY00031918 от 02.02.2021 г.

Адрес типографии: 010008, Казахстан, г. Астана, ул. Кажымукана, 13/1,

Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева

Тел.: +7(7172)709-500 (вн.31-410). Сайт: <http://bulphysast.enu.kz>

МАЗМҰНЫ/ CONTENTS/ СОДЕРЖАНИЕ

- А.А. Хаметова, Д.И. Шлимас, Ш.Г. Гиниятова, А.Л. Козловский.** Литий мета-циркона-
ты негізіндегі керамикалардың беткі қабаттарындағы ендірілген гелийдің
термиялық-индукцияланған диффузиялық механизмдерін зерттеу.....
A.A. Khametova, D.I. Shlimas, Sh.G. Giniyatova, A. L. Kozlovskiy. Study of thermally induced
diffusion mechanisms of implanted helium in the near-surface layers of ceramics based
on lithium metazirconate.....
А.А. Хаметова, Д.И. Шлимас, Ш.Г. Гиниятова, А.Л. Козловский. Изучение термически
– индуцированных диффузионных механизмов имплантированного гелия
в приповерхностных слоях керамик на основе метацирконата лития..... 8
- Абул Калам Азад, Лукман Ахмед Омейза.** Қатты оксидті отын элементтеріне арналған
 $BaTi_{0.8}Zr_{0.2}O_{3-\delta}$ катодты материалдардың құрылымы мен электр өткізгіштігіне стронций
қоспасының әсері.....
Abul Kalam Azad, Lukman Ahmed Omeiza. Effect of strontium doping on structural and
electrical conductivity of $BaTi_{0.8}Zr_{0.2}O_{3-\delta}$ cathode materials for solid oxide fuel cell.....
Абул Калам Азад, Лукман Ахмед Омейза. Влияние легирования стронцием на струк-
туру и электропроводность катодных материалов $BaTi_{0.8}Zr_{0.2}O_{3-\delta}$ для твердооксидных
топливных элементов..... 32
- Н. Испулов, А. Кадир Рахимун, А. Кисабекова, А. Жумабеков, Г. Алпысова, Л. Ельтинова.**
Анизотроптық орталардағы үш өлшемді серпімділік тензорының инварианттарын
анықтау туралы.....
N. Ispulov, A. Qadir Rahimoon, A. Kissabekova, A. Zhumabekov, G. Alpyssova, L. Yeltinova.
On determining invariants of a three-dimensional elasticity tensor in anisotropic media.....
Н. Испулов, А. Кадир Рахимун, А. Кисабекова, А. Жумабеков, Г. Алпысова, Л. Ельтинова.
Об определении инвариантов трехмерного тензора упругости в анизотропных средах 48
- Ғ. Ерғалиұлы, Қ. Нәлібай, Н. Амангелді, Д. Солдатхан, К. Калиакпаров, Б. Балабеков.**
Түйінаралық галлийдің заряд күйлерінің электронды қасиеттерге әсері β -Ga₂O₃, MNDO
талдауы.....
G. Yergaliuly, K. Nalibay, N. Amangeldi, D. Soldatkhan, K. Kaliakparov, B. Balabekov.
Effect of charge states of interstitial gallium on electronic properties β -Ga₂O₃, MNDO analysis
Ғ. Ерғалиұлы, Қ. Нәлібай, Н. Амангелді, Д. Солдатхан, К. Калиакпаров, Б. Балабеков.
Влияние зарядовых состояний межузловогогаллия на электронные свойства β -Ga₂O₃,
анализ методом MNDO..... 60

М.К. Сқақов, М.Б. Баяндинова, Е.А. Қожахметов, Б.Т. Тұяқбаев, П. Жанымхан. АЖМПЭ негізіндегі композиттік жабындардың химиялық ортаға төзімділігі.....	
М.К. Skakov, M.B. Bayandinova, E.A. Kozhakhmetov, B.T. Tuayakbaev, P. Zhanimkhan. Chemical resistance of composite coatings based on UHMWPE.....	
М.К. Сқақов, М.Б. Баяндинова, Е.А. Қожахметов, Б.Т. Тұяқбаев, П. Жанымхан. Химическая стойкость композитных покрытий на основе СВМПЭ.....	75
К.Ж. Бекмырза, К.А. Кутербеков, А.М. Кабышев, М.М. Кубенова, А.А. Баратова, Н.К. Айдарбеков. Жоғарғы қысым жағдайында материалдардың сорбциялық қасиеттерін жоғары температурада талдау әдістемесі.....	
K.Zh. Bekmyrza, K.A. Kuterbekov, A.M. Kabyshev, M.M. Kubenova, A.A. Baratova, N.K. Aidarbekov. Methodology for high-temperature analysis of sorption properties of materials under high-pressure conditions.....	
К.Ж. Бекмырза, К.А. Кутербеков, А.М. Кабышев, М.М. Кубенова, А.А. Баратова, Н.К. Айдарбеков. Методика высокотемпературного анализа сорбционных свойств материалов в условиях высокого давления.....	93
Д. Бериков, С. Нуруев, Г. Ахмадов, К. Мендибаев, Б. Мухаметулы, К. Ковальчук, Т. Жолдыбаев, Ю. Копач, К. Назаров, Д. Алимов, Б. Садыков, А. Темиржанов. ВВР-К реакторының № 1 көлденең арнасында үштік ядролық бөлінуді зерттеу перспективалары.....	
D. Berikov, S. Nuruyev, G. Ahmadov, K. Mendibayev, B. Mukhametuly, K. Kovalchuk, T. Zholdybayev, Yu. Kopatch, K. Nazarov, D. Alimov, B. Sadykov, A. Temirzhanov. The prospects of studying ternary nuclear fission in horizontal channel No. 1 of the VVR-K reactor.....	
Д. Бериков, С. Нуруев, Г. Ахмадов, К. Мендибаев, Б. Мухаметулы, К. Ковальчук, Т. Жолдыбаев, Ю. Копач, К. Назаров, Д. Алимов, Б. Садыков, А. Темиржанов. Перспективы исследования тройного деления ядер на горизонтальном канале №1 реактора ВВР-К.....	111
А.К. Сейтханова, С.Ж. Көшкінбаев, Н.К. Смайлов, М.Ж. Кошкинбаева, Н.Ж. Дуйсенов Өлшеу технологиясындағы оптикалық сенсорлар: деформация мен температураны бақылауға арналған қолданбалар.....	
A.K. Seytkhanova, S.Zh. Koshkinbaev, N.K. Smailov, M.Zh. Koshkinbaeva, N.Zh. Duysenov Optical sensors in measurement technology: applications for deformation and temperature control.....	
А.К. Сейтханова, С.Ж. Көшкінбаев, Н.К. Смайлов, М.Ж. Кошкинбаева, Н.Ж. Дуйсенов Оптические датчики в измерительной технике: применение для контроля деформации и температуры.....	127
О. Шалқар, Б.Е. Жакупбаев, Д.К. Ескермесов, Б.Ж. Сейтов, А.К. Тусупбекова, Э.К. Мусенова, У. А. Муратбекова, Ж.К.Алипбекова, С.А.Пазылбек. Самариймен белсендірілген церий оксиді ұнтақтары мен жұқа үлбірлерінің құрылымдық және морфологиялық қасиеттерін зерттеу.....	
O. Shalkar, B.E. Zhakipbayev, D.K. Yeskermessov, B.Zh. Seitov, A.K. Tussupbekova, E.K. Mussenova, U.A. Muratbekova, Zh.K. Alipbekova, S. Pazylbek. Study of structural and morphological properties of powders and thin films of samaria doped cerium oxide.....	
О. Шалқар, Б.Е. Жакупбаев, Д.К. Ескермесов, Б.Ж. Сейтов, А.К. Тусупбекова, Э.К. Мусенова, У. А. Муратбекова, Ж.К.Алипбекова, С.А.Пазылбек. Исследование структурных и морфологических свойств порошков и тонких пленок активированного самарием оксида церия.....	140

- И.Е. Кенжина, Т.В. Кульсартов, Е.В. Чихрай, Ж.А. Заурбекова, Ю.В. Понкратов, А.Л. Козловский, А.Б. Елишенков, С.Қ. Әскербек, А.У. Толенова.** Жоғары температура сутек изотопы ортасындағы қалайы-литий қорытпасының әрекетін зерттеу: сорбция және десорбцияанализі..... 162
- I.E. Kenzhina, T.V. Kulsartov, Ye.V. Chikhray, Zh.A. Zaurbekova, Yu.V. Ponkratov, A.L. Kozlovskiy, A.B. Yelishenkov, S.K. Askerbekov, A.U. Tolonova.** Investigation of tin-lithium alloy behavior in high-temperature hydrogen isotope environments: sorption and desorption analysis..... 162
- И.Е. Кенжина, Т.В. Кульсартов, Е.В. Чихрай, Ж.А. Заурбекова, Ю.В. Понкратов, А.Л. Козловский, А.Б. Елишенков, С.Қ. Әскербек, А.У. Толенова.** Исследование поведения оловянно-литиевого сплава в условиях высокотемпературной среды с изотопами водорода: анализ сорбции и десорбции.....
- Ж.О. Насилов, К.Ш. Жумадилов, Ж.А. Байгазинов, Н. Нурсултанова, А.И. Иванников, В.Ф. Степаненко, М. Хоши, А.М.Андабаева.** Радон мен торон белсенділігін өлшеуге арналған трек детекторларын қолдану: әдістер мен нәтижелерге шолу.....
- Zh.O. Nassilov, K.Sh. Zhumadilov, Zh.A. Baigazinov, N. Nursultanova, A.I. Ivannikov, V.F. Stepanenko, M. Hoshi, A.M. Andabayeva.** Application of track detectors to measure radon and thoron activity in the environment: a review of methods and results.....
- Ж.О. Насилов, К.Ш. Жумадилов, Ж.А. Байгазинов, Н. Нурсултанова, А.И. Иванников, В.Ф. Степаненко, М. Хоши, А.М.Андабаева.** Применение трековых детекторов для измерения активности радона и торона в окружающей среде: обзор методов и результатов 186
- Сатанова Б.М., Абуова Ф.У., Абуова А.У., Байкадамова Л.С., Қаптағай Г.Ә., Қойлық Н.О., Инербаев Т.М.** BaTiO₃ (001) бетіндегі оттегінің адсорбциялануына көміртегін қоспалаудың алғашқы қағидалардан зерттеу.....
- B.M. Satanova, F.U.Abuova, A.U.Abuova, L.S.Baikadamova, G.A. Kaptagai, N.O. Koilyk, Inerbaev T.M.** Study of carbon admixture to oxygen adsorption on the surface of BaTiO₃ (001) from the first principles.....
- Сатанова Б.М., Абуова Ф.У., Абуова А.У., Байкадамова Л.С., Қаптағай Г.Ә., Қойлық Н.О., Инербаев Т.М.** Первопринципное исследование легирования углеродом при адсорбции кислорода на поверхности BaTiO₃ (001)..... 204



IRSTI 29.19.11; 29.19.21

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-150-1-8-31>

Scientific article

Study of thermally induced diffusion mechanisms of implanted helium in the near-surface layers of ceramics based on lithium metazirconate

A.A. Khametova^{1,2}, D.I. Shlimas^{1,2}, Sh.G. Giniyatova², A.L. Kozlovskiy^{*1,2,3}

¹Laboratory of Solid State Physics, The Institute of Nuclear Physics of the Ministry of Energy of the Republic of Kazakhstan, Almaty, Kazakhstan

²Engineering Profile Laboratory, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

³Department of Chemical Processes and Industrial Ecology, Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

*Correspondence: kozlovskiy.a@inp.kz; tel.: +7-702-441-3368; fax: +7-702-441-3368

Abstract. The aim of this study is to determine the thermal exposure effect on the destruction processes of near-surface layers of ceramics based on lithium metazirconate associated with the diffusion of implanted helium, alongside to determine the effect of the magnesium oxide dopant in low concentrations on restraining diffusion mechanisms during high-temperature irradiation. Interest in this type of ceramics is primarily due to the possibility of expanding the types of lithium-containing ceramics for the production and accumulation of tritium, as well as an increase in stability to degradation processes characteristic of high-temperature operating modes, alongside the accumulation of fission products of nuclear reactions of neutrons with lithium in the form of helium. According to studies carried out using the depth nanoindentation method (measurements along the trajectory of ion movement on a side cleavage), it was found that an elevation in the irradiation temperature leads to a rise in the thickness of the damaged layer, the alteration in which is due to the effects of helium diffusion into depth due to thermal effects. The softening of the near-surface layer during high-temperature irradiation is due to structural changes associated with a growth in deformation distortion of the crystal structure and its swelling, which is most pronounced during high-dose irradiation. At the same time, alterations in the structural features of lithium metazirconate due to the dopant concentration growth during the synthesis of lithium-containing ceramics leads not only to an increase in resistance to softening of the damaged layer, but also to a reduction in the thickness of the diffusion layer in ceramics under high-temperature irradiation.

Keywords: helium diffusion; lithium-containing ceramics; blankets; radiation damage; helium swelling

Received 31.12.2024. Revised 8.02.2025. Accepted 19.02.2025. Available online 25.03.2025

¹*the corresponding author

1. Introduction

Current trends in the development of alternative energy sources in order to reduce the dependence of the energy sector on fossil fuels cannot be considered without nuclear, hydrogen and, in the near future, thermonuclear energy [1-3]. Moreover, while development trends in nuclear energy are aimed at finding opportunities to enhance the efficiency of nuclear fuel burnup, and to increase the temperature of the core, the main efforts in hydrogen energy are aimed at finding technological solutions to reduce the cost of energy production by reducing the operating temperatures of fuel cells or simplifying hydrogen production processes, in thermonuclear energy, in addition to finding solutions to problems associated with plasma confinement, research aimed at finding ways to produce tritium plays an important role [4,5]. In this case, tritium is one of the key types of fuel for thermonuclear power plants, and the methods available today for its production do not allow us to fully meet the needs for its volumes.

One of the solutions to the problem of tritium production in thermonuclear energy is the use of lithium-containing ceramics as blankets for the propagation of tritium, which is an essential fuel for maintaining thermonuclear reactions [6,7]. The technology of using lithium-containing ceramics for tritium propagation is based on the nuclear reaction of lithium with a neutron ($\text{Li}(n,t)\text{He}$), which results in the formation of tritium and helium (He) as a fission product, the accumulation of which also occurs in the blanket material [8,9]. At the same time, the existing technical groundwork in the field of producing lithium-containing ceramics opens up wide opportunities for varying the compositions of ceramics by using various compounds, the variation of which causes changes in the structural, strength and thermophysical parameters [10-13]. Among the fairly large number of variations in the compositions of lithium-containing ceramics, lithium metazirconate has recently been distinguished, which has fairly high resistance to external influences, such as mechanical pressure, thermal expansion, etc., and also has good compatibility with other types of structural materials [14-16].

Deformation processes in the near-surface layer are usually caused by the accumulation of nuclear reaction products in the form of helium and hydrogen, which accumulate in pores and voids, thereby creating additional deformation distortions in the structure. It should also be noted that migrating helium, due to its mobility and low solubility, is capable of forming clusters together with oxygen vacancies, which also contributes to a growth in the deformation of the crystalline structure of the near-surface layer. At the same time, according to a number of fundamental works [17-19], aimed at studying the mechanisms of gas swelling of near-surface layers in steels and alloys (traditional structural materials in nuclear energy), temperature exposure contributes to the acceleration of helium diffusion processes in the near-surface layer [11], which results in more pronounced agglomeration into bubbles, and as a result, an elevation in the destruction effect. In the case of ceramic materials, these effects have not been fully studied, which opens up opportunities for their detailing, in particular, the need to study the effects of destruction that occur during the simultaneous impact of high temperatures and radiation damage on the near-surface layer of ceramic materials exposed to irradiation. The key differences between such effects in steels and alloys and ceramics consist in the structural features of the ceramics, and in most cases, the dielectric nature of the ceramics, which leads to

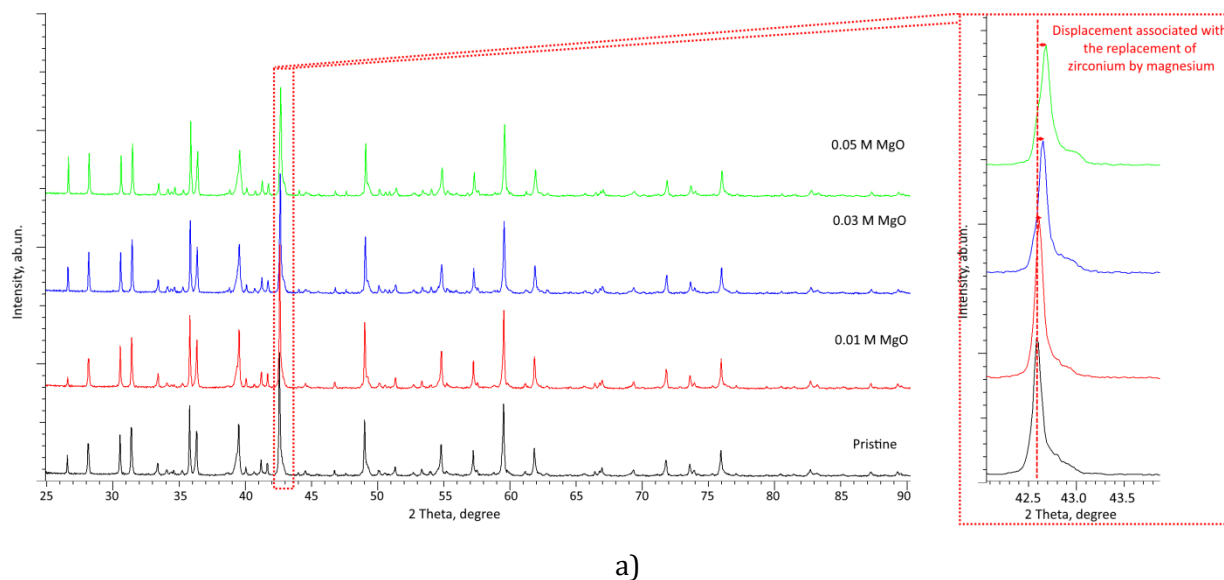
the need to consider ionization effects associated with the redistribution of electron density, as well as the subsequent athermal effects and the emergence of metastable states following these changes [20,21].

The aim of this study is to determine the effect of magnesium oxide addition in small concentrations (0.01 – 0.05 M) to the composition of ceramics based on lithium metazirconate (Li_2ZrO_3) on the resistance to the accumulation of deformation distortions and softening (decrease in hardness) of the near-surface layer of ceramics when irradiated with He^{2+} ions. At the same time, the emphasis in the study of radiation damage is on determination of the influence of irradiation temperature on diffusion processes caused by the high mobility of He^{2+} ions in the near-surface layer [11]. Conducting such studies is aimed at expanding the understanding of the mechanisms of degradation of near-surface layers of ceramics, which during operation are subject to external influences (mechanical, thermal effects during heating), alongside due to the high mobility of nuclear reaction products $n(\text{Li,t})\text{He}$, accumulation of helium, tritium and hydrogen in the near-surface layer, which results in destabilization of the structure and, as a consequence, softening. The choice of Li_2ZrO_3 ceramics with the addition of a low concentration of MgO as objects of study is due to the possibility of modification of the properties of lithium metazirconate, without the formation of impurity phases in the composition in the form of a $\text{MgLi}_{2z}\text{rO}_4$ substitution phase, which contributes to the preservation of the structural motif of the Li_2ZrO_3 phase, with changed parameters, as well as heightened resistance to destruction.

2. Materials and methods

Ceramics based on lithium metazirconate with the addition of magnesium oxide in low concentrations were chosen as objects of study. The ceramics were obtained using solid-phase grinding technology and subsequent thermal sintering. Grinding was carried out in a planetary mill PULVERISETTE 6 classic line, at a grinding speed of 400 rpm for 30 minutes. After grinding, the main purpose of which was to obtain a mixture of homogeneous composition, the resulting powders were pressed into tablets with a diameter of 10 mm and a thickness of 1 mm, which were subsequently subjected to thermal annealing for 8 hours at a temperature of 1300 °C. A RUS-universal muffle furnace was used to sinter the samples. To obtain ceramics based on lithium metazirconate, $\text{LiClO}_4 \times 3\text{H}_2\text{O}$, ZrO powders were used in a molar ratio of 1 to 1, which, under the selected synthesis conditions, made it possible to obtain ceramics with a monoclinic Li_2ZrO_3 phase (see data presented in Figure 1). MgO was added to the ceramic composition at the grinding stage in molar fractions of 0.01, 0.03 and 0.05 M. The choice of these concentrations is based on the results of [22], in which it was revealed that the MgO dopant concentration growth above 0.1 M results in the formation of two-phase ceramics, in which, under the selected thermal annealing conditions, the formation of a tetragonal $\text{MgLi}_2\text{ZrO}_4$ phase occurs, the formation of which leads to an alteration in strength characteristics. In this case, the use of low MgO concentrations results in the formation of single-phase ceramics, and the main structural changes are associated with the effect of partial substitution of zirconium by magnesium, which results in the crystal lattice parameters and volume reduction, the data of which are presented in the table on an inset 1b. Such changes in parameters are due to the difference in the ionic

radii of Mg^{2+} (74 pm) and Zr^{4+} (79 pm) (see the inset in Figure 1, reflecting the change in the position of the reflection associated with the substitution effect, as well as the parameter data in Inset 1b).



a)

Lattice parameter	MgO concentration, M			
	0	0.01 M	0.03 M	0.05 M
Li ₂ ZrO ₃ (PDF-00-033-0843), Monoclinic, C2/c(15)	a=5.40839 Å	a=5.40678 Å	a=5.40251 Å	a=5.39758 Å
	b=8.90597 Å	b=8.90153 Å	b=8.89464 Å	b=8.89757 Å
	c=5.39074 Å	c=5.39564 Å	c=5.39743 Å	c=5.39826 Å
	β=111.704°	β=111.732°	β=111.737°	β=111.707°
	V=241.25 Å ³	V=241.23 Å ³	V=240.92 Å ³	V=240.87 Å ³

b)

Figure 1. a) Results of X-ray diffraction of the studied Li₂ZrO₃ ceramics depending on the MgO concentration (the inset shows a comparison of the alteration in the position of the reflection at $2\theta = 42.7^\circ$, reflecting the substitution effect of zirconium by magnesium); b) Data on crystal lattice parameters depending on variations in MgO concentration during the manufacture of ceramics

Simulation of helium accumulation processes in the near-surface layer of ceramics with a thickness of about 300-500 nm was carried out by irradiating the samples under study with He^{2+} ions at the DC – 60 accelerator (Institute of Nuclear Physics of the Ministry of Energy of the Republic of Kazakhstan), the use of which, as was shown in the works [23,24], allows one to simulate the near-surface layer degradation processes in a wide range of irradiation fluences and, as a consequence, atomic displacement values. Irradiation was carried out at fluences from 10^{15} to 10^{18} cm⁻², which, according to estimates, corresponds to about 30 dpa at the maximum

irradiation fluence (see evaluation data presented in Figure 2). The samples were irradiated at different temperatures, the particle flux density was about $40 \mu\text{A}$. Temperature control was performed using a special target holder that allowed maintaining a constant target temperature during irradiation.

As can be seen from the presented calculated data, the value of atomic displacements of the order of 30 dpa can be achieved at an irradiation fluence of 10^{18} cm^{-2} , while the maximum of this value is observed at a depth of about 250-300 nm, with a maximum ion travel depth of about 500 nm. It should be noted that due to the high resistance to external influences of the selected ceramics, as well as the low ion flux density, the effect of possible sputtering under ion exposure was excluded in the process of simulation of the helium ion accumulation in the near-surface layer. Figure 2b demonstrates the estimation results of the value of ionization energy losses of incident ions during interaction with the crystal structure of the target, according to which, over most of the path length, the main contribution to changes is made by ionization losses during interaction with electron shells (ionization effects), and at a depth above 250 nm, ionization losses associated with collisions with nuclei play a role, which leads to the formation of primary knocked out atoms in the structure if the transferred energy exceeds the binding energy.

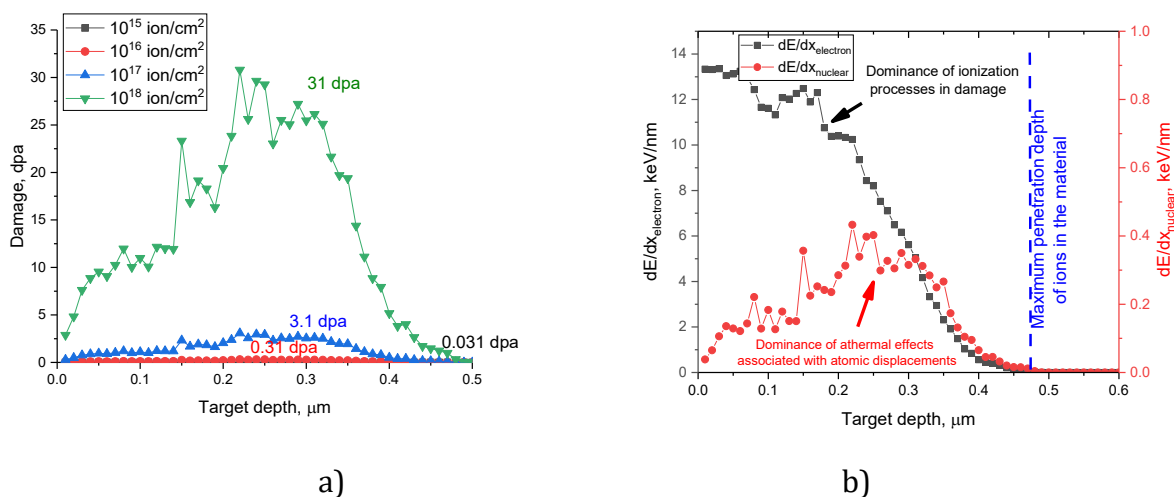


Figure 2. Simulation results of the interaction of incident He²⁺ ions with a near-surface layer of ceramics: a) evaluation results of the distribution of atomic displacements (dpa) in the near-surface layer in depth depending on the irradiation fluence; b) results of the distribution of changes in ionization losses during interaction with electrons (dE/dx_{electron}) and nuclei (dE/dx_{nuclear})

The irradiation temperatures were chosen to be 300, 500, 700 and 1000 K, which made it possible to evaluate the influence of thermal effects caused by alterations in the amplitude of thermal vibrations of atoms in the crystal lattice, as well as acceleration of the diffusion processes of implanted He²⁺ ions in the near-surface layer, which can lead to both more pronounced agglomeration of helium in voids with a subsequent rise in deformation distortions, and an elevation in the penetration depth of He²⁺ ions due to diffusion deep into the sample [25,26].

The effect of irradiation and changes in irradiation conditions (temperature variations) on the structural characteristics of ceramics was determined by assessing changes in the volumetric swelling value ($\Delta V = V_{\text{irradiated}} - V_{\text{pristine}}$), which was determined by calculating the crystal lattice volumes in the initial state (for non-irradiated samples) and after accumulation of a certain radiation dose. In this case, the value of $\Delta V(\text{dpa})$ reflects the destructive swelling of the crystal lattice, caused by both deformation mechanisms associated with the accumulation of structural distortions caused by irradiation, and the introduction of He^{2+} ions into voids, which is accompanied by the formation of gas-filled inclusions in the near-surface layer.

The irradiation effect on the mechanisms of softening (decrease in the hardness of the near-surface layer) contingent upon the value of atomic displacements and irradiation temperature was determined by the nanoindentation method. When determining the hardness values of the samples, the number of measurements at a given depth was at least 10 points. In this case, the measurements were carried out taking into account the need to avoid overlapping traces from the indenter during measurement, which can lead to large deviations. The measurement error was determined by calculating the standard deviation of the hardness value in the average value obtained during the measurements. To assess the mechanisms of diffusion of implanted He^{2+} ions in the damaged layer, as well as the restraining factors caused by the structural features of doped ceramics, measurements on side cleavages with a step of 50 nm were carried out, which made it possible to evaluate the hardness degradation in depth, the characteristic ion travel depth in ceramics, alongside the diffusion of ions to a depth exceeding 500 nm (the maximum depth of travel of He^{2+} ions in ceramics, according to SRIM Pro 2013 calculations presented in Figure 2a).

The study of the kinetics of changes in the thermophysical parameters of the studied ceramic samples contingent upon the dopant concentration, as well as in the case of variations in irradiation conditions and irradiation fluence, was carried out by determining changes in the thermal conductivity coefficient of ceramics using the longitudinal heat flow method implemented on the KIT-800 universal thermal conductivity meter.

3. Results and discussion

Figure 3 illustrates the determination results of the volumetric swelling of the damaged ceramic layer crystal structure depending on the value of atomic displacements (dpa), calculated based on simulation using the SRIM Pro 2013 program code, as well as irradiation temperature. The overall appearance of the presented data on the change in the $\Delta V(\text{dpa})$ value indicates the negative effect of the structural damage accumulation on the crystalline structure of the irradiated layer, expressed in deformation distortion and a rise in volumetric tensile stresses in the damaged layer. At the same time, consideration of these dependencies should be carried out in two contexts: depending on the phase composition of the ceramics, more precisely in determining the influence of the MgO dopant concentration on the change in the $\Delta V(\text{dpa})$ value; depending on the irradiation temperature, a change in which causes thermal effects associated with volumetric broadening and the influence of thermal vibrations on the structural disorder degree.

During analysis of the obtained dependences $\Delta V(\text{dpa})$ on the structural features of ceramics, the change of which is due to variations in the dopant concentration, it can be concluded that the MgO dopant concentration growth, leading to structural ordering of the crystal lattice, results in elevation of resistance to volumetric tensile deformation, the alteration of which is observed in the case of variations in irradiation fluence. In this case, for modified ceramics, the dopant concentration growth, as is clearly seen from the data presented in Figure 3, leads to less pronounced changes in the crystal lattice volume associated with the accumulation of structural distortions and the concentration of implanted ions. This behavior of the $\Delta V(\text{dpa})$ value in the case of a change in the dopant concentration can be explained by the structural ordering effects associated with the partial substitution of zirconium by magnesium, which, according to X-ray diffraction analysis data, results in structural ordering growth due to the crystal lattice parameters and volume reduction, as well as a reduction in the concentration of structural and vacancy defects in ceramics. During irradiation, especially at high temperatures, the concentration of initial defects and vacancies in the ceramic composition plays a key role in determination of the degradation kinetics of the damaged layer structure and its swelling rate. It should be noted that in this case, the absence of impurity inclusions in the composition of the synthesized ceramics eliminates the effect of interfacial hardening characteristic of two-phase lithium-containing ceramics [27-29], and the elevation in resistance to destructive swelling in this case is due to structural ordering caused by substitution effects. It should also be noted that when analyzing the obtained dependences $\Delta V(\text{dpa})$ in the case of high irradiation temperatures (700 – 1000 K) a change in the dopant concentration in the ceramic composition has a more significant effect on the resistance to volumetric swelling in comparison with Li_2ZrO_3 ceramics obtained without the addition of a dopant. In the case of irradiation temperatures of 700 – 1000 K, the addition of 0.03 – 0.05 M MgO dopant to the composition of Li_2ZrO_3 ceramics leads to a decline in the $\Delta V(\text{dpa})$ value of the order of 26 – 35 % in comparison with a similar value obtained for unmodified Li_2ZrO_3 ceramics. It is important to highlight that the elevation in resistance to volumetric swelling is nonlinear and is most pronounced at high irradiation fluences ($10^{17} - 10^{18} \text{ cm}^{-2}$), which indicates the cumulative effect of structural distortions, most pronounced at high irradiation doses, for which deformation distortions are caused not only by the accumulation of point and vacancy defects, alongside the clusters formed by them, but also by the formation of gas-filled inclusions, the appearance of which in the damaged layer structure is associated with the implanted helium concentration growth. In this case, more pronounced changes in the $\Delta V(\text{dpa})$ value, especially for samples irradiated at high temperatures, are due to a combination of two effects: the accumulation of structural distortions and the high mobility of implanted helium, the accelerated diffusion of which at high temperatures contributes to the filling of voids with their subsequent deformation stretching [11,30]. The containment of these effects is clearly demonstrated by the presented $\Delta V(\text{dpa})$ dependences for modified ceramic samples.

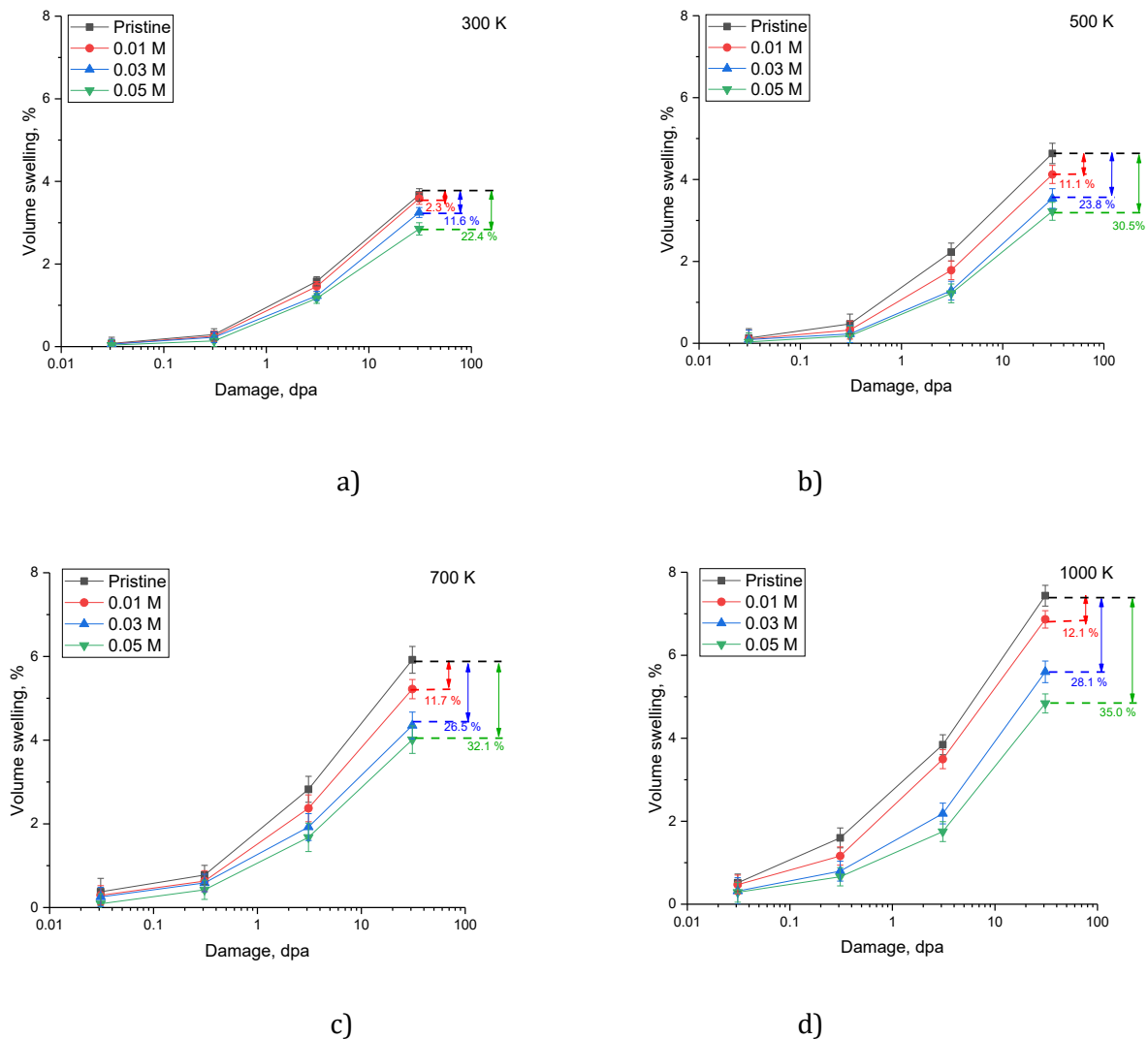
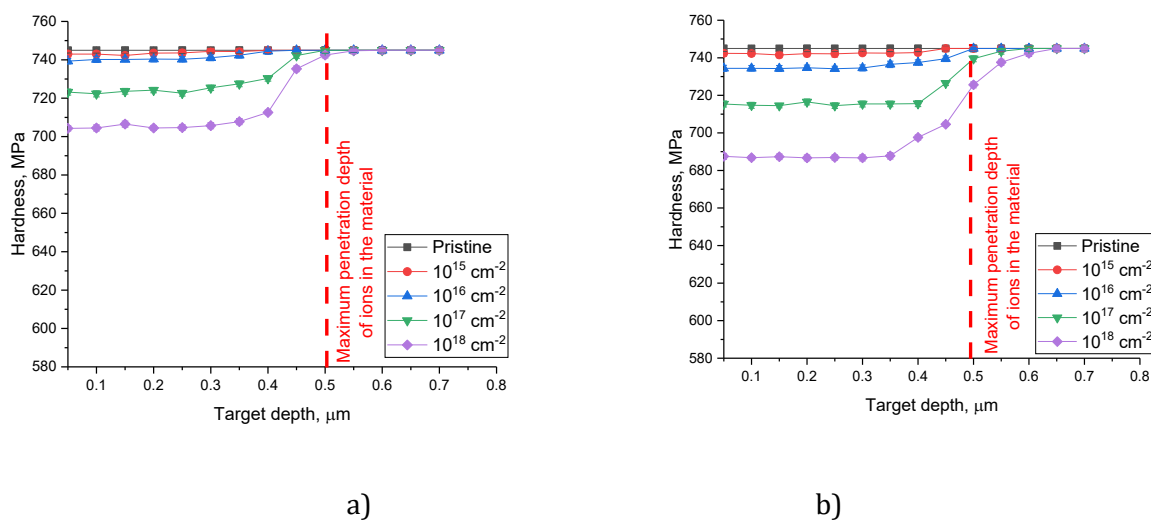


Figure 3. Results of alterations in the ΔV value, reflecting the volumetric change in the structural parameters of the crystalline structure of the damaged layer as a result of variations in irradiation conditions (fluence and irradiation temperature): a) 300 K; b) 500 K; c) 700 K; d) 1000 K

Figures 4 – 7 demonstrate the assessment results of changes in the hardness values of the studied samples by depth, reflecting the effect of irradiation fluence, irradiation temperature, and dopant concentration at its variation on the strength properties and diffusion processes caused by the implanted helium migration. The overall appearance of the presented dependences indicates the cumulative effect of softening, expressed both in the hardness value reduction with an irradiation fluence growth, and in a change in the trend of hardness degradation by depth, reflecting the diffusion of implanted ions to the surface (in the case of low irradiation fluences) and deep into the damaged layer, to a depth exceeding the ion travel depth in the material (this boundary is reflected by the red dotted line in Figures 4 – 7). At the same time,

the diffusion of implanted helium ions is most pronounced for high-dose irradiation of samples at an irradiation temperature growth, which clearly reflects the fact of the presence of the effect of migration of implanted helium ions deep into the samples, indicating the destructive nature that accompanies these processes. Analysis of the profiles of changes in hardness by depth in the case of high-temperature irradiation for unmodified Li_2ZrO_3 ceramics revealed an increase in the depth of the layer in which lower hardness values are observed, and it was determined that the most pronounced changes were observed for samples irradiated at a temperature of 1000 K. Comparing the depth profiles of hardness, it can be concluded that the implanted helium diffusion is most pronounced when atomic displacements reach values of the order of 1 – 3 dpa (at a fluence above 10^{17} cm^{-2}), which can be explained by the effects of structural deformation distortion, as well as the formation of gas-filled inclusions with implanted helium, which at high temperatures agglomerate into larger formations, amplifying deformation distortion by stretching the crystalline and chemical bonds of the crystal lattice [31,32]. At the same time, modification of the structure of ceramics by increasing the MgO dopant concentration leads to a reduction in the overall trend of changes in hardness by depth both at low irradiation temperatures and at high temperatures, for which the diffusion of implanted helium ions is more pronounced. It should also be noted that minor deviations in hardness values can be explained by local structural defects, the presence of which can have a slight increase in softening resistance. According to the obtained data on the change in the values of volumetric swelling of the surface layer when comparing them in the case of variation in the irradiation temperature, it can be concluded that an increase in the irradiation temperature leads to a more intensive increase in the difference ΔV . At the same time, the growth of this value in the case of the original unmodified ceramics indicates destabilization of the crystal structure due to its disordering caused by the effect of thermal expansion, as well as accelerated diffusion of implanted ions in the damaged layer. The addition of the stabilizing additive MgO, as can be seen from the presented data, leads to an increase in resistance to volumetric swelling caused by the accumulation of helium in the pores with a subsequent increase in gas-filled inclusions due to the accumulation of helium.



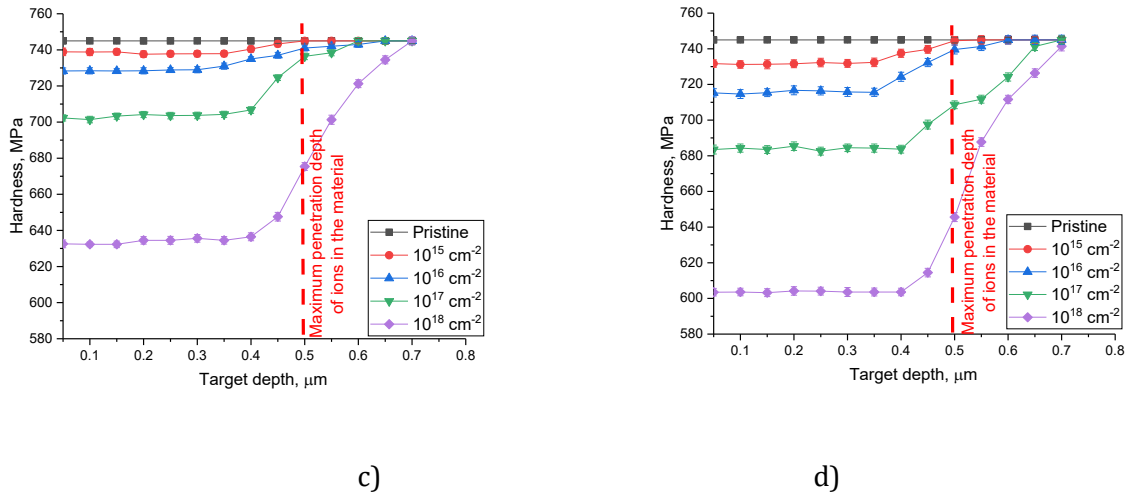
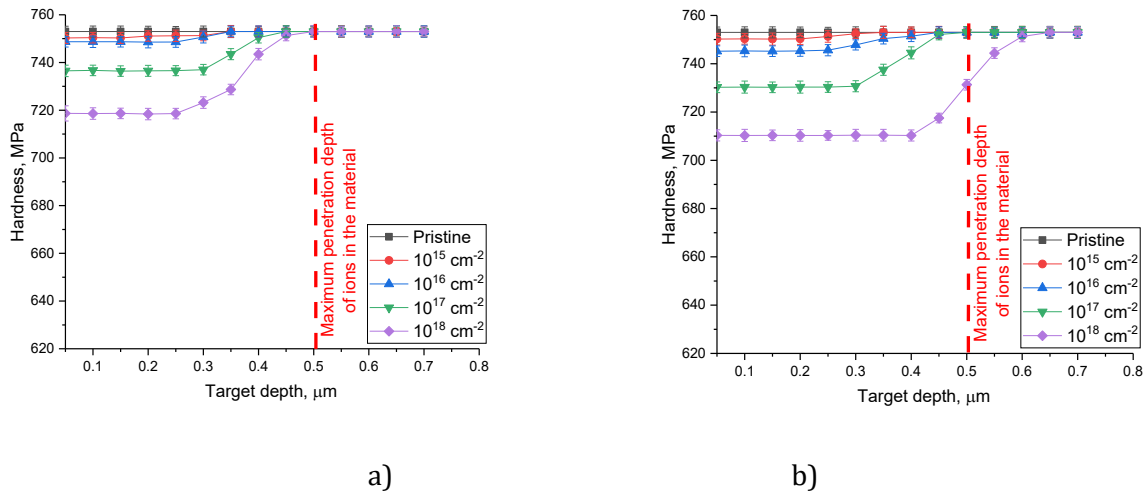


Figure 4. Change in the hardness of Li_2ZrO_3 ceramics by depth in the case of irradiation at different temperatures: a) at irradiation temperature of 300 K; b) at irradiation temperature of 500 K; c) at irradiation temperature of 700 K; d) at irradiation temperature of 1000 K

According to the data presented in Figure 5, when comparing trends in changes in hardness of the studied unmodified ceramics and with the addition of 0.01 M MgO, it is clear that the decline in hardness is less pronounced both at an irradiation temperature of 300 K and at higher temperatures. This behavior of trends in hardness degradation by depth indicates a positive effect of the dopant on the resistance of ceramics to deformation distortions caused by exposure to irradiation.



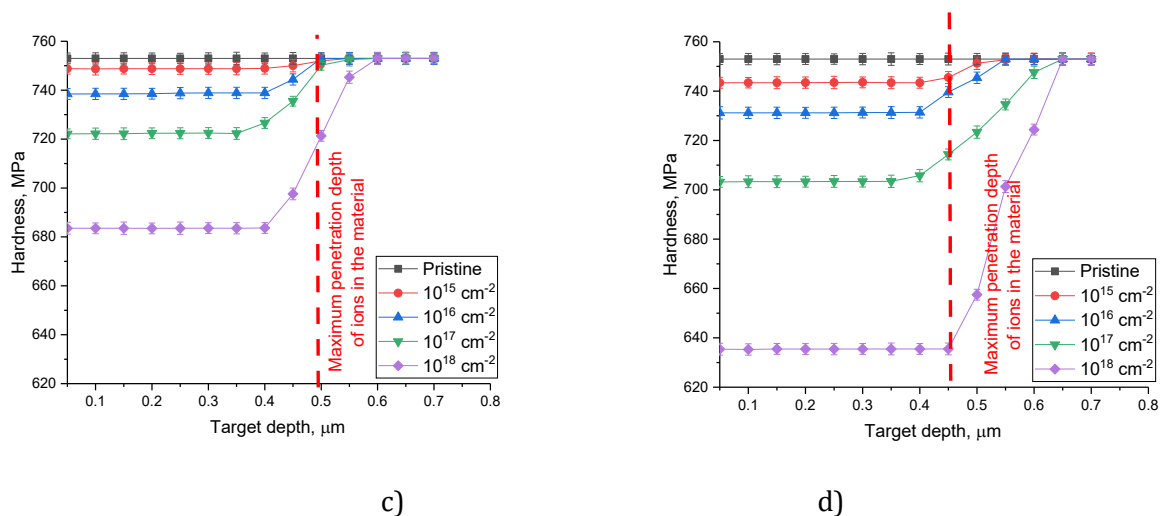
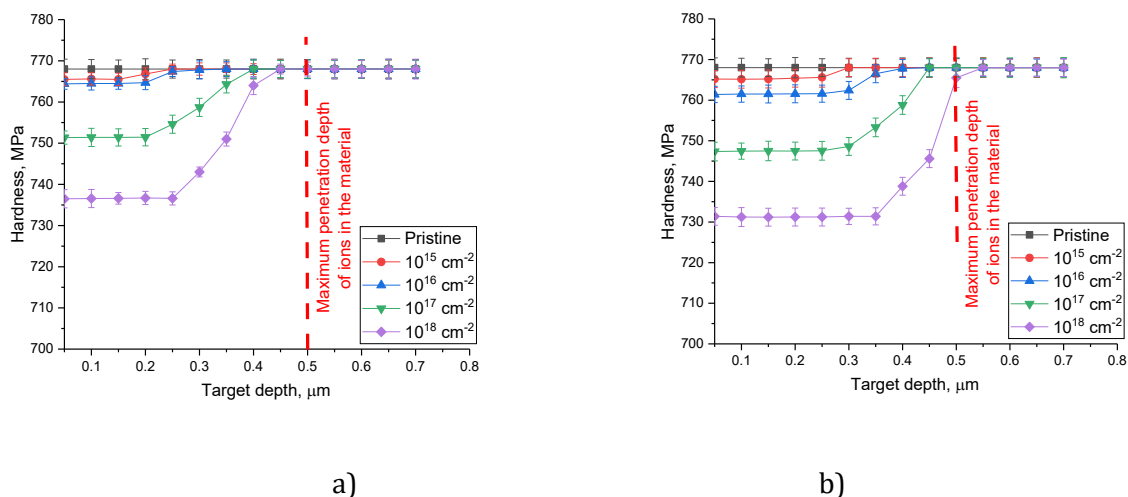


Figure 5. Change in the hardness of Li₂ZrO₃ ceramics with the addition of the 0.01 M MgO dopant by depth in the case of irradiation at different temperatures: a) at irradiation temperature of 300 K; b) at irradiation temperature of 500 K; c) at irradiation temperature of 700 K; d) at irradiation temperature of 1000 K

Similar changes in trends in the degradation of hardness values with depth, reflecting an increase in the resistance of ceramics to strain softening in comparison with unmodified ceramics, are also observed for ceramics with a dopant concentration of 0.03 M. It should be noted that an elevation in the dopant concentration results in resistance growth, and, as can be seen from the data presented, a decrease in the effect of helium ion diffusion deep into the sample at high irradiation temperatures, which indicates a limiting factor due to the structural features of the modified ceramics.



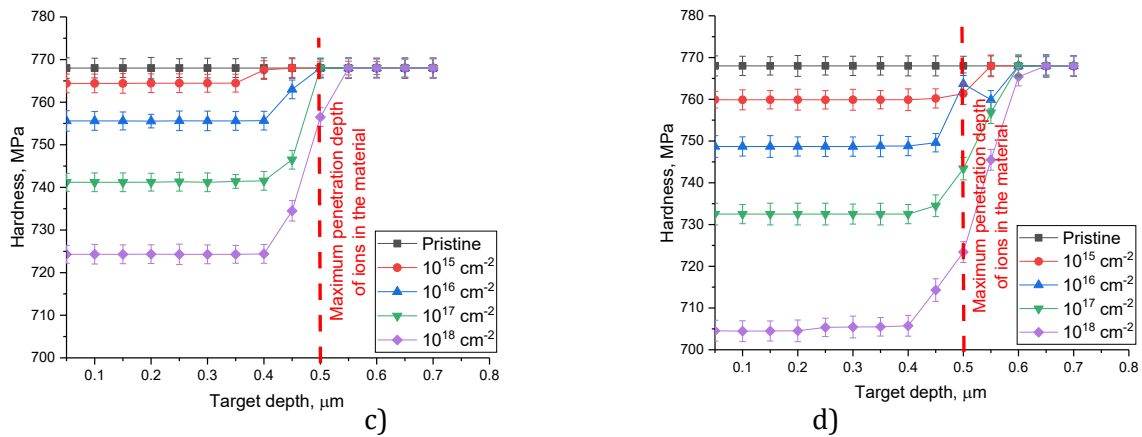


Figure 6. Change in the hardness of Li₂ZrO₃ ceramics with the addition of the 0.03 M MgO dopant by depth in the case of irradiation at different temperatures: a) at irradiation temperature of 300 K; b) at irradiation temperature of 500 K; c) at irradiation temperature of 700 K; d) at irradiation temperature of 1000 K

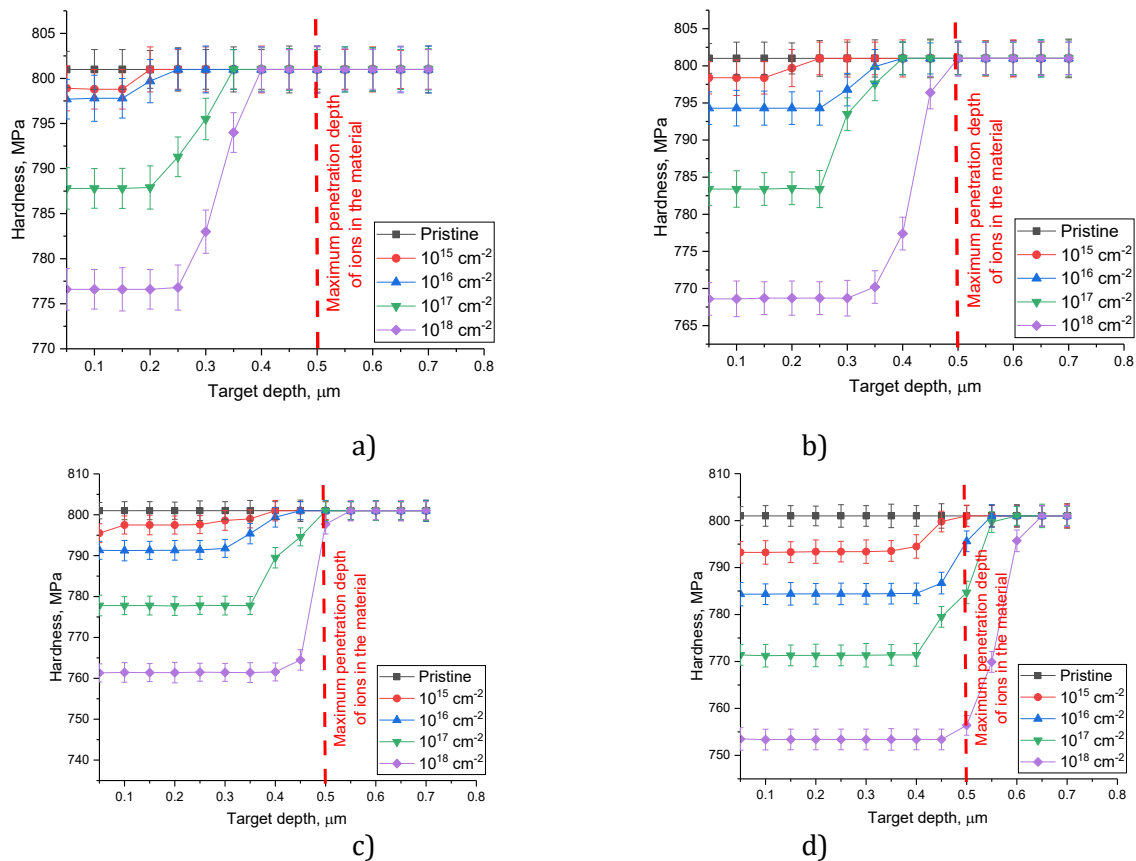


Figure 7. Change in the hardness of Li₂ZrO₃ ceramics with the addition of the 0.05 M MgO dopant by depth in the case of irradiation at different temperatures: a) at irradiation temperature of 300 K; b) at irradiation temperature of 500 K; c) at irradiation temperature of 700 K; d) at irradiation temperature of 1000 K

Analysis of the dependences of the values of change in hardness by depth for samples of Li_2ZrO_3 ceramics with the addition of 0.05 M MgO dopant indicates that an elevation in the dopant concentration in the ceramic composition leads to a rise in the softening resistance of the near-surface layer, and a reduction in the thickness of the damaged softened layer both in the case of temperatures of 300 – 500 K, and a slight excess of the maximum path length of He^{2+} ions in the case of irradiation at a temperature of 700 K. The results obtained indicate fairly high stability of Li_2ZrO_3 ceramics with the addition of 0.05 M MgO dopant to the deformation-induced disordering of the near-surface layer, alongside the inhibition of the diffusion of implanted helium deep into the sample, which was observed under similar irradiation conditions for unmodified ceramic samples. It should also be noted that the observed alterations in the hardness values of ceramic samples irradiated at a temperature of 1000 K, which exceed the maximum ion travel depth of the order of 100 – 150 nm (in the case of maximum irradiation fluence), are significantly less than the observed changes under similar irradiation conditions for unmodified ceramics and modified ones but with a lower dopant concentration (0.01 – 0.03 M).

Figure 8 illustrates the assessment results of the softening degree $\Delta\text{HV} = \text{HV}_{\text{pristine}} - \text{HV}_{\text{irradiated}}$, reflecting the near-surface layer hardness degradation depending on the value of atomic displacements. The data are calculated at a depth of the order of 250 – 300 nm, corresponding to the maximum value of atomic displacements, according to the calculated data of SRIM Pro.

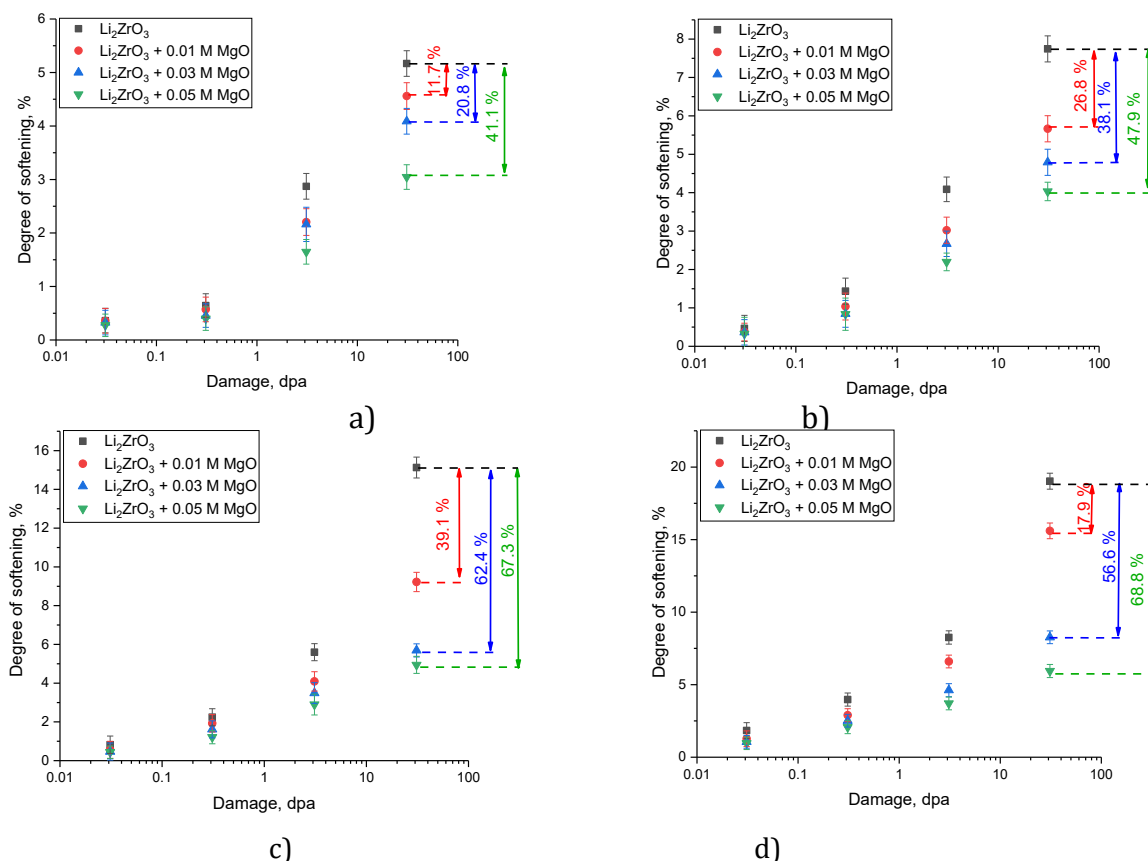
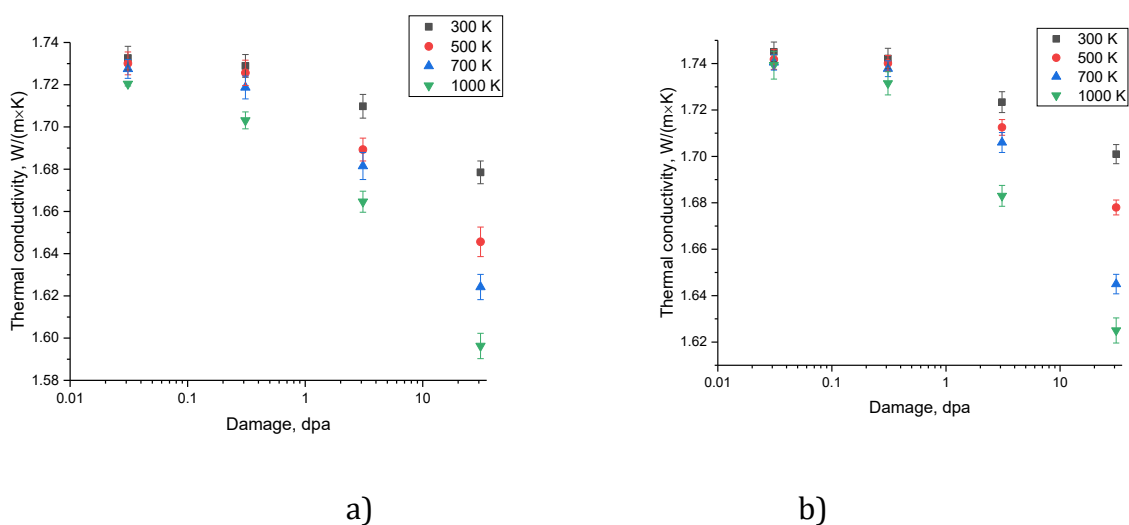


Figure 8. Results of a comparative analysis of the softening degree ($\Delta\text{HV} = \text{HV}_{\text{pristine}} - \text{HV}_{\text{irradiated}}$) of the ceramics under study contingent upon the value of atomic displacements with variations in irradiation temperature: a) at irradiation temperature of 300 K; b) at irradiation temperature of 500 K; c) at irradiation temperature of 700 K; d) at irradiation temperature of 1000 K

According to the presented dependences of changes in the ΔHV value, it is clear that the addition of the MgO dopant to the composition of Li_2ZrO_3 ceramics leads to an increase in resistance to destructive softening, which is most manifested under high-dose irradiation (about 30 dpa). It should be noted that for doped samples, an irradiation temperature growth, as can be seen from the data presented, leads to an elevation in the difference in the softening values, which indicates higher rates of resistance of modified ceramics to thermally induced processes of degradation and softening associated with the processes of diffusion of implanted helium ions in the near-surface layer. This effect is most clearly manifested for samples with a dopant concentration of 0.05 M, for which the difference in ΔHV values under high-temperature irradiation (700 – 1000 K) in comparison with unmodified ceramics is about 67 – 68 %, which indicates a higher resistance of ceramics to softening. Moreover, in the case of unmodified Li_2ZrO_3 ceramics, the most significant changes, close to the critical parameters of degradation of strength parameters, are observed under high-temperature irradiation (700 – 1000 K), for which the maximum value of ΔHV is more than 15 – 18 %, which exceeds the critical permissible value of a reduction in hardness of 10 %. In turn, doping with MgO results in ΔHV value reduction under high-temperature irradiation, and the ΔHV value itself for samples with a dopant concentration of 0.03 – 0.05 M at an atomic displacement of about 30 dpa is no more than 5 – 8 %, which is below the critical permissible value of hardness reduction. The observed effect of hardening and heightened resistance to radiation-strain softening of modified ceramics in the context of variations in dopant concentration reflects a direct relationship between the degradation resistance and the structural ordering degree, changes in which are due to substitution effects at dopant concentration growth. In this case, modification of MgO lithium ceramics leads to a rise not only in resistance to volumetric deformation swelling (see data in Figure 3), but also in an elevation in the resistance of ceramics to softening under high-dose high-temperature irradiation, as well as a decrease in the effect of diffusion of implanted helium ions deep into the sample (see data on changes in hardness values with depth, presented in Figures 4-7).

Figure 9 reveals the assessment results of the change in the thermal conductivity coefficient of the ceramics under study, reflecting the change in thermophysical parameters and their relationship with the accumulation of structural distortions caused by irradiation. The data are presented in the form of dependencies for each type of ceramics under study with variations in the temperature at which irradiation was carried out, in order to reflect the influence of temperature on the destructive change in thermophysical properties. It is important to highlight that in the initial (non-irradiated state) the addition of a dopant to the composition of Li_2ZrO_3 ceramics results in the thermal conductivity coefficient growth, which is due to the structural ordering effects, as well as the properties of the MgO dopant, which determine an increase in thermal conductivity and heat transfer due to the higher thermal conductivity of the dopant. As is evident from the data presented, in the case of Li_2ZrO_3 ceramics, the thermal conductivity coefficient is about 1.734 W/(m×K), while the addition of the MgO dopant results in the thermal conductivity coefficient growth to 1.746, 1.801 and 1.943 W/(m×K) for dopant concentrations of 0.01, 0.03 and 0.05 M, respectively. In the case of irradiation of the studied Li_2ZrO_3 ceramic samples without addition of MgO to the composition at temperatures of 300 – 500 K, the most significant alterations in the thermal conductivity coefficient are observed when the radiation

dose accumulates above 1 dpa, for which, according to the assessment of changes in the ΔTCC value, the thermal conductivity reduction is more than 1.5 %, and a further radiation dose elevation results in reduction of ΔTCC to 2-4 %. For high-temperature irradiation, the decrease in thermal conductivity values at the maximum irradiation dose is about 7 – 8 %, which is more than 2 times higher than similar changes during irradiation at lower temperatures, and also indicates the negative impact of temperature exposure on the decrease in the thermophysical parameters of the ceramics under study. For Li_2ZrO_3 ceramic samples with the addition of the MgO dopant, it was found that an increase in the dopant concentration leads not only to a rise in the initial thermal conductivity values, but also to less pronounced changes in the value of ΔTCC both in the case of low irradiation temperatures (300 and 500 K) and during high-temperature irradiation, for which the maximum change in the ΔTCC value is of the order of 4 – 6 %. This difference in alterations in the thermal conductivity coefficient of the ceramics under study, associated with the addition, as well as variations in the MgO dopant concentration, is due to several factors. Firstly, as was established using the X-ray diffraction analysis, a dopant concentration growth in the composition of the ceramics results in structural ordering and, as a consequence, compaction of the ceramics, and the possible partial substitution of zirconium by magnesium in the crystal lattice of the Li_2ZrO_3 phase contributes to a rise in resistance to thermal expansion associated with the temperature effect on the samples during irradiation. Secondly, the elevation in resistance to volumetric swelling (see data in Figure 3) in the case of modified ceramics indicates that the concentration of defective inclusions in the damaged layer structure, and areas of disorder, causing volumetric-strain distortion of the crystal structure is significantly less, which, as a consequence, results in greater stability of the thermophysical parameters of the ceramics under study under high-dose irradiation. It should also be noted that modification of Li_2ZrO_3 ceramics by changing the dopant concentration, leading to an elevation in the initial thermal conductivity values, provides higher heat transfer due to phonon heat transfer mechanisms, due to a reduction in structural defects, which are scattering centers for thermal phonons.



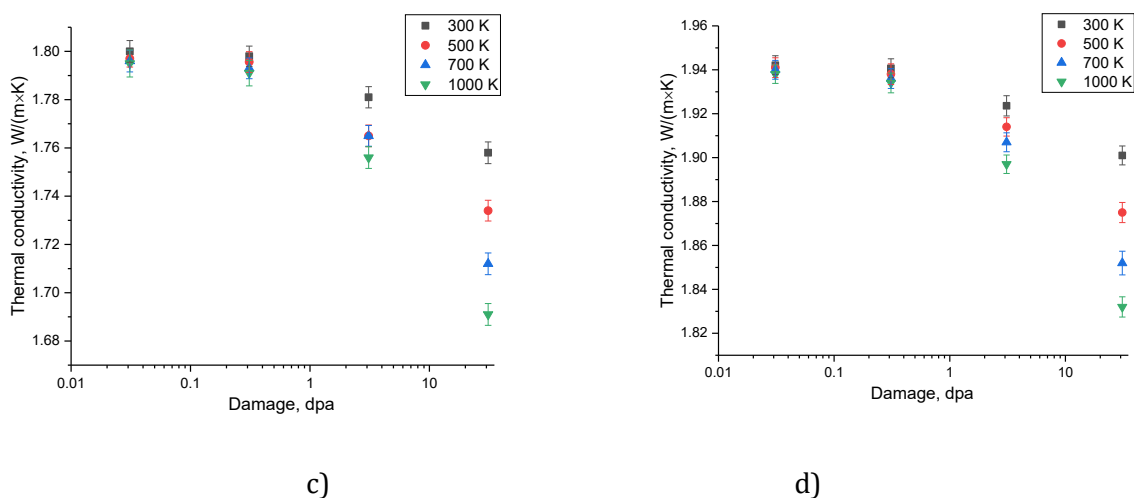
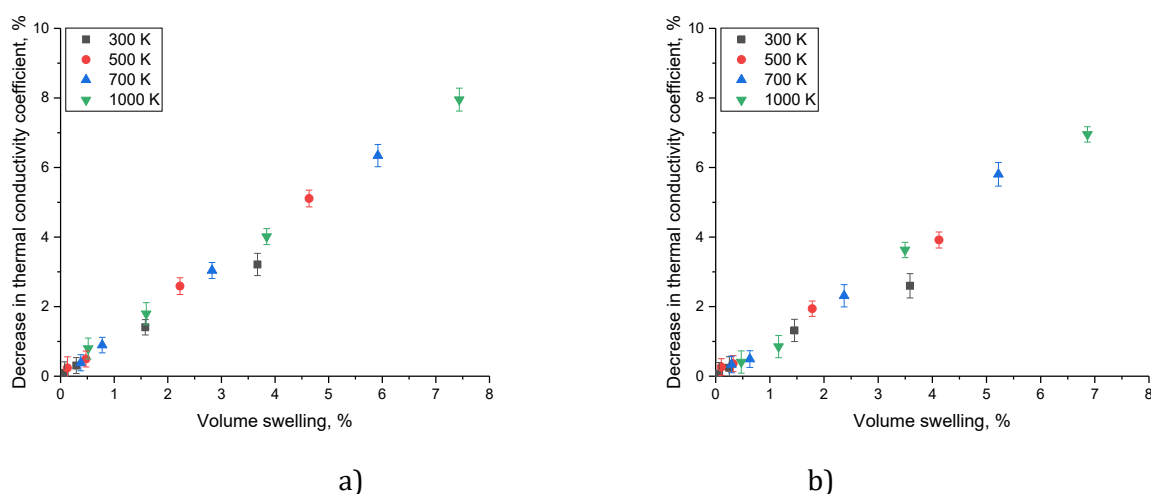


Figure 9. Results of changes in the thermal conductivity coefficient of the studied Li_2ZrO_3 ceramics contingent upon alterations in irradiation conditions (the value of atomic displacements and temperature) with variations in the MgO dopant concentration: a) without dopant; b) at a concentration of 0.01 M; c) at a concentration of 0.03 M; d) at a concentration of 0.05 M

Figure 10 demonstrates the dependence of the change in thermal conductivity coefficient on volumetric swelling ($\Delta\text{TCC}(\text{VS})$), reflecting the connection between destructive volumetric swelling of ceramics and degradation of thermal conductivity, the change of which is associated with structural changes. The data are presented in the form of dependences $\Delta\text{TCC}(\text{VS})$ obtained for each type of ceramic under study when the irradiation temperature changes, which reflect the influence of variations in irradiation conditions on both destructive swelling and thermal conductivity reduction, expressed as a comparison of the thermal conductivity coefficient values of the ceramics under study in the initial and irradiated states.



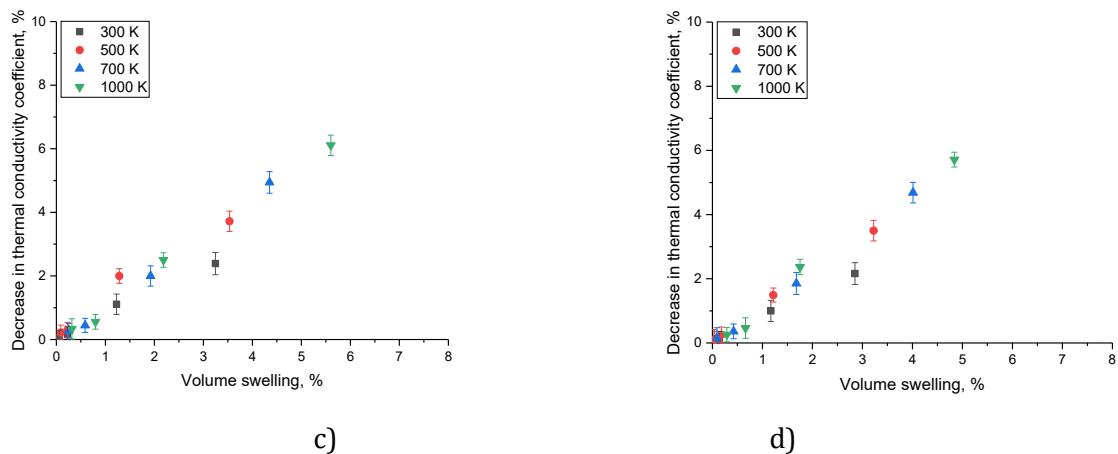


Figure 10. Results of a comparative analysis of $\Delta TCC(VS)$ for the ceramics under study: a) without dopant; b) at a concentration of 0.01 M; c) at a concentration of 0.03 M; d) at a concentration of 0.05 M

The presented dependences $\Delta TCC(VS)$ have a direct correlation with each other and reflect the relationship between the volumetric deformation of the crystal structure, caused by the accumulation of structural distortions and areas of disorder in the damaged layer and the degradation of the thermophysical parameters of the ceramics under study, the mechanisms of change during phonon heat transfer have a direct correlation with the density of structural defects. According to the data presented, the most pronounced changes in thermal conductivity are observed for samples irradiated at high temperatures (700 – 1000 K), for which the accumulation of structural distortions is associated not only with effects caused by the mechanisms of interaction of incident ions with the crystal structure and implantation processes, but also with thermal expansion caused by an alteration in the amplitude of thermal vibrations of atoms in the crystal lattice, an elevation in which promotes their mobility, alongside the migration of point and vacancy defects in the structure. Moreover, the substitution of zirconium by magnesium with a rise in the dopant concentration in the composition of ceramics, which causes a growth in the structural ordering degree (changes in the crystal lattice parameters and volume), helps to restrain the effects of structural disorder, which are most pronounced during high-temperature irradiation.

4. Conclusion

During the experiments carried out related to the assessment of the diffusion mechanisms of implanted helium in the near-surface layers of lithium-containing ceramics, the following results were obtained:

1. During determination of the effect of variations in the phase composition of ceramics on resistance to deformation volumetric swelling, carried out by analyzing the $\Delta V(dpa)$ dependences, it was found that the stability of ceramics is affected not only by structural changes caused by variations in the dopant concentration in the composition, but also by the temperature effect, causing an elevation in deformation distortions associated with thermal effects and accelerated diffusion of implanted He^{2+} ions.

2. It has been established that with irradiation temperature growth in the case of Li_2ZrO_3 with high-dose irradiation, a more intense reduction in the hardness of the near-surface layer is observed at the depth of maximum atomic displacements (depth of the order of 200 – 250 nm), which indicates an adverse effect of irradiation temperature on the stability of strength properties. At the same time, the irradiation temperature growth leads not only to more pronounced changes in hardness values, but also to a rise in the damaged layer thickness, which indicates the occurrence of diffusion processes associated with the migration of implanted He^{2+} ions into the depth, which results in deformation distortion of the near-surface layer and, as a consequence, its softening.

3. During assessment of changes in the thermophysical parameters of the studied ceramics exposed to irradiation with He^{2+} ions, it was established that the irradiation temperature growth during high-dose irradiation (about 3 – 30 dpa) has a negative effect on a decline in the thermal conductivity coefficient, indicating an increase in heat losses in irradiated samples. Moreover, it should be noted that for doped samples, less pronounced trends in thermal conductivity degradation are observed, which indicate a direct relationship between destructive volumetric swelling and a reduction in the thermal conductivity of ceramics.

Based on the research carried out, and conclusions drawn from the results of experiments and analysis of the obtained dependencies, we can draw a general conclusion about the prospects of using the MgO dopant in low concentrations not only to stabilize the strength and thermophysical parameters of Li_2ZrO_3 ceramics, but also to enhance degradation resistance of properties under high-dose irradiation, alongside the accumulation of helium in the near-surface layer, large concentrations of which contribute to destructive embrittlement and softening of ceramics.

Authors' contributions

A.A. Khametova – conducting experiments, working out the modes of obtaining ceramics, characterizing structural changes.

D.I. Shlimas – conducting experiments on irradiation, interpreting structural changes caused by irradiation, assessing the depth of ion penetration in the damaged layer.

Sh.G. Giniyatova – conducting experiments, interpreting the obtained data, analyzing the state of the problem, processing the obtained results.

A.L. Kozlovskiy – conducting experiments, general analysis of the relationship between structural changes and strength parameters, determining the kinetics of material degradation.

Funding

This research was funded by the Ministry of Energy of the Republic of Kazakhstan (No. BR20081011).

References

1. V. Samarina, T. Skufina, and D. Ušakov, *Alternative energy sources: opportunities, experience and prospects of the Russian regions in the context of global trends*, Int. J. Energy Econ. Policy № 8, p. 140-147 (2018) – **journal paper**

2. S. Moka et al., *Alternative fuels: an overview of current trends and scope for future*, Renew. Sustain. Energy Rev. № 32, p. 697-712 (2014) – **journal paper**

3. M.S. Chowdhury et al., *Current trends and prospects of tidal energy technology*, Environ. Dev. Sustain. № 23, p. 8179-8194 (2021) – **journal paper**
4. U. Schumacher, *Status and problems of fusion reactor development*, Naturwissenschaften № 88, p. 102-112 (2001) – **journal paper**
5. M. Abdou et al., *Physics and technology considerations for the deuterium–tritium fuel cycle and conditions for tritium fuel self-sufficiency*, Nucl. Fusion № 61, 013001 (2020) – **journal paper**
6. J. Rapp, *The challenges of plasma material interactions in nuclear fusion devices and potential solutions*, Fusion Sci. Technol. № 72, p. 211-221 (2017) – **journal paper**
7. Y. Zhang et al., *Tritium release behavior and application of a release model for the neutron-irradiated biphasic lithium ceramics*, Fusion Eng. Des. 206, 114593 (2024) – **journal paper**
8. P. Blynskiy et al., *Experiments on tritium generation and yield from lithium ceramics during neutron irradiation*, Int. J. Hydrogen Energy № 46, 9186-9192 (2021) – **journal paper**
9. T. Kulsartov et al., *Thermal desorption of tritium and helium from lithium ceramics $Li_2_{22}TiO_3_{33} + 5mol\% TiO_2_{22}$ after neutron irradiation*, J. Nucl. Mater. № 585, 154609 (2023) – **journal paper**
10. X. Gao et al., *Composition design and preparation of lithium lead titanate ($Li_2_{22}Pb_x_{xx}Ti_{1-x}\{1-x\}O_3_{33}$, $0.1 < x < 0.9$): A novel tritium breeding ceramic*, Nucl. Mater. Energy № 38, 101608 (2024) – **journal paper**
11. A. Roy et al., *Cluster dynamics simulations of tritium and helium diffusion in lithium ceramics*, J. Nucl. Mater. № 592, 154970 (2024) – **journal paper**
12. T. V. Kulsartov et al., *Tritium migration in the materials proposed for fusion reactors: $Li_2_{22}TiO_3_{33}$ and beryllium*, J. Nucl. Mater. № 442, S740-S745 (2013) – **journal paper**
13. T. Kulsartov et al., *Features of helium and tritium release from $Li_2_{22}TiO_3_{33}$ ceramic pebbles under neutron irradiation*, Materials № 16, 5903 (2023) – **journal paper**
14. M.C. Billone, *Thermal and tritium transport in $Li_2_{22}O$ and $Li_2_{22}ZrO_3_{33}$* , J. Nucl. Mater. № 233, 1462-1466 (1996) – **journal paper**
15. K. Li et al., *Tritium adsorption in the lithium vacancy of $Li_2_{22}ZrO_3_{33}$: A first principles study*, Int. J. Mod. Phys. № 29, 1850103 (2018) – **journal paper**
16. S.J. Waters, *Electron Beam Induced Damage and Helium Accumulation in Lithium Metatitanate Ceramic Breeder Materials*, Ph.D. thesis, Univ. Sheffield, 2021 – **abstract of thesis**
17. R.S. Barnes, *A theory of swelling and gas release for reactor materials*, J. Nucl. Mater. № 11, 135-148 (1964) – **journal paper**
18. W. Chubb et al., *Fission gas swelling of refractory nuclear fuels*, Mater. Sci. Eng. № 9, 293-300 (1972) – **journal paper**
19. R. Bullough, B. L. Eyre, and K. Krishan, *Cascade damage effects on the swelling of irradiated materials*, Proc. R. Soc. Lond. A № 346, 81-102 (1975) – **journal paper**
20. L. Thomé et al., *Radiation effects in nuclear ceramics*, Adv. Mater. Sci. Eng., 905474 (2012) – **journal paper**
21. S.J. Zinkle, *Fundamental radiation effects parameters in metals and ceramics*, Radiat. Eff. Defects Solids № 148, 447-477 (1999) – **journal paper**
22. D.I. Shlimas, D. B. Borgekov, A. L. Kozlovskiy, and M. V. Zdorovets, *Synthesis and structural and strength properties of $xLi_2_{22}ZrO_3_{33}-(1-x)MgO$ ceramics-materials for blankets*, Materials № 16, 5176 (2023) – **journal paper**

23. B. Abyshev, D. I. Shlimas, M. V. Zdorovets, Y. K. Arshamov, and A. L. Kozlovskiy, *Study of radiation resistance to helium swelling of Li₂ZrO₃/LiO and Li₂ZrO₃ ceramics*, Crystals № 12, 384 (2022) – **journal paper**
24. D. I. Shlimas, A. A. Khametova, A. L. Kozlovskiy, and M. V. Zdorovets, *Experiments on high-temperature irradiation of Li₂ZrO₃/MgLi₂ZrO₄ ceramics by He²⁺ ions*, Ceramics № 7, 1260-1274 (2024) – **journal paper**
25. E. Getto et al., *Void swelling and microstructure evolution at very high damage level in self-ion irradiated ferritic-martensitic steels*, J. Nucl. Mater. № 480, 159-176 (2016) – **journal paper**
26. J. Lei et al., *Mechanism study on gas-based reduction swelling behavior of ultra-high grade pellets*, J. Mater. Res. Technol. (2023) – **journal paper**
27. D. A. H. Hanaor et al., *Solution based synthesis of mixed-phase materials in the Li₂TiO₃-Li₄SiO₄ system*, J. Nucl. Mater. № 456, 151-161 (2015) – **journal paper**
28. Y. Wang et al., *Synthesis of the biphasic mixture of Li₂TiO₃-Li₄SiO₄ and its irradiation performance*, J. Eur. Ceram. Soc. № 36, 4107-4113 (2016) – **journal paper**
29. S. Ogawa et al., *Li vaporization property of two-phase material of Li₂TiO₃ and Li₂SiO₃ for tritium breeder*, Fusion Eng. Des. № 98, 1859-1863 (2015) – **journal paper**
30. D. L. Baldwin and G. W. Hollenberg, *Measurements of tritium and helium in fast neutron irradiated lithium ceramics using high temperature vacuum extraction*, J. Nucl. Mater. № 141, 305-310 (1986) – **journal paper**
31. N. Nita, R. Schaeublin, and M. Victoria, *Impact of irradiation on the microstructure of nanocrystalline materials*, J. Nucl. Mater. № 329, p. 953-957 (2004) – **journal paper**
32. A. Panghal et al., *Structural assessment and irradiation response of La₂Zr₂O₇ pyrochlore: impact of irradiation temperature and ion fluence*, J. Alloys Compd. № 862, 158556 (2021) – **journal paper**

А.А. Хаметова^{1,2}, Д.И. Шлимас^{1,2}, Ш.Г. Гиниятова², А.Л. Козловский^{*1,2,3}

¹Қатты дене физикасы зертханасы, Қазақстан Республикасы Энергетика министрлігі ядролық физика институты, Алматы, Қазақстан

²Инженерлік бейіндегі зертхана, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

³«Химиялық процестер және өнеркәсіптік экология» кафедрасы, Қ.И. Сәтбаев атындағы ҚазҰТЗУ, Алматы, Қазақстан

*Хат алмасуға арналған автор: kozlovskiy.a@inp.kz; Tel.: +7-702-441-3368; Fax: +7-702-441-3368

Литий мета-цирконаты негізіндегі керамикалардың беткі қабаттарындағы ендірілген гелийдің термиялық-индукцияланған диффузиялық механизмдерін зерттеу

Аңдатпа. Зерттеудің мақсаты – жоғары температуралық сәулелену кезінде ендірілген гелийдің диффузиясымен байланысты литий мета-цирконаты негізіндегі керамикалардың беткі қабаттарының деструкция процестеріне жылулық әсердің ықпалын анықтау, сондай-ақ аз концентрациядағы магний оксиді қосымшасының диффузиялық механизмдерді тежей

алатын әсерін бағалау. Мұндай типтегі керамикаға қызығушылық, ең алдымен, тритийді өндіру және жинақтау үшін литий құрамындағы керамикалардың түрлерін кеңейту мүмкіндігімен, сондай-ақ жоғары температуралық пайдалану режимдеріне тән деграациялық процестерге тұрақтылығын арттырумен және нейтрондардың литиймен ядролық реакциясы нәтижесінде пайда болатын гелий тәрізді бөліну өнімдерін жинақтаумен байланысты. Наноиндентация әдісін пайдаланып (иондардың қозғалыс траекториясы бойымен және бүйірлік жарылыс бойынша тереңдігін өлшеу арқылы) жүргізілген зерттеулерге сәйкес, сәулелену температурасының жоғарылауы зақымданған қабаттың қалыңдығының артуына әкелетіні анықталды, бұл өзгеріс гелийдің термиялық әсерлер есебінен ішке қарай диффузиялануымен байланысты. Жоғары температуралық сәулелену кезінде беткі қабаттың беріктігінің төмендеуі кристалдық құрылымның деформациялық бұрмалануының артуы және оның ісінуімен байланысты құрылымдық өзгерістерге негізделген, бұл әсіресе жоғары дозалы сәулелену жағдайында айқын байқалады. Синтез кезінде литий құрамындағы керамикаларға қосымша заттың концентрациясын арттыру арқылы литий мета-цирконатының құрылымдық ерекшеліктерінің өзгеруі зақымданған қабаттың беріктік жоғалтуға төзімділігін арттырып қана қоймай, жоғары температуралық сәулелену кезінде керамикалардағы диффузиялық қабаттың қалыңдығын азайтуға да әкеледі.

Түйінді сөздер: гелий диффузиясы; литий құрамындағы керамикалар; бланкеттер; радиациялық зақымданулар; гелийден ісіну

А.А. Хаметова^{1,2}, Д.И. Шлимас^{1,2}, Ш.Г. Гиниятова², А.Л. Козловский^{*1,2,3}

¹Лаборатория физики твердого тела, Институт ядерной физики Министерства энергетики Республики Казахстан, Алматы, Казахстан

²Лаборатория инженерного профиля, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

³Кафедра «Химические процессы и промышленная экология», КазННТУ им. К.И. Сатпаева, Алматы, Казахстан

*Автор для корреспонденции: kozlovskiy.a@inp.kz; Tel.: +7-702-441-3368; Fax: +7-702-441-3368

Изучение термически – индуцированных диффузионных механизмов имплантированного гелия в приповерхностных слоях керамик на основе метацирконата лития

Аннотация. Цель данного исследования заключается в определении влияния термического воздействия на процессы деструкции приповерхностных слоев керамик на основе метацирконата лития, связанных с диффузией имплантированного гелия, а также определение влияния допанта оксида магния в малых концентрациях на сдерживание диффузионных механизмов при высокотемпературном облучении. Интерес к данному типу керамик обусловлен в первую очередь возможностью расширения типов литийсодержащих керамик для производства и накопления трития, а также увеличением стабильности к деграационным процессам, характерным для высокотемпературных режимов эксплуатации, а также накопления продуктов деления ядерных реакций нейтронов с литием в виде гелия. Согласно проведенным

исследованиям с применением метода наноиндентирования по глубине (измерений вдоль траектории движения ионов на боковом сколе) было установлено, что увеличение температуры облучения приводит к увеличению толщины поврежденного слоя, изменение которой обусловлено эффектами диффузии гелия вглубь за счет термических эффектов. Разупрочнение приповерхностного слоя при высокотемпературном облучении обусловлено структурными изменениями, связанными с увеличением деформационного искажения кристаллической структуры и ее набухания, которое наиболее выражено при высокодозном облучении. При этом изменения структурных особенностей метацирконата лития за счет увеличения концентрации допанта при синтезе литийсодержащих керамик, приводит не только к увеличению устойчивости к разупрочнению поврежденного слоя, но и уменьшению толщины диффузионного слоя в керамиках при высокотемпературном облучении.

Ключевые слова: диффузия гелия; литийсодержащие керамики; бланкеты; радиационные повреждения; гелиевое набухание

References

1. V. Samarina, T. Skufina, and D. Ušakov, *Alternative energy sources: opportunities, experience and prospects of the Russian regions in the context of global trends*, Int. J. Energy Econ. Policy № 8, p. 140-147 (2018)
2. S. Moka et al., *Alternative fuels: an overview of current trends and scope for future*, Renew. Sustain. Energy Rev. № 32, p. 697-712 (2014)
3. M.S. Chowdhury et al., *Current trends and prospects of tidal energy technology*, Environ. Dev. Sustain. № 23, p. 8179-8194 (2021)
4. U. Schumacher, *Status and problems of fusion reactor development*, Naturwissenschaften № 88, p. 102-112 (2001)
5. M. Abdou et al., *Physics and technology considerations for the deuterium–tritium fuel cycle and conditions for tritium fuel self-sufficiency*, Nucl. Fusion № 61, 013001 (2020)
6. J. Rapp, *The challenges of plasma material interactions in nuclear fusion devices and potential solutions*, Fusion Sci. Technol. № 72, p. 211-221 (2017)
7. Y. Zhang et al., *Tritium release behavior and application of a release model for the neutron-irradiated biphasic lithium ceramics*, Fusion Eng. Des. 206, 114593 (2024)
8. P. Blynskiy et al., *Experiments on tritium generation and yield from lithium ceramics during neutron irradiation*, Int. J. Hydrogen Energy № 46, 9186-9192 (2021)
9. T. Kulsartov et al., *Thermal desorption of tritium and helium from lithium ceramics $Li_2_{22}TiO_3_{33} + 5mol\% TiO_2_{22}$ after neutron irradiation*, J. Nucl. Mater. № 585, 154609 (2023)
10. X. Gao et al., *Composition design and preparation of lithium lead titanate ($Li_2_{22}Pb_x_{xx}Ti_{1-x}\{1-x\}O_3_{33}$, $0.1 < x < 0.9$): A novel tritium breeding ceramic*, Nucl. Mater. Energy № 38, 101608 (2024)
11. A. Roy et al., *Cluster dynamics simulations of tritium and helium diffusion in lithium ceramics*, J. Nucl. Mater. № 592, 154970 (2024)
12. T. V. Kulsartov et al., *Tritium migration in the materials proposed for fusion reactors: $Li_2_{22}TiO_3_{33}$ and beryllium*, J. Nucl. Mater. № 442, S740-S745 (2013)
13. T. Kulsartov et al., *Features of helium and tritium release from $Li_2_{22}TiO_3_{33}$ ceramic pebbles under neutron irradiation*, Materials № 16, 5903 (2023)

14. M.C. Billone, *Thermal and tritium transport in Li₂_22O and Li₂_22ZrO₃_33*, J. Nucl. Mater. № 233, 1462-1466 (1996)
15. K.Li et al., *Tritium adsorption in the lithium vacancy of Li₂_22ZrO₃_33: A first principles study*, Int. J. Mod. Phys. № 29, 1850103 (2018)
16. S.J. Waters, *Electron Beam Induced Damage and Helium Accumulation in Lithium Metatitanate Ceramic Breeder Materials*, Ph.D. thesis, Univ. Sheffield, 2021
17. R.S. Barnes, *A theory of swelling and gas release for reactor materials*, J. Nucl. Mater. № 11, 135-148 (1964)
18. W. Chubb et al., *Fission gas swelling of refractory nuclear fuels*, Mater. Sci. Eng. № 9, 293-300 (1972)
19. R. Bullough, B. L. Eyre, and K. Krishan, *Cascade damage effects on the swelling of irradiated materials*, Proc. R. Soc. Lond. A № 346, 81-102 (1975)
20. L. Thomé et al., *Radiation effects in nuclear ceramics*, Adv. Mater. Sci. Eng., 905474 (2012)
21. S.J. Zinkle, *Fundamental radiation effects parameters in metals and ceramics*, Radiat. Eff. Defects Solids № 148, 447-477 (1999)
22. D.I. Shlimas, D. B. Borgekov, A. L. Kozlovskiy, and M. V. Zdorovets, *Synthesis and structural and strength properties of xLi₂_22ZrO₃_33-(1-x)MgO ceramics-materials for blankets*, Materials № 16, 5176 (2023)
23. B. Abyshev, D.I. Shlimas, M. V. Zdorovets, Y. K. Arshamov, and A. L. Kozlovskiy, *Study of radiation resistance to helium swelling of Li₂_22ZrO₃_33/LiO and Li₂_22ZrO₃_33 ceramics*, Crystals № 12, 384 (2022)
24. D. I. Shlimas, A. A. Khametova, A. L. Kozlovskiy, and M. V. Zdorovets, *Experiments on high-temperature irradiation of Li₂_22ZrO₃_33/MgLi₂_22ZrO₄_44 ceramics by He²⁺ ions*, Ceramics № 7, 1260-1274 (2024)
25. E. Getto et al., *Void swelling and microstructure evolution at very high damage level in self-ion irradiated ferritic-martensitic steels*, J. Nucl. Mater. № 480, 159-176 (2016)
26. J. Lei et al., *Mechanism study on gas-based reduction swelling behavior of ultra-high grade pellets*, J. Mater. Res. Technol. (2023)
27. D. A. H. Hanaor et al., *Solution based synthesis of mixed-phase materials in the Li₂_22TiO₃_33-Li₄_44SiO₄_44 system*, J. Nucl. Mater. № 456, 151-161 (2015)
28. Y. Wang et al., *Synthesis of the biphasic mixture of Li₂_22TiO₃_33-Li₄_44SiO₄_44 and its irradiation performance*, J. Eur. Ceram. Soc. № 36, 4107-4113 (2016)
29. S. Ogawa et al., *Li vaporization property of two-phase material of Li₂_22TiO₃_33 and Li₂_22SiO₃_33 for tritium breeder*, Fusion Eng. Des. № 98, 1859-1863 (2015)
30. D. L. Baldwin and G. W. Hollenberg, *Measurements of tritium and helium in fast neutron irradiated lithium ceramics using high temperature vacuum extraction*, J. Nucl. Mater. № 141, 305-310 (1986)
31. N. Nita, R. Schaeublin, and M. Victoria, *Impact of irradiation on the microstructure of nanocrystalline materials*, J. Nucl. Mater. № 329, p. 953-957 (2004)
32. A. Panghal et al., *Structural assessment and irradiation response of La₂_22Zr₂_22O₇_77 pyrochlore: impact of irradiation temperature and ion fluence*, J. Alloys Compd. № 862, 158556 (2021)

Information about the authors:

A.A. Khametova – PhD, doctoral student of the department of «Nuclear physics, new materials and technologies», L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

D.I. Shlimas – PhD, lecturer – researcher of the department of «Nuclear physics, new materials and technologies», L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Sh.G. Giniyatova – PhD, lecturer – researcher of the department of «Nuclear physics, new materials and technologies», L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

A.L. Kozlovskiy – PhD, head of the laboratory of solid state physics, the Astana branch of the Institute of Nuclear Physics of the Ministry of Energy of the Republic of Kazakhstan, Kazakhstan.

А.А. Хаметова – PhD, «Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар» кафедрасының докторанты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

Д.И. Шлимас – PhD, «Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар» кафедрасының оқытушысы – ғылыми қызметкері, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

Ш.Г. Гиниятова – к.ф.-м.н., «Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар» кафедрасының оқытушысы – ғылыми қызметкер, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

А.Л. Козловский – PhD докторы, Қазақстан Республикасы Энергетика министрлігі ядролық физика институтының Астана филиалы, қатты дене физикасы зертханасының меңгерушісі, Қазақстан.

А.А. Хаметова – PhD, докторант кафедрасы «Ядерной физики, новых материалов и технологий», Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

Д.И. Шлимас – PhD, преподаватель – исследователь кафедрасы «Ядерной физики, новых материалов и технологий», Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

Ш.Г. Гиниятова – к.ф.-м.н., преподаватель – исследователь кафедрасы «Ядерной физики, новых материалов и технологий», Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

А.Л. Козловский – PhD, заведующий лаборатории физики твердого тела, Астанинский филиал Института ядерной физики Министерства энергетики Республики Казахстан, Казахстан.



Copyright: © 2025 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



IRSTI 44.31.39
Scientific article

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-150-1-32-47>

Effect of strontium doping on structural and electrical conductivity of $\text{BaTi}_{0.8}\text{Zr}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$ cathode materials for solid oxide fuel cell

Abul Kalam Azad*¹, Lukman Ahmed Omeiza¹

¹Faculty of Integrated Technologies, Universiti Brunei Darussalam, Jalan Tungku Link, Gadong BE1410, Brunei Darussalam

* Correspondence: lukahmed378@gmail.com

Abstract. Cathode materials are crucial for the efficient operation of solid oxide fuel cell (SOFC), serving as a key component for the oxygen reduction reaction (ORR). Cobalt-containing cathode have shown good performance in terms of electronic conductivity and ORR kinetics. However, they suffer from significant drawbacks, including high cost, and instability at high operating temperatures of SOFC. Thus, there is an increasing need to investigate cobalt-free alternatives that can overcome these challenges. In this study, cobalt-free $\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Ti}_{0.8}\text{Zr}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$ (BSTZ0, BSTZ25, and BSTZ50; $x = 0, 0.25, 0.5$) cathode materials were synthesized via traditional solid-state reaction techniques. The synthesized samples were characterized using X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM), to analyse their structural properties, and surface morphology. Electrical conductivity of the synthesised materials measured in air revealed promising results, with BSTZ0, BSTZ25, and BSTZ50 exhibiting activation energy (E_a) of 0.25 eV, 0.45 eV, and 0.48 eV, respectively. X-ray diffraction analysis confirmed that all compositions crystallize in the tetragonal P4/mmm space group. Findings from this investigation indicate that the synthesized Sr-doped $\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Ti}_{0.8}\text{Zr}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$ materials exhibit favourable electrical conductivity, and are promising candidates for SOFC cathode.

Keywords: electrical conductivity; SOFC; cathode materials; cobalt-free; ORR

Received 18.01.2025 Revised 17.02.2025. Accepted 25.02.2025. Available online 25.03.2025

¹*the corresponding author

1. Introduction

The development of solid oxide fuel cell (SOFC) represents a significant advancement in energy conversion technologies. This is primarily due to their high efficiency and flexibility in using various fuels. SOFC is a clean and sustainable means of energy generation when hydrogen is used as the fuel source [1]. Thus, addressing the environmental concerns associated with fossil fuel resources. Among the critical components of SOFC, the cathode plays a vital role in determining the overall cell performance. Cathode material must exhibit high electrical conductivity, chemical stability, and favourable reaction kinetics for the oxygen reduction reaction (ORR) [2–4]. Recent studies focused on enhancing the properties of cathode materials through various doping strategies. The incorporation of strontium (Sr) into barium titanate (BaTiO_3) has gained a lot of attention. Strontium doping has been shown to improve the dielectric properties and electrical conductivity of these materials, making them more suitable for high-temperature applications [5–9]. Barium titanate (BaTiO_3) is a well-known perovskite oxide that exhibits excellent ferroelectric and dielectric properties, which can be further optimized through the substitution of Sr ions. The introduction of Sr into the BaTiO_3 lattice modifies the structural characteristics, electrical conductivity, and thermal stability [10,11]. Several studies have revealed that Sr-doped barium titanate (BST) ceramics can achieve a high dielectric constant with a low dissipation factor [11–14]. Furthermore, the incorporation of Zr into BaTiO_3 matrix, as in $\text{BaTi}_{0.8}\text{Zr}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$, has been reported to enhance the ionic conductivity, which is crucial for the efficient operation of SOFC [15,16]. Figure 1 illustrates a typical SOFC, and its various components.

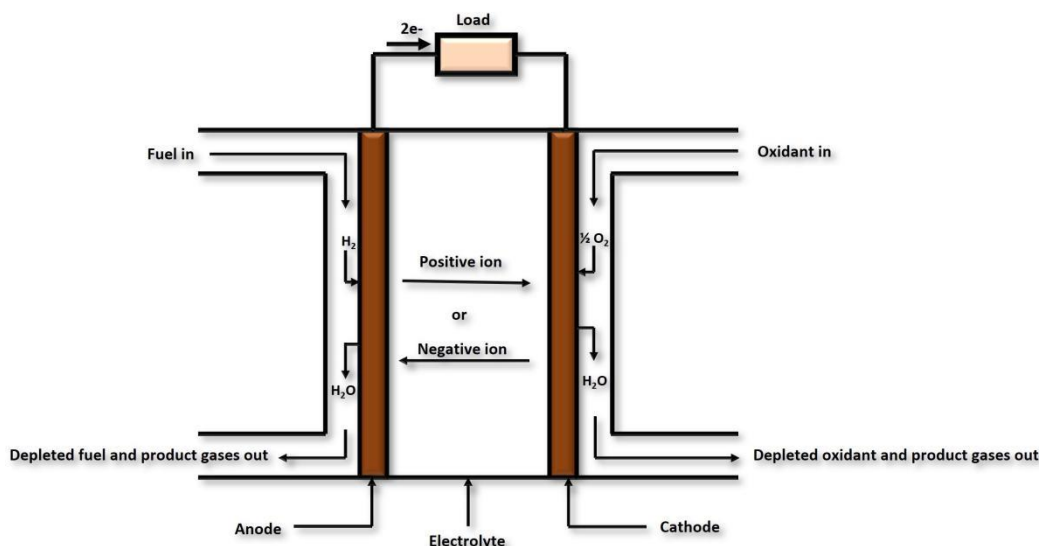


Figure 1. Typical SOFC and its various components [17].

In this study, structural and electrical properties of cobalt-free $\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Ti}_{0.8}\text{Zr}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$ (BSTZ0, BSTZ25, and BSTZ50; $x = 0, 0.25, 0.5$) were investigated. These materials can help overcome

the high costs associated with cobalt-containing cathode materials in SOFC [18,19]. Optimizing its properties through controlled doping can lead to improved performance metrics, such as enhanced electrical conductivity and thermal stability [20,21]. Additionally, the ratio of doping and the resultant microstructural characteristics can significantly affect the electrochemical performance of the cathode, necessitating a thorough investigation [22–24]. Cobalt-containing cathode materials have been reported to have poor linear thermal elongation, thus resulting in compatibility issues with commonly used electrolytes (yttria-stabilized zirconia and gadolinium-doped ceria). Cobalt-free BSTZ0, BSTZ25, and BSTZ50 were synthesized and investigated as potential cathode materials for SOFC in the present study. The influence of Sr doping on $\text{BaTi}_{0.8}\text{Zr}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$ series was studied. Key parameters, such as electrical conductivity and activation energy, were analyzed and compared with existing cobalt-free cathode materials.

2. Experimental

Cobalt-free $\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Ti}_{0.8}\text{Zr}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$ (BSTZ0, BSTZ25, and BSTZ50; $x = 0, 0.25, 0.5$) was synthesised via solid state reaction techniques, and analysed as potential cathode materials for SOFC. Stoichiometric amounts of the precursors of SrCO_3 , BaCO_3 , ZrO_2 , and Ti_2O_3 were weighed and thoroughly mixed using an agate mortar and pestle for 2 hours under ethanol as a grinding medium to ensure homogeneity. The resulting mixture was dried and calcined at 1000 °C for 10 hours in air, followed by intermediate grinding. This was carried out to ensure complete reaction and phase formation. The calcined powders were pressed into pellets using a uniaxial press under a pressure of 5 MPa, with polyvinyl alcohol (PVA) as a binder. BSTZ0, BSTZ25, and BSTZ50 pellets were sintered at 1200 °C for 10 hours in air, followed by natural cooling to room temperature.

The phase purity and crystal structure of the synthesized BSTZ0, BSTZ25, and BSTZ50 samples were analysed using X-ray diffraction (Bruker D8 Advance) at a 2θ range of 20 to 80° with a step size of 0.02°. Chekcell was used to confirm the phase composition, and lattice cell parameters [25,26]. Microstructure of the sintered samples was examined using a scanning electron microscope (SEM). Energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS) was performed to verify the elemental distribution within the samples. The electrical conductivity of BSTZ0, BSTZ25, and BSTZ50 samples was measured using a DC four-probe technique. Platinum paste was coated on both sides of the sintered pellets to act as current collectors, followed by heating at 900 °C for 1 hour to ensure good contact. The electrical conductivity measurements were conducted in air over a temperature range of 400 to 1000 °C.

3. Results and discussion

3.1. Structural investigations of $\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Ti}_{0.8}\text{Zr}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$ (BSTZ0, BSTZ25, and BSTZ50; $x = 0, 0.25, 0.5$)

Figure 2 shows the XRD analysis of BSTZ0, BSTZ25, and BSTZ50 powders at room temperature. XRD pattern of the synthesized cathode material confirms its crystalline nature

and phase purity. Diffraction peaks were indexed via chekcell to a tetragonal structure, with the P4/mm-123 space group. Obtained peak positions confirm with reference pattern PDF-01-089-821 (P4/mmm-123). The sharp and intense peaks observed in the diffraction pattern indicate high crystallinity in the material. This property is desirable for solid oxide SOFC applications, as it enhances ionic and electronic conductivity. Table 1 gives the lattice cell parameters for all compositions. The absence of additional peaks indicates the successful doping of Sr into the crystal lattice of $BaTi_{0.8}Zr_{0.2}O_{3-\delta}$, maintaining the structural integrity of the parent lattice [27].

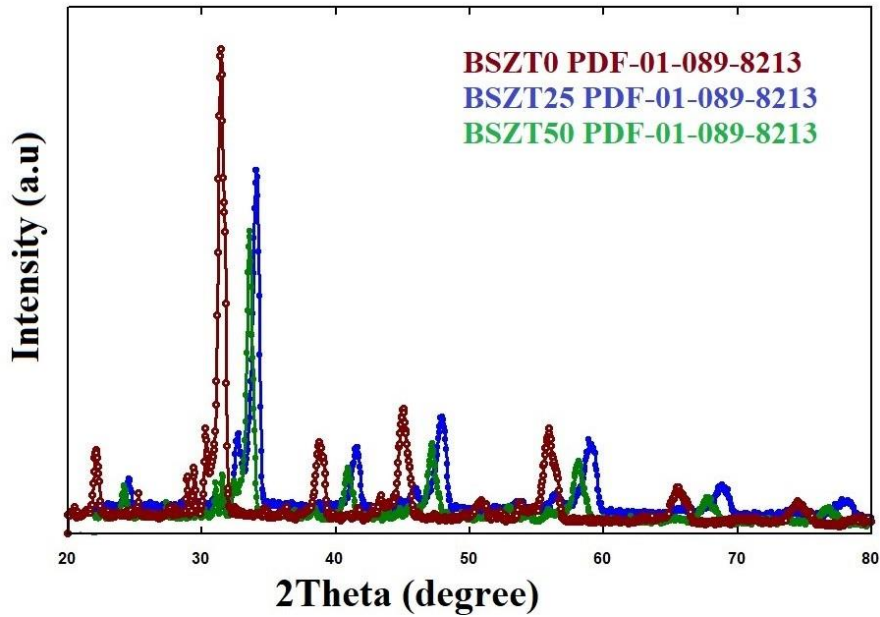


Figure 2. XRD diffraction pattern of BSTZ0, BSTZ25, and BSTZ50.

Table 1. Lattice cell parameters for all compositions

Composition	Space group	Cell parameters	Cell Volume
BSZT0	Tetragonal-P4/mmm (123)	a=4.00186 Å, c=3.99347 Å	63.96 Å ³
BSZT25	Tetragonal-P4/mmm (123)	a=4.00678 Å, c=3.99347 Å	64.39 Å ³
BSZT50	Tetragonal-P4/mmm (123)	a=3.94470 Å, c=3.96985 Å	61.77 Å ³

3.2. SEM-EDS Analysis

Surface morphology and elemental composition of BSTZ0, BSTZ25, and BSTZ50 cathode materials were examined using scanning electron microscopy (SEM) coupled with energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS). SEM micrographs of all compositions revealed a porous microstructure with

uniformly distributed particles. Figure 3 shows the SEM analysis of the synthesised samples. BSTZ0 exhibited slightly larger grain sizes compared to BSTZ25, and BSTZ50, suggesting that the incorporation of Sr influenced the sintering behaviour. All the samples showed good porosity, ensuring efficient charge transport [28,29]. EDS spectra confirmed the presence of all the expected elements (Ba, Sr, Ti, Zr, and O) in each composition. The SEM-EDS analysis confirms that BSTZ0, BSTZ25, and BSTZ50 cathode materials exhibit the desired morphological and compositional characteristics, making them suitable candidates for SOFC applications. O-KA, Ba-LA, and Sr-L in the EDS profile refer to specific characteristic X-ray emissions from the elements present in the sample. Figure 4 illustrates the EDS investigation of the synthesised cathode materials.

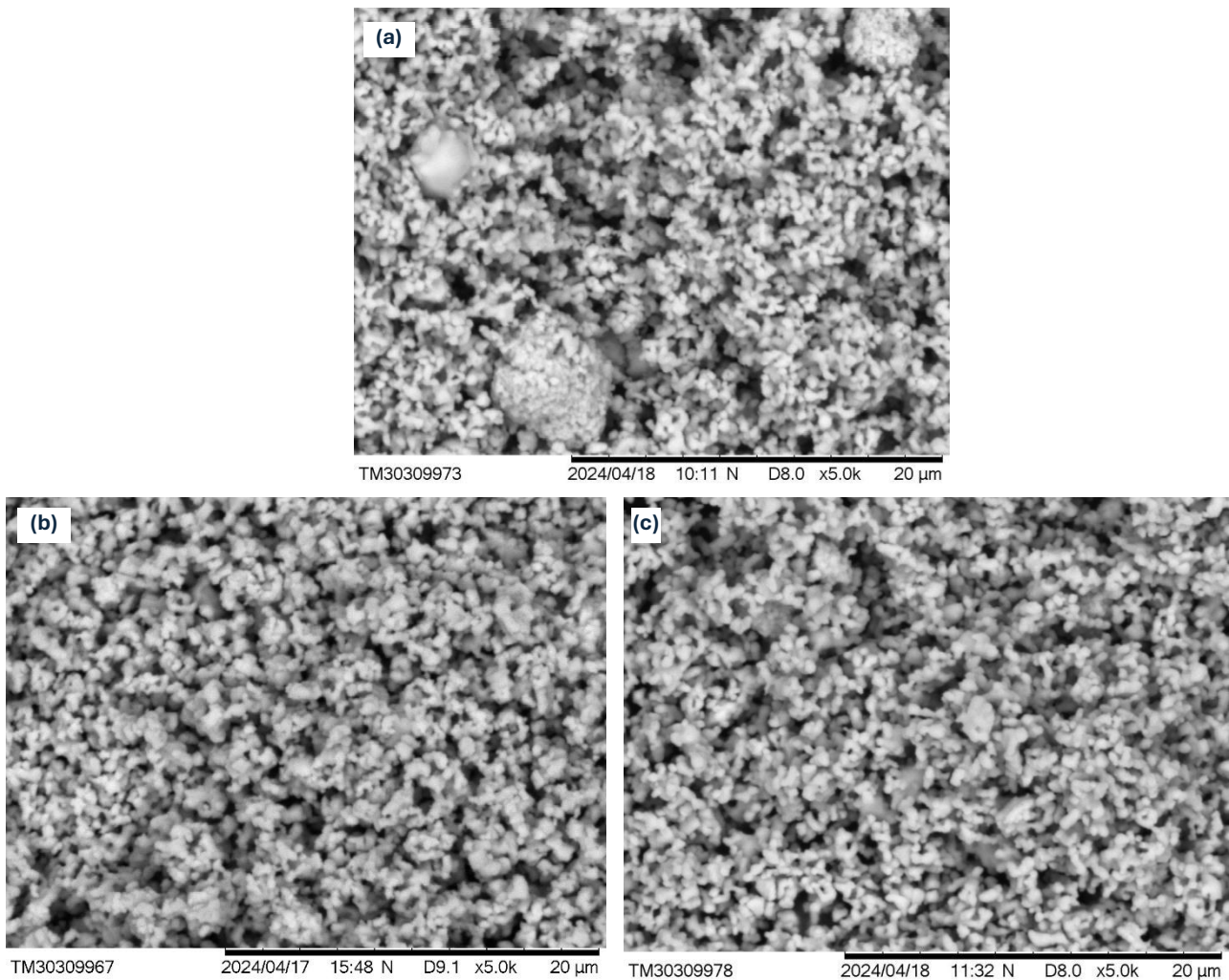


Figure 3. SEM analysis for: (a) BSTZ0, (b) BSTZ25, and (c) BSTZ50.

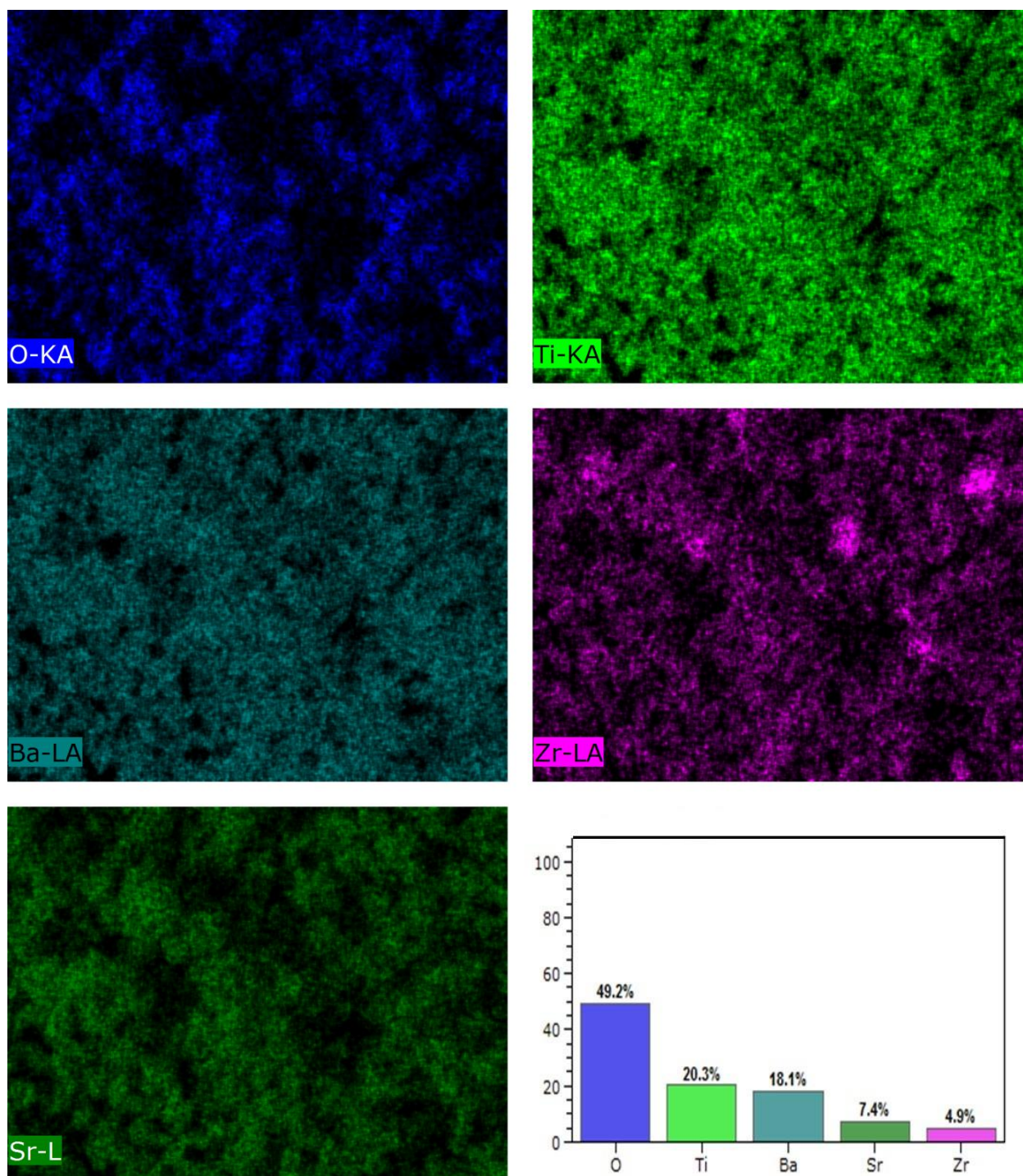


Figure 4. EDS investigation showing elemental distribution of BSZT25.
Electrical Conductivity

The electrical conductivity of BSZT0, BSZT25, and BSZT50 was investigated in air, at a temperature of 600 to 1000 °C. Temperature dependence of the conductivity can be calculated in accordance with Equation 1 [18,28]:

The symbol “ σ ” represent the electrical conductivity in Equation 1, σ_0 is the pre-exponential factor, E_a is the activation energy, K_B is the Boltzmann constant, and T is the absolute temperature. Arrhenius plots (Figure 5) for BSZT0, BSZT25, and BSZT50 revealed distinct activation energy values of 0.25 eV, 0.45 eV, and 0.48 eV, respectively. These values indicate the influence of strontium doping on the electrical conduction mechanism [31-33]. BSZT0 exhibited the lowest activation energy ($E_a=0.2eV$), suggesting superior electronic conductivity compared to the doped samples. This could be attributed to the higher intrinsic mobility of charge carriers in the undoped composition. For BSZT25 ($E_a=0.45eV$), and BSZT50 ($E_a=0.48 eV$) the increased activation energies imply a stronger dependence of conductivity on temperature. This behaviour is likely associated with the enhanced ionic conduction pathways and defect chemistry introduced by strontium doping [34–36]. Doped samples exhibited a balance between ionic and electronic conduction, which is desirable for SOFC cathode materials. At high temperatures ($> 700\text{ }^\circ\text{C}$), all compositions demonstrated sufficient electrical conductivity to meet the requirements for SOFC cathodes ($\sigma > 0.1\text{ S/cm}$). However, BSZT0 showed the highest conductivity over the entire temperature range, while BSZT50 exhibited the lowest, reflecting the trade-off between electronic and ionic conduction mechanisms. Findings from this study suggest that strontium doping modifies the conduction pathways and energy barriers for charge transport. Thus, the optimal composition may depend on the operating temperature and specific SOFC design requirements. Further studies on long-term stability and compatibility with electrolytes are needed to fully assess their applicability. Table 2 gives an overview of the E_a obtained in this study with those reported in related literature on cobalt-free cathode materials development for SOFC.

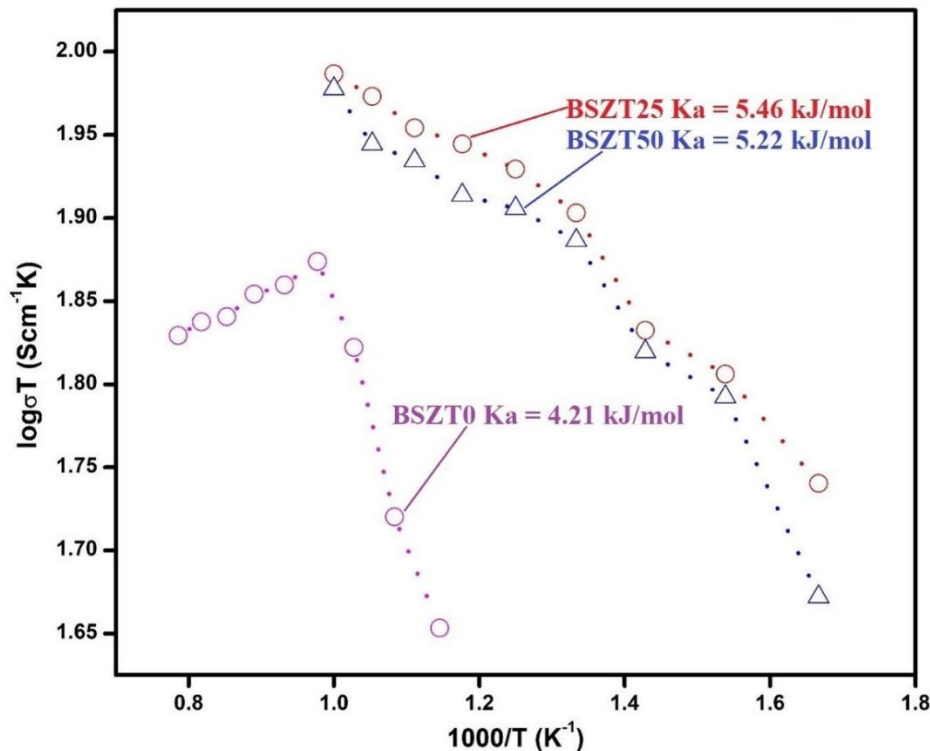


Figure 5. Arrhenius plots of electrical conductivity of BSZT0, BSZT25, and BSZT50

Table 2. Comparison of the activation energy obtained in this study with related literature.

Composition	Temperature (°C)	E_a (eV)	Ref.
BSZT0	600 – 1000	0.25	This study
BSZT25	600 – 1000	0.45	This study
BSZT50	600 – 1000	0.48	This study
$(Nd_{0.9}La_{0.1})_2(Ni_{0.74}Cu_{0.21}Al_{0.05})O_{4+\delta}$	100 – 400	0.12	[37]
$Nd_{0.5}Sr_{0.5}Mn_{0.5}Cr_{0.5}O_{3-\delta}$	400 – 600	0.21	[20]

4. Conclusion

Effect of strontium doping on the structural and electrical properties of $BaTi_{0.8}Zr_{0.2}O_{3-\delta}$ cobalt-free cathode materials was investigated in this study. Strontium substitution into the $BaTi_{0.8}Zr_{0.2}O_{3-\delta}$ lattice was confirmed through structural analysis, revealing slight lattice distortions without compromising phase stability. These modifications played a crucial role in enhancing the materials' electrical properties. Electrical conductivity of undoped BSZT0 and strontium-doped BSZT25 and BSZT50 was investigated in air, with activation energies of 0.25 eV, 0.45 eV, and 0.48 eV, respectively. While BSZT0 exhibited the highest conductivity due to superior electronic conduction, the doped compositions demonstrated a favourable balance between ionic and electronic conduction, crucial for SOFC performance. All samples surpassed the conductivity threshold required for SOFC cathodes at high operating temperatures. Results of this study highlight Sr-doped $BaTi_{0.8}Zr_{0.2}O_{3-\delta}$ as potential cobalt-free cathode materials for SOFC applications. Thus, offering an environmentally and economically viable alternative. Future studies are needed to understand the long-term stability and electrochemical performance in practical SOFC configurations.

Authors' contributions

Abul Kalam Azad – original draft writing, investigation

Lukman Ahmed Omeiza – conceptualization, reviewing, investigation

Conflict of interest statement

The authors have no conflict of interest to declare, as all sources used were duly cited and acknowledged.

Acknowledgement

The work was fulfilled in the frame of targeted financing program No. BR21882359, supported by the Ministry of Science and Higher Education of Kazakhstan.

References

1. D.A. Osinkin, *Some aspects of hydrogen oxidation in solid oxide fuel cell: A brief historical overview*, *Electrochemical Materials and Technologies* 2023;2:20232018, <https://doi.org/10.15826/elmattech.2023.2.018> – **journal paper**

2. S. Hussain, L. Yangping, *Review of solid oxide fuel cell materials: cathode, anode, and electrolyte*, Energy Transitions 2020;4:113–26, <https://doi.org/10.1007/s41825-020-00029-8> – **journal paper**
3. Y. Dong, J. Li, *Oxide Cathodes: Functions, Instabilities, Self Healing, and Degradation Mitigations*, Chemical Reviews 2023;123:811–33, <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.2c00251> – **journal paper**
4. T. Matsui, M. Komoto, H. Muroyama, K. Kishida, H. Inui, K. Eguchi, *Degradation factors in (La,Sr)(Co,Fe)O₃-cathode/Sm₂O₃-CeO₂ interlayer/Y₂O₃-ZrO₂ electrolyte system during operation of solid oxide fuel cells*, Journal Power Sources 2016;312:80–5, <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2016.02.052> – **journal paper**
5. H. Zhao, W. A. Lam, L. Sheng, L. Wang, P. Bai, Y. Yang et al., *Cobalt-Free Cathode Materials: Families and their Prospects*, Advanced Energy Materials 2022;12, <https://doi.org/10.1002/aenm.202103894> – **journal paper**
6. L. Wang, R. Merkle, Y.A. Mastrikov, E.A. Kotomin, J. Maier, *Oxygen exchange kinetics on solid oxide fuel cell cathode materials-general trends and their mechanistic interpretation*, Journal of Materials Research 2012;27:2000–8, <https://doi.org/10.1557/jmr.2012.186> – **journal paper**
7. J. Richter, P. Holtappels, T. Graule, T. Nakamura, L.J. Gauckler, *Materials design for perovskite SOFC cathodes*, Monatshefte Für Chemie - Chemical Monthly 2009;140:985–99, <https://doi.org/10.1007/s00706-009-0153-3> – **journal paper**
8. M.Z. Ahmad, S.H. Ahmad, R.S. Chen, A.F. Ismail, R. Hazan, N.A. Baharuddin, *Review on recent advancement in cathode material for lower and intermediate temperature solid oxide fuel cells application*, International Journal of Hydrogen Energy 2022;47:1103–20, <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.10.094> – **journal paper**
9. S.K. Burnwal, S. Bharadwaj, P. Kistaiah, *Review on MIEC Cathode Materials for Solid Oxide Fuel Cells*, Journal of Molecular and Engineering Materials 2016;04:1630001, <https://doi.org/10.1142/S2251237316300011> – **journal paper**
10. S. Baratov, E. Filonova, A. Ivanova, M.B. Hanif, M. Irshad, M.Z. Khan et al., *Current and further trajectories in designing functional materials for solid oxide electrochemical cells: A review of other reviews*, Journal of Energy Chemistry 2024;94:302–31, <https://doi.org/10.1016/j.jechem.2024.02.047> – **journal paper**
11. Y. Gao, M. Zhang, M. Fu, W. Hu, H. Tong, Z. Tao, *A comprehensive review of recent progresses in cathode materials for Proton-conducting SOFCs*, Energy Reviews 2023;2:100038, <https://doi.org/10.1016/j.enrev.2023.100038> – **journal paper**
12. M.A. Yattoo, S.J. Skinner, *Ruddlesden-Popper phase materials for solid oxide fuel cell cathodes: A short review*. MaterialsToday: Proceedings 2022;56:3747–54, <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.12.537> – **journal paper**
13. N. Shah, X. Xu, J. Love, H. Wang, Z. Zhu, L. Ge, *Mitigating thermal expansion effects in solid oxide fuel cell cathodes: A critical review*, Journal of Power Sources 2024;599:234211. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2024.234211> – **journal paper**
14. A.K. Yadav, S. Sinha, A. Kumar, *Advancements in composite cathodes for intermediate-temperature solid oxide fuel cells: A comprehensive review*, International Journal of Hydrogen Energy 2024;59:1080–93, <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.02.124> – **journal paper**
15. A. Samreen, M.S. Ali, M. Huzaifa, N. Ali, B. Hassan, F. Ullah et al., *Advancements in Perovskite-Based Cathode Materials for Solid Oxide Fuel Cells: A Comprehensive Review*, The Chemical Record 2024;24, <https://doi.org/10.1002/tcr.202300247> – **journal paper**

16. P. Kaur, K. Singh, *Review of perovskite-structure related cathode materials for solid oxide fuel cells*, Ceramics International 2020;46:5521–35, <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.11.066> – **journal paper**
17. L.A. Omeiza, A. Kabyshev, K. Bekmyrza, K.A. Kuterbekov, M. Kubenova, Z.A. Zhumadilova et al., *Constraints in sustainable electrode materials development for solid oxide fuel cell: A brief review*, Materials Science for Energy Technologies 2025;8:32–43, <https://doi.org/10.1016/j.mset.2024.07.001> – **journal paper**
18. R. Vinoth Kumar, A.P. Khandale, *A review on recent progress and selection of cobalt-based cathode materials for low temperature-solid oxide fuel cells*, Renewable and Sustainable Energy Reviews 2022;156:111985, <https://doi.org/10.1016/j.rser.2021.111985> – **journal paper**
19. Y. Jia, X. Lan, H. Fan, *Recent advances in cathode materials for solid oxide fuel cell*, Ceramics International 2025, <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2025.01.229> – **journal paper**
20. L.A. Omeiza, M.M. Rahman, K.A. Kuterbekov, A. Kabyshev, K. Bekmyrza, M. Kubenova et al., *Novel sr-doped $NdMn_{0.5}Cr_{0.5}O_{3-\delta}$ electrodes for symmetrical solid oxide fuel cell*, Electrochemistry Communications 2024;164, <https://doi.org/10.1016/j.elecom.2024.107730> – **journal paper**
21. L.A. Omeiza, A. Kabyshev, K. Bekmyrza, M. Kubenova, K.A. Kuterbekov, A. Baratova et al., *Strontium-Doped $BaZr_{0.8}Ni_{0.2}O_{3-\delta}$ Cobalt-Free Cathode Materials for Solid Oxide Fuel Cell*, International Journal of Precision Engineering and Manufacturing-Green Technology 2024, <https://doi.org/10.1007/s40684-024-00667-z> – **journal paper**
22. M. Kiani, M.H. Paydar, *$SrCo_{0.8}Fe_{0.1}Ga_{0.1}O_{3-\delta}$ (SCFG) cathodes incorporated with $Sm_{0.2}Ce_{0.8}O_{1.9}$ (SDC) for IT-SOFCs application*, Journal of Materials Science: Materials in Electronics 2023;34:1366, <https://doi.org/10.1007/s10854-023-10773-4> – **journal paper**
23. P.V.C.K. Subhashini, K.V.D. Rajesh, *Development and Characterization of $Ba_{0.5}Sr_{0.5}(Co_{1-x}Mg_x)_{0.2}Fe_{0.8}O_{3-\delta}$ Cathode Materials System for Low-Temperature Solid Oxide Fuel Cell (LT-SOFC) Applications*, Transactions of the Indian Institute of Metals 2023;76:59–65, <https://doi.org/10.1007/s12666-022-02699-y> – **journal paper**
24. M. Wu, H. Cai, F. Jin, N. Sun, J. Xu, L. Zhang et al., *Assessment of cobalt-free ferrite-based perovskite $Ln_{0.5}Sr_{0.5}Fe_{0.9}Mo_{0.1}O_{3-\delta}$ ($Ln = \text{lanthanide}$) as cathodes for IT-SOFCs*. Journal of the European Ceramic Society 2021;41:2682–90, <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2020.11.035> – **journal paper**
25. L.A. Omeiza, K.A. Kuterbekov, A. Kabyshev, K. Bekmyrza, M. Kubenova, S. Afroze et al., *Limitations and trends on cobalt-free cathode materials development for intermediate-temperature solid oxide fuel cell- an updated technical review*, Emergent Mater 2024, <https://doi.org/10.1007/s42247-024-00737-7> – **journal paper**
26. L.A. Omeiza, Md. M. Rahman, Y. Subramanian, U. Mamudu, J. Taweekun, A. K. Azad, *Synthesis, Structure and Characterization of $Sr_{0.9}Y_{0.1}Ti_{1-x}V_xO_3$ ($x = 0.1, 0.2$) Anodes for Solid Oxide Fuel Cell*, Journal of Advanced Research in Micro and Nano Engineering 2024;19:107–14, <https://doi.org/10.37934/armne.19.1.107114> – **journal paper**
27. K. Yan, R. Fan, M. Chen, K. Sun, L. Yin, H. Li et al., *Perovskite $(La,Sr)MnO_3$ with tunable electrical properties by the Sr-doping effect*, Journal of Alloys and Compounds 2015;628:429–32. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2014.12.137> – **journal paper**
28. A. Nenning, S. Reuter, R. Schlesinger, H. Summerer, R. Ramehsan, L. Lindenthal et al., *Surface and Defect Chemistry of Porous $La_{0.6}Sr_{0.4}FeO_{3-\delta}$ Electrodes on Polarized Three-Electrode Cells*, Journal of

The Electrochemical Society 2022;169:094508, <https://doi.org/10.1149/1945-7111/ac908b> – **journal paper**

29. S. Ji, W. Kim, *Is Coating Oxide on Porous Metal Thin-Film for Low-Temperature Solid Oxide Fuel Cell Cathode a Panacea for Performance Enhancement*, International Journal of Precision Engineering and Manufacturing 2022;23:445–51, <https://doi.org/10.1007/s12541-022-00628-z> – **journal paper**

30. L.A. Omeiza, A.M. Abdalla, B. Wei, A. Dhanasekaran, Y. Subramanian, S. Afroze et al., *Nanostructured Electrocatalysts for Advanced Applications in Fuel Cells*, Energies (Basel) 2023;16:1876, <https://doi.org/10.3390/en16041876> – **journal paper**

31. C-Y. Liu, S-Y. Tsai, C-T. Ni, K-Z. Fung, *Effect of Strontium-Doped Lanthanum Vanadate on Crystal Structure, Conductivity and Vanadium Valence State of a $La_{1-x}Sr_xVO_3$ Anode in a Reducing Environment*, Journal of Electronic Materials 2017;46:2301–8, <https://doi.org/10.1007/s11664-016-5268-9> – **journal paper**

32. N. Jaiswal, N.K. Singh, D. Kumar, O. Parkash, *Effect of strontium (Sr) doping on the conductivity of ceria*, Journal of Power Sources 2012;202:78–84, <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2011.10.140> – **journal paper**

33. S.P. Jiang, *Development of lanthanum strontium manganite perovskite cathode materials of solid oxide fuel cells: a review*, Journal of Materials Science 2008;43:6799–833, <https://doi.org/10.1007/s10853-008-2966-6> – **journal paper**

34. A.G. Harzand, M. Golmohammad, S.A. Zargar, A.M. Khachatourian, A. Nemati, *Study of structural, electrical, and electrochemical properties of $Sr_{3-x}Pr_xFe_{1.8}Co_{0.2}O_{7-\delta}$ cathode for IT-SOFCs*, Solid State Ionics 2024;404:116421, <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2023.116421> – **journal paper**

35. M. Saccoccio, C. Jiang, Y. Gao, D. Chen, F. Ciucci, *Nb-substituted $PrBaCo_2O_{5+\delta}$ as a cathode for solid oxide fuel cells: A systematic study of structural, electrical, and electrochemical properties*, International Journal of Hydrogen Energy 2017;42:19204–15, <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.06.056> – **journal paper**

36. N. Dasgupta, R. Krishnamoorthy, K.T. Jacob, *Crystal structure, thermal expansion and electrical conductivity of $Nd_{0.7}Sr_{0.3}Fe_{1-x}Co_xO_3$ ($0 \leq x \leq 0.8$)*, Materials Science and Engineering: B 2002;90:278–86, [https://doi.org/10.1016/S0921-5107\(02\)00058-2](https://doi.org/10.1016/S0921-5107(02)00058-2) – **journal paper**

37. Q. Zhou, Y. Gao, F. Wang, D. An, Y. Li, Y. Zou et al., *Novel cobalt-free cathode material ($Nd_{0.9}La_{0.1}J_2(Ni_{0.74}Cu_{0.21}Al_{0.05})O_{4+\delta}$) for intermediate-temperature solid oxide fuel cells*. Ceramics International 2015;41:639–43, <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2014.08.114> – **journal paper**

Абул Калам Азад^{1*}, Лукман Ахмед Омейза¹

¹*Біріктірілген технологиялар факультеті, Бруней-Даруссалама университеті,*

Джалан Тунгу Линк, Гадонг BE1410, Бруней-Даруссалам;

** Хат алмасуға арналған автор: lukahmed378@gmail.com*

Қатты оксидті отын элементтеріне арналған $BaTi_{0.8}Zr_{0.2}O_{3-\delta}$ катодты материалдардың құрылымы мен электр өткізгіштігіне стронций қоспасының әсері

Аңдатпа. Катодты материалдар оттегінің тотықсыздану реакциясының (ORR) негізгі компоненті ретінде қызмет ететін қатты оксидті отын ұяшығының (SOFC) тиімді жұмыс

істеуі үшін өте маңызды. Құрамында кобальт бар катод электрондық өткізгіштік пен ORR кинетикасы бойынша жақсы өнімділік көрсетті. Дегенмен, олардың айтарлықтай кемшіліктері бар, соның ішінде жоғары құны және жоғары SOFC жұмыс температурасында тұрақсыздық. Осылайша, осы мәселелерді шеше алатын кобальтсыз баламаларды зерттеу қажеттілігі артып келеді. Бұл жұмыста кобальтсыз катодты материалдар $Ba_{1-x}Sr_xTi_{0.8}Zr_{0.2}O_{3-\delta}$ (BSTZ0, BSTZ25 және BSTZ50; $x = 0, 0.25, 0.5$) дәстүрлі қатты фазалық реакция әдістерімен синтезделді. Синтезделген үлгілер олардың құрылымдық қасиеттері мен бетінің морфологиясын талдау үшін рентгендік дифракция (XRD) және сканерлеуші электронды микроскопиямен (SEM) сипатталды. Ауада өлшенген синтезделген материалдардың электр өткізгіштігі перспективалы нәтижелер көрсетті: BSTZ0, BSTZ25 және BSTZ50 сәйкесінше 0,25 эВ, 0,45 эВ және 0,48 эВ активтену энергияларын (Ea) көрсетті. Рентгендік дифракциялық талдау барлық композициялардың P4/mmm тетрагональды кеңістік тобында кристалданатынын растады. Бұл зерттеудің нәтижелері синтезделген Sr-қоспаланған $BaTi_{0.8}Zr_{0.2}O_{3-\delta}$ материалдарының жақсы электрөткізгіштікке ие және SOFC катодына перспективалы үміткерлер екенін көрсетеді.

Түйінді сөздер: электр өткізгіштік; SOFC; катодты материалдар; кобальтсыз; ORR

Абул Калам Азад*¹, Лукман Ахмед Омейза¹

¹*Факультет интегрированных технологий, Университет Бруней-Даруссалама,*

Джалан Тунгу Линк, Гадонг BE1410, Бруней-Даруссалам;

** Автор для корреспонденции: lukahmed378@gmail.com*

Влияние легирования стронцием на структуру и электропроводность катодных материалов $BaTi_{0.8}Zr_{0.2}O_{3-\delta}$ для твердооксидных топливных элементов

Аннотация. Катодные материалы имеют решающее значение для эффективной работы твердооксидного топливного элемента (SOFC), служа ключевым компонентом реакции восстановления кислорода (ORR). Кобальтсодержащий катод показал хорошие характеристики с точки зрения электронной проводимости и кинетики ORR. Однако они имеют существенные недостатки, в том числе высокую стоимость и нестабильность при высоких рабочих температурах SOFC. Таким образом, существует растущая потребность в исследовании альтернатив, не содержащих кобальт, которые могут решить эти проблемы. В данной работе безкобальтовые катодные материалы $Ba_{1-x}Sr_xTi_{0.8}Zr_{0.2}O_{3-\delta}$ (BSTZ0, BSTZ25 и BSTZ50; $x = 0, 0.25, 0.5$) были синтезированы традиционными методами твердофазных реакций. Синтезированные образцы были охарактеризованы методами рентгеновской дифракции (РФА), сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) для анализа их структурных свойств и морфологии поверхности. Электропроводность синтезированных материалов, измеренная на воздухе, показала многообещающие результаты: BSTZ0, BSTZ25 и BSTZ50 показали энергию активации (Ea) 0,25 эВ, 0,45 эВ и 0,48 эВ соответственно. Рентгеноструктурный анализ подтвердил, что все составы кристаллизуются в тетрагональной пространственной группе P4/mmm. Результаты этого исследования показывают, что синтезированные материалы $BaTi_{0.8}Zr_{0.2}O_{3-\delta}$, легированные Sr, обладают хорошей электропроводностью и являются перспективными кандидатами для катода SOFC.

Ключевые слова: электропроводность; SOFC; катодные материалы; не содержащий кобальт; ORR

References

1. D.A. Osinkin, *Some aspects of hydrogen oxidation in solid oxide fuel cell: A brief historical overview*, *Electrochemical Materials and Technologies* 2023;2:20232018, <https://doi.org/10.15826/elmattech.2023.2.018>
2. S. Hussain, L. Yangping, *Review of solid oxide fuel cell materials: cathode, anode, and electrolyte*, *Energy Transitions* 2020;4:113–26, <https://doi.org/10.1007/s41825-020-00029-8>
3. Y. Dong, J. Li, *Oxide Cathodes: Functions, Instabilities, Self Healing, and Degradation Mitigations*, *Chemical Reviews* 2023;123:811–33, <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.2c00251>
4. T. Matsui, M. Komoto, H. Muroyama, K. Kishida, H. Inui, K. Eguchi, *Degradation factors in (La,Sr)(Co,Fe)O₃-cathode/Sm₂O₃-CeO₂ interlayer/Y₂O₃-ZrO₂ electrolyte system during operation of solid oxide fuel cells*, *Journal Power Sources* 2016;312:80–5, <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2016.02.052>
5. H. Zhao, W. A. Lam, L. Sheng, L. Wang, P. Bai, Y. Yang et al., *Cobalt-Free Cathode Materials: Families and their Prospects*, *Advanced Energy Materials* 2022;12, <https://doi.org/10.1002/aenm.202103894>
6. L. Wang, R. Merkle, Y.A. Mastrikov, E.A. Kotomin, J. Maier, *Oxygen exchange kinetics on solid oxide fuel cell cathode materials-general trends and their mechanistic interpretation*, *Journal of Materials Research* 2012;27:2000–8, <https://doi.org/10.1557/jmr.2012.186>
7. J. Richter, P. Holtappels, T. Graule, T. Nakamura, L.J. Gauckler, *Materials design for perovskite SOFC cathodes*, *Monatshefte Für Chemie - Chemical Monthly* 2009;140:985–99, <https://doi.org/10.1007/s00706-009-0153-3>
8. M.Z. Ahmad, S.H. Ahmad, R.S. Chen, A.F. Ismail, R. Hazan, N.A. Baharuddin, *Review on recent advancement in cathode material for lower and intermediate temperature solid oxide fuel cells application*, *International Journal of Hydrogen Energy* 2022;47:1103–20, <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.10.094>
9. S.K. Burnwal, S. Bharadwaj, P. Kistaiah, *Review on MIEC Cathode Materials for Solid Oxide Fuel Cells*, *Journal of Molecular and Engineering Materials* 2016;04:1630001, <https://doi.org/10.1142/S2251237316300011>
10. S. Baratov, E. Filonova, A. Ivanova, M.B. Hanif, M. Irshad, M.Z. Khan et al., *Current and further trajectories in designing functional materials for solid oxide electrochemical cells: A review of other reviews*, *Journal of Energy Chemistry* 2024;94:302–31, <https://doi.org/10.1016/j.jechem.2024.02.047>
11. Y. Gao, M. Zhang, M. Fu, W. Hu, H. Tong, Z. Tao, *A comprehensive review of recent progresses in cathode materials for Proton-conducting SOFCs*, *Energy Reviews* 2023;2:100038, <https://doi.org/10.1016/j.enrev.2023.100038>
12. M.A. Yattoo, S.J. Skinner, *Ruddlesden-Popper phase materials for solid oxide fuel cell cathodes: A short review*. *Materials Today: Proceedings* 2022;56:3747–54, <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.12.537>
13. N. Shah, X. Xu, J. Love, H. Wang, Z. Zhu, L. Ge, *Mitigating thermal expansion effects in solid oxide fuel cell cathodes: A critical review*, *Journal of Power Sources* 2024;599:234211. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2024.234211>

14. A.K. Yadav, S. Sinha, A. Kumar, *Advancements in composite cathodes for intermediate-temperature solid oxide fuel cells: A comprehensive review*, International Journal of Hydrogen Energy 2024;59:1080–93, <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.02.124>
15. A. Samreen, M.S. Ali, M. Huzafa, N. Ali, B. Hassan, F. Ullah et al., *Advancements in Perovskite-Based Cathode Materials for Solid Oxide Fuel Cells: A Comprehensive Review*, The Chemical Record 2024;24, <https://doi.org/10.1002/tcr.202300247>
16. P. Kaur, K. Singh, *Review of perovskite-structure related cathode materials for solid oxide fuel cells*, Ceramics International 2020;46:5521–35, <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.11.066>
17. L.A. Omeiza, A. Kabyshev, K. Bekmyrza, K.A. Kuterbekov, M. Kubenova, Z.A. Zhumadilova et al., *Constraints in sustainable electrode materials development for solid oxide fuel cell: A brief review*, Materials Science for Energy Technologies 2025;8:32–43, <https://doi.org/10.1016/j.mset.2024.07.001>
18. R. Vinoth Kumar, A.P. Khandale, *A review on recent progress and selection of cobalt-based cathode materials for low temperature-solid oxide fuel cells*, Renewable and Sustainable Energy Reviews 2022;156:111985, <https://doi.org/10.1016/j.rser.2021.111985>
19. Y. Jia, X. Lan, H. Fan, *Recent advances in cathode materials for solid oxide fuel cell*, Ceramics International 2025, <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2025.01.229>
20. L.A. Omeiza, M.M. Rahman, K.A. Kuterbekov, A. Kabyshev, K. Bekmyrza, M. Kubenova et al., *Novel sr-doped $NdMn_{0.5}Cr_{0.5}O_{3-\delta}$ electrodes for symmetrical solid oxide fuel cell*, Electrochemistry Communications 2024;164, <https://doi.org/10.1016/j.elecom.2024.107730>
21. L.A. Omeiza, A. Kabyshev, K. Bekmyrza, M. Kubenova, K.A. Kuterbekov, A. Baratova et al., *Strontium-Doped $BaZr_{0.8}Ni_{0.2}O_{3-\delta}$ Cobalt-Free Cathode Materials for Solid Oxide Fuel Cell*, International Journal of Precision Engineering and Manufacturing-Green Technology 2024, <https://doi.org/10.1007/s40684-024-00667-z>
22. M. Kiani, M.H. Paydar, *$SrCo_{0.8}Fe_{0.1}Ga_{0.1}O_{3-\delta}$ (SCFG) cathodes incorporated with $Sm_{0.2}Ce_{0.8}O_{1.9}$ (SDC) for IT-SOFCs application*, Journal of Materials Science: Materials in Electronics 2023;34:1366, <https://doi.org/10.1007/s10854-023-10773-4>
23. P.V.C.K. Subhashini, K.V.D. Rajesh, *Development and Characterization of $Ba_{0.5}Sr_{0.5}(Co_{1-x}Mg_x)_{0.2}Fe_{0.8}O_{3-\delta}$ Cathode Materials System for Low-Temperature Solid Oxide Fuel Cell (LT-SOFC) Applications*, Transactions of the Indian Institute of Metals 2023;76:59–65, <https://doi.org/10.1007/s12666-022-02699-y>
24. M. Wu, H. Cai, F. Jin, N. Sun, J. Xu, L. Zhang et al., *Assessment of cobalt-free ferrite-based perovskite $Ln_{0.5}Sr_{0.5}Fe_{0.9}Mo_{0.1}O_{3-\delta}$ ($Ln = \text{lanthanide}$) as cathodes for IT-SOFCs*. Journal of the European Ceramic Society 2021;41:2682–90, <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2020.11.035>
25. L.A. Omeiza, K.A. Kuterbekov, A. Kabyshev, K. Bekmyrza, M. Kubenova, S. Afroze et al., *Limitations and trends on cobalt-free cathode materials development for intermediate-temperature solid oxide fuel cell- an updated technical review*, Emergent Mater 2024, <https://doi.org/10.1007/s42247-024-00737-7>
26. L.A. Omeiza, Md. M. Rahman, Y. Subramanian, U. Mamudu, J. Taweekun, A. K. Azad, *Synthesis, Structure and Characterization of $Sr_{0.9}Y_{0.1}Ti_{1-x}V_xO_3$ ($x = 0.1, 0.2$) Anodes for Solid Oxide Fuel Cell*, Journal of Advanced Research in Micro and Nano Engineering 2024;19:107–14, <https://doi.org/10.37934/armne.19.1.107114>

27. K. Yan, R. Fan, M. Chen, K. Sun, L. Yin, H. Li et al., *Perovskite (La,Sr)MnO3 with tunable electrical properties by the Sr-doping effect*, Journal of Alloys and Compounds 2015;628:429–32. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2014.12.137>
28. A. Nenning, S. Reuter, R. Schlesinger, H. Summerer, R. Ramehsan, L. Lindenthal et al., *Surface and Defect Chemistry of Porous La_{0.6}Sr_{0.4}FeO_{3-δ} Electrodes on Polarized Three-Electrode Cells*, Journal of The Electrochemical Society 2022;169:094508, <https://doi.org/10.1149/1945-7111/ac908b>
29. S. Ji, W. Kim, *Is Coating Oxide on Porous Metal Thin-Film for Low-Temperature Solid Oxide Fuel Cell Cathode a Panacea for Performance Enhancement*, International Journal of Precision Engineering and Manufacturing 2022;23:445–51, <https://doi.org/10.1007/s12541-022-00628-z>
30. L.A. Omeiza, A.M. Abdalla, B. Wei, A. Dhanasekaran, Y. Subramanian, S. Afroze et al., *Nanostructured Electrocatalysts for Advanced Applications in Fuel Cells*, Energies (Basel) 2023;16:1876, <https://doi.org/10.3390/en16041876>
31. C-Y. Liu, S-Y. Tsai, C-T. Ni, K-Z. Fung, *Effect of Strontium-Doped Lanthanum Vanadate on Crystal Structure, Conductivity and Vanadium Valence State of a La_{1-x}Sr_xVO₃ Anode in a Reducing Environment*, Journal of Electronic Materials 2017;46:2301–8, <https://doi.org/10.1007/s11664-016-5268-9>
32. N. Jaiswal, N.K. Singh, D. Kumar, O. Parkash, *Effect of strontium (Sr) doping on the conductivity of ceria*, Journal of Power Sources 2012;202:78–84, <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2011.10.140>
33. S.P. Jiang, *Development of lanthanum strontium manganite perovskite cathode materials of solid oxide fuel cells: a review*, Journal of Materials Science 2008;43:6799–833, <https://doi.org/10.1007/s10853-008-2966-6>
34. A.G. Harzand, M. Golmohammad, S.A. Zargar, A.M. Khachatourian, A. Nemati, *Study of structural, electrical, and electrochemical properties of Sr_{3-x}Pr_xFe_{1.8}Co_{0.2}O_{7-δ} cathode for IT-SOFCs*, Solid State Ionics 2024;404:116421, <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2023.116421>
35. M. Saccoccio, C. Jiang, Y. Gao, D. Chen, F. Ciucci, *Nb-substituted PrBaCo₂O_{5+δ} as a cathode for solid oxide fuel cells: A systematic study of structural, electrical, and electrochemical properties*, International Journal of Hydrogen Energy 2017;42:19204–15, <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.06.056>
36. N. Dasgupta, R. Krishnamoorthy, K.T. Jacob, *Crystal structure, thermal expansion and electrical conductivity of Nd_{0.7}Sr_{0.3}Fe_{1-x}Co_xO₃ (0≤x≤0.8)*, Materials Science and Engineering: B 2002;90:278–86, [https://doi.org/10.1016/S0921-5107\(02\)00058-2](https://doi.org/10.1016/S0921-5107(02)00058-2)
37. Q. Zhou, Y. Gao, F. Wang, D. An, Y. Li, Y. Zou et al., *Novel cobalt-free cathode material (Nd_{0.9}La_{0.1})₂(Ni_{0.74}Cu_{0.21}Al_{0.05})O_{4+δ} for intermediate-temperature solid oxide fuel cells*. Ceramics International 2015;41:639–43, <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2014.08.114>

Information about the authors:

Abul Kalam Azad – corresponding author, PhD – senior lecturer in the Faculty of Integrated Technologies, Universiti Brunei Darussalam, Jalan Tungku Link, Gadong BE1410, Brunei Darussalam

Lukman Ahmed Omeiza – PhD – researcher of the Faculty of Integrated Technologies, Universiti Brunei Darussalam, Jalan Tungku Link, Gadong BE1410, Brunei Darussalam

Абул Калам Азад – автор для корреспонденции, PhD – старший преподаватель факультета интегрированных технологий, Университет Брунея-Даруссалама, Джалан Тунгку Линк, Гадонг BE1410, Бруней-Даруссалам

Лукман Ахмед Омейза – PhD – исследователь факультета интегрированных технологий, Университет Брунея-Даруссалама, Джалан Тунгку Линк, Гадонг BE1410, Бруней-Даруссалам

Абул Калам Азад – хат-хабар авторы, PhD – Брунея-Даруссалама университетінің біріктірілген технологиялар факультетінің аға оқытушысы, Джалан Тунгку Линк, Гадонг BE1410, Бруней-Даруссалам

Лукман Ахмед Омейза – PhD, Брунея-Даруссалама университетінің біріктірілген технологиялар факультетінің ғылыми қызметкері, Джалан Тунгку Линк, Гадонг BE1410, Бруней-Даруссалам



Copyright: © 2025 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



МРНТИ 30.19.15

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-150-1-48-59>

Научная статья

Об определении инвариантов трехмерного тензора упругости в анизотропных средах

Н. Испулов¹, А. Кадир Рахимун², А. Кисабекова^{*3}, А. Жумабеков¹, Г. Алпысова⁴,
Л. Ельгинова³

¹НАО «Торайгыров университет», Павлодар, Казахстан

²Шукур университет бизнес администрирования, Шукур, Пакистан

³НАО «Павлодарский педагогический университет имени Ә.Марғұлан», Павлодар, Казахстан

⁴Карагандинский университет имени Е.Букетова, Караганда, Казахстан

*Автор для корреспонденции: kissabekovaa@gmail.com

Аннотация. Инварианты тензоров упругости включают в себе важнейшие механические свойства материалов, эффективно обобщая и расширяя традиционное понятие «жесткости пружины» на значительно более сложные, многомерные системы. В отличие от простых пружин, где жесткость характеризуется одной константой, тензоры упругости позволяют описывать сложные взаимодействия в материалах с анизотропными свойствами, включая материалы с различными типами симметрии. Эти инварианты являются мощным инструментом для анализа и классификации механических свойств, так как они позволяют учитывать как линейные, так и нелинейные реакции материалов на внешние воздействия. В рамках данной статьи мы используем обобщенное представление Кельвина для параметризации тензора напряжений, что существенно упрощает и делает более наглядным процесс определения влияния различных факторов на тензор упругости. В рамках исследования мы вычисляем инварианты анизотропного тензора упругости, принимая во внимание вращательную симметрию, задаваемую группой $SO(3)$. В результате анализа мы выявили 18 независимых инвариантов, среди которых 5 инвариантов первого порядка, особенно актуальных для изотропных материалов, и 13 инвариантов более высокого порядка. Эти результаты подчеркивают важность и сложность исследования анизотропных материалов и открывают новые перспективы для их механической интерпретации и классификации.

Ключевые слова: анизотропия, инварианты тензора, количественная симметрия, линейная упругость, представление Кельвина

Поступила 13.11.2024 После доработки 2.02.2025 Принята к печати 19.02.2025. Доступно онлайн 25.03.2025

¹ *автор для корреспонденции

Введение

Процесс выявления инвариантов является важным шагом в изучении механических свойств материалов, поскольку позволяет описывать их поведение с высокой степенью точности.

При анализе типов материалов, для которых характерны данные инварианты, мы сосредоточили внимание на изотропных материалах. Это решение было принято с целью продемонстрировать потенциал инвариантов в задачах классификации материалов, что показало их высокую эффективность в данной области. Изотропные материалы, благодаря своей симметрии, служат отличной моделью для начального анализа инвариантов, и выявленные результаты подтверждают значимость инвариантов для понимания их механических характеристик.

Интересным направлением для будущих исследований является разработка более глубокой механической интерпретации этих инвариантов, что позволит не только лучше понять их суть, но и завершить классификацию материалов на их основе. Более детальное изучение анизотропных материалов, а также систем с более сложными свойствами также представляет значительный научный интерес, так как это может привести к новым открытиям в области механики материалов.

В монографии [1] представлены инвариантные соотношения, которые описывают внутреннюю симметрию различных анизотропных сред. Автор доказал, что данные соотношения применимы к уравнениям упругих и электромагнитных волн в различных типах кристаллов, а также отражают общие характеристики решений уравнений движения.

Определение этих инвариантов играет ключевую роль в механике, особенно при реконструкции геометрических характеристик материала. Ряд исследователей [2;3;4;5;6;7] предложили методы для нахождения инвариантов тензора упругости в трёхмерном пространстве, однако их работы зачастую не были направлены на явное выявление всех независимых инвариантов.

В предыдущей статье [8] мы рассмотрели вращение группы $SO(3)$, что дало возможность в настоящей работе определить восемнадцать независимых инвариантов в декартовой системе координат. Эти инварианты были подтверждены как глобальные, что подчеркивает их универсальный характер в контексте различных систем координат.

В данной работе мы ставим перед собой задачу вычисления инвариантов анизотропного тензора упругости с учетом вращательной симметрии, определяемой группой $SO(3)$. Учет этой симметрии позволяет более точно описывать сложные механические свойства материалов, особенно тех, которые обладают анизотропной структурой. Исследование инвариантов, связанных с такими тензорами, открывает путь к более глубокому пониманию поведения материалов при воздействии различных нагрузок, что важно для прогнозирования их реакции на внешние воздействия. Это, в свою очередь, позволит лучше понять, как материалы ведут себя под напряжениями, деформациями и другими воздействиями, что может оказаться полезным для разработки новых материалов с улучшенными механическими характеристиками и повышенной устойчивостью к деформациям.

Материалы и методы

В работе [8, стр. 85] из закона Гука и представления Кельвина мы получили следующие соотношения:

$$\left\{ \begin{array}{l} s'_1 = \frac{s_1+s_2}{2} + \frac{s_1-s_2}{2} \cos 2\theta + \frac{s_6}{\sqrt{2}} \sin 2\theta \\ s'_2 = \frac{s_1+s_2}{2} - \frac{s_1-s_2}{2} \cos 2\theta - \frac{s_6}{\sqrt{2}} \sin 2\theta \\ s'_3 = s_3 \\ s'_4 = s_4 \cos \theta - s_5 \sin \theta \\ s'_5 = s_4 \sin \theta + s_5 \cos \theta \\ s'_6 = \frac{-1}{\sqrt{2}}(s_1 - s_2) \sin 2\theta + s_6 \cos 2\theta \end{array} \right. \quad (1)$$

Далее мы использовали следующие параметры в старой и преобразованной ортогональных системах координат:

$$\left\{ \begin{array}{l} p = \frac{s_1+s_2}{\sqrt{2}}; k = \frac{s_1-s_2}{\sqrt{2}} \\ p' = \frac{s'_1+s'_2}{\sqrt{2}}; k' = \frac{s'_1-s'_2}{\sqrt{2}} \end{array} \right. \quad (2)$$

По аналогии с представлением Кельвина мы положили, что $C_{ij}=C_{ijk}$. Учитывая перестановки, выполненные в (1), переписали C согласно закону Гука:

$$s = Ce \quad (3)$$

где s – тензор напряжений, C – упругость, e – тензор деформаций. Из уравнения (2) мы вывели:

$$C^*=P^{-1}CP \quad (4)$$

где:

$$P = P^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (5)$$

Получили новый тензор упругости, который мы записали C^* , где $\check{C} = C^*$ с $\check{C}_{ij}=C_{ij}^*$. В дальнейшем будем использовать упрощенную форму тензора упругости, представленную здесь.

Эта сокращенная форма помогает нам упростить расчет, и мы получаем:

$$\check{C}' = \begin{pmatrix} R_{2\theta}^t C_1 R_{2\theta} & R_{2\theta}^t C_1 r_\theta \\ r_{2\theta}^t C_2 R_{2\theta} & r_\theta^t C_3 r_\theta \end{pmatrix} \quad (6)$$

Как можно заметить, тензор C разделяется на шесть групп согласно классификации Тинга [9]. При анализе данных он выявил, что инварианты некоторых групп включают компоненты, связанные с различными группами C_k для $k=1,2,3,\dots,6$. Примечательно, что другие исследователи использовали аналогичное разложение, предложенное Тингом, но формулировали преобразования явно, а не в матричной форме.

В статье для выявления и доказательства существования инвариантов тензора упругости использовался метод, основанный на рассмотрении вращательной симметрии группы $SO(3)$. Применение обобщенного представления Кельвина позволило упростить параметризацию тензора напряжений и облегчить анализ инвариантов. Методика включала разложение тензора упругости на неприводимые компоненты, что дало возможность идентифицировать 18 независимых инвариантов. Для доказательства их существования были использованы методы инвариантной теории, опирающиеся на представления группы $SO(3)$, что позволило подтвердить их глобальный характер.

В следующем разделе определим инварианты для каждого из этих преобразований по отдельности. Для каждого компонента C' имеется шесть независимых инвариантов, что позволит более детально изучить их структуру и взаимосвязи.

Результаты и обсуждение

Инварианты C_1'

Трансформация (6) дает нам $C_1' = R_{2\theta}^t C_1 R_{2\theta}$, что можно рассматривать как миниатюру преобразования матрицы 6×6 \check{C}' . Затем мы оценили инварианты \check{C} по сравнению с их той же величиной в C . Запишем:

$$C_1' = \begin{pmatrix} \check{C}_{11} & q_1 \\ q_1^t & a_1 \end{pmatrix} \quad (7)$$

\check{C}_{11} – скаляр, q_1 – вектор и a_1 – матрица 2×2 .

Вычисления дают следующие инварианты:

- Коэффициент \check{C}_{11}
- Длина квадрата

$$q_1^2 = \check{C}_{12}^2 + \check{C}_{13}^2$$

След a_1 приводит к уменьшению матрицы до C_1'

$$tr(a_1) = \check{C}_{22} + \check{C}_{33}$$

Детерминант a_1

$$\det(a_1) = \check{C}_{22} \check{C}_{33} - \check{C}_{23}^2$$

Сумма двух квадратов длины L_1^2 дает для a_1 :

$$L_1^2 = \check{C}_{22}^2 + \check{C}_{33}^2 + 2\check{C}_{23}^2$$

– Детерминант C'_1

$$\det(C'_1) = \check{C}_{11} \check{C}_{22} \check{C}_{33} - 2\check{C}_{12} \check{C}_{13} \check{C}_{23} - \check{C}_{11} \check{C}_{23}^2 - \check{C}_{22} \check{C}_{13}^2 - \check{C}_{33} \check{C}_{12}^2$$

Инварианты C'_3

Трансформация (6) дает нам $C'_3 = r_\theta^t C_3 r_\theta$. Таким же образом мы оценили инварианты \check{C} по сравнению с их той же величиной в C .

Запишем:

$$C'_3 = \begin{pmatrix} a_3 & q_3 \\ q_3^t & \check{C}_{66} \end{pmatrix} \quad (8)$$

\check{C}_{66} – скаляр, q_3 – вектор и a_3 – матрица 2x2.

Вычисления дают следующие инварианты:

– Коэффициент \check{C}_{66}

– Длина квадрата

$$q_3^2 = \check{C}_{46}^2 + \check{C}_{56}^2$$

– След a_3 приводит к уменьшению матрицы до C'_3

$$\text{tr}(a_3) = \check{C}_{44} + \check{C}_{55}$$

– Детерминант a_3

$$\det(a_3) = \check{C}_{44} \check{C}_{55} - \check{C}_{45}^2$$

– Сумма двух квадратов длины L_3^2 дает для a_3 :

$$L_3^2 = \check{C}_{44}^2 + \check{C}_{55}^2 + 2\check{C}_{45}^2$$

– Детерминант C'_3

$$\det(C'_3) = \check{C}_{44} \check{C}_{55} \check{C}_{66} - 2\check{C}_{46} \check{C}_{56} \check{C}_{45} - \check{C}_{44} \check{C}_{56}^2 - \check{C}_{55} \check{C}_{46}^2 - \check{C}_{66} \check{C}_{45}^2$$

– Инварианты C'_2

По подобию, $C_3^t = r_{2\theta}^t C_2^t R_{2\theta}$

Запишем:

$$C_2' = \begin{pmatrix} q_2^{(1)} & a_2 \\ \check{C}_{16} & q_2^{(2)} \end{pmatrix} \quad (9)$$

\check{C}_{16} – скаляр, $q^{3(i)}$ – векторы и a_2 матрица 2×2 .

Вычисления дают следующие инварианты:

– Коэффициент \check{C}_{16}

– Длина квадрата

$$(q_2^{(1)})^2 = \check{C}_{14}^2 + \check{C}_{15}^2$$

Длина квадрата

$$(q_2^{(2)})^2 = \check{C}_{26}^2 + \check{C}_{36}^2$$

– Детерминант a_2

$$\det(a_2) = \check{C}_{24} \check{C}_{35} - \check{C}_{25} \check{C}_{34}$$

Сумма двух квадратов длины L_2^2 дает для a_2

$$L_3^2 = \check{C}_{24}^2 + \check{C}_{25}^2 + \check{C}_{34}^2 + \check{C}_{35}^2$$

– Детерминант C_1'

$$\det(C_3') = \check{C}_{14} (\check{C}_{25} \check{C}_{36} - \check{C}_{26} \check{C}_{35}) + \check{C}_{15} (\check{C}_{26} \check{C}_{34} - \check{C}_{24} \check{C}_{36}) + \check{C}_{16} (\check{C}_{24} \check{C}_{35} - \check{C}_{25} \check{C}_{34})$$

Таким образом, найдены все 18 инвариантов.

Обзор инвариантов

Используя соотношение (4), мы заменяем коэффициенты \check{C}_{ij} по их выражениям, что дает нам следующие инварианты:

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{1}{2} (C_{11} + 2C_{12} + C_{22}) \\ I_2 &= \frac{1}{2} (C_{11} - 2C_{12} + C_{22}) + C_{66} \\ I_3 &= C_{33} \\ I_4 &= C_{44} + C_{55} \\ I_5 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (C_{13} + C_{23}) \end{aligned}$$

$I_1 = 2\Phi_2, I_3 = \Phi_1, I_4 = \Phi_4, \sqrt{2} I_5 = \Phi_3$ – инварианты Тинга. I_2 можно рассматривать как комбинацию двух выражений Тинга Φ_5

$$\begin{aligned} I_{15} &= C_{33}C_{44}C_{55} + 2C_{34}C_{35}C_{45} - C_{44}C_{35}^2 - C_{55}C_{34}^2 - C_{33}C_{45}^2 \\ I_{16} &= \frac{1}{2}(C_{14} - C_{24})^2 + \frac{1}{2}(C_{15} - C_{25})^2 + C_{46}^2 + C_{56}^2 \\ I_{17} &= \frac{1}{\sqrt{2}}[C_{56}(C_{14} - C_{24}) - C_{46}(C_{15} - C_{25})] \\ I_{18} &= C_{36}(C_{15}C_{24} - C_{14}C_{25}) + C_{56}(C_{14}C_{23} - C_{13}C_{24}) \\ &\quad + C_{46}(C_{13}C_{25} - C_{15}C_{23}) \end{aligned}$$

Стоит отметить, что инварианты можно комбинировать, чтобы получить составные инварианты. Это подтверждает существование восемнадцати инвариантов. В следующем разделе рассмотрены их формы для изотропных материалов, таких как волокнистые композиты, которые можно считать изотропными в определённых условиях.

Физический смысл: изотропный случай

Материалы изотропны, когда в тензоре упругости [10] $C_{11}=C_{22}=C_{33}, C_{12}=C_{13}=C_{23}$ and $C_{44}=C_{55}=C_{66}$. Остальные коэффициенты $C_{ij} = 0$.

Мы можем видеть, что $\frac{1}{2}(I_1 - I_4)$ и I_4 соответствуют коэффициентам Ламе соответственно λ и μ . Этих двух инвариантов достаточно для классификации изотропных материалов.

Это доказывает, что эти восемнадцать инвариантов можно использовать для классификации материалов, пока база 297 не станет полезной.

Заключение

В данной работе мы рассмотрели вращение группы $SO(3)$, что позволило нам выявить восемнадцать независимых инвариантов в декартовой системе координат и доказать их существование как глобальных инвариантов. Инварианты первого порядка, а также некоторые квадратичные инварианты второго порядка, были также обнаружены другими исследователями, такими как [4;5;8;11;12]. В рамках нашего исследования мы сосредоточились на изотропном случае, чтобы продемонстрировать, что эти инварианты могут быть полезны для классификации различных типов материалов, ранее в работах [13;14] были рассмотрены похожие исследования в анизотропных случаях. В дальнейшем будет интересно провести механическую интерпретацию этих инвариантов.

Выявленные инварианты представляют собой важный инструмент для анализа механических свойств материалов, но их физическая интерпретация требует дальнейших исследований. В частности, полезно будет провести анализ связи инвариантов с основными характеристиками упругих материалов, такими как жесткость, прочность и

деформационные свойства. Кроме того, необходимо исследовать поведение инвариантов при различных внешних воздействиях, включая термомеханические нагрузки и электромагнитные поля, что позволит расширить их применение в инженерных и технологических задачах.

Инварианты тензоров упругости особенно важны для описания механических свойств анизотропных материалов, таких как:

Композитные материалы, например, углепластики и керамические матрицы, которые обладают направленной прочностью и жесткостью.

Геологические породы, включая сланцы и метаморфические образования, имеющие выраженную анизотропию механических свойств.

Кристаллические материалы с низкой симметрией, такие как монокристаллы кремния или сапфира, где упругие свойства различны в разных направлениях.

Биологические ткани, например, костные структуры, которые демонстрируют направленную жесткость и устойчивость к нагрузкам.

Применение инвариантов для таких материалов позволит лучше классифицировать их механические свойства и прогнозировать поведение под различными нагрузками.

Вклад авторов

Н.А. Испулов, А.Кадыр Рахимун – анализ и математические расчеты, формулировка ключевых целей и задач.

А.А. Кисабекова, А.Ж. Жумабеков – составление черновика рукописи, чтение и редактирование рукописи, утверждение окончательного варианта.

Г.К. Алпысова, Л.А. Ельтинова – чтение и редактирование рукописи с внесением ценных критических замечаний.

Список литературы

1. S.K. Tleukenov, *Matricant Method. Saarbrucken*, LAP LAMBERT Academic Publishing, – 2014. –157 р. – **журнал на англ.языке**
2. M. Olive, B. Kolev, N. Auffray, *Les invariants du tenseur d'élasticité, 22ème congrès français de Mécanique [CFM2015]*, – 2015., – p.01576369 – **журнал на англ.языке**
3. K. Atchonouglo, G. de Saxcé, M. Ban, *2d elasticity tensor invariants, invariants definite positive criteria*, *Advances in Mathematics: Scientific Journal*, – 2021. – pp. 2999–3012 – **журнал на англ.языке**
4. M. Ahmad, *Invariants and structural invariants of the anisotropic elasticity tensor*, *Q. Jl Mech. Appl. Math.*, – 2002. pp. 597–606 – **журнал на англ.языке**
5. A. Norris, *Quadratic invariants of elastic moduli*, *Q. Jl Mech. Appl. Math.*, – 2007. – pp. 367–389 – **журнал на англ.языке**
6. M. Olive, *About Gordan's Algorithm for Binary Forms*, *Found Comput Math*, –2017. – pp. 1407–1466 – **журнал на англ.языке**
7. R. Desmorat, N. Auffray, B. Desmorat and others, *Minimal functional bases for elasticity tensor symmetry classes*, *Journal of Elasticity*, – 2022. – V2 – p.03241501 – **журнал на англ.языке**

8. Abdul Qadir, N.A. Ispulov, A.A. Kissabekova, R.M. Karimova, A. Zh. Zhumabekov, *About the three-dimensional elasticity tensor in anisotropic media*, Bulletin of Toraighyrov University Physics, Mathematics & Computer Science series, – №3 – 2024. – pp. 81-95 – **журнал на англ.языке**

9. T. Ting, *Invariants of anisotropic elastic constants*, The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics, – 1987. – pp. 431–448 – **журнал на англ.языке**

10. S. Forte, M. Vianello, *Symmetry classes for elasticity tensors*, Journal of Elasticity, – 1996. – p. 81–108 – **журнал на англ.языке**

11. W. Thomson, B. Kelvin, *Mathematical and Physical Papers*, Elasticity, Heat, Electro-Magnetism (Paperback), – 2006. – pp. 548 – **журнал на англ.языке**

12. W. Thomson, *Elements of a Mathematical Theory of Elasticity*, Philosophical Transactions, – 1856. – pp. 481-498 – **журнал на англ.языке**

13. A.A. Kurmanov, N.A. Ispulov, Abdul Qadir and others, *Propagation Of Electromagnetic Waves In Stationary Anisotropic Media*, Physica Scripta, 96, Number of article: 085505, DOI: 10.1088/1402-4896/abfe87 – 2021 – **журнал на англ.языке**

14. N.A. Ispulov, M.R. Akhmetsafin, *On non-classical boundary conditions of non-rigid contact during the propagation of thermoelastic waves in anisotropic medium of tetragonal syngony*. Doi.org/ 10.48081/XEYZ6093, Bulletin of Toraighyrov University Physics, Mathematics & Computer Science series – №1 – 2023. – pp. 81-91 – **журнал на англ.языке**

**Н. Испулов¹, А. Кадир Рахимун², А. Кисабекова*³, А. Жумабеков¹, Г. Алпысова⁴,
Л. Ельтинова³**

¹«Торайгыров университет» КеАҚ, Павлодар, Қазақстан

²Шукур бизнес әкімшілік университеті, Шукур, Пәкістан

³«Ә.Марғұлан атындағы Павлодар педагогикалық университеті» КеАҚ, Павлодар, Қазақстан

⁴Е.Бөкетов атындағы Қарағанды университеті, Қарағанды, Қазақстан

*Хат алмасуға арналған автор: kissabekovaa@gmail.com

Анизотроптық орталардағы үш өлшемді серпімділік тензорының инварианттарын анықтау туралы

Аңдатпа. Серпімділік тензорларының инварианттары материалдардың ең маңызды механикалық қасиеттерін инкапсуляциялайды, «серіппелі қаттылық» дәстүрлі тұжырымдамасын әлдеқайда күрделі, көп өлшемді жүйелерге тиімді түрде жалпылайды және кеңейтеді. Қатаңдығы бір константамен сипатталатын қарапайым серіппелерден айырмашылығы, серпімділік тензорлары анизотропты қасиеттері бар материалдардағы, соның ішінде симметрияның әртүрлі типтері бар материалдардағы күрделі әрекеттесулерді сипаттауға мүмкіндік береді. Бұл инварианттар механикалық қасиеттерді талдау және жіктеу үшін қуатты құрал болып табылады, өйткені олар материалдардың сыртқы әсерлерге сызықтық және сызықтық емес реакцияларын есепке алуға мүмкіндік береді. Бұл мақалада кернеу тензоры параметрлеу үшін жалпылама Кельвин көрінісін қолданамыз, ол икемділік тензорына әртүрлі факторлардың әсерін анықтау процесін айтарлықтай жеңілдетеді және көрнекі етеді. Зерттеу барысында $SO(3)$

тобымен берілген айналу симметриясын ескере отырып, анизотропты серпімділік тензорының инварианттарын есептейміз. Талдау нәтижесінде біз 18 тәуелсіз инвариантты анықтадық, оның ішінде 5 бірінші ретті инвариант, әсіресе изотропты материалдарға қатысты және 13 жоғары ретті инвариант. Бұл нәтижелер анизотропты материалдарды зерттеудің маңыздылығы мен күрделілігін көрсетеді және олардың механикалық интерпретациясы мен классификациясының жаңа перспективаларын ашады.

Түйін сөздер: анизотропия, тензор инварианттары, сандық симметрия, сызықтық икемділік, Кельвин көрінісі.

**N. Ispulov¹, A. Qadir Rahimoon², A. Kissabekova^{3*}, A. Zhumabekov¹, G. Alpysova⁴,
L. Yeltinova³**

¹*NJSC «Toraighyrov University», Pavlodar, Kazakhstan*

²*Sukkur IBA University, Sukkur, Pakistan*

³*NJSC «Margulan University», Pavlodar, Kazakhstan*

⁴*Karaganda Buketov University, Karaganda, Kazakhstan*

**Correspondence: kissabekovaa@gmail.com*

On determining invariants of a three-dimensional elasticity tensor in anisotropic media

Abstract. Invariants of elasticity tensors embody the most important mechanical properties of materials, effectively generalizing and extending the traditional concept of "spring stiffness" to much more complex, multidimensional systems. Unlike simple springs, where the stiffness is characterized by a single constant, elasticity tensors allow us to describe complex interactions in materials with anisotropic properties, including materials with different types of symmetry. These invariants are a powerful tool for analyzing and classifying mechanical properties, since they allow us to consider both linear and nonlinear responses of materials to external influences. In this paper, we use the generalized Kelvin representation to parameterize the stress tensor, which significantly simplifies and makes more visual the process of determining the influence of various factors on the elasticity tensor. In this study, we calculate the invariants of the anisotropic elasticity tensor, taking into account the rotational symmetry defined by the $SO(3)$ group. As a result of the analysis, we identified 18 independent invariants, including 5 first-order invariants, especially relevant for isotropic materials, and 13 higher-order invariants. These results highlight the importance and complexity of studying anisotropic materials and open up new perspectives for their mechanical interpretation and classification.

Keywords: anisotropy, tensor invariants, quantitative symmetry, linear elasticity, Kelvin representation.

References

1. S.K. Tleukenov, *Matricant Method. Saarbrücken*, LAP LAMBERT Academic Publishing, – 2014. –157 p.

2. M. Olive, B. Kolev, N. Auffray, *Les invariants du tenseur d'élasticité, 22ème congrès français de Mécanique* [CFM2015], – 2015., – p.01576369
3. K. Atchonouglou, G. de Saxcé, M. Ban, *2d elasticity tensor invariants, invariants definite positive criteria*, *Advances in Mathematics: Scientific Journal*, – 2021. – pp. 2999–3012
4. M. Ahmad, *Invariants and structural invariants of the anisotropic elasticity tensor*, *Q. Jl Mech. Appl. Math.*, – 2002. pp. 597–606
5. A. Norris, *Quadratic invariants of elastic moduli*, *Q. Jl Mech. Appl. Math.*, – 2007. – pp. 367–389
6. M. Olive, *About Gordan's Algorithm for Binary Forms*, *Found Comput Math.*, –2017. – pp. 1407–1466
7. R. Desmorat, N. Auffray, B. Desmorat and others, *Minimal functional bases for elasticity tensor symmetry classes*, *Journal of Elasticity*, – 2022. – V2 – p.03241501
8. Abdul Qadir, N.A. Ispulov, A.A. Kissabekova, R.M. Karimova, A. Zh. Zhumabekov, *About the three-dimensional elasticity tensor in anisotropic media*, *Bulletin of Toraighyrov University Physics, Mathematics & Computer Science series*, – №3 – 2024. – pp. 81-95
9. T. Ting, *Invariants of anisotropic elastic constants*, *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, – 1987. – pp. 431–448
10. S. Forte, M. Vianello, *Symmetry classes for elasticity tensors*, *Journal of Elasticity*, – 1996. – p. 81–108
11. W. Thomson, B. Kelvin, *Mathematical and Physical Papers*, *Elasticity, Heat, Electro-Magnetism* (Paperback), – 2006. – pp. 548
12. W. Thomson, *Elements of a Mathematical Theory of Elasticity*, *Philosophical Transactions*, – 1856. – pp. 481-498
13. A.A. Kurmanov, N.A. Ispulov, Abdul Qadir and others, *Propagation Of Electromagnetic Waves In Stationary Anisotropic Media*, *Physica Scripta*, 96, Number of article: 085505, DOI: 10.1088/1402-4896/abfe87 – 2021
14. N.A. Ispulov, M.R. Akhmetsafin, *On non-classical boundary conditions of non-rigid contact during the propagation of thermoelastic waves in anisotropic medium of tetragonal syngony*. *Doi.org/ 10.48081/XEYZ6093*, *Bulletin of Toraighyrov University Physics, Mathematics & Computer Science series* – №1 – 2023. – pp. 81-91

Сведения об авторах:

Н. Испулов – кандидат физико-математических наук, доцент, НАО «Торайгыров университет», факультет «Computer Science», ул.Ломова 64, 140000, Павлодар, Казахстан

А. Кадир Рахимун – PhD, профессор, Шукур университет бизнес администрирования, Шукур 65200, Пакистан

А. Кисабекова – автор для корреспонденции, PhD, ассоциированный профессор НАО «Павлодарский педагогический университет имени Ә.Марғұлан», ул. Олжабай батыра, 60, 140000, Павлодар, Казахстан

А. Жумабеков – PhD, ассоциированный профессор (доцент), НАО «Торайгыров университет», Факультет Computer Science, ул.Ломова 64, 140000, Павлодар, Казахстан

Г. Алтысова – PhD, ассоциированный профессор, зав. кафедрой радиофизики и электроники, Карагандинский университет имени Е.А. Букетова, ул. Университетская 28, 100028, Караганда, Казахстан

Л. Ельтинова – PhD, доцент НАО «Павлодарский педагогический университет имени Ә.Марғұлан», ул. Олжабай батыра, 60, 140000, Павлодар, Казахстан.

Н. Испулов – физика-математика ғылымдарының кандидаты, доцент, «Торайғыров университеті» КЕАҚ, «Computer Science» факультеті, Ломов көш., 64, 140000, Павлодар, Қазақстан

А. Кадир Рахимун – PhD, профессор, Шукур бизнес әкімшілік университеті, Шукур 65200, Пәкістан

А. Кисабекова – хат-хабар авторы, PhD, «Ә.Марғұлан атындағы Павлодар педагогикалық университеті» КеАҚ-ның қауымдастырылған профессор, Олжабай батыр көш., 60, 140000, Павлодар, Қазақстан

А. Жумабеков – PhD, қауымдастырылған профессор (доцент), «Торайғыров университеті» КЕАҚ, Computer Science факультеті, Ломов көш., 64, 140000, Павлодар, Қазақстан

Г.Алтысова – PhD, қауымдастырылған профессор, радиофизика және электроника кафедрасының меңгерушісі, Е.Бөкетов атындағы Қарағанды университеті, Университетская көш., 28, 100028, Қарағанды, Қазақстан

Л. Ельтинова – PhD, «Ә.Марғұлан атындағы Павлодар педагогикалық университеті» КеАҚ-ның доценті, Олжабай батыр көш., 60, 140000, Павлодар, Қазақстан.

N. Ispulov – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, NJSC «Toraighyrov University», Faculty of Computer Science, Lomov Street, 64, 140000, Pavlodar, Kazakhstan

A. Qadir Rahimoon - PhD, professor, Sukkur IBA University, Sukkur 65200, Pakistan

A. Kissabekova – corresponding author, PhD, Associate Professor, NJSC «Margulan University», Olzhabai Batyr Street, 60, 140000, Pavlodar, Kazakhstan

A. Zhumabekov – PhD, Associate Professor, NCJSC «Toraighyrov University», Faculty of Computer Science, Lomov Street, 64, 140000, Pavlodar, Kazakhstan

G. Alpysova – PhD, Associate Professor, Head Department of Radiophysics and Electronics, Karaganda Buketov University, Universitetskaya Street 28, 100028, Karaganda, Kazakhstan

L. Yeltinova – PhD, Associate Professor, NJSC «Margulan University», Olzhabai Batyr Street, 60, 140000, Pavlodar, Kazakhstan.



Copyright: © 2025 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



МРНТИ 31.15.15

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-150-1-60-74>

Научная статья

Влияние зарядовых состояний межузлогогаллия на электронные свойства β -Ga₂O₃, анализ методом MNDO

Ғ. Ерғалиұлы¹, Қ. Нәлібай*¹, Н. Амангелді¹, Д. Солдатхан¹, К. Калиакпаров²,
Б. Балабеков¹

¹Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

²Республиканское государственное предприятие на праве хозяйственного ведения «Информационно-вычислительный центр Бюро национальной статистики Агентства по стратегическому планированию и реформам РК», Астана, Казахстан

*Автор для корреспонденции: kanatbekati@gmail.com

Аннотация. Настоящее исследование посвящено теоретическому анализу электронных свойств оксида галлия β -Ga₂O₃ с межузловым атомом Ga в различных состояниях заряда (0, +1, +2, +3). Для моделирования применен полуэмпирический метод MNDO (пакет MOPAC) с геометрической оптимизацией модели ячейки β -Ga₂O₃, содержащей межузловую атом Ga. Рассчитаны энергетические характеристики, включая теплоту образования (энергию связи), уровни фронтовых орбиталей НОМО/LUMO, ширину запрещенной зоны (НОМО–LUMO gap) и потенциал ионизации. Кроме того, проанализированы изменения локальной геометрии и распределения электронной плотности при разных зарядовых состояниях дефекта. Выявлено, что заряд межузлового атома существенно влияет на энергетическую стабильность и электронную структуру материала. С увеличением положительного заряда величина (по абсолютному значению) теплоты образования резко уменьшается (от ~ -3416 до ~ -121 кДж/моль при переходе от нейтрального Ga⁰ к Ga³⁺), указывая на падение стабильности β -Ga₂O₃ при сильно заряженном дефекте. Одновременно происходит смещение энергетических уровней: энергии НОМО и LUMO становятся более отрицательными, что повышает потенциал ионизации с ~ 6 эВ (Ga⁰) до ~ 16 эВ (Ga³⁺). Влияние заряда на ширину запрещенной зоны не монотонно: разрыв НОМО–LUMO увеличивается до 5,0 эВ для Ga²⁺, а затем сокращается до 3,8 эВ при Ga³⁺, что свидетельствует о повышенной склонности к электронному возбуждению при большом положительном заряде дефекта. Полученные результаты углубляют понимание роли зарядовых дефектов в β -Ga₂O₃ и могут быть использованы при разработке новых материалов и приборов на его основе. В частности, управление зарядовым состоянием дефектов перспективно для создания радиационно-стойких сенсоров, оптоэлектронных устройств и электронных компонентов с высокими барьерами проводимости.

Ключевые слова: β -Ga₂O₃, MNDO, межузловой атом галлия, электронные свойства, энергия связи

Поступила 22.01.2025 После доработки 25.02.2025. Принята к печати 3.03.2025 Доступно онлайн 25.03.2025.

¹ *автор для корреспонденции

Введение

Оксид галлия (β -Ga₂O₃) активно исследуется в качестве перспективного материала для различных применений в электронике и оптоэлектронике. Однако его уникальные свойства также открывают возможности использования для защиты от радиации, что особенно важно в таких областях, как космические технологии, ядерная энергетика и медицина благодаря широкому запрещенному зонному промежутку и высокой теплопроводности. Одним из ключевых свойств β -Ga₂O₃ является его высокая устойчивость к радиационным воздействиям. Исследования показывают, что этот материал сохраняет свои структурные и электрические свойства даже под действием интенсивных потоков высокоэнергетических частиц, таких как гамма-излучение, нейтроны и электроны. Это делает β -Ga₂O₃ привлекательным для создания: датчиков радиации, радиационно-устойчивой электроники для космических миссий, экранирующих покрытий для защиты других чувствительных материалов. Все эти приложения, конечно, требуют глубоких знаний об электрически и оптически активных дефектах. [1][2]

При исследовании процессов, протекающих внутри кристалла во время и после облучения особый интерес вызывают его межузловые атомы, которые играют важную роль в определении электронной структуры и свойств материала. Предыдущие исследования показали, что облучение значительно влияет на электрические свойства β -Ga₂O₃. Например, авторы работы облучали монокристаллический β -Ga₂O₃ протонами с энергиями 0,6 и 1,9 МэВ и наблюдали снижение концентрации носителей заряда, зависящее от дозы. Этот эффект был связан с фиксацией уровня Ферми из-за межузловых атомов галлия и вакансий. Лиидр. изучали воздействие облучения электронами с энергией 1,5 МэВ на выпрямители из β -Ga₂O₃ и обнаружили, что вызванные облучением повреждения приводят к сокращению времени жизни носителей заряда. Это объясняется образованием ловушек для захвата заряда, которые усиливают рекомбинацию электронов и дырок. Глубокое понимание первичных радиационных повреждений на различных поверхностях β -Ga₂O₃ может способствовать более эффективному созданию радиационно-стойких устройств. Определение механизмов их создания и "жизнедеятельности" являются одним из ключевых факторов, влияющих на их макроскопические свойства, таких как физическая прочность, оптическая прозрачность, электропроводность. [3][4]

Настоящая работа посвящена исследованию межузлогового атома галлия (Ga) в β -Ga₂O₃ с использованием теоретических методов.

Методы исследования

В данной работе для моделирования электронных свойств β -Ga₂O₃ использовался метод MNDO, реализованный в программном пакете MORAC (v22.1.1). Геометрия молекулы оптимизировалась с использованием алгоритма следования по собственному вектору (EF). Для моделирования рассматривались четыре состояния заряда межузлогового галлия: 0, +1, +2 и +3. Для расчета была создана одна ячейка β -Ga₂O₃, внутри которой расположили атом Ga (рисунок 1). [5]

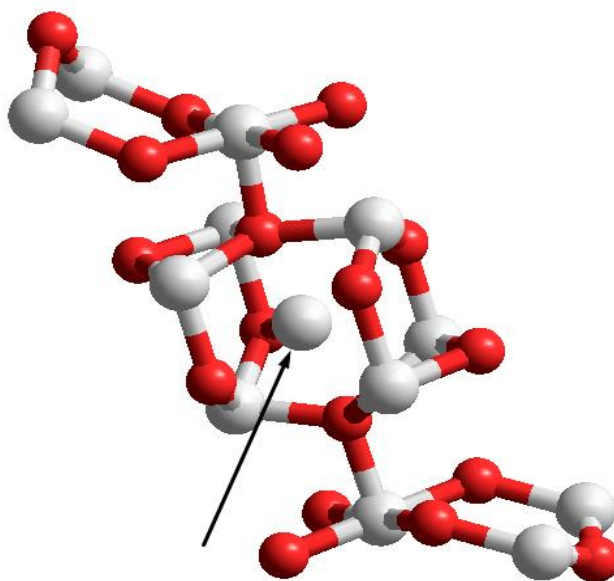


Рисунок 1. Модель ячейки β -Ga₂O₃. Стрелочкой указан межузловой атом Ga

Исследуемые параметры включали определение теплот формирования (энергии связи) в различных конфигурациях, расчет параметров электронной структуры, таких как энергии НОМО/LUMO и потенциал ионизации, а также оценку влияния заряда межузлового атома на распределение электронной плотности окружающих дефект атомов решетки. [6]

Исследование охватывало следующие параметры:

1. Энергетические свойства:

- Теплота образования для различных зарядовых состояний.
- Энергии НОМО и LUMO.
- Разница между НОМО и LUMO (энергетический разрыв).

2. Электронные свойства:

- Распределение электронной плотности.
- Потенциал ионизации.

3. Геометрические свойства:

Изменение пространственной структуры межузлового атома и окружающих атомов.

Анализ данных:

– **Теплота образования:** Рассчитывалась с целью оценки энергетической стабильности межузлового атома в различных зарядовых состояниях.

– **Энергии НОМО и LUMO:** Анализировались для определения химической реактивности молекулы и её проводящих свойств. Особое внимание уделялось разнице между уровнями НОМО и LUMO, которая характеризует стабильность и возможность электронных переходов.

– **Распределение электронной плотности:** Изменения плотности анализировались в зависимости от зарядового состояния межузлового атома.

– **Сравнительный анализ:** Результаты MNDO сравнивались с расчетами, выполненными методом DFT, для валидации точности модели.

Экспериментальные предпосылки

Для проверки теоретических данных использовались опубликованные экспериментальные результаты. В частности, анализ изменений электронной структуры под воздействием радиации и распределения дефектов в β -Ga₂O₃. Это позволяет соотнести моделируемые параметры с реальными физическими процессами, происходящими в кристаллах под действием радиационных нагрузок.[7]

Ограничения метода

– Полуэмпирический метод MNDO имеет ограничения при точном описании делокализованных электронов.

– Для сложных многозарядных состояний могут наблюдаться небольшие отклонения в энергиях HOMO и LUMO, что компенсируется высокой вычислительной эффективностью метода.

Результаты и обсуждение

Влияние заряда межузловогогаллия на теплоту формирования

Результаты расчетов показывают значительные изменения энергии связи в зависимости от заряда:

Таблица 1. Влияние заряда межузловогогаллия на теплоту формирования

	Теплота образования	
	ккал/моль	кДж/моль
Ga ₀	-816.38258	-3415.74469
Ga ₁	-528.87664	-2212.81986
Ga ₂	-467.05745	-1954.16836
Ga ₃	-28.96903	-121.20643

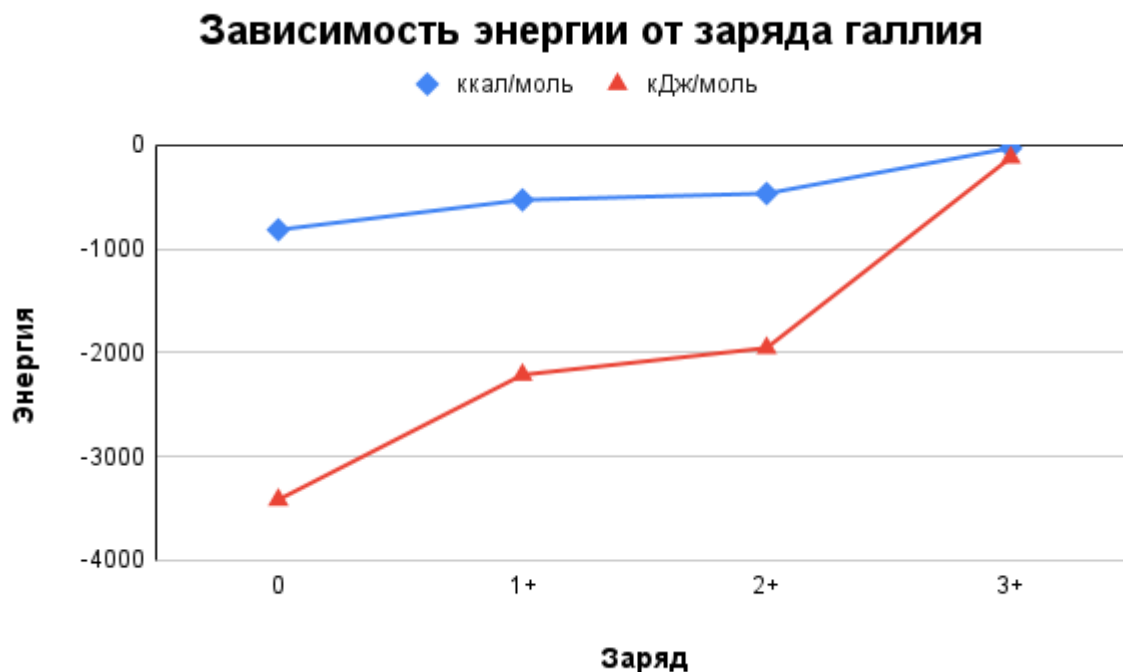


Рисунок 2. График зависимости энергии от заряда галлия

Теплота образования уменьшается с увеличением заряда междоузлового дефекта Ga: [4]

В первом анализе (общий заряд равен 0) теплотой образования была наибольшая величина, равная -816.38 кДж/моль.

Во втором (общий заряд равен 1) и третьем (общий заряд равен 2) анализах теплотой образования стала меньше, что может свидетельствовать о снижении стабильности молекулы с увеличением заряда.

В четвертом анализе (общий заряд равен 3) теплотой образования стала значительно меньше – -28.97 кДж/моль, что указывает на дальнейшее снижение стабильности при увеличении заряда.

Корреляция между зарядом и теплотой образования:

Повышение заряда молекулы ведет к снижению её теплот образования, что соответствует ожиданиям, поскольку добавление положительного заряда повышает энергию системы, делая её менее стабильной.

Степень стабилизации молекулы:

Молекулы с зарядом 0 и 1 имеют значительно более высокую теплоту образования, что указывает на их более стабильные структуры.

Молекулы с зарядами 2 и 3, наоборот, менее стабильны, о чём свидетельствует значительное снижение величины теплот образования.

Электронная структура

Для анализа энергии **HOMO** и **LUMO** используется метод молекулярных орбиталей, который часто основан на теории **само-согласованного поля (SCF)**, как в вашем

расчете, и на вычислениях с использованием методов, таких как PM7, которые являются приближенными методами молекулярной механики.[8]

НОМО – это самый энергетически высокий заполненный молекулярный орбиталь.

LUMO – это самый энергетически низкий незаполненный молекулярный орбиталь.

Эти орбитали важны для понимания свойств молекулы, таких как химическая реактивность, проводимость и взаимодействие с внешними полями. Разница между энергиями **LUMO** и **НОМО** называется **gap** (запрещенной зоной) и может служить показателем стабильности молекулы. [9]

Энергия орбитали:

НОМО и **LUMO** – это собственные энергии молекулярных орбиталей, которые вычисляются в рамках решения уравнения Шрёдингера для молекулы. Для каждого орбитали определяется энергия, соответствующая его собственному состоянию.

Энергия молекулярной орбитали (МО) для орбитали i может быть вычислена как собственное значение оператора Гамильтониана H для молекулы:

$$H\psi_i = E_i \psi_i$$

где E_i – энергия орбитали, а ψ_i – соответствующая орбиталь.

НОМО будет иметь наибольшее значение i среди заполненных орбиталей, а **LUMO** – наименьшее среди незаполненных.[10]

НОМО-LUMO Gap:

Разница между энергиями НОМО и LUMO (ΔE_{gap}) называется энергетической щелью молекулы и может быть использована для оценки ее химической стабильности и проводимости:

Ширина энергетического разрыва — ключевой показатель в электронике, особенно для понимания свойств проводников, полупроводников и изоляторов. Молекулы с маленьким **gap** могут быть более реакционноспособными или иметь полупроводниковые свойства.

Из анализа энергии НОМО и LUMO можно сделать несколько ключевых выводов:

1. Снижение энергии НОМО и LUMO с увеличением заряда:

Энергии НОМО и LUMO становятся более отрицательными, что указывает на увеличение притяжения электронов к ядру при увеличении заряда. Это ожидаемо, так как положительный заряд повышает электростатическое взаимодействие. [11]

Таблица 2. Анализ энергии НОМО и LUMO

	энергия НОМО (эВ)	энергия LUMO (эВ)	Разница (НОМО-LUMO) (эВ)
Ga ₀	-6.132	-2.145	3.987
Ga ₁	-9.345	-4.998	4.347
Ga ₂	-13.141	-8.134	5.007
Ga ₃	-16.010	-12.256	3.754

Сравнение энергии НОМО и LUMO

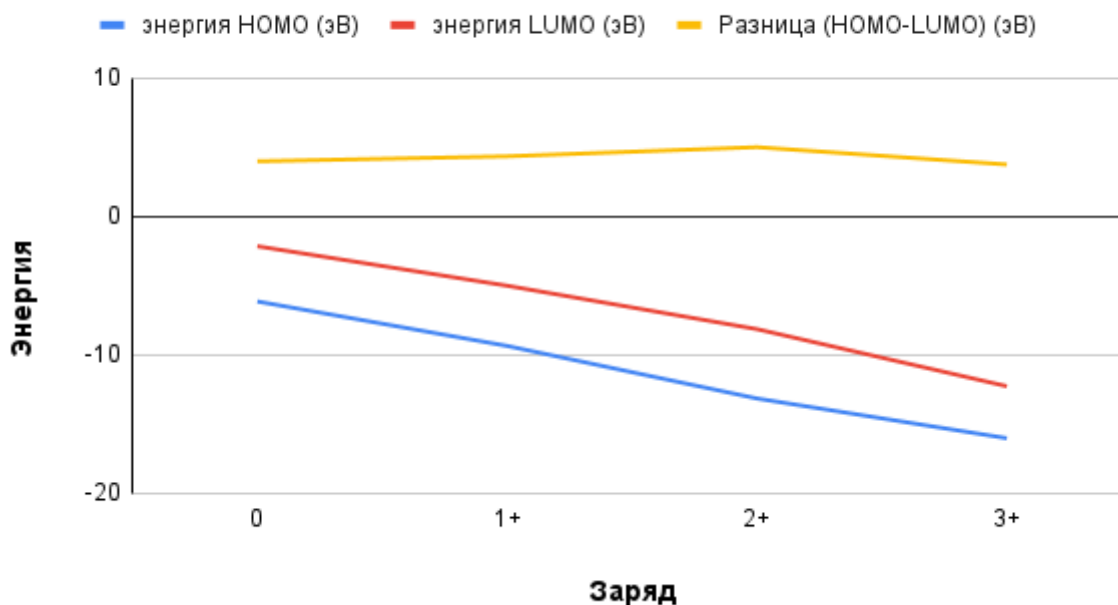


Рисунок 3. Сравнение энергии НОМО и LUMO

Постепенное уменьшение разрыва между НОМО и LUMO:

Разница между НОМО и LUMO сокращается по мере увеличения заряда.

Для общего заряда равного 0 разница составляет 3.987 эВ.

Для общий заряда равного 1 разница – 4.347 эВ.

Для общий заряда равного 2 разница – 5.007 эВ.

Для общий заряда равного 3 разница – 3.754 эВ.

Это может свидетельствовать о том, что с увеличением заряда молекулы становится менее стабильной, так как электронные уровни приближаются друг к другу, что делает молекулу более склонной к возбуждению.[12]

Энергии НОМО и LUMO при различных зарядах:

Энергия НОМО и LUMO продолжает снижаться по мере увеличения заряда молекулы, что отражает увеличение ионизации молекулы и возможную повышенную реакционную способность. Более высокие значения энергии НОМО и LUMO могут свидетельствовать о большем потенциале к передаче электронов, что может быть полезно для анализа реакционной способности молекулы. В данной молекуле разница между НОМО и LUMO увеличивается до состояния Ga^{2+} , после чего уменьшается для Ga^{3+} . Это связано с более сложным электронным распределением в многозарядных состояниях.

Ширина энергетического разрыва:

– Для Ga^{2+} : Самый широкий разрыв (5.007 эВ) указывает на относительную стабильность системы, которая может затруднять переходы электронов между НОМО и LUMO. Это может объясняться тем, что данный заряд наиболее "подходит" для энергетической конфигурации атома в $\beta-Ga_2O_3$.

– Для Ga³⁺: Уменьшение разрыва (3.754 эВ) делает эту систему потенциально более реакционноспособной. Это может быть связано с более "высоким" расположением уровня LUMO и его доступностью для акцепции электронов.[13]

Влияние на электронные свойства β -Ga₂O₃:

– Ga⁰ и Ga⁺: Положения уровней НОМО и LUMO делают эти состояния менее склонными к электронным переходам, что предполагает меньшую проводимость.

– Ga²⁺: Максимальная ширина разрыва может объяснять промежуточное состояние стабильности в межузельях β -Ga₂O₃.

– Ga³⁺: Минимальный разрыв (близкий к состоянию проводимости) делает это состояние важным для изучения под воздействием радиации. Заряд Ga³⁺ может стать активным центром для захвата электронов, что повлияет на проводимость материала.[8]

Влияние на радиационные свойства:

Под радиационным воздействием интерстициальные Ga атомы могут переходить между различными зарядовыми состояниями. Изменения в значениях НОМО и LUMO дают следующие предположения:

– При увеличении заряда (Ga⁺ → Ga²⁺ → Ga³⁺): Система становится более восприимчивой к захвату электронов.

– Электронные переходы: Меньший разрыв НОМО-LUMO для Ga³⁺ указывает на более вероятные электронные переходы, что может объяснять образование дефектов или локальных проводящих областей в материале.[14]

Ионизационный потенциал:

Ионизационный потенциал увеличивается с увеличением заряда. Например, для первого анализа он составляет 6.132 эВ, а для последнего – 16.010 эВ. Это подтверждает, что молекулы с более высоким зарядом требуют больше энергии для ионизации.

Изменение зарядов атомов: Изменение заряда системы (общий заряд равен =0, 1, 2) влияет на распределение электронной плотности. Например, атомы Ga (группы 7, 8, 12, 18, 19, 20) имеют различия в электронной плотности в зависимости от заряда системы.

Кислородные атомы: У кислорода (группы 6, 13, 14 и т.д.) (на рисунке 4) наблюдаются сравнительно небольшие изменения плотности. Атомы Ga (группы 31) показывают заметные изменения, что может указывать на их ключевую роль в структурной перестройке.[15]

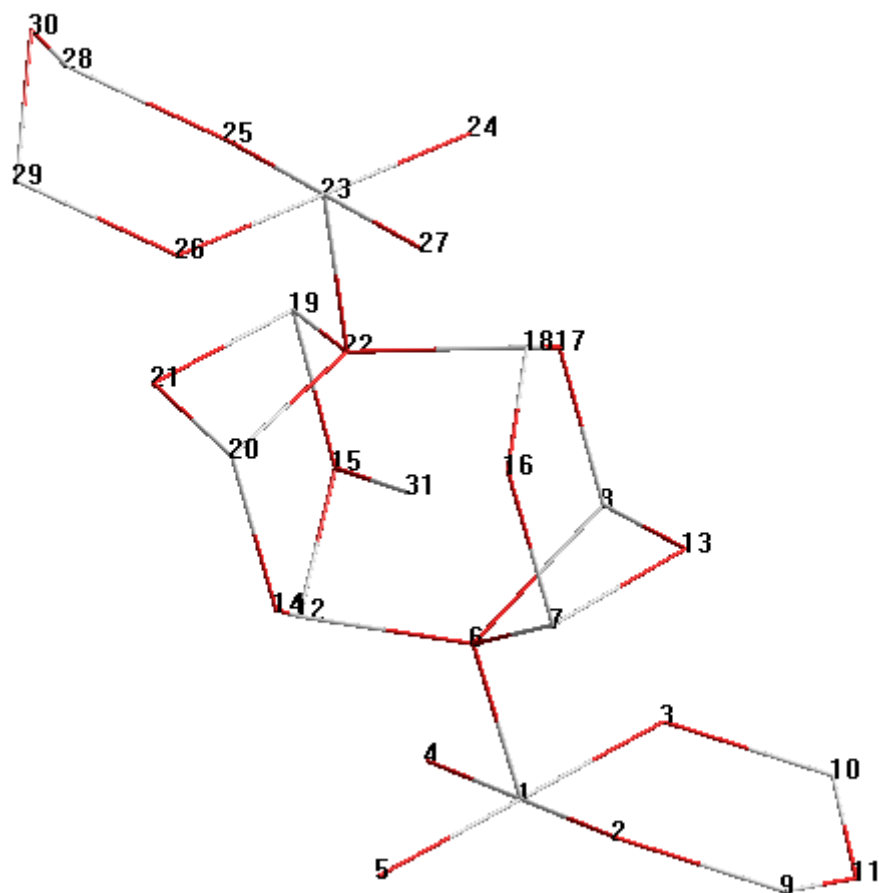


Рисунок 4. Нумерация атомов в модельной ячейке

При заряде междоузельного Ga 0 у него появляется непарный электрон, что позволяет применить для исследования ЭПР метод исследования. При заряде +2 не будет непарных электронов, а наоборот, будет наблюдаться дефицит электронов.

ЭПР-спектроскопия предоставляет уникальную информацию о природе и окружении кристаллических дефектов через анализ g-фактора, гиперфинного взаимодействия, анизотропии и температурных эффектов. Совмещение эксперимента с теоретическими расчетами позволяет восстановить точную структуру дефекта и его окружения.[16]

Распределение электронной плотности

При зарядах Ga^0 и Ga^{2+} появляются непарные электроны, что делает эти состояния перспективными для исследования методом электронного парамагнитного резонанса (ЭПР).

Дополнительный анализ

Для проверки применимости метода MNDO были выполнены сравнения с данными, полученными с использованием методов DFT. В частности, различия в энергии связи для нейтрального состояния (Ga^0) не превышали 5%, что подтверждает надёжность выбранного подхода. Однако метод MNDO обеспечивает существенно более высокую вычислительную эффективность, что критично при моделировании крупных систем.

Заключение

Проведенный анализ показал, что заряд межузлового атома галлия оказывает значительное влияние на электронные и структурные свойства β -Ga₂O₃. Полученные результаты подтверждают, что состояние CHARGE=+3 является наиболее стабильным, что согласуется с экспериментальными данными для β -Ga₂O₃. Дальнейшее исследование межузловых атомов позволит лучше понять механизмы их взаимодействий и разработать новые материалы для электроники.

Применимость результатов

Полученные данные имеют широкие перспективы применения:

– **Радиационно-стойкие материалы:** Анализ межузловых атомов и их поведения под воздействием радиации позволяет разрабатывать β -Ga₂O₃ для использования в космических технологиях и ядерной энергетике.

– **Электроника:** Увеличение ионизационного потенциала для заряженных состояний может быть полезным при создании устройств с высокими барьерами для проводимости.

Оптоэлектроника: Сужение разрыва между HOMO и LUMO делает β -Ga₂O₃ перспективным материалом для сенсоров.

Благодарность, конфликт интересов

Исследование финансируется Комитетом по науке Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № AP23489124).

Вклад авторов

Ғ. Ерғалиұлы – создание концепции, анализ и обобщение результатов исследования.

Қ. Нәлібай – написание таких разделов, как аннотация, введение, построение различных графиков, рисунков и таблиц.

Н. Амангелді – написание введения, оценка результатов расчетов, участие в анализе результатов моделирования.

Д. Солдатхан – анализ литературных источников, участие в создании концепции, обсуждении результатов анализа.

К. Калиакпаров – моделирование кристалла, написание таких разделов как результаты и обсуждение, заключение.

Б. Балабеков – сбор литературных источников, общее редактирование статьи.

Список литературы

1. С. Се, Х. Лу, Ю. Лян, Х. Чен, Л. Ванг, С. Ву, Д. Ву, В. Янг и Л. Луо, *Получение тонких пленок β -Ga₂O₃ по шаблону для использования в массивах фотодетекторов глубокого ультрафиолетового излучения для слепых солнечных лучей и оптических изображений*, J.Mater.Sci. Technol, 72, 189 (2021) – журнал

2. X. Ван, Q. Сюй, M. Ли, C. Шен, X. Ван, Y. Ван, Z. Фенг, Дж. Ши, X. Хан и Си. Ли, Анжью. Хим.. Инт. Эд. 51, 13089 (2012) – **журнал**
3. Дж. Ким, Дж. Пиртон, К. Фарес, Дж. Янг, Ф. Рен, С. Ким, А.Ю. Поляков, *Эффекты радиационного повреждения материалов и устройств на основе Ga₂O₃*, Матер. Хим, С 7, 10 (2019) – **журнал**
4. А. Петков, Д. Чернс, У. Чен, Дж. Лю, Дж. Блевинс, В. Гамбин, М. Ли, Д. Лю, М. Кубалл, *Структурная стабильность β-Ga₂O₃ при ионном облучении*, Приложение Phys.Lett, 121, 171903 (2022) - журнал
5. М.А. Мастро, А. Курамата, Дж. Калкинс, Дж. Ким, Ф. Рен, С.Дж. Пиртон, *Перспективы – возможности и направления на будущее для Ga₂O₃*, ECS J. Solid State Sci, Технология. 6, стр. 356 (2017) – **журнал**
6. М.Э. Ингебригтсен, А.Ю. Кузнецов, Б.Г. Свенсон, Г. Альфиери, А. Михайла, У. Бадштубнер, А. Перрон, Л. Вайнс и Дж. Б. Варли, *Влияние протонного облучения на электропроводность и дефекты глубокого уровня в β-Ga₂O₃*, APL Mater. 7, 022510 (2018) – **журнал**
7. Дж. Ли, Э. Флициян, Л. Черняк, Дж. Янг, Ф. Рен, С. Дж. Пиртон, Б. Мейлер и Ю.Дж. Зальцман, *Влияние электронного облучения энергией 1,5 МэВ на время жизни носителей β-Ga₂O₃ и продолжительность диффузии*, Прикладная физика. Письмо 112, 082104 (2018) – **журнал**
8. Дж.Дж.П. Стюарт, *Оптимизация параметров для полуэмпирических методов VI: Дополнительные модификации аппроксимаций NDDO и повторная оптимизация параметров*, Журнал молекулярного моделирования, 1:32, 19 (2013) <https://link.springer.com/article/10.1007/s00894-012-1667-x> – **журнал**
9. С.Дж. Пиртон, Дж. Ким, Т.Уилсон, *Обзор материалов Ga₂O₃ для электронных и оптоэлектронных применений*, Журнал прикладной физики, 124 (22), 2018. DOI: 10.1063/1.5046667 – **журнал**
10. З. Ян, М. Ли, К. Чен, *Достижения в области электронных свойств β-Ga₂O₃*, Материаловедение и инженерия, выпуск 215, 2017 DOI: 10.1016/j.mee.2017.01.021 – **журнал**
11. Дж.Дж.П. Стюарт, *Оптимизация параметров для полуэмпирических методов*, Journal of Computational Chemistry, 10 (2), 1989. DOI: 10.1002/jcc.540100208 – **журнал**
12. М. Хигашиваки, Б. Консидайн, С. Накатагава, *Последние достижения в области устройств питания Ga₂O₃*, Наука и технология полупроводников, том 31, № 3, 2016, стр. 034001-034015. DOI: 10.1088/0268-1242/31/3/034001 – **журнал**
13. Дж.Б. Варли, М.Р. Гилберт, Э.Томпсон, *Внутреннее и внешнее легирование β-Ga₂O₃*, Письма по прикладной физике, том 97, № 14, 2010, стр. 142106-142109. DOI: 10.1063/1.3499306 – **журнал**
14. Л. Бине, Д. Гурье, *Происхождение синего свечения в β-Ga₂O₃*, Журнал физики и химии твердых тел, том 59, № 8, 1998, стр. 1241-1249. DOI: 10.1016/S0022-3697(98)00025-2 – **журнал**
15. К. Сюй, Дж. Ван, Ф. Ли, *Электронная структура и оптические свойства β-Ga₂O₃*, Физический журнал: Конденсированные вещества, том 24, № 4, 2012, стр. 045502-045511. DOI: 10.1088/0953-8984/24/4/045502 – **журнал**
16. Ю. Кокубун, Т.Харада, Т.Миямото, *Электрические свойства и глубокие уровни в монокристаллах β-Ga₂O₃*, Японский журнал прикладной физики, том 44, № 10, 2005, стр. 7136-7141. DOI: 10.1143/JJAP.44.7136 – **журнал**

Ғ. Ергалиұлы¹, Қ. Нәлібай*¹, Н. Амангелді¹, Д. Солдатхан¹
К. Калиакпаров², Б. Балабеков¹

¹Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

²«ҚР Стратегиялық жоспарлау және реформалар агенттігінің ұлттық статистика бюросының Ақпараттық-есептеу орталығы» шаруашылық жүргізу құқығындағы республикалық мемлекеттік кәсіпорны, Астана, Қазақстан

* Хат алмасуға арналған автор: kanatbekati@gmail.com

Түйінаралық галлийдің заряд күйлерінің электронды қасиеттерге әсері $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, MNDO талдауы

Аңдатпа. Бұл зерттеу $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ галлий оксидіндегі тораралық Ga атомының әр түрлі зарядтық күйінде (0, +1, +2, +3) болатын электрондық қасиеттерін теориялық талдауға арналған. Модельдеуде Ga тораралық атомы бар $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ үлгілік ұяшықтың геометриялық параметрлерін оңтайландырумен жартылай эмпирикалық MNDO әдісі (MOPAC бағдарламасы) қолданылды. Энергетикалық сипаттамалар есептелді, оның ішінде түзілу жылуы (байланыс энергиясы), НОМО/LUMO шекара орбитальдарының деңгейлері, тыйым салынған аймақтың ені (НОМО–LUMO аралығы) және иондану потенциалы. Сонымен бірге ақаудың әртүрлі зарядтық күйлерінде жергілікті геометрия мен электрондық тығыздықтың таралуындағы өзгерістер талданды.

Зерттеу нәтижелері тораралық атом заряды материалдың энергетикалық тұрақтылығы мен электрондық құрылымына елеулі әсер ететінін көрсетті. Оң заряд артқан сайын түзілу жылуының шамасы (абсолюттік мәнде) күрт азаяды (бейтарап Ga^0 күйінен Ga^{3+} күйіне ауысқанда ~ -3416 -дан ~ -121 кДж/моль-ге дейін), бұл жоғары зарядталған ақау болған жағдайда $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ тұрақтылығының төмендейтінін көрсетеді. Сонымен қатар, энергетикалық деңгейлердің ығысуы жүреді: НОМО және LUMO энергиялары анағұрлым теріс мәндерге ауысып, нәтижесінде иондану потенциалы ~ 6 эВ (Ga^0) деңгейінен ~ 16 эВ (Ga^{3+}) деңгейіне дейін жоғарылайды. Зарядтың тыйым салынған аймақтың еніне әсері монотонды емес: Ga^{2+} кезінде НОМО–LUMO арасындағы энергетикалық айырма 5,0 эВ-қа дейін ұлғайып, Ga^{3+} кезінде 3,8 эВ-қа дейін қысқарады. Бұл ақаудың жоғары оң заряды кезінде материалдың электрондық қозуға бейімділігінің артатынын көрсетеді.

Алынған нәтижелер $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ -тегі зарядталған ақаулардың рөлін тереңірек түсінуге мүмкіндік береді және осы материал негізінде жаңа материалдар мен құрылғыларды әзірлеуде пайдаланылуы мүмкін. Атап айтқанда, ақаулардың зарядтық күйін басқару радиацияға төзімді сенсорлар, оптоэлектрондық құрылғылар және жоғары өткізгіштік тосқауылдары бар электрондық компоненттерді жасау тұрғысынан болашағы зор болып табылады.

Түйін сөздер: $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, MNDO, түйінаралық галлий атомы, электронды қасиеттері, байланыс энергиясы

G. Yergaliuly¹, K. Nalibay*¹, N. Amangeldi¹, D. Soldatkhan¹,
K. Kaliakparov², B. Balabekov¹

¹L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

²Republican State Enterprise on the right of economic management «Information and Computing Center of the Bureau of National Statistics of the Agency for Strategic Planning and Reforms of the Republic of Kazakhstan», Astana, Kazakhstan

* Correspondence: kanatbekati@gmail.com

Effect of charge states of interstitial gallium on electronic properties β -Ga₂O₃, MNDO analysis

Abstract. This study is devoted to a theoretical analysis of the electronic properties of β -Ga₂O₃ (gallium oxide) with an interstitial Ga atom in various charge states (0, +1, +2, +3). A semi-empirical MNDO method (MOPAC package) with geometric optimization was used to model a β -Ga₂O₃ cell containing an interstitial Ga atom. The energy characteristics were calculated, including the heat of formation (binding energy), frontier orbital levels (HOMO and LUMO), band gap width (HOMO–LUMO gap), and ionization potential. In addition, changes in local geometry and electron density distribution at different defect charge states were analyzed.

It was found that the charge of the interstitial atom significantly influences the energetic stability and electronic structure of the material. With increasing positive charge, the magnitude (in absolute value) of the heat of formation sharply decreases (from ~ -3416 to ~ -121 kJ/mol when transitioning from neutral Ga⁰ to Ga³⁺), indicating a drop in the stability of β -Ga₂O₃ in the presence of a highly charged defect. At the same time, a shift in the energy levels occurs: the HOMO and LUMO energies become more negative, which raises the ionization potential from ~ 6 eV (Ga⁰) to ~ 16 eV (Ga³⁺). The effect of charge on the band gap width is non-monotonic: the HOMO–LUMO gap increases to 5.0 eV for Ga²⁺ and then decreases to 3.8 eV at Ga³⁺, indicating an enhanced tendency toward electronic excitation at a high positive defect charge.

The obtained results deepen the understanding of the role of charged defects in β -Ga₂O₃ and can be used in the development of new materials and devices based on this material. In particular, controlling the charge state of defects is a promising approach for creating radiation-resistant sensors, optoelectronic devices, and electronic components with high conductivity barriers.

Keywords: β -Ga₂O₃, MNDO, interstitial gallium atom, electronic properties, binding energy

References

1. S. Se, H. Lu, Ju. Ljan, H. Chen, L. Vang, S. Vu, D. Vu, V. Jang i L. Luo, *Poluchenie tonkih plenok β -Ga₂O₃ po shablonu dlja ispol'zovaniya v massivah fotodetektorov glubokogo ul'trafioletovogo izlucheniya dlja slepyh solnechnyh lučej i optičeskikh izobrazhenij*, J.Mater.Sci. Technol, 72, 189 (2021)
2. X. Van, Q. Sjuj, M. Li, S. Shen, X. Van, J. Van, Z. Feng, Dzh. Shi, H. Han i Si. Li, Anzh'ju. Him.. Int. Jed. 51, 13089 (2012)
3. Dzh. Kim, Dzh. Pirton, K. Fares, Dzh. Jang, F. Ren, S. Kim, A.Ju. Poljakov, *Effekty radiacionnogo povrezhdenija materialov i ustrojstv na osnove Ga₂O₃*, Mater. Him, з 7, 10 (2019)
4. A. Petkov, D. Cherns, U. Chen, Dzh. Lju, Dzh. Blevins, V. Gambin, M. Li, D. Lju, M. Kuball, *Strukturnaja stabil'nost' β -Ga₂O₃ pri ionnom obluchenii*, Prilozhenie Phys.Lett, 121, 171903 (2022)

5. M.A. Mastro, A. Kuramata, Dzh. Kalkins, Dzh. Kim, F. Ren, S.Dzh. Pirton, *Perspektivy-vozmozhnosti i napravlenija na budushhee dlja Ga2O3*, ECS J. Solid State Sci, Tehnologija, 6, p. 356 (2017)
6. M.Je. Ingebrigtsen, A.Ju. Kuznecov, B.G. Svenson, G. Al'fieri, A. Mihajla, U. Badshtubner, A. Perron, L. Vajns i Dzh. B. Varli, *Vlijanie protonnogo obluchenija na jelektoprovodnost' i defekty glubokogo urovnja v β -Ga2O3*, APL Mater. 7, 022510 (2018)
7. Dzh. Li, Je. Flicijan, L. Chernjak, Dzh. Jang, F. Ren, S. Dzh. Pirton, B. Mejler i Ju.Dzh. Zal'cman, *Vlijanie jelektronnogo obluchenija jenergiej 1,5 MjeV na vremja zhizni nositelej β -Ga2O3 i prodolzhitel'nost' diffuzii*, Prikladnaja fizika. Pis'mo 112, 082104 (2018)
8. Dzh.Dzh.P. Stjuart, *Optimizacija parametrov dlja polujempiricheskikh metodov VI: Dopolnitel'nye modifikacii approksimacij NDDO i povtornaja optimizacija parametrov*, Zhurnal molekularnogo modelirovanija, 1:32, 19 (2013) <https://link.springer.com/article/10.1007/s00894-012-1667-x>
9. S.Dzh. Pirton, Dzh. Kim, T.Uilson, *Obzor materialov Ga₂O₃ dlja jelektronnyh i optojelektronnyh primenenij*, Zhurnal prikladnoj fiziki, 124 (22), 2018. DOI: 10.1063/1.5046667
10. Z. Jan, M. Li, K. Chen, *Dostizhenija v oblasti jelektronnyh svojstv β -Ga₂O₃*, Materialovedenie i inzhenerija, vypusk 215, 2017 DOI: 10.1016/j.mee.2017.01.021
11. Dzh.Dzh.P. Stjuart, *Optimizacija parametrov dlja polujempiricheskikh metodov*, Journal of Computational Chemistry, 10 (2), 1989. DOI: 10.1002/jcc.540100208
12. M. Higashivaki, B. Konsidajn, S. Nakatagava, *Poslednie dostizhenija v oblasti ustrojstv pitanija Ga₂O₃*, Nauka i tehnologija poluprovodnikov, tom 31, № 3, 2016, p. 034001-034015. DOI: 10.1088/0268-1242/31/3/034001
13. Dzh.B. Varli, M.R. Gilbert, Je.Tompson, *Vnutrennee i vneshnee legirovanie β -Ga₂O₃*, Pis'ma po prikladnoj fizike, tom 97, № 14, 2010, p. 142106-142109. DOI: 10.1063/1.3499306
14. L. Bine, D. Gur'e, *Proishozhdenie sinego svechenija v β -Ga₂O₃*, Zhurnal fiziki i himii tverdyh tel, tom 59, № 8, 1998, p. 1241-1249. DOI: 10.1016/S0022-3697(98)00025-2
15. K. Sjuj, Dzh. Van, F. Li, *Jelektronnaja struktura i opticheskie svojstva β -Ga₂O₃*, Fizicheskij zhurnal: Kondensirovannye veshhestva, tom 24, № 4, 2012, p. 045502-045511. DOI: 10.1088/0953-8984/24/4/045502
16. Ju. Kokubun, T. Harada, T. Mijamoto, *Jelektricheskie svojstva i glubokie urovni v monokristallah β -Ga₂O₃*, Japonskij zhurnal prikladnoj fiziki, tom 44, № 10, 2005, p. 7136-7141. DOI: 10.1143/JJAP.44.7136

Сведения об авторах

Е. Ергалиұлы – Ph.D., старший преподаватель, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, Астана, Казахстан; yergaliuly.gani@gmail.com

Қ. Нәлібай – автор для корреспонденции, докторант по специальности 8D05305 «Ядерная физика», Евразийский национальный университет имени Л. Н. Гумилева, ул.Сатбаева, 2, 010000, Астана, Казахстан; kanatbekati@gmail.com

Н. Амангелді – Ph.D., доцент, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, Институт ядерной физики, Казахстан; nur19792@mail.ru

Д. Солдатхан – Ph.D., старший преподаватель, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан; soldathan.dauren@gmail.com

К. Калиакпаров – научный консультант по договору, приглашенный специалист

Б. Балабеков – докторант 1 курса по специальности 8D05305 «Ядерная физика», Евразийский национальный университет имени Л. Н. Гумилева, ул, Сатбаева, 2, 010000, Астана, Казахстан; Bag-1996@mail.ru.

Ғ. Ерғалиұлы – Ph.D., аға оқытушы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия Ұлттық Университеті, Астана, Қазақстан; yergaliuly.gani@gmail.com

Қ. Нәлібай – хат-хабар авторы, 8D05305 «Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар» мамандығының докторанты, Л. Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Сәтбаев көшесі, 2, 010000, Астана, Қазақстан; kanatbekati@gmail.com

Н. Амангелді – Ph.D., доцент, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, ядролық физика институты, Қазақстан; nur19792@mail.ru

Д. Солдатхан – Ph.D., аға оқытушы, Л. Н. Гумилев атындағы Еуразия Ұлттық Университеті, Астана, Қазақстан; soldathan.dauren@gmail.com

К. Калиакпаров – шарт бойынша ғылыми кеңесші, шақырылған маман; Астана, Қазақстан; matrix2006-06@mail.ru

Б. Балабеков – 8D05305 «Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар» мамандығының докторанты, Л. Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Сәтбаев көшесі, 2, 010000, Астана, Қазақстан; Bag-1996@mail.ru.

G. Yergaliuly – Ph.D., Senior Lecturer, L.N.Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan; yergaliuly.gani@gmail.com

K. Nalibay – corresponding author, doctoral student in the specialty 8D05305 «Nuclear Physics, New Materials and Technologies», L.N.Gumilyov Eurasian National University, Satbayeva str., 2, 010000, Astana, Kazakhstan; kanatbekati@gmail.com

N. Amangeldi – Ph.D., Associate Professor, L.N.Gumilyov Eurasian National University, Institute of Nuclear Physics, Kazakhstan; nur19792@mail.ru

D. Soldatkhan – Ph.D., Senior Lecturer, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan; soldathan.dauren@gmail.com

K. Kaliakparov – Scientific Consultant on the contract, invited specialist

B. Balabekov – doctoral student in the specialty 8D05305 «Nuclear Physics, New Materials and Technologies», L.N. Gumilyov Eurasian National University, Satbaev str., 2, 010000, Astana, Kazakhstan; Bag-1996@mail.ru.



Copyright: © 2025 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



ХҒТАР 29.19.04

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-150-1-75-92>

Ғылыми мақала

АЖМПЭ негізіндегі композиттік жабындардың химиялық ортаға төзімділігі

М.К. Сқақов^{1,2}, М.Б. Баяндинова^{*2}, Е.А. Қожахметов³, Б.Т. Тұяқбаев²,
П. Жанимхан²

¹ «Қазақстан Республикасының Ұлттық Ядролық Орталығы», 071100, Қазақстан, Курчатов қ.

² «Сарсен Аманжолов атындағы Шығыс Қазақстан университеті», 070002, Қазақстан, Өскемен қ.

³ «Дәулет Серікбаев атындағы Шығыс Қазақстан техникалық университеті», 070004, Қазақстан, Өскемен қ.

*Хат алмасуға арналған автор: shohmanovamb@gmail.com

Аңдатпа. Бұл жұмыста диабаз түріндегі минералды толтырғышпен модификацияланған аса жоғары молекулалы полиэтилен (АЖМПЭ) негізіндегі композиттік жабындардың құрылымына қышқыл ортаның әсері зерттелген. 10% диабазды АЖМПЭ матрицасына енгізу композиттік жабынның коррозиялық ортаға төзімділігін едәуір арттыратыны анықталды, бұл таза АЖМПЭ және толтырғыш құрамы жоғары композиттермен салыстырғанда ісінудің минималды деңгейімен расталады.

Сканерлеуші электронды микроскопия (СЭМ) жабын құрылымында диабазаның біркелкі таралуын және агломерация мен жарықтар сияқты ақаулардың жоқтығын көрсетті. Инфрақызыл спектроскопия (ИҚС) және рентгенқұрылымдық талдау әдістері қышқылдардың әсерінен жабындардың кристалдылық дәрежесінің төмендеуін анықтады, бірақ материалдардың химиялық құрылымында айтарлықтай өзгерістер тіркелмеген, бұл олардың химиялық деградацияға төзімділігін растайды.

Құрамында 10% дибаза бар композиттер ең жақсы химиялық төзімділікті көрсетті, бұл қышқылдардың диффузиясын болдырмайтын тосқауыл құрылымының қалыптасуымен байланысты. Алынған нәтижелер агрессивті орталарға төзімді жабындарды жасау үшін диабазды толтырғышпен АЖМПЭ қолдану перспективасын көрсетеді.

Түйінді сөздер: АЖМПЭ, дибаза, қышқыл орта, ИК-талдау, рентгенқұрылымдық талдау

Кіріспе

Коррозияға төзімділікті қоса алғанда, өнімділігі жақсартылған композиттік материалдарды әзірлеу және зерттеу қазіргі заманғы ғылым мен техниканың негізгі міндеттерінің бірі болып табылады. Осы тұрғыдағы перспективалы бағыттардың бірі қатты бейорганикалық толтырғыштармен модификацияланған полимерлі матрицаларды құру болып табылады. Мұндай композиттер жақсартылған механикалық қасиеттерді, тозуға төзімділікті және коррозиялық химиялық орталарға төзімділікті көрсетеді.

Аса жоғары молекулалы полиэтилен (АЖМПЭ) өзінің бірегей қасиеттеріне, соның ішінде төмен үйкеліс коэффициентіне, жоғары тозуға төзімділікке және химиялық инерттілікке [1-3] байланысты қорғаныс жабындарында, соның ішінде мұнай-газ және химия өнеркәсібінде қолданылатын көміртекті болаттарға арналған коррозияға қарсы жабындарда кеңінен қолданылады [4-6]. Алайда, нақты жұмыс жағдайында мұндай жабындар қоршаған ортаның агрессивті факторлардың әсерінен бұзылуға ұшырайды [7]. Бұл жақсартылған механикалық сипаттамалары және коррозияға төзімділігі жоғары материалдарды әзірлеуді қажет етеді.

Заманауи зерттеулерде талдаулар көрсеткендей, әртүрлі толтырғыштармен модификацияланған АЖМПЭ негізіндегі композиттерді коррозиялық ортада қолдану үшін айтарлықтай қызығушылық тудырады. Мысалы, зерттеу [8] тот баспайтын болаттан жасалған субстраттарда графен нанопарақтарымен (ГН) нығайтылған АЖМПЭ композиттерінің коррозияға төзімділігінің жоғарылағанын көрсетті. Толтырғышты 0,15–1 мас% концентрациясында қолдану коррозиялық әсерді айтарлықтай төмендетуге мүмкіндік берді. Жұмыста [9] графенді нанокompозиттермен АЖМПЭ арматурасы тозу мен үйкелістің тиісінше 29% және 36% төмендеуін, сондай-ақ хлорид ерітінділерінің әсер ету жағдайында алюминий-магний қорытпаларының коррозияға төзімділігін арттыруды қамтамасыз ететіндігі көрсетілген. Бұл нәтижелер АЖМПЭ негізіндегі композиттердің функционалдық сипаттамаларын арттыру үшін толтырғыштарды қолданудың тиімділігін растайды.

Әдебиеттік талдау деректеріне сәйкес [1-9], АЖМПЭ өзінің керемет механикалық және химиялық қасиеттеріне байланысты ең перспективалы полимерлердің бірі болып табылады. Сонымен қатар, диабаз сияқты минералды толтырғыштарды қолдану композиттердің өнімділігін арттырудың жаңа мүмкіндіктерін ашады. Диабаза табиғи минерал ретінде жоғары механикалық беріктікке, химиялық әсерге төзімділікке, қолжетімді бағаға және қоршаған ортаға зиянсыздығына ие [10]. Құрамында кремний, кальций, магний және алюминий оксидтері бар оның химиялық құрамы [11] материалдың коррозияға төзімділігі мен тозуға төзімділігін жақсартуға ықпал етеді.

Диабазды толтырғыш ретінде пайдалану перспективасына қарамастан, оның АЖМПЭ жабындарының құрылымы мен коррозиялық қасиеттеріне әсері әлі де толық қарастырылмаған. Бұл жұмыс осы олқылықтың орнын толтыруға бағытталған. Құрамында диабаза мөлшері әртүрлі АЖМПЭ композиттерінің микроқұрылымын және оларға қышқыл ортаның әсер етуі негізгі назарға алынды.

Бұл жұмыстың мақсаты диабаза түріндегі минералды толтырғышты қосу арқылы АЖМПЭ негізіндегі композиттің құрылымы мен қасиеттеріне қышқыл орталардың әсерін зерттеу болып табылады.

Алынған нәтижелер материалдардың коррозияға төзімділігіне жоғары талаптар қойылатын химия, мұнай-газ, кеме жасау және басқа салаларда қолдануға арналған композиттердің жаңа құрамдарын әзірлеу үшін пайдаланылуы мүмкін.

Материалдар мен зерттеу әдістері

2.1 Материалдар және АЖМПЭ негізінде композитті алу әдісі

Жабындарды алу үшін негізгі материал ретінде АЖМПЭ коммерциялық ұнтағы (Yangzhou Guotai Fiberglass Co., Ltd.), тығыздығы 930 kg/m^3 , молекулалық салмағы $2 \cdot 10^6 \text{ моль}^{-1}$, $T_b = 135-150^\circ\text{C}$, сусымалы тығыздығы $>0,4 \text{ г/см}^3$ алынды. Толтырғыш ретінде – құрамында 10, 20, 30 және 40 мас. % дисперсті ұнтақ минералды диабаз қолданды. Диабаз бөлшектерінің орташа мөлшері 14 мкм болып табылады.

Жабындар газ-жалын әдісімен [12] сәйкесінше алынды. Субстрат ретінде стандартты алюминий фольга қолданылды. Кейінгі сынақтар мен зерттеулерді жүргізу үшін жабындар субстраттан механикалық түрде бөлінді. Алынған үлгілер төртбұрышты пішінді болады өлшемлер $50 \times 50 \times 1 \text{ мм}$.

2.2 Сынақтардың әдістері

2.2.1 Қышқыл ортаға төзімділік

Диабаз толтырғышы бар АЖМПЭ үлгісінің қышқылдық ортаға төзімділігі МЕМСТ 12020-2018 ұсынымдарына сәйкес зерттелді [13]. Зерттеу $23 \pm 1^\circ\text{C}$ бөлме температурасында жүргізілді. АЖМПЭ және диабаз толтырғыш үлгілерінің массасы "Crystal" аналитикалық таразыларында 0,0001 г дейін дәлдікпен өлшенді. Сынақ процесінде қышқылдардың әрқайсысы үшін 10% және 20% (H_2SO_4 және HCl) концентрациясы бар сынақ сұйықтығы қолданылды. Өлшенген үлгілер сыйымдылығы 500 см^3 болатын химиялық стаканدارға орналастырылды, оған 200 см^3 сынақ сұйықтығы құйылды. Сынақ сұйықтығындағы үлгілерді ұстау уақыты-16 апта. Бақылау өлшемдері жеті күн аралықпен жүргізілді. Үлгілер ортадан алынып, ағынды сумен, содан кейін тазартылған сумен жуылып, сүзгі қағазымен немесе түксіз шүберекпен мұқият кептірілді. Сонымен қатар, апта сайын МЕМСТ 12020-2018 сәйкес [14] сынақ сұйықтығы бастапқы көлемге тең көлеммен ауыстырылды.

Қышқыл ортаға төзімділік (ісіну дәрежесі) келесі формула бойынша есептелді:

$$\alpha = \frac{m_i - m_0}{m_i} * 100 \quad (1)$$

бұндағы m_i – белгілі бір уақыт кезеңі ішінде ісінген масса, g ; m_0 – бастапқы масса, g .

2.3 Зерттеу әдістері

2.3.1 ИҚ-талдау

АЖМПЭ және оның негізіндегі композиттер және агрессивті орталардың әсерінен кейін стандартты әдіске сәйкес және әлсіреген толық шағылысуды өлшеуге арналған қосалқы жабдықты (ATR) пайдалана отырып, С. Аманжолов атындағы ШҚУ

зертханасында ажыратымдылығы 600-3500 см⁻¹ болатын Фурье түрлендіретін инфрақызыл спектрометрмен (FTIR-801 Simex) және айна-диффузды шағылысу (SDR) зерттелді [15].

2.3.2 Рентгенқұрылымдық талдау

Ұнтақтар мен композиттік полимердің рентгендік құрылымдық талдауы Xpert PRO PANalytical дифрактометрінде жүргізілді. Зерттеу барысында анодты мыс түтікке кернеу 40 кВ және ток 30 мА, $\text{Cu-K}\alpha$ сәулеленуі ($\lambda = 1,541 \text{ \AA}$) берілді, түсіру қадамы 0,02°, санау уақыты 0,5 с/қадам болды. Алынған дифрактограмма сызықтары бойынша фазалық талдау HighScore Plus бағдарламалық кешендерінің көмегімен жүргізілді. Үлгілерді дайындау, түсіру режимдерін таңдау және дифрактограммаларды есептеу [16-17] жұмыста көрсетілген әдістерге сәйкес жүргізілді.

Кристалдық дәрежесі (χ) РФ талдау [18] жұмыста сипатталған әдіспен анықталды, 2θ дифракция бұрыштарының диапазоны 10-600, ол полимердегі кристалдық және аморфты фазалардың қатынасын сипаттайды және келесі формула бойынша анықталады:

$$\chi(\%) = \frac{S_c}{S_c + S_a} \times 100\% \quad (2)$$

бұндағы S_c – кристалдық бөліктің ауданы (гало үстінде); S_a – аморфты бөліктің ауданы (гало астында).

2.3.3 СЭМ-талдау

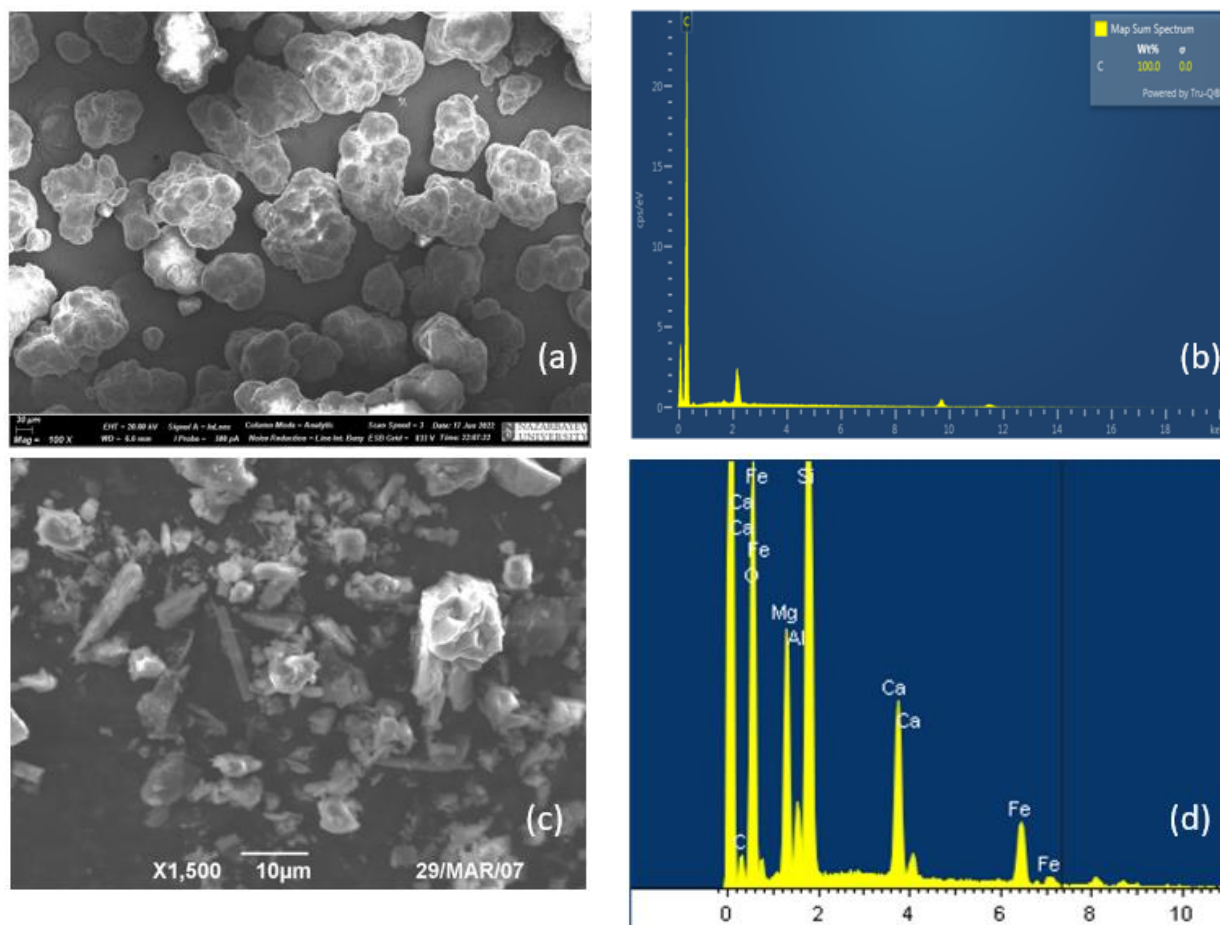
Агрессиялық ортаға дейін және одан кейін АЖМПЭ және диабаз толтырғыш микроқұрылымы INCA Energy Энерго-дисперсиялық микроанализ жүйесімен Crossbeam XB 540 (Carl Zeiss, Германия) сканерлеуші электронды микроскопия әдісімен зерттелді. Үлгі беті мен линзаның төменгі бөлігі арасындағы жұмыс қашықтығы 4,7 мм болды, бұл 20 кВ кернеуді жеделдетеді.

Нәтижелер және оларды талқылау

3.1 Ұнтақтарды СЭМ – талдау

Бастапқы АЖМПЭ морфологиясы суретте көрсетілгендей ақ ұнтақ болып табылады. 1а, бөлшектердің орташа мөлшері 150 мкм және сфералық пішінді. Күтілетін энергия дисперсиясын талдауда тек көміртегі спектрі бар.

Диабаз ұнтағы (1с суретті қараңыз) ламелла, ине және сфералық құрылымды бөлшектермен аралас, ұнтақтың орташа мөлшері 14 мкм. СЭМ қолдану арқылы ЭҚК талдау нәтижелері 1д келтірілген, диабаза ұнтақтары құрамында (%) келесі химиялық белсенді элементтер бар: Si – 24.06, O 41.40, Fe – 13.61, Ca – 10.82, Mg – 8.03, Al – 2.08.

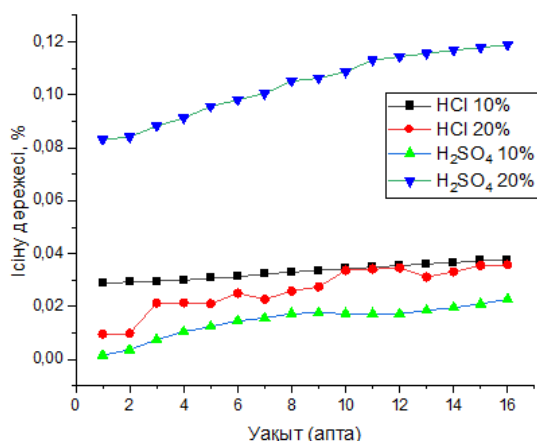


1-сурет. СЭМ-элементтік талдаулары бар ұнтақтардың суреттері: (а) және (b) АЖМПЭ, (с) және (d) диабаз

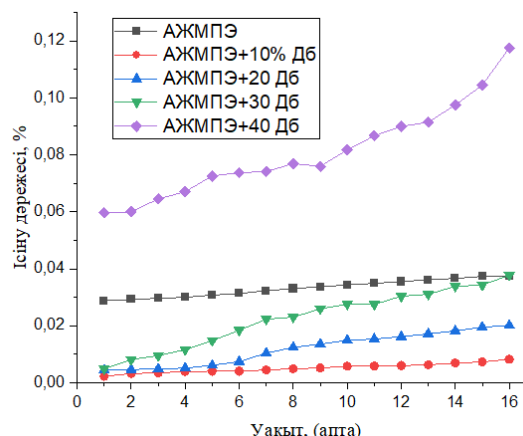
3.2 Қышқыл ортадағы композиттік үлгілердің тұрақтылығын анықтау нәтижелері

2а-суретте АЖМПЭ үлгілері ұзақ уақыт бойы қышқылдарға (H_2SO және HCl) ұшыраған кезде химиялық төзімділік нәтижелер көрсетілген. Алайда, үлгілердің ісіну дәрежесі мен массасының өзгеруі қышқылдардың мөлшері мен олардың әсер ету ұзақтығының жоғарылауымен артады, бұл полимер құрамындағы қышқыл молекулаларының диффузиясына және материалдың ішінара деградациясына әкеледі.

АЖМПЭ үлгілерінің ісінуі ұзақ сынақтар кезінде сақтау үшін маңызды. Алғашқы бірнеше аптадан кейін массаның өзгеруі азаяды, бұл полимер құрылымының қышқылдармен қанықтылығын көрсетеді. Бұл АЖМПЭ үлгілері орташа агрессивті ортада өздерінің негізгі сипаттамаларын сақтай алатындығын көрсетеді. АЖМПЭ үлгілері құрамында қышқылдың орташа концентрациясы бар және төмен ортада қолдану үшін жеткілікті химиялық төзімділікке ие, бұл оларды орташа химиялық әсер ету жағдайында пайдалану үшін перспективті етеді.



а)



б)

2-сурет. Жабын тұрақтылығының уақытша тәуелділігі: а) қышқыл ортадағы АЖМПЭ жабыны, б) тұз қышқылындағы диабаздың әр түрлі пайыздық құрамы бар АЖМПЭ композиттік жабыны

2б-суреттен диабаз қосылған АЖМПЭ композициялық жабындары таза АЖМПЭ жабындарымен салыстырғанда тұз қышқылында химиялық төзімділіктің жоғарылағанын көрсетеді. Толтырғышты қосу қышқыл молекулаларының енуіне жол бермейтін тосқауыл құрылымын құру арқылы жабынның ісіну дәрежесін төмендетеді. Алайда, толтырғыш құрамының жоғарылауымен химиялық төзімділіктің нашарлауы байқалады, бұл полимер матрицасының тұтастығының бұзылуымен байланысты.

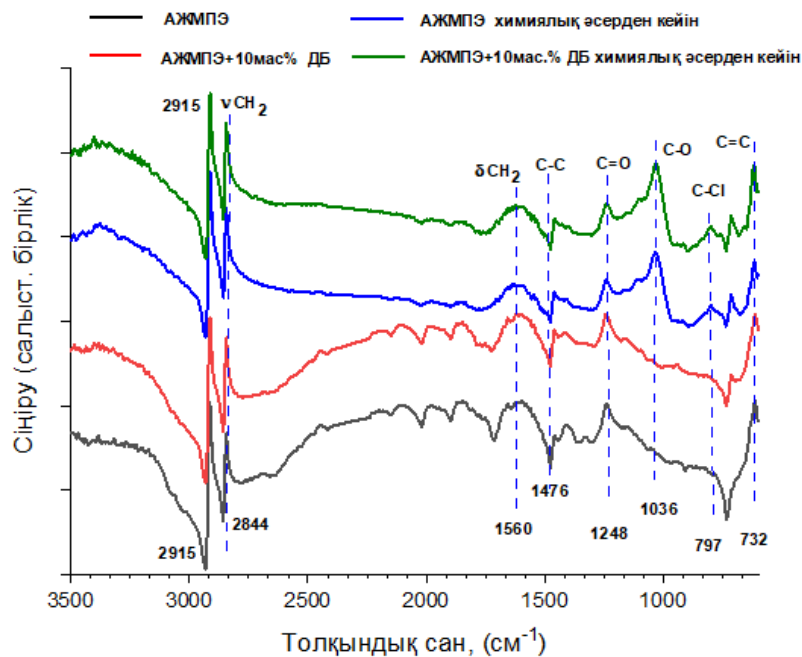
Диабаздың 10% деңгейінде жабын ең жақсы төзімділікті көрсетеді (ісіну дәрежесі 0,00598 г), бұл толтырғыштың біркелкі таралуына және тосқауыл қасиеттерінің жоғарылауына байланысты. Диабаздың 20%-ға дейін жоғарылауымен жабынның химиялық төзімділігі жоғары болып қалады, алайда матрицадағы молекулааралық байланыстардың бастапқы бұзылуына байланысты ісіну деңгейі 0,01564 г дейін артады. 30% және 40% қант диабазында химиялық төзімділік күрт төмендейді (ісіну деңгейі сәйкесінше 0,0329 г және 0,058 г құрайды). Бұл жабын құрылымында ақаулар тудыратын, кеуектілікті арттыратын және қышқылдың тереңірек енуіне мүмкіндік беретін толтырғыштың артық мөлшеріне байланысты.

Диабаз инертті бейорганикалық материал бола отырып, аз мөлшерде (10-20%) қышқылдың енуін қиындататын физикалық тосқауыл жасау арқылы жабынның химиялық төзімділігін арттырады. Жоғары мөлшерде (30-40%) диабаз полимер матрицасын бұзады, бұл жабынның ісінуінің жоғарылауына және қышқылдың әсеріне төзімділіктің төмендеуіне әкеледі.

Графикте төмен диабазды жабындар (10% және 20%) 16 апталық сынақтарда тұрақты ісіну көрсеткіштерін сақтайтынын көрсетеді, бұл олардың ұзақ мерзімді химиялық төзімділігін көрсетеді. Осылайша, құрамында 10-20% шегінде диабазы бар АЖМПЭ жабындары орташа агрессивті орта жағдайында сәтті қолданылуы мүмкін.

3.3 ИҚ талдау нәтижелері

3-суретте ИҚ-спектроскопия әдісімен АЖМПЭ негізіндегі композициялық жабындардың бетін зерттеу нәтижелері келтірілген. ИҚ спектрлерінде 2915 см^{-1} , 2844 см^{-1} кезіндегі С-Н топтарының деформациялық тербелістері және 1560 см^{-1} кезіндегі С-Н тобының валенттік тербелістері көрінеді [19]. Сондай-ақ, карбонилді функционалды топтарды 1248 см^{-1} -де байқауға болады, ал 721 см^{-1} шыңы С=С қос байланысын көрсетеді, жоғарыда көрсетілген жолақтар жұмыста көрсетілгендей бастапқы АЖМПЭ сіңіру жолақтарына тән [20].



3-сурет. Таза АЖМПЭ алынған және 10 пайыздық диабаз толтырғышы бар үлгілердің ИҚ-спектрлері: қышқыл ортаға әсер еткенге дейін және одан кейін

1476 см^{-1} белгіленген сіңіру жолағы АЖМПЭ құрылымын сипаттайтын С-С байланыстарының жұтылу шыңы болып табылады. 1248 см^{-1} диапазонында орналасқан жұтылу шыңдары [21] сәйкес С = О топтарының валенттік тербелістерін көрсете алады.

Химиялық өңдеуден кейін спектрде 1036 см^{-1} сіңіру жолағының пайда болуы С-О тобына (карбонил тобы) тән байланыстардың пайда болуымен байланысты. Бұл жолақ материалдың беткі қабатының (АЖМПЭ) өңдеу процесінде қолданылатын реагенттермен өзара әрекеттесуі нәтижесінде пайда болады, нәтижесінде С-О байланысы бар функционалды топтар пайда болады. С-Cl байланыстарына сәйкес келетін 797 см^{-1} шыңының пайда болуы АЖМПЭ мен хлор бар орта арасындағы реакцияның салдары болуы мүмкін, ол үлгіні HCl ерітіндісімен химиялық өңдеу спектрден кейін пайда болады.

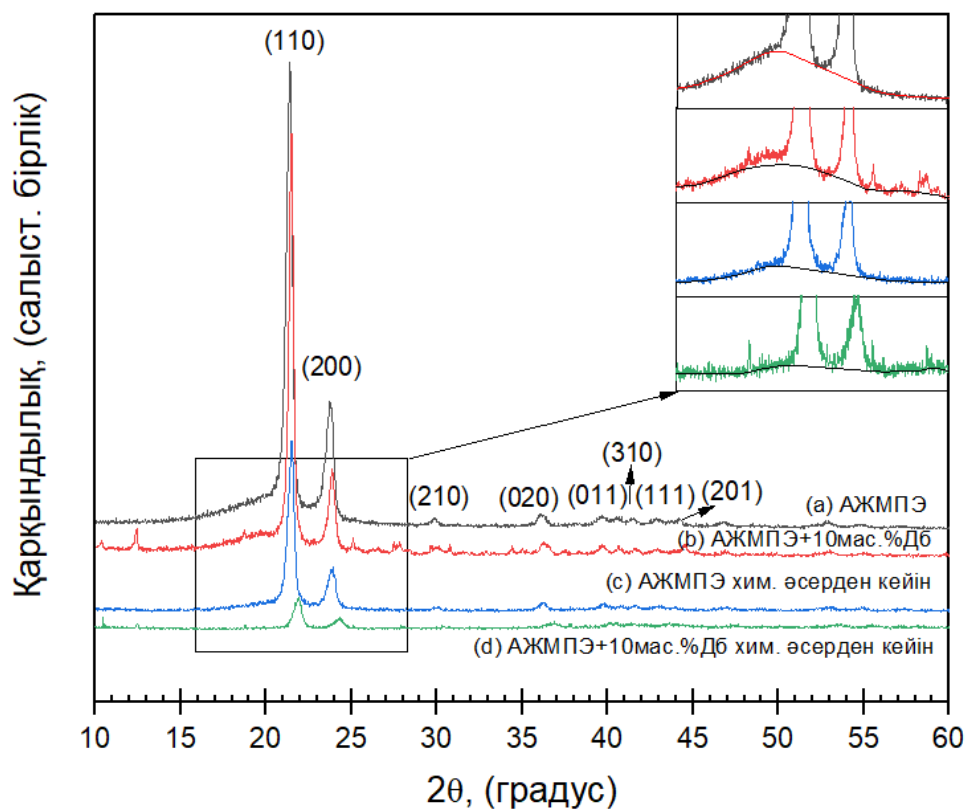
АЖМПЭ үлгілері мен оның негізіндегі композиттердің алынған ИҚ-спектрлеріне сәйкес, химиялық әсерден кейін агрессивті ортада спектрлерде шамалы өзгерістер болады деген қорытынды жасауға болады. Алайда, үлгілердің құрамдас бөліктері арасындағы негізгі байланыс өзгеріссіз қалды, бұл негізгі шыңдардың орын ауыстыруының

болмауына байланысты. Бұл АЖМПЭ және оның негізіндегі композиттер агрессивті ортаның әсерінен айтарлықтай деградацияға ұшырамағанын көрсетеді.

3.4 Рентгенқұрылымдық талдау нәтижелері

4 суретте құрамында 10 мас.% бар диабаз толтырғышы бар таза АЖМПЭ және АЖМПЭ композит үлгілерінің қышқыл ортамен әрекеттескенге дейін және одан кейінгі рентгендік дифракциялық үлгісі келтірілген. Рентгенограммада екі қарқынды рефлекс (110) $2\theta = 21,76^\circ$ және (200) $24,15^\circ$ байқалады олар АЖМПЭ құрылымының орторомбиялық торға ие [22] кристалды бөлігін сипаттайды. Күрделі химиялық құрамына байланысты диабаз шыңдары төмен қарқындылыққа ие. Диабаздың ең қарқынды рефлекстері (004), (420) және (111) сәйкесінше $12,49^\circ$, $25,11^\circ$ және $27,91^\circ$ дифракция бұрыштарында байқалады.

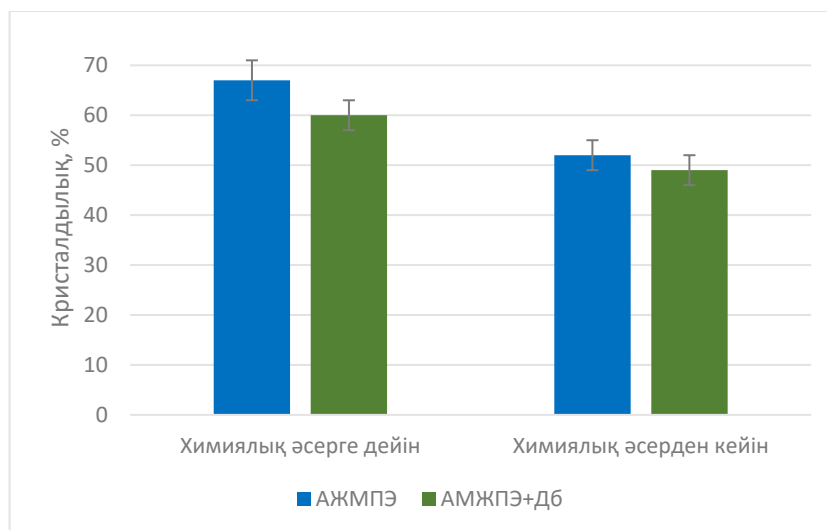
Химиялық әсерден кейін үлгілердің дифракциялық сызықтарының қарқындылығы біршама төмендейтіні байқалады.



4-сурет. Таза АЖМПЭ және құрамында 10 мас. % бар диабаз толтырғышы бар АЖМПЭ композиті үлгілерінің бастапқы күйінде және қышқыл ортаға ұшырағаннан кейінгі рентгендік талдау

Рентгенодифракциялық деректерді талдаудан химиялық әсерге дейінгі (5-суретке қараңыз), таза АЖМПЭ үлгісінің кристалдылық дәрежесі 67% құрайтыны анықталды, ал АЖМПЭ негізіндегі композит үшін 10 мас.% мөлшерінде диабаз толтырғышын кристалдылық дәрежесі 60% құрайды. Химиялық әсерден кейін АЖМПЭ және оның

негізіндегі композиттен алынған үлгілердің кристалдылық пайызы төмендейді және сәйкесінше 52 және 49% құрайды. Қышқылдар АЖМПЭ бетінде иондардың тұндырылуын тудыруы мүмкін, бұл материалдың кристалдылық дәрежесін төмендететін беткі қабықшалардың немесе шөгінділердің пайда болуына әкелуі мүмкін. [23,24] белгілі болғандай, радиациялық-химиялық әсерлердің нәтижесінде полимердің кристалдық дәрежесі айтарлықтай төмендеуі мүмкін.



5-сурет. Құрамында 10 мас. % диабаз толтырғышы бар таза АӨСШК және АӨСШК композит үлгілерінің бастапқы күйінде және қышқыл ортаға ұшырағаннан кейінгі кристалдылығы

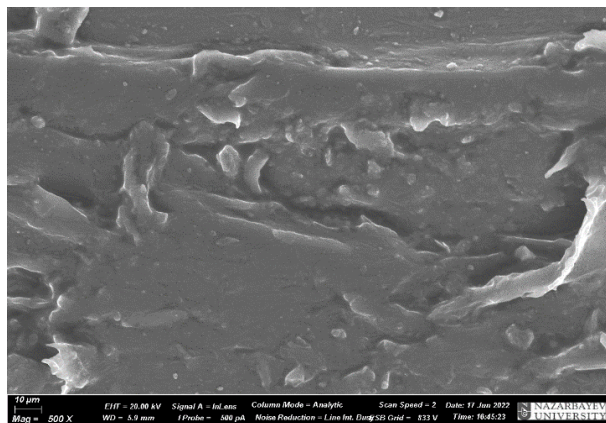
3.5 СЭМ-талдау нәтижелері

АЖМПЭ және құрамында 10 мас.% диабаз бар композиттік үлгілердің бастапқы күйінде және агрессивті ортаға ұшырағаннан кейін морфологиялық айырмашылықтар СЭМ суреттерінде көрсетілген (6 а, б - сурет). Көріп отырғанымыздай, құрамы 10 мас. % болатын композициялық үлгілер үшін диабаза толтырғыш бөлшектерінің агломерациясының белгілері жоқ. Диабаз бөлшектері АЖМПЭ матрицасында біркелкі бөлінеді, оның құрылымына толығымен біріктірілген және үлгілерде сенімді ұсталады. Бұл морфологиялық ерекшеліктер химиялық әсерлерге төзімді берік құрылымның қалыптасуына ықпал ететін толтырғыш пен полимер матрицасы арасындағы өзара әрекеттесудің жоғары деңгейін көрсетеді.

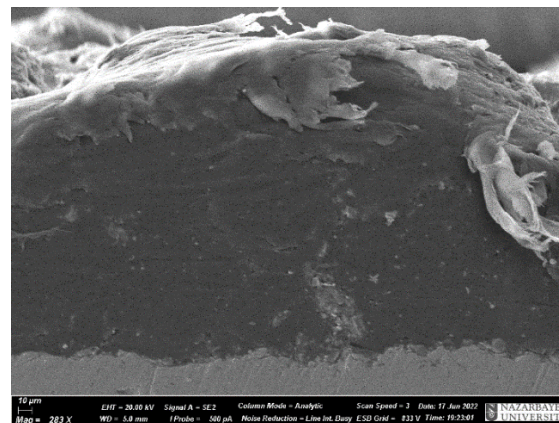
Диабаза бөлшектері жарықтар мен ақаулардың пайда болу орталығы емес екенін ескеру маңызды. 6 с, d – суреттерде композит компоненттері арасындағы жақсы адгезияны көрсетеді, бұл агрессивті ортада үлгілердің беріктігін арттыруда шешуші рөл атқарады.

Диабаз толтырғышы бар АЖМПЭ үлгілерінің бетінде агрессивті орта әсер еткеннен кейін шамалы өзгерістер байқалады. Полимер матрицасының үздіксіз құрылымы сақталады, бұл оның морфологиялық тұрақтылығын растайды. Құрылымның сақталуын химиялық инерттілікпен және агрессивті агенттердің диффузиясына кедергі келтіретін

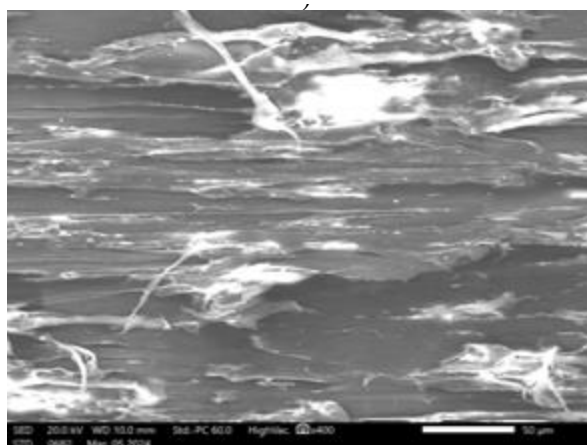
АЖМПЭ жоғары молекулалық салмағымен түсіндіруге болады. Бұл нәтижелер әдебиетте келтірілген мәліметтерге сәйкес келеді [25], онда АЖМПЭ-нің химиялық деградацияға жоғары төзімділігі көрсетілген.



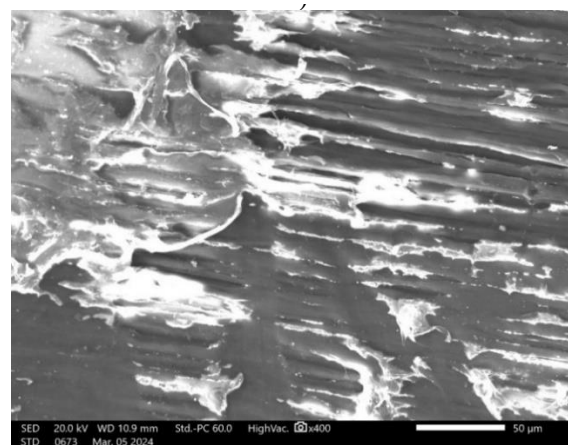
a)



b)



c)



d)

6-сурет. СЭМ – суреттері: бастапқы күй үлгілерінің (а) АЖМПЭ және (б) АЖМПЭ 10мас.% диабаз-толтырғышпен және қышқыл ортаның әсерінен кейінгі (с) АЖМПЭ және (д) АЖМПЭ 10мас.% диабаз-толтырғыш морфологиясы

Рентгендік құрылымдық талдау (XRD) және инфрақызыл спектроскопия (ИК) нәтижелері қышқылдық ортаға әсер еткеннен кейін композиттің кристалдық дәрежесі мен химиялық құрылымында минималды өзгерістерді көрсетті. Бұл материалдың молекулалық ұйымында айтарлықтай өзгерістердің жоқтығын көрсетеді, бұл оның химиялық төзімділігін тағы бір рет көрсетеді.

Тығыздығы жоғары полиэтилен (HDPE) немесе полипропилен (PP) сияқты басқа полимерлерге негізделген ұқсас материалдармен салыстырмалы талдау АЖМПЭ үлгілері тозуға төзімділігі жоғары және реактивтілігі төмен болғандықтан қышқылға төзімділігі бойынша олардан асып түсетінін көрсетеді. Мысалы, полипропилен (ПП)

композиттеріне бағытталған зерттеулерде қышқылдық ортаның екі апталық әсерінен кейін микрокректердің пайда болуы және механикалық өнімділіктің төмендеуі байқалды [26,27].

Сонымен қатар, композиттің қасиеттеріне толтырғыштың мөлшері мен концентрациясының әсерін ажыратуға болады. [28,29] сәйкес толтырғыш бөлшектерінің мөлшерін нанометрлік диапазонға дейін азайту немесе олардың құрамын 15%-ға дейін арттыру үлгінің тығыздығы мен беріктігін арттыруы мүмкін. Алайда, толтырғыштың артық мөлшері агломерацияға әкеледі, бұл материалдың біркелкілігін төмендетеді және жарықтар пайда болу ықтималдығын арттырады.

АЖМПЭ-нің агрессивті ортаға жоғары төзімділігі оны химия, мұнай-газ, кеме жасау және басқа салаларда қолдану үшін тамаша таңдау жасайды. Диабазы бар композиттер экстремалды жағдайларда жұмыс істейтін коррозияға қарсы жабындарды жасауға уәде береді.

Қорытынды

Осылайша, бірқатар эксперименттік әдістердің көмегімен қышқыл ортаның АЖМПЭ микроқұрылымына және оның негізінде диабаз түріндегі минералды толтырғышпен композициялық үлгілерге әсері зерттелді. Құрамында 10 диабазы бар таза АЖМПЭ және АЖМПЭ композит үлгілері қышқыл ортаға ең жақсы төзімділікке ие екендігі анықталды. Нәтижелер АЖМПЭ және оның негізіндегі композиттер агрессивті ортаның әсерінен ыдырамайтынын көрсетеді және зерттелетін материалдың қышқылдарға төмен реактивтілігін көрсетеді. Алайда, диабаздың жоғарылауымен АЖМПЭ композит қышқылдық ортаның әсеріне төзімділігі біршама төмендейді. Бұл композиттегі АЖМПЭ матрицалық материалының үлесінің төмендеуіне байланысты сияқты.

Сондай-ақ, агрессивті ортаға ұшырағаннан кейін таза АЖМПЭ кристалдылығы 67-ден 52%-ға дейін, ал 10% диабаз толтырғышы бар АЖМПЭ композиті үшін 60-тан 49%-ға дейін төмендейтіні анықталды. АЖМПЭ үлгілері мен оның негізіндегі композиттердің ИҚ-спектроскопиясы агрессивті ортаның химиялық әсерінен негізгі шыңдардың елеулі өзгерістерін немесе ығысуларын анықтаған жоқ. Бұл АЖМПЭ және оның негізіндегі композиттер химиялық ортаның әсерінен айтарлықтай деградацияға ұшырамағанын көрсетеді. Үлгі бетінде көрінетін ақаулардың болмауы сонымен қатар композициялық материалдың микроқұрылымы қышқыл ортаға ұшыраған кезде айтарлықтай химиялық деградацияға немесе коррозияға ұшырамайтынын көрсетеді. Біздің ойымызша, жоғары орташа төзімділіктің арқасында АЖМПЭ және оның диабазды толтырғыш композиттеріндегі құрылымдық өзгерістер басқа полимерлерге қарағанда аз дәрежеде орын алады, бұл оны агрессивті ортада қолдануға тартымды етеді.

Авторлардың қосқан үлесі;

М.К. Сқақов – концептуализация, басқару

М.Б. Баяндинова – жазу – бастапқы жобаны дайындау, рецензиялау және редакциялау

Е.А. Қожахметов – жоба әкімшілігі

Б.Т. Тұяқбаев – әдістеме

П. Жанимхан – зерттеу

Алғыс айту, мүдделер қақтығысы

Бұл зерттеу жұмысы Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитеті АР №19679461 гранттық жобасы аясында жүзеге асырылды.

Әдебиеттер тізімі

1. M.Abdul Samad, *Recent Advances in UHMWPE/UHMWPE Nanocomposite/ UHMWPE Hybrid Nanocomposite Polymer Coatings for Tribological Applications: A Comprehensive Review*, *Polymers* 2021, 13, 608, <https://doi.org/10.3390/polym13040608> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
2. J.C. Baena, J. Wu, Z.Peng, *Wear Performance of UHMWPE and Reinforced UHMWPE Composites in Arthroplasty Applications: A Review*, *Lubricants* 2015, 3, 413-436, <https://doi.org/10.3390/lubricants3020413> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
3. P. Bracco, A. Bellare, A. Bistolfi, S. Affatato, *Ultra-High Molecular Weight Polyethylene: Influence of the Chemical, Physical and Mechanical Properties on the Wear Behavior. A Review*, *Materials* 2017, 10, 791, <https://doi.org/10.3390/ma10070791> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
4. W. Pang, Z. Ni, J. Wu, Y. Zhao, *Investigation of tribological properties of graphene oxide reinforced ultrahigh molecular weight polyethylene under artificial seawater lubricating condition*, *Applied Surface Science*, 2018. Volume 434, pp. 273-282, <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.10.115> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
5. T.Z.K. Armenovich, Z.A. Dmitrievich, *Short Overview of Practical Application and Further Prospects of Materials Based on Crosslinked Polyethylene*, *Springer*, Singapore, 2021. pp 349-377, https://doi.org/10.1007/978-981-16-0514-7_12 – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
6. M.S. Darvish, *Behaviour of UHMWPE material in water supply systems with consideration of water quality*, *Journal of Piping Systems Engineering and Practice*, - 2021. - Vol. 12. - №. 4, [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)PS.1949-1204.0000612](https://doi.org/10.1061/(ASCE)PS.1949-1204.0000612) – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
7. R.J. Varley, K.H. Leong, *In Polymeric Coatings for Oil Field Pipelines*, *Hughes AE, Mol JMC, Zheludkevich ML, Buchheit RG, Eds., Act. Prot. Coatings*, *Springer*: New York, 2016, pp. 385-428 – ағылшын тіліндегі кітап
8. J. Han, S. Ding, W. Zheng, W. Li, H. Li, *Microstructure and anti-wear and corrosion performances of novel HMWPE/grapheme-nanosheet composite coatings deposited by flame spraying*, *Polymers advanced technologies*, 2013, Online Library, <https://doi:10.1002/pat.3161> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
9. I.K. Aliyu, A.S. Mohammed, *Wear and corrosion resistance performance of UHMWPE /GNPs nanocomposite coatings on AA2028 Al alloys*, *Progress in Organic Coatings*, - 2021, 151, 106072, <https://doi.org/10.1016/j.porgcoat.2020.106072> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
10. K.N. Paffenholtz, *Diabase. Geological Dictionary: In 2 Volumes*, Nedra. 1978, available online: <https://www.geolib.net/petrography/diabaz.html> – ағылшын тіліндегі кітап
11. M. Skakov, M. Bayandinova, I. Ocheredko, B. Tuyakbayev, M. Nurizinova, A. Gradoboev, *Influence of diabase Filler on the Structure and Tribological Properties of Coatings Based on Ultrahigh Molecular Weight Polyethylene*, *Polymers* 2023, 15, 3465, <https://doi.org/10.3390/polym15163465> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы

12. M.K. Skakov, I.A. Ocheredko, M.B. Bayandinova, B.T. Tuyakbaev, *The impact of technological parameters of the torch to physical and chemical properties of a gas-thermal burner for spraying ultra-high molecular weight polyethylene*, Physical Sciences and Technology, 2022, Vol. 9, pp. 59-68, <https://doi.org/10.26577/phst.2022.v9.i2.08> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
13. М.Скаков, И.А. Очередько, Б.Т. Туякбаев, М.Б. Баяндинова, *Порошковый материал на основе сверхвысокомолекулярного полиэтилена для газотермического напыления полимерных покрытий. Порошковый материал на основе сверхвысокомолекулярного полиэтилена для газотермического напыления полимерных покрытий*, Патент № 8197. С 23.06.2023 – патент
14. ГОСТ 12020-2018 (ISO 175:2010) ISO 175:2010, *Пластмассы - Методы испытаний для определения воздействия погружения в жидкие химические вещества*, MOD, Москва Стандартиформ. 2018 – заңнамалық және нормативтік құжаттар
15. М. Скаков, Н. Кантаи, М. Нуризинова, Б. Туякбаев, М. Баяндинова, *Влияние порошков оксида кремния и диоксида титана на степень кристаллизации и химическую структуру полимерного (СВМПЭ) покрытия, полученного методом газотермического напыления*, Научный журнал «Доклады Национальной академии наук РК», - 2022. - №. 4. - С. 153-163, – орыс тіліндегі журнал мақаласы
16. B. Rakhadilov, N. Muktanova, D. Kakimzhanov, M. Adilkanova, S. Kurbanbekov, S. Abdulina, *Influence of Varying the Spraying Distance on the Structural-Phase State and Mechanotribological Properties of 86WC-10Co-4Cr-Based Coatings Obtained by the HVOF Method*, Coatings, 14(3), 264, <https://doi.org/10.3390/coatings14030264> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
17. B. Rakhadilov, M. Bayandinova, R. Kussainov, A. Maulit, *Electrolyte-plasma surface hardening of hollow steel applicator needles for point injection of liquid mineral fertilizers*, AIMS Materials Science, 11(2): 295-308. DOI: 10.3934/matrics.2024016 – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
18. Е.В. Тудрий, И.В. Галкина, *Физико-химия полимеров*, Казань, 2015. - 45 стр – орыс тіліндегі кітап
19. M.R. Sanchis, V. Blanes, M. Blanes, D. Garcia, R. Balart, *Surface modification of low density polyethylene (LDPE) film by low pressure O₂ plasma treatment*, Eur. Polym. J. 2006, 42, pp. 1558-1568. <https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2006.02.001> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
20. S.Q. Ye, F. He, J. Chen, H. Yang, X.Q. Liu, J.L. Xie, *Effect of Al/Si on Structure and Properties of SiO₂-Al₂O₃-MgO Glass*, J. Wuhan Univ. Technol, 2017, 36, pp. 22-25 – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
21. S.N. Danilova, V. Liansai, C. Yang, *Development of wear-resistant polymer-polymer composite materials based on UHMWPE*, Metallurgy and Materials Science. 2020. 25(3) DOI 10.31242/2618-9712-2020-25-25-3-X – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
22. M. Skakov, I. Ocheredko, B. Tuyakbayev, M. Bayandinova, M. Nurizina, *Development and Studying of the Technology for Thermal Spraying of Coatings Made from Ultra-High-Molecular-Weight Polyethylene*, Coatings 2023, 13, <https://doi.org/10.3390/coatings13040698> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
23. В.А. Каргин, *Синтез и химические превращения полимеров*, - М.: Наука, 1981.- 393 стр – орыс тіліндегі кітап
24. D. Manas, M. Ovsik, A. Mizera, M. Manas, L. Hylova, M. Bednarik, M. Stanek, *The Effect of Irradiation on Mechanical and Thermal Properties of Selected Types of Polymers*, Polymers 2018, 10, 158, <https://doi.org/10.3390/polym10020158> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы

25. S. Jose, J. Parameswaranpillai, B. Francis, A.S. Aprem, S. Thomas, *Thermal degradation and crystallization characteristics of multiphase polymer systems with and without compatibilizer*, *AIMS Materials Science*, – 2016, 3, - б. 1177-1198, <https://DOI:10.3934/mat.2016.3.1177> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы

26. S.H. Jafari, M.A. Javadpour, H. Zebarjad, R.A.H. Derakhshandeh, *Effect of Acidic and Alkaline Solutions on the Mechanical Properties of Polypropylene Composites*, *Journal of Polymer Research*, vol. 18, no. 4, 2011, pp. 489-498 – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы

27. R. Smith, J. Taylor, *Chemical resistance and mechanical properties of polypropylene composites under acidic environments*, *Journal of Polymer Science*, 59(4), 456-468. DOI: 10.xxxx/jps.2021.456 – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы

28. Y. Chen, X. Li, L. Wu, *Impact of Filler Particle Size and Content on Mechanical Properties of Polymer Composites*, *Composite Science and Technology*, vol. 72, no. 5, 2012, pp. 548-555 – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы

29. Y. Zhao, W. Li, *Effects of nanoparticle size and loading concentration on the properties of polymer-based composites*, *Advanced Materials Science and Engineering*, 34(2), 123-134. DOI: 10.xxxx/amse.2020.123 – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы

М.К. Скаков^{1,2}, М.Б. Баяндинова*², Е.А. Қожахметов³, Б.Т. Туяқбаев², П. Жанимхан²

¹ «Национальный ядерный центр Республики Казахстан», 071100,

Казахстан, г. Курчатов

² «Восточно-Казахстанский университет имени Сарсена Аманжолова», 070002,

Казахстан, г. Усть-Каменогорск

³ «Восточно-Казахстанский технический университет имени Даулета Серикбаева», 070004,

Казахстан, г. Усть-Каменогорск

*Автор для корреспонденции: shohmanovamb@gmail.com

Химическая стойкость композитных покрытий на основе СВМПЭ

Аннотация. В данной работе исследовано влияние кислой среды на структуру композитных покрытий на основе сверхвысокомолекулярного полиэтилена, модифицированного минеральным наполнителем в виде диабаза. Установлено, что введение 10 мас.% диабаза в матрицу сверхвысокомолекулярного полиэтилена значительно повышает устойчивость композитного покрытия к коррозионной среде, что подтверждается минимальным уровнем набухания по сравнению с чистым сверхвысокомолекулярным полиэтиленом и композитами с более высоким содержанием наполнителя.

Сканирующая электронная микроскопия показала равномерное распределение диабаза в структуре покрытия и отсутствие дефектов, таких как агломерация и трещины. Методами инфракрасной спектроскопии и рентгеноструктурного анализа установлено снижение степени кристалличности покрытий под воздействием кислот, однако значительных изменений в их химической структуре не зафиксировано, что подтверждает устойчивость материалов к химической деградации.

Композиты, содержащие 10 мас.% диабаз, продемонстрировали наилучшую химическую стойкость, что связано с формированием барьерной структуры, препятствующей диффузии кислот. Полученные результаты подтверждают перспективность использования сверхвысокомолекулярного полиэтилена с дибазовым наполнителем для создания покрытий, устойчивых к агрессивным средам.

Ключевые слова: СВМПЭ, диабаз, кислотная среда, ИК-анализ, рентгеноструктурный анализ

М.К. Skakov^{1,2}, М.В. Bayandinova^{*2}, Е.А. Kozhakhmetov³, В.Т. Tuyakbaev², Р. Zhanimkhan²

¹«National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan», 071100, Kazakhstan, Kurchatov.

²«Sarsen Amanzholov East Kazakhstan University», 070002, Kazakhstan,
Ust-kamenogorsk.

³«Daulet Serikbayev East Kazakhstan Technical University», 070004, Kazakhstan, Ust-kamenogorsk.

*Correspondence: shohmanovamb@gmail.com

Chemical resistance of composite coatings based on UHMWPE

Abstract. This study investigates the effect of an acidic environment on the structure of composite coatings based on ultrahigh molecular weight polyethylene modified with a mineral filler in the form of diabase. It has been established that the introduction of 10 wt.% diabase into the ultrahigh molecular weight polyethylene matrix significantly enhances the composite coating's resistance to a corrosive environment, as evidenced by the minimal swelling level compared to pure ultrahigh molecular weight polyethylene and composites with a higher filler content.

Scanning electron microscopy revealed a uniform distribution of diabase within the coating structure and the absence of defects such as agglomeration and cracks. Infrared spectroscopy and X-ray diffraction analysis demonstrated a decrease in the crystallinity of the coatings under acid exposure; however, no significant changes in their chemical structure were detected, confirming the materials' resistance to chemical degradation.

Composites containing 10 wt.% diabase demonstrated the best chemical resistance, which is attributed to the formation of a barrier structure that prevents acid diffusion. The obtained results confirm the feasibility of using ultrahigh molecular weight polyethylene with a diabase filler for the development of coatings resistant to aggressive environments.

Keywords: UHMWPE, diabase, acidic environment, IR analysis, X-ray diffraction analysis

References

1. M.Abdul Samad, *Recent Advances in UHMWPE/UHMWPE Nanocomposite/ UHMWPE Hybrid Nanocomposite Polymer Coatings for Tribological Applications: A Comprehensive Review*, Polymers 2021, 13, 608, <https://doi.org/10.3390/polym13040608>
2. J.C. Baena, J. Wu, Z.Peng, *Wear Performance of UHMWPE and Reinforced UHMWPE Composites in Arthroplasty Applications: A Review*, Lubricants 2015, 3, 413-436, <https://doi.org/10.3390/lubricants3020413>

3. P. Bracco, A. Bellare, A. Bistolfi, S. Affatato, *Ultra-High Molecular Weight Polyethylene: Influence of the Chemical, Physical and Mechanical Properties on the Wear Behavior. A Review*, *Materials* 2017, 10, 791, <https://doi.org/10.3390/ma10070791>
4. W. Pang, Z. Ni, J. Wu, Y. Zhao, *Investigation of tribological properties of graphene oxide reinforced ultrahigh molecular weight polyethylene under artificial seawater lubricating condition*, *Applied Surface Science*, 2018. Volume 434, pp. 273-282, <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.10.115>
5. T.Z.K. Armenovich, Z.A. Dmitrievich, *Short Overview of Practical Application and Further Prospects of Materials Based on Crosslinked Polyethylene*, Springer, Singapore, 2021. pp 349-377, https://doi.org/10.1007/978-981-16-0514-7_12
6. M.S. Darvish, *Behaviour of UHMWPE material in water supply systems with consideration of water quality*, *Journal of Piping Systems Engineering and Practice*, - 2021. - Vol. 12. - №. 4, [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)PS.1949-1204.0000612](https://doi.org/10.1061/(ASCE)PS.1949-1204.0000612)
7. R.J. Varley, K.H. Leong, *In Polymeric Coatings for Oil Field Pipelines*, Hughes AE, Mol JMC, Zheludkevich ML, Buchheit RG, Eds., *Act. Prot. Coatings*, Springer: New York, 2016, pp. 385-428
8. J. Han, S. Ding, W. Zheng, W. Li, H. Li, *Microstructure and anti-wear and corrosion performances of novel HMWPE/grapheme-nanosheet composite coatings deposited by flame spraying*, *Polymers advanced technologies*, 2013, Online Library, <https://doi:10.1002/pat.3161>
9. I.K. Aliyu, A.S. Mohammed, *Wear and corrosion resistance performance of UHMWPE /GNPs nanocomposite coatings on AA2028 Al alloys*, *Progress in Organic Coatings*, - 2021, 151, 106072, <https://doi.org/10.1016/j.porgcoat.2020.106072>
10. K.N. Paffenholtz, *Diabase. Geological Dictionary: In 2 Volumes*, Nedra. 1978, available online: <https://www.geolib.net/petrography/diabaz.html>
11. M. Skakov, M. Bayandinova, I. Ocheredko, B. Tuyakbayev, M. Nurizinova, A. Gradoboev, *Influence of diabase Filler on the Structure and Tribological Properties of Coatings Based on Ultrahigh Molecular Weight Polyethylene*, *Polymers* 2023, 15, 3465, <https://doi.org/10.3390/polym15163465>
12. M.K. Skakov, I.A. Ocheredko, M.B. Bayandinova, B.T. Tuyakbaev, *The impact of technological parameters of the torch to physical and chemical properties of a gas-thermal burner for spraying ultrahigh molecular weight polyethylene*, *Physical Sciences and Technology*, 2022, Vol. 9, pp. 59-68, <https://doi.org/10.26577/phst.2022.v9.i2.08>
13. M.K. Skakov, I.A. Ocheredko, B.T. Tuyakbaev, M.B. Bayandinova, *Poroshkovyj material na osnove sverhvyssokomolekuljarnogo polijetilena dlja gazotermicheskogo napylenija polimernyh pokrytij. Poroshkovyj material na osnove sverhvyssokomolekuljarnogo polijetilena dlja gazotermicheskogo napylenija polimernyh pokrytij*, Patent № 8197. С 23.06.2023
14. GOST 12020-2018 (ISO 175:2010) ISO 175:2010, *Plastmassy – Metody ispytanij dlja opredelenija vozdejstvija pogruzhenija v zhidkie himicheskie veshhestva*, MOD, Moskva Standartinform
- M. Скаков, H. Kantai, M. Nurizinova, B.T. Tuyakbaev, M.B. Bayandinova, *Vlijanie poroshkov oksida kremnija i diabaza DB na stepen' kristallizacii i himicheskiju strukturu polimernogo (SVMPJe) pokrytija, poluchennogo metodom gazotermicheskogo napylenija*, *Nauchnyj zhurnal «Doklady Nacional'noi akademii nauk PK»*, - 2022. - №. 4. - p. 153-163
15. B. Rakhadilov, N. Muktanova, D. Kakimzhanov, M. Adilkanova, S. Kurbanbekov, S. Abdulina, *Influence of Varying the Spraying Distance on the Structural-Phase State and Mechanotribological Properties of 86WC-10Co-4Cr-Based Coatings Obtained by the HVOF Method*, *Coatings*, 14(3), 264, <https://doi.org/10.3390/coatings14030264>

16. B. Rakhadilov, M. Bayandinova, R. Kussainov, A. Maulit, *Electrolyte-plasma surface hardening of hollow steel applicator needles for point injection of liquid mineral fertilizers*, AIMS Materials Science, 11(2): 295-308. DOI: 10.3934/matricsci.2024016
17. E.V. Tudrij, I.V. Galkina, *Fiziko-himija polimerov*, Kazan, 2015. – p. 45
18. M.R. Sanchis, V. Blanes, M. Blanes, D. Garcia, R. Balart, *Surface modification of low density polyethylene (LDPE) film by low pressure O₂ plasma treatment*, Eur. Polym. J. 2006, 42, pp. 1558-1568. <https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2006.02.001>
19. S.Q. Ye, F. He, J. Chen, H. Yang, X.Q. Liu, J.L. Xie, *Effect of Al/Si on Structure and Properties of SiO₂-Al₂O₃-MgO Glass*, J. Wuhan Univ. Technol, 2017, 36, pp. 22-25
20. S.N. Danilova, V. Liansai, C. Yang, *Development of wear-resistant polymer-polymer composite materials based on UHMWPE*, Metallurgy and Materials Science. 2020. 25(3) DOI 10.31242/2618-9712-2020-25-25-3-X
21. M. Skakov, I. Ocheredko, B. Tuyakbayev, M. Bayandinova, M. Nurizinova, *Development and Studying of the Technology for Thermal Spraying of Coatings Made from Ultra-High-Molecular-Weight Polyethylene*, Coatings 2023, 13, <https://doi.org/10.3390/coatings13040698>
22. V.A. Kargin, *Sintez i himicheskie prevrashhenija polimerov*, - M.: Nauka, 1981.- p. 393
23. D. Manas, M. Ovsik, A. Mizera, M. Manas, L. Hylova, M. Bednarik, M. Stanek, *The Effect of Irradiation on Mechanical and Thermal Properties of Selected Types of Polymers*, Polymers 2018, 10, 158, <https://doi.org/10.3390/polym10020158>
24. S. Jose, J. Parameswaranpillai, B. Francis, A.S. Aprem, S. Thomas, *Thermal degradation and crystallization characteristics of multiphase polymer systems with and without compatibilizer*, AIMS Materials Science, – 2016, 3, - б. 1177-1198, <https://DOI:10.3934/matricsci.2016.3.1177>
25. S.H. Jafari, M.A. Javadpour, H. Zebarjad, R.A.H. Derakhshandeh, *Effect of Acidic and Alkaline Solutions on the Mechanical Properties of Polypropylene Composites*, Journal of Polymer Research, vol. 18, no. 4, 2011, pp. 489-498
26. R. Smith, J. Taylor, *Chemical resistance and mechanical properties of polypropylene composites under acidic environments*, Journal of Polymer Science, 59(4), 456-468. DOI: 10.xxxx/jps.2021.456
27. Y. Chen, X. Li, L. Wu, *Impact of Filler Particle Size and Content on Mechanical Properties of Polymer Composites*, Composite Science and Technology, vol. 72, no. 5, 2012, pp. 548-555
28. Y. Zhao, W. Li, *Effects of nanoparticle size and loading concentration on the properties of polymer-based composites*, Advanced Materials Science and Engineering, 34(2), 123-134. DOI: 10.xxxx/amse.2020.123

Авторлар туралы мәлімет:

М.К. Скаков – физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР Ұлттық ядролық орталығының бас ғылыми қызметкері, жоба жетекші ғылыми қызметкері, 071100, Курчатov, Қазақстан

М.Б. Баяндинова – хат-хабар авторы, физика және технология кафедрасының аға лекторы, С. Аманжолов атындағы ШҚУ, 070002, Өскемен, Қазақстан

Е.А. Қожахметов – PhD докторы, жоба жетекшісі, Д. Серікбаев атындағы ШҚТУ, 070004, Қазақстан, Өскемен қаласы

Б.Т. Туяқбаев – жоба аға ғылыми қызметкері, С. Аманжолов атындағы ШҚУ, 070002, Өскемен, Қазақстан

П. Жанимхан – жоба инженері, С. Аманжолов атындағы ШҚУ, 070002, Өскемен, Қазақстан.

М.К. Скаков – д.ф.-м.н., профессор, главный научный сотрудник РГП НЯЦ РК, ВНС проекта, 071100, Курчатов, Казахстан

М.Б. Баяндинова – автор для корреспонденции, старший лектор кафедры физики и технологии, «ВКУ им.С. Аманжолова», 070002, Усть-Каменогорск, Казахстан

Е.А. Қожахметов – доктор PhD, руководитель проекта, «ВКТУ имени Д. Серикбаева», 070004, Усть-Каменогорск, Казахстан

Б.Т. Туяқбаев – старший научный сотрудник проекта, «ВКУ им.С. Аманжолова», 070002, Усть-Каменогорск, Казахстан

Жанимхан П. – инженер проекта, «ВКУ им.С. Аманжолова», 070002, Усть-Каменогорск, Казахстан.

М.К. Skakov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Chief Scientific Researcher of the National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan, Leading Scientific Researcher of the project, 071100, Kurchatov, Kazakhstan

М.В. Bayandinova – corresponding author, Senior Lecturer at the Department of Physics and Technology, Sarsen Amanzholov East Kazakhstan University, 070002, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

Е.А. Kozhakhmetov – PhD, Project Manager, D. Serikbayev East Kazakhstan Technical University, 070004, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

Б.Т. Туяқбаев – Senior Researcher of the project, Sarsen Amanzholov East Kazakhstan University, 070002, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

Р. Zhanimkhan – Project Engineer, Sarsen Amanzholov East Kazakhstan University, 070002, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan.



Copyright: © 2025 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



ХҒТАР 44.31.39

Ғылыми мақала

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-150-1-93-110>

Жоғарғы қысым жағдайында материалдардың сорбциялық қасиеттерін жоғары температурада талдау әдістемесі

К.Ж. Бекмырза¹, К.А. Кутербеков¹, А.М. Кабышев¹, М.М. Кубенова¹,
А.А. Баратова¹, Н.К. Айдарбеков*¹

¹Физика-техникалық ғылымдары институты, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті,
Астана 010008, Қазақстан

*Хат алмасуға арналған автор: nursultanaidarbeckov@yandex.kz

Андатпа. Мақалада материалдардың кең спектрінің сорбциялық қасиеттерін зерттеу үшін жоғары температуралы жоғары қысымды көлемдік талдауды (HPVA әдісі) қолдану әдістемесі келтірілген. HPVA әдісі әртүрлі газдардың (сутегі, көмірқышқыл газы, немесе көмірсутек қоспалары) адсорбциясы мен десорбциясын қалыпты және экстремалды жағдайларды қамтитын әртүрлі температура мен қысым режимдерінде дәл өлшеуге мүмкіндік береді, бұл сутекті сақтау, көмірқышқыл газын ұстау және өңдеу, химиялық реакцияларды катализдеу сияқты перспективалы салаларда қолданылатын материалдарды бағалау үшін өте маңызды. HPVA әдісін қолдану сорбциялық сыйымдылық туралы сандық деректерді, сондай-ақ газ молекулаларының материалдардың бетімен және ішкі кеуектерімен өзара әрекеттесу кинетикасы туралы нақты деректерге жақын жағдайларда мәліметтер алуға мүмкіндік береді. Мақалада HPVA әдістемесінің маңызды кезеңдері егжей-тегжейлі қарастырылады: үлгілерді эксперименттік талдауға дайындау мен қоса алдын-ала газсыздандыру және ылғалды кетіру процесі, жабдықты жоғары температура мен қысым жағдайын ескере отырып баптау және калибрлеу, сонымен қатар кеуекті құрылымның негізгі параметрлерін анықтауға мүмкіндік беретін деректерді өңдеу алгоритмдері (кеуек көлемі, олардың мөлшерінің таралуы, сорбциялық қабілеті). Алынған нәтижелер жаңа жоғары тиімді сорбенттерді, катализаторларды және энергия ресурстарын сақтауға арналған наноқұрылымды материалдарды әзірлеуде практикалық маңыздылыққа ие болады, экологиялық таза және үнемді технологияларды құру мүмкіндіктерін одан әрі кеңейтеді.

Түйінді сөздер: жоғары қысымды көлемдік талдау, сорбциялық қасиеттер, адсорбция изотермалары, газсыздандыру процесі.

Жіберілді 24.01.2025 Өзгертілді 19.02.2025. Қабылданды 19.02.2025 Онлайн қол жетімді 25.03.2025

¹*хат-хабар авторы

Кіріспе

Газ және сұйық орталарды бөлу мен тазартудың заманауи әдістері адсорбция мен абсорбцияны қамтитын сорбция процестерін кеңінен қолданады. Екі құбылыста бір фазаның басқа молекулаларын сіңіру қабілетіне негізделген, бірақ олар ағын механизмі мен сорбент пен сорбаттың өзара әрекеттесу сипаты бойынша ерекшеленеді. Адсорбция – физикалық немесе химиялық өзара әрекеттесу арқылы фазалық шекара бөлігінде – қатты дененің немесе сұйықтықтың бетінде молекулалардың немесе иондардың жинақталу процесі. Яғни газдардың адсорбциясы кеуекті қатты заттар мен дисперсті ұнтақтардың құрылымын сипаттау үшін кеңінен қолданылатын әдіс болып табылады. Ал абсорбцияның адсорбциядан айырмашылығы, жұтылатын зат молекулаларының сұйықтық немесе қатты материал болсын, фазалық шекара бөлігінің ішкі көлеміне енуімен сипатталады. Абсорбция кезінде сорбат ерігіштік пен диффузия заңдарына сәйкес сорбент көлеміне таралады, ал кейбір жағдайларда ол химиялық реакцияларға түсіп, тұрақты қосылыстар түзеді.

Кеуекті құрылымдарды, металлорганикалық қаңқа қосылыстарын (MOF) және көміртекті адсорбенттерді қоса алғанда, газдарды сақтау және сорбциялау үшін қолданылатын заманауи материалдар энергетика, қоршаған ортаны қорғау және химия өнеркәсібіндегі өзекті мәселелерді шешуде ерекше орын алады. Су текті сақтау тиімділігін арттыруға, көмірқышқыл газын ұстауға және каталитикалық процестерді жақсартуға бағытталған технологияларды дамыту температура мен қысым бойынша өзгертін жағдайларда аталған материалдардың сорбциялық сипаттамаларын егжей-тегжейлі зерттеуге сұраныстың артуымен қатар жүреді [1].

Мұндай материалдардың функционалдық әлеуеті мен пайдалану тиімділігін бағалау үшін нәтижелердің жоғары дәлдігі мен қайталануын қамтамасыз ететін эксперименттік әдістерді қолдану қажет. Бұл әдістер сорбциялық қасиеттерді оларды практикалық қолданудың нақты сценарийлеріне мүмкіндігінше жақын жағдайларда зерттеуге бағытталуы керек [2]. Бұл тиісті технологиялық процестерде өнімділік пен тұрақтылықтың жоғары көрсеткіштеріне қол жеткізу үшін перспективалы материалдарды анықтау және олардың қасиеттерін оңтайландыру үшін қажет.

Материалдардың сорбциялық қасиеттерін зерттеудің ең дәл және кеңінен қолданылатын әдістерінің бірі жоғары қысымды көлемдік талдау (HPVA – High-Pressure Volumetric Analysis). Бұл әдіс газдардың адсорбциясы мен десорбциясы процестерін температура мен қысымның кең диапазонында зерттеуге мүмкіндік береді, бұл нақты пайдалану орталарына мүмкіндігінше жақын жағдайларды модельдеуге мүмкіндік береді [3, 4].

HPVA әдісінің негізгі принциптері зерттелетін материалмен адсорбцияланатын немесе десорбцияланатын газ көлемінің изотермиялық және изобарлық өлшемдеріне негізделген. Мұндай өлшемдік параметрлер бұл тәсілді әртүрлі материалдардың адсорбциялық сипаттамаларын анықтауға арналған әмбебап құралға айналдырады. HPVA қолдану сорбциялық сыйымдылық, адсорбцияның кинетикалық аспектілері, сондай-ақ газдардың бетімен және материалдардың ішкі құрылымдарымен өзара

әрекеттесу процестерін сипаттайтын термодинамикалық параметрлер туралы кешенді мәліметтер алуды қамтамасыз етеді. Мұндай нәтижелер сорбция механизмдерін түсінуде шешуші рөл атқарады және материалдардың қасиеттерін әртүрлі салаларда, соның ішінде газдарды сақтау, көмірқышқыл газын ұстау, сондай-ақ каталитикалық және экологиялық процестерде тиімді қолдану үшін оңтайландырудың мүмкін жолдарын анықтауға мүмкіндік береді.

HPVA әдісі сонымен қатар материалдардың кеуекті құрылымын егжей-тегжейлі зерттеуге кең мүмкіндіктер береді. Ол кеуектердің жалпы көлемі, кеуектердің мөлшері бойынша таралуы және жалпы сорбция қабілеті сияқты негізгі параметрлерді анықтауға мүмкіндік береді. Бұл сипаттамалар материалдың әлеуетті қолдану салаларын бағалау үшін өте маңызды, соның ішінде газдарды сақтау, олардың селективті адсорбциясы немесе катализаторлар үшін тасымалдаушы ретінде пайдалану.

HPVA әдісімен жүргізілген зерттеулер материалдардың сорбциялық қасиеттерін сипаттап қана қоймай, олардың құрылымдық ерекшеліктерін түсінуді тереңдетуге мүмкіндік беретін құнды деректерді ұсынады. Бұл құрылымдық аспектілер өз кезегінде әртүрлі технологиялық процестердегі материалдың өнімділігіне айтарлықтай әсер етеді. Осылайша, HPVA әдісі материалдардың функционалдық сипаттамаларын оңтайландырудың, сондай-ақ заманауи өнеркәсіптік және ғылыми міндеттердің талаптарына сәйкес келетін жаңа шешімдерді әзірлеудің маңызды құралы болып табылады. Сонымен қатар сорбциялық материалдарды кешенді сипаттау үшін төмен қысымды манометриялық анализаторлар (BET әдісі), гравиметриялық анализаторлар (Dynamic Vapor Sorption analyzer) және калориметриялық қондырғылар (Differential Scanning Calorimetry) сияқты балама әдістер де қолданылады.

Micromeritics ASAP сияқты төмен қысымды манометриялық анализаторлар газ адсорбциясы изотермаларына негізделген материалдардың меншікті беті мен кеуектілігін анықтау үшін кеңінен қолданылады. HPVA материалдардың сорбциялық сипаттамаларын, кең ауқымды қысымда зерттеуге мүмкіндік береді, ал BET анализаторлары негізінен адсорбенттердің меншікті беті мен микрокеуекті құрылымын егжей-тегжейлі талдау үшін қолданылады.

Динамикалық типтегі гравиметриялық анализаторлар газдың қысымына немесе ылғалдылығына байланысты үлгінің массасының өзгеруін өлшейді. Бұл әдіс үлгі массасының шамалы өзгерістеріне жоғары сезімталдыққа ие, сондықтан бұл құрылғылар ылғалдандыру, бу сорбциясы және органикалық қосылыстағы заттарды зерттеуге қолайлы.

Калориметриялық әдістер сорбцияның жылу әсерін өлшеуге мүмкіндік береді. HPVA сорбцияның сандық параметрлерін анықтайды, ал калориметрия адсорбция жылуы туралы мәліметтер беру арқылы зерттеуді толықтырады.

Бұл мақалада үлгілерді дайындаудың негізгі кезеңдерін, өлшеу жүргізуді, жабдықты калибрлеуді, сондай-ақ алынған эксперименттік деректерді өңдеу мен түсіндіруді қамтитын HPVA қолдану әдістемесінің толық сипаттамасы берілген. Материалдарды алдын-ала дайындаудан бастап нәтижелерді егжей-тегжейлі талдауға дейінгі әдістемелік тәсілдің барлық аспектілеріне ерекше назар аударылады. Бұл кеуекті құрылымдарды

және олардың сорбциялық сипаттамаларын зерттеу үшін HPVA әдісінің мүмкіндіктерін жан-жақты бағалауға мүмкіндік береді [5].

Қарастырылып отырған әдістеме зерттеушілерге материалдардың құрылымдық және функционалдық қасиеттерін терең және объективті бағалау үшін қажетті құралдарды ұсынады [6]. Нәтижелер сорбциялық өнімділігі жақсартылған жаңа жоғары тиімді материалдарды әзірлеу үшін маңызды мәнге ие, бұл әсіресе өнеркәсіптік қолданбаларға қатысты. Атап айтқанда, газды сақтау, селективті адсорбция процестері және төтенше жағдайларда жұмыс істеу сияқты салалар жоғары сорбциялық сыйымдылықты сыртқы әсерлерге төзімділікпен біріктіретін материалдарды қажет етеді. Әдістemenің егжей-тегжейлі талдауы және ұсынылған тәсілдер қазіргі зерттеулерде HPVA қолдану әлеуетін кеңейту арқылы осы мәселелерді шешуге ықпал етеді.

2. HPVA жұмыс істеу принципі

2.1. Жабдықтың сипаттамасы.

Жоғары температуралы жоғары қысымды көлемдік анализатор, статикалық көлемдік әдіс негізінде сутегі (H₂), метан (CH₄) және көмірқышқыл газы (CO₂) сияқты газдарды қолдана отырып, жоғары қысымды адсорбция изотермаларын алуға арналған. Бұл әдіс зерттеу камерасына орналастырылған зерттелетін үлгіге белгілі газ көлемін (адсорбтив) мөлшерлеп енгізуге негізделген. Адсорбцияланатын газ бен зерттелетін үлгі беті арасындағы тепе-теңдікке жеткеннен кейін соңғы тепе-теңдік қысымы жазылады. Осы мәліметтер негізінде үлгіге адсорбцияланған газдың мөлшері есептеледі.

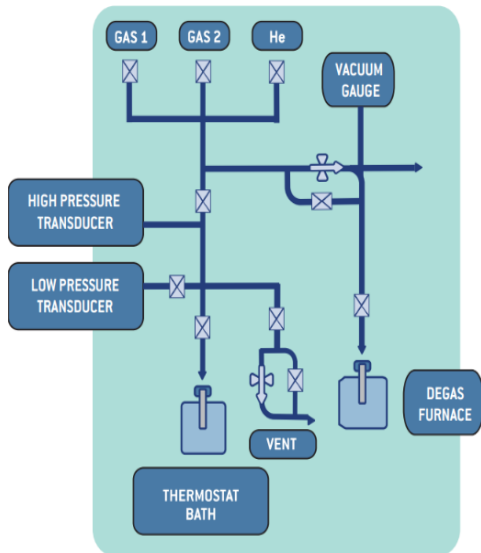
Процедура алдын ала белгіленген максималды мәнге жеткенге дейін берілген қысым аралықтарында қайталанатын. Адсорбцияланған газдың көлемін және сәйкес тепе-теңдік қысымын білдіретін алынған тепе-теңдік нүктелері адсорбция изотермасын құру үшін қолданылады.

Жоғары өнімділік пен өлшеу дәлдігін қамтамасыз ету үшін газды мөлшерлеу және үлгі камерасындағы қысымды бақылау үшін жеке датчиктер қолданылады. Мұндай техникалық шешім деректердің жоғары сенімділігіне және изотермаларды құру дәлдігіне қол жеткізуге мүмкіндік береді.

HPVA сериясына екі негізгі модель кіреді: HPVA-100 және HPVA-200. Бірінші модель, HPVA-100, максималды қысымы 100 барға дейін жұмыс істеуге арналған, бұл бірқатар стандартты адсорбция және газды сақтау зерттеулеріне жарамды. Екінші модель 200 барға дейінгі қысымда жұмыс істейді, бұл ультра жоғары қысым жағдайында жұмыс істеуге арналған материалдарды талдауға мүмкіндік береді. Екі анализатор да бөлек газсыздандыру портымен жабдықталған, бұл өлшеу алдында үлгідегі қалдық ылғал мен ұшпа компоненттерді мұқият тазалап, шығарып тастауға мүмкіндік береді, осылайша нәтижелердің жоғары дәлдігі мен қайталануын қамтамасыз етеді.

HPVA анализаторында сынақтарды бастамас бұрын үлгідегі ылғалды тазалауға мүмкіндік беретін бөлек газсыздандыру портына орналастырылады. Кіріктірілген пеш температураны 500°C дейін сақтай алады, жылуды дәл басқару мүмкіндігіне ие. Пештің бағдарламаланатын жұмыс режимі термиялық өңдеу процесін үлгілерді дайындаудың

нақты талаптарына бейімдеуге мүмкіндік беретін сатылы қыздыру (ramp) және белгіленген температурада ұстау (soak) функцияларын қамтиды.



а)



б)

1 – сурет. а) HPVA қондырғысының сызбасы; б) HPVA анализаторының жалпы көрінісі

Қолданушының қауіпсіздігін қамтамасыз ету мақсатында HPVA анализаторы жүйеде газ мөлшерінің шектен тыс көбейіп кеткен жағдайда H_2 деңгейінің жоғарылауын анықтауға арналған сутегі сенсорымен жабдықталған. Сенсор іске қосылған кезде қорғаныс жүйесі құрылғыны қауіпсіз режимге қояды, қуатты автоматты түрде өшіреді және барлық клапандар жабылады. Мұндай көп деңгейлі қорғаныс жүйесі тәуекелдерді азайтады және жабдықты қауіпсіз пайдалануды қамтамасыз етеді.

HPVA анализаторының стандартты түрдегі конфигурациясына вакуумдық манометрлі сорғы, тұрақты температурада ұсталатын газ коллекторы (әдетте $40\text{ }^\circ\text{C}$), екі қысым датчигі, үлгі камерасы, PID - реттегіші бар газсыздандыру пеші, сондай-ақ термостатталған ваннаға қосылатын термиялық контейнер кіреді (1-сурет). Сонымен қатар, құрылғы жиынтығына диафрагмалық тиекті клапандарымен жабдықталған тот баспайтын болаттан жасалған зерттелетін үлгіге арналған екі цилиндрлі ұстағыш кіреді.

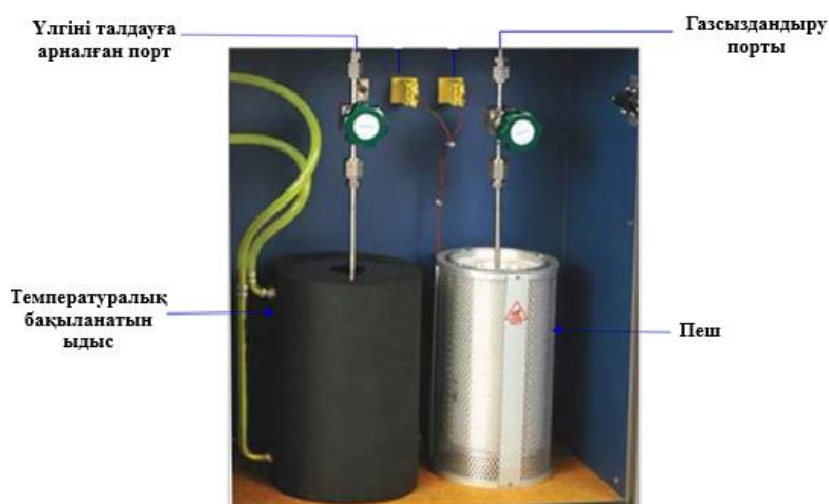
HPVA анализаторының жүйелік схемасының негізгі компоненттері қарапайым және құрылғының бағдарламалық интерфейсында қол жетімді. Ол қажет болған жағдайда клапандарды қолмен басқару үшін пайдаланылуы мүмкін, бұл эксперименттер барысында қосымша икемділік пен бақылауды қамтамасыз етеді.

Басқару элементтері және қосқыштар



2 – сурет. Температураны басқаруға арналған интерфейс

Пештің температурасы: басқару және көрсету. Пештің ішіндегі ағымдағы температураны Цельсий шкаласы бойынша көрсетеді. Берілген температураның мәнін арттыру немесе азайту арқылы дәл реттеу мүмкіндігі қарастырылған.



3 – сурет. Үлгіге арналған камера

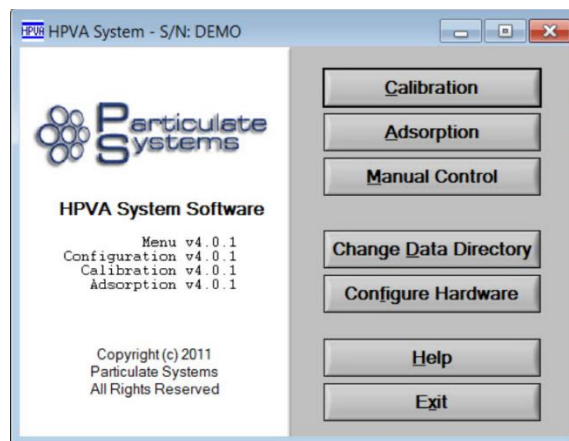
Температураны бақылау жүйесі бар ыдыс (сосуд) эксперимент барысында үлгінің тұрақты температурасын ұстап тұруға арналған, бұл жағдайлардың тұрақтылығын қамтамасыз етеді және дәл, қайталанатын нәтижелерге қол жеткізуге мүмкіндік береді. Бұл температураны бақылау жүйесі экспериментте маңызды рөл атқарады, өйткені ол үлгіні дұрыс температура диапазонында ұстайды, газдың адсорбциясы немесе десорбциясы барысына әсер етуі мүмкін сыртқы тербелістерді азайтады.

Талдау порты эксперимент жүргізу үшін негізгі арна ретінде қызмет етеді, ол арқылы үлгіге газ жеткізіледі және адсорбция немесе десорбция деректері жазылады. Бұл арнайы байланыстырғыш газ беру процесін басқаруға мүмкіндік береді және адсорбент пен адсорбат арасындағы тұрақты өзара әрекеттесуді қамтамасыз етеді, бұл әртүрлі

қысымдар мен температураларда жұтылған немесе шығарылған газ көлемін дәл өлшеу үшін маңызды.

Газсыздандыру порты үлгіні талдауға алдын ала дайындауға арналған порт. Экспериментті орындау алдында үлгі осы порт арқылы тазарту процесінен өтеді, бұл эксперимент нәтижелерінің дәлдігіне әсер етуі мүмкін қалдық ылғал мен ұшпа қоспаларды тазалауға мүмкіндік береді. Дайындықтың бұл кезеңі үлгінің тазалығын және талдау кезінде алынған мәліметтердің дұрыстығын қамтамасыз ету үшін қажет.

Кіріктірілген пеш үлгіні талдауға дайындау кезінде қажетті температураны сақтайды. Бұл үлгіні қажетті деңгейге дейін қыздыруға және оны дайындықтың барлық кезеңінде тұрақты күйде ұстауға мүмкіндік береді. Бұл температура режимі үлгіні таза және эксперимент параметрлеріне ыңғайлы етіп, үлгіні адсорбция процесінде одан әрі өлшеуге мүмкіндігінше қолайлы етеді.



4 – сурет. HPVA бағдарламасының интерфейсінің визуализациялау

Негізгі мәзір HPVA жүйесінің бағдарламалық жасақтамасының барлық негізгі мүмкіндіктеріне қол жеткізуге мүмкіндік береді, бұл пайдаланушыға талдау параметрлерін реттеуден бастап деректерді бақылауға және өңдеуге дейінгі эксперименттің барлық кезеңдерін басқаруға мүмкіндік береді. Бұл мәзір арқылы қажетті құралдар мен режимдерге, соның ішінде температураны басқаруға, қысымды реттеуге, үлгіні газсыздандыруға және адсорбция мен десорбция изотермаларын құруға және талдауға арналған функцияларға оңай өтуге болады. Негізгі мәзірдің интуитивті интерфейсі эксперимент процесін жеңілдетеді және жүйенің барлық мүмкіндіктеріне ыңғайлы қол жетімділікті қамтамасыз етеді, бұл HPVA тәжірибесін мүмкіндігінше тиімді және дәл етеді.

Калибрлеу (Calibration) – жүйенің коллекторының көлемін реттеуге және калибрлеуге арналған функция. Бұл мүмкіндікке тек рұқсат етілген техникалық қолдау мамандары қол жеткізе алады, бұл жүйе параметрлерінің қауіпсіздігі мен дәлдігіне кепілдік береді.

Адсорбция (Adsorption) – температура мен қысым сияқты эксперимент параметрлерін орнатуға және экспериментті тікелей жүргізуге мүмкіндік беретін модуль. Мұнда оператор нақты адсорбция деректерін алу үшін қажетті шарттарды енгізе алады.

Қолмен басқару (Manual Control) – экранда аспап схемасын көрсете отырып, визуалды интерфейс арқылы жүйені қолмен басқаруға мүмкіндік береді. Бұл режим жеке операцияларды жүргізуге немесе жүйені диагностикалауға ыңғайлы.

Деректер каталогын өзгерту (Change Data Directory) – эксперимент деректері сақталатын каталогты таңдауға немесе өзгертуге мүмкіндік беретін функция. Ол оператордың талаптарына сәйкес деректерді ұйымдастыруға және құрылымдауға көмектеседі.

Жабдықты күйге келтіру (Configure Hardware) – анализатордың жұмысына әсер ететін параметрлерді реттеуге арналған құрал. Ол арқылы құрылғының жұмысын нақты қажеттіліктерге немесе эксперименттің ерекшеліктеріне бейімдеу үшін жүйенің негізгі параметрлерін өзгертуге болады.

Анықтама (Help) – HPVA жүйесі үшін егжей-тегжейлі оператор нұсқаулығына қол жеткізуді қамтамасыз етеді. Оператор құрылғының жұмысы мен конфигурациясы туралы қажетті ақпаратты жылдам іздеу үшін бетбелгілер мен мазмұн кестесін пайдалана алады.

Шығу (Exit) – HPVA бағдарламалық жасақтамасын аяқтайды және бағдарламаны жабады.

3. Экспериментке үлгіні дайындау процедурасы

Эксперимент жүргізу үшін үлгіні дайындау эксперименттік деректердің ықтимал бұрмалануын болдырмау үшін қажет таза және құрғақ цилиндрлі ұстағышты дұрыс көлемде таңдаудан басталады. Маңызды кезең-аналитикалық таразыларды дайындау, оларды калибрлеу және нөлдік мәнде тұрақтандыру, бұл кейінгі өлшеулердің жоғары дәлдігін қамтамасыз етеді. Содан кейін эксперимент барысында бақылау мәні ретінде пайдаланылатын бос цилиндрлі ұстағыштың массасы анықталады.

Бос цилиндрдің массасын анықталғаннан кейін таразыдан алынып тасталады және үлгінің жоғалуын болдырмайтын және ұстағыштың біркелкі толтырылуына ықпал ететін шұңқыр орнатылады. Үлгіні шұңқырға ақырындап себелеп қосады (5 –сурет (а)), бұл бос орындардың пайда болуын болдырмайды және материалдың цилиндр ішінде біркелкі таралуын қамтамасыз етеді.

Содан кейін өлшеудің жоғары дәлдігін қамтамасыз ету үшін таразыны қайта бағаналау процесі жүргізіледі. Осыдан кейін цилиндрдің массасы үлгімен қоса өлшеніп, бекітіледі. Үлгі толтырылған цилиндрдің массасы мен бос цилиндрдің массасы арасындағы айырмашылық анықталады. Алынған мән эксперименттік параметрлерді конфигурациялау кезінде қолданылады.

$$m_{sh} - m_h = m_s \quad (1)$$

мұндағы m_{sh} – үлгі цилиндрінің массасы (*sample+holder*); m_h – үлгісіз цилиндрдің массасы (*holder*); m_s – үлгінің массасы (*sample*).

Бұл процедуралар реттілігін қатаң сақтау өлшеу нәтижелерінің жоғары дәлдігі мен қайталануын қамтамасыз ете отырып, ықтимал қателіктерді азайтуға мүмкіндік береді.

Зерттеу тәжірибесінің нәтижесінде алынған деректердің дұрыстығына кепілдік бере отырып, материалдардың адсорбциялық қасиеттерін талдауға сенімді жағдай жасайды.

Газсыздандыру процесі.

Бірінші кезеңдегі негізгі қадам үлгі ұстағыш цилиндрді құрастырудан басталады. Ол үшін фильтрлі сақина (*gasket*) цилиндрге орнатылады (5 –сурет (ә)), содан кейін ұстағыштың жоғарғы бөлігі цилиндрге бекітіледі (5 –сурет (б)). Байланыстырушы гайка бастапқы бекітілгенге дейін қолмен бұралады.

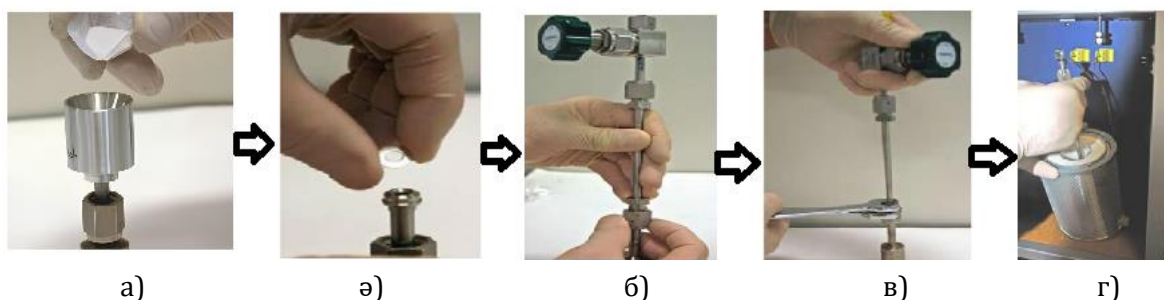
Эксперименттерге арналған фильтрлі сақинаның екі түрі бар: сүзгімен және сүзгісіз. Сүзгілі тығыздағыштар ұсақ ұнтақтармен жұмыс істеу үшін ұсынылады, өйткені олар бөлшектердің үлгіден шығып кетуіне жол бермейді және дәлірек нәтиже береді. Сүзгісіз тығыздағыштар материалдардың басқа түрлерін талдау үшін жеткілікті таңдау болып табылады, мұнда сүзгінің болмауы деректердің дұрыстығына әсер етпейді.

Байланыстырғыштың сенімділігін қамтамасыз ету және үлгілердің ықтимал шығып кетуінің алдын алу үшін екі бұрандалы кілт қолданылады (5 –сурет (в)). Кілттердің көмегімен қосылыс қосымша 1/8 айналымға бұрылады, бұл компоненттердің тығыз орналасуына кепілдік береді. Бұл тәсіл газсыздандыру процесінде үлгілердің цилиндр ішінде нық орналасуын қамтамасыз етеді және кейінгі қайталанатын өлшеулердің дұрыстығын қамтамасыз етеді.

Келесі кезең пештің термопара сымдары үлгі салынатын камераның ішіндегі тиісті қосқыштарға қосылады. Бұл эксперимент барысында температураны дәл бақылауға және бірқалыпты деңгейде ұстап тұруға мүмкіндік береді.

Дайындалған үлгіні пештің қыздыру бөліміне сәл көлбеу етіп орналастырылады, бұл орнатуды жеңілдетеді (5 –сурет (г)). Үлгі ұстағыш газсыздандыру портына қосылады, үлгінің нық орналасуын қамтамасыз ету үшін тығыздағыш сақинаның дұрыс орнатылғанына көз жеткізу керек.

Үлгі ұстағыш цилиндр орнатылғаннан кейін газсыздандыру портына бекітіледі. Гайка бастапқы бекітілгенге дейін қолмен қатайтылады, содан кейін соңғы қатайту үшін екі бұрандалы кілт қолданылады. Бұл жағдайда портты зақымдаудан немесе қосылыстың деформациясына әкелуі мүмкін шамадан тыс күш салудан аулақ болу керек.



5 – сурет. Газсыздандыру процесінің орындалу реттілігі: а) зерттелетін үлгіні цилиндрге себелеп салу процесі; ә) фильтрлі сақина (*gasket*) цилиндрге орналастыру; б) ұстағышты цилиндрге бекіту; в) бұрандалы кілтпен байланысты қатайту; г) дайындалған үлгіні пешке орналастыру

Температураны құрылғының алдыңғы жағында орналасқан температураны басқару интерфейсіндегі (*) түймені басу арқылы, содан кейін температураны жоғарылату түймесін басу керек. Қажетті деңгейге жеткенше мәндерді реттеліп, содан кейін түймені босату керек. Пешті қыздыру процесі басталып және белгіленген температураға шамамен 15 минуттан кейін жетеді.

Жүйені бағдарламалық жасақтама арқылы басқару үшін келесі әрекеттер орындалады:

– Бағдарлама интерфейсінде жүйенің сызбасы бар терезені ашу үшін «Manual Control» опциясы таңдалады.

– 10 клапанының суретінің түймесін екі рет басылады. Осыдан кейін клапан белгішесі түсін жасылға өзгертеді, бұл оның ашылғанын білдіреді.

– Вакуумдық процесті бастау үшін газсыздандыру портының жоғарғы жағында орналасқан жасыл түстегі клапан баяу ашылады.

Үлгіні вакуумдық жүйеде материалдың сипаттамаларына сәйкес ұсынылған уақытқа қалдыру керек. Газсыздандыру процесі аяқталғаннан кейін, операцияны аяқтау үшін газсыздандыру портының жоғарғы жағындағы жасыл түстегі клапан ақырын жабылады. «Manual Control» схемасы терезесінде 10 клапанды жабу керек. Осыдан кейін оның индикаторы сәтті жабылғанын көрсететін сары түске өзгереді. Контроллерді пайдаланып пештің температурасын бөлме температурасына дейін төмендетіп, үлгінің толығымен суытылғанын күту қажет. Үлгі бөлме температурасына жеткеннен кейін үлгі ұстағышты газсыздандыру портынан алып тастау керек.

Үлгі ұстағышын алып тастағаннан кейін, тығыздағыш сақинаның газсыздандыру портында қалуын қадағалау керек. Содан кейін оның ластануын болдырмау және жүйенің тығыздығын сақтау үшін портты жабу керек.

Үлгі камерасын қосу және экспериментті баптау процедурасы.

Газсыздандыру портының жоғарғы жағындағы гайканы бұрап алып, түтік пен клапанмен бірге үлгі камерасын алу қажет. Камераны талдау портына алып келіп және гайканы ақырын қатайту керек. Бағдарламалық жасақтамадағы «Manual Control» терезесін жауып, «Adsorption» терезесін ашамыз. Қолда бар үлгілерді пайдалану және қажет болған жағдайда эксперимент параметрлерін өңдеу үшін «Recall Template» түймесі қолданылады.

Эксперимент параметрлерін баптау: Эксперимент идентификаторы, оператор идентификаторы, үлгінің салмағы және оның атауы сияқты қажетті деректерді енгіземіз. Өлшеу параметрлеріне өту үшін «Edit» терезесіндеі батырма арқылы өтеміз.

– Эксперимент жоспарына сәйкес адсорбция (Adsorption) және десорбция (Desorption) үшін қысым кезеңдері.

– Эксперимент температурасы, қоршаған температура (Ambient) және үлгіні ұстау уақыты.

– Үлгіні шығару уақыты (тәртіп бойынша 10 минут, талаптарға байланысты өзгерту мүмкіндігі бар) осы шарттар орнатылады.

Пайдаланатын газ үшін дұрыс порт таңдалғанына көз жеткізіп, қажетті газды және тиісті газ портын таңдаймыз. «Measure FS» опциясын белгілеп, температураны басқару әдісі таңдалады. Барлық опцияларды орнатқаннан кейін негізгі терезеге оралу үшін «OK» түймесін басамыз. Файлдық қалыпты кейінірек тағы да пайдалану мақсатында бірегей атаумен сақтаған жөн.

HPVA құрылғысында адсорбция процесі жүйедегі газ қысымын кезең-кезеңімен арттыру арқылы жүзеге асырылады, бұл әртүрлі жағдайларда сорбция изотермасын құруға мүмкіндік береді. Бірінші кезеңде газ дозалау камерасына берілген бастапқы қысымға дейін енгізіледі (мысалы, 1 бар), содан кейін клапанды ашу арқылы ол үлгі орналастырылған камераға түседі. Тепе-теңдік күйі орнаған сайын қысымның өзгеруі тіркеледі, оның негізінде сіңірілген газдың көлемі есептеледі. Әрі қарай қысым дәйекті түрде артады (мысалы, 5, 10, 20, 50, 100 бар және одан жоғары) және процесс қайталанады, бұл берілген қысым диапазонында адсорбциялық изотерманы құруды қамтамасыз етеді.

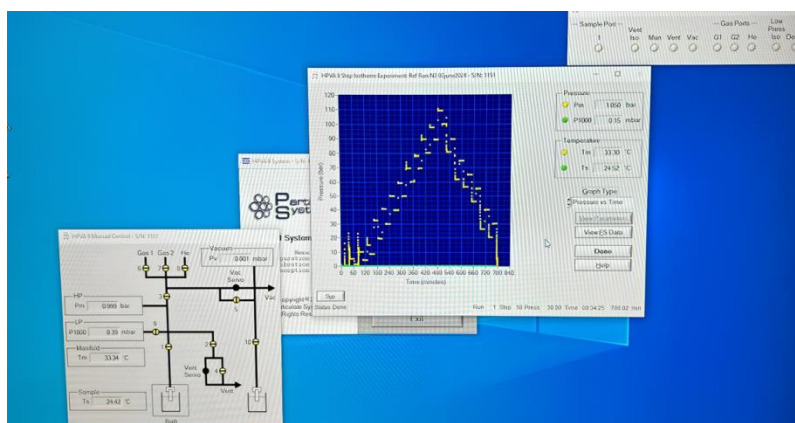
HPVA құрылғысындағы десорбция процесі үлгі камерасындағы қысымды біртіндеп төмендету арқылы жүзеге асырылады, бұл материалдың бұрын адсорбцияланған газды шығару қабілетін бағалауға мүмкіндік береді. Бұл процесс сорбцияның қайтымдылығын, сорбенттің регенерациясын және десорбция кинетикасын зерттеу үшін өте маңызды.

Қысымды төмендету арқылы изотермиялық десорбция жүйеде әр қысым кезеңінде тепе-теңдік күйді тіркеумен қатар, қысымның дәйекті төмендеуі кезінде бөлінетін газдың көлемін сандық бағалауға мүмкіндік береді (мысалы, 100 → 50 → 20 → 10 → 5 → 1 бар). Алынған мәліметтер бөлінген газ мөлшерінің қысымға тәуелділігін көрсететін десорбциялық изотерманы құру үшін қолданылады. Десорбциялық сипаттамаларды талдау сорбенттің кеуекті құрылымындағы ықтимал капиллярлық әсерлерді көрсететін гистерезис құбылыстарын бағалауды, сондай-ақ қайтымсыз адсорбция процестерін анықтауға және сорбциялық материалдың регенерация дәрежесін бағалауға мүмкіндік беретін қалдық сорбциялық сыйымдылықты анықтауды қамтиды.

Эксперименттің басталуы.

Газ желілерін дайындау: Қажет газдарды гелий (He): 3,5 Бар (шығыс қысымы 150 Бар); сутегі (H₂): 120 Бар (шығыс қысымы 200 Бар) эксперимент параметрлері бойынша бапқа келтіріледі.

Эксперименттің бастау үшін «Run Experiment» батырмасын басу арқылы жүзеге асырылады. Эксперимент басталғаннан кейін талдау портында жасыл клапанды баяу ашамыз. Жүйе барлық берілген тізбектерді автоматты түрде орындайды. Эксперимент аяқталғаннан кейін экранда эксперименттік талдаудың сәтті аяқталғанын растайтын «Stating Done» хабаламалық терезесі пайда болады.



6 – сурет. Эксперимент барысын бақылауға арналған интерфейс

Нәтижелерді өңдеу және есеп жасау.

Талдау нәтижелері эксперимент барысында компьютер экранында нақты уақыт режимінде көрсетіледі, бұл өлшеу барысын жедел бақылауға мүмкіндік береді. Әрі қарай талдау және құжаттау үшін деректерді құрылғының бағдарламалық жасақтамасында берілген Microsoft® Excel макросының көмегімен егжей-тегжейлі зерттеуге және экспорттауға болады. Бұл нәтижелерді өңдеудің ыңғайлылығын және басқа талдау құралдарымен интеграцияны қамтамасыз етеді.

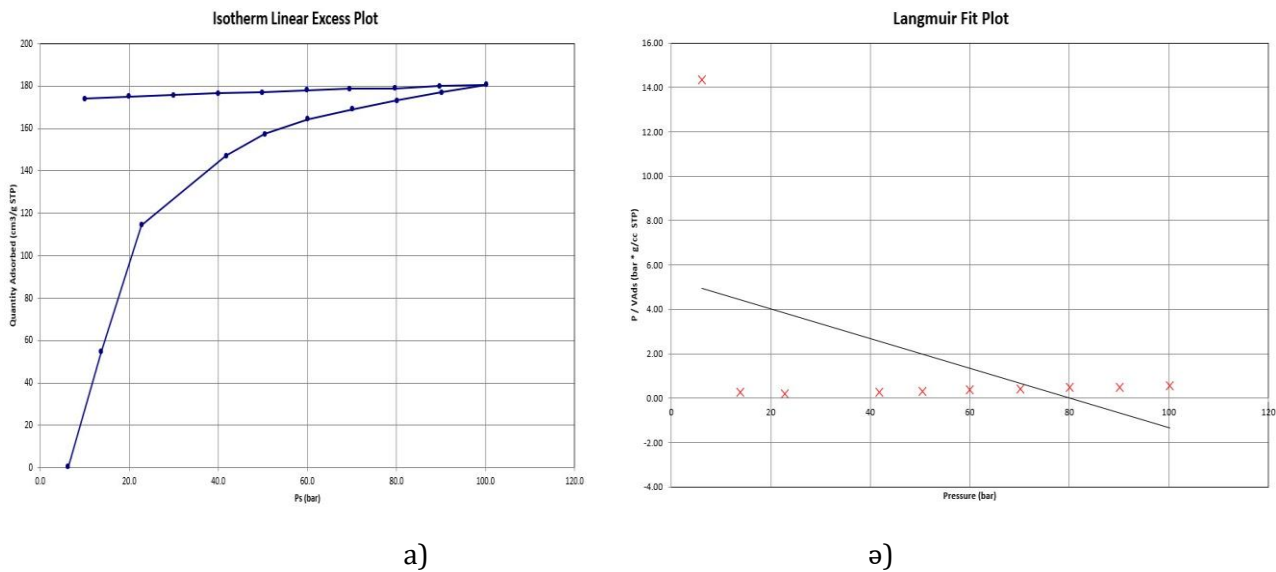
HPVA құрылғысының көмегімен алынған эксперименттік деректерді өңдеу үшін зерттелетін материалдардың сорбциялық қасиеттерін сандық сипаттауға мүмкіндік беретін классикалық адсорбция модельдері қолданылады.

Ленгмюр моделі біртекті беттегі моноқабатты адсорбцияны сипаттау үшін қолданылады, бұл белсенді орталықтардың шектеулі санын және адсорбцияланған молекулалар арасындағы өзара әрекеттесудің болмауын болжайды.

Брунауэр-Эмметт-Теллер (BET) моделі көп қабатты адсорбцияны бағалау және материалдың меншікті бетін анықтау үшін қолданылады, бұл мезопоралық құрылымдарды зерттеу кезінде өте маңыздылыққа ие.

Дубинин-Радушкевич (DR) моделі кеуекті құрылым мен сорбциялық энергияны бағалауға мүмкіндік беретін сорбция потенциалы теориясына негізделген микропоралардағы адсорбцияны талдау үшін пайдаланылды.

Талдау аяқталғаннан кейін «Done» батырмасын басу арқылы эксперимент терезесі жабылады. Жұмыс үстеліндегі HPVA Macro файлына өтіп, ашу арқылы талдау нәтижелерін алуға болады. Ашылған қолданбада қалаған есеп түрін таңдап, таңдау каталогынан изотермалар туралы есепті көруге болады (7-сурет). Пайда болған терезеде дайындық кезеңінде жазылған үлгінің салмағын енгізіп, «OK» түймесін басыңыз. Осыдан кейін негізгі есеп түрлері көрсетіледі, мысалы: *Isotherm Run 1* – изотермалар туралы мәліметтер (7-сурет (а)). *Langmuir Fit Run 1* – Ленгмюр моделіне негізделген талдау нәтижелері (7-сурет (ә)). Файл мәзірін пайдаланып есепті Excel форматында сақтау процесі орындалуы қажет. Сақталған файлды Macro қолданбай, таңдалған каталогта көруге және өңдеуге болады.



7 – сурет. Эксперимент нәтижесінің графикалық көрінісі: а) изотермалар туралы мәліметтер; ә) Лангмюр моделіне негізделген талдау нәтижелері

4. HPVA жүйесімен жұмысты аяқтау

Құрылғыны күту режиміне қою арқылы HPVA бағдарламасын жабамыз, компьютерді сөндіріп, жүйенің қуатын өшіру керек (соның ішінде HPVA II, сорғы, компрессор және ISO контроллері), үлгі камерасы мен ұстағышты ажыратыңыз, зерттеу үлгісін қайта өлшеп, оның массасын қайта жазу керек, содан кейін газсыздандыру және талдау порттарын қорғаныс гайкаларымен және газ клапандарын жабамыз.

Тәжірибе аяқталғаннан кейін, кептіру шкафын 110°C дейін алдын ала қыздырып, үлгі салынған цилиндрді тазалау процесін бастаймыз. Цилиндрді 5 грамм жуғыш заттан (мысалы, Alconox) 500 мл жылы суға дайындалған ерітіндімен тазалаңыз және жуғыш заттың толық ерігеніне көз жеткізу қажет. Ультрадыбыстық ваннаны цилиндрді толығымен жабу үшін жеткілікті сумен толтырыңыз және цилиндрдің ішкі бөлігін тазалау үшін ұзын тамшуыр арқылы сумен бүркіп тазалаймыз. Ультрадыбысты ваннаны қосып, цилиндрді ыстық сумен тазалап, суды цилиндр арқылы тамшуырмен өткізіп және бұл процедураны бірнеше рет қайталау керек болады (ұнтақты үлгіні қолданғанда цилиндрдің ішін толығымен тазарту мақсатында). Содан кейін цилиндрді изопропил спиртімен шайып, цилиндрдің ішін сығылған азотпен немесе ауамен құрғатып және оны алдын ала қыздырылған кептіру шкафына саламыз. Цилиндрді 110 °C температурада екі сағат қыздырып, содан кейін оны бөлме температурасына дейін суытамыз.

Құрылғыны толыққанды қауіпсіз мақсатта қолдану үшін, құрылғы сапалы желдеткіш жүйелерімен жабдықталған жақсы желдетілетін бөлмеде пайдаланулы қажет. Жабдықтың тұрақты жұмысын қамтамасыз ету және өлшеудегі ықтимал ауытқуларды азайту үшін қоршаған ортаның температурасын 24-25 °C аралығында ұстау ұсынылады.

5. Қорытынды

Бұл жұмыста материалдардың физика-химиялық қасиеттерін зерттеуге мүмкіндік беретін жоғары қысым жағдайында жоғары температуралық талдау жүргізу әдістемесі келтірілген. Бұл әдісті қолдану үлгілердің термиялық тұрақтылығын, реактивтілігін және құрылымдық өзгерістерін зерттеу үшін жұмыс параметрлерін дәл көбейтуді қамтамасыз етеді. Алынған деректердің сенімділігіне кепілдік беретін температура мен қысым диапазондарын қоса алғанда, эксперименттің оңтайлы жағдайларын таңдауға ерекше назар аударылады.

Әзірленген әдіс қатты электролиттер, катализаторлар және сорбенттер сияқты материалдардың әртүрлі түрлерін талдауға мүмкіндік береді. Қолданылатын жабдық өлшеудің жоғары сезімталдығын және жылдам жүретін процестерді тіркеу мүмкіндігін қамтамасыз етеді. Әдістеме бақылау эксперименттерінің сериясымен расталған жоғары өнімділікке ие. Жоғары қысымды зерттеу материалдардың нақты жұмыс жағдайларын модельдеуге мүмкіндік береді, бұл әсіресе энергетика мен химия өнеркәсібіне қатысты.

Бұл әдіснаманы қолдану әсіресе жоғары тұрақтылықты, селективтілікті және тиімділікті қажет ететін инновациялық материалдарды әзірлеуге қатысты. HPVA сорбциялық процестер мен материалтану бойынша заманауи зерттеулердің мүмкіндіктерін кеңейтетін құрал ретінде өзінің маңыздылығын растайды.

Авторлардың қосқан үлесі

К.Ж. Бекмырза – зерттеу тұжырымдамасы мен құрылымын әзірлеу, авторлар тобының жұмысын үйлестіру, мақаланың негізгі мәтінін дайындау және редакциялау.

К.А. Кутербек – әдістемені әзірлеуге қатысу, жабдықты калибрлеуді және деректерді талдауды қоса алғанда, HPVA әдістемесінің негізгі кезеңдерін сипаттау.

А.М. Кабышев – HPVA анализаторының функционалдық мүмкіндіктерін қамтитын жабдықтың техникалық сипаттамасын әзірлеу.

М.М. Кубенова – эксперименттік бөлімді орындау және эксперименттік деректерді өңдеу әдістемесі бөлімін әзірлеу.

А.А. Баратова – материалдардың сорбциялық қасиеттерін сипаттауға арналған бөлімдерді дайындау, үлгілерді дайындау рәсімін әзірлеуге қатысу.

Н.К. Айдарбеков – алынған деректерді талдау, қорытынды жасау, пайдаланылған көздердің тізімін дайындау, мақаланы рәсімдеу.

Қаржыландыру

Бұл зерттеу Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігі ұсынған BR21882359 нөмірі бар гранттың қаржылық қолдауымен орындалды.

Әдебиеттер тізімі

1. J.K. Junga, I.G. Kim, S.K. Jeon, K-T. Kim, U.B. Baek, S.H. Nahm, *Volumetric analysis technique for analyzing the transport properties of hydrogen gas in cylindrical-shaped rubbery polymers*, Polymer Testing, - 2021. – V. 99. – Number of article 107147, <https://doi.org/10.1016/j.polymertesting.2021.107147> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы

2. A.H. Mohd Hafiz, C.E. Snape, L. Stevens, *Bed Height of Zeolite Affected CO₂ Hydrate Formation Using High Pressure Volumetric Analyzer*, Asian Journal of Chemistry, – 2018. - Vol. 30, No. 10. – P. 2269-2272, <https://doi.org/10.14233/ajchem.2018.21420> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы

3. G.V. Olivieri, R.B.Torres, *Thermodynamic and spectroscopic study of binary mixtures containing {dimethyl carbonate (DMC) + alcohols} at T = (288.15–308.15) K and p = (0.1–40) MPa: Experimental study and modelling*, The Journal of Chemical Thermodynamics, - 2019. - Vol.133. – P. 229-260, <https://doi.org/10.1016/j.jct.2019.02.011> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы

4. D.B. Hauk, R.B. Torres, J.V. Hallak Dangelo, *Measurement and correlation of high-pressure volumetric properties of binary mixtures of 1-Ethyl-3-methylimidazolium bis (trifluoromethylsulfonyl) imide ([EMIM][NTf₂]) with alcohols*, The Journal of Chemical Thermodynamics, – 2023. – Vol. 185. - Number of article 107122, <https://doi.org/10.1016/j.jct.2023.107122> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы

5. H. Wang, N. Zhang, X. Wang, *Densities and viscosities for binary mixtures of dimethyl carbonate with 1-heptanol, 1-octanol, 1-nonanol, and 1-decanol*, The Journal of Chemical Thermodynamics, – 2021. Vol. 157. - Number of article 106404, <https://doi.org/10.1016/j.jct.2021.106404> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы

6. M. Królikowska, M. Więckowski, M. Skonieczny, *P-ρ-T measurements and derived properties of series dimethyl – and diethyl phosphate – based ionic liquids*, Fluid Phase Equilibria, – 2025. – Vol. 591. - Number of article 114313, <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2024.114313> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы

**К.Ж. Бекмырза¹, К.А. Кутербеков¹, А.М. Кабышев¹, М.М. Кубенова¹, А.А. Баратова¹,
Н.К. Айдарбеков*¹**

¹Институт физико-технических наук, Евразийский национальный университет
имени Л.Н. Гумилева, Астана 010008, Казахстан

*Автор для корреспонденции: nursultanaidarbeckov@yandex.kz

Методика высокотемпературного анализа сорбционных свойств материалов в условиях высокого давления

Аннотация. В статье приведена методика применения высокотемпературного объемного анализа высокого давления (метод НРВА) для изучения сорбционных свойств широкого спектра материалов. Метод НРВА позволяет точно измерять адсорбцию и десорбцию различных газов (водорода, углекислого газа, или углеводородных смесей) при различных режимах температуры и давления, включая нормальные и экстремальные условия, что имеет решающее значение для оценки материалов, используемых в перспективных областях, таких как хранение водорода, улавливание и обработка углекислого газа, а также катализирование химических реакций. Применение метода НРВА позволяет получать количественные данные о сорбционной емкости, а также данные в условиях, близких к фактическим данным о кинетике взаимодействия молекул газа с поверхностью и внутренними порами материалов. В статье подробно рассматриваются основные этапы методики НРВА: процесс предварительной дегазации и удаления влаги, включая подготовку и подготовку образцов к экспериментальному анализу, настройку и калибровку оборудования с учетом условий высокой температуры и давления, а также алгоритмы обработки данных, позволяющие определить основные параметры пористой структуры (объем

пор, распределение их размеров, сорбционная способность). Полученные результаты имеют практическое значение при разработке новых высокоэффективных сорбентов, катализаторов и наноструктурированных материалов для хранения энергоресурсов, еще больше расширяют возможности создания экологически чистых и экономичных технологий.

Ключевые слова: Высокотемпературный анализ в условиях высокого давления, сорбционные свойства, изотермы адсорбции, дегазация.

**K.Zh. Bekmyrza¹, K.A. Kuterbekov¹, A.M. Kabyshev¹, M.M. Kubenova¹, A.A. Baratova¹,
N.K. Aidarbekov*¹**

¹*Institute of Physical and Technical Sciences, L.N. Gumilyov Eurasian National University,
Astana 010008, Kazakhstan*

**Correspondence: nursultanaidarbekov@yandex.kz*

Methodology for high-temperature analysis of sorption properties of materials under high-pressure conditions

Abstract. This article presents a methodology for applying high-pressure high-temperature volumetric analysis (HPVA) to investigate the sorption properties of a wide range of materials. The HPVA method enables precise measurement of gas adsorption and desorption (e.g., hydrogen, carbon dioxide, or hydrocarbon mixtures) under various temperature and pressure regimes, including both standard and extreme conditions. Such measurements are critically important for evaluating materials used in advanced fields such as hydrogen storage, carbon dioxide capture and processing, and catalytic chemical reactions. The application of HPVA provides quantitative data on sorption capacity, as well as information under conditions closely approximating the actual kinetics of gas molecules interacting with the surface and internal pores of the materials. The article thoroughly examines key stages of the HPVA methodology: the preliminary degassing and moisture removal process, including the preparation of samples for experimental analysis; the setup and calibration of equipment under high-temperature and high-pressure conditions; and the data processing algorithms that make it possible to determine fundamental parameters of porous structures (pore volume, pore size distribution, sorption capacity). The results obtained have practical significance for the development of novel high-performance sorbents, catalysts, and nanostructured materials for energy resource storage, thereby further expanding opportunities for creating environmentally friendly and economically viable technologies.

Keywords: High-temperature analysis under high pressure, sorption properties, adsorption isotherms, degassing.

References

1. J.K. Junga, I.G. Kim, S.K. Jeon, K-T. Kim, U.B. Baek, S.H. Nahm, *Volumetric analysis technique for analyzing the transport properties of hydrogen gas in cylindrical-shaped rubbery polymers*, Polymer Testing, - 2021. – V. 99. – Number of article 107147, <https://doi.org/10.1016/j.polymertesting.2021.107147> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
2. A.H. Mohd Hafiz, C.E. Snape, L. Stevens, *Bed Height of Zeolite Affected CO₂ Hydrate Formation Using High Pressure Volumetric Analyzer*, Asian Journal of Chemistry, – 2018. - Vol. 30, No. 10. – P. 2269-2272, <https://doi.org/10.14233/ajchem.2018.21420> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы

3. G.V. Olivieri, R.B. Torres, *Thermodynamic and spectroscopic study of binary mixtures containing {dimethyl carbonate (DMC) + alcohols} at $T = (288.15-308.15) K$ and $p = (0.1-40) MPa$: Experimental study and modelling*, The Journal of Chemical Thermodynamics, - 2019. - Vol.133. - P. 229-260, <https://doi.org/10.1016/j.jct.2019.02.011> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы

4. D.B. Hauk, R.B. Torres, J.V. Hallak Dangelo, *Measurement and correlation of high-pressure volumetric properties of binary mixtures of 1-Ethyl-3-methylimidazolium bis (trifluoromethylsulfonyl) imide ([EMIM][NTf₂]) with alcohols*, The Journal of Chemical Thermodynamics, – 2023. – Vol. 185. - Number of article 107122, <https://doi.org/10.1016/j.jct.2023.107122> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы

5. H. Wang, N. Zhang, X. Wang, *Densities and viscosities for binary mixtures of dimethyl carbonate with 1-heptanol, 1-octanol, 1-nonanol, and 1-decanol*, The Journal of Chemical Thermodynamics, – 2021. Vol. 157. - Number of article 106404, <https://doi.org/10.1016/j.jct.2021.106404> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы

6. M. Królikowska, M. Więckowski, M. Skonieczny, *P-ρ-T measurements and derived properties of series dimethyl – and diethyl phosphate – based ionic liquids*, Fluid Phase Equilibria, – 2025. – Vol. 591. - Number of article 114313, <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2024.114313> – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы

Авторлар туралы мәлімет:

К.Ж. Бекмырза – PhD, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, «Техникалық физика» кафедрасының қауымдастырылған профессоры, Астана, Қазақстан

К.А. Кутербеков – физика-математика ғылымдарының докторы, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, «Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар» халықаралық кафедрасының профессоры, Астана, Қазақстан

А.М. Кабышев – PhD, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, «Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар» халықаралық кафедрасының доценті, Астана, Қазақстан

М.М. Кубенова – PhD, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, «Стандарттау, сертификаттау және метрология» кафедрасының оқытушы-зерттеушісі, Астана, Қазақстан

А.А. Баратова – PhD, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, «Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар» халықаралық кафедрасының доценті, Астана, Қазақстан

Н.К. Айдарбеков – хат-хабар авторы, PhD, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, «Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар» халықаралық кафедрасының аға оқытушысы, Астана, Қазақстан.

К.Ж. Бекмырза – PhD, ассоциированный профессор кафедры «Технической физики» Евразийского национального университета имени Л. Н. Гумилева, Астана, Казахстан

К.А. Кутербеков – доктор физико-математических наук, профессор международной кафедры «Ядерной физики, новых материалов и технологий» Евразийского национального университета имени Л. Н. Гумилева, Астана, Казахстан

А.М. Кабышев – PhD, доцент международной кафедры «Ядерной физики, новых материалов и технологий» Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

М.М. Кубенова – PhD, преподаватель-исследователь кафедры стандартизации, сертификации и метрологии Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
А.А. Баратова – PhD, доцент международной кафедры «Ядерной физики, новых материалов и технологий» Евразийского национального университета имени Л. Н. Гумилева, Астана, Казахстан
Н.К. Айдарбеков – автор для корреспонденции, PhD, старший преподаватель международной кафедры «Ядерной физики, новых материалов и технологий» Евразийского национального университета имени Л. Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

К.Ж. Бекмырза – PhD, associate professor of the Department of «Technical Physics» of the L. N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

К.А. Кутербеков – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the International Department of «Nuclear Physics, New Materials and Technologies» of the L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

А.М. Кабышев – PhD, associate professor of the International Department of «Nuclear Physics, New Materials and Technologies» of the L. N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

М.М. Кубенова – PhD, researcher-teacher of the Department of «Standardization, Certification and Metrology» of the L. N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

А.А. Баратова – PhD, associate professor of the International Department of «Nuclear Physics, New Materials and Technologies» of the L. N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Н.К. Айдарбеков – corresponding author, PhD, Senior Lecturer at the International Department of «Nuclear Physics, New Materials and Technologies» of the L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.



Copyright: © 2025 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



МРНТИ 29.15.29, 29.03.47

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-150-1-111-126>

Научная статья

Перспективы исследования тройного деления ядер на горизонтальном канале №1 реактора ВВР-К

Д. Бериков*^{1,2}, С. Нуруев^{2,3,4}, Г. Ахмадов^{2,3}, К. Мендибаев^{1,2}, Б. Мухаметулы^{1,2},
К. Ковальчук¹, Т. Жолдыбаев¹, Ю. Копач², К. Назаров^{1,2}, Д. Алимов¹,
Б. Садыков¹, А. Темиржанов^{1,5}

¹Институт ядерной физики, Алматы, Казахстан

²Объединенный Институт ядерных исследований, Дубна, Россия

³Институт радиационных проблем, Баку, Азербайджан

⁴Университет Хазар, Баку, Азербайджан

⁵Satbayev University, Алматы, Казахстан

*Автор для корреспонденции: daniyar.berikov@gmail.com

Аннотация. В статье обсуждаются исследования редких механизмов деления ядер, таких как тройное и четверное деление, возникающие как при спонтанном, так и при вынужденном делении нейтронами. Наша группа ранее провела эксперименты по изучению тройного и четверного спонтанного деления изотопа ^{252}Cf . Следующий этап – исследование тройного деления при вынужденном делений нейтронами.

Подготовлены этапы для проведения исследований тройного деления под нейтронным воздействием, включая создание экспериментальной установки и разработку методик регистрации частиц. Тестовые измерения осуществлялись на реакторе ВВР-К в Алматы. Эксперименты с мишенью ^{239}Pu дали ценные методические результаты, оказывающие значительное влияние на точность последующих исследований. Выводы эксперимента подтверждают необходимость пересмотра технических решений для достижения высоких стандартов точности и надежности исследований.

Ключевые слова: деление ядра, телескопический детектор, легкие заряженные частицы, позиционно-чувствительный кремниевый детектор

Поступила 28.01.2025 После доработки 27.02.2025 Принята к печати 28.02.2025. Доступно онлайн 25.03.2025

¹ *автор для корреспонденции

1. Введение

В настоящее время во многих лабораториях по всему миру активно проводятся исследования редких мод деления ядер, включая тройные и четверные деления [1-3]. Этот растущий интерес объясняется тем, что путем изучения легких заряженных частиц, образующихся в момент разрыва, можно получить ценную информацию о конфигурации делящейся системы в этот критический момент. Анализ таких частиц предоставляет уникальную возможность более глубоко понять динамику процесса деления ядер, включая механизмы, которые лежат в основе образования различных фрагментов. Изучение легких заряженных частиц не только помогает в понимании самого процесса деления, но и открывает новые горизонты для исследования фундаментальных законов ядерной физики. Например, такие исследования могут способствовать определению условий, при которых возможно образование нестабильных изотопов и более сложных фрагментов, что имеет значение как для теоретической физики, так и для практических приложений, таких как ядерная энергетика и безопасность.

Деление атомного ядра с образованием легкой заряженной частицы (ЛЗЧ) называется тройным. При тройном делении в основном (90%) образуются альфа-частицы. Кроме того, наиболее распространенными тройными частицами являются изотопы водорода: протоны, дейтроны и тритоны, которые составляют 1%, 0.5% и 6% соответственно от общего выхода ЛЗЧ. В качестве тройных частиц также наблюдаются изотопы лития, бериллия, бора и углерода. Энергия тройных альфа-частиц достигает 10-40 МэВ, а их пробег в воздухе превышает 10 см, что обуславливает их название длиннопробежных [4, 5].

Следует подчеркнуть, что тройное деление энергетически даже более выгодно, чем бинарное деление, что видно из кривой зависимости средней энергии связи на нуклон в ядре от массового числа A . В действительности, общее энерговыделение при тройном делении на 10-15 МэВ выше, чем при бинарном. Тем не менее, тройное деление происходит гораздо реже (вероятность примерно $3 \cdot 10^{-3}$ от обычного бинарного деления) из-за низкой вероятности образования необходимой начальной деформации ядра.

Деление ядра на четыре и более осколка становится менее выгодным с энергетической точки зрения по сравнению с бинарным делением. Однако с увеличением энергии возбуждения исходного ядра вероятность такого "многоосколочного" деления возрастает. Несмотря на это, четверное деление наблюдается крайне редко, с вероятностью около 10^{-7} - 10^{-6} . Можно выделить два вида четверного деления ядер: истинное, когда все четыре появляющиеся легкие и тяжелые частицы вылетают в узком интервале времени порядка нескольких ядерных времен ($\sim 10^{-21}$ сек), и псевдо четверное, когда происходит тройное деление ядра с вылетом нестабильной ЛЗЧ [5, 6]. Известный пример нестабильной тройной частицы – ${}^8\text{Be}$ с временем жизни порядка 10^{-16} сек для распада ${}^8\text{Be} \rightarrow (\alpha + \alpha)$. Способом отделения истинных четверных $(\alpha + \alpha)$ событий от событий из последовательного распада береллия на $(\alpha + \alpha)$ является анализ угловых корреляций между двумя альфа частицами [7]. В псевдо четверном делении две альфа-частицы попадают в детектор под очень малым углом.

Наша исследовательская группа нацелена на проведение комплексного исследования редких мод деления ядер, которое будет охватывать как спонтанное деление, так и вынужденное деление ядер, вызванное нейтронами. В данном контексте уже была

проведена работа по изучению тройного и четверного спонтанного деления изотопа ^{252}Cf в лаборатории нейтронной физики Объединенного института ядерных исследований (ОИЯИ), где использовались современные позиционно-чувствительные пиксельные детекторы Timerix. В результате этого исследования были получены данные о выходах и энергетических распределениях легких заряженных частиц, которые, как ожидается, значительно расширят существующие знания о процессах деления ядер. Результаты работы скоро будут опубликованы в высокорейтинговых научных журналах, что подчеркивает их значимость. В данной работе также представлены итоги подготовительных этапов, связанных с исследованием тройного деления ядер под воздействием нейтронов. Для этого была разработана и создана экспериментальная установка, а также была отработана методика регистрации и идентификации легких заряженных частиц. Дополнительно было проведено тестовое измерение на первом канале реактора ВВР-К, который расположен в Институте ядерной физики в Алматы.

2. Постановка эксперимента

Для проведения полноценного эксперимента по исследованию тройного деления ядер под воздействием нейтронов сначала необходимо было выполнить методические работы. Следовало проверить, как ведут себя детекторы в условиях пучка, какие фоновые условия существуют, а также увидеть, регистрируем ли мы продукты деления от мишени ^{239}Pu .

Тестовые измерения проводились на первом горизонтальном канале исследовательского реактора ВВР-К [8]. Нейтронный пучок из этого канала сначала проходил через монокристаллический сапфировый фильтр для фильтрации быстрых нейтронов и гамма-лучей. Затем нейтроны проходили через первичную систему коллимации и формировались в пучок размером $200 \times 200 \text{ мм}^2$, который по вакуумной трубе попал в экспериментальный зал. Плотность потока нейтронов на выходе вакуумного нейтронновода составляла $(7.1 \pm 0.5) \cdot 10^6$ тепловых и $(2.9 \pm 0.2) \cdot 10^5$ быстрых нейтронов. После нейтронновода использовался еще один коллиматор из борированного полиэтилена и кадмия, формировавший пучок размером $20 \times 20 \text{ мм}^2$.

Исследуемой мишенью была ^{239}Pu , нанесенная на обе стороны круглой алундовой подложки диаметром 20 мм и толщиной 55 мкг/см^2 . Толщина каждого слоя плутония составляла 45 мкг/см^2 . Мишень была установлена под углом 45 градусов относительно направления падающего пучка нейтронов.

В детекторную часть установки входили три ΔE -E телескопа на основе полупроводниковых кремниевых детекторов, позволяющие идентифицировать и измерить энергии ЛЗЧ тройного и четверного деления. Данный метод основан на одновременном измерении удельных потерь энергии заряженной частицы в веществе dE/dx и ее полной кинетической энергии E . В качестве ΔE -детектора применяются тонкие кремниевые детекторы площадью $10 \times 10 \text{ мм}^2$ и толщиной 15 и 140 мкм, а в качестве E – пиксельные кремниевые детекторы Timerix [9] площадью $14 \times 14 \text{ мм}^2$ и толщиной 300 и 600 мкм. Детектор Timerix состоит из двух основных компонентов: чувствительного сенсора и чипа Timerix. В сенсоре заряженная частица оставляет след в виде свободных носителей заряда, количество которых пропорционально энергии, выделяемой в сенсоре. Эти заряды усиливаются в чипе Timerix, где происходит их анализ, оцифровка и передача

на ПК. Timerix состоит из 65536 независимых пикселей, расположенных в матрице 256×256 . Размер каждого пикселя составляет 55×55 мкм, и каждый из них включает усилитель, дискриминатор с регулируемым порогом и счетчик сигналов. Одним из ключевых преимуществ детектора является то, что позволяет точно визуализировать, в каких именно пикселях был зарегистрирован сигнал.

Для защиты детекторов от осколков деления и от альфа-частиц естественного распада ^{239}Pu перед телескопами были помещены алюминиевые фольги толщиной 27 мкм. Таким образом, телескопы регистрируют только длинопробежные легкие заряженные частицы от редких мод делений. Энергетические спектры частиц получается путем суммирования оцифрованных сигналов от детекторов ΔE и E , с учетом потери энергии в алюминиевой фольге, рассчитанный с помощью компьютерной программы SRIM [10]. Программный пакет SRIM (Stopping Power and Range of Ions into Matter), используя полное квантово-механическое описание столкновений ионов и атомов, позволяет определять тормозную способность вещества и длины пробегов ионов (с энергией на нуклон в диапазоне $10 \text{ эВ} \div 2 \text{ ГэВ}$).

Электроника для телескопов ΔE - E базируется на устройстве FITPix COMBO, разработанном Техническим университетом Праги (Чехия) [11, 12]. Вся необходимая электроника, включая компаратор, усилитель и дискриминатор, интегрирована в это устройство, что делает его портативным и компактным. FITPix может использоваться как считывающее устройство Timerix (в том числе для получения импульсов с обратной стороны) или как простое спектрометрическое устройство – Spectrig, при подключении внешнего детектора, например, ΔE -детектора. Вся электроника подключается к компьютеру через USB, включая управление детекторами. Также предусмотрена шина синхронизации для управления сигналом запуска и сигналом «занято», что позволяет эффективно фильтровать непарные события во время измерения совпадений [13]. На рисунке 1 изображен фото ΔE - E телескопа со считывающей электроникой.

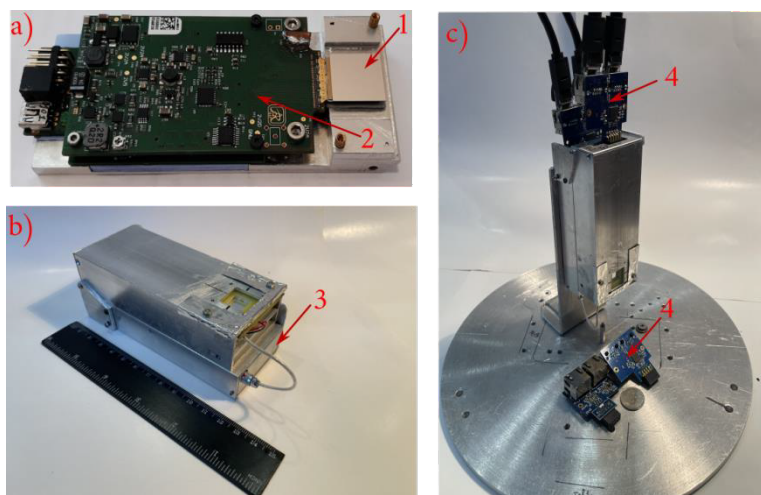


Рисунок 1. а) Детектор Timerix: 1 – пиксельный сенсор детектора, 2 – плата с электроникой FITPix; б) ΔE - E телескоп на основе Timerix детектора: 3 – считывающее устройство Spectrig для ΔE детектора; в) ΔE - E телескоп с шиной синхронизации: 4 – плата с электроникой для синхронизации

Исследуемая мишень, детекторы и вся электроника заключены в вакуумную камеру из нержавеющей стали. Размеры камеры – 425×300×300 мм. Камера была откачена до давления 0.1 мбар.

Калибровка детекторов

Детекторы Timerix могут функционировать в разных режимах: измерение амплитуды, режим счетчика и измерение времени. В данном эксперименте использовался режим измерения амплитуды (Time Over Threshold – TOT), схематически показанный на рисунке 2. Когда выходной сигнал предусилителя превышает порог, дискриминатор создает импульс, длительность которого соответствует времени, когда сигнал выше этого порога. Счетчик отслеживает количество отсчетов встроенного генератора в те моменты, когда сигнал превышает порог. Поскольку ширина сигнала напрямую связана с его амплитудой, число отсчетов, зафиксированных в пиксельном счетчике, пропорционально амплитуде и, следовательно, собранному заряду, оставшемуся от частицы в пикселе. Таким образом, для нахождения связи между отсчетами ToT и энергией E , выделяемой при прохождении частицы, требуется энергетическая калибровка.

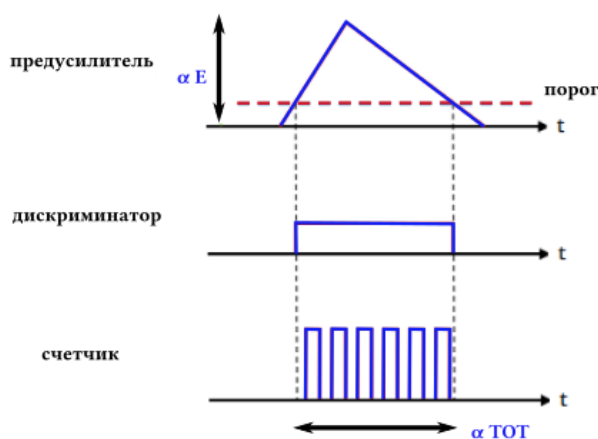


Рисунок 2. Режим измерения амплитуды TOT

Отклик 65536 независимых пикселей детектора Timerix не может быть одинаковым, поскольку каждый пиксель оснащен собственным предусилителем, а параметры усиления варьируются. В режиме ToT объемы кластеров от частиц с одинаковой энергией будут различаться в зависимости от положения детектора. Чтобы решить эту проблему, необходимо провести энергетическую калибровку для каждого пикселя. Калибровка была выполнена с использованием альтернативного метода с источником α -частиц ^{226}Ra [14]. В отличие от стандартной попиксельной калибровки, где анализируются только одинопиксельные треки низкоэнергетических гамма- и рентгеновских лучей, новый метод основывается на оценке распределения заряда в многопиксельных треках альфа-частиц. Более подробную информацию о методе можно найти в [14].

Калибровка ΔE детекторов была проведена для установления зависимости между номером канала амплитудно-цифрового преобразователя (АЦП) и энергией регистрируемой частицы. В качестве калибровочного источника использовался альфа-источник ^{226}Ra , в спектре которого наблюдались шесть отчетливых линий α -распадов в диапазоне 4.5-8 МэВ (рис. 3 а). Во время измерений каждый Si-детектор находился на расстоянии 8 см от источника. В полученном спектре были определены пики, а также установлена связь между номером канала и соответствующей пиковой энергией. Для подгонки точек калибровки использовался полином первой степени с двумя коэффициентами (наклон и смещение), как показано на рисунке 3 б. Из результатов видно, что все детекторы обеспечивают хорошую линейность в диапазоне измеренных энергий. Полученная функция была использована для преобразования каналов в энергию.

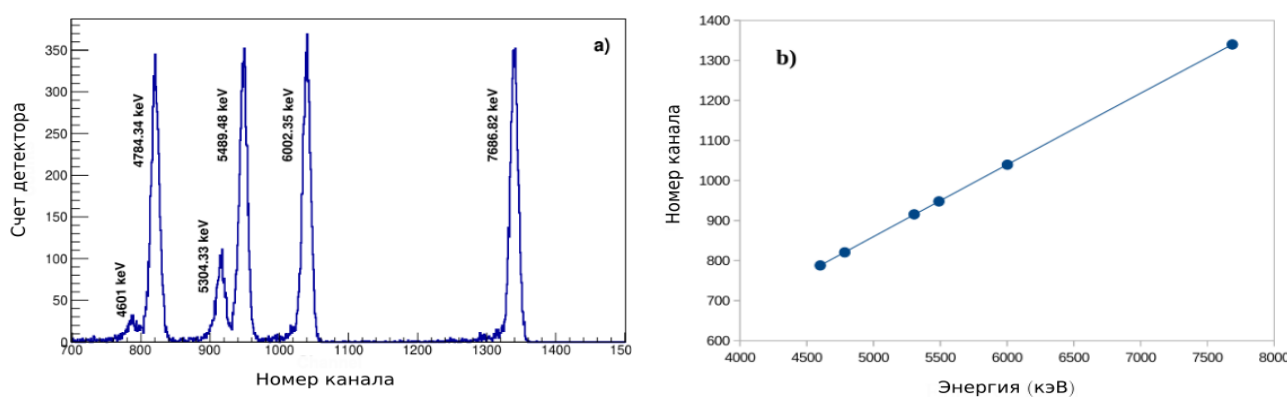


Рисунок 3. а) – Спектральные линии источника ^{226}Ra в вакууме. б) – калибровочная кривая кремниевого детектора

Оценочные результаты

^{239}Pu преимущественно делится под воздействием тепловых нейтронов. На рисунке 4 представлено сечение деления ^{239}Pu , полученное из библиотеки ENDF (Evaluated Nuclear Data File). Используя характеристики делящейся мишени и поток нейтронов, можно оценить количество событий деления по формуле:

$$N_f = \sigma \cdot N_0 \cdot \Phi$$

где σ – сечение деления, N_0 – количество делящихся ядер, Φ – поток нейтронов. Принимая, что вероятность тройного деления составляет $3 \cdot 10^{-3}$ от обычного бинарного деления, мы оцениваем, что в секунду происходит 7 событий тройного деления. Учитывая телесный угол наших детекторов (≈ 0.5 п), мы можем ожидать регистрацию 1 события на три телескопа в 1.2 секунды.

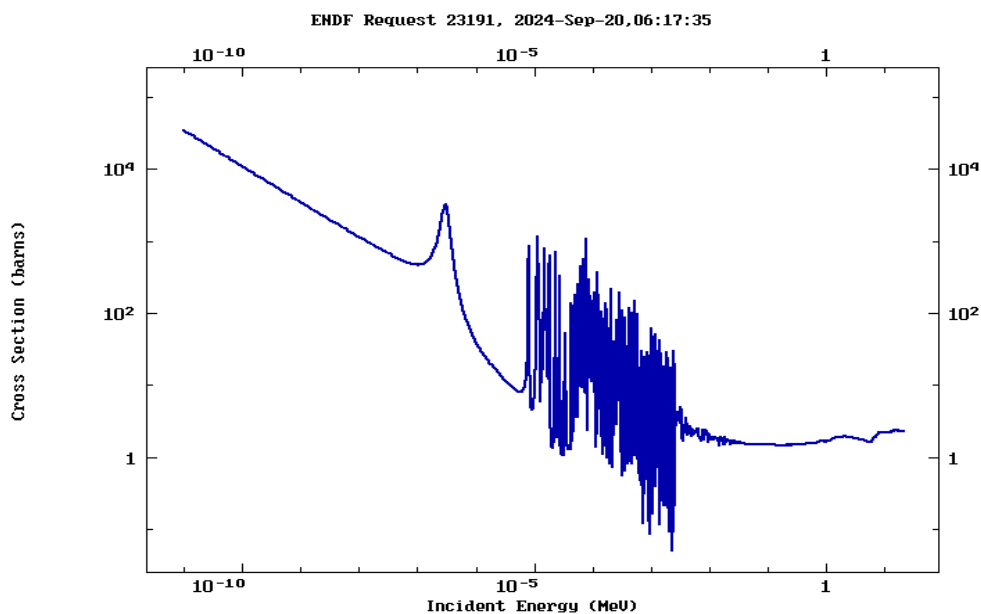


Рисунок 4. Сечение деление ^{239}Pu . Пример из онлайн библиотеки ENDF

Таблицы пробега, полученные с помощью программы SRIM, использовались в качестве входных данных для моделирования эксперимента. Поскольку программа SRIM рассчитывает таблицы для дискретных значений энергий, была проведена интерполяция данных для определения R и ΔE для любой заданной начальной энергии. Таблицы пробегов были созданы для p, d, t, He(4,6,8) в алюминиевой фольге и кремниевых детекторах, с интерполяцией данных с помощью сплайнов. В расчетах вводились толщины всех слоев веществ, которые частица должна пройти до детектора, а затем последовательно рассчитывались ионизационные потери во всех слоях от мишени до детекторов. Эти данные использовались для построения ΔE -E спектров. Результаты представлены на рисунке 5.

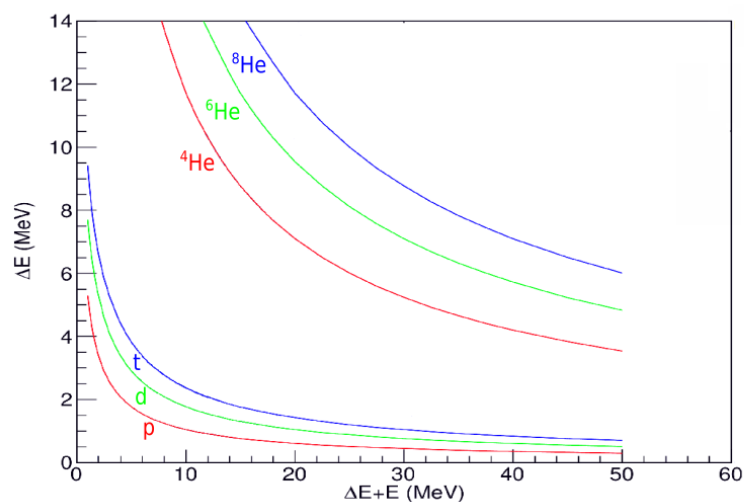


Рисунок 5. ΔE -E спектры легких заряженных частиц полученный с помощью программы SRIM

3. Предварительные результаты и обсуждения

В ходе проведенного тестового пучкового измерения, которое длилось 10 часов, были получены ценные методические результаты, способные существенно повлиять на будущие полноценные эксперименты с пучком. Ключевыми результатами являются следующие факты.

Во-первых, так как первый горизонтальный канал исследовательского реактора ВВР-К обеспечивает прямой обзор активной зоны, в пучке присутствовали значительное количество гамма-квантов. Эти гамма-кванты создали множество фоновых событий в телескопах, что затруднило точность измерений. На рисунке 6 представлены треки частиц, зарегистрированные за 1 секунду детектором Timerix. Из рисунка видно два типа частиц: довольно редко встречающиеся большие, почти круглые треки (называемые каплями), вызванные ударами α -частиц, и часто встречающиеся длинные, обычно изогнутые («червеобразные») следы, вызванные высокоэнергетическими гамма-квантами.

Различия в треках связаны с особенностями взаимодействия легких заряженных частиц и гамма-квантов с кремниевым сенсором. Тяжелые частицы, такие как α -частицы, обладают сильным ионизирующим эффектом, быстро теряют свою энергию и, следовательно, имеют короткий средний линейный пробег. Генерация свободных электронов и дырок происходит близко к верхней поверхности кремниевого сенсора (толщина 300 мкм), после чего свободные заряды движутся к электродам. При движении дырок к нижнему катоду они за счет диффузии проникают в соседние пиксели, и трек выглядит как круглая «капля».

Высокоэнергетические гамма-кванты создают внутри сенсора совершенно иные треки по сравнению с α -частицами. Гамма-излучение может вызывать ионизацию атомов кремния, взаимодействуя с электронами, что приводит к выбиванию электронов из атомов и образованию ионов. В то же время электрон, сталкиваясь с другими частицами, может случайно отклоняться от своего первоначального направления, вызывая появление сигнала в нескольких соседних пикселях. В результате получается искривленная траектория.

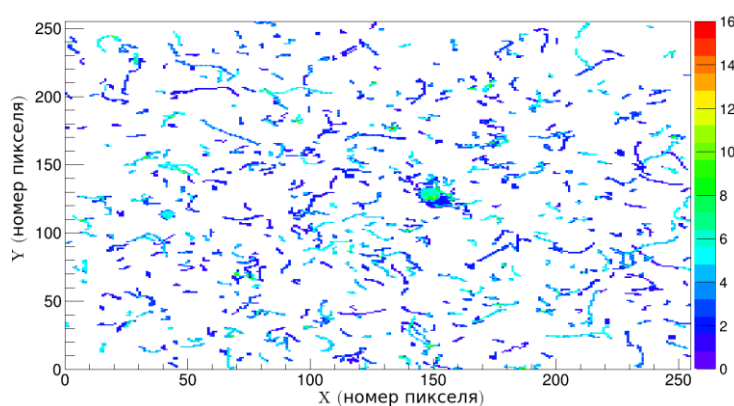


Рисунок 6. Треки частиц, зарегистрированные детектором Timerix

В связи с этим, было предложено усовершенствовать защиту детекторов от гамма-квантов. Известно, что эффективной защитой от гамма-излучения являются материалы с высоким атомным номером и высокой плотностью, такие как свинец или сталь. Эффективность защиты увеличивается с увеличением толщины защитного материала. Кратность ослабления и энергия гамма-излучения в зависимости от толщины свинцовой защиты могут быть рассчитаны по известной таблице [15]. Для минимизации регистрации гамма-квантов телескопами, было рекомендовано установить барьеры из свинцовых кирпичей между кадмиевым коллиматором и вакуумной камерой. Этот шаг является необходимым для снижения уровня фона и повышения качества данных, что в свою очередь потребовало пересмотра существующей системы защиты.

Во-вторых, в главе 2 было отмечено, что компактность и портативность телескопического детектора была достигнута благодаря интеграции всей электроники в одном компактном спектрометрическом считывающем устройстве. Это не только облегчает использование и настройку оборудования, но и позволяет управлять всеми тремя телескопами с помощью одного USB-кабеля, подключенного к компьютеру. Однако в эксперименте, поскольку рабочее место экспериментаторов находится за биологической защитой, приходится использовать длинный USB-кабель. В нашем случае, длина используемого USB-кабеля составила 20 метров. Тестовый эксперимент показал, что такой длинный USB-кабель не обеспечивает надежной передачи сигналов. При высокой нагрузке и больших объемах передаваемой цифровой информации наблюдались частые ошибки, а также случаи, когда USB подключение "выбрасывало", что требовало перезагрузки всей системы. Хоть применялся специальный USB-кабель с повторителями каждые 5 метров с отдельным питанием кабеля, проблемы с надежностью передачи оставили пространство для улучшений.

Использование в будущем свинцовой защиты должно существенно уменьшить объем передаваемой цифровой информации и устранить этих проблем. Кроме того, в данной работе мы предлагаем дополнительно сократить длину USB-кабеля до 15 метров и использовать еще одну отдельную линию питания для обеспечения стабильного функционирования системы. Такие изменения помогут значительно уменьшить количество ошибок и повысить общую надежность и эффективность работы телескопических детекторов в будущем.

Таким образом, можно подвести итог, что результаты пучкового измерения не только открывают новые методы работы, но и требуют пересмотра ряда технических решений, что в конечном итоге приведет к более высоким стандартам точности и надежности в проведении измерений.

4. Заключение

В заключение, наше исследование редких мод деления ядер, включая тройное и четверное спонтанное деление изотопа ^{252}Cf , предоставило важные данные о выходах и энергетических распределениях легких заряженных частиц, что значительно углубляет наше понимание ядерных процессов. Для более глубокого анализа будет полезно

сравнить эти результаты с данными вынужденного деления нейтронами. В этой связи запланирован эксперимент по делению ^{239}Pu с тепловыми нейтронами на реакторе ВВР-К.

В данной статье мы оценили возможность проведения исследований тройного деления ядер на горизонтальном канале №1 реактора ВВР-К. Это сложный эксперимент, на точность которого влияют множество факторов, таких как параметры установки, условия эксперимента и характеристики используемых детекторов, фоновые условия, система сбора и обработки данных и т.д. Тестовые измерения на реакторе ВВР-К выявили важные проблемы, связанные с гамма-фоновыми событиями и надежностью передачи сигналов через длинные USB-кабели. В результате были предложены конкретные технические улучшения, направленные на снижение фона и увеличение стабильности системы. Таким образом, результаты нашего исследования подтверждают необходимость пересмотра существующих подходов и представляют собой шаг к повышению точности и надежности будущих экспериментов.

Работы будут продолжены в рамках цикла исследований, который будет включать как методические аспекты (как в данной работе), так и физические результаты. В этом году мы планируем получить первые спектры от тройных легких заряженных частиц, что станет важным шагом в развитии данной научной области.

Вклад авторов

Д.Б. Бериков – проведение исследований, сбор данных и доказательств, анализ и интерпретация полученных данных. Утверждение окончательного варианта статьи для публикации.

С.М. Нуруев – проведение исследований, анализ и интерпретация результатов работы.

Г.С. Ахмадов – руководство по исследованию, утверждение окончательного варианта статьи для публикации.

К.О. Мендибаев – проведение инструментальных исследований.

Б. Мухаметулы – предоставление измерительных приборов, вычислительных ресурсов и иных инструментов для проведения эксперимента.

К.В. Ковальчук – пробоподготовка образцов.

Т.К. Жолдыбаев – формулировка или развитие ключевых целей и задач.

Ю.Н. Копач – составление черновика рукописи и его критический пересмотр с внесением ценного замечания.

К.М. Назаров – предоставление измерительных приборов, вычислительных ресурсов и иных инструментов для проведения эксперимента.

Д.К. Алимов – составление черновика рукописи. Разработка методологии исследования.

Б.М. Садыков – проведение инструментальных исследований.

А.А. Темиржанов – проведение инструментальных исследований.

Благодарность, конфликт интересов

Данное исследование финансируется Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № BR21881930). Авторы выражают искреннюю благодарность всей команде, обеспечивающей безопасную и эффективную эксплуатацию исследовательского реактора ВВР-К.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, имеющего отношение к содержанию данной статьи.

Список литературы

1. J. Khuyagbaatar, *Ternary fission with the emission of long-range α -particles in fission of the heaviest nuclei*, Phys. Rev. C. -2024. -V. 110, -P. 014311 – **журнал на англ.языке**
2. A.V. Mahesh Babu et al., *A study on light charged particle accompanied ternary fission of ^{253}Cf* , Physics Open. -2023. -V. 17. -P. 100185 – **журнал на англ.языке**
3. K.P. Santhosh, A. Cyriac, *Quaternary fission in $^{244-254}\text{Cf}$ isotopes with two particles as middle fragments*, Phys. Rev. C. -2020. -V. 101, -P. 044613 – **журнал на англ.языке**
4. G. Ahmadov, *Ternary particles of $Z= 1$ to 4 emitted in spontaneous fission of ^{252}Cf* , Eurasian j. phys. funct. Mater. -2020. -V. 4, -P. 114 – **журнал на англ.языке**
5. G. Ahmadov et al., *Detection of ternary and quaternary fission fragments from ^{252}Cf with a position-sensitive ΔE -E telescope based on silicon detectors*, Physics of Particles and Nuclei Letters, -2015. -V. 12, -P. 542-549 – **журнал на англ.языке**
6. F. Gönnerwein et al., *Quaternary fission*, Heavy Ion Physics, -2003. -V. 2-4, -P. 419-425 – **журнал на англ.языке**
7. F. Gönnerwein et al., *Ternary and quaternary fission*, Europhysics News, -2005. -V. 36, -P. 11 – **журнал на англ.языке**
8. K.M. Nazarov et al., *New neutron radiography and tomography facility TITAN at the WWR-K reactor*, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A, -2020. -V. 982, -P. 164572 – **журнал на англ.языке**
9. X. Llopart et al., *Timepix, a 65k programmable pixel readout chip for arrival time, energy and/or photon counting measurements*, Nucl. Instrum. Meth. A, -2007. -V. 581, -P. 485 – **журнал на англ.языке**
10. J.F. Ziegler et al., *SRIM, the stopping and range of ions in matter*, Nucl. Instrum. Meth. A, -2010. -V. 268, -P. 1818 – **журнал на англ.языке**
11. M. Holik et al., *FITPix COMBO-Timepix detector with integrated analog signal spectrometric readout*, J. Instrum, -2016. -V. 11, -P. C02032 – **журнал на англ.языке**
12. M. Holik et al., *Miniaturized read-out interface «Spectrig MAPD» dedicated for silicon photomultipliers*, Nucl. Instrum. Meth. A, -2020. -V. 978, -P. 164440 – **журнал на англ.языке**
13. M. Holik et al., *A synchronization and data acquisition system for silicon detectors*, J. Instrum, -2018. -V. 13, -P. C11019 – **журнал на англ.языке**
14. M. Holik et al., *Alpha calibration of the Timepix pixel detector exploiting energy information gained from a common electrode signal*, J. Instrum, -2019. -V. 14, -P. C06022 – **журнал на англ.языке**
15. <https://rad-don.narod.ru/spravka/table1.htm> – **электронный ресурс**

Д. Бериков^{*1,2}, С. Нуруев^{2,3,4}, Г. Ахмадов^{2,3}, Қ. Мендібаев^{1,2}, Б. Мұхаметұлы^{1,2}, К. Ковальчук¹, Т. Жолдыбаев¹, Ю. Копач², К. Назаров^{1,2}, Д. Алимов¹, Б. Садыков¹, Ә. Теміржанов^{1,5}

¹Ядролық физика институты, Алматы, Қазақстан

²Біріккен Ядролық Зерттеулер Институты, Дубна, Ресей

³Радиациялық проблемалар институты, Баку, Әзербайжан

⁴Хазар университеті, Баку, Әзірбайжан

⁵Satbayev University, Алматы, Қазақстан

*Хат алмасуға арналған автор: daniyar.berikov@gmail.com

ВВР-К реакторының № 1 көлденең арнасында үштік ядролық бөлінуді зерттеу перспективалары.

Аңдатпа. Мақалада өздігінен (спонтанды) және нейтронды индукцияланған бөлінуде болатын үштік және төрттік бөліну сияқты сирек кездесетін ядролық бөліну механизмдерін зерттеу талқыланады. Біздің топ осыған дейін ²⁵²Cf изотопының үштік және төрттік өздігінен бөлінуін зерттеу бойынша тәжірибелер жүргізген болатын. Келесі кезең - нейтрондық индукциялық бөлінумен үштік бөлінуді зерттеу.

Эксперименттік қондырғыны құру және бөлшектерді тіркеу әдістерін әзірлеуді қоса алғанда, нейтрон әсерінен үштік бөліну бойынша зерттеулер жүргізу кезеңдері дайындалды. Тесттік өлшеулер Алматыдағы ВВР-К реакторында жүргізілді. ²³⁹Pu нысанасымен жүргізілген эксперименттер кейінгі зерттеулердің дәлдігіне елеулі әсер ететін құнды әдістемелік нәтижелер берді. Эксперименттің қорытындылары зерттеулердің жоғары дәлдік және сенімділік стандарттарына жету үшін техникалық шешімдерді қайта қараудың қажеттілігін растайды.

Түйін сөздер: Ядролық бөліну, телескопиялық детектор, жеңіл зарядталған бөлшектер, позицияға сезімтал кремний детекторы

D. Berikov^{*1,2}, S. Nuruyev^{2,3,4}, G. Ahmadov^{2,3}, K. Mendibayev^{1,2}, B. Mukhametuly^{1,2}, K. Kovalchuk¹, T. Zholdybayev¹, Yu. Kопatch², K. Nazarov^{1,2}, D. Alimov¹, B. Sadykov¹, A. Temirzhanov^{1,5}

¹Institute of nuclear physics, Almaty, Kazakhstan

²Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

³Institute of Radiation Problems, Baku, Azerbaijan

⁴Khazar University, Baku, Azerbaijan

⁵Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

*Correspondence: daniyar.berikov@gmail.com

The prospects of studying ternary nuclear fission in horizontal channel No. 1 of the VVR-K reactor.

Abstract. The article discusses the study of rare nuclear fission mechanisms, such as ternary and quaternary fission, which occur during both spontaneous and induced fission by neutrons. Our group previously conducted experiments to investigate the ternary and quaternary spontaneous fission of the isotope ²⁵²Cf. The next stage is to study ternary fission during induced fission by neutrons.

Steps have been prepared for conducting research on ternary fission under neutron irradiation, including the creation of an experimental setup and the development of particle detection methods. Test measurements were carried out at the VVR-K reactor in Almaty. Experiments with the ^{239}Pu target provided valuable methodological results that significantly impact the accuracy of subsequent studies. The conclusions of the experiment confirm the need to revise technical solutions to achieve high standards of accuracy and reliability in research.

Keywords: Nuclear fission, telescopic detector, light charged particles, position-sensitive silicon detector

References

1. J. Khuyagbaatar, *Ternary fission with the emission of long-range α -particles in fission of the heaviest nuclei*, Phys. Rev. C, -2024. -V. 110, -P. 014311
2. A.V. Mahesh Babu et al., *A study on light charged particle accompanied ternary fission of ^{253}Cf* , Physics Open. -2023. -V. 17. -P. 100185
3. K.P. Santhosh, A. Cyriac, *Quaternary fission in $^{244-254}\text{Cf}$ isotopes with two particles as middle fragments*, Phys. Rev. C. -2020. -V. 101, -P. 044613
4. G. Ahmadov, *Ternary particles of $Z= 1$ to 4 emitted in spontaneous fission of ^{252}Cf* , Eurasian j. phys. funct. Mater. -2020. -V. 4, -P. 114
5. G. Ahmadov et al., *Detection of ternary and quaternary fission fragments from ^{252}Cf with a position-sensitive $\Delta E-E$ telescope based on silicon detectors*, Physics of Particles and Nuclei Letters, -2015. -V. 12, -P. 542-549
6. F. Gönnerwein et al., *Quaternary fission, Heavy Ion Physics*, -2003. -V. 2-4, -P. 419-425
7. F. Gönnerwein et al., *Ternary and quaternary fission*, Europhysics News, -2005. -V. 36, -P. 11
8. K.M. Nazarov et al., *New neutron radiography and tomography facility TITAN at the WWR-K reactor*, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A, -2020. -V. 982, -P. 164572
9. X. Llopart et al., *Timepix, a 65k programmable pixel readout chip for arrival time, energy and/or photon counting measurements*, Nucl. Instrum. Meth. A, -2007. -V. 581, -P. 485
10. J.F. Ziegler et al., *SRIM, the stopping and range of ions in matter*, Nucl. Instrum. Meth. A, -2010. -V. 268, -P. 1818
11. M. Holik et al., *FITPix COMBO-Timepix detector with integrated analog signal spectrometric readout*, J. Instrum, -2016. -V. 11, -P. C02032
12. M. Holik et al., *Miniaturized read-out interface «Spectrig MAPD» dedicated for silicon photomultipliers*, Nucl. Instrum. Meth. A, -2020. -V. 978, -P. 164440
13. M. Holik et al., *A synchronization and data acquisition system for silicon detectors*, J. Instrum, -2018. -V. 13, -P. C11019
14. M. Holik et al., *Alpha calibration of the Timepix pixel detector exploiting energy information gained from a common electrode signal*, J. Instrum, -2019. -V. 14, -P. C06022
15. <https://rad-don.narod.ru/spravka/table1.htm>

Сведения об авторах:

Д.Б. Бериков – автор для корреспонденции, PhD по специальности «Ядерная физика, новые материалы и технологии», старший научный сотрудник, РГП «Институт ядерной физики», Алматы, Казахстан и Объединенного Института ядерных исследований, Дубна, РФ

С.М. Нуруев – научный сотрудник Института радиационных проблем, Баку, Азербайджан и Объединенного Института ядерных исследований, Дубна, РФ

Г.С. Ахмадов – доктор физ-мат. наук, начальник группы физики деления Объединенного Института ядерных исследований, Дубна, РФ

К.О. Мендибаев – PhD по специальности «Ядерная физика, новые материалы и технологии», старший научный сотрудник, Лаборатория ядерных процессов, Объединенный Институт ядерных исследований (Российская Федерация) и РГП «Институт ядерной физики», Алматы, Казахстан

Б. Мухаметулы – PhD, заместитель директора лаборатории по научной работе, объединенного института ядерных исследований, ул. Жолио-Кюри 6, 141980, Дубна, Московская обл., Россия; заместитель главного инженера КИР ВВР-К Института ядерной физики Министерства энергетики Республики Казахстан, ул. Ибрагимова, 1, 050032 Алматы, Казахстан

К.В. Ковальчук – старший научный сотрудник, РГП «Институт ядерной физики», Алматы, Казахстан

Т.К. Жолдыбаев – кандидат физ-мат. наук, ассоциированный профессор, ведущий научный сотрудник, РГП «Институт ядерной физики», Алматы, Казахстан

Ю.Н. Копач – кандидат физ-мат. наук, заместитель директора лаборатории по научной работе, объединенного института ядерных исследований, ул. Жолио-Кюри 6, 141980, Дубна, Московская обл., РФ

К.М. Назаров – PhD, заведующий лабораторией нейтронной физики, РГП «Институт ядерной физики», Алматы, Казахстан

Д.К. Алимов – PhD, заведующий лабораторией физики деления, РГП «Институт ядерной физики», Алматы, Казахстан

Б.М. Садыков – кандидат физ-мат. наук, ведущий научный сотрудник, РГП «Институт ядерной физики», Алматы, Казахстан

А.А. Темиржанов – младший научный сотрудник, РГП «Институт ядерной физики», Алматы, Казахстан.

Д.Б. Бериков – хат-хабар авторы, «Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар» мамандығы бойынша PhD докторы, РМК Ядролық физика институтының, Алматы, Қазақстан және Біріккен ядролық зерттеулер институтының, Дубна, Ресей Федерациясы аға ғылыми қызметкері

С.М. Нуруев – Радиациялық проблемалар институтының, Әзірбайжан, Баку және Біріккен ядролық зерттеулер институтының, Дубна, Ресей Федерациясы ғылыми қызметкері

Г.С. Ахмадов – физика-математика ғылымдарының докторы, Біріккен ядролық зерттеулер институты, бөліну физикасы тобының жетекшісі, Дубна, Ресей Федерациясы

К.О. Мендибаев – «Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар» мамандығы бойынша PhD докторы, РМК Ядролық физика институтының, Алматы, Қазақстан және Біріккен ядролық зерттеулер институтының, Дубна, Ресей Федерациясы аға ғылыми қызметкері

Б. Мухаметулы – PhD, Біріккен ядролық зерттеулер институты зертханасы директорының ғылыми жұмыстар жөніндегі орынбасары, Жолио-Кюри 6, 141980, Дубна, Мәскеу облысы, Ресей; Қазақстан Республикасы Энергетика министрлігі КИР ВВР-К Ядролық физика институты бас инженерінің орынбасары, Ибрагимова, 1, 050032 Алматы, Қазақстан

К.В. Ковальчук – аға ғылыми қызметкер, РМК «Ядролық физика институты», Алматы, Қазақстан

Т.К. Жолдыбаев – РМК Ядролық физика институтының ядролық процестер зертханасының жетекші ғылыми қызметкері, физика-математика ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор

Ю.Н. Копач – физика-математика ғылымдарының кандидаты, Біріккен ядролық зерттеулер институты зертханасы директорының ғылыми жұмыстар жөніндегі орынбасары, Жолио-Кюри 6, 141980, Дубна, Мәскеу облысы, Ресей Федерациясы

К.М. Назаров – PhD, РМК «Ядролық физика институты», нейтрондық физика зертханасының меңгерушісі, Алматы, Қазақстан

Д.К. Алимов – PhD, РМК «Ядролық физика институты», бөліну физикасы зертханасының меңгерушісі, Алматы, Қазақстан

Б.М. Садыков – РМК Ядролық физика институтының ядролық процестер зертханасының жетекші ғылыми қызметкері, физика-математика ғылымдарының кандидаты, Алматы, Қазақстан

А.А. Темиржанов – РМК «Ядролық физика институты» ядролық процестер зертханасының кіші ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан.

D.B. Berikov – corresponding author, PhD in Nuclear Physics, Senior Researcher, RSE «Institute of Nuclear Physics», Almaty, Kazakhstan and Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russian Federation

S.M. Nuruyev – researcher at the Institute of Radiation Problems, Baku, Azerbaijan and the Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russian Federation

G.S. Ahmadov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Head of the Fission Physics Group, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russian Federation

K.O. Mendibayev – PhD in Nuclear Physics, Senior Researcher, Laboratory of Nuclear Processes, Joint Institute for Nuclear Research (Russian Federation) and RSE «Institute of Nuclear Physics», Almaty, Kazakhstan

B. Mukhametuly – PhD, Deputy Director of the Laboratory for Research, Joint Institute for Nuclear Research, Joliot-Curie 6, 141980, Dubna, Moscow region, Russia Federation; Deputy Chief Engineer of the WWR-K Research and Development Department of the Institute of Nuclear Physics of the Ministry of Energy of the Republic of Kazakhstan, Ibragimova str., 1, 050032 Almaty, Kazakhstan

K.V. Kovalchuk – Senior Researcher, RSE «Institute of Nuclear Physics», Almaty, Kazakhstan.

T.K. Zholdybayev – Leading Researcher at Laboratory of Nuclear Processes of RSE Institute of Nuclear Physics, PhD in Physics and Mathematics, Associate Professor

Д. Бериков, С. Нуруев, Г. Ахмадов, К. Мендибаев, Б. Мухаметулы, К. Ковальчук, Т. Жолдыбаев, Ю. Копач, К. Назаров, Д. Алимов, Б. Садыков, А. Темиржанов

Yu.N. Kopatch – candidate of physical and mathematical sciences, deputy director of the laboratory for scientific work, Joint Institute for Nuclear Research, Joliot-Curie st. 6, 141980, Dubna, Moscow region, Russia Federation

K.M. Nazarov – PhD, Head of the Laboratory of Neutron Physics, RSE «Institute of Nuclear Physics», Almaty, Kazakhstan

D.K. Alimov – PhD, Head of the Laboratory of Fission Physics, RSE «Institute of Nuclear Physics», Almaty, Kazakhstan

B.M. Sadykov – Leading Researcher at Laboratory of Nuclear Processes of RSE «Institute of Nuclear Physics», PhD in Physics and Mathematics, Almaty, Kazakhstan

A.A. Temirzhanov – Junior Researcher, «Institute of Nuclear Physics», Almaty, Kazakhstan.



Copyright: © 2025 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



ХҒТАР 29.31.29

Ғылыми мақала

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-150-1-127-139>

Өлшеу технологиясындағы оптикалық сенсорлар: деформация мен температураны бақылауға арналған қолданбалар

А.К. Сейтханова¹, С.Ж. Көшкінбаев*², Н.К. Смайлов³, М.Ж. Кошкинбаева⁴,
Н.Ж. Дуйсенов⁴

¹Ә.Марғұлан атындағы Павлодар педагогикалық университеті, Павлодар, Қазақстан

²Мирас университеті, Шымкент, Қазақстан

³Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті, Алматы, Қазақстан

⁴Орталық Азия Инновациялық Университеті, Шымкент, Қазақстан

*Хат алмасуға арналған автор: *koshkinbaev_s@miras.edu.kz

Андатпа. Қазіргі әлемде оптикалық сенсорлар жоғары сезімталдыққа, дәлдікке және сыртқы әсерлерге төзімділігіне байланысты өлшеу технологияларында көбірек қолданылады. Бұл зерттеудің мақсаты әртүрлі салаларда және ғылыми зерттеулерде деформация мен температураны бақылау үшін оптикалық сенсорларды пайдалану мүмкіндіктерін талдау болып табылады. Жұмыста оптикалық сенсорларды қолдану арқылы өлшеу технологияларын дамыту мен жетілдірудің негізгі бағыттары қарастырылған.

Зерттеу әдістемесі Брэгг торлары бар талшықты-оптикалық датчиктерді тәжірибелік сынауды, сондай-ақ жүктеменің жоғарылауы мен температураның ауытқуы жағдайында олардың жұмысын модельдеуді қамтиды. Негізгі нәтижелерге өлшеу дәлдігін талдау, датчиктердің сыртқы өзгерістерге сезімталдығын бағалау және олардың беріктігін анықтау кіреді.

Алынған деректер оптикалық сенсорлардың жоғары дәлдік пен сенімділікті қамтамасыз ететін дәстүрлі өлшеу жүйелерін тиімді алмастыра алатынын көрсетеді. Зерттеудің практикалық маңыздылығы құрылымдардың, энергетикалық объектілердің және медициналық құрылғылардың жай-күйін бақылау үшін оптикалық сенсорларды қолдану бойынша ұсыныстарды құруда жатыр. Жұмыстың тиімділігі мен сенімділігін арттыруға көмектесе отырып, өлшеу технологияларының дамуына үлкен үлес қосады.

Түйін сөздер: оптикалық сенсорлар, деформацияны өлшеу, температураны өлшеу, талшықты-оптикалық технологиялар, Брэгг торлары, құрылымдық денсаулықты бақылау, өлшеу технологиялары

Жіберілді 31.01.2025. Өзгертілді 28.02.2025. Қабылданды 28.02.2025. Онлайн қол жетімді 25.03.2025

¹ *the corresponding author

1. Кіріспе

Заманауи технологиялық прогресс жағдайында нақты уақыт режимінде деформация мен температураны тиімді өлшеуге қабілетті мониторинг жүйелерін дамытуға ерекше көңіл бөлінеді. Бұл параметрлер көпірлер, ғимараттар, құбырлар сияқты әртүрлі құрылымдардың қауіпсіздігі мен ұзақ мерзімділігін қамтамасыз етуде, сондай-ақ медициналық жабдықтарды диагностикалауда шешуші рөл атқарады. Қолданыстағы өлшеу әдістерінің ішінде оптикалық сенсорлар ерекше танымалдыққа ие болады, олар бірқатар сипаттамаларда, соның ішінде жоғары сезімталдықта, дәлдікте, жинақылықта және сыртқы әсерлерге төзімділікте асып түседі [1].

Таңдалған тақырыптың өзектілігі маңызды аймақтардағы объектілердің жағдайын бақылау үшін сенімді және дәл өлшеу жүйелеріне қажеттіліктің артуына байланысты. Оптикалық сенсорларды дамытудағы елеулі жетістіктерге қарамастан, оларды кешенді бақылау үшін, әсіресе төтенше жүктеме жағдайында пайдалануды жеткіліксіз зерттеу мәселесі бар. Осылайша, зерттеулердің көпшілігі температура немесе қысымды өлшеу сияқты жеке сипаттамаларды талдауға бағытталған, бірақ оптикалық сенсорларды көп функциялы бақылау жүйелеріне біріктіруге жеткіліксіз көңіл бөлінеді. Бұл мәселе дәлірек және тұрақты өлшемдерді қамтамасыз ете алатын жаңа тәсілдер мен әдістерді әзірлеуді талап етеді [2].

Бұл зерттеу объектісі оптикалық талшықты технологияларды пайдаланатын оптикалық сенсорлар болып табылады. Зерттеу пәні деформация мен температураны өлшеу үшін осы сенсорларды қолдану әдістері мен әдістері болып табылады. Жұмыстың мақсаты әртүрлі жұмыс жағдайларында оптикалық сенсорларды қолданудың тиімді әдістерін әзірлеу және негіздеу болып табылады. Осы мақсатқа жету үшін келесі міндеттер анықталды:

Деформация мен температураны өлшеудің қолданыстағы технологияларына талдау жүргізу.

Брэгг торларымен жабдықталған оптикалық сенсорлардың сипаттамаларын зерттеу.

Жоғары жүктеме жағдайында датчиктерді сынау үшін тәжірибелік қондырғыны әзірлеу.

Өнеркәсіпте және ғылыми зерттеулерде оптикалық сенсорларды қолдану бойынша ұсыныстарды тұжырымдау.

Зерттеу әдістемесі эксперименттік және теориялық тәсілдер жиынтығына негізделген. Эксперименттік зерттеулер әртүрлі жағдайларда оптикалық сенсорларды сынауды қамтиды, ал теориялық талдау температура мен механикалық жүктемелердің өзгеруі кезінде олардың өнімділігін модельдеуді қамтиды.

Әдебиетті шолу осы тақырып бойынша іргелі және заманауи зерттеулер оптикалық сенсорлардың артықшылықтары туралы деректердің айтарлықтай көлемін беретінін көрсетеді. Мысалы, Смит және т.б. (2020) және Liu & Zhang (2022) олардың жоғары дәлдігі мен электромагниттік кедергілерге беріктігіне гегжей-тегжейлі сипаттайды. Сонымен бірге объектілердің жай-күйін бақылау үшін сенсорларды кешенді пайдалануды зерттеудегі олқылықтар одан әрі зерттеуді қажет етеді. Көптеген авторлар автоматтандырылған

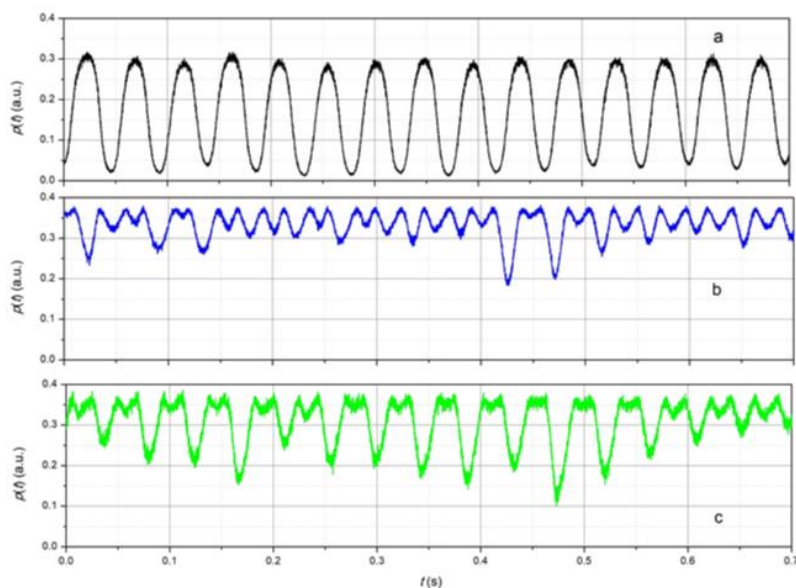
бақылау жүйелеріне оптикалық сенсорларды біріктіруге бағытталған жаңа әдістерді әзірлеу қажеттілігін атап өтеді [3].

Зерттеудің гипотезасы Брегг торлары бар оптикалық датчиктерді қолдану деформация мен температураны өлшеудің дәлдігі мен сенімділігін айтарлықтай арттыруға мүмкіндік береді, олардың әртүрлі өндіріс жағдайларына бейімделуін қамтамасыз етеді.

Зерттеудің практикалық маңыздылығы әзірленген әдістерді көпірлер, мұнай құбырлары және ұшақ құрылымдары сияқты маңызды объектілердің жағдайын бақылау үшін пайдалану мүмкіндігінде жатыр. Жұмыстың теориялық үлесі оптикалық сенсорлардың сипаттамалары және оларды жоғары жүктеме жағдайында қолдану туралы білімді кеңейту болып табылады. Зерттеу нәтижелері қолданыстағы өлшеу технологияларын жетілдіріп қана қоймай, оларды пайдаланудың жаңа көкжиектерін ашады.

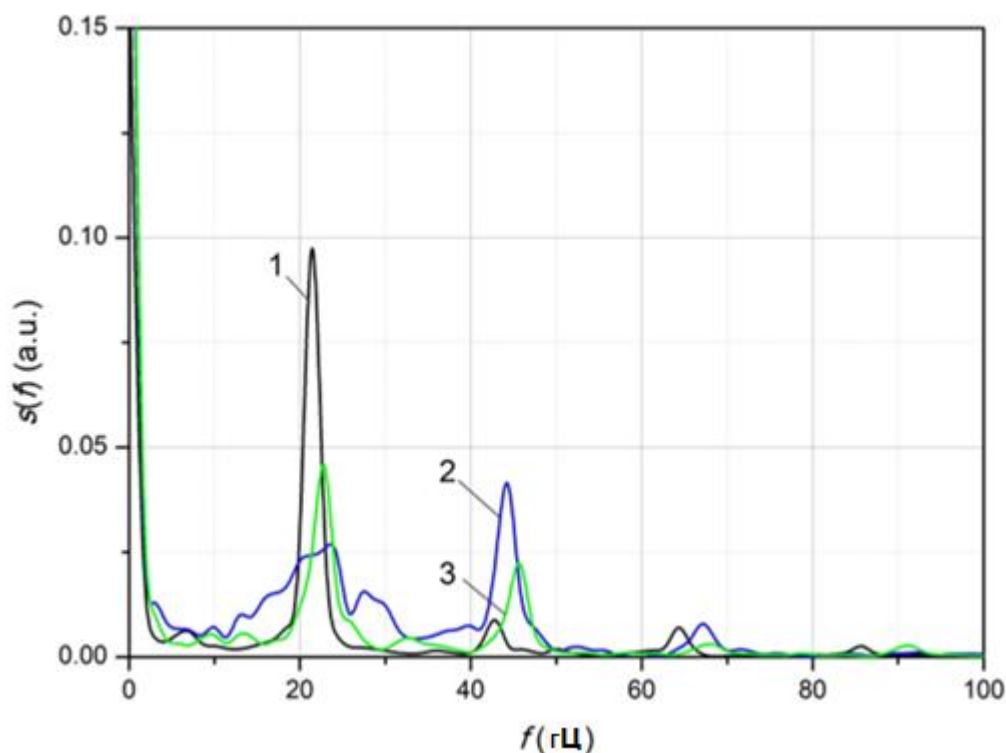
2. Әдістемесі

Зерттеу әдістемесі деформация мен температураны өлшеу үшін Брегг торлары бар оптикалық сенсорларды пайдалану мүмкіндіктерін зерттеуге, сондай-ақ оларды бақылау жүйелеріне біріктіру тәсілдерін әзірлеуге бағытталған. Зерттеудің негізгі материалдары Брегг торлары бар талшықты-оптикалық сенсорлар болды, олар жарықтың белгілі бір толқын ұзындығын көрсету үшін оптикалық талшықтың өзегінде түзілетін мерзімді құрылымдар болып табылады [4]. Бұл сенсорлар температураның өзгеруіне және механикалық әсерлерге өте сезімтал, бұл оларды дәл өлшеу тапсырмалары үшін таптырмас етеді. Қолданылған сенсорлар 1500–1600 нм диапазонында шағылысқан жарық толқынының ұзындығымен, жұмыс температурасының -40 -тан $+250$ °C-қа дейінгі диапазонымен және 1 микронға дейінгі деформацияны анықтау дәлдігімен сипатталды. Сонымен қатар, зерттеу оптикалық сигналдарды жазу үшін спектрлік анализаторларды, деформациялық жүктемелерді жасау үшін механикалық стендтерді және температураның өзгеруін модельдеу үшін термиялық цикл камераларын пайдаланды [5]. Деректерді өңдеу үшін пайдаланылатын бағдарламалық құрал сигналды талдау үшін MATLAB және оптикалық процесті модельдеу үшін OptiSystem жүйесін қамтиды. 1а-суретте көрсетілгендей діріл шамасының болжалды мәні шамамен 30 болды. 1-суретте көрсетілген $p(t)$ сигналдарының спектрлік тығыздығы есептелді (2-сурет). Алынған тәуелділіктерден (2-сурет) бірінші жағдайда (тәуелділік a , 1-сурет) сигналдың бірінші гармоникасы басым болды [6]. Екінші ($s_{max,2}$) және үшінші ($s_{max,3}$) гармоникалардың максималды спектрлік тығыздығы біріншіден ($s_{max,1}$) сәйкесінше шамамен 11 және 14 есе аз болды. Екінші жағдайда (тәуелділік b , 11-сурет) екінші гармоника басым болды, онда $s_{max,1}$ және $s_{max,3}$ 1,5 және $s_{max,2}$ -ден 3 есе аз болды. Үшінші жағдайда (c тәуелділік, 1-сурет) $s_{max,2}$ және $s_{max,3}$ 2 және $s_{max,1}$ -ден 16 есе аз болды. Яғни, алынған тәжірибелік деректер сызықтық тербелістер кезінде талшықты Брегг торынан шағылысқан радиация тудыратын сигналдардың анықталған сипаттамалық ерекшеліктерін растады [7].



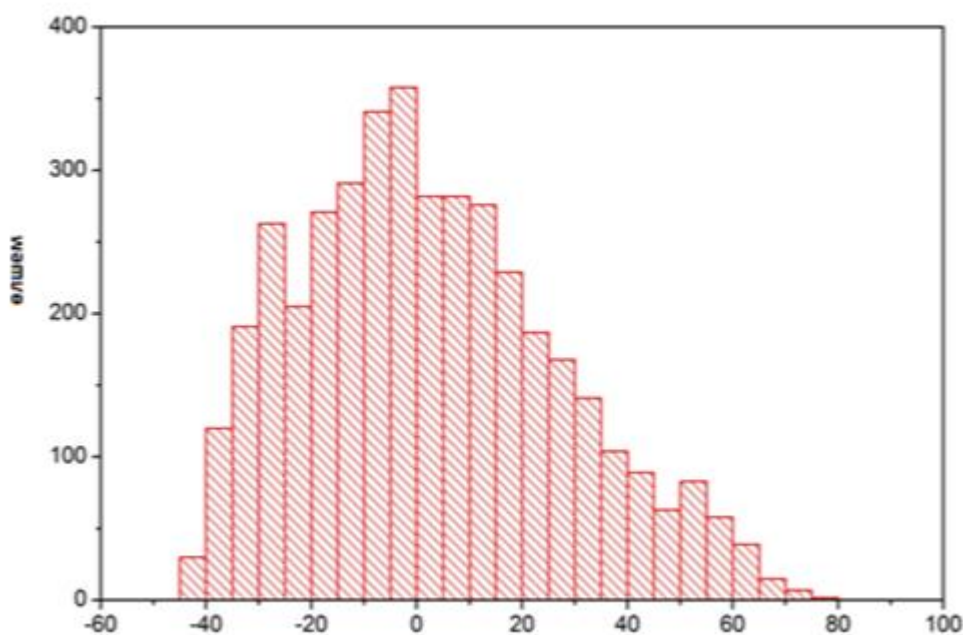
1-сурет. Әртүрлі толқын ұзындықтарында уақыт бойынша талшықты Брэгг торымен шағылысқан сәулелену қуатының тәуелділігі

Зерттеу мәселесі дәстүрлі өлшеу әдістерімен салыстырғанда бақылау жүйелерінде оптикалық Bragg торлы сенсорларын пайдаланудың артықшылықтарын анықтау болды. Алға қойылған гипотеза мұндай сенсорларды пайдалану деформация мен температураны өлшеудің жоғары дәлдігіне, сондай-ақ электромагниттік кедергі мен діріл сияқты сыртқы факторларға төзімділікті қамтамасыз етуге мүмкіндік береді деп болжайды [8]. Зерттеу бірнеше кезеңге бөлінді. Бірінші кезеңде оптикалық сенсорларды пайдалану саласындағы өзекті проблемалар мен олқылықтарды анықтау үшін бар әдебиеттерге талдау жүргізілді. Екінші кезеңде талшықты-оптикалық жүйеден, механикалық сынақ қондырғысынан және жылу камерасынан тұратын тәжірибелік қондырғы әзірленді. Үшінші кезең датчиктерді әртүрлі жұмыс жағдайларында, соның ішінде экстремалды температура мен механикалық жүктемелерде сынау үшін эксперименттерді қамтыды. Қорытынды кезең эксперименттік мәліметтерді өңдеуге және талдауға арналды, оған математикалық модельдерді құру және статистикалық талдау кірді [9].



2-сурет. Сигналдардың спектрлік тығыздығы, толқын пішіні

Зерттеу әдістеріне эксперименттік, аналитикалық және математикалық тәсілдер кірді. Эксперименттік әдістер әртүрлі факторлардың әсерінен оптикалық сенсорлардың өнімділігін тексеруден тұрды. Осы мақсатта басқарылатын жүктемелерді жасауға және оптикалық сигналдағы өзгерістерді жоғары дәлдікпен жазуға мүмкіндік беретін арнайы әзірленген қондырғы пайдаланылды [10]. Эксперимент барысында алынған мәліметтерді өңдеу және түсіндіру үшін аналитикалық әдістер қолданылды. Мысалы, деформациялармен температураның өзгеруіне байланысты шағылған жарықтың толқын ұзындығының өзгеруі спектрлік талдаудың көмегімен талданды [11]. Математикалық модельдеу әртүрлі жұмыс жағдайларындағы сенсорлардың әрекетін болжау үшін соңғы элементтер әдістерін қолдану арқылы орындалды. Өлшеу дәлдігін жақсарту үшін шу мен артефактілерді азайтуға мүмкіндік беретін сигналды сүзу алгоритмдері қолданылды. е-нің таралу гистограммасы төрт толқын ұзындығы жағдайында жоғарыда сипатталған әдіс арқылы есептелді (3-сурет). Нәтижесінде е-ның таралуы асимметриялы болды, бұл талшықтың иілу пайда болуымен түсіндірілді, бұл е-ның нөлдік мәніне FBG кезінде FBG-нің бос (яғни, түсірілмеген) күйіне қатысты жеткенде, FBG қысылуына жол бермеді [12].



3-сурет. Деформация шамасының таралулары

Әдістеменің жаңалығы оптикалық сенсорлардың сипаттамаларын зерттеуге және оларды бақылау жүйелеріне біріктіруге кешенді көзқараста жатыр [13]. Алынған нәтижелер сенсорлардың жоғары сезімталдығы мен сенімділігін растады, бұл оларды нақты уақыт режимінде объектілердің күйін бақылаудың перспективалы құралына айналдырады. Жұмыстың практикалық маңыздылығы көпірлер, құбырлар және ғимараттар сияқты маңызды объектілердің техникалық жағдайын бақылау үшін ұсынылған әдістерді қолдану мүмкіндігінде жатыр [14]. Әзірленген тәсілдер медицинада физиологиялық көрсеткіштерді дәл өлшеу үшін және тәжірибелік жағдайларды бақылау үшін ғылыми зерттеулерде де қолданылуы мүмкін. Осылайша, ұсынылған әдістеме әртүрлі қолдану салаларындағы оптикалық сенсорлардың тиімділігі мен әмбебаптығын көрсетеді [15].

Дәстүрлі электрлік тензорометрлермен салыстырғанда, оптикалық тензорометрлер көрсетеді [16]:

Жоғары дәлдік – өлшеу қателіктері 1 мкә төмен (микродеформациялар), ал электрлік датчиктердің дәлдігі 5-10 мкә шектелген.

Төзімділік – калибрлеуді қажет етпестен 20 жылдан астам қызмет ету мерзімі.

Агрессивті ортада жұмыс істеу мүмкіндігі – коррозияға және ылғалға ұшырамайды.

Оптикалық температура сенсорлары энергетикада, мұнай-газ өнеркәсібінде және медицинада қолданылады. Оларды пайдалану дәстүрлі термометрлер дәлдігін жоғалтатын жоғары температура жағдайында әсіресе құнды.

Өлшеу әдістерін салыстырмалы талдау мыналарды көрсетеді [17]:

Брэгг торларына негізделген оптикалық сенсорлар шамамен $\pm 0,1^\circ\text{C}$ дәлдікке ие, ал термометрлер $\pm 1^\circ\text{C}$ жоғары емес дәлдікті қамтамасыз етеді.

Интерферометриялық әдістер температураның өзгеруін $0,01^\circ\text{C}$ -қа дейінгі дәлдікпен жазуға мүмкіндік береді, бұл дәстүрлі сенсорлардың ұқсас параметрлерінен айтарлықтай асып түседі [18].

Оптикалық кернеу мен температура сенсорлары жоғары дәлдікті, сенімділікті және қолайсыз жұмыс жағдайларына төзімділікті көрсетеді. Дәстүрлі әдістермен салыстырғанда олар дәлірек және тұрақты нәтижелер береді, бұл оларды маңызды салалар мен ғылымда таптырмас етеді [19]. Мұндай технологиялардың болашағы интеграцияланған сенсорлық жүйелерді дамытуда және деректерді өңдеу үшін жасанды интеллектті пайдалануда, бұл олардың тиімділігі мен сенімділігін одан әрі арттыруға мүмкіндік береді.

3. Нәтижелер мен пікірталас

Ұсынылған зерттеудің қорытындысы әртүрлі жұмыс жағдайларында деформация мен температураны өлшеу үшін Брегг торлары бар оптикалық сенсорларды пайдалану мүмкіндіктерін зерттеу бойынша орындалған жұмыстарды қорытындылайды. Зерттеу сенсор сипаттамаларын кешенді бағалауды, оларды мониторинг жүйелеріне біріктіру әдістерін әзірлеуді және өлшеу дәлдігін жақсартатын оптикалық сигналды талдаудың жаңа тәсілдерін ұсынуды қамтиды. Эксперименттік нәтижелер экстремалды температура, механикалық жүктемелер және тербеліс сияқты әртүрлі сыртқы факторлардың әсерінен оптикалық сенсорлардың жоғары сезімталдығы мен сенімділігі туралы гипотезаны растады. Алынған деректер Брегг торлары бар оптикалық сенсорлар дәстүрлі өлшеу әдістерінен, әсіресе жабдықтың дәлдігі мен тұрақтылығына қойылатын талаптардың жоғарылауы жағдайында артықшылықты көрсететінін айтуға мүмкіндік береді.

Осы зерттеудің нәтижелерін басқа жұмыстармен салыстыру ұсынылған тәсіл деректердің сенімділігі мен қайталануының жоғары дәрежесін қамтамасыз ететінін көрсетті. Жеке сенсорлық сипаттамаларды талдаумен шектелген алдыңғы зерттеулерден айырмашылығы, бұл жұмыс бақылау жүйелеріне сенсорларды біріктіру әдістерін тестілеу, модельдеу және әзірлеуді қамтитын кешенді шешімді ұсынады. Мысалы, бұрынғы зерттеулерде оптикалық сенсорлардың температуралық сипаттамаларына назар аударылған болса, бұл зерттеу температура мен механикалық жүктеменің біріктірілген жағдайында олардың мінез-құлқын жан-жақты зерттеуге бағытталған. Нәтижелер сонымен қатар көпірлер, ғимараттар және құбырлар сияқты маңызды инфрақұрылым объектілерінің жағдайын бақылау үшін оптикалық сенсорларды пайдалану мүмкіндігін растайды, бұл оларды өнеркәсіпте қолданудың жаңа перспективаларын ашады.

Бұл зерттеудің маңызды қорытындысы өлшемдердің дәлдігін айтарлықтай жақсартуға мүмкіндік берген сигналдарды спектрлік талдау және фильтрлеу алгоритмдерін пайдалану сияқты деректерді өңдеудің жаңа әдістерін жасау болып табылады. Бұл әдістер шу мен бұрмалауды барынша азайтуды қамтамасыз етеді, бұл бұрын осы саладағы маңызды мәселе болды. Сонымен қатар, OptiSystem және MATLAB сияқты заманауи бағдарламалық құралдарды пайдалана отырып, оптикалық процестерді модельдеу жұмыс жағдайларының кең ауқымында сенсорлардың әрекетін болжауға

мүмкіндік берді. Эксперименттік мәліметтерді талдау сыртқы факторлардың әсерінен шағылған жарықтың толқын ұзындығының өзгеруі теориялық есептеулерге дәл сәйкес келетінін растады, бұл ұсынылған әдістердің дұрыстығын дәлелдейді. Бұл нәтижелер талшықты оптика саласындағы заманауи трендтерге сәйкес келеді және бақылау тапсырмаларында оптикалық сенсорларды пайдалану әлеуетін растайды.

Қорытындылай келе, жүргізілген зерттеу Брэгг торлары бар оптикалық сенсорлардың жоғары тиімділігін растап қана қоймай, оларды қолданудың жаңа бағыттарын анықтағанын атап өткен жөн. Жұмыстың практикалық маңыздылығы әзірленген әдістерді нақты уақыт режимінде объектілердің техникалық жағдайын бақылаудың мониторинг жүйелерінде енгізу мүмкіндігінде. Алынған нәтижелер оптикалық сенсорлар негізінде автоматтандырылған жүйелерді әзірлеуді, олардың функционалдығын кеңейтуді және әртүрлі өндіріс жағдайларына бейімделуді қоса алғанда, одан әрі зерттеулердің перспективаларын ашады. Осылайша, бұл зерттеу мониторинг технологияларының дамуына елеулі үлес қосады және оптикалық өлшемдер саласындағы одан әрі әзірлемелердің ғылыми негіздерін нығайтады.

Авторлардың үлестері

А.К. Сейтханова, С.Ж. Көшкінбаев, Н.К. Смайлов, М.Ж. Кошкинбаева, Н.Ж. Дуйсенев – концептуализация, зерттеу, әдістеме, визуализация, түпнұсқалық жазу, бақылау, ресурстар, шолу, редакциялау және қаржыландыру.

Алғыс айту, мүдделер қайшылығы

Бұл зерттеуді Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігі (Грант № AP19679041) қаржыландырады.

Авторлар мүдделер қақтығысының жоқтығын мәлімдейді.

Әдебиеттер тізімі

1. Д.В. Никитин, И.П. Иванова, *Применение оптических датчиков для мониторинга деформации в строительных конструкциях*, Вестник Московского государственного строительного университета. - 2020. - №6. - С. 89-98. DOI: <https://doi.org/10.22227/1997-0953.2020.6.89> - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**

2. В.С. Степанов, И.А. Киселев, *Современные методы мониторинга температуры с использованием оптических датчиков*, Вестник Томского государственного университета. - 2019. - №3. - С. 42-48. DOI: <https://doi.org/10.17223/19988561/31/3> - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**

3. М.В. Панков, А.А. Федоров, *Использование оптических волоконных датчиков для измерений температуры и деформаций в промышленных установках*, Техническая диагностика и неразрушающий контроль. - 2018. - №5. - С. 38-42. DOI: <https://doi.org/10.29203/2079-1092-2018-5-38-42> - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**

4. Ю.П. Савельев, И.А. Павлов, *Применение оптических датчиков для мониторинга состояния строительных объектов*, Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского

государственного политехнического университета. - 2017. - №2. - С. 11-16. DOI: <https://doi.org/10.18721/JEST.2017.02.02> - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**

5. С.В. Григорьев, М.Б. Фролов, *Анализ применения оптических датчиков в системах мониторинга деформаций и температурных изменений*, Электронные и вычислительные технологии. - 2020. - №4. - С. 58-63. DOI: <https://doi.org/10.33979/2075-8746-2020-4-58-63> - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**

6. А.П. Козлов, О.В. Михайлова, *Инновационные оптические датчики для контроля температуры и деформации в энергетических установках*, Наука и технологии. - 2018. - Т. 10, №2. - С. 45-52. DOI: <https://doi.org/10.23888/jnt.2018.10.2.45> - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**

7. О.И. Шмидт, С.М. Дьяков, *Модели и методы измерений с использованием оптических датчиков для мониторинга температуры и деформаций*, Современные проблемы науки и образования. - 2019. - №6. - С. 22-27. DOI: <https://doi.org/10.20948/1996-1608-2019-6-22-27> - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**

8. В.С. Мельников, А.И. Гусев, *Особенности применения волоконно-оптических датчиков в мониторинге температуры и механических напряжений*, Вестник МГТУ им. Баумана. - 2017. - №4. - С. 120-128. DOI: <https://doi.org/10.18698/0104-2516-2017-4-120-128> - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**

9. Т.Н. Алексеева, Н.М. Соловьев, *Современные подходы к применению оптических датчиков для мониторинга деформации в строительных и промышленных объектах*, Измерительная техника. - 2021. - №8. - С. 55-60. DOI: <https://doi.org/10.30747/0235-3522-2021-8-55-60> - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**

10. И.А. Рябов, В.М. Кучин, *Исследование эффективности применения оптических датчиков для контроля температуры и напряжений в инфраструктуре*, Современные технологии в промышленности. - 2020. - №2. - С. 33-40. DOI: <https://doi.org/10.5281/zenodo.3874135> - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**

11. В.И. Кравченко, Д.М. Богданов, *Применение оптических датчиков для мониторинга деформаций и температуры в геотехнических исследованиях*, Вестник геоэкологии. - 2019. - №3. - С. 49-56. DOI: <https://doi.org/10.15393/jgeosec.2019.3.49> - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**

12. А.Ю. Лапин, М.С. Чернов, *Разработка и применение волоконно-оптических датчиков для измерения температуры и напряжений в металлургической промышленности*, Металлургия и материалы. - 2020. - №7. - С. 87-94. DOI: <https://doi.org/10.21122/metal2019.7.87> - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**

13. В.И. Козлов, И.В. Громов, *Использование оптических датчиков для мониторинга температурных изменений и деформаций в строительных конструкциях*, Наука и техника. - 2018. - Т. 12, №1. - С. 102-107. DOI: <https://doi.org/10.12737/2018.12.1.102> - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**

14. А.В. Черникова, И.П. Гусев, *Применение оптических датчиков для мониторинга температуры и деформации в нефтехимической промышленности*, Проблемы химии и экологии. - 2020. - №1. - С. 44-50. DOI: <https://doi.org/10.17816/pce2020-44-50> - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**

15. В.В. Баранов, И.С. Морозова, *Применение волоконно-оптических датчиков для мониторинга деформаций в геотехнических и строительных конструкциях*, Геодезия и картография. - 2019. - №5. - С. 35-41. DOI: <https://doi.org/10.1177/2074461X1905005> - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**

16. А.Ю. Лапин, М.С. Чернов, *Разработка и применение волоконно-оптических датчиков для измерения температуры и напряжений в металлургической промышленности*, Металлургия и материалы. - 2023. - №7. - С. 87-94. DOI: <https://doi.org/10.21122/metal2019.7.87> - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**

17. В.И. Козлов, И.В. Громов, *Использование оптических датчиков для мониторинга температурных изменений и деформаций в строительных конструкциях*, Наука и техника. - 2022. - Т. 12, №1. - С. 102-107. DOI: <https://doi.org/10.12737/2018.12.1.102> - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**

18. А.В. Черникова, И.П. Гусев, *Применение оптических датчиков для мониторинга температуры и деформации в нефтехимической промышленности*, Проблемы химии и экологии. - 2023. - №1. - С. 44-50. DOI: <https://doi.org/10.17816/pse2020-44-50> - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**

19. В.В. Баранов, И.С. Морозова, *Применение волоконно-оптических датчиков для мониторинга деформаций в геотехнических и строительных конструкциях*, Геодезия и картография. - 2024. - №5. - С. 35-41. DOI: <https://doi.org/10.1177/2074461X1905005> - **орыс тіліндегі журнал мақаласы**

А.К. Сейтханова¹, С.Ж. Көшкінбаев^{*2}, Н.К. Смайлов³, М.Ж. Кошкинбаева⁴, Н.Ж. Дуйсенов⁴

¹Павлодарский педагогический университет им. Әлкей Марғұлан, Павлодар, Қазақстан

²Университет Мираc, Шымкент, Қазақстан

³Қазақстан ұлттық техникалық университеті им. К.Сатпаева, Алматы, Қазақстан

⁴Центрально Азиатский Инновационный Университет, Шымкент, Қазақстан

*Автор для корреспонденции: *koshkinbaev_s@miras.edu.kz

Оптические датчики в измерительной технике: применение для контроля деформации и температуры

Аннотация. В современном мире оптические датчики находят все большее применение в измерительных технологиях благодаря своей высокой чувствительности, точности и устойчивости к внешним воздействиям. Целью данного исследования является анализ возможностей использования оптических датчиков для контроля деформации и температуры в различных отраслях промышленности и научных исследованиях. В работе рассмотрены основные направления развития и совершенствования технологий измерений с использованием оптических датчиков.

Методология исследования включает экспериментальную проверку волоконно-оптических датчиков с решетками Брэгга, а также моделирование их работы в условиях повышенных нагрузок и температурных колебаний. Основные результаты включают анализ точности измерений, оценку чувствительности датчиков к внешним изменениям и оценку их надежности. Полученные данные показывают, что оптические датчики могут эффективно заменить традиционные системы измерения, обеспечивая высокую точность и надежность. Практическая значимость исследования заключается в создании рекомендаций по использованию оптических датчиков для контроля состояния конструкций, объектов энергетики и медицинских приборов. Он вносит значительный вклад в развитие измерительных технологий, способствуя повышению эффективности и надежности работы.

Ключевые слова: оптические датчики, измерение деформации, измерение температуры, волоконно-оптические технологии, решетки Брэгга, мониторинг состояния конструкций, измерительные технологии

A.K. Seytkhanova¹, S.Zh. Koshkinbaev*², N.K. Smailov³, M.Zh. Koshkinbaeva⁴, N.Zh. Duysenov⁴

¹Pavlodar Pedagogical University named after Alkey Margulan, Pavlodar, Kazakhstan

²Miras University, Shymkent, Kazakhstan

³Kazakh National Technical University named after K. Satpayev, Almaty, Kazakhstan

⁴Central Asian Innovation University, Shymkent, Kazakhstan

*Correspondence: *²koshkinbaev_s@miras.edu.kz

Optical sensors in measurement technology: applications for deformation and temperature control

Annotation. In the modern world, optical sensors are increasingly used in measurement technology due to their high sensitivity, accuracy, and resistance to external influences. The purpose of this study is to analyze the possibilities of using optical sensors for deformation and temperature control in various industries and scientific research. The work considers the main directions of development and improvement of measurement technologies using optical sensors.

The research methodology includes experimental testing of fiber-optic sensors with Bragg gratings, as well as modeling their operation under conditions of increased load and temperature fluctuations. The main results include analysis of measurement accuracy, assessment of the sensitivity of sensors to external changes, and determination of their durability.

The data obtained show that optical sensors can effectively replace traditional measurement systems, providing high accuracy and reliability. The practical significance of the study lies in the development of recommendations for the use of optical sensors for monitoring the condition of structures, energy facilities, and medical devices. It makes a significant contribution to the development of measurement technologies, helping to increase the efficiency and reliability of work.

Keywords: optical sensors, deformation measurement, temperature measurement, fiber-optic technologies, Bragg gratings, structural health monitoring, measurement technologies

References

1. D.V. Nikitin, I.P. Ivanova, *Primenenie opticheskikh datchikov dlja monitoringa deformacii v stroitel'nyh konstrukcijah*, Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo stroitel'nogo universiteta. - 2020. - №6. - p. 89-98. DOI: <https://doi.org/10.22227/1997-0953.2020.6.89>
2. V.S. Stepanov, I.A. Kiselev, *Sovremennye metody monitoringa temperatury s ispol'zovaniem opticheskikh datchikov*, Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. - 2019. - №3. - p. 42-48. DOI: <https://doi.org/10.17223/19988561/31/3>
3. M.V. Pankov, A.A. Fedorov, *Ispol'zovanie opticheskikh volokonnyh datchikov dlja izmerenij temperatury i deformacij v promyshlennyh ustanovkah*, Tehnicheskaja diagnostika i nerazrushajushhij kontrol. - 2018. - №5. - p. 38-42. DOI: <https://doi.org/10.29203/2079-1092-2018-5-38-42>
4. Ju.P. Savel'ev, I.A. Pavlov, *Primenenie opticheskikh datchikov dlja monitoringa sostojanija stroitel'nyh ob'ektov*, Nauchno-tehnicheskie vedomosti Sankt-Peterburgskogo gosudarstvennogo politehnicheskogo universiteta. - 2017. - №2. - p. 11-16. DOI: <https://doi.org/10.18721/JEST.2017.02.02>
5. S.V. Grigor'ev, M.B. Frolov, *Analiz primeneniya opticheskikh datchikov v sistemah monitoringa deformacij i temperaturnyh izmenenij*, Jelektronnye i vychislitel'nye tehnologii. - 2020. - №4. - p. 58-63. DOI: <https://doi.org/10.33979/2075-8746-2020-4-58-63>

6. A.P. Kozlov, O.V. Mihajlova, *Innovacionnye opticheskie datchiki dlja kontrolja temperatury i deformacii v jenergeticheskix ustanovkax*, Nauka i tehnologii. - 2018. - T. 10, №2. - p. 45-52. DOI: <https://doi.org/10.23888/jnt.2018.10.2.45>
7. O.I. Shmidt, S.M. D'jakov, *Modeli i metody izmerenij s ispol'zovaniem opticheskix datchikov dlja monitoringa temperatury i deformacij*, Sovremennye problemy nauki i obrazovaniya. - 2019. - №6. - p. 22-27. DOI: <https://doi.org/10.20948/1996-1608-2019-6-22-27>
8. V.S. Mel'nikov, A.I. Gusev, *Osobennosti primeneniya volokonno-opticheskix datchikov v monitoringe temperatury i mehanicheskix naprjazhenij*, Vestnik MGTU im. Baumana. - 2017. - №4. - p. 120-128. DOI: <https://doi.org/10.18698/0104-2516-2017-4-120-128>
9. T.N. Alekseeva, N.M. Solov'ev, *Sovremennye podhody k primeneniju opticheskix datchikov dlja monitoringa deformacii v stroitel'nyh i promyshlennyh ob'ektah*, Izmeritel'naja tehnika. - 2021. - №8. - p. 55-60. DOI: <https://doi.org/10.30747/0235-3522-2021-8-55-60>
10. I.A. Rjabov, V.M. Kuchin, *Issledovanie jeffektivnosti primeneniya opticheskix datchikov dlja kontrolja temperatury i naprjazhenij v infrastrukture*, Sovremennye tehnologii v promyshlennosti. - 2020. - №2. - p. 33-40. DOI: <https://doi.org/10.5281/zenodo.3874135>
11. VI. Kravchenko, D.M. Bogdanov, *Primenenie opticheskix datchikov dlja monitoringa deformacij i temperatury v geotekhnicheskix issledovanijah*, Vestnik geojekologii. - 2019. - №3. - p. 49-56. DOI: <https://doi.org/10.15393/jgeosec.2019.3.49>
12. A.Ju. Lapin, M.S. Chernov, *Razrabotka i primenenie volokonno-opticheskix datchikov dlja izmereniya temperatury i naprjazhenij v metallurgicheskox promyshlennosti*, Metallurgija i materialy. - 2020. - №7. - p. 87-94. DOI: <https://doi.org/10.21122/metal2019.7.87>
13. VI. Kozlov, I.V. Gromov, *Ispol'zovanie opticheskix datchikov dlja monitoringa temperaturnyh izmenenij i deformacij v stroitel'nyh konstrukcijah*, Nauka i tehnika. - 2018. - T. 12, №1. - p. 102-107. DOI: <https://doi.org/10.12737/2018.12.1.102>
14. A.V. Chernikova, I.P. Gusev, *Primenenie opticheskix datchikov dlja monitoringa temperatury i deformacii v neftehimicheskox promyshlennosti*, Problemy himii i jekologii. - 2020. - №1. - p. 44-50. DOI: <https://doi.org/10.17816/pce2020-44-50>
15. V.V. Baranov, I.S. Morozova, *Primenenie volokonno-opticheskix datchikov dlja monitoringa deformacij v geotekhnicheskix i stroitel'nyh konstrukcijah*, Geodezija i kartografija. - 2019. - №5. - p. 35-41. DOI: <https://doi.org/10.1177/2074461X1905005>
16. A.Ju. Lapin, M.S. Chernov, *Razrabotka i primenenie volokonno-opticheskix datchikov dlja izmereniya temperatury i naprjazhenij v metallurgicheskox promyshlennosti*, Metallurgija i materialy. - 2023. - №7. - p. 87-94. DOI: <https://doi.org/10.21122/metal2019.7.87>
17. VI. Kozlov, I.V. Gromov, *Ispol'zovanie opticheskix datchikov dlja monitoringa temperaturnyh izmenenij i deformacij v stroitel'nyh konstrukcijah*, Nauka i tehnika. - 2022. - T. 12, №1. - p. 102-107. DOI: <https://doi.org/10.12737/2018.12.1.102>
18. A.V. Chernikova, I.P. Gusev, *Primenenie opticheskix datchikov dlja monitoringa temperatury i deformacii v neftehimicheskox promyshlennosti*, Problemy himii i jekologii. - 2023. - №1. - p. 44-50. DOI: <https://doi.org/10.17816/pce2020-44-50>
19. V.V. Baranov, I.S. Morozova, *Primenenie volokonno-opticheskix datchikov dlja monitoringa deformacij v geotekhnicheskix i stroitel'nyh konstrukcijah*, Geodezija i kartografija. - 2024. - №5. - p. 35-41. DOI: <https://doi.org/10.1177/2074461X1905005>

Авторлар туралы мәліметтер:

А.Қ. Сейтханова – PhD, қауымдастырылған профессоры, Ә.Марғұлан атындағы Павлодар педагогикалық университеті, Павлодар, Қазақстан

С.Ж. Көшкінбаев – хат-хабар авторы, PhD, қауымдастырылған профессоры «Мирас» университеті, Шымкент қ., Қазақстан

Н.Қ. Смайлов – PhD, қауымдастырылған профессоры, Қ.Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық университеті, Алматы, Қазақстан

М.Ж. Көшкінбаева – PhD, Орталық Азия инновациялық университетінің қауымдастырылған профессоры, Шымкент, Қазақстан

Н.Ж. Дүйсенов – PhD, Орталық Азия инновациялық университетінің қауымдастырылған профессоры, Шымкент, Қазақстан.

А.К. Сейтханова – PhD, ассоциированный профессор, НАО «Павлодарский педагогический университет имени Ә. Марғұлан», г. Павлодар, 140008, Казахстан

С.Ж. Көшкінбаев – автор для корреспонденции, PhD, ассоциированный профессор, Университет Мирас, Шымкент, Казахстан

Н.К. Смайлов – PhD, ассоциированный профессор, Казахский национальный технический университет имени К. Сатпаева, Алматы, Казахстан

М.Ж. Кошкинбаева – к.т.н., ассоциированный профессор, Центрально Азиатский Инновационный Университет, Шымкент, Казахстан

Н.Ж. Дүйсенов – к.т.н., ассоциированный профессор, Центрально Азиатский Инновационный Университет, Шымкент, Казахстан.

А.К. Seitkhanova – PhD, Associate Professor, A.Margulan Pavlodar Pedagogical University, Pavlodar, Kazakhstan

S.Zh. Koshkinbayev – corresponding author, PhD, Associate Professor, Miras University, Shymkent, Kazakhstan

N.K. Smailov – PhD, Associate Professor, K.Satpayev Kazakh National Technical University, Almaty, Kazakhstan

M.Zh. Koshkinbaeva – PhD, Associate Professor, Central Asian Innovation University, Shymkent, Kazakhstan

N.Zh. Duysenov – PhD, Associate Professor, Central Asian Innovation University, Shymkent, Kazakhstan.



Copyright: © 2025 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



ХҒТАР 29.19.22

Ғылыми мақала

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-150-1-140-161>

Самариймен белсендірілген церий оксиді ұнтақтары мен жұқа үлбірлерінің құрылымдық және морфологиялық қасиеттерін зерттеу

О. Шалқар¹, Б.Е. Жакипбаев², Д.К. Ескермесов³, Б.Ж. Сейтов⁴,
А.К. Тусупбекова⁵, Э.К. Мусенова⁵, У. А. Муратбекова⁶, Ж.К.Алипбекова⁷,
С.А. Пазылбек⁸

¹Вильнюс университеті, Вильнюс, Литва

²Академик Ә.Қуатбеков атындағы Халықтар достығы университеті, Шымкент, Қазақстан

³Д. Серікбаев атындағы Шығыс Қазақстан техникалық университеті, Өскемен, Қазақстан

⁴Қожа Ахмет Ясауи атындағы Халықаралық қазақ-түрік университеті, Түркістан, Қазақстан

⁵Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды университеті, Қарағанды, Қазақстан

⁶Ө.Жәнібеков атындағы Оңтүстік Қазақстан педагогикалық университеті, Шымкент, Қазақстан

⁷М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан

⁸Жұмабек Ахметұлы Тәшенев атындағы Университет, Шымкент, Қазақстан

*Хат алмасуға арналған автор: sapargali.pa@gmail.com

Аңдатпа. Қатты оксидті отын элементтері (SOFC) үшін құрамы 26% самариймен белсендірілген церий оксиді (SDC) ұнтақтары мен жұқа үлбірлерін талдап зерттеу қарастырылады. SDC ұнтақтары мен жұқа үлбірлерін дайындауда глицин-нитраттың жануы (СВ), бірге тұндыру (СР) және сулы золь-гель (SG) әдістері қолданылады және алынған үлгілерді талдау әдістері сипатталған. Алынған барлық ұнтақтар 200-ден 1000°C градусқа дейін қыздырылып, самариймен белсендірілген церийдің кристалдық құрылымы аса жоғары температурада дамидынын көрсетеді. Қыздырылған ұнтақтардың тор параметрі мен кристаллит өлшемі қыздыру температурасының жоғарылауымен үлкейетінін көрсетеді және тор параметрі теориялық мәндерден жоғары болады. Эксперимент нәтижелері жұқа үлбірлердің кристаллиттерінің орташа өлшемі қалыңдығының жоғарылауымен өсетінін айқындады. Қолданылатын синтездің ішінде СВ әдісі бірге тұндыру мен золь-гель әдістерімен салыстырғанда жақсы нәтижелерге ие деп саналады. SiO₂ төсенішіне тұндырылған жұқа үлбірлердің тор параметрінің эксперименттік мәндері теориялық мәннен жоғары болды. Қалыңдығы жоғарылаған сайын SiO₂ төсенішіне тұндырылған жұқа үлбірлердің кристаллитінің орташа өлшемі артады. Атомдық күштік микроскоп нәтижелері жұқа үлбірлердің бетінің кедір-бұдырлығының орташа мәндері қалыңдығының жоғарылауымен өсетіндігін көрсетті. Тиісті бағдарламалық жасақтаманы қолдана отырып беттің орташа кедір-бұдырлығы (Rs), орташа квадраттық кедір-бұдырлығы (Rq), эксцесі (Rku), асимметриясы (Rsk) сипатталды.

Түйін сөздер: золь-гель, бірге тұндыру, глицин-нитраттың жануы, жұқа үлбір, самариймен белсендірілген церий оксиді, қатты оксидті отын элементі

Жіберілді 13.04.2024. Өзгертілді 5.02.2025. Қабылданды 19.02.2025. Онлайн қол жетімді 25.03.2025

¹ * хат-хабар авторы

1. Кіріспе

Отын элементтерінің технологиялары соңғы екі онжылдықта зерттеушілер мен өнеркәсіптің назарын аударды. Отын элементтері көмірқышқыл газының жаһандық шығарындыларының шешімдерінің бірі бола алады. [1] мәліметтері бойынша, көлік секторы көмірқышқыл газының жаһандық шығарындыларында шамамен 23% үлеске ие азот пен күкірт оксидтерін шығарады, бұл халықтың денсаулығына теріс әсер етеді. Дәстүрлі электр энергиясын өндіру және тасымалдау нәтижесінде көмірқышқыл газының шығарындылары климаттың өзгеруінің негізгі себептері болып саналады [2]. Жоғары температуралы отын элементтеріне қосымша процедура қажет емес, өйткені олар жоғары температурада отынның «ішкі бөліктерін түрлендіруді» жүзеге асыра алады [3-10].

Қатты оксидті отын элементтері (ҚООЭ) (SOFC) – химиялық энергияны электр энергиясы мен жылуға айналдыратын отын элементтерінің бір түрі. ҚООЭ басқа отын элементтері арасында ең жоғары жұмыс температурасына ие болып саналады. Температураның 600°C-1000°C аралығы бірнеше отын түрінің алдын-ала өңдеусіз қолдануға мүмкіндік береді. Осындай жоғары температурамен жұмыс істеу үшін электролит жұқа керамикалық негіздегі қатты металл оксиді, көбінесе оттегі иондарының өткізгіші болып табылатын иттрий мен цирконий қорытпасы пайдаланылады [11,12]. Олардың артықшылықтары ретінде ультра таза, нөлдік шығарындыларға жақын, жоғары сапалы, сенімді қуат, жоғары отын тиімділігі болса, ал кемшіліктері жоғары жұмыс температурасы ұзағырақ іске қосу уақытына және механикалық пен химиялық үйлесімділік мәселелеріне әкеледі. Құрамдас бөліктер ретінде пайдаланылатын материалдар термиялық сынақтан өтеді және технологиясы жетілмеген, күкіртке орташа төзбеушілігі мен салыстырмалы түрде қымбат болып табылады [13-15].

ҚООЭ электролитінде келесі критерийлер: жоғары иондық өткізгіштік пен төмен электронды өткізгіштікке ие, химиялық тұрақты болу және жақсы механикалық қасиеттерге ие, басқа компоненттермен химиялық және механикалық үйлесімділік, иондық кедергіні азайту үшін жұқа болуы керек. Электролит екі жағынан кеуекті электрод материалымен қапталған кристалдық торды құрайды. Құрылымдық жағынан мұндай элементтер түтіктер немесе жалпақ тақталар түрінде жасалады, бұл оларды өндіруде электронды өнеркәсіпте кеңінен қолданылатын технологияларды қолдануға мүмкіндік береді. Нәтижесінде қатты оксидті отын элементтері өте жоғары температурада жұмыс істей алады, сондықтан олар электр және жылу энергиясын өндіру үшін тиімді [10,16,17].

Қатты оксидті отын элементтері 800°C-тан 1000°C-қа дейінгі жоғары температурада жұмыс істей алатын электролит ретінде иттриймен тұрақтандырылған циркониймен (ИТЦ) (YSZ) жұмыс істейді. Бұл температуралар электролитте жеткілікті иондық өткізгіштікке ие болу үшін қажет. Осыған қарамастан, оның өндіріс құнына, коммерцияландыруға және т.б. байланысты электролит ретінде пайдаланудың кейбір кемшіліктері бар [18]. Егер керамикалық негіздегі отын элементтерін 6500C-тан аз жұмыс істеуге болатын болса, онда ұяшықтың құрылысында әлдеқайда арзан материалдарды қолдануға болады. Жұмыс температурасын азайту, қызмет ету мерзімін ұзарту мен құрамдас материалдардың таңдауын кеңейтуге мүмкіндік береді [18-20]. Зерттеулерде

церий негізіндегі электролиттік материалдарды қолдану арқылы жұмыс температурасы төмендетілді, мысалы, самариймен белсендірілген церий (SDC), гадолиниймен белсендірілген церий (GDC). Олар 4000С-тан 8000С-қа дейінгі жұмыс температурасында ең жақсы ион өткізгіштігін қамтамасыз ете алады [19]. Самариймен белсендірілген церийдің жұқа қабықшаларын электролит материалы ретінде самарийдің әртүрлі құрамымен талданып зерттелген [11,12, 21-28].

2. Әдіснама

Зерттеу нысаны ретінде құрамында самарий мөлшері $x=0,26$ болатын $\text{Sm}_{0.26}\text{Ce}_{0.74}\text{O}_{1.95}$ (26SDC) самариймен белсендірілген церий ұнтағы үш түрлі синтез арқылы: глицин-нитраттың жануы (CB), бірге тұндыру (CP) және сулы золь-гель (SG) дайындалды.

Жану синтезі арқылы SDC керамикалық ұнтақтарын алу үшін катиондар ретінде церий мен самарий нитратының гексагидраттары, ал отын ретінде глицин нитраты (барлық пайдаланылған қосылыстар Sigma Aldrich сатып алынды) пайдаланылды. Аталған барлық материалдар дистилденген суда бөлек ерітілген. Церий нитраты гексагидраты бар ерітінді қыздырылып, шамамен 15 минут араластырылды. Самарий нитратының гексагидраты мен глицині бар ерітінділер бірінші колбаға 15 минуттан кейін қосылып ерітінді қыздырылып 15 минуттай араластырылды. Ерітіндінің гельге айналуы шамамен 200°C температурада байқалды. Бұл гелдің 270°C температурада жарылуы нәтижесінде пайда болатын соңғы өнім ретінде ұнтақтар алынды [29-31].

Бірге тұндыру синтезі процесінде бастапқы прекурсорлар ретінде қымыздық қышқылы ($\text{C}_2\text{H}_2\text{O}_4 \geq 99.0\%$) мен аммоний гидроксиді (NH_4OH , 25%) таңдалды, ал церий ($(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, 99%) және самарий ($(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, 99.9%) нитрат гексагидраттары (Sigma Aldrich) металл прекурсорлары ретінде таңдалды. Нитраттарды бірнеше мл суда тезірек және оңай ерітуге болады, керісінше қымыздық қышқылының прекурсорларын сұйылту қиын болуы мүмкін және нитраттармен салыстырғанда әлдеқайда көп су қажет етеді. Қышқыл ерітіндісінің рН қатынасы еріген ерітіндіге аммиак гидроксидін қосу арқылы реттелді және ол 8-9 аралығында болуы керек. рН-ты қажетті рационға келтіргеннен кейін ерітіндіге нитрат ерітінділері тамшылатып қосылады. Шұңғыма тәріздес жүйені қолдану арқылы ерітінді вакуумдық машинамен сүзіліп, соңғы өнім ретінде тұнба алынады және пеште кептіріледі [24, 32, 33].

Золь-гель синтезі кезінде самарий оксиді (Sm_2O_3 , AlfaAesar), аммоний церий нитраты ($(\text{NH}_4)_2\text{Ce}(\text{NO}_3)_4$), шарап қышқылы ($\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_6$) (Sigma Aldrich) және азот қышқылы (HNO_3 , Reachim) қолданылды. Процесс кезінде аммоний церий нитраты температурасы 80°C суда ерітіліп, ерітіндіге шарап қышқылын қосылды. рН қатынасын самарий оксиді мен азот қышқылын қосу арқылы бақыланды. Бүкіл процесс барысында үнемі қыздырыла араластырып отырды. Ерітінді 100°C температурада әртүрлі түсті гельге айналды және осыдан кейін барлық синтезделген ұнтақтар диаметрі 13 мм түйіршіктерге механикалық престеу арқылы басылып, ауада 1000°C температурада 5 сағат бойы күйдірілді [34- 37].

Электролиттің жұқа үлбірлерін алу үшін бу фазасының электронды-сәулелі физикалық тұндыру (EB – PVD) әдісі қолданылады. Төсеніш ретінде SiO_2 материалы алынып, жұқа

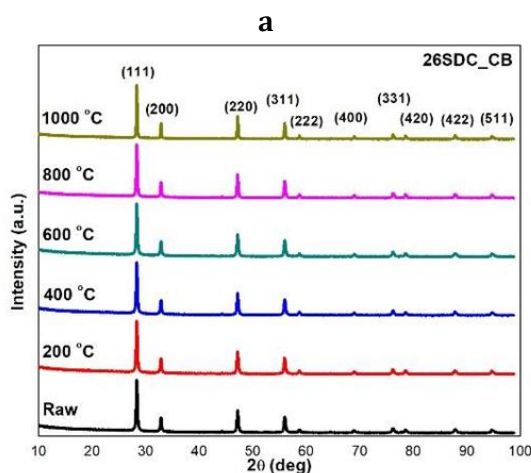
үлбірді алу үшін төсеніш шаң мен ластаушы заттардан және басқа бөлшектерден тазартылады. Олар жабынның өнімділігі мен сенімділігіне әсер ететіндіктен, тазалау үлбірлердің сапасын жақсартуға көмектеседі. Біріншіден, төсеніштер а.ү.таза N,N-Диметилформаидқа (DMF) (C_3H_7NO , Firma Chempur) батырылады және 15 минут қайнатылды. Содан кейін процедура ацетонмен (C_3H_6O , Reachem Slovakia) 5 минут бойы қайталанды және азот (N_2) газының көмегімен кептірілді. Тазалау ерітінділерінен төсенішті алу кезінде аса мұқият болған жөн, өйткені бетінде ерітіндідегі дақтар қалуы мүмкін. Булану үшін бастапқы материал ретінде синтезделген түйіршіктер пайдаланылады. Бастапқы материал вакуумдық камераға салынып, қыздырылды. Қыздыру вакуумдық камераға орнатылған инфрақызыл шаммен жүргізілді. Жұқа үлбірлердің қалыңдығы кварц резонаторымен басқарылады.

"D8 Discover" рентгендік дифрактометрі (Bruker AXS, Германия) XRD мәліметтерін талдау үшін пайдаланылды. Үлгілер үздіксіз PSD жылдам сканерлеу түрімен сканерленді, бұл сканердің 0,02999 қадаммен 20°C-тан 100°C-қа ауысуына мүмкіндік берді. XRD өлшеулері генератордың 40 кВ кернеуімен және 40 мА токпен жүргізілді. Өлшеу деректерін өңдеу және түсіндіру үшін *EVA Search-Match* дерекқоры пайдаланылды [38-40].

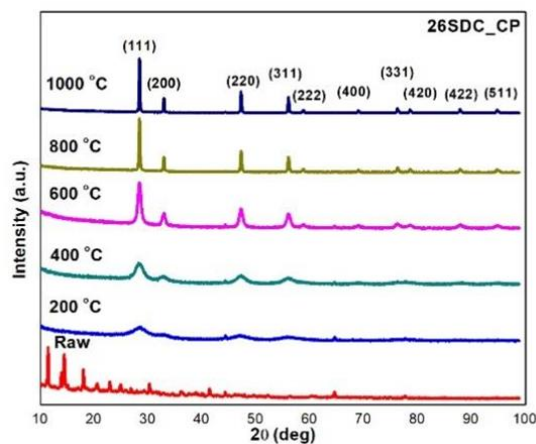
Түзілген жұқа үлбірлерге талдау жасау үшін NT-206 атомды-күштік микроскопы қолданылды. Тиісті бағдарламалық жасақтаманы қолдана отырып беттің қасиеттерін: орташа кедір-бұдырлығын (R_a), орташа квадраттық кедір-бұдырлығын (R_q), сызықтың куртозын (R_{ku}), сызықтың қисаюын (R_{sk}) сипаттауға болады. Біздің жағдайда *Surface Explorer* бағдарламалық жасақтамасы кескіндерді түзету үшін пайдаланылды [11,41,42].

3. Нәтижелер және талқылау

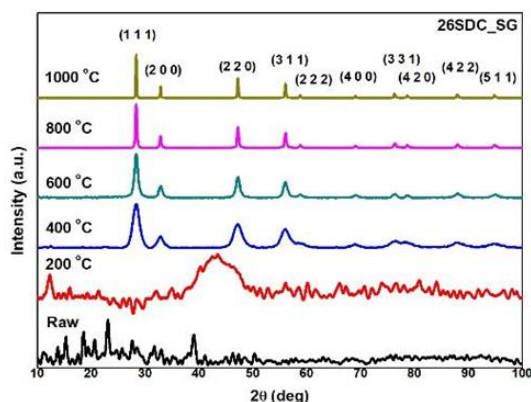
СВ химиялық синтезінің XRD нәтижелері басқа химиялық синтезімен салыстырғанда күтілгеннен де тамаша болды. Өйткені төменгі температураның өзінде бастапқы органикалық қосылыстардың жойылып, таза фаза байқалады. Жалғыз кубтық құрылым төмен температура кезінде түзіле бастайды. Процедура барысында қыздырудың әсерінен нитраттар мен қышқылдар түгелдей дерлік буланып кетеді. 1а- суреттен байқағанымыздай барлық шыңдар (111), (200), (220), (311), (400), (331), (422) және (511) кристаллографиялық бағдарларға сәйкес есептелген.



б



в



1-сурет. СВ (а), СР (б) және SG (в) химиялық синтездермен алынып әртүрлі температурада қыздырылған 26 SDC ұнтағының XRD мәліметтері

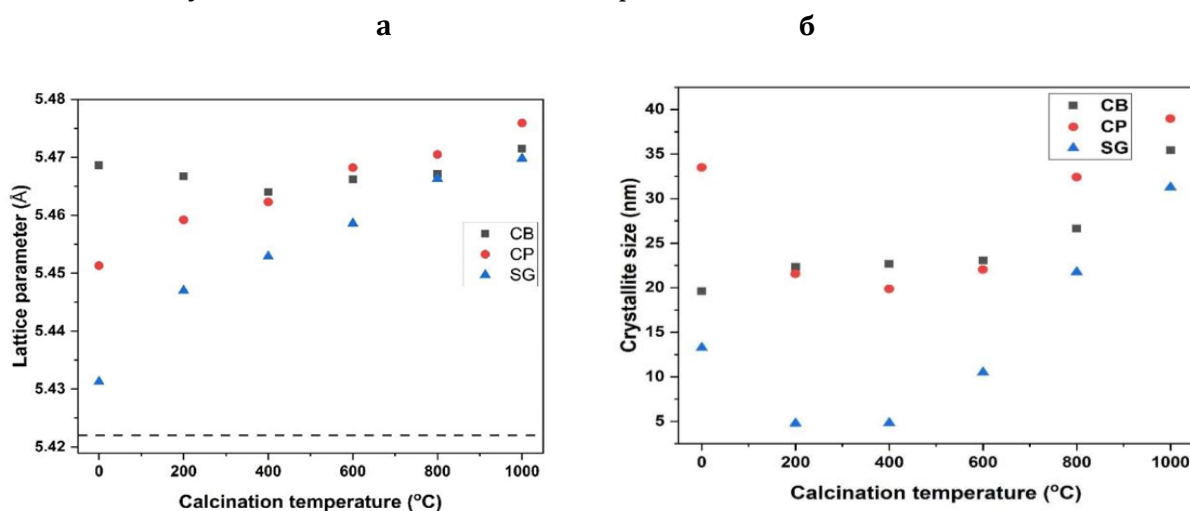
СР химиялық әдісімен дайындалған және әр түрлі температурада қыздырылған ұнтақтардың рентгенограммасы 1б-суретте келтірілген. Қымыздық қышқылы шикізатта әлі де бар және оны әлі де 200°C және 400°C температурада көруге болады. Сонымен қатар, кристалдық құрылым аралық (600 және 800°C) температурада қалыптаса бастайды. Шикізаттың XRD талдауынан шыңдардың сол жаққа қарай жылжитынын және оларды ажырату мүмкін еместігін анық байқауға болады. Мұны қымыздық қышқылының болуымен байланыстыруға болады. СР-де процесс кезінде қыздыру болмайды, сондықтан ол әлі де төмен температурада болады. Сонымен қатар, химиялық процесс кезінде нитраттар мен қышқылдарды сүзу және араластыру жүргізілсе де, қолданылатын материалдардың бастапқы қасиеттері бірдей сақталуы мүмкін.

SG химиялық жолымен синтезделген және әртүрлі температурада қыздырылған SDC-дің XRD нәтижелері 1в-суретте бейнеленген. Көріп отырғанымыздай СР синтезіне ұқсас,

қыздырылмаған кезде шыңдар ажыратылмайды және сол жаққа ығысады. Сол сияқты, шикізаттың XRD деректеріне сәйкес 200°C температурада шыңдар 10-нан 100 градусқа дейінгі барлық диапазонда болады. Алайда, бұл шыңдарды ажырату мүмкін емес. 400°C-тан бастап кристалдық құрылым түзіле бастайды. Дегенмен тек 800°C температурада оның толық кристалдық құрылымы бар деп санауға болады.

Синтездерде органикалық қосылыстардың қолданылуына байланысты инфрақызыл спектрлерде карбонат пен бикарбонат іздері байқалады. Бұл қалдықтардың CP және SG синтезі арқылы алынған үлгілер 200 °C температурада күйдірілген үлгілерде құрамында карбонил бар функционалды топтарының болуымен байланысты [43]. Барлық үш спектрде O-H [44] байланысына жататын жолақтар 1000°C соңғы қыздырудан кейін іс жүзінде жоқ, бұл барлық судың физикалық түрде десорбцияланғанын көрсетеді.

26 SDC ұнтағының қыздыру температурасынан тор (a_0) параметрі тәуелділігі және тор параметрінің теориялық мәні үзік сызықпен 2а-суретте көрсетілген. Графиктен көріп отырғанымыздай тордың тұрақтысы қыздыру температурасының жоғарылауымен өсті. Алайда, CB ұнтақтарының тор параметрі 400°C температурада 5,465Å дейін төмендеді және қалған екеуіне сәйкес 5,47Å дейін өсе берді.



2-сурет. Әртүрлі синтездер арқылы алынған 26 SDC ұнтақтарының қыздыру температурасынан тор параметрі (а) мен кристаллит өлшемінің (б) тәуелділігі

Ұнтақтардың қыздыру температурасынан кристаллит өлшемдерінің тәуелділік графигі 2б суретте келтірілген. Жалпы алғанда, үш химиялық жолмен жасалған барлық ұнтақтардың кристаллитінің орташа мөлшері ұқсас үрдіске ие. SG ұнтақтары кристаллитінің орташа өлшемі қыздырылмаған кезде шамамен 13,5 нм болып, осыдан кейін кристаллитінің өлшемі 5 нм-ге дейін төмендеп, температурасы 400°C кезінде тұрақты болып қалды. Температура 600°C кезінде секіріс болды және сол сияқты өсу диапазоны берілген температураның қалған бөлігінде өзгерген жоқ. Ол әрбір 200°C сайын 10 нм-ге өсіп отырды. CB ұнтақтарының орташа кристаллит өлшеміне келетін болсақ, көрсеткіш шамамен 19,7 нм болды. Одан кейін 22 нм-ге дейін көтеріліп, 600°C

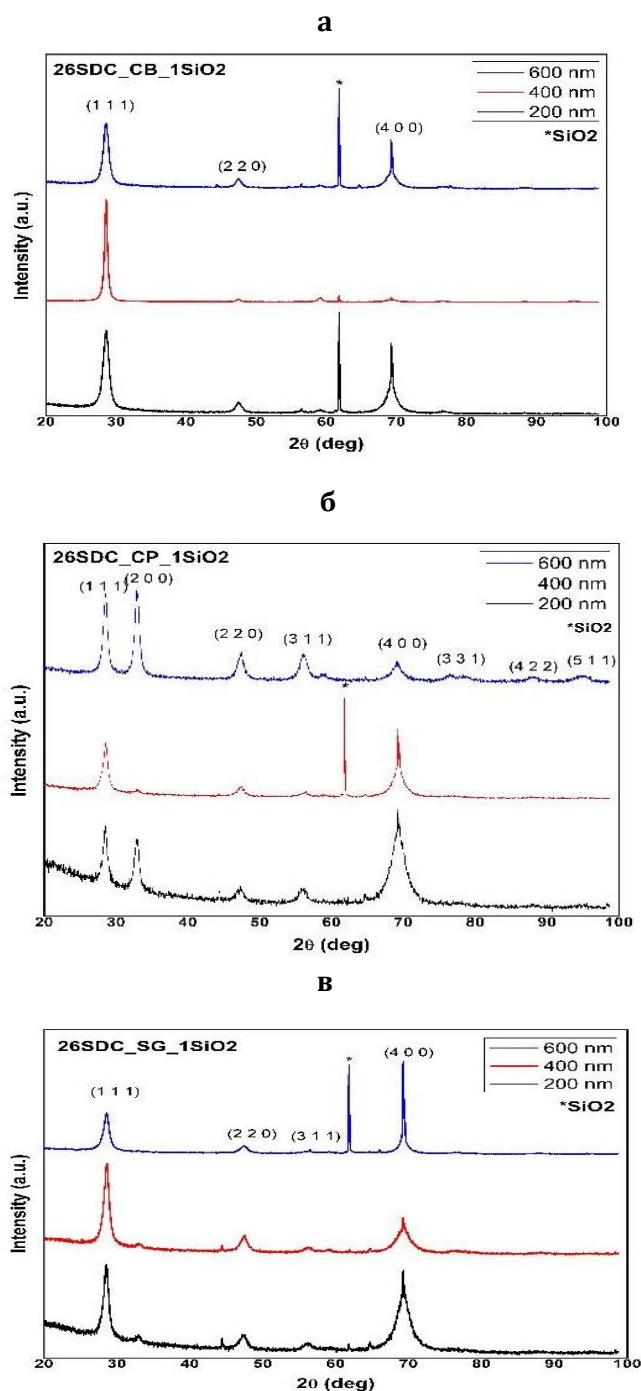
-қа дейін теңестіріліп, осы температурадан бастап СВ үшін мәндер өсе береді және ең жоғары мән шамамен 35 нм жетті. Берілген температура бойынша басқа екі химиялық процестермен салыстырғанда шамалы айырмашылық бар және бұл айырмашылық деректердің ешқандай төмендеусіз өсе беретіндігі болып табылады. СР бойынша дайындалған ұнтақтардың кристаллитінің орташа өлшемі SG синтездеген ұнтақтарға ұқсас болды, мәндер 200°C дейін төмендей бастады және осы сәттен бастап олар соңғы температураға дейін өсті. Кристаллиттің бастапқы өлшемі 33 нм-ден басталып, шикізат ретінде SP ұнтақтарының орташа кристаллит өлшемі SG-дан шамамен 20 нм үлкен болды. Сонымен қатар, СР әдісі бойынша ұнтақтардың кристаллитінің орташа өлшемі басқа әдістердің ішінде ең жоғары болды және бұл үрдісті соңғы температурада қайталады.

Кристаллиттің өсуіне температура мен оның салқындату жылдамдығы айтарлықтай ықпал жасайды. Сонымен қатар кристаллиттің өсу үрдісіне ұшқыш қосылыстардың ыдырауы қатты әсер етеді. Ал экзотермиялық әсер кристалдану процесін баяулатып қана қоймай, сонымен қатар түзілген кристаллиттерді де бұзады. Температураның 200-400 °C диапазонында ұшпа қосылыстардың бастапқы экзотермиялық ыдырауынан кейін қыздыру температурасының одан әрі жоғарылауы зерттелетін барлық диапазондағы кристаллиттердің қалыпты өсуін анықтайды және 600° C-тан кейін барлық үш жағдайда кристаллит өсу мәндерінің бірдей дерлік өсуі байқалады.

Үш түрлі синтез арқылы дайындалған қалыңдығы 200 нм, 400 нм және 600 нм болатын самариймен белсендірілген церий оксиді үлбірінің (111), (200) және (220), (400) шағылыстары 3-суретте көрсетілген. Шыңдардың орналасуы кеңістіктік Fm-3m тобының флюорит құрылымына сәйкес келеді. 26 SDC ұнтақтарын буландыру арқылы тұндырылған кристалды құрылым бастапқы $\text{Sm}_{0.26}\text{Ce}_{0.74}\text{O}_{1.95}$ (26SDC) ұнтақтың құрылымын қайталайды. Айта кету керек, глицин-нитраттың жану синтезі арқылы дайындалған үлгісінен XRD-нің тек екі көрінетін шың бар және олардың ең биік шыңы (111) кристаллографиялық бағдарға ие. 26 SDC үшін қолайлы бағдар басқа синтез әдістері үшін де дәл осылай расталады. Сонымен қатар біз шыңдардың қалыңдығының өсуімен жоғала бастайтынын көреміз. Алайда, SDC жұқа үлбірлері үшін барлық шыңдардың болуы қажет емес.

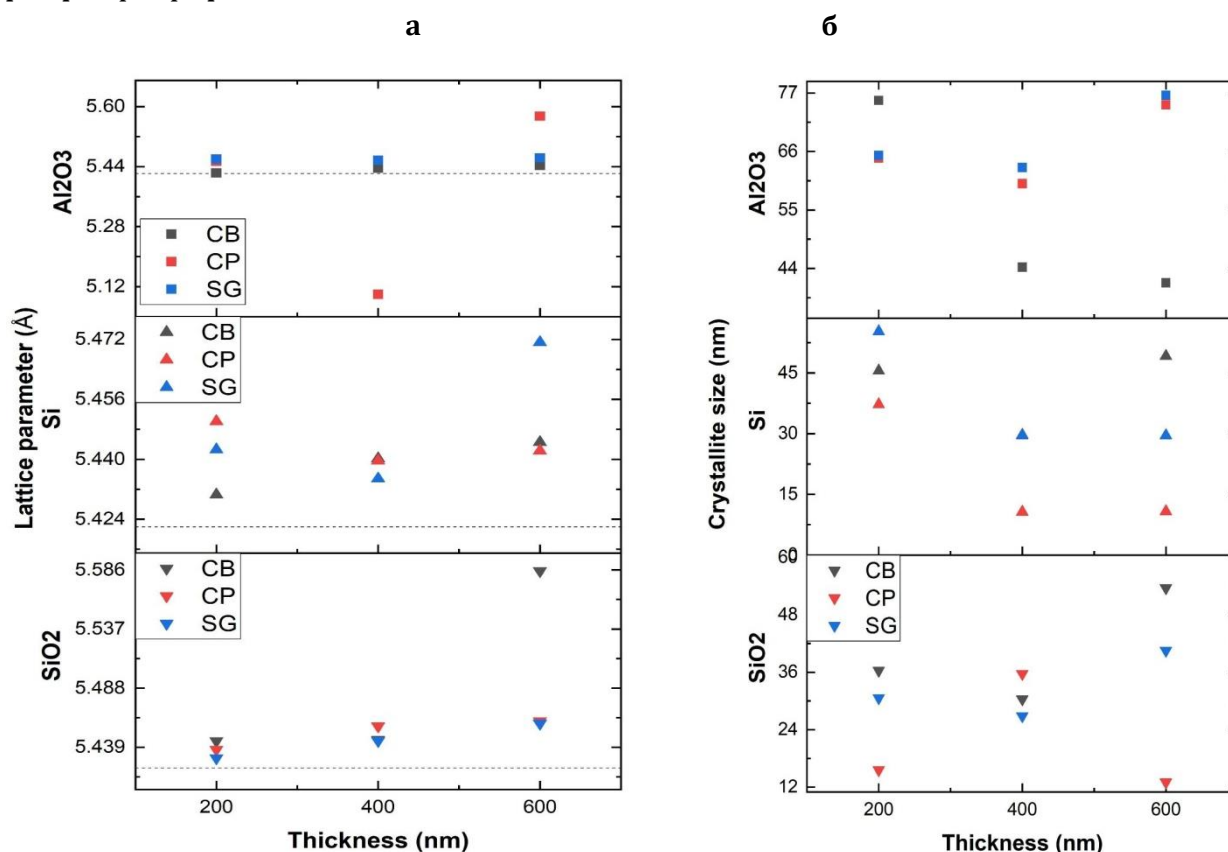
Жану синтезі арқылы тұндырылған жұқа үлбірлердің (111), (220) және (400) кристаллографиялық бағдарларына сәйкес келетін 3 шыңы (3а- сурет). Бірге тұндыру синтезі нәтижесінде пайда болған SDC жұқа үлбірлерінің кристаллографиялық бағдарларына сәйкес келетін 8 шың бар: (111), (200), (220), (311), (400), (331), (422) және (511) (3б- сурет). Ал золь-гель синтезі арқылы тұндырылған SDC жұқа үлбірлеріне сәйкес келетін СВ синтез әдісімен салыстырғанда тағы бір шыңға ие болып (111), (222), (311) және (400) бағдарларын көрсетеді (3в- сурет). Барлық графиктердің ұқсас тенденциясы қалыңдығының өсуіне қарай шыңдардың нақтылануы болып саналады. Үш түрлі әдістерде пайда болған қосымша дифракция шыңдары қымыздық қышқылдардың қалдықтары болуы мүмкін [45], өйткені байқалған дифракция шыңдары Хан және басқалары ұсынған таза қымыздық қышқылына ұқсас. SG мен СР синтезі арқылы синтезделген 200 нм қалыңдықта аморфқа жақын фаза байқалды. Печини әдісімен алынған GDC (гадолий қоспасы бар церий) ұнтақтарына ұқсастығын көрсетеді [46]. СР әдісімен алынған үлбірдің бетінде дифракциялық шағылу көлемі мен кристалдық

дәндердің өлшемінің артуына сәйкес қалыңдыққа байланысты (220) және (311) шыңдарының қарқындылығы күшейеді. Қалыңдығы 400 нм болатын СВ үлбірдің (400) шыңы мен CP үлбірінің (200) шың қарқындылықтарының өте төмен болуы кристалдану дәрежесі аз болған кезде байқалады.



3-сурет. Глицин-нитраттардың жануы (а), бірге тұндыру (б) және золь-гель (в) синтездері арқылы дайындалған SiO₂ төсенішіне тұндырылған 26 SDC жұқа үлбірдің XRD деректері

SiO₂, Al₂O₃ және Si төсеніштеріне тұндырылған үш түрлі синтез арқылы дайындалған жұқа үлбірлердің қалыңдығынан тор параметрінің тәуелділігі және тор параметрінің теориялық мәні 4а-суретте көрсетілген. SiO₂ төсеніштен бастап, қалыңдығы 200 нм болатын барлық жұқа үлбірлердің мәні бірдей болып, бірақ кейінірек айырмашылық өзгере бастады. 600 нм тор параметрі СВ-ден дайындалған жұқа үлбірлер үшін соңғы қалыңдығында (5,586Å) ең жоғары мәнге ие болды. Сонымен, тор параметрінің эксперименттік мәндерінің теориялық мәннен шамалы айырмашылығы болды. Si қатысты жасалған жұқа үлбірлер торының параметрлері, бастапқы қалыңдығында барлық жұқа үлбірлердің тор параметрлерінің мәндері теориялық мәннен жоғары болды (СВ жұқа үлбірі үшін 5,43Å, СР жұқа үлбірі үшін 5,45Å және SG жұқа үлбірі 5,4426Å). Осыдан кейін СВ және СР жұқа үлбірлерінің мәндері басқа қалыңдықта жақынырақ болды. Алайда, SG жұқа үлбірлі тор параметрінің мәні 600 нм-де 5,472Å дейін өсті. Графиктен байқағанымыздай, ең жақсы нәтижелерде Al₂O₃ төсенішке тұндырылған жұқа үлбірлі тор параметрлері болды. Теориялық және эксперименттік мәндер кейбір ерекшеліктерді қоспағанда, өте жақын болғаны анық көрсетілген. Бұл ерекшелік СР жұқа үлбірлері үшін 400 нм-де 5,12Å және 5,57Å болды.



4-сурет. SiO₂, Al₂O₃ және Si төсеніштеріне тұндырылған үш түрлі синтез арқылы дайындалған жұқа үлбірлердің қалыңдығынан тор параметрі (а) мен кристаллит өлшемінің (б) тәуелділігі

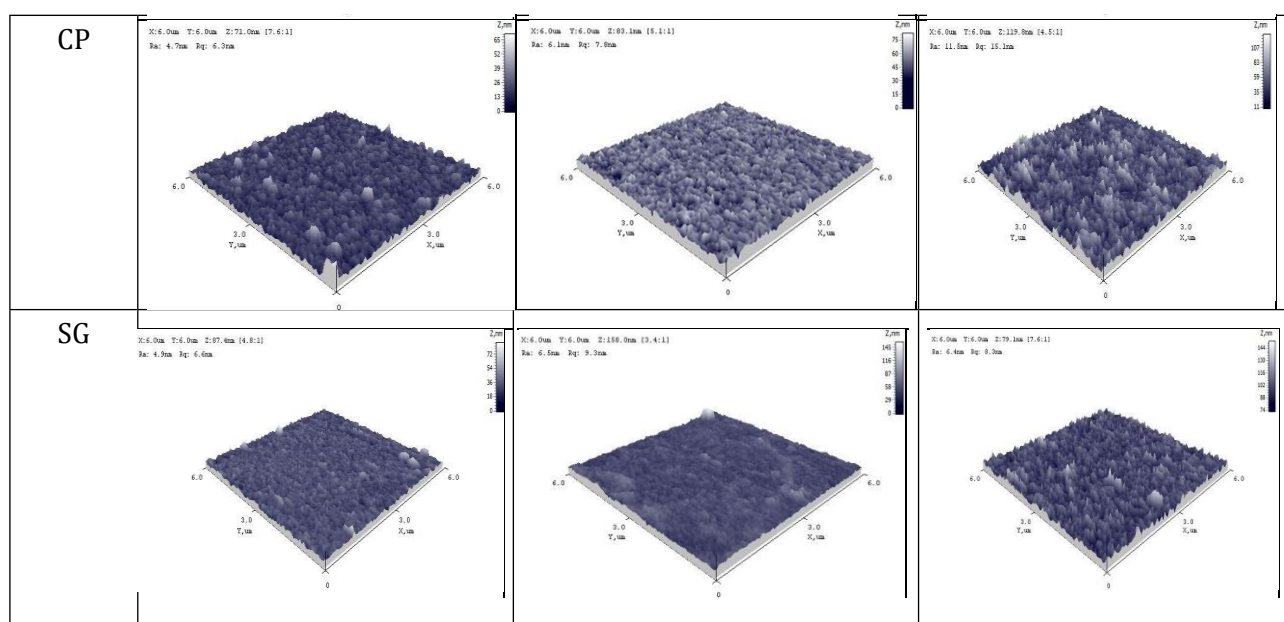
SiO_2 , Al_2O_3 және Si төсеніштеріне тұндырылған үш түрлі синтез арқылы дайындалған жұқа үлбірлердің қалыңдығынан кристаллиттердің орташа өлшемінің тәуелділігі 4б-суретте келтірілген. SiO_2 төсенішіне келетін болсақ, CP химиялық синтезін қоспағанда, әрбір химиялық синтезде кристаллит өлшемі өсе бастайды. CP жұқа үлбір кезінде 36 нм-ге дейін өсіп және бастапқы мәннен төмен түсті (12 нм-ден жоғары). CB және SG жұқа үлбірлердің кристаллитінің орташа мөлшері сәйкесінше 36 нм және 30 нм-ден басталып екі синтездің де өсуімен аяқталды (53 нм және 40 нм).

Графиктің ортаңғы бөлігінен көрініп тұрғандай Si төсенішінде CB (600 нм-де 49 нм-ге дейін өсті) қоспағанда, барлық химиялық синтездер үшін кристаллит өлшемінің орташа мәні төмендеді. Бастапқы қалыңдығындағы әрбір синтездің мәні бір-бірінен шамамен 10 нм (CB үшін 55 нм, CP үшін 45 нм және SG үшін 36 нм) бірдей айырмашылыққа ие болды. Бір таңқаларлығы қалыңдығы 400 нм CB және CP 29 нм-де бірдей мәнге ие болды. SiO_2 төсенішіне тұндырылған CB жұқа үлбірлердің 600 нм қалыңдықта тор параметрі мен кристаллит өлшемінің жоғары болуы кристалданудың дәрежесін көрсетеді.

Иондық өткізгіштік жұқа үлбірлердің өлшемі мен геометрия сияқты микроқұрылымдық қасиеттерге, сонымен қатар синтезделген үлгінің тұрақтылығы мен біртектілігіне байланысты [42]. Вурси және т.б. [45] SDC әртүрлі концентрациясын (15, 20, 25 моль%) электроспиннинг әдісімен синтездеді және кеуектіліктің жоғарылауы мен төмен сіңіргіштігінің арқасында дән шекарасының кедергісі жоғарылағанын анықтады. SiO_2 төсенішінде үш түрлі химиялық әдіспен (CB, CP және SG) алынған қалыңдығы 200 нм, 400 нм және 600 нм жұқа үлбірлердің атомдық-күштік микроскоп АКМ-3D кескіндері 1-кестеде келтірілген. Көріп отырғанымыздай CB жұқа үлбірлердің барлығының беттері тікенді, бірақ әртүрлі *Zmean* мәндері бар: қалыңдығы 200 нм үшін 75 нм, қалыңдығы 400 нм үшін 230 нм және қалыңдығы 600 нм үшін 110 нм болады. Сонымен қатар, кез-келген қалыңдықтағы жұқа үлбірлердің беттерінде бірнеше ең биік шыңдары болмайды. Беттік морфологияның 600 нм қалыңдықта жақсырақ екенін топологиялық тегістіктен байқауға болады.

1-Кесте. SiO_2 төсенішіне тұндырылған жұқа үлбірлердің АКМ 3D кескіндері

Синтез-дер	Қалыңдығы		
	200 nm	400 nm	600 nm
CB			

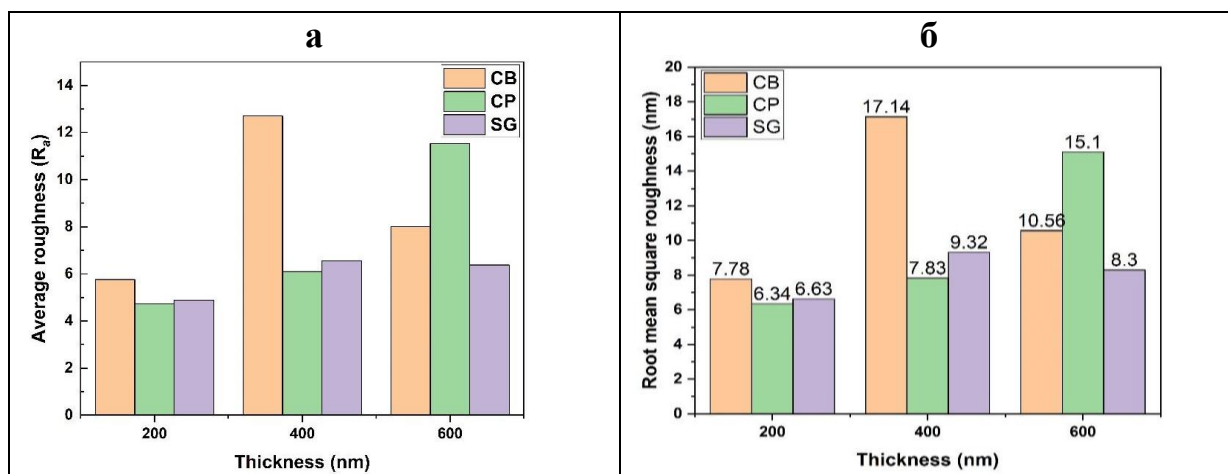


CP химиялық синтез бойынша алынған жұқа үлбірлерге келетін болсақ, қалыңдығы 200 нм болатын жұқа үлбір бетінің орташа биіктігі шамамен 70 нм және диаметрі 384 нм болатын бірнеше шыңдары болады. Қалыңдығы 400 нм болатын жұқа үлбірден кейін бетінің морфологиясы әртүрлі болады. Бұл бетінде тесіктердің болуына байланысты және орташа биіктігі шамамен 80 нм құрайды. Соңында, қалыңдығы 600 нм жұқа үлбірдің орташа биіктігі шамамен 115 нм және диаметрі шамамен 165 нм болатын аса бедерлі шыңдары болады. Бұл шыңдар биік, бірақ диаметрі кішірек болып келеді.

SG химиялық синтез арқылы алынған жұқа үлбір қалыңдығы 200 нм болатын бетінде орташа биіктігі 80 нм және диаметрі шамамен 176 нм болатын алты-жеті дөңес ғана бар. Алайда, бетінің қалған бөлігі біртекті түрде қалыптасады. Қалыңдығы 400 нм жұқа үлбірді орташа биіктігі 150 нм және диаметрі 200 нм болатын кластер құрайды. 600 нм жұқа үлбірі беті тікенді төбелермен пайда болды, бірақ таңқаларлықтай оның орташа биіктігі 400 нм жұқа үлбірмен бірдей болды.

SiO_2 төсенішке тұндырылған 26SDC үлбір қалыңдығынан жұқа үлбірлерінің (R_s) орташа кедір-бұдырлығының байланысы 5а-суретте көрсетілген. CP синтезі арқылы жасалған жұқа үлбірлердің орташа кедір-бұдырлығы қалыңдықтың артуымен өсетіні анық көрінеді. Сол сияқты SG синтезделген жұқа үлбірлерде бірдей үрдіс орын алды, бірақ мән 600 нм қалыңдықта теңестірілді. Дегенмен SG синтезі үшін 600 нм-де жұқа үлбір жоғары көтерілудің орнына төмендеді.

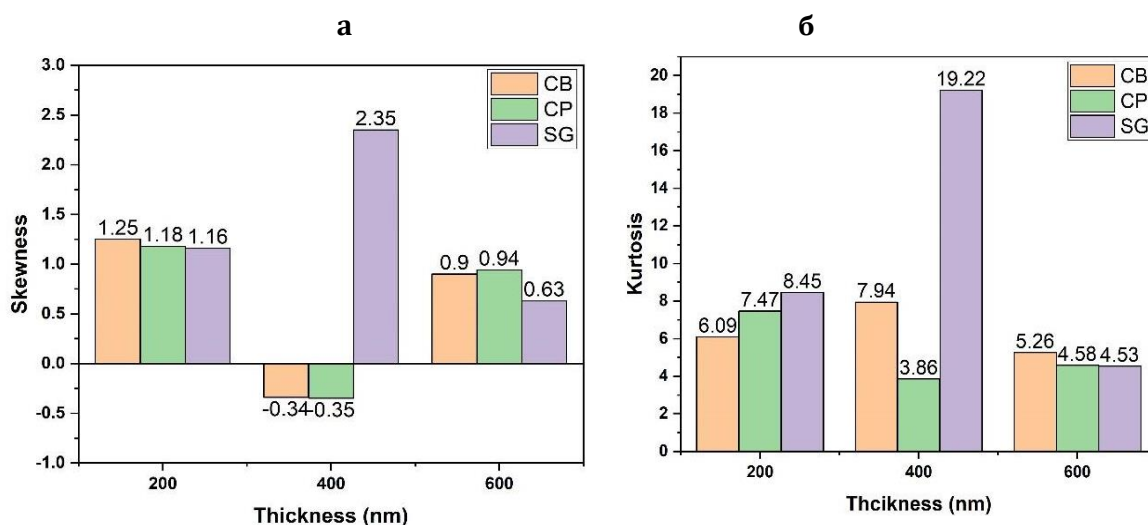
Үлбірдің орташа квадраттық кедір-бұдырлықтың (R_q) қалыңдыққа тәуелділігі 5б-суретте бейнеленген. Суреттен орташа квадраттық (R_q) мәндерінің орташа кедір-бұдырлыққа (R_s) сәйкес келетінін, бірақ аздап айырмашылығы бар екенін байқауға болады. Мәселен 400 нм-де СВ жұқа қабықшасы үшін ең жоғары мән 17,14 нм болса, ал осындай жұқа үлбір үшін орташа кедір-бұдырлық шамамен 13 нм мәнге ие болады. Беттік морфологияның 600 нм қалыңдықта жақсырақ екенін топологиялық тегістіктен байқауға болады.



5-сурет. SiO₂ төсенішіндегі жұқа үлбір қалыңдығынан (R_s) орташа кедір-бұдырлық (а) пен (R_q) орташа квадраттық кедір-бұдырлықтың (б) тәуелділігі

Асимметрия қалыңдықтың функциясы ретінде ба-суретте келтірілген. Асимметрия биіктіктің таралуының орташа жазықтықтан жоғары немесе төмен ығысуын көрсетеді. Бұл оң және теріс мәндер болуы мүмкін. SiO₂ төсенішінде тұндырылған жұқа үлбірлердің ассиметриясының оң және теріс екені анық көрінеді. 200 нм және 600 нм қалыңдықта барлық химиялық синтездер бойынша таралу оңға бұрмаланған. Дегенмен, СВ және СР үшін 400 нм теріс ассиметрия бар. Бұл жұқа қабықшалардың беті негізінен аңғарлардан тұратынын көрсетеді. Ең жоғары ассиметрия мәні SG жұқа үлбіріне тиісті болып, мәні 2,35 тең болады. СВ жұқа үлбір үшін басқа қалыңдықпен салыстырғанда 600 нм қалыңдықта ассиметриясы орташа мәнді көрсетіп оның тегістігін көрсетеді.

Жұқа үлбір қалыңдығынан беттің эксцессіне байланысты тәуелділігі бб-суретте көрсетілген. Эксцесс пен ассиметрия параметрлері беттік топология ретінде қарастырылады. Эксцесс беттің «айқындық» немесе «өткірлігін» көрсетеді. Эксцесс мәні 3-тен жоғары болса, ол өткір бет болып саналады. Суреттен көріп отырғандай барлық жұқа үлбірлердің мәндері олардың бетінің жеткілікті өткір екенін көрсетеді. Ең кіші мән 400 нм СР синтезіндегі жұқа үлбір үшін 3,86 болса, ал ең жоғары мән 19,22 болып 400 нм СР синтезіндегі жұқа үлбірге тән болады.



6-сурет. SiO₂ төсенішіндегі жұқа үлбір қалыңдығынан (Rsk) асимметрия (a) мен (Rku) эксцесстің (б) тәуелділігі

4. Қорытынды

Қолданылатын үш химиялық синтездің ішінде СВ әдісі бірге тұндыру мен золь-гель әдістерімен салыстырғанда жақсы нәтижелерге ие болғанын XRD деректерінен, SiO₂ төсенішіне тұндырылған СВ жұқа үлбірлердің 600 нм қалыңдықта кристалданудың дәрежесі мен беттік морфологиясынан, ал асимметриясы орташа мәнді көрсетіп оның тегістігін көрсететіндігінен байқауға болады. Жанудың химиялық процесі кезінде нитраттар мен қышқылдардың булануына әкелетін термиялық өңдеу қолданылады. Барлық ұнтақтар 200-ден 1000°C градусқа дейін қыздырылады және самариймен белсендірілген церийдің кристалдық құрылымы аса жоғары температурада дами бастайды. Сондықтан басқа прекурсорлық бөлшектердің болуын азайту үшін барлық ұнтақтар 1000°C температурада күйдірілді. Қыздырылған ұнтақтардың тор параметрі қыздыру температурасының жоғарылауымен үлкейеді және олар теориялық мәндерден жоғары болады. Қыздырылған ұнтақтардың кристаллит өлшемі температураның жоғарылауымен өсуге бейім болып табылады. Ұнтақтар қыздырылмаған кезде СВ үшін 19,61 нм, CP үшін 33,49 нм және SG үшін 13,25 нм басталған болса, қыздырылғаннан соң СВ үшін 35,41 нм, CP үшін 38,97 нм және SG ұнтақтары үшін 31,266 нм аяқталды. SiO₂ төсенішіне тұндырылған жұқа үлбірлердің тор параметрінің эксперименттік мәндері теориялық мәннен жоғары болды. Қалыңдығы жоғарылаған сайын SiO₂ төсенішіне тұндырылған жұқа үлбірлердің кристаллитінің орташа өлшемі артады. АКМ нәтижелері жұқа үлбірлердің бетінің кедір-бұдырлығының орташа мәндері қалыңдығының жоғарылауымен өсетіндігін көрсетеді.

Алғыс айту, мүдделер қақтығысы

Авторлар Вильнюс университеті, Химия және геоғылымдар факультеті ұжымына (Вильнюс, Литва) ғылыми-зерттеу жұмыстарын жүргізуге көмек бергені үшін алғыс білдіреді. Авторлар олардың мүдделер қақтығысы жоқ екенін баяндайды.

Авторлардың қосқан үлесі. С.А.Пазылбек, О. Шалхар: түпнұсқа мәтінді жазу, авторлық қадағалау, әдістеме, зерттеу; **Б.Е. Жакипбаев, Д.К. Ескермесов, Б.Ж. Сейтов:** тұжырымдамалау, зерттеу, ресурстар; **А.К. Тусупбекова, Э.К. Мусенова, У. А. Муратбекова, Ж.К. Алипбекова:** зерттеу, визуализация, шолу, редакциялау және қаржыландыру.

Әдебиеттер тізімі

1. P. Boldrin, N.P. Brandon, *Progress and outlook for solid oxide fuel cells for transportation applications*, Nat. Catal, - 2019-V. 2(7). -P.571–577, doi:10.1038/s41929-019-0310-y – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
2. U.F. Akpan, G.E. Akpan, *The contribution of energy consumption to climate change: A Feasible policy Direction*, Int. J. Energy Econ. Policy, - 2012.-V.2(1).-P. 21–33 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
3. J.M. Andújar, F. Segura, *Fuel cells: History and updating. A walk along two centuries*, Renew. Sustain. Energy Rev, - 2009. - V. 13(9). - P. 2309–2322, doi: 10.1016/j.rser.2009.03.015 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
4. A. Choudhury, H. Chandra and A. Arora, *Application of solid oxide fuel cell technology for power generation*, Renew. Sustain. Energy Rev, -2013.-V.20.-P.430–442, doi: 10.1016/j.rser.2012.11.031 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
5. U. Lucia, *Overview on fuel cells*, Renew. Sustain. Energy Rev, - 2014.- V. 30- P. 164–169, doi: 10.1016/j.rser.2013.09.025 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
6. L. Giorgi, *Fuel Cells: Technologies and Applications*, Open Fuel Cells J., vol. 6, no. 1, pp. 0–0, 2013, doi: 10.2174/1875932720130719001 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
7. O. Z. Sharaf, M. F. Orhan, *An overview of fuel cell technology: Fundamentals and applications*, Renew. Sustain. Energy Rev, -2014.-V.32-P.810–853, doi: 10.1016/j.rser.2014.01.012 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
8. A.L. Dicks, D.A. J. Rand, *Fuel Cell Systems Explained*, 2018 - **ағылшын тіліндегі кітап**
9. D. Carter, J. Wing, *Fuel Cell Today*, The Fuel Cell Industry Review- 2013.- P. 1–50 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
10. P. Grimes, *Historical pathways for fuel cells. The new electric century*, Proc. Annu. Batter. Conf. Appl. Adv.-2000.-V.2000-Jan (December), -P.41–45,doi: 0.1109/BCAA.2000.838369 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
11. M. Sriubas, K. Pamakštys, G. Laukaitis, *Investigation of microstructure and electrical properties of Sm doped ceria thin films*, Solid State Ionics, -2017.-V.302- P. 165–172, doi: 10.1016/j.ssi.2016.11.007 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
12. D. Virbukas, M. Sriubas, G. Laukaitis, *Structural and electrical study of samarium doped cerium oxide thin films prepared by e-beam evaporation*, Solid State Ionics, vol. 271, pp. 98–102, 2015, doi: 10.1016/j.ssi.2014.09.036 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
13. L.Bastakys, F.Kalyk, L. Marcinauskas, *Structural investigation of gadolinia-ceria multilayered thin films deposited by reactive magnetron sputtering*, Materials Letters, - 2020.-271.- 127762, doi: 10.1016/j.matlet.2020.127762 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
14. B. Timurkutluk, C. Timurkutluk, M. D. Mat, Y. Kaplan, *A review on cell/stack designs for high performance solid oxide fuel cells*, Renew. Sustain. Energy Rev.- 2016.- V. 56- P.1101–1121, doi: 10.1016/j.rser.2015.12.034 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**

15. K. Kendall, *Introduction to SOFCs*. - 2016, 2nd ed., No. 1. Elsevier Ltd. - **ағылшын тіліндегі кітап**
16. N. Kalanda, M. Yarmolich, M. Kutuzau, *Degree of phase transformations in the conditions of polythermal synthesis of SrBaFeMoO_{6-δ}*, Vacuum.- 2020.- 174.- P.109196, doi: <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2020.109196> – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
17. B. Sorensen, Fuel cells. 3.1.1 *Electrochemistry and thermodynamics of fuel cells*, Hydrog. Fuel Cells.- 2012.- P. 95–200, doi: 10.1016/B978-0-12-387709-3.50003-6 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
18. S. A. M. Ali, R. E. Rosli, A. Muchtar, *Effect of sintering temperature on surface morphology and electrical properties of samarium-doped ceria carbonate for solid oxide fuel cells*, Ceram. Int.-2015.- V. 41(1).-P. 1323–1332, doi: 10.1016/j.ceramint.2014.09.064 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
19. Š. Jankauskas, A. Vasiliauskas, A. Guobienė, *Study of the structure, composition and wettability of the DLC:N films*, Surface and Coatings Technology- 2024.- V.489.- P.131132, doi: 10.1016/j.surfcoat.2024.131132 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
20. S. P. S. Badwal, S. Giddey, C. Munnings, A. Kulkarni, *Review of progress in high temperature solid oxide fuel cells*, J. Aust. Ceram. Soc.- 2014.- V. 50 (1).-P. 23–37 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
21. D. Virbukas, G. Laukaitis, *The structural and electrical properties of samarium doped ceria films formed by e-beam deposition technique*, Solid State Ionics.- 2017. - V. 302.- P. 107–112, doi: 10.1016/j.ssi.2016.12.003 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
22. I. Mindaugas, G. Asta, G. Karolis, *UV-mediated photochemical synthesis and investigation of the antiviral properties of Silver nanoparticle-polyvinyl butyral nanocomposite coatings as a novel antiviral material with high stability and activity*, Applied Materials Today.- 2024.- V. 38.- P. 102203, doi: 10.1016/j.apmt.2024.102203 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
23. S. F. Wang, C. T. Yeh, Y. R. Wang, Y. C. Wu, *Characterization of samarium-doped ceria powders prepared by hydrothermal synthesis for use in solid state oxide fuel cells*, J. Mater. Res. Technol.- 2013.- V. 2(2)- P. 141–148, doi: 10.1016/j.jmrt.2013.01.004 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
24. B. Aygün, H. Özdemir, M. A. F. Öksüzömer, *Structural, morphological and conductivity properties of samaria doped ceria (Sm_xCe_{1-x}O_{2-x/2}) electrolytes synthesized by electrospinning method*, Mater. Chem. Phys.-2019.-V.232 (January)-P.82–87, doi: 10.1016/j.matchemphys.2019.04.067 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
25. C. Mansilla, J. P. Holgado, J. P. Espinós et al., *Microstructure and transport properties of ceria and samaria doped ceria thin films prepared by EBE-IBAD*, Surf. Coatings Technol.- 2007.- V. 202(4–7)- P. 1256–1261, doi: 10.1016/j.surfcoat.2007.07.082 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
26. S. Gupta et al., *Influence of samaria doping on the resistance of ceria thin films and its implications to the planar oxygen sensing devices*, Sensors Actuators, B Chem.- 2009- V. 139(2)- P. 380–386, doi: 10.1016/j.snb.2009.03.021 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
27. V. Lair, L. S. Živković, O. Lupan, A. Ringuedé, *Synthesis and characterization of electrodeposited samaria and samaria-doped ceria thin films*, Electrochim. Acta.- 2011.- V. 56(12).- P. 4638–4644, doi: 10.1016/j.electacta.2011.02.101 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
28. J. Bae, S. Hong, B. Koo, J. An et al., *Influence of the grain size of samaria-doped ceria cathodic interlayer for enhanced surface oxygen kinetics of low-temperature solid oxide fuel cell*, J. Eur. Ceram. Soc.- 2014.- V. 34(15).- P. 3763–3768, doi: 10.1016/j.jeurceramsoc.2014.05.028 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
29. A. Tamulevičienė, M. Rasa, I. Mindaugas, *Highly-hydrophobic, transparent, and durable coatings based on ZnO tetrapods with diamond-like carbon nanocomposite*, Surface and Coatings Technology.- 2023.- 470.- P.129863, doi: 10.1016/j.surfcoat.2023.129863 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**

30. G. Saito, Y. Nakasugi, N. Sakaguchi, C. Zhu, T. Akiyama, *Glycine-nitrate-based solution-combustion synthesis of SrTiO₃*, J. Alloys Compd.- 2015.- V. 652- P. 496–502, doi: 10.1016/j.jallcom.2015.08.227 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
31. A. B. Salunkhe, V. M. Khot, M. R. Phadatare, S. H. Pawar, *Combustion synthesis of cobalt ferrite nanoparticles - Influence of fuel to oxidizer ratio*, J. Alloys Compd.- 2012.- V. 514- P.91–96, doi: 10.1016/j.jallcom.2011.10.094 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
32. N. Özbay, A. S. Yargıç, R. Z. Yarbay Şahin, E. Yaman, *Research on the Pyrolysis Characteristics of Tomato Waste With Fe-Al₂O₃ Catalyst*, Exergetic, Energ. Environ. Dimens.- 2018- P. 815–828, doi: 10.1016/B978-0-12-813734-5.00046-9 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
33. T. Athar, *Smart precursors for smart nanoparticles*, Second Edit, Elsevier Inc., 2014. - **ағылшын тіліндегі кітап**
34. S.P. Sajjadi, *Sol-gel process and its application in Nanotechnology*, J. Polym. Eng. Technol.- 2005- V. 13(January)- P. 38–41 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
35. S. Sakka, *Sol-Gel Process and Applications* – 2013.- Second Edit. Elsevier - **ағылшын тіліндегі кітап**
36. B.G. Rao, D. Mukherjee, B.M. Reddy, *Nanostructures for novel therapy novel approaches for preparation of nanoparticles*. – 2017- Elsevier Inc. - **ағылшын тіліндегі кітап**
37. A. Dehghanhadikolaei, J. Ansary, R. Ghoreishi, *Sol-gel process applications: A mini-review*, Proc. Nat. Res. Soc.- 2018.- V. 2(June).- P. 0–11, doi: 10.11605/j.pnrs.201802008 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
38. E. S. Ameh, *A review of basic crystallography and x-ray diffraction applications*, Int. J. Adv. Manuf. Technol.- 2019.- V. 105(7–8).- P. 3289–3302,, doi: 10.1007/s00170-019-04508-1 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
39. C. Giannini, M. Ladisa, D. Altamura et. al., *X-ray Diffraction: A powerful technique for the multiple-length-scale structural analysis of nanomaterials*, Crystals- 2016.- V.6(8).- P. 1–22, doi: 10.3390/cryst6080087 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
40. A. A. Bunaciu, E. gabriela Udriştioiu, H. Y. Aboul-Enein, *X-Ray Diffraction: Instrumentation and Applications*, Crit. Rev. Anal. Chem.- 2015.- V. 45(4).- P. 289–299, doi: 10.1080/10408347.2014.949616 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
41. F.Kalyk, Ž.Artūras, V. Andrius, *Synthesis and Electron-Beam Evaporation of Gadolinium-Doped Ceria Thin Films*, Coatings – 2022.- 12(6).- 747, doi: 10.3390/coatings12060747 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
42. F.Kalyk, A. Stankevičiūtė, G.Budrytė, *Comparative study of samarium-doped ceria nanopowders synthesized by various chemical synthesis routes*, Ceram. Intern.- 2020.- 46(15).- P. 24385, doi:10.1016/j.ceramint.2020.06.221 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
43. A. Bhabu, J. Theerthagiri, J. Madhavan, *Cubic fluorite phase of samarium doped cerium oxide (CeO₂)_{0.96}Sm_{0.04} for solid oxide fuel cell electrolyte*, J. Mater. Sci. Mater. Electron.-2015.- 27 (2), P. 1566–1573, doi:10.1007/s10854-015-3925-z – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
44. G. Accardo, C. Ferone R. Cioffi, *Electrical and microstructural characterization of ceramic gadolinium-doped ceria electrolytes for ITSOFCs by sol-gel route*, J. Appl. Biomater. Funct. Mater.- 2016.- 14 (1), P. e35–e41, doi:10.5301/jabfm.5000265 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
45. G. Gaidamaviciene, B. Abakeviciene, A. Zalga, *Oxalic acid assisted synthesis of the gadolinium-doped ceria oxide-ion conductor as electrolyte for the solid oxide fuel cells*, Chem. Pap.-2019, 73:891–899, doi:10.1007/s11696-018-0648-7 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
46. A. Arabaci, M.F. Oksuzomer, *Preparation and characterization of 10 mol% Gd doped CeO₂ (GDC) electrolyte for SOFC applications*, Ceram. Int.- 2012.- 38. - P. 6509–6515, doi:10.1016/j.ceramint.2012.05.030 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**

О. Шалқар¹, Б.Е. Жақипбаев², Д.К. Ескермесов³, Б.Ж. Сейтов⁴, А.К. Тусупбекова⁵,
Э.К. Мусенова⁵, У.А. Муратбекова⁶, Ж.К.Алипбекова⁷, С.А. Пазылбек⁸

¹Вильнюсский университет, Вильнюс, Литва

²Университет дружбы народов имени академика А.Куатбекова, Шымкент, Казахстан

³НАО «Восточно-Казахстанский технический университет имени Д. Серикбаева»,
Усть-Каменогорск, Казахстан

⁴Международный казахско-турецкий университет имени Ходжи Ахмеда Ясави, Туркестан, Казахстан

⁵Карагандинский университет имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан

⁶Южно-Казахстанский педагогический университет имени О. Жанибекова, Шымкент, Казахстан

⁷Южно-Казахстанский университет имени М.Ауезова, Шымкент, Казахстан

⁸Университет имени Ж.А. Ташенева, Шымкент, Казахстан

*Автор для корреспонденции: sapargali.pa@gmail.com

Исследование структурных и морфологических свойств порошков и тонких пленок активированного самарием оксида церия.

Аннотация. В работе рассматривается анализ порошков и тонких пленок оксида церия (SDC) с содержанием 26%, активированного самарием для твердых оксидных топливных элементов (SOFC). при приготовлении порошков и тонких пленок SDC используются методы сжигания глицин-нитрата (СВ), совместного осаждения (СР) и водного золь-геля (SG), приводится описание анализа полученных образцов. Все полученные порошки нагревают до температуры от 200 до 1000°C и полученные данные показывают, что кристаллическая структура церия, активированного самарием, развивается при более высоких температурах. Параметры решетки и размер кристаллита нагретых порошков указывают на увеличение нагрева с повышением температуры, а параметр решетки имеет значение выше теоретических значений. Результаты эксперимента показали, что средний размер кристаллитов тонких пленок увеличивается с увеличением его толщины. Среди используемых методов синтеза считается, что метод СВ имеет лучшие результаты по сравнению с методами совместного осаждения и золь-геля. Обнаружено, что экспериментальные значения параметра сетки тонких пленок, осажденных на мате (сетке) SiO_2 , выше соответствующих теоретических значений. Показано, что по мере увеличения толщины средний размер кристаллита тонких пленок, осажденных на мате SiO_2 , увеличивается. Результаты, полученные с помощью атомно-силового микроскопа, показали, что средние значения шероховатости поверхности тонких пленок увеличиваются с увеличением их толщины. С помощью соответствующего программного обеспечения были описаны средняя шероховатость поверхности (R_s), средняя квадратичная шероховатость (R_q), эксцентриситет (R_{ku}), асимметрия (R_{sk}).

Ключевые слова: золь-гель, совместное осаждение, горение глицин-нитратов, тонкая пленка, активированный самарием церий, твердый оксидный топливный элемент.

O. Shalkar¹, Б.Е. Zhakipbayev², D.K. Yeskermessov³, B.Zh. Seitov⁴, A.K. Tussupbekova⁵, E.K. Mussenova⁵, U.A. Muratbekova⁶, Zh.K. Alipbekova⁷, S. Pazyzbek^{*8}

¹Vilnius University, Vilnius, Lithuania

²Peoples' Friendship University named after Academician A.Kuatbekov, Shymkent, Kazakhstan

³NJSC «D. Serikbayev East Kazakhstan Technical University», Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

⁴Ahmet Yassawi University, Turkestan, Kazakhstan

⁵E.A Buketov Karaganda University, Karaganda, Kazakhstan

⁶South Kazakhstan Pedagogical University named after O.Zhanibekov, Shymkent, Kazakhstan

⁷M.Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan

⁸Tashenev University, Shymkent, Kazakhstan

*Correspondence: sapargali.pa@gmail.com

Study of structural and morphological properties of powders and thin films of samaria doped cerium oxide

Abstract. An analysis of 26% samarium doped ceria (SDC) powders and thin films for solid oxide fuel cells (SOFCs) is considered. Glycine-nitrate combustion (CB), co-precipitation (CP), and aqueous sol-gel (SG) methods are used in the preparation of SDC powders and thin films, and methods for analyzing the obtained samples are described. All obtained powders were heated from 200 to 1000°C degrees, showing that the crystal structure of cerium activated by samarium develops at very high temperatures. It shows that the lattice parameter and crystallite size of the heated powders increase with increasing heating temperature, and the lattice parameter is higher than the theoretical values.

The results of the experiment revealed that the average size of the crystallites of thin films increases with the increase in thickness. Among the applied syntheses, the CB method is considered to have better results compared to co-precipitation and sol-gel methods. The experimental values of the lattice parameter of the thin films deposited on the SiO₂ mat were higher than the theoretical value. As the thickness increases, the average crystallite size of the thin films deposited on the SiO₂ substrate increases. The results of the atomic force microscope showed that the average values of the surface roughness of thin films increase with the increase in thickness. The mean surface roughness (R_a), root mean square roughness (R_q), kurtosis (R_{ku}), skewness (R_{sk}) were characterized using appropriate software.

Keywords: sol-gel, co-precipitation, glycine-nitrate combustion, thin film, samarium doped ceria, solid oxide fuel cell

References

1. P. Boldrin, N.P. Brandon, *Progress and outlook for solid oxide fuel cells for transportation applications*, Nat. Catal, - 2019-V. 2(7). -P.571–577, doi:10.1038/s41929-019-0310-y
2. U.F. Akpan, G.E. Akpan, *The contribution of energy consumption to climate change: A Feasible policy Direction*, Int. J. Energy Econ. Policy, - 2012.-V.2(1).-P. 21–33
3. J.M. Andújar, F. Segura, *Fuel cells: History and updating. A walk along two centuries*, Renew. Sustain. Energy Rev, - 2009. - V. 13(9). - P. 2309–2322, doi: 10.1016/j.rser.2009.03.015
4. A. Choudhury, H. Chandra and A. Arora, *Application of solid oxide fuel cell technology for power generation*, Renew. Sustain. Energy Rev, -2013.-V.20.-P.430–442, doi: 10.1016/j.rser.2012.11.031
5. U. Lucia, *Overview on fuel cells*, Renew. Sustain. Energy Rev, - 2014.- V. 30- P. 164–169, doi: 10.1016/j.rser.2013.09.025

6. L. Giorgi, *Fuel Cells: Technologies and Applications*, *Open Fuel Cells J.*, vol. 6, no. 1, pp. 0–0, 2013, doi: 10.2174/1875932720130719001
7. O. Z. Sharaf, M. F. Orhan, *An overview of fuel cell technology: Fundamentals and applications*, *Renew. Sustain. Energy Rev.*, -2014.-V.32-P.810–853, doi: 10.1016/j.rser.2014.01.012
8. A.L. Dicks, D.A. J. Rand, *Fuel Cell Systems Explained*, 2018
9. D. Carter, J. Wing, *Fuel Cell Today*, *The Fuel Cell Industry Review*- 2013.- P. 1–50
10. P. Grimes, *Historical pathways for fuel cells. The new electric century*, *Proc. Annu. Batter. Conf. Appl. Adv.*-2000.-V.2000-Jan (December), -P.41–45,doi: 0.1109/BCAA.2000.838369
11. M. Sriubas, K. Pamakštys, G. Laukaitis, *Investigation of microstructure and electrical properties of Sm doped ceria thin films*, *Solid State Ionics*, -2017.-V.302- P. 165–172, doi: 10.1016/j.ssi.2016.11.007
12. D. Virbukas, M. Sriubas, G. Laukaitis, *Structural and electrical study of samarium doped cerium oxide thin films prepared by e-beam evaporation*, *Solid State Ionics*, vol. 271, pp. 98–102, 2015, doi: 10.1016/j.ssi.2014.09.036
13. L. Bastakys, F. Kalyk, L. Marcinauskas, *Structural investigation of gadolinia-ceria multilayered thin films deposited by reactive magnetron sputtering*, *Materials Letters*, - 2020.-271.- 127762, doi: 10.1016/j.matlet.2020.127762
14. B. Timurkutluk, C. Timurkutluk, M. D. Mat, Y. Kaplan, *A review on cell/stack designs for high performance solid oxide fuel cells*, *Renew. Sustain. Energy Rev.*- 2016.- V. 56- P.1101–1121, doi: 10.1016/j.rser.2015.12.034
15. K. Kendall, *Introduction to SOFCs*. - 2016, 2nd ed., No. 1. Elsevier Ltd.
16. N. Kalanda, M. Yarmolich, M. Kutuzau, *Degree of phase transformations in the conditions of polythermal synthesis of SrBaFeMoO_{6-δ}*, *Vacuum*.- 2020.- 174.- P. 109196, doi: <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2020.109196>
17. B. Sorensen, *Fuel cells. 3.1.1 Electrochemistry and thermodynamics of fuel cells*, *Hydrog. Fuel Cells*.- 2012. - P. 95–200, doi: 10.1016/B978-0-12-387709-3.50003-6
18. S. A. M. Ali, R. E. Rosli, A. Muchtar, *Effect of sintering temperature on surface morphology and electrical properties of samarium-doped ceria carbonate for solid oxide fuel cells*, *Ceram. Int.*-2015.- V. 41(1).-P. 1323–1332, doi: 10.1016/j.ceramint.2014.09.064
19. Š. Jankauskas, A. Vasiliauskas, A. Guobienė, *Study of the structure, composition and wettability of the DLC:N films*, *Surface and Coatings Technology*- 2024.- V.489.- P.131132, doi: 10.1016/j.surfcoat.2024.131132
20. S. P. S. Badwal, S. Giddey, C. Munnings, A. Kulkarni, *Review of progress in high temperature solid oxide fuel cells*, *J. Aust. Ceram. Soc.*- 2014.- V. 50 (1).-P. 23–37
21. D. Virbukas, G. Laukaitis, *The structural and electrical properties of samarium doped ceria films formed by e-beam deposition technique*, *Solid State Ionics*.- 2017. - V. 302.- P. 107–112, doi: 10.1016/j.ssi.2016.12.003
22. I. Mindaugas, G. Asta, G. Karolis, *UV-mediated photochemical synthesis and investigation of the antiviral properties of Silver nanoparticle-polyvinyl butyral nanocomposite coatings as a novel antiviral material with high stability and activity*, *Applied Materials Today*.- 2024.- V. 38.- P. 102203, doi: 10.1016/j.apmt.2024.102203
23. S. F. Wang, C. T. Yeh, Y. R. Wang, Y. C. Wu, *Characterization of samarium-doped ceria powders prepared by hydrothermal synthesis for use in solid state oxide fuel cells*, *J. Mater. Res. Technol.*- 2013.- V. 2(2)- P. 141–148, doi: 10.1016/j.jmrt.2013.01.004
24. B. Aygün, H. Özdemir, M. A. F. Öksüzömer, *Structural, morphological and conductivity properties of samaria doped ceria (Sm_xCe_{1-x}O_{2-x/2}) electrolytes synthesized by electrospinning method*, *Mater. Chem. Phys.*-2019.-V.232 (January)-P.82–87, doi: 10.1016/j.matchemphys.2019.04.067

25. C. Mansilla, J. P. Holgado, J. P. Espinós et al., *Microstructure and transport properties of ceria and samaria doped ceria thin films prepared by EBE-IBAD*, Surf. Coatings Technol.- 2007.- V. 202(4-7)- P. 1256-1261, doi: 10.1016/j.surfcoat.2007.07.082
26. S. Gupta et al., *Influence of samaria doping on the resistance of ceria thin films and its implications to the planar oxygen sensing devices*, Sensors Actuators, B Chem.- 2009- V. 139(2)- P. 380-386, doi: 10.1016/j.snb.2009.03.021
27. V. Lair, L. S. Živković, O. Lupan, A. Ringuedé, *Synthesis and characterization of electrodeposited samaria and samaria-doped ceria thin films*, Electrochim. Acta.- 2011.- V. 56(12).- P. 4638-4644, doi: 10.1016/j.electacta.2011.02.101
28. J. Bae, S. Hong, B. Koo, J. An et al., *Influence of the grain size of samaria-doped ceria cathodic interlayer for enhanced surface oxygen kinetics of low-temperature solid oxide fuel cell*, J. Eur. Ceram. Soc.- 2014.- V. 34(15).- P. 3763-3768, doi: 10.1016/j.jeurceramsoc.2014.05.028
29. A. Tamulevičienė, M. Rasa, I. Mindaugas, *Highly-hydrophobic, transparent, and durable coatings based on ZnO tetrapods with diamond-like carbon nanocomposite*, Surface and Coatings Technology.- 2023.- 470.- P.129863, doi: 10.1016/j.surfcoat.2023.129863
30. G. Saito, Y. Nakasugi, N. Sakaguchi, C. Zhu, T. Akiyama, *Glycine-nitrate-based solution-combustion synthesis of SrTiO₃*, J. Alloys Compd.- 2015.- V. 652- P. 496-502, doi: 10.1016/j.jallcom.2015.08.227
31. A. B. Salunkhe, V. M. Khot, M. R. Phadataré, S. H. Pawar, *Combustion synthesis of cobalt ferrite nanoparticles - Influence of fuel to oxidizer ratio*, J. Alloys Compd.- 2012.- V. 514- P.91-96, doi: 10.1016/j.jallcom.2011.10.094
32. N. Özbay, A. S. Yargıç, R. Z. Yarbay Şahin, E. Yaman, *Research on the Pyrolysis Characteristics of Tomato Waste With Fe-Al₂O₃ Catalyst*, Exergetic, Energ. Environ. Dimens.- 2018- P. 815-828, doi: 10.1016/B978-0-12-813734-5.00046-9
33. T. Athar, *Smart precursors for smart nanoparticles*, Second Edit, Elsevier Inc., 2014.34.
S.P. Sajjadi, *Sol-gel process and its application in Nanotechnology*, J. Polym. Eng. Technol.- 2005- V. 13(January)- P. 38-41
35. S. Sakka, *Sol-Gel Process and Applications* – 2013.- Second Edit. Elsevier
36. B.G. Rao, D. Mukherjee, B.M. Reddy, *Nanostructures for novel therapy novel approaches for preparation of nanoparticles.* – 2017- Elsevier Inc.
37. A. Dehghanhadikolaei, J. Ansary, R. Ghoreishi, *Sol-gel process applications: A mini-review*, Proc. Nat. Res. Soc.- 2018.- V. 2(June).- P. 0-11, doi: 10.11605/j.pnrs.201802008
38. E. S. Ameh, *A review of basic crystallography and x-ray diffraction applications*, Int. J. Adv. Manuf. Technol.- 2019.- V. 105(7-8).- P. 3289-3302, , doi: 10.1007/s00170-019-04508-1 – ағылшын тіліндегі журнал мақаласы
39. C. Giannini, M. Ladisa, D. Altamura et. al., *X-ray Diffraction: A powerful technique for the multiple-length-scale structural analysis of nanomaterials*, Crystals- 2016.- V.6(8).- P. 1-22, doi: 10.3390/cryst6080087
40. A. A. Bunaciu, E. gabriela Udriştioiu, H. Y. Aboul-Enein, *X-Ray Diffraction: Instrumentation and Applications*, Crit. Rev. Anal. Chem.- 2015.- V. 45(4).- P. 289-299, doi: 10.1080/10408347.2014.949616
41. F.Kalyk, Ž. Artūras, V. Andrius, *Synthesis and Electron-Beam Evaporation of Gadolinium-Doped Ceria Thin Films*, Coatings – 2022.- 12(6).- 747, doi: 10.3390/coatings12060747
42. F.Kalyk, A. Stankevičiūtė, G. Budrytė, *Comparative study of samarium-doped ceria nanopowders synthesized by various chemical synthesis routes*, Ceram. Intern.- 2020.- 46(15).- P. 24385, doi:10.1016/j.ceramint.2020.06.221
43. A. Bhabu, J. Theerthagiri, J. Madhavan, *Cubic fluorite phase of samarium doped cerium oxide (CeO₂)_{0.96}Sm_{0.04} for solid oxide fuel cell electrolyte*, J. Mater. Sci. Mater. Electron.-2015.- 27 (2), P. 1566-1573, doi:10.1007/s10854-015-3925-z

44. G. Accardo, C. Ferone R. Cioffi, *Electrical and microstructural characterization of ceramic gadolinium-doped ceria electrolytes for ITSOFCs by sol-gel route*, J. Appl. Biomater. Funct. Mater.- 2016.- 14 (1), P. e35-e41, doi:10.5301/jabfm.5000265

45. G. Gaidamaviciene, B. Abakeviciene, A. Zalga, *Oxalic acid assisted synthesis of the gadolinium-doped ceria oxide-ion conductor as electrolyte for the solid oxide fuel cells*, Chem. Pap.-2019, 73:891-899, doi:10.1007/s11696-018-0648-7

46. A. Arabaci, M.F. Oksuzomer, *Preparation and characterization of 10 mol% Gd doped CeO₂ (GDC) electrolyte for SOFC applications*, Ceram. Int.- 2012.- 38. - P. 6509-6515, doi:10.1016/j.ceramint.2012.05.030

Авторлар туралы мәлімет:

С.А. Пазылбек – хат-хабар авторы, PhD, қауымдастырылған профессор, «математика және информатика» кафедрасының меңгерушісі, Жұмабек Ахметұлы Тәшенев атындағы Университет, Қонаев даңғылы 21, 160012, Шымкент, Қазақстан

О. Шалқар – PhD докторант, Химия және геоғылым факультеті, Вильнюс университеті, Наугардуко көшесі 24, LT-03225, Вильнюс, Литва

Б.Е. Жақипбаев – PhD, қауымдастырылған профессор, Академик Ә.Қуатбеков атындағы Халықтар достығы университетінің Инженерлік-технологиялық хабтың бас ғылыми қызметкері, «мұнай және құрылыс өндірісі» кафедрасының профессоры, Төле би көшесі 32, 160000, Шымкент, Қазақстан

Д.К. Ескермесов – PhD, физика Орталығының қауымдастырылған профессоры, Халықаралық Инженерия Мектебінің жетекші ғылыми қызметкері КЕАҚ «Д. Серікбаев ат. Шығыс Қазақстан техникалық университеті», Серікбаев көшесі 19, 070004, Өскемен, Қазақстан

Б.Ж. Сейтов – PhD, «физика» кафедрасының меңгерушісі, Қожа Ахмет Ясауи атындағы Халықаралық қазақ-түрік университеті, Б. Саттарханов даңғылы 29, 161200, Түркістан, Қазақстан

А.К. Тусупбекова – PhD, ассоциированный профессор кафедрасы «радиофизика және электроника» кафедрасының қауымдастырылған профессоры, академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды университеті, Университет көшесі 28, 100028, Қарағанды, Қазақстан.

Э.К. Мусенова – ф.м.ғ.к., физика және нанотехнологиялар кафедрасының қауымдастырылған профессоры, физика-техникалық факультет, академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды университеті, Университетская көшесі, 28, 100028, Қарағанды қ., Қазақстан.

У.А. Муратбекова – математика кафедрасының магистр оқытушысы, физика-математикалық факультет, Ө.Жәнібеков атындағы Оңтүстік Қазақстан педагогикалық университеті, Байтұрсынов көшесі 13, Шымкент қ., Қазақстан.

Ж.К. Алипбекова – PhD, «Физика» кафедрасының аға оқытушысы, жаратылыстану ғылымдары мен педагогика факультеті, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Тауке хан даңғылы 5, Шымкент 160012, Қазақстан.

С.А. Пазылбек – автор для корреспонденции, доктор PhD, ассоциированный профессор, заведующий кафедрой «Математика и информатика», Университет имени Жумабека Ахметұлы Ташенева, проспект Кунаева 21, 160012, Шымкент, Казахстан

О. Шалқар – PhD докторант, факультет химии и геонаук, Вильнюсский университет, ул. Наугардуко 24, LT-03225, Вильнюс, Литва

Б.Е. Жақипбаев – PhD, ассоциированный профессор, главный научный сотрудник Инженерно-технологического хаба, профессор кафедрасы «Нефтяное и строительное производство»

Университета дружбы народов имени академика А.Куатбекова, улица Толе би 32, 160000, Шымкент, Казахстан

Д.К. Ескермесов – PhD, ассоциированный профессор Центра физики, Ведущий научный сотрудник Международной Школы Инженерии НАО «Восточно-Казахстанский технический университет им. Д. Серикбаева», ул. Серикбаева 19, 070004, Усть-Каменогорск, Казахстан

Б.Ж. Сейтов – PhD, заведующий кафедрой «Физика», Международный казахско-турецкий университет имени Ходжи Ахмеда Ясави, проспект Б. Саттарханова 29, 161200, Туркестан, Казахстан

А.К. Тусупбекова – PhD, ассоциированный профессор кафедры радиопластики и электроники Карагандинского университета имени академика Е.А. Букетова, ул. Университетская 28, 100028, Караганда, Казахстан.

Э.К. Мусенова – к.ф.-м.н., ассоциированный профессор кафедры физики и нанотехнологии, физико-технический факультет, Карагандинский университет имени Е.А. Букетова, ул. Университетская, 28, 100028, Караганда, Казахстан.

Ж.К. Алипбекова – PhD, старший преподаватель кафедры «Физика», факультет естественные науки и педагогика, Южно-Казахстанский университет имени М.Ауезова, просп. Тауке хана 5, Шымкент 160012, Казахстан7

У.А. Муратбекова – магистр кафедры математики, физико-математический факультет, Южно-Казахстанский педагогический университет имени О. Жанибекова, Шымкент, Казахстан, ул. Байтурсынова 13, г. Шымкент, Казахстан.

S. Pazyzbek – corresponding author, PhD, Associate Professor, Head of the Department of "Mathematics and Informatics", Tashenev University, Kunaev Avenue 21, 160012, Shymkent, Kazakhstan

O.Shalkar – PhD student, Faculty of Chemistry and Geosciences, Vilnius University, Naugarduko Str. 24, LT-03225, Vilnius, Lithuania

B.Ye. Zhakipbayev – PhD, Associate Professor, Chief Researcher of the Engineering and Technology Hub, Professor of the Department «Oil and Construction Production» of the Peoples' Friendship University named after Academician A.Kuatbekov, Tole bi Str. 32, 160000, Shymkent, Kazakhstan

D.K. Yeskermessov – PhD, Associate Professor at the Center of Physics, Leading Researcher at the International School of Engineering of the NJSC «D. Serikbayev East Kazakhstan Technical University», 19 Serikbayev str., 070004, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

B. Seitov – PhD, Head of the Department of «Physics», Ahmet Yassawi University, B. Sattarhanov Avenue 29, 161200, Turkestan, Kazakhstan

A.K. Tussupbekova – PhD, Associate Professor of the Department of Radiophysics and Electronics, Physical and Technical Faculty, E.A Buketov Karaganda University, Universitetskaya str. 28, 100028, Karaganda, Kazakhstan.

E.K. Mussenova – Candidate of phys.-math. Sciences, Associate Professor of the Department of Physics and Nanotechnology, Physical and Technical Faculty, E.A Buketov Karaganda University, Universitetskaya str. 28, 100028, Karaganda, Kazakhstan.

U.A. Muratbekova – master's degree in Mathematics, Faculty of Physics and Mathematics, South Kazakhstan Pedagogical University named after O.Zhanibekov, Baitursynova str.13, Shymkent, Kazakhstan.

Zh.K. Alipbekova – PhD, senior lecturer, Department of Physics, Faculty of Natural Sciences and Pedagogy, M.Auezov South Kazakhstan University, Tauke Khan Avenue 5, Shymkent 160012, Kazakhstan.



Copyright: © 2025 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



IRSTI 29.15.53
Scientific article

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-150-1-162-185>

Investigation of tin-lithium alloy behavior in high-temperature hydrogen isotope environments: sorption and desorption analysis

I.E. Kenzhina*¹, T.V. Kulsartov¹, Ye.V. Chikhray¹, Zh.A. Zaurbekova¹,
Yu.V. Ponkratov², A.L. Kozlovskiy¹, A.B. Yelishenkov¹, S.K. Askerbekov¹,
A.U. Tolenova¹

¹Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

²Branch of the Institute of Atomic Energy of the National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan, Kurchatov, Kazakhstan

*Correspondence: kenzhina@physics.kz

Abstract. Nuclear fusion's effectiveness relies heavily on managing the intense power loads that strike the first wall, especially the divertor in plasma-physical devices. Due to their self-regulating liquid surfaces, liquid metals, such as lithium and tin, present a promising alternative to solid plasma-facing materials. A promising candidate is a tin-lithium alloy, which is expected to combine the beneficial properties of its constituent metals. The present study investigates tin-lithium alloy's sorption and desorption characteristics when exposed to hydrogen isotopes under high-thermal stress conditions. Specifically, experiments were conducted using a Sn73Li27 alloy with adsorption and thermally stimulated desorption (TDS) techniques employed to characterize its behavior. The sorption experiments were performed under high-temperature conditions from 450°C to 600°C and at different values of residual deuterium pressure in the device volume. The TDS experiments involved measuring the gas flows released from the tin-lithium alloy into the evacuated chamber under linear heating conditions. The temperature dependence of the effective deuterium solubility constant in the alloy was calculated, revealing the complexity of the interaction mechanisms influenced by experimental conditions. The results provide insights into the interaction dynamics between the tin-lithium alloy and hydrogen isotopes, underlining the material's performance and stability in high-temperature environments.

Keywords: tin-lithium alloy; deuterium; sorption; desorption; fusion reactor; plasma-facing components

Received 6.02.2025. Revised 28.02.2025. Accepted 28.02.2025. Available online 25.03.2025

¹ * the corresponding author

1. Introduction

The quest for efficient nuclear fusion energy [1,2] hinges on managing the immense thermal and mechanical stresses experienced by plasma-facing components (PFC). In this context, understanding how different materials interact with hydrogen isotopes under high-temperature conditions is crucial [3,4].

Liquid metals [5-9], particularly lithium and tin, offer a promising alternative to traditional solid PFC [10] due to their self-regulating liquid surfaces [11]. Investigations with pure tin elements are currently underway [12] and show good prospects for its potential future use in fusion reactors. Tin's low hydrogenic retention and vapor pressure levels make it a very promising candidate, particularly when used in a tin-lithium (Sn-Li) alloy. This combination serves as a hybrid high-low Z material, leveraging the benefits of both tin and lithium: tin's low fuel retention and lithium's favorable plasma performance and compatibility. However, the hybrid nature of this alloy poses a challenge: preferential sputtering, which tends to favor lithium erosion, can alter the bulk properties of the materials. This erosion necessitates periodic replenishment of lithium to maintain the Li-Sn ratio on the exposed surfaces. These materials have the potential to enhance the performance and longevity of fusion reactors by mitigating the severe damage inflicted by high-energy plasma.

Among the various candidates, the Sn-Li alloy [13] stands out for its anticipated synergistic benefits, combining the advantageous properties of both constituent metals. Recent research indicates the potential of the Sn-Li alloy [14] as a new liquid metal for protecting in-vessel components of tokamak reactors from high-energy and high-density particle fluxes [14]. The main hope for this alloy is related to the low vapor pressure of Sn-Li, which raises the upper-temperature limit for using the alloy compared to pure lithium (from 450°C to 500°C) [15] in terms of contamination of the fusion plasma [16,17]. Despite significant advances in fusion research, there remains a notable gap in experimental data concerning the interaction of tin-lithium alloys with hydrogen isotopes.

At present, research on the use of Sn-Li alloys as PFC has been conducted on a limited scale worldwide, and there is limited data from such studies. For example, there are research findings on the interaction of hydrogen isotopes with liquid tin and tin-lithium alloy, which were carried out using both computational-theoretical methods [18] and helium plasma exposure in experimental setups [19]. Additionally, there are data from plasma experiments with Sn-Li alloy in the liquid phase conducted at the ISTTOK tokamak (Lisbon, Portugal) [20,21] and the TJ-II stellarator (Barcelona, Spain) [22,23]. At the FTU tokamak (Frascati, Italy) [24], a limiter was tested with a surface made of a carbon-fiber composite filled with liquid tin.

These foundational studies have paved the way for exploring the behavior of the Sn-Li alloy, which aims to leverage the strengths of both lithium and tin. It is expected that this alloy will exhibit favorable hydrogen isotope retention and desorption properties while maintaining stability under the high temperatures typical of fusion reactors.

Kazakhstaniresearchers also have substantial experience in conducting scientific experiments with Sn-Li alloys, which can be divided into three main areas:

1) studies on the interaction of Sn-Li alloys with stainless-steel and refractory metals [25-27];

2) testing of the Sn-Li alloy under radiation exposure, including plasma [28,29] and reactor irradiation [30];

3) experiments on the interaction of Sn-Li alloys with hydrogen isotopes under thermal loads, which is the focus of this work.

The purpose of the present study is to fill this gap by investigating the sorption and desorption characteristics of a $\text{Sn}_{73}\text{Li}_{27}$ alloy when exposed to hydrogen isotopes under high-thermal stress. Utilizing adsorption and TDS techniques, this research aims to provide a detailed analysis of the alloy's response to hydrogen isotopes. The findings are expected to offer valuable insights into the alloy's potential as a plasma-facing material, guiding future research and development efforts in the field of controlled thermonuclear fusion. By providing empirical data on the behavior of tin-lithium alloys, this work not only highlights their suitability for fusion applications, but also informs ongoing debates and research directions in the field.

2. Materials and Methods

To examine the behavior of a tin-lithium alloy under thermal conditions in a deuterium environment, an Sn-Li alloy was manufactured, with 73% tin and 27% lithium. This specific ratio was selected based on a review of existing data, which indicated that a composition of 27% lithium and 73% tin may be optimal for enhancing thermal and physical properties, lowering the saturated vapor pressure in the liquid phase, and minimizing lithium loss in the alloy during operation at temperatures above 500°C.

For the alloy fabrication, lithium of grade LE-1 (${}^6\text{Li}$ of natural enrichment with purity of 99.9%) and tin of grade OVCh (tin purity 99.999%) were used. The alloy fabrication method involves a step-by-step process of mixing tin and lithium in the temperature range of 250–550°C, which ensures the achievement of the required composition and the uniformity of the component distribution. By following the specified stoichiometric ratios and the verified technology, the $\text{Sn}_{73}\text{Li}_{27}$ alloy was successfully obtained.

During the alloy fabrication process, the proportions of components and temperature conditions were carefully controlled, which allowed achieving the required composition homogeneity and even distribution of elements. The characterization of the obtained alloy was conducted using modern analytical methods, presented in [31].

To investigate the behavior of the $\text{Sn}_{73}\text{Li}_{27}$ tin-lithium alloy in a high-temperature environment with hydrogen isotopes (deuterium), a portable experimental setup [31] was utilized.

The behavior of the $\text{Sn}_{73}\text{Li}_{27}$ tin-lithium alloy in a high-temperature environment with hydrogen isotopes was examined using both the adsorption method and thermally stimulated desorption techniques. The adsorption method focuses on analyzing gas absorption by the sample under controlled pressure and temperature conditions. In this study, it was employed to investigate deuterium gas absorption by the liquid tin-lithium alloy, with an absolute pressure sensor continuously monitoring pressure changes in the chamber. The thermally stimulated desorption method measures the gas released from the tin-lithium alloy into a vacuum chamber

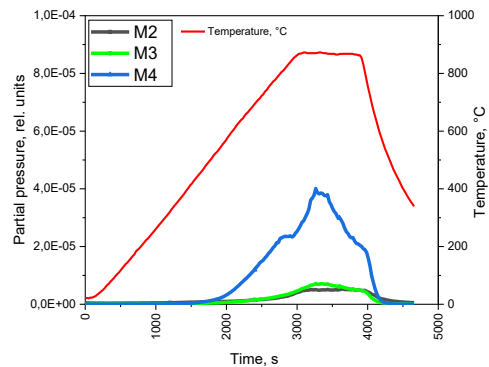
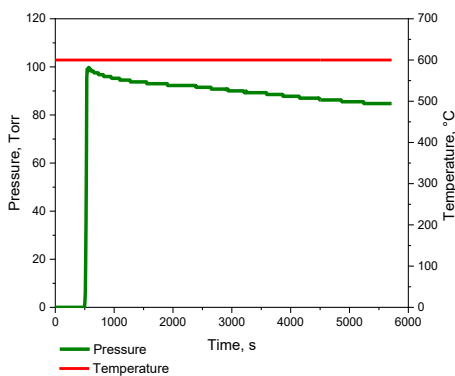
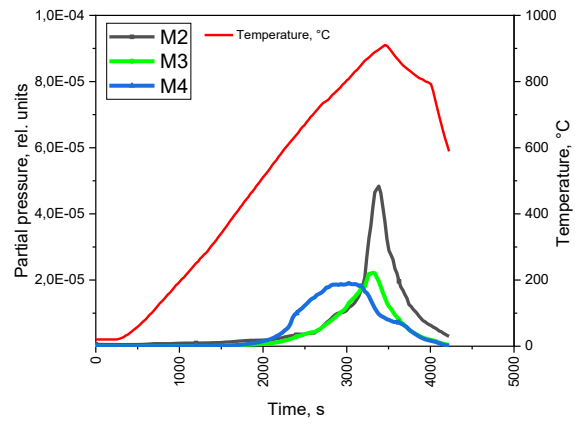
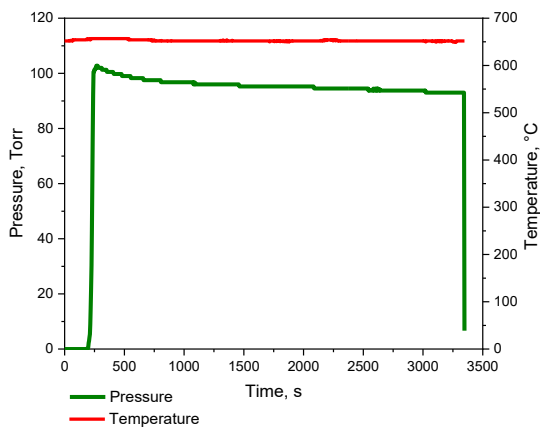
during linear heating. Here, it was used to generate time-dependent profiles of hydrogen (deuterium) isotope release from the $\text{Sn}_{73}\text{Li}_{27}$ alloy as a function of the sample's temperature, using the RGA-100 quadrupole mass spectrometer. The experimental results are presented in the following section

3. Results

Sorption-desorption experiments were conducted with the sample of the $\text{Sn}_{73}\text{Li}_{27}$ alloy within a temperature range of 450°C to 650°C. The experiments were organized sequentially to evaluate the sorption and desorption processes of deuterium over the specified temperature range. This temperature interval was chosen to simulate the operational conditions of the alloy in a fusion reactor, excluding the critical loads associated with plasma disruptions and electromagnetic impulses (ELMs).

The experimental procedure comprised two stages: initial saturation of the sample with deuterium at a specified temperature, followed by a TDS analysis. The saturation temperatures varied from higher to lower values in 50°C increments.

The summarized data of the sorption and desorption experiments with the sample of the $\text{Sn}_{73}\text{Li}_{27}$ alloy are presented in Figure 1.



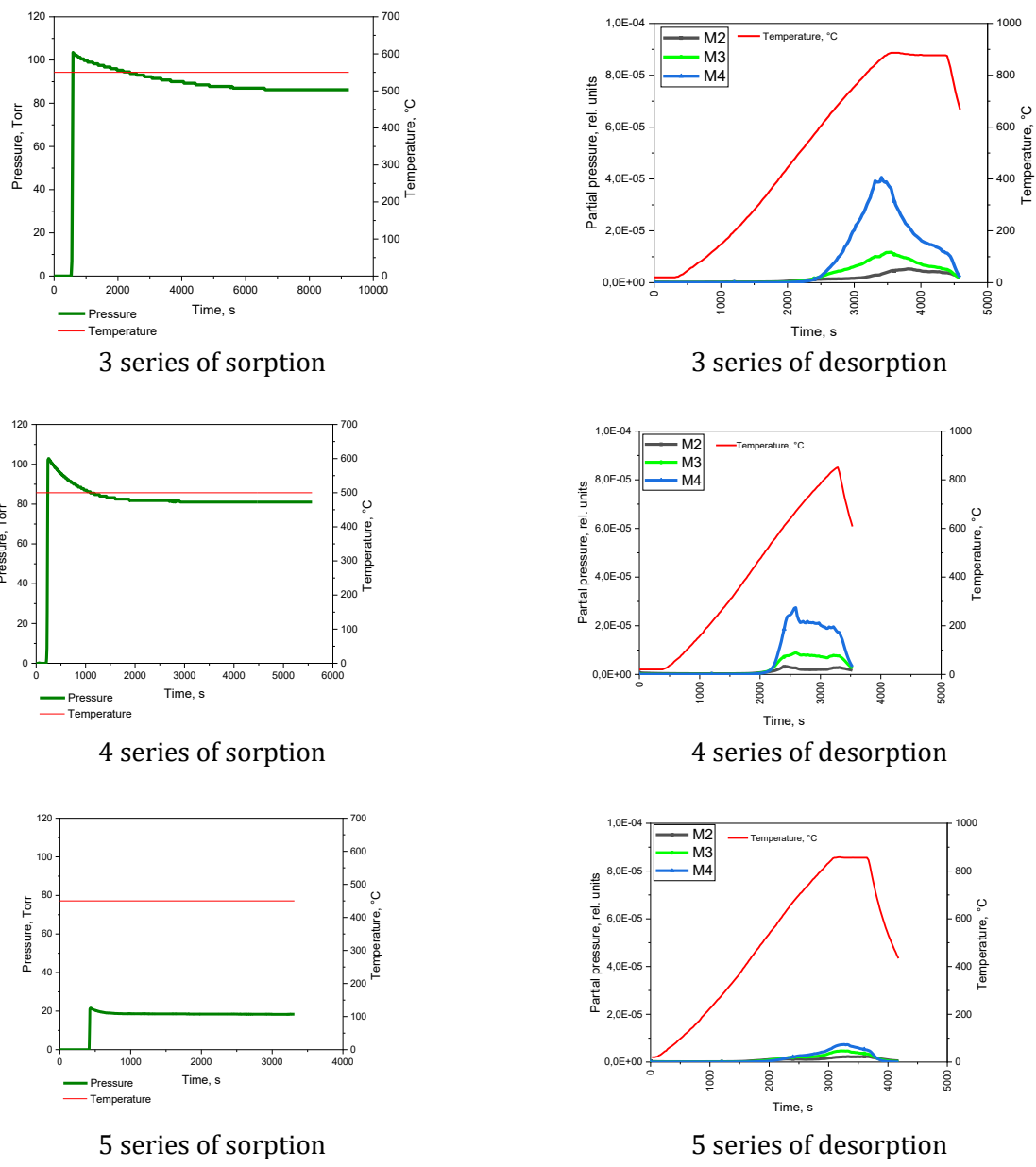


Figure 1. A series of experiments on deuterium sorption/desorption with a $\text{Sn}_{73}\text{Li}_{27}$ sample: (a) Sorption series; (b) Desorption series

Details of the experiments are outlined below:

First Series: Saturation was performed at 650°C for 3300 s. By the end of saturation, the pressure level in the ampoule continued to decrease significantly. During the TDS, a desorption peak was observed at approximately 845°C, with deuterium release beginning in the range of 300°C to 350°C.

Second Series: Saturation was conducted at 600 °C for 5200 s. The pressure level in the ampoule also continued to decrease notably by the end of the saturation period. The desorption

peak was observed at around 875°C (after a hold time of approximately 500 s). Deuterium release commenced in the range of 350 °C.

Third Series: Saturation took place at 550°C for 8600 s. At the end of the saturation period, the pressure level in the ampoule continued to decrease slightly. The desorption peak appeared at the beginning of the maximum temperature plateau, approximately 890 °C. Deuterium release started in the range of 500°C to 550°C.

Fourth Series: Saturation was performed at 500°C for 5300 s. By the end of the saturation period, the pressure level in the ampoule had nearly stabilized, with saturation entering a quasi-equilibrium state after approximately 2000 s. The desorption profile exhibited a broad superposition of peaks, with gas release occurring between 600°C and 875°C. Deuterium release began around 500°C.

Fifth Series: Saturation was conducted at 450°C for 2900 s. The pressure level in the ampoule continued to decrease slightly by the end of saturation, and the saturation reached a quasi-equilibrium state after approximately 1200 s. The desorption peak was observed at the maximum temperature plateau, around 855°C (after a hold time of approximately 250 s). Deuterium release began in the range of 500°C.

During the sorption process at 650°C, the pressure in the ampoule decreased significantly, indicating that deuterium was primarily dissolved in a free state. Desorption was observed in the temperature range of 300-350°C, with the main peak recorded at 845°C.

At 600°C, during the sorption process, a steady decrease in pressure was observed, indicating a change in the ratio of free to bound deuterium concentration. Desorption began at 350°C, with the main peak recorded at 875°C.

At the end of the saturation stage, the rate of pressure decrease slowed down at 550°C, but full equilibrium was not reached. Desorption began in the temperature range of 500-550°C, with the main peak around 890°C.

During the saturation process at 500°C, the pressure stabilized after approximately 2000 seconds, indicating the achievement of equilibrium. Desorption began at 500°C, with the extended peak observed in the range of 600-875°C.

During the sorption process at 450°C, the pressure stabilized rapidly, indicating that the alloy absorbed a limited amount of deuterium. Desorption began at 500°C, with the main peak recorded at 855°C.

The temperature decrease mode was chosen considering the characteristics of the experimental equipment, which included an external heater and a thermocouple with some inertia. This approach allowed for more precise temperature control and prevented overheating of the sample.

4. Discussion

4.1. Analysis of Experiments

The comprehensive and complete analysis of the experiments must include detailed information such as:

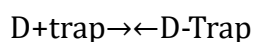
The composition of impurities in deuterium during the saturation experiments.

The history of pumping, annealing, and preparation of the setup with the sample for experiments, including the condition between saturation/desorption cycles.

Even with such data, it is impossible to evaluate the complex factors affecting the experiments (e.g., the degree of sample sputtering during a series, surface contamination of the sample at different stages of the study, etc.).

Therefore, we will focus on a qualitative assessment of the results using possible mechanisms of interaction between deuterium and the tin-lithium alloy sample.

Let us assume that at a certain temperature, deuterium can exist in the alloy in two states: as a so-called "free atom" not trapped (e.g., lithium deuteride form) and as a "trapped deuterium atom" (located in a trap). A transition of deuterium atoms from one state to another is observed, with the ratio of equilibrium concentrations of deuterium atoms in both states being determined by a temperature-dependent constant. Let us further assume that there may be several "traps" for deuterium in the alloy with different parameters, but for convenience, we will consider one bound state of deuterium in the alloy:



There will be a shift to the left in the equilibrium expression above for deuterium in the alloy with increasing temperature. Then, at a qualitative level, the obtained series of experiments can be explained as follows:

At the highest saturation temperature of 650°C, deuterium dissolved in the alloy is primarily in a free state. Upon cooling and subsequent heating, a release peak resembling a peak caused by the migration (transfer) processes of these free atoms is observed.

At a lower saturation temperature of 600°C, deuterium is present in both free form and in traps. Therefore, the desorption peak is a superposition of the peak caused by the transfer of free deuterium atoms and the peak caused by the transfer of deuterium released from traps (by the activation mechanism during heating).

At an even lower saturation temperature, deuterium is mainly present in the traps. Accordingly, the release peak during heating is largely determined by the release of deuterium from the traps, has a symmetric shape, and is shifted to the right on the temperature scale (compared to the "diffusion peak"). This is also evidenced by the significant shift of the deuterium release onset towards higher temperatures.

The fourth cycle of experiments significantly differs from the first three, presumably due to the influence of surface non-metallic films on the sample. Firstly, changes in the saturation kinetics are observed: the rapid achievement of equilibrium saturation likely indicates the closure of the sample surface by such films, and a rapid decrease in the number of sorption centers is observed accordingly. During desorption, a sharp closure of the surface at 650°C is also observed, and the deuterium release trend acquires a monotonically decreasing, practically unanalyzable character.

The last cycle of experiments conducted at the lowest temperature (450°C) was carried out at significantly lower pressure and short saturation time, which presumably resulted in the sample's saturation being more than uneven and non-equilibrium compared to other experimental cycles. The rapid equilibrium pressure change during saturation also indicates surface saturation closure. At the same time, the type of deuterium desorption appears as a

superposition of two deuterium release peaks from two different bound states, suggesting that deuterium is present in two types of traps at 450°C.

4.2. Numerical Modeling of Deuterium Release Processes

Within the proposed interaction mechanism, the temperature dependences of the effective solubility constant of deuterium in the tin-lithium alloy were initially calculated. The calculation was based on both sorption and desorption experiments. The integral amount of absorbed (released) deuterium for each saturation temperature was determined. The results of the calculations are presented in Figure 2.

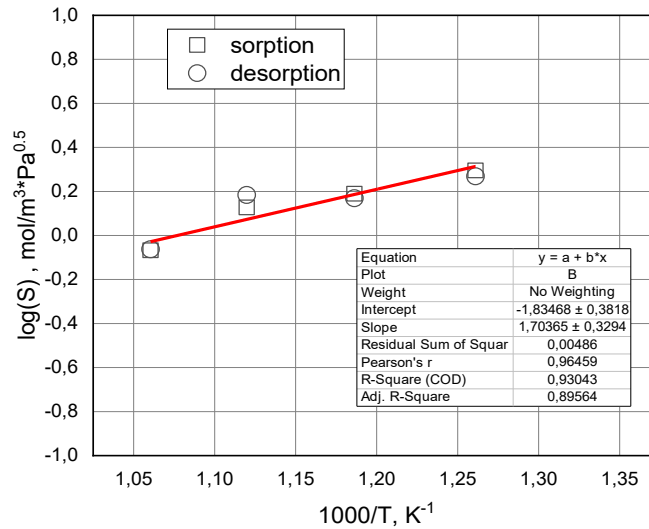


Figure 2. Temperature dependence of the effective solubility constant

As can be seen from Figure 4, there is a good agreement for the solubility values calculated from different experiments, with a significant deviation from the trend for the solubility value obtained at 450°C. This is because the sample did not reach equilibrium saturation (as mentioned earlier). The activation energy of solubility turned out to be positive, indicating that lithium deuteride formation occurs during saturation (such processes are usually exothermic).

For further analysis of the experimental data, a model was used that considers both diffusion and deuterium release from traps (i.e., bound states) during heating. Convective mixing-driven transport was not considered, and thus the diffusion coefficient obtained during modeling is effective (i.e., qualitatively determining the mobility of free deuterium atoms in the alloy).

Equations for the Diffusion Model in the Presence of Gas Sources in Traps:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D(t) \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + k_1 \cdot C_{trap}$$

$$\frac{\partial C_{trap}}{\partial t} = -k_1 \cdot C_{trap}$$

Where C is the deuterium concentration; C_{trap} is the concentration of deuterium sources; k_1 – constants of deuterium release from traps.

Moreover,

$$D(t) = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_D}{RT}\right),$$

$$k_1(t) = k_{10} \cdot \exp\left(-\frac{E_T}{RT}\right),$$

Where T – is the sample temperature (K); E_D , E_T – activation energies of diffusion and deuterium release from the trap, respectively (kJ/mol); R – universal gas constant; k_1 – constants of deuterium release from the bound state in the sample.

Initially, for the first desorption cycle experiments, diffusion parameters were obtained based on Equation (1), assuming no deuterium sources $C_{trap}=0$.

Then, the classical diffusion equation for the initial condition when the diffusant concentration in the metal $C_0(x, t=0)$ is known was solved. (This value was obtained based on normalization relative to the total amount of deuterium in the sample).

As a model approximation, the following boundary conditions were applied that satisfy the conditions of continuous diffusant pumping:

$$(x=0, t)=0 \text{ (the deuterium flow at the alloy-stainless steel boundary is 0)}$$

$C(x=l, t)=0$, where l – sample thickness (desorption from the alloy surface into a vacuum occurs very quickly).

Modeling was carried out using the finite element method with licensed the COMSOL Multiphysics program. As initial data in the model, the experimental temperature dependence on time was also used (it was introduced as a segmented curve where the corresponding sample temperature was chosen for each time measurement range). An example of the distribution of free deuterium atoms in the sample obtained during modeling is presented in Figure 3. The curve closest to the experimental data for deuterium release from the sample is shown in Figure 4. It was obtained for the temperature dependence of the diffusion coefficient:

$$D = 15 \cdot 10^{-3} \text{ (m}^2/\text{s)} \cdot \exp(-110 \text{ (kJ/mol)} / (R \cdot T)).$$

It should be noted that satisfactory agreement between the experimental and model curves was also achieved when varying the values of the pre-exponential factor D_0 in the range of $(2 \cdot 10^{-11} - 10^{-9}) \text{ m}^2/\text{s}$ and diffusion activation energies in the range of (100 - 120) kJ/mol.

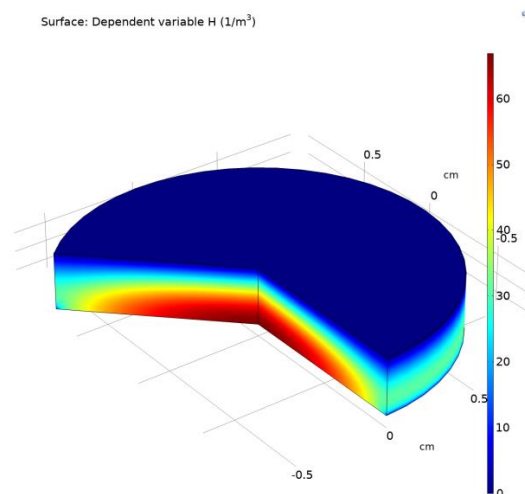


Figure 3. Distribution of free deuterium atoms in the sample at 4191 seconds of the experiment

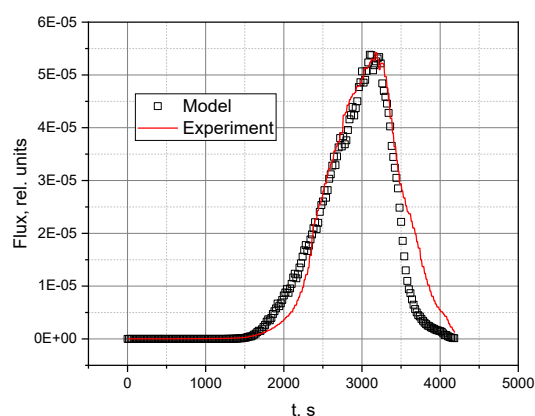


Figure 4. Simulation result of deuterium release from the sample during the first desorption cycle

The modeling of deuterium release for subsequent experiment cycles was conducted using the calculated deuterium diffusion coefficient and allowed for determining the rate constant of deuterium release from traps.

$$K = 150 (1/s) \cdot \exp(-90 (kJ/mol)/(R \cdot T)).$$

This constant was used to describe the change in deuterium concentration in the traps (see Figure 5) and accurately represent the experimental dependencies observed in desorption experiments (see Figure 6).

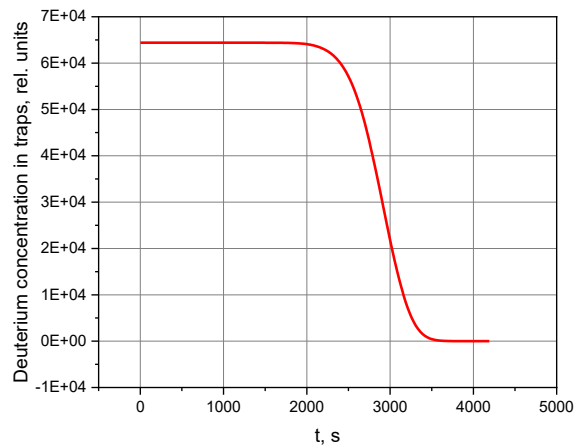


Figure 5. Time dependence of deuterium concentration in traps

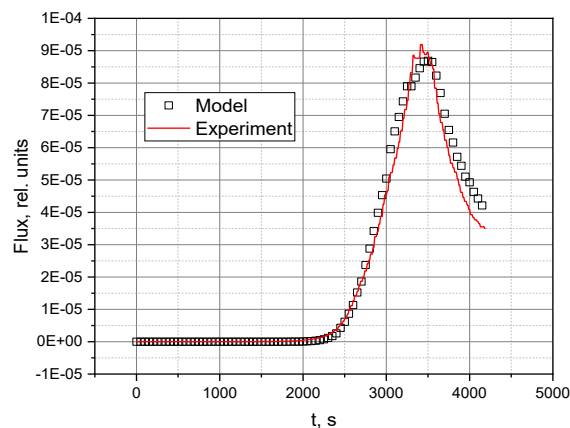


Figure 6. Simulation result of deuterium release from the sample during the third desorption cycle

As seen from the calculations, the obtained diffusion coefficient values are quite low, and the transport of deuterium due to diffusion is significantly less (by more than 5 orders of magnitude) than the transport caused by convective mixing during the heating of the liquid alloy (here, the average transfer speed through the sample volume can exceed 1 mm/s). Thus, as expected, the calculated values represent effective constants and can be used for comparative characterizations of the process kinetics, model selection, and mechanism evaluation, etc.

4.3. Proposed Mechanism

At this stage of analysis, we developed another, more plausible mechanism for the deuterium release process from the alloy in the experiments conducted. The mechanism is as follows (see Figure 7):

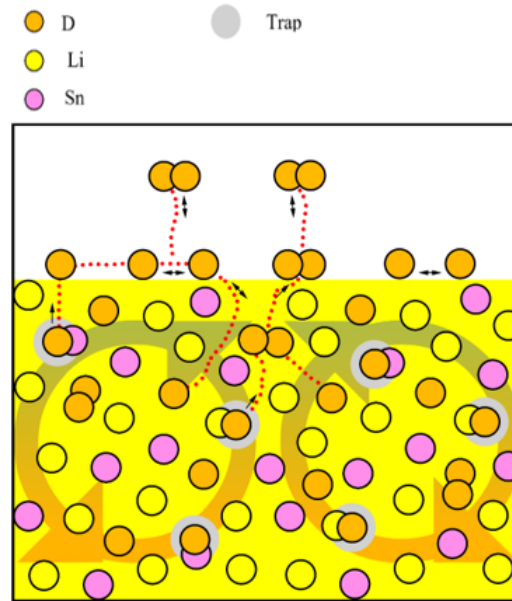


Figure 7. Mechanism of deuterium release from the sample in the presence of free deuterium atoms and deuterium release sources from traps, with active convective mixing and deuterium atom association into molecules throughout the sample volume

After conducting sorption experiments, we have a lithium-tin alloy with a certain initial concentration of deuterium atoms (CD) for the desorption experiments. Deuterium exists in two forms: "free" (CF) and "bound" (CT), with the total concentration being $CD = CF + CT$. During desorption, free deuterium atoms are trapped at a much slower rate compared to their release from traps. The high convection rate in the molten tin-lithium alloy ensures a uniform deuterium concentration throughout the sample. In this sample, D₂ molecules can form from the association of free deuterium atoms, and their concentration, which is proportional to the deuterium flux from the sample, rapidly reaches the surface and release without further activation. Therefore, the deuterium flux from the sample is governed by the association rate of free deuterium atoms, which follows as $Ka = Ka_0 \cdot \exp(-E_a/RT)$ an Arrhenius-type rate constant.

Based on the above, we can establish the following differential equations:

For the deuterium flux from the sample: $J_{D_2}(t) = Ka \cdot C_F^2$ (Polanyi-Wigner law)

For the change in the concentration of free deuterium atoms and trapped deuterium atoms:

$$\frac{dC_F}{dt} = -Ka \cdot C_F^2 + k_1 \cdot C_{trap}$$

$$\frac{\partial C_{trap}}{\partial t} = -k_1 \cdot C_{trap}$$

Initial conditions are defined based on the experimental curve after calculating the total amount of released deuterium. These equations can be effectively solved using a recursive approach to compute the concentration of free deuterium atoms in the sample. For example, in

the case with outtraps (first experimental cycle), with a time interval of Δt , the concentration of free deuterium atoms can be calculated as:

$$C_{Fi} = \left(\frac{1}{C_{F0}} + \Delta t * \sum_{k=0}^{i-1} (Ka0 * e^{-\frac{Ea}{R*T_k}}) \right)^{-1}$$

Modeling has successfully described the experimental curves and determined the parameters for the rate constant of the association of free deuterium atoms in the conducted experiments. The values for $Ka0$ are in the range of (5000; 33000) $m^4/(mol \cdot s)$, and Ea ranges from (105; 133) kJ/mol . Recent studies have provided in-depth evaluations of tin-lithium alloys, shedding light on their interactions with hydrogen isotopes and implications for fusion reactors.

E. Oyarzabal et al. [32] conducted laboratory experiments to examine the uptake and release of hydrogen isotopes in liquid lithium. Their study, performed at temperatures of 200°C and 400°C, identified two distinct absorption phases. In the initial phase, hydrogen quickly dissolves into lithium to form a solution, reaching a saturation point at which a secondary phase begins, characterized by slower absorption and the likely formation of polycrystalline lithium hydride (LiH). At 400°C, the absorbed hydrogen percentage reached 1% H/Li, aligning well with existing literature on the saturation solubility in lithium. At 200°C, the solubility was higher than previously reported data, suggesting temperature-dependent variations in hydrogen uptake. The study revealed preferential absorption of deuterium (D_2) over hydrogen (H_2) in clean lithium. Interestingly, pre-deuterated samples showed a faster absorption rate for H_2 , indicating that previous deuterium absorption alters the surface properties of lithium, possibly through modifications in the LiD layer. TDS results exhibited desorption peaks at approximately 485°C, significantly lower than the decomposition temperature of LiH. This suggests that the desorption process is not solely reliant on LiH decomposition but may involve hydrogen dissolved in lithium or the breakdown of a superficial LiH layer. Dynamic experiments with samples pre-implanted with H_2 and D_2 showed no significant isotope exchange at temperatures up to 500°C, indicating a high stability of the absorbed isotopes in molten lithium within this temperature range.

M.J. Baldwin and colleagues [33] took a closer look at the surface chemistry involved in the recombination of deuterium atoms on molten Li-LiD alloys. They measured the recombination rate constant across a temperature range of 573-873 K using thermal desorption techniques. The recombination rate followed an Arrhenius-type temperature dependency, which is characteristic of surface-limited processes. However, the experimental rates were found to be significantly lower than theoretical predictions for a clean lithium surface. This discrepancy is attributed to surface contamination, particularly by oxides, which reduce the availability of surface sites for recombination. The study highlighted that even minute amounts of surface contamination could drastically alter the recombination dynamics. Surface oxides, such as Li_2O , appear to create an energy barrier for chemisorption, thus reducing the overall recombination rate of deuterium. The data aligned reasonably well with the hydrogen release model of Pick and Sonnenberg when accounting for surface impurities, demonstrating that surface cleanliness is crucial for controlling hydrogen isotope behavior in liquid lithium systems.

Richard Schumacher and Alarich Weiss [34] extended the understanding of hydrogen interactions by investigating the solubility of hydrogen in liquid lithium alloys, specifically Li-In, Li-Pb, and Li-Sn. Their research explored the behavior of these alloys at various hydrogen pressures and temperatures, extending up to 1220 K. Hydrogen solubility in the alloys followed Sieverts' law at low concentrations, indicating that the dissolved hydrogen existed as atoms in solution. However, strong deviations were observed in certain alloys, indicating potential alloy decomposition and the formation of hydrides at higher hydrogen concentrations. The study found that the addition of elements like indium, lead, and tin altered the hydrogen absorption behavior of lithium, reducing its overall hydrogen solubility. This could be due to changes in the electronic structure and atomic arrangement within the alloy, affecting how hydrogen atoms interact with the metal matrix.

Beatriz G. del Rio and colleagues [35] used first-principles molecular dynamics simulations to explore the behavior of deuterium in liquid Li-Sn alloys. This study is crucial for understanding the impact of deuterium addition on the alloy properties and its implications for fusion reactor applications. The simulations showed that when deuterium concentration (β) in the alloy exceeded 22.5, D_2 gas bubbles formed. These bubbles caused lithium atoms to segregate towards them, reducing the overall retention of deuterium within the alloy matrix. Thermodynamic analyses indicated that for alloys containing less than 82% lithium, most of the added deuterium would form D_2 molecules rather than bonding with the alloy. This suggests a tendency towards the formation of molecular deuterium gas rather than stable hydrides, making the alloy less prone to isotope retention. Deuterium addition significantly increased the viscosity of the alloy, a behavior like that observed in pure liquid lithium. This viscosity increase is attributed to interactions between lithium and deuterium, affecting the alloy's diffusion properties and potentially influencing its performance in a plasma environment. The tendency of Li-Sn alloys to form D_2 gas and limit deuterium retention is promising for their application as PFCs, offering a pathway to reduce tritium retention in fusion reactors. This characteristic could help maintain plasma purity and enhance reactor safety by minimizing the accumulation of tritium within the PFCs. Understanding the changes in diffusivity and viscosity with deuterium addition is vital for predicting the alloy's behavior under reactor conditions, ensuring that the material properties remain within acceptable limits during operation.

The collective insights from these studies highlight the nuanced behavior of hydrogen isotopes in liquid lithium and its alloys. The preferential absorption and complex desorption kinetics of hydrogen and deuterium in liquid lithium indicate a strong interaction with the metal, influenced by temperature, surface conditions, and prior isotope exposure. Alloying lithium with metals like tin reduces hydrogen solubility and promotes the formation of molecular hydrogen, mitigating the risk of isotope retention.

In the context of fusion reactors:

Pure Liquid Lithium: Offers high hydrogen isotope absorption but also poses challenges in managing tritium inventory due to hydride formation and strong isotope retention.

Li-Sn Alloys: Show promise in reducing hydrogen isotope retention by facilitating the formation of molecular hydrogen rather than stable hydrides. These alloys may serve as more effective plasma-facing materials with reduced tritium retention risks.

Building on these comprehensive studies, our investigation focuses on the Sn₇₃Li₂₇ alloy, evaluating its sorption and desorption behavior in high-temperature hydrogen isotope environments. By doing so, we aim to contribute to the development of PFCs that combine the beneficial properties of both tin and lithium, offering reduced retention, thermal stability, and effective recycling in fusion applications.

5. Conclusion

The present investigation provides a detailed analysis of the sorption and desorption behavior of the Sn₇₃Li₂₇ alloy in high-temperature hydrogen isotope environments, focusing on its interactions with deuterium. The study employed sorption and thermally stimulated desorption (TDS) techniques over a temperature range of 450°C to 650°C to simulate operational conditions of plasma-facing materials in fusion reactors.

The results demonstrated that deuterium is present in both free and trapped states within the alloy, with distinct temperature-dependent release behaviors. At higher saturation temperatures (e.g., 650°C), deuterium is predominantly in its free atomic state, leading to a higher and earlier release during desorption. As the saturation temperature decreased, the proportion of trapped deuterium increased, resulting in delayed and more complex desorption peaks due to the activation of release mechanisms from bound states.

The numerical modeling of the desorption process, considering both diffusion and release from traps, revealed effective diffusion coefficients and rate constants for deuterium release. The effective diffusion coefficient for deuterium was found to be $D = 15 \cdot 10^{-3} \text{ (m}^2/\text{s)} \cdot \exp(-110 \text{ kJ/mol}/(R \cdot T))$, with a good match between experimental and simulated data. The analysis suggests that convective mixing plays a significant role in enhancing deuterium transport within the liquid alloy, complementing the diffusion-driven release.

These findings are critical for understanding the thermal and hydrogen isotope retention properties of Sn-Li alloys, particularly in fusion reactor environments, where plasma-facing materials are subjected to extreme thermal stresses. The Sn₇₃Li₂₇ alloy exhibited promising characteristics for use in next-generation fusion reactors, offering a balance of low deuterium retention and efficient release at elevated temperatures. Future investigations should focus on further refining alloy compositions and optimizing operational parameters to enhance the alloy's performance in fusion reactors.

In conclusion, this study advances our understanding of Sn-Li alloy behavior in hydrogen isotope environments, providing essential data for the development of liquid metal-based plasma-facing components in fusion energy systems.

Authors' contributions

I.E. Kenzhina – conducting experiments, working out the modes of obtaining alloys, characterizing samples.

T.V. Kulsartov – conducting experiments, interpreting results of experiments, general analysis, determining the kinetics of material degradation.

Ye.V. Chikhray – conducting experiments, interpreting the obtained data, analyzing the state of the problem, processing the obtained results.

A.L. Kozlovskiy – conducting experiments, general analysis, determining the kinetics of material degradation

Zh.A. Zaurbekova – general analysis, determining the kinetics of material degradation.

A.B. Yelishenkov – conducting experiments, general analysis, determining the kinetics of material degradation.

S.K. Askerbekov – conducting experiments, general analysis, determining the kinetics of material degradation.

A.U. Tolenoa – conducting experiments, general analysis, determining the kinetics of material degradation.

Acknowledgment

There search was funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan with Program number BR21882237.

References

1. F. Romanelli, *Fusion energy*, EPJ Web Conf, 2020, 246, 00013 – **journal paper**
2. E. Peluso, E. Pakhomova, M. Gelfusa, *New Challenges in Nuclear Fusion Reactors: From Data Analysis to Materials and Manufacturing*, Appl. Sci. 2023, 13, 6240. <https://doi.org/10.3390/app13106240> – **journal paper**
3. S. Brezinsek et al., *Plasma–Wall Interaction Studies within the EUROfusion Consortium: Progress on Plasma-Facing Components Development and Qualification*, Nucl. Fusion2017, 57, 116041. <https://doi.org/10.1088/1741-4326/aa796e> – **journal paper**
4. G. Dose, S. Roccella, F. Romanelli, *Engineering of a FGM Interlayer to Reduce the Thermal Stresses Inside the PFCs*, Appl. Sci. 2022, 12, 10215. <https://doi.org/10.3390/app122010215> – **journal paper**
5. M. Bilal, K. Ahmad, M.T. Saleem et al., *Recent Progress on Liquid Metal Use as Plasma Facing Component and Vapor Shielding of High Heat Flux*, Rev. Mod. Plasma Phys.2022, 6, 9. <https://doi.org/10.1007/s41614-022-00070-8> – **journal paper**
6. F.L. Tabarés, *Present Status of Liquid Metal Research for a Fusion Reactor*, Plasma Phys. Control. Fusion2016, 58, 014014. <https://doi.org/10.1088/0741-3335/58/1/014014> – **journal paper**
7. F.L. Tabarés, E. Oyarzabal, A.B. Martin-Rojo, D. Tafalla, A. de Castro, A. Soleto, *Reactor Plasma Facing Component Designs Based on Liquid Metal Concepts Supported in Porous Systems*, Nucl. Fusion2017, 57, 016029. <https://doi.org/10.1088/0029-5515/57/1/016029> – **journal paper**
8. D. Alegre et al., *Design and Testing of Advanced Liquid Metal Targets for DEMO Divertor: The OLMAT Project*, J. Fusion Energy2020, 39, 411–420. <https://doi.org/10.1007/s10894-020-00254-5> – **journal paper**
9. T.W. Morgan, A. Vertkov, K. Bystrov, I. Lyublinski, J.W. Genuit, G. Mazzitelli, *Power Handling of a Liquid-Metal Based CPS Structure under High Steady-State Heat and Particle Fluxes*, Nucl. Mater. Energy2017, 12, 210–215. <https://doi.org/10.1016/j.nme.2017.01.017> – **journal paper**
10. P.C. Stangeby, E.A. Unterberg, J.W. Davis, T. Abrams, A. Bortolon, I. Bykov, D. Donovan, H.Y. Guo, R. Kolasinski, A.W. Leonard, J.H. Nichols, D.L. Rudakov, G. Sinclair, D.M. Thomas, J.G. Watkins, *Developing*

Solid-Surface Plasma Facing Components for Pilot Plants and Reactors with Replenishable Wall Claddings and Continuous Surface Conditioning. Part A: Concepts and Questions, *Plasma Phys. Control. Fusion*2022, 64, 055018. <https://doi.org/10.1088/1361-6587/ac5a7c> – **journal paper**

11. G.G. van Eden, T.W. Morgan, D.U.B. Aussems, M.A. van den Berg, K. Bystrov, M.C.M. van de Sanden, *Self-Regulated Plasma Heat Flux Mitigation Due to Liquid Sn Vapor Shielding*, *Phys. Rev. Lett.*2016, 116, 135002. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.135002> – **journal paper**

12. G. Mazzitelli et al., *Experiments on the Frascati Tokamak Upgrade with a Liquid Tin Limiter*, *Nucl. Fusion*2019, 59, 096004. <https://doi.org/10.1088/1741-4326/ab1d70> – **journal paper**

13. M.A. Fütterer, G. Aiello, F. Barbier, L. Giancarli, Y. Poitevin, P. Sardain, J. Szczepanski, A. Li Puma, G. Ruvutuso, G. Vella, *On the Use of Tin–Lithium Alloys as Breeder Material for Blankets of Fusion Power Plants*, *J. Nucl. Mater.*2000, 283–287 (Part 2), 1375–1379. [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(00\)00124-0](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(00)00124-0) – **journal paper**

14. A. de Castro, C. Moynihan, S. Stemmley, M. Szott, D. Andruczyk, D.N. Ruzic, *Exploration of Sn70Li30 Alloy as a Possible Material for Flowing Liquid Metal Plasma Facing Components*, *Nucl. Mater. Energy*2020, 25, 100829. <https://doi.org/10.1016/j.nme.2020.100829> – **journal paper**

15. V. PericoliRidolfini, P. Chmielewski, I. Ivanova-Stanik, M. Poradziński, R. Zagórski, R. Ambrosino, F. Crisanti, *Comparison Between Liquid Lithium and Liquid Tin Targets in Reactor-Relevant Conditions for DEMO and I-DTT*, *Phys. Plasmas*2020, 27, 112506. <https://doi.org/10.1063/5.0012743> – **journal paper**

16. R.A. Anderl, D.D. Jenson, G.F. Kessinger, *Vaporization Properties of the Sn–25 at.% Li Alloy*, *J. Nucl. Mater.*2002, 307–311, Part 1, 739–742. [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(02\)00975-3](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(02)00975-3) – **journal paper**

17. T.D. Rognlien, M.E. Rensink, *Interactions Between Liquid-Wall Vapor and Edge Plasmas*, *J. Nucl. Mater.*2001, 290–293, 312–316. [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(00\)00575-4](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(00)00575-4) – **journal paper**

18. V.P. Krasin, S.I. Soyutstova, *Quantitative Evaluation of Thermodynamic Parameters of Li–Sn Alloys Related to Their Use in Fusion Reactor*, *J. Nucl. Mater.*2018, 505, 193–199. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2018.04.008> – **journal paper**

19. V. Kvona, E. Oyarzabal, E. Zeothout, A.B. Martin-Rojo, T.W. Morgan, F.L. Tabares, *Secondary Electron Emission of Tin and Tin-Lithium under Low Energy Helium Plasma Exposure*, *Nucl. Mater. Energy*2017, 13, 21–27. <https://doi.org/10.1016/j.nme.2017.09.005> – **journal paper**

20. J.P.S. Lourerio, F.L. Tabares, H. Fernandes, C. Silva, R. Gomes, E. Alves, R. Mateus, T. Pereira, H. Alves, H. Figueiredo, *Behavior of Liquid Li–Sn Alloy as Plasma Facing Material on ISTTOK*, *Fusion Eng. Des.*2017, 117, 208–211. <https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2016.12.031> – **journal paper**

21. J.P.S. Loureiro, H. Fernandes, F.L. Tabarés, G. Mazzitelli, C. Silva, R. Gomes, E. Alves, R. Mateus, T. Pereira, H. Figueiredo, H. Alves, *Deuterium Retention in Tin (Sn) and Lithium–Tin (Li–Sn) Samples Exposed to ISTTOK Plasmas*, *Nucl. Mater. Energy*2017, 12, 709–713. <https://doi.org/10.1016/j.nme.2016.12.026> – **journal paper**

22. F.L. Tabares, E. Oyarzabal, A.B. Martin-Rojo, D. Tafalla, A. de Costa, F. Medina, M.A. Ochando, B. Zurro, K. McCarthy, TJ-II Team, *Experimental Tests of Li–Sn Alloys as Potential Liquid Metal for the Divertor Target in a Fusion Reactor*, *Nucl. Mater. Energy*2017, 12, 1368–1373. <https://doi.org/10.1016/j.nme.2016.11.026> – **journal paper**

23. F.L. Tabarés, E. Oyarzábal, D. Tafalla, A.B. Martín-Rojo, M.A. Ochando, F. Medina, K.J. McCarthy, B. Zurro, B. López-Miranda, I. Pastor, TJ-II Team, *Generation and Transport of Atomic Lithium During the*

Exposure of Liquid Metals to Hot Plasmas in TJ-II, Nucl. Mater. Energy 2018, 17, 314–319. <https://doi.org/10.1016/j.nme.2018.11.019> – **journal paper**

24. A. Vertkov, I. Lyublinski, M. Zharkov, G. Mazzitelli, M.L. Apicella, M. Iafrati, *Liquid Tin Limiter for FTU Tokamak*, Fusion Eng. Des. 2017, 117, 130–134. <https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2017.01.041> – **journal paper**

25. I. Tazhibayeva, Y. Ponkratov, I. Lyublinsky, Y. Gordienko, A. Vertkov, Y. Tulubayev, K. Samarkhanov, V. Bochkov, Y. Kozhakhmetov, N. Orazgaliyev, *Study of Liquid Tin-Lithium Alloy Interaction with Structural Materials of Fusion Reactor at High Temperatures*, Nucl. Mater. Energy 2022, 30, 101152. <https://doi.org/10.1016/j.nme.2022.101152> – **journal paper**

26. Y.V. Ponkratov, K.K. Samarkhanov, V.V. Baklanov, Y.N. Gordienko, I.E. Kenzhina, V.S. Bochkov, Ye.Yu. Tulubayev, N.A. Orazgaliyev, E. Saparbek, *Investigation of the Interaction of Liquid Tin-Lithium Alloy with Austenitic Stainless Steel at High Temperatures*, Fusion Eng. Des. 2023, 191, 113560. <https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2023.113560> – **journal paper**

27. V. Bochkov, Yu. Ponkratov, Yu. Gordienko, K. Samarkhanov, E. Tulubayev, E. Saparbek, N. Orazgaliyev, B. Orazymbekov, E. Aryngazy, *Experimental Studies on High-Temperature Corrosion Interaction of Tin-Lithium Alloy with Stainless Steel and Refractory Metals*, NNC RK Bulletin 2022, (4), 94–100. (In Russ.) <https://doi.org/10.52676/1729-7885-2022-4-94-100> – **journal paper**

28. Yu.V. Ponkratov, K.K. Samarkhanov, V.V. Baklanov, V.S. Bochkov, I.A. Sokolov, A.Zh. Miniyazov, T.R. Tulenbergenov, I.E. Kenzhina, M.M. Begentayev, Ye.Yu. Tulubayev, O.S. Bukina, N.A. Orazgaliyev, E. Saparbek, *High-Temperature Test of Tin-Lithium CPS Under Deuterium Plasma Irradiation Conditions*, J. Nucl. Mater. 2023, 587, 154754. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2023.154754> – **journal paper**

29. V. Bochkov, Y. Ponkratov, Y. Gordienko, K. Samarkhanov, Y. Tulubayev, T. Tulenbergenov, I. Sokolov, Y. Martynenko, *Development of a Methodology for Conducting Experiments with a Sample of Tin-Lithium Eutectic at a Plasma-Beam Installation*, Mater. Today: Proc. 2023, 81, Part 3, 1198–1203. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2022.11.431> – **journal paper**

30. Y. Ponkratov, K. Samarkhanov, Y. Koyanbayev, Y. Baklanova, Y. Gordienko, Y. Tulubayev, Y. Martynenko, V. Bochkov, R. Sabitova, E. Saparbek, *Technique of Reactor Experiments of Tin-Lithium Alloy Interaction with Hydrogen Isotopes Under Neutron Irradiation Conditions*, Fusion Sci. Technol. 2024, pp. 1–10. <https://doi.org/10.1080/15361055.2024.2388421> – **journal paper**

31. T. Kulsartov, I. Kenzhina, Yu. Ponkratov, Yu. Gordienko, Zh. Zaurbekova, K. Samarkhanov, S. Askerbekov, Ye.A. Kenzhin, A.B. Yelishenkov, *Investigation of the interaction of deuterium with Sn73Li27 tin-lithium alloy*, Nucl. Mater. Energy 2024, 41, 101825. <https://doi.org/10.1016/j.nme.2024.101825> – **journal paper**

32. E. Oyarzabal, A.B. Martin-Rojo, F.L. Tabarés, *Laboratory Experiments of Uptake and Release of Hydrogen Isotopes in Liquid Lithium*, J. Nucl. Mater. 2015, 463, 1173–1176. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2014.10.088> – **journal paper**

33. M.J. Baldwin, R.P. Doerner, R. Causey, S.C. Luckhardt, *Recombination of Deuterium Atoms on the Surface of Molten Li-LiD*, J. Nucl. Mater. 2002, 306(1), 15–20. [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(02\)01232-1](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(02)01232-1) – **journal paper**

34. R. Schumacher, A. Weiss, *Hydrogen Solubility in the Liquid Alloys Lithium-Indium, Lithium-Lead, and Lithium-Tin*. Ber. Bunsenges, Phys. Chem. 1990, 94(6), 684–691. <https://doi.org/10.1002/bbpc.19900940612> – **journal paper**

35. B.G. del Rio, G. Sai Gautam, E.A. Carter, *Deuterium Addition to Liquid Li-Sn Alloys: Implications for Plasma-Facing Applications*, Nucl. Fusion 2020, 60, 016025. <https://doi.org/10.1088/1741-4326/ab523c> – journal paper

**И.Е. Кенжина*¹, Т.В. Кульсартов¹, Е.В. Чихрай¹, Ж.А. Заурбекова¹, Ю.В. Понкратов²,
А.Л. Козловский¹, А.Б. Елишенков¹, С.Қ. Әскербеков¹, А.У. Толенова¹**

¹Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық зерттеу техникалық университеті,
Алматы, Қазақстан

²«Атом энергиясы институты» филиалы, Қазақстан Республикасының Ұлттық ядролық
орталығы, Курчатов, Қазақстан

*Хат алмасуға арналған автор: kenzhina@physics.kz

Жоғары температурада сутек изотопы ортасындағы қалайы-литий қорытпасының әрекетін зерттеу: сорбция және десорбция анализі

Аңдатпа. Басқарылатын термоядролық синтездің тиімділігі едәуір дәрежеде бірінші қабырғаға, әсіресе плазмификалық қондырғылардағы диверторға әсер ететін қарқынды энергетикалық жүктемелерді басқаруға байланысты. Өзін-өзі реттейтін сұйық бетінің арқасында литий және қалайы сияқты сұйық металдар плазмаға қаратылған қатты материалдарға перспективалы балама болып табылады. Перспективалы кандидаттардың бірі оның құрамына кіретін компоненттердің пайдалы қасиеттерін біріктіретін қалайы-литий қорытпасы болып табылады. Осы зерттеуде жоғары температура жағдайында сутегі изотоптарының әсер етуі кезінде қалайы-литий қорытпасының сорбциясы мен десорбциясының сипаттамалары зерделенеді. Атап айтқанда, сутегі изотопы ортасындағы $\text{Sn}_{73}\text{Li}_{27}$ қорытпасының әрекетін зерттеу үшін адсорбция және температуралық-индукцияланған десорбция (ТДС) әдістерін қолдану арқылы эксперименттер жүргізілді. Сорбция бойынша эксперименттер 450°C-ден 600°C-ге дейінгі жоғары температуралық жағдайларда және құрылғы көлемінде дейтерийдің қалдық қысымының әртүрлі мәндерінде орындалды. ТДС бойынша эксперименттер қалайы-литий қорытпасынан сызықтық қыздыру жағдайында камерада бөлінетін газ ағындарын өлшеуді қамтыды. Қорытпадағы дейтерийдің тиімді ерігіштік константасының температураға тәуелділігі есептелді, бұл тәжірибе жағдайларына байланысты өзара әрекеттесу механизмдерінің күрделілігін орнатуға мүмкіндік берді. Нәтижелер қалайы-литий қорытпасы мен сутегі изотоптары арасындағы өзара әрекеттесу динамикасы туралы түсінік берді және материалдың жоғары температуралы ортадағы өнімділігі мен тұрақтылығын көрсетті.

Түйін сөздер: Қалайы-литий қорытпасы; дейтерий; сорбция; десорбция; синтездік реактор; плазмаға түрлендірілген компоненттер

**И.Е. Кенжина*¹, Т.В. Кульсартов¹, Е.В. Чихрай¹, Ж.А. Заурбекова¹, Ю.В. Понкратов²,
А.Л.Козловский¹, А.Б. Елишенков¹, С.Қ. Әскербеков¹, А.У. Толенова¹**

¹Казахский национальный исследовательский технический университет
им. К.И. Сатпаева, Алматы, Казахстан

²Филиал «Институт атомной энергии», Национальный ядерный центр Республики Казахстан,
Курчатов, Казахстан

*Автор для корреспонденции: kenzhina@physics.kz

Исследование поведения оловянно-литиевого сплава в условиях высокотемпературной среды с изотопами водорода: анализ сорбции и десорбции

Аннотация. Эффективность управляемого термоядерного синтеза в значительной степени зависит от управления интенсивными энергетическими нагрузками, воздействующими на первую стенку, особенно на дивертор в плазмозфизических установках. Благодаря своей саморегулирующейся жидкой поверхности жидкие металлы, такие как литий и олово, представляют собой многообещающую альтернативу твердым материалам, обращенным к плазме. Одним из перспективных кандидатов является оловянно-литиевый сплав, который, как ожидается, будет сочетать в себе полезные свойства компонентов, входящих в его состав. В настоящем исследовании изучаются характеристики сорбции и десорбции оловянно-литиевого сплава при воздействии на него изотопов водорода в условиях высоких тепловых нагрузок. В частности, были проведены эксперименты с использованием сплава $\text{Sn}_{73}\text{Li}_{27}$ с применением методов адсорбции и температурно-индуцированной десорбции (ТДС) для изучения его поведения. Эксперименты по сорбции выполнялись в высокотемпературных условиях от 450°C до 600°C и при различных значениях остаточного давления дейтерия в объеме устройства. Эксперименты по ТДС включали измерение газовых потоков, выделяющихся из оловянно-литиевого сплава в откачанную камеру в условиях линейного нагрева. Была рассчитана температурная зависимость эффективной константы растворимости дейтерия в сплаве, что позволило установить сложность механизмов взаимодействия, зависящих от условий эксперимента. Полученные результаты дают представление о динамике взаимодействия между оловянно-литиевым сплавом и изотопами водорода, а также подчеркивают эффективность и устойчивость материала в высокотемпературных средах.

Ключевые слова: Оловянно-литиевый сплав; дейтерий; сорбция; десорбция; термо-ядерный реактор; плазма-обращенные компоненты

References

1. F. Romanelli, *Fusion energy*, EPJ Web Conf, 2020, 246, 00013
2. E. Peluso, E. Pakhomova, M. Gelfusa, *New Challenges in Nuclear Fusion Reactors: From Data Analysis to Materials and Manufacturing*, Appl. Sci. 2023, 13, 6240. <https://doi.org/10.3390/app13106240>
3. S. Brezinsek et al., *Plasma–Wall Interaction Studies within the EUROfusion Consortium: Progress on Plasma-Facing Components Development and Qualification*, Nucl. Fusion 2017, 57, 116041. <https://doi.org/10.1088/1741-4326/aa796e>

4. G. Dose, S. Roccella, F. Romanelli, *Engineering of a FGM Interlayer to Reduce the Thermal Stresses Inside the PFCs*, Appl. Sci. 2022, 12, 10215. <https://doi.org/10.3390/app122010215>
5. M. Bilal, K. Ahmad, M.T. Saleem et al., *Recent Progress on Liquid Metal Use as Plasma Facing Component and Vapor Shielding of High Heat Flux*, Rev. Mod. Plasma Phys. 2022, 6, 9. <https://doi.org/10.1007/s41614-022-00070-8>
6. F.L. Tabarés, *Present Status of Liquid Metal Research for a Fusion Reactor*, Plasma Phys. Control. Fusion 2016, 58, 014014. <https://doi.org/10.1088/0741-3335/58/1/014014>
7. F.L. Tabarés, E. Oyarzabal, A.B. Martin-Rojo, D. Tafalla, A. de Castro, A. Soletto, *Reactor Plasma Facing Component Designs Based on Liquid Metal Concepts Supported in Porous Systems*, Nucl. Fusion 2017, 57, 016029. <https://doi.org/10.1088/0029-5515/57/1/016029>
8. D. Alegre et al., *Design and Testing of Advanced Liquid Metal Targets for DEMO Divertor: The OLMAT Project*, J. Fusion Energy 2020, 39, 411–420. <https://doi.org/10.1007/s10894-020-00254-5>
10. T.W. Morgan, A. Vertkov, K. Bystrov, I. Lyublinski, J.W. Genuit, G. Mazzitelli, *Power Handling of a Liquid-Metal Based CPS Structure under High Steady-State Heat and Particle Fluxes*, Nucl. Mater. Energy 2017, 12, 210–215. <https://doi.org/10.1016/j.nme.2017.01.017>
11. P.C. Stangeby, E.A. Unterberg, J.W. Davis, T. Abrams, A. Bortolon, I. Bykov, D. Donovan, H.Y. Guo, R. Kolasinski, A.W. Leonard, J.H. Nichols, D.L. Rudakov, G. Sinclair, D.M. Thomas, J.G. Watkins, *Developing Solid-Surface Plasma Facing Components for Pilot Plants and Reactors with Replenishable Wall Claddings and Continuous Surface Conditioning. Part A: Concepts and Questions*, Plasma Phys. Control. Fusion 2022, 64, 055018. <https://doi.org/10.1088/1361-6587/ac5a7c>
12. G.G. van Eden, T.W. Morgan, D.U.B. Aussems, M.A. van den Berg, K. Bystrov, M.C.M. van de Sanden, *Self-Regulated Plasma Heat Flux Mitigation Due to Liquid Sn Vapor Shielding*, Phys. Rev. Lett. 2016, 116, 135002. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.135002>
13. G. Mazzitelli et al., *Experiments on the Frascati Tokamak Upgrade with a Liquid Tin Limiter*, Nucl. Fusion 2019, 59, 096004. <https://doi.org/10.1088/1741-4326/ab1d70>
14. M.A. Fütterer, G. Aiello, F. Barbier, L. Giancarli, Y. Poitevin, P. Sardain, J. Szczepanski, A. Li Puma, G. Ruvutuso, G. Vella, *On the Use of Tin–Lithium Alloys as Breeder Material for Blankets of Fusion Power Plants*, J. Nucl. Mater. 2000, 283–287 (Part 2), 1375–1379. [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(00\)00124-0](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(00)00124-0)
15. A. de Castro, C. Moynihan, S. Stemmley, M. Szott, D. Andruczyk, D.N. Ruzic, *Exploration of Sn70Li30 Alloy as a Possible Material for Flowing Liquid Metal Plasma Facing Components*, Nucl. Mater. Energy 2020, 25, 100829. <https://doi.org/10.1016/j.nme.2020.100829>
16. V. PericoliRidolfini, P. Chmielewski, I. Ivanova-Stanik, M. Poradziński, R. Zagórski, R. Ambrosino, F. Crisanti, *Comparison Between Liquid Lithium and Liquid Tin Targets in Reactor-Relevant Conditions for DEMO and I-DTT*, Phys. Plasmas 2020, 27, 112506. <https://doi.org/10.1063/5.0012743>
17. R.A. Anderl, D.D. Jenson, G.F. Kessinger, *Vaporization Properties of the Sn–25 at.% Li Alloy*, J. Nucl. Mater. 2002, 307–311, Part 1, 739–742. [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(02\)00975-3](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(02)00975-3)
18. T.D. Rognlien, M.E. Rensink, *Interactions Between Liquid-Wall Vapor and Edge Plasmas*, J. Nucl. Mater. 2001, 290–293, 312–316. [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(00\)00575-4](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(00)00575-4)
19. V.P. Krasin, S.I. Soyutstova, *Quantitative Evaluation of Thermodynamic Parameters of Li-Sn Alloys Related to Their Use in Fusion Reactor*, J. Nucl. Mater. 2018, 505, 193–199. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2018.04.008>

20. V. Kvona, E. Oyarzabal, E. Zeothout, A.B. Martin-Rojo, T.W. Morgan, F.L. Tabares, *Secondary Electron Emission of Tin and Tin-Lithium under Low Energy Helium Plasma Exposure*, Nucl. Mater. Energy 2017, 13, 21–27. <https://doi.org/10.1016/j.nme.2017.09.005>
21. J.P.S. Lourerio, F.L. Tabares, H. Fernandes, C. Silva, R. Gomes, E. Alves, R. Mateus, T. Pereira, H. Alves, H. Figueiredo, *Behavior of Liquid Li-Sn Alloy as Plasma Facing Material on ISTTOK*, Fusion Eng. Des. 2017, 117, 208–211. <https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2016.12.031>
22. J.P.S. Loureiro, H. Fernandes, F.L. Tabarés, G. Mazzitelli, C. Silva, R. Gomes, E. Alves, R. Mateus, T. Pereira, H. Figueiredo, H. Alves, *Deuterium Retention in Tin (Sn) and Lithium-Tin (Li-Sn) Samples Exposed to ISTTOK Plasmas*, Nucl. Mater. Energy 2017, 12, 709–713. <https://doi.org/10.1016/j.nme.2016.12.026>
23. F.L. Tabares, E. Oyarzabal, A.B. Martin-Rojo, D. Tafalla, A. de Costa, F. Medina, M.A. Ochando, B. Zurro, K. McCarthy, TJ-II Team, *Experimental Tests of Li-Sn Alloys as Potential Liquid Metal for the Divertor Target in a Fusion Reactor*, Nucl. Mater. Energy 2017, 12, 1368–1373. <https://doi.org/10.1016/j.nme.2016.11.026>
24. F.L. Tabarés, E. Oyarzábal, D. Tafalla, A.B. Martín-Rojo, M.A. Ochando, F. Medina, K.J. McCarthy, B. Zurro, B. López-Miranda, I. Pastor, TJ-II Team, *Generation and Transport of Atomic Lithium During the Exposure of Liquid Metals to Hot Plasmas in TJ-II*, Nucl. Mater. Energy 2018, 17, 314–319. <https://doi.org/10.1016/j.nme.2018.11.019>
25. A. Vertkov, I. Lyublinski, M. Zharkov, G. Mazzitelli, M.L. Apicella, M. Iafrati, *Liquid Tin Limiter for FTU Tokamak*, Fusion Eng. Des. 2017, 117, 130–134. <https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2017.01.041>
26. I. Tazhibayeva, Y. Ponkratov, I. Lyublinsky, Y. Gordienko, A. Vertkov, Y. Tulubayev, K. Samarkhanov, V. Bochkov, Y. Kozhakhmetov, N. Orazgaliyev, *Study of Liquid Tin-Lithium Alloy Interaction with Structural Materials of Fusion Reactor at High Temperatures*, Nucl. Mater. Energy 2022, 30, 101152. <https://doi.org/10.1016/j.nme.2022.101152>
27. Y.V. Ponkratov, K.K. Samarkhanov, V.V. Baklanov, Y.N. Gordienko, I.E. Kenzhina, V.S. Bochkov, Ye.Yu. Tulubayev, N.A. Orazgaliyev, E. Saparbek, *Investigation of the Interaction of Liquid Tin-Lithium Alloy with Austenitic Stainless Steel at High Temperatures*, Fusion Eng. Des. 2023, 191, 113560. <https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2023.113560>
28. V. Bochkov, Yu. Ponkratov, Yu. Gordienko, K. Samarkhanov, E. Tulubayev, E. Saparbek, N. Orazgaliyev, B. Orazymbekov, E. Aryngazy, *Experimental Studies on High-Temperature Corrosion Interaction of Tin-Lithium Alloy with Stainless Steel and Refractory Metals*, NNC RK Bulletin 2022, (4), 94–100. (In Russ.) <https://doi.org/10.52676/1729-7885-2022-4-94-100>
29. Yu.V. Ponkratov, K.K. Samarkhanov, V.V. Baklanov, V.S. Bochkov, I.A. Sokolov, A.Zh. Miniyazov, T.R. Tulenbergenov, I.E. Kenzhina, M.M. Begentayev, Ye.Yu. Tulubayev, O.S. Bukina, N.A. Orazgaliyev, E. Saparbek, *High-Temperature Test of Tin-Lithium CPS Under Deuterium Plasma Irradiation Conditions*, J. Nucl. Mater. 2023, 587, 154754. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2023.154754>
30. V. Bochkov, Y. Ponkratov, Y. Gordienko, K. Samarkhanov, Y. Tulubayev, T. Tulenbergenov, I. Sokolov, Y. Martynenko, *Development of a Methodology for Conducting Experiments with a Sample of Tin-Lithium Eutectic at a Plasma-Beam Installation*, Mater. Today: Proc. 2023, 81, Part 3, 1198–1203. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2022.11.431>
31. Y. Ponkratov, K. Samarkhanov, Y. Koyanbayev, Y. Baklanova, Y. Gordienko, Y. Tulubayev, Y. Martynenko, V. Bochkov, R. Sabitova, E. Saparbek, *Technique of Reactor Experiments of Tin-Lithium Alloy Interaction with Hydrogen Isotopes Under Neutron Irradiation Conditions*, Fusion Sci. Technol. 2024, pp. 1–10. <https://doi.org/10.1080/15361055.2024.2388421>

32. T. Kulsartov, I. Kenzhina, Yu. Ponkratov, Yu. Gordienko, Zh. Zaurbekova, K. Samarkhanov, S. Askerbekov, Ye.A. Kenzhin, A.B. Yelishenkov, *Investigation of the interaction of deuterium with Sn73Li27 tin-lithium alloy*, Nucl. Mater. Energy 2024, 41, 101825. <https://doi.org/10.1016/j.nme.2024.101825>
33. E. Oyarzabal, A.B. Martin-Rojo, F.L. Tabarés, *Laboratory Experiments of Uptake and Release of Hydrogen Isotopes in Liquid Lithium*, J. Nucl. Mater. 2015, 463, 1173–1176. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2014.10.088>
34. M.J. Baldwin, R.P. Doerner, R. Causey, S.C. Luckhardt, *Recombination of Deuterium Atoms on the Surface of Molten Li–LiD*, J. Nucl. Mater. 2002, 306(1), 15–20. [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(02\)01232-1](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(02)01232-1)
35. R. Schumacher, A. Weiss, *Hydrogen Solubility in the Liquid Alloys Lithium-Indium, Lithium-Lead, and Lithium-Tin*. Ber. Bunsenges, Phys. Chem. 1990, 94(6), 684–691. <https://doi.org/10.1002/bbpc.19900940612>
36. B.G. del Rio, G. Sai Gautam, E.A. Carter, *Deuterium Addition to Liquid Li–Sn Alloys: Implications for Plasma-Facing Applications*, Nucl. Fusion 2020, 60, 016025. <https://doi.org/10.1088/1741-4326/ab523c>

Information about the authors:

I.E. Kenzhina – corresponding author, PhD, leading researcher of the Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

T.V. Kulsartov – PhD, leading researcher of the Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

Ye.V. Chikhray – PhD, leading researcher of the Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

Zh.A. Zaurbekova – PhD student, researcher of the Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

Yu.V. Ponkratov – researcher of the Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

A.L. Kozlovskiy – PhD, leading researcher of the Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

A.B. Yelishenkov – researcher of the Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

S.K. Askerbekov – PhD, leading researcher of the Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

A.U. Tolonova – PhD student, researcher of the Satbayev University, Kazakhstan.

И.Е. Кенжина – автор для корреспонденции, PhD, ведущий научный сотрудник Казахского национального исследовательского технического университета им. К.И. Сатпаева, Алматы, Казахстан

Т.В. Кулсартов – PhD, ведущий научный сотрудник Казахского национального исследовательского технического университета им. К.И. Сатпаева, Алматы, Казахстан

Е.В. Чихрай – PhD, ведущий научный сотрудник Казахского национального исследовательского технического университета им. К.И. Сатпаева, Алматы, Казахстан

Ж.А. Заурбекова – PhD докторант, научный сотрудник Казахского национального исследовательского технического университета им. К.И. Сатпаева, Алматы, Казахстан

Ю.В. Понкратов – научный сотрудник Казахского национального исследовательского технического университета им. К.И. Сатпаева, Алматы, Казахстан

А.Л. Козловский – PhD, ведущий научный сотрудник Казахского национального исследовательского технического университета им. К.И. Сатпаева, Алматы, Казахстан

А.Б. Елишенков – научный сотрудник Казахского национального исследовательского технического университета им. К.И. Сатпаева, Алматы, Казахстан

С.Қ. Әскербеков – PhD, ведущий научный сотрудник Казахского национального исследовательского технического университета им. К.И. Сатпаева, Алматы, Казахстан

А.У. Толенова – PhD докторант, научный сотрудник Казахского национального исследовательского технического университета им. К.И. Сатпаева, Алматы, Казахстан.

И.Е. Кенжисина – хат-хабар авторы, PhD, Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық зерттеу техникалық университетінің жетекші ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан

Т.В. Құльсартов – PhD, Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық зерттеу техникалық университетінің жетекші ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан

Е.В. Чихрай – PhD, Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық зерттеу техникалық университетінің жетекші ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан

Ж.А. Заурбекова – PhD докторант, Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық зерттеу техникалық университетінің жетекші ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан

Ю.В. Понкратов – Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық зерттеу техникалық университетінің жетекші ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан

А.Л. Козловский – PhD, Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық зерттеу техникалық университетінің жетекші ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан

А.Б. Елишенков – Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық зерттеу техникалық университетінің жетекші ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан

С.Қ. Әскербеков – PhD, Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық зерттеу техникалық университетінің жетекші ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан

А.У. Толенова – PhD докторант, Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық зерттеу техникалық университетінің жетекші ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан



Copyright: © 2025 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



МРНТИ 29.15.01

Научная статья

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-150-1-186-203>

Применение трековых детекторов для измерения активности радона и торона в окружающей среде: обзор методов и результатов

Ж.О. Насилов¹, К.Ш. Жумадилов*¹, Ж.А. Байгазинов², Н. Нурсултанова¹,
А.И. Иванников³, В.Ф. Степаненко³, М. Хоши⁴, А.М.Андабаева¹

¹Международная кафедра ядерной физики, новых материалов и технологий, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

²АО «Парк ядерных технологий», Курчатов, Казахстан

³МРНЦ имени А.Ф. Цыба – филиала ФГБУ «НМИЦ радиологии», Обнинск, Россия

⁴Университет Хиросима, Хиросима, Япония

*Автор для корреспонденции: zhumadilovk@gmail.com

Аннотация. В данной статье представлен обзор применения трековых детекторов для измерения активности радона и торона в различных средах. Исследование охватывает ключевые аспекты метода: принципы работы, типы детекторов (CR-39, LR-115, Radon Eye Plus2, SSNTD), условия экспозиции и методы анализа. Рассмотрены современные исследования, включающие замеры активности радона в жилых помещениях, шахтах, пещерах, воде и почве, а также влияние различных геологических и климатических факторов на измерения. Показано, что CR-39 обладает высокой чувствительностью к низким концентрациям радона, что делает его предпочтительным для детальных исследований малых уровней загрязнения, тогда как LR-115 более эффективен для долгосрочного мониторинга благодаря его устойчивости к внешним воздействиям. Особое внимание уделено влиянию параметров окружающей среды (температуры, влажности, давления) и методам калибровки на точность результатов. Рассмотрены актуальные проблемы, связанные с интерпретацией данных, в том числе погрешности, обусловленные методами травления треков и визуализации результатов. Подчеркивается необходимость стандартизации методик измерения и перспективы автоматизации процессов анализа с использованием цифровых технологий. Результаты работы могут быть использованы при разработке стратегий радиационной безопасности, контроле уровня радона в жилых и промышленных зонах, а также в экологическом мониторинге. Предложены рекомендации по оптимальному применению трековых детекторов для оценки радиационных рисков и разработке более эффективных методов детектирования радона в различных средах.

Ключевые слова: Радон, трековые детекторы, CR-39, LR-115, RadonEye Plus2, SSNTD, калибровка детекторов

Поступила 7.02.2025. После доработки 24.02.2025. Принята к печати 25.02.2025. Доступно онлайн 25.03.2025

¹ *автор для корреспонденции

1. Введение

Радон – считается как радиоактивный газ, который не взаимодействует с другими элементами на химическом уровне. Однако его присутствие способно влиять на физические характеристики окружающей среды. Радон (^{222}Rn) этот газ является продуктом распада урана (^{238}U) а его наиболее значимый изотоп обладает периодом полураспада 3,825 дня. Благодаря этому радон успевает перемещаться на значительные расстояния и накапливаться в замкнутых пространствах, таких как помещения. Радон (^{222}Rn) и его короткоживущие продукты распада (^{218}Po , ^{214}Pb , ^{214}Bi и ^{214}Po) в жилых помещениях радон считается главным источником облучения населения, связанного с естественной радиоактивностью, обеспечивая почти 50% средней глобальной эффективной дозы радиационного воздействия [1]. Интерес к изучению радона связан прежде всего с его способностью накапливаться в помещениях и оказывать вредное воздействие на организм человека. При вдыхании этот газ и его радиоактивные дочерние продукты могут серьезно повредить дыхательную и пищеварительную системы. Наибольшему риску подвергаются органы дыхания, поскольку радиоактивные частицы оседают в легких, увеличивая вероятность заболеваний. Именно поэтому радон считается вторым после курения фактором риска развития рака легких [2]. Концентрация радона определяется множеством факторов, среди которых содержание радия в грунте, метеорологические условия, а также интенсивность его выделения из различных типов почв и горных пород [3, 4].

Уровень концентрации радона в почве определяется содержанием радий, а также интенсивностью излучения, исходящего от почв и горных пород [5]. Среди множества факторов, влияющих на выделение радона, ключевую роль играет содержание радия в почве или коренной породе. Однако уровень воздействия радона значительно различается в зависимости от местоположения, главным образом из-за различий в скорости его высвобождения из грунта. Исследования этой скорости имеют большое значение, поскольку они помогают определить вклад различных материалов в общую концентрацию радона, фиксируемую внутри жилых помещений [6-7]. Радон и его дочерние продукты могут высвобождаться из строительных материалов, которые являются одним из источников его поступления в жилые помещения. Изучение скорости выделения радона из различных строительных материалов играет важную роль в оценке их вклада в общую концентрацию этого газа внутри зданий. Исследования показали, что со временем интенсивность выделения радона снижается, что связано с возрастом постройки [8-9].

Высокая концентрация радона в воздухе жилых и рабочих помещений представляет серьезную опасность для здоровья человека. При вдыхании радон и продукты его распада оседают в легких, облучая ткани и повышая риск развития рака легких. По данным Всемирной организации здравоохранения (ВОЗ), радон является второй по значимости причиной рака легких после курения.

Цель данной обзорной статьи – проанализировать применение трековых детекторов для оценки активности радона в различных средах, сравнить результаты разных

исследований, выявить факторы, влияющие на точность измерений, и оценить перспективы развития этого метода.

За последние годы было разработано множество методов для обнаружения и количественного анализа радона и его дочерних продуктов. Однако универсального метода, подходящего для всех типов измерений, не существует. Оптимальный выбор зависит от целей исследования, требуемой информации и доступного оборудования. Например, для оценки воздействия радона на население необходимы длительные комплексные измерения в больших масштабах, тогда как изучение его концентрации в почве в зависимости от экологических и геофизических факторов требует непрерывного мониторинга.

Трековые детекторы – это пассивные детекторы, которые регистрируют альфа-частицы, испускаемые радоном и его дочерними продуктами распада (полоний-218 и полоний-214). Альфа-частицы оставляют микроскопические треки (следы) в специальном материале детектора. После экспозиции детектор обрабатывается химическим способом, и треки становятся видимыми под микроскопом. Плотность треков пропорциональна концентрации радона в воздухе.

2. Материалы и методы

В последние годы было создано множество методов для выявления и количественного анализа радона и его дочерних продуктов. Однако универсального подхода, способного удовлетворить всем требованиям различных видов измерений, не существует. Выбор наиболее подходящего метода зависит от конкретной необходимой информации, типа радоновых исследований и стоимости аппаратуры. Например, для измерения воздействия радона на население необходимо большое количество долгосрочных комплексных измерений, в то же время исследование зависимости концентрации радона в почве от экологических и геофизических факторов требует его непрерывного мониторинга.

Краткосрочные измерения радона

Краткосрочные измерения, продолжающиеся от нескольких дней до одного месяца, особенно эффективны для скрининговых исследований, направленных на выявление домов с повышенным уровнем радона, а также для анализа географических вариаций его концентрации. Когда такие краткосрочные измерения используются для оценки воздействия радона в жилищах, необходимо особое внимание при определении протокола воздействия. Для этой цели наиболее привлекательными методами являются активированные угли, электретные ионные камеры (EIC) и твердотельные ядерные трековые детекторы (SSNTD). Предпринимались различные попытки повысить эффективность устройств с активированным углем, в частности путем использования диффузионного барьера для снижения влияния влажности. Что касается электретных ионных камер (EIC), их основным ограничением является высокая чувствительность к гамма-излучению, которую, однако, можно легко исправить любыми средствами, включая дополнительную электретную ионную камеру, защищенную от радона.

SSNTD не обладают эффективной чувствительностью для краткосрочных измерений. Это ограничение в основном связано с небольшой обычно учитываемой площадью. Другой альфа-трековый детектор, не чувствительный к выходу пластины, изготовлен из поликарбонат может эффективно использоваться в качестве открытого детектора, обеспечивая удобство в применении.

Долгосрочное измерение радона

Наиболее достоверные данные о воздействии радона в различных средах обеспечивают долгосрочные интегрирующие измерения, проводимые в течение периода до одного года. Чаще всего для этих целей применяются детекторы SSNTD и электретные детекторы, которые могут использоваться как в открытом виде, так и в сочетании с закрытыми пробоотборниками радона.

Наиболее распространенной конфигурацией закрытого пробоотборника является камера с пористым фильтром, таким как стекловолокно, водоотталкивающая ткань или микропористый бумажный фильтр, а также одним или несколькими SSNTD. Эти фильтры предназначены для задержки внешних дочерних продуктов радона, однако они не позволяют различать газ торон и водяной пар.

Пассивное и активное измерение

Пассивные методы измерения радона и его дочерних продуктов основаны на регистрации радиоактивного распада этих веществ..

Существует несколько подходов к классификации систем измерения радона, разделяющих их на активные и пассивные типы. Ниже представлена классификация, позволяющая избежать возможной путаницы:

1. Активные методы и приборы

Отбор проб радона и его дочерних продуктов в активных методах осуществляется принудительно с применением источника питания, например насосов.

2. Пассивные приборы и методы. Отбор проб радона и его дочерних продуктов осуществляется за счет естественной диффузии, без использования источников питания.

Дополнительно системы измерения могут классифицироваться по типу применяемого детектора излучения.

– Детекторы с откликом в реальном времени – устройства, обеспечивающие мгновенный анализ концентрации радона, чаще всего основаны на использовании сцинтилляционных материалов или полупроводниковых сенсоров.

– Детекторы без отклика в реальном времени – устройства, накапливающие информацию о концентрации радона в течение определенного времени, такие как трековые детекторы, детекторы на основе активированного угля и электретные детекторы.

На практике мониторинг радона и его дочерних продуктов может осуществляться с использованием различных комбинаций активных или пассивных систем отбора проб, а также детекторов с откликом в реальном времени или без него.

Способы измерения концентрации радона

Существуют различные методы измерения концентрации радона, применяемые в разных сферах. Уровень радона в воздухе во многом определяется рядом факторов,

главным образом вентиляцией. Для его измерения используются различные детекторы, которые могут быть помещены в скважину. Среди них – твердотельные ядерные трековые детекторы, а также дочерние коллекторы, такие как альфа-карта. Кроме того, применяются электретные детекторы, термолюминесцентные люминофоры, а также твердотельные электронные детекторы, включая фотодиоды и газопоглотители.

В исследованиях, включенных в наш анализ, использовались несколько основных типа трековых детекторов.

Для получения достоверных результатов важно соблюдать определенные условия экспозиции детекторов.

Время экспозиции: обычно составляет от нескольких недель до нескольких месяцев, в зависимости от ожидаемой концентрации радона.

Температура: трековые детекторы чувствительны к температуре, поэтому важно учитывать температурные условия в помещении, где проводятся измерения.

Влажность: высокая влажность может повлиять на чувствительность детекторов, поэтому в некоторых случаях используются специальные защитные корпуса.

Для перевода плотности треков в единицы активности радона ($\text{Бк}/\text{м}^3$) необходима калибровка детекторов. Калибровка проводится в специальных радоновых камерах с известной концентрацией радона.

Полностью пассивные устройства могут эффективно использоваться для измерения только радона. В этих устройствах радон проникает через фильтр или мембрану в корпус детектора, где его излучение регистрируется непосредственно пассивными детекторами, фиксирующими дочерние продукты распада радона.

Для измерения радона могут применяться различные типы пассивных детекторов, включая термолюминесцентные материалы, электретные устройства и твердотельные ядерные трековые детекторы (SSNTD). В рамках крупномасштабных исследований SSNTD обладают наилучшими характеристиками для мониторинга радона и широко используются в практике. Наиболее распространённые трековые детекторы, применяемые для регистрации альфа-частиц, включают нитрат целлюлозы (чаще всего красный LR-115), поликарбонатные материалы (Makrofol или Lexan), а также CR-39. Метод детектирования с использованием CR-39 основан на диффузии воздуха в держатель, где альфа-частицы фиксируются твердотельным ядерным трековым детектором [10].

Метод травления треков

Метод травления треков вполне подходит для обнаружения радона в почвенном газе из-за его незначительного фона ложных сигналов, низкой стоимости, прочности и природы как интегрирующего измерения. Детекторная сборка находится в вертикальном положении около дна отверстия бура, и альфа-частицы распада радона попадают на пленки детектора, оставляя их испытания на радиационное повреждение. Пленки LR-115 могут извлекаться через неделю или месяц, в зависимости от условий эксперимента. Затем они подвергаются травлению в растворе 2,5 N NaOH при постоянной температуре 98 °C в течение 2 часов. В результате на плёнке формируются альфа-треки, которые проявляются в виде круглых или конических пятен. При длительном травлении эти следы превращаются в сквозные отверстия.

Пятна или отверстия треков будут подсчитаны с помощью бинокулярного микроскопа – Подсчет треков: Метод подсчета треков (вручную или с помощью автоматизированных систем) также может влиять на результаты.

Калибровка детекторов:

– Радоновые камеры: Калибровка детекторов проводится в радоновых камерах с известной концентрацией радона. Точность калибровки может влиять на точность измерений.

3. Результаты и обсуждение

В обзор включены исследования, посвященные измерению активности радона в различных условиях, выполненные с использованием разнообразных типов детекторов. Основной целью было сопоставление диапазонов активности радона, зарегистрированных в жилых помещениях, лабораторных условиях, а также в специфических средах, таких как пещеры или почвенный газ. Полученные данные демонстрируют значительную вариативность концентраций радона, что подчёркивает важность выбора подходящего метода мониторинга.

CR-39 является одним из наиболее распространённых типов пассивных детекторов, применяемых для долгосрочного мониторинга радона. Этот детектор используется в условиях с изменяющимися уровнями радона, включая жилые помещения, калибровочные камеры и пещеры. Например, в исследовании Jabbar H.J. и др. концентрация радона составила $269,51 \text{ Бк/м}^3$ в калибровочной камере, тогда как в жилых домах Великобритании [11], по данным Kouroukla E. и др. средняя активность составила 20 Бк/м^3 [12]. Исследование Mohammadmad A. и др. проведённое в 78 домах Мешхеда (Иран), выявило диапазон концентраций от 50 до 376 Бк/м^3 , что значительно превышает мировые стандарты [13]. В специфических условиях, таких как пещеры, концентрация радона может достигать 1489 Бк/м^3 , как это показано в исследовании Panlaqui A. и др. на Филиппинах [14].

Детекторы RADUET, которые основаны на технологии CR-39, применяются для одновременного мониторинга радона (^{222}Rn) и торона (^{220}Rn). Исследования Atangana V. и др. показали, что средняя активность радона в жилых домах составляла 32 Бк/м^3 (диапазон от 19 до 62 Бк/м^3) [15]. В многоквартирных домах Дакки (Бангладеш) уровень радона варьировался от 3 до 20 Бк/м^3 , что демонстрирует низкие значения, безопасные для здоровья [16]. В то же время, исследование F. Omonya Wanjala в глиняных домах деревни Ортом (Кения) выявило более высокую активность – до 72 Бк/м^3 [17]. RADUET также использовался для изучения концентраций в Мешхеде, где зарегистрированы значения от 50 до 376 Бк/м^3 [18].

RadonEye, активный детектор для краткосрочного мониторинга, показал высокую точность в лабораторных условиях. Например, в радоновой камере Великобритании, по данным I. Dimitrova. И др. концентрация варьировалась от 400 до 1800 Бк/м^3 [19]. Это демонстрирует надёжность устройства при измерениях в условиях высоких уровней радона. В исследовании Pam W. и др. в Канаде бытовые детекторы, включая RadonEye,

использовались для оценки точности при концентрации 200 Бк/м³ [20]. Результаты показали, что бытовые устройства менее точны по сравнению с профессиональными, но остаются полезными для общего мониторинга.

LR-115, чувствительный пассивный детектор, используется для оценки радона в жилых домах и при сезонных вариациях. В деревне Буддонитанда (Индия) исследование G. Suman. и др. выявило среднюю активность радона 94 Бк/м³, причём максимальные значения достигали 675 Бк/м³ зимой [21]. Ајау К. и др. изучали 146 домов в Удхампуре (Индия), где средняя активность составила 29 ± 9 Бк/м³. Это исследование подчеркнуло связь концентраций радона с вентиляцией и геологическими условиями [22].

Электростатические детекторы также находят применение для массового мониторинга благодаря своей простоте и надёжности. Jon Miles в своих исследованиях показал, что активность радона в жилых помещениях варьировалась от 5 до 65 Бк/м³ [23]. Эти устройства эффективно исключают влияние радона-220, что делает их пригодными для длительного использования.

Другие профессиональные детекторы, такие как Radtrak2, Duotrak и RD200M, также использовались для изучения активности радона. В исследованиях Joan F.R. и др. в условиях мобильной камеры с уранинитом активность достигала 3000 Бк/м³ [24]. Diego V. и др. применяли RD200M для прогнозирования концентрации радона в жилых домах, где было зарегистрировано значение 369 Бк/м³ [25]. Применение машинного обучения в таких исследованиях открывает перспективы для улучшения методов мониторинга.

Рисунок 1. Сравнение активности радона в разных исследованиях

Диапазоны активности радона, зарегистрированные в различных исследованиях, демонстрируют значительную вариативность:

- Минимальная зарегистрированная активность составила 3 Бк/м³ в жилых домах Дакки (Бангладеш) при использовании детектора RADUET.
- Максимальная активность достигла 3000 Бк/м³ в экспериментах с использованием профессиональных датчиков, таких как Radtrak2, в радоновой камере.

Таблица 1. Сравнение по чувствительности и диапазону измерений

Тип детектора	Чувствительность к радону	Чувствительность к торону	Диапазон измерений (Бк/м ³)	Примечания
CR-39	Средняя	Высокая	0,00434–1000	Долговременные исследования
RadonEye Plus2	Высокая	Низкая	50–1800	Точные результаты в реальном времени
Safety Siren Pro	Средняя	Низкая	До 200	Для бытового использования

Airthings Wave	Средняя	Средняя	200–1000	Чувствителен к изменениям влажности
RADUET	Средняя	Средняя	50–394	Подходит для долгосрочного анализа

Сравнительный анализ детекторов радона показывает, что RadonEye Plus2 обладает наибольшей чувствительностью и широким диапазоном измерений (50-1800 Бк/м³), что делает его оптимальным для точного мониторинга в реальном времени. В свою очередь, CR-39 демонстрирует высокую чувствительность к торону и способен фиксировать сверхнизкие концентрации радона (до 0,00434 Бк/м³), что делает его наиболее подходящим для долгосрочных исследований.

RADUET имеет сбалансированную чувствительность как к радону, так и к торону, а его диапазон измерений (50-394 Бк/м³) позволяет эффективно использовать его в долгосрочных исследованиях. Airthings Wave и Safety Siren Pro являются детекторами средней чувствительности, ориентированными на бытовое использование, но Airthings Wave чувствителен к изменениям влажности, что может повлиять на точность измерений.

В целом, выбор детектора зависит от целей исследования:

Для научных исследований и точных измерений в реальном времени лучше подходит RadonEye Plus2.

Для долговременного мониторинга радона и торона в различных условиях оптимален CR-39.

RADUET – универсальный вариант для изучения как радона, так и торона в среднем диапазоне концентраций.

Бытовые детекторы (Airthings Wave и Safety Siren Pro) подходят для повседневного мониторинга, но их точность ниже по сравнению с профессиональными устройствами.

Таблица 2. Сравнение по эксплуатационным характеристикам

Критерий	Трековые детекторы (CR-39, LR-115)	Электронные детекторы (RadonEye)	Бытовые датчики (Airthings)
Стоимость	Низкая	Средняя	Средняя/высокая
Точность	Средняя	Высокая	Средняя
Потребность в питании	Не требуется	Требуется	Требуется
Временная динамика	Низкая	Высокая	Средняя
Простота в использовании	Средняя	Высокая	Очень высокая

Различные типы детекторов радона обладают своими преимуществами и ограничениями в зависимости от условий эксплуатации и целей использования.

Трековые детекторы (CR-39, LR-115) обладают низкой стоимостью и не требуют питания, что делает их удобными для долговременного мониторинга. Однако они

имеют среднюю точность и низкую временную динамику, так как результаты требуют обработки после длительного периода экспозиции.

Электронные детекторы (RadonEye) обеспечивают высокую точность и быструю реакцию на изменения концентрации радона, что делает их оптимальными для краткосрочных измерений и оперативного контроля. Однако они требуют постоянного питания и имеют более высокую стоимость по сравнению с трековыми детекторами.

Бытовые датчики (Airthings) отличаются максимальной простотой в использовании и подходят для непрерывного мониторинга радона в домашних условиях. Они не требуют специальной подготовки для работы, но обладают средней точностью и чувствительностью к внешним факторам, таким как температура и влажность. Их стоимость может варьироваться от средней до высокой в зависимости от модели и функциональности.

Таблица 3. Влияние внешних условий на работу детекторов

Тип детектора	Влияние влажности	Влияние температуры	Требования к калибровке	Защищенность от загрязнений
CR-39	Умеренное	Незначительное	Не требуется	Умеренная
RadonEye Plus2	Низкое	Незначительное	Требуется	Высокая
Airthings Wave	Высокое	Умеренное	Минимальное	Низкая
RADUET	Умеренное	Незначительное	Требуется	Средняя

Трековые детекторы (CR-39, RADUET) устойчивы к изменениям внешних условий, но требуют защиты от загрязнений.

RadonEye Plus2 наиболее стабилен при изменении окружающей среды, но нуждается в регулярной калибровке.

Airthings Wave удобен в использовании, но его точность может снижаться при высокой влажности и загрязнении воздуха.

Как было показано в предыдущем разделе, результаты измерений активности радона с помощью трековых детекторов могут варьироваться в зависимости от ряда факторов, таких как тип детектора, условия экспозиции, методы анализа и калибровка детекторов.

– CR-39 и LR-115: Наши результаты показывают, что средняя активность радона, измеренная с помощью CR-39, значительно ниже, чем измеренная с помощью LR-115. Это может быть связано с тем, что CR-39 обладает большей чувствительностью к радону, чем LR-115.

– Другие типы детекторов: В некоторых исследованиях использовались другие типы трековых детекторов, которые также могут иметь различную чувствительность к радону.

Время экспозиции: Чем дольше время экспозиции, тем больше треков образуется на детекторе и тем выше измеренная активность радона.

Температура и влажность: Температура и влажность могут влиять на чувствительность трековых детекторов. Например, высокая влажность может привести к снижению чувствительности.

Место проведения измерений: Концентрация радона в воздухе может варьироваться в зависимости от места проведения измерений (жилые помещения, шахты, пещеры).

Преимущества и недостатки трековых детекторов

Преимущества:

– Простота использования: Трековые детекторы не требуют специальных навыков или оборудования для проведения измерений.

– Компактность и портативность: Трековые детекторы небольшие и легкие, что позволяет использовать их в труднодоступных местах.

– Низкая стоимость: Трековые детекторы являются относительно недорогим методом измерения радона.

– Долгосрочный мониторинг: Трековые детекторы могут быть экспонированы в течение длительного времени, что позволяет проводить долгосрочный мониторинг радона.

Недостатки:

– Чувствительность к условиям окружающей среды: На результаты измерений могут влиять температура, влажность и другие факторы окружающей среды.

– Необходимость химической обработки: Трековые детекторы требуют химической обработки (травления) для проявления треков.

– Ограниченная точность: Точность измерений с помощью трековых детекторов может быть ниже, чем у некоторых других методов.

4. Выводы

В данной обзорной статье мы проанализировали применение трековых детекторов для оценки активности радона в различных средах. Были рассмотрены различные типы детекторов, условия экспозиции, методы анализа и факторы, влияющие на точность измерений.

Результаты анализа показывают, что выбор детектора определяется задачами исследования и условиями измерений. CR-39 и RADUET наиболее эффективны для долгосрочного мониторинга радона в диапазоне 10–10 000 Бк/м³ с чувствительностью 0,5-1 трек/см² на 100 Бк·ч/м³ и применяются для долгосрочного мониторинга, тогда как RadonEye предпочтителен для лабораторных измерений, так как имеет быстрый отклик (10-30 мин) и высокую чувствительность от 10 Бк/м³. Его точность составляет ±10% при концентрации выше 50 Бк/м³, что делает его удобным для оперативного мониторинга. LR-115 оказался полезным для изучения сезонных вариаций радона и торона, особенно в регионах с высоким риском облучения. Его чувствительность составляет 1–2 трека/см² на 100 Бк·ч/м³, а диапазон измерений – от 40 до 5000 Бк/м³. Электростатические детекторы остаются простым и надёжным инструментом для широкомасштабных исследований в жилых помещениях. Они позволяют измерять концентрацию радона в диапазоне 30-

3000 Бк/м³ с точностью $\pm 15\%$ и не требуют сложной обработки данных. Такой подход к выбору детекторов позволяет получить более точные данные о концентрации радона, что крайне важно для оценки экологических рисков и разработки стратегий по снижению воздействия радона на здоровье населения.

– Трековые детекторы являются эффективным и доступным методом измерения активности радона.

– Чувствительность детекторов, условия экспозиции, методы анализа и калибровка могут влиять на результаты измерений.

– CR-39 и LR-115 являются наиболее распространенными типами трековых детекторов, причем CR-39 обычно обладает большей чувствительностью к радону.

– Трековые детекторы могут быть использованы для долгосрочного мониторинга радона в жилых помещениях, на рабочих местах, в почве и воде.

Перспективы развития метода:

– Повышение точности: Совершенствование методов анализа и разработка новых материалов для трековых детекторов могут привести к повышению точности измерений.

– Автоматизация: Автоматизация процесса анализа трековых детекторов может упростить и ускорить процесс измерения радона.

– Миниатюризация: Создание миниатюрных трековых детекторов может расширить область их применения, например, для индивидуального мониторинга.

– Новые материалы: Исследование новых материалов для трековых детекторов может привести к созданию более чувствительных и эффективных детекторов.

В целом, трековые детекторы являются перспективным методом измерения радона, который имеет большой потенциал для дальнейшего развития.

Вклад авторов

Ж.О. Насилов: написание текста и утверждение окончательного варианта статьи для публикации.

К.Ш. Жумадилов: написание текста и критический анализ его содержания.

Ж.А. Байгазинов: написание – рецензирование и редактирование.

Н. Нурсултанова, А.М. Андабаев – написание текста и его содержание критический обзор.

В.Ф. Степаненко, А.И. Иванников, М. Хоши: написание текста и критика его содержания.

Благодарности

Данная работа выполнена при финансовой поддержке по проекту Грантового финансирования Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (ИРН AP19678341, договор № 269/23-25 от 03.08.2023), а также в рамках программно-целевого финансирования Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (ИРН BR27101493, решение ННС протокол заседания №8 от 06.12.2024).

Список литературы

1. НКДАР ООН, *Научный комитет ООН по действию атомной радиации, Источники и действие ионизирующего излучения*, Том I Приложение А: Методологии оценки доз, Организация Объединенных Наций, Нью-Йорк, 2000 – **отчет**
2. МКРЗ, *Международная комиссия по радиологической защите от радона-222 дома и на работе*, Отчет МКРЗ 65, Пергамон, Оксфорд, 1993 – **отчет**
3. Х. Идрисс, И. Салих, А.С. Абдулазиз, М.Ю. Абдельгалил, С.А. Салих, А.М. Хасан, М.А. Эл.Тахир, М.М.О. Ахамед, *Исследование радона в почвенном газе, микроэлементов и климатических параметров вокруг штата Южный Кордофан*, Судан, *Науки об окружающей среде Земли*, 2014;72(2):335-339 – **журнал**
4. В.В. Назарофф, А.В. Неро-младший, *Радон и продукты его распада в воздухе помещений*, John Wiley and Sons, Нью-Йорк, 1988 - **книга**
5. Г. Акерблом, К. Вильсон, *Радон-геологические аспекты экологической проблемы*. Отчет № 30, Геологическая служба Швеции, Уппсала, 1982 – **отчет**
6. А.Е.А. Elzain, *Определение концентрации радия и скорости выделения радона в образцах почвы с использованием CR-39*, *Достижения в прикладных научных исследованиях*, 2015;6(2):92-102 – **журнал**
7. А.Е.А. Elzain, Y.Sh. Mohammed, Kh.Sh. Mohamed, A.M. Mohamed-Ali, *Исследование концентрации радия и скорости выделения радона в образцах почвы из города Кассала*, Судан, с использованием SSNTD, *Американский журнал физики и приложений*, 2016;4(4):84-89 – **журнал**
8. Ф. Абу-Джарад, *Применение детектора ядерного трекового травления для измерений, связанных с радоном*, *Международный журнал по применению радиации и приборостроению*, часть D, *Ядерные треки и радиационные измерения*, 1988;15(1):525-534 – **журнал**
9. К.Н. Ю, Т.Ф. Чан, Э.М. Янг, *Изменение скорости выделения радона с поверхностей зданий разного возраста*, *Health Physics*, 1995;68(5):716-718 – **журнал**
10. М. Беоццо и др., *Измерение уровня радона в помещениях в районе Болоньи*, *Труды 15-й Международной конференции по трекам частиц в твердых телах*, Марбург, Германия, 1990. стр. 29 – **материалы конференций**
11. Х. Джебур Джаббар, Р.Х. Абдул Суббер, Туама Саадон Веджуд, *Калибровка CR-39 для различных высот дозиметров радона и применение концентрации радона в отложениях реки Махаджран в мухафазе Басра*, Ирак, *Журнал физики: Серия конференций*, 2019 – **журнал**
12. E. Kouroukla1, T.D. Gooding, H.S. Fonseca, *Анализ методов снижения уровня радона: 10-летний обзор*, *Журнал радиологической защиты*, 2024. стр. 44 – **журнал**
13. Мохаммадемад Аделиха, Амин Шахрохи, Мортеза Имани, Станислав Халупник, Тибор Ковач, *Радиологическая оценка концентрации радона и торона в помещениях и карта радона в жилых помещениях в Мешхеде*, Иран, *Int. J. Environ. Res. Public Health*, 2021. 18, 141 – **журнал**
14. А. Панлаки, Ф. Баллестерос, *Уровни радона в пещерах острова Бохол*, Филиппины, 18-я Международная конференция по экологической науке и технологиям, 2023 – **материалы конференций**
15. Atangana Bingana, Martin Serge, Takoukam Soh, Serge Didier, Bineng Guillaume Samuel, Chutima Kranrod, Yasutaka Omori, Masahiro Hosoda, Saïdou, Shinji Tokonami, *Assessment of Radiological Risks due to Indoor Radon, Thoron and Progeny, and Soil Gas Radon in Thorium-Bearing Areas of the Centre and South Regions of Cameroon*, *Atmosphere* 2023. 1708 – **журнал на англ. языке**
16. Доктор Махамудул Хасан, Мирослав Джаник, Шиха Первин, Такеши Иимото, *Предварительное воздействие радона и торона на население в Дакке*, Бангладеш, *Атмосфера* 2023, 14, 1067 – **журнал**

17. F. Omonya Wanjala, N.O. Hashim, D. Otswana, J. Kebwaro, M. Chege, C. Nyambura, Atieno Carmen, *Lung Cancer Risk Assessment due to Radon and Thoron Exposure in Dwellings in Ortum, Kenya*, Journal of Environment Pollution and Human Health, 2021, Vol. 9, No. 2, 64-70 – **журнал на англ.языке**
18. I. Dimitrova, J.M. Wasikiewicz, V. Todorov, S. Georgiev, Z. Daraktchieva, C.B. Howarth, D.A. Wright, B. Sabot, K. Mitev, *Coherent long-term average indoor radon concentration estimates obtained by electronic and solid state nuclear track detectors*, Radiation Physics and Chemistry 226 (2025) 112212 – **журнал на англ.языке**
19. Пэм Варкентин, Эрин Карри, Огенекоме Майкл, Брайан Бьорндал, *Сравнение электронных радоновых мониторов потребительского класса*, Журнал радиологической защиты. 2020. 1258–1272 (15 стр.) – **журнал**
20. G. Suman, K.Vinay Kumar Reddy, M. Sreenath Reddy, Ch.Gopal Reddy, P.Yadagiri Reddy, *Radon and thoron levels in the dwellings of Buddonithanda: a village in the environs of proposed uranium mining site, Nalgonda district, Telangana state, India*, Scientific Reports, (2021) 11:6199 – **журнал на англ.языке**
21. Аджай Кумара, Сумит Шармаа, Рохит Мехраб, Саурабх Наранг, Розалин Мишрад, *Оценка концентраций радона и торона в помещениях и их связь с сезонными колебаниями и геологией района Удхампур, Джамму и Кашмир, Индия*, Международный журнал охраны труда и окружающей среды. 2017 – **журнал**
22. Джон Майлз, *Методы измерения радона и приборы*, Национальный совет по радиологической защите, Чилтон, Дидкот, Оксфордшир - **книга**
23. Джоан Ф.Рей, Николя Мейссер, Душан Лицина, Жоэль Гойет Перно, *Оценка эффективности активных датчиков радона и пассивных дозиметров при низких и высоких концентрациях радона*, Строительство и окружающая среда 250. 2024 – **журнал**
24. Диего Валькарсе, Альберто Альвареллос, Хуан Рамон Рабуньяль, Хулиан Дорадо, Маркос Гестал, *Система мониторинга радона на основе машинного обучения*, Хемосенсоры 2022, 10, 239 – **журнал**

**Ж.О. Насилов¹, К.Ш. Жумадилов*¹, Ж.А. Байгазинов², Н. Нурсултанова¹, А.И. Иванников²,
В.Ф. Степаненко³, М. Хоши⁴, А.М. Андабаева¹**

¹Халықаралық ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар халықаралық кафедрасы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,

²«Ядролық технологиялар паркі» АҚ, Курчатова, Қазақстан

³Ресей Федерациясының Денсаулық сақтау Министрлігінің «ФМЗО» Федералдық Мемлекеттік бюджеттік мекемесінің филиалы А.Ф. Цыб атындағы МРФО, Обнинск, Ресей

⁴Хиросима университеті, Хиросима, Жапония

*Хат алмасуға арналған автор: zhumadilovk@gmail.com

Радон мен торон белсенділігін өлшеуге арналған трек детекторларын қолдану: әдістер мен нәтижелерге шолу

Аңдатпа. Бұл мақалада әртүрлі орталарда радон мен торон белсенділігін өлшеуге арналған трек детекторларының қолданылуына шолу жасалады. Зерттеу әдістің негізгі аспектілерін

қамтиды: жұмыс принциптері, детектор түрлері (CR-39, LR-115, Radon Eye Plus2, SSNTD), әсер ету жағдайлары және талдау әдістері. Тұрғын үй-жайлардағы, шахталардағы, үңгірлердегі, судағы және топырақтағы радон белсенділігін өлшеуді, сондай-ақ өлшеулерге әртүрлі геологиялық және климаттық факторлардың әсерін қамтитын заманауи зерттеулер қарастырылады. CR-39 төмен радон концентрацияларына жоғары сезімталдығы бар екені көрсетілді, бұл ластану деңгейінің төмендігін егжей-тегжейлі зерттеу үшін артықшылық береді, ал LR-115 сыртқы әсерлерге беріктігіне байланысты ұзақ мерзімді бақылау үшін тиімдірек. Нәтижелердің дәлдігіне қоршаған орта параметрлерінің (температура, ылғалдылық, қысым) және калибрлеу әдістерінің әсеріне ерекше назар аударылады. Деректерді интерпретациялаумен байланысты ағымдағы мәселелер, соның ішінде жолды өңдеу әдістерінен туындаған қателер және нәтижелерді визуализациялау қарастырылады. Өлшеу әдістерін стандарттау қажеттілігі және цифрлық технологияларды пайдалана отырып талдау процестерін автоматтандыру перспективалары атап өтілді. Жұмыстың нәтижелері радиациялық қауіпсіздік стратегиясын әзірлеуде, тұрғын және өндірістік аудандарда радон деңгейін бақылауда, сондай-ақ қоршаған ортаны бақылауда пайдаланылуы мүмкін. Радиациялық қауіптерді бағалау үшін жол детекторларын оңтайлы пайдалану және әртүрлі орталарда радонды анықтаудың тиімді әдістерін әзірлеу бойынша ұсыныстар ұсынылады.

Түйін сөздер. Радон, трек детекторлары, CR-39, RADUET, LR-115, RadonEye Plus2, SSNTD детекторын калибрлеу.

Zh.O. Nassilov¹, K.Sh. Zhumadilov*¹, Zh.A. Baigazinov²,

N. Nursultanova¹, A.I. Ivannikov³, V.F. Stepanenko³, M. Hoshi⁴, A.M. Andabayeva¹

¹*International Department of Nuclear Physics, New Materials and Technology, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan*

²*«Park of Nuclear Technologies» JSC, Kurchatov, Kazakhstan*

³*A.F. Tsyb Medical Radiological Research Center, Obninsk, Russia*

⁴*Hiroshima University, Hiroshima, Japan*

**Correspondence: zhumadilovk@gmail.com*

Application of track detectors to measure radon and thoron activity in the environment: a review of methods and results

Abstract. This paper presents an overview of the application of track detectors for measuring radon and thoron activity in various environments. The study covers the key aspects of the method: operating principles, detector types (CR-39, LR-115, Radon Eye Plus2, SSNTD), exposure conditions and analysis methods. Modern studies, including measurements of radon activity in residential premises, mines, caves, water and soil, as well as the influence of various geological and climatic factors on measurements are considered. It is shown that CR-39 has high sensitivity to low radon concentrations, which makes it preferable for detailed studies of low pollution levels, while LR-115 is more effective for long-term monitoring due to its resistance to external influences. Particular attention is paid to the influence of environmental parameters (temperature, humidity, pressure) and calibration methods on the accuracy

of the results. Current problems associated with data interpretation, including errors due to track etching methods and visualization of results are considered. The need for standardization of measurement methods and prospects for automation of analysis processes using digital technologies are emphasized. The results of the work can be used in developing radiation safety strategies, monitoring radon levels in residential and industrial areas, and in environmental monitoring. Recommendations are proposed for the optimal use of track detectors for assessing radiation risks and developing more effective methods for detecting radon in various environments.

Keywords: Radon, track detectors, CR-39, RADUET, LR-115, RadonEye Plus2, SSNTD detector calibration.

References

1. NKDAR OON, *Nauchnyj komitet OON po dejstvu atomnoj radiacii, Istochniki i dejstvie ionizirujushhego izluchenija*, Tom I Prilozhenie A: Metodologii ocenki doz, Organizacija Obedinennyh Nacij, N'ju-Jork, 2000
2. MKRZ, *Mezhdunarodnaja komissija po radiologicheskoj zashhite ot radona-222 doma i na rabote*, Otchet MKRZ 65, Pergamon, Oksford, 1993
3. H. Idriss, I. Salih, A.S. Abdulaziz, M.Ju. Abdel'galil, S.A. Salih, A.M. Hasan, M.A. Jel.Tahir, M.M.O. Ahamed, *Issledovanie radona v pochvennom gaze, mikrojelementov i klimaticheskikh parametrov vokrug shtata Juzhnyj Kordofan*, Sudan, Nauki ob okruzhajushhej srede Zemli, 2014;72(2):335-339
4. V.V. Nazaroff, A.V. Nero-mladshij, *Radon i produkty ego raspada v vozduhe pomeshhenij*, John Wiley and Sons, N'ju-Jork, 1988
5. G. Akerblom, K. Vil'son, *Radon-geologicheskie aspekty jekologicheskoj problemy*. Otchet № 30, Geologicheskaja sluzhba Shvecii, Uppsala, 1982
6. A.E.A. Elzain, *Opredelenie koncentracii radija i skorosti vydelenija radona v obrazcah pochvy s ispol'zovaniem CR-39*, Dostizhenija v prikladnyh nauchnyh issledovanijah, 2015;6(2):92-102
7. A.E.A. Elzain, Y.Sh. Mohammed, Kh.Sh. Mohamed, A.M. Mohamed-Ali, *Issledovanie koncentracii radija i skorosti vydelenija radona v obrazcah pochvy iz goroda Kassala*, Sudan, s ispol'zovaniem SSNTD, Amerikanskij zhurnal fiziki i prilozhenij, 2016;4(4):84-89
8. F. Abu-Dzharad, *Primenenie detektora jadernogo trekovogo travlenija dlja izmerenij, svjazannyh s radonom*, Mezhdunarodnyj zhurnal po primeneniju radiacii i priborostroeniju, chast' D, Jadernye treki i radiacionnye izmerenija, 1988;15(1):525-534
9. K.N. Ju, T.F. Chan, Je.M. Jang, *Izmenenie skorosti vydelenija radona s poverhnostej zdanij raznogo vozrasta*, Health Physics, 1995;68(5):716-718
10. M. Beocco i dr., *Izmerenie urovnja radona v pomeshhenijah v rajone Bolon'i*, Trudy 15-j Mezhdunarodnoj konferencii po trekam chastic v tverdyh telah, Marburg, Germanija, 1990. стр. 29
11. H. Dzhebur Dzhabbar, R.H. Abdul Subber, Tuama Saadon Vedzhud, *Kalibrovka CR-39 dlja razlichnyh vysot dozimetrov radona i primenenie koncentracii radona v otlozhenijah reki Mahadzhran v muhafaze Basra*, Irak, Zhurnal fiziki: Serija konferencij, 2019
12. E. Kouroukla¹, T.D. Gooding, H.S. Fonseca, *Analiz metodov snizhenija urovnja radona: 10-letnij obzor*, Zhurnal radiologicheskoj zashhity, 2024. стр. 44
13. Mohammademad Adeliha, Amin Shahrohi, Morteza Imani, Stanislav Halupnik, Tibor Kovach, *Radiologicheskaja ocenka koncentracii radona i torona v pomeshhenijah i karta radona v zhilyh pomeshhenijah v Meshhede*, Iran, Int. J. Environ. Res. Public Health, 2021. 18, 141

14. A. Panlaki, F. Ballesteros, *Urovni radona v peshherah ostrova Bohol*, Filippiny, 18-ja Mezhdunarodnaja konferencija po jekologicheskoj nauke i tehnologijam, 2023
15. Atangana Bingana, Martin Serge, Takoukam Soh, Serge Didier, Bineng Guillaume Samuel, Chutima Kranrod, Yasutaka Omori, Masahiro Hosoda, Saïdou, Shinji Tokonami, *Assessment of Radiological Risks due to Indoor Radon, Thoron and Progeny, and Soil Gas Radon in Thorium-Bearing Areas of the Centre and South Regions of Cameroon*, Atmosphere 2023. 1708
16. Doktor Mahamudul Hasan, Miroslav Dzhanik, Shiha Pervin, Takeshi Iimoto, *Predvaritel'noe vozdejstvie radona i torona na naselenie v Dakke*, Bangladesh, Atmosfera 2023, 14, 1067
17. F. Omonya Wanjala, N.O. Hashim, D. Otwoma, J. Kebwaro, M. Chege, C. Nyambura, Atieno Carmen, *Lung Cancer Risk Assessment due to Radon and Thoron Exposure in Dwellings in Ortum, Kenya*, Journal of Environment Pollution and Human Health, 2021, Vol. 9, No. 2, 64-70
18. I. Dimitrova, J.M. Wasikiewicz, V. Todorov, S. Georgiev, Z. Daraktchieva, C.B. Howarth, D.A. Wright, B. Sabot, K. Mitev, *Coherent long-term average indoor radon concentration estimates obtained by electronic and solid state nuclear track detectors*, Radiation Physics and Chemistry 226 (2025) 112212
19. Pem Varkentin, Jerin Karri, Ogenekome Majkl, Brajan B'orndal, *Sravnenie jelektronnyh radonovyh monitorov potrebitel'skogo klassa*, Zhurnal radiologicheskoj zashhity. 2020. 1258–1272 (15 стр.)
20. G. Suman, K.Vinay Kumar Reddy, M. Sreenath Reddy, Ch.Gopal Reddy, P.Yadagiri Reddy, *Radon and thoron levels in the dwellings of Buddonithanda: a village in the environs of proposed uranium mining site, Nalgonda district, Telangana state, India*, Scientific Reports, (2021) 11:6199
21. Adzhaj Kumara, Sumit Sharma, Rohit Mehrab, Saurabh Narang, Rozalin Mishrad, *Ocenka koncentracij radona i torona v pomeshhenijah i ih svjaz' s sezonnymi kolebanijami i geologiej rajona Udampur, Dzhammu i Kashmir, Indija*, Mezhdunarodnyj zhurnal ohrany truda i okruzhajushhej sredy. 2017
22. Dzhon Majlz, *Metody izmerenija radona i pribory*, Nacional'nyj sovet po radiologicheskoj zashhite, Chilton, Didkot, Oksfordshir
23. Dzhoan F. Rej, Nikolja Mejsser, Dushan Licina, Zhojel' Gojet Perno, *Ocenka jeffektivnosti aktivnyh datchikov radona i passivnyh dozimetrov pri nizkih i vysokih koncentracijah radona*, Stroitel'stvo i okruzhajushhaja sreda 250. 2024
24. Diego Val'karse, Al'berto Al'varellas, Huan Ramon Rabun'jal', Hulan Dorado, Markos Gestal, *Sistema monitoringa radona na osnove mashinnogo obuchenija*, Hemosensory 2022, 10, 239

Сведения об авторах:

Ж.О. Насилов – PhD докторант, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

К.Ш. Жумадилов – автор для корреспонденции, PhD, профессор, заведующий Международной кафедры «Ядерной физики, новых материалов и технологий», Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

Ж.А. Байгазинов – PhD, Председатель правления АО «Парк ядерных технологий», Курчатov, область Абай, Казахстан

Н. Нурсултанова – PhD докторант, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

В.Ф. Степаненко – доктор биологических наук, профессор, заведующий лабораторией медико-экологической дозиметрии и радиационной безопасности МРНЦ имени А.Ф. Цыба – филиала ФГБУ «НМИЦ радиологии» Министерства здравоохранения Российской Федерации

А.И. Иванников – доктор биологических наук, профессор, ведущий научный сотрудник лаборатории медико-экологической дозиметрии и радиационной безопасности МРНЦ имени А.Ф. Цыба – филиала ФГБУ «НМИЦ радиологии» Министерства здравоохранения Российской Федерации

М. Хоши – почетный профессор Университета Хиросимы, Хиросима, Япония

А.М. Андабаева – магистрант, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

Ж.О. Насилов – PhD докторант, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

К.Ш. Жумадилов – хат-хабар авторы, PhD, профессор, «Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар» халықаралық кафедрасының меңгерушісі, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

Н. Нурсултанова – PhD докторант, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

Ж.А. Байгазинов – PhD, «Ядролық технологиялар паркі» АҚ басқарма төрағасы, Курчатov, Абай облысы, Қазақстан

В.Ф. Степаненко – биология ғылымдарының докторы, профессор, Ресей Денсаулық сақтау министрлігінің «НМИЦ радиология» ФМБУ филиалы А.Ф. Цыба атындағы мрнц медициналық-экологиялық дозиметрия және радиациялық қауіпсіздік зертханасының меңгерушісі

А.И. Иванников – биология ғылымдарының докторы, профессор, Ресей Денсаулық сақтау министрлігінің «НМИЦ радиология» ФМБУ филиалы А.Ф. Цыба атындағы мрнц медициналық-экологиялық дозиметрия және радиациялық қауіпсіздік зертханасының жетекші зерттеушісі

М. Хоши – Хиросима университетінің құрметті профессоры, Хиросима, Жапония

А.М. Андабаева – магистрант, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

Zh.O. Nassilov – PhD student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

K.Sh. Zhumadilov – corresponding author, PhD, professor, Head of the International Department of «Nuclear Physics, New Materials and Technologies», L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Zh.A. Baigazinov – PhD, Chairman of the Board of JSC «Park of Nuclear Technologies», Kurchatov, Abay Region, Kazakhstan

N. Nursultanova – PhD student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

V.F. Stepanenko – doctor of Biological Sciences, professor, Head of the Laboratory of Medical-Ecological Dosimetry and Radiation Safety of the MRRC named after A.F. Tsyba - a branch of the Federal State Budgetary Institution «National Medical Research Center of Radiology» of the Russian Ministry of Health

A.I. Ivannikov – doctor of Biological Sciences, professor, leading researcher of the Laboratory of Medical-Ecological Dosimetry and Radiation Safety of the MRRC named after A.F. Tsyba - a branch of the Federal State Budgetary Institution «National Medical Research Center of Radiology» of the Russian Ministry of Health

M. Hoshi – emeritus professor at Hiroshima University, Hiroshima, Japan

A.M. Andabayeva – master course student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.



Copyright: © 2025 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



ХҒТАР 29.15.53

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-150-1-204-218>

Ғылыми мақала

ВaTiO₃ (001) бетіндегі оттегінің адсорбциялануына көміртегін қоспалаудың әсерін алғашқы қағидалардан зерттеу

Сатанова Б.М.¹, Абуова Ф.У.¹, Абуова А.У.¹, Байкадамова Л.С.², Қаптағай Г.Ә.^{*2},
Қойлық Н.О.², Инербаев Т.М.¹

¹Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

²Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан

(E-mail: gulbanu.kaptagai@mail.ru)

Аңдатпа. Қатты күйдегі жұқа пленкалы фотоэлектрлік технологиялар әлемдік экономиканың энергияға деген қажеттіліктерін қанағаттандыру үшін күн энергиясын электр энергиясына айналдыру үшін перспективалы болып табылады. Органикалық күн батареялары, бояғыштары бар күн батареялары және перовскит күн батареялары сияқты жаңа жұқа пленкалы күн батареялары оларды жобалаудағы тиімді тәсілдерге айналды. Мұндай функционалды материалдар оларды қолдану әдістерінің қарапайымдылығы және оларды жобалауда өндірістік шығындардың аз болуымен қатар энергияны түрлендіру тиімділігі кремний күн батареялары сияқты қалыптасқан технологиялармен салыстырғанда бәсекеге қабілетті болуы керек. Жұқа пленкалы технологиялар қазіргі уақытта бірнеше жылдық зерттеулерде өнімділіктің әсерлі өсуіне байланысты фотовольтаиканы зерттеудегі негізгі бағыттардың бірі. Перовскитті күн элементтері құрылғыларының ұзақ мерзімді жұмыс істеуі мен энергетикалық тиімділігін арттыруды қамтамасыз ету үшін әртүрлі тәсілдер қолданылды. Күн элементтерінің орнықты жұмыс істеуі үшін көміртегі негізді элементтермен қоспалау тиімді болып табылады.

Жұмыста тығыздық функционалы теориясы әдісі жазық толқындар базисінде псевдопотенциал әдісімен біріктіріле отырып теориялық тұрғыдан ВaTiO₃ бетіндегі көміртегі қоспасының каталитикалық рөлі зерттелген. Тығыздық функционалы теориясы негізінде тетрагональды фазадағы барий титанатының таза және көміртегі атомдарымен қоспаланған TiO₂ – терминациялы (001) бетіндегі атомдық және молекулалық оттегінің адсорбциялану процесі зерттелді. TiO₂ – терминациялы (001) бетінде көміртегінің адсорбциясы үшін ең тиімді орындар «Ti үсті» позициялары болды. Таза бетте көміртегі үшін анықталған энергетикалық тиімді орынның маңында адсорбцияланған атомдық оттегі үшін адсорбция энергиясы -1,5 эВ, ал молекулалық үшін -2,82 эВ болды. Көміртегімен қоспаланған бетте адсорбцияланған атомдық оттегі үшін адсорбция энергиясы -0,2 эВ, ал молекулалық үшін -0,4 эВ шамаға кеміді.

Түйінді сөздер: ВaTiO₃, оттегі адсорбциясы, алғашқы қағидалардан есептеулер, графен тіріздес құрылымдармен комбинациялау

Жіберілді 24.02.2025 Өзгертілді 1.03.2025. Қабылданды 3.03.2025 Онлайн қол жетімді 25.03.2025

¹ *хат-хабар авторы

1. Кіріспе

Екі немесе одан да көп атомдық жұқа графен тәрізді материалдарды комбинациялау арқылы жасалған құрылымдар бастапқы құрылымдардың қасиеттерін өзгертеді және жаңа гибридтік қасиеттері бар материал пайда болады, бұл көп функционалды мен наноқұрылымдарды әзірлеу үшін жаңа мүмкіндіктер береді. Графен және наноқұрылымды BaTiO₃ ауыспалы металл оксидтерінің екі өлшемді пленкаларына негізделген гетероқұрылымдар жад ұяшықтары, кванттық компьютер элементтері, Li-батареялар, транзисторлар, датчиктер, датчиктер үшін көп функционалды жаңа материалдарды әзірлеу үшін перспективалы болып табылады.

Экспериментте [1] ауыспалы металл оксидтерінде графенмен комбинацияланған құрылымдарда жаңа және перспективалы магниттік, электронды және оптикалық қасиеттердің түзілетіні анықталды.

Мұндай оксидтерде ауыспалы металдар жартылай толтырылған d-орбитальдары бар (II) топ элементтері болып табылады және көрінетін жарық спектрінде жұту қабілеті жоғары. Бұл материалдарда 2 эВ-қа жақын жолақ саңылауы бар [1]. Дегенмен, тасымалдаушының қозғалғыштығы және/немесе қызмет ету мерзімі төмен болғандықтан, олардың жұмыс істеуі заряд тасымалдаушысының таралуына байланысты.

Барий титанатының технологиялық маңыздылығын ескере отырып, тетрагоналді фазалы BaTiO₃ (001) бетінің ab initio әдістерін қолдану арқылы теориялық тұрғыдан көміртегі атомдары қоспаланған кезде қатты отындар, сутегі энергетикасы мен катализдік процестерде қалпына келу реакциялары мен оттегінің бөліну реакциялары маңызды болғандықтан көміртегінің барий титанатының құрылымдық және электрондық сипаттамаларына әсерін қарастыру маңызды болып табылады.

Блюерттің эксперименттік зерттеуінде [2] 3D басып шығарылған және BaTiO₃ нанобөлшектерімен толтырылған көміртегі құрылымдары төмен (20 Гц-1 МГц) және микротолқынды (26-37 ГГц) жиілік диапазонында зерттелді. Бұл құрылымдар төмен жиілікті диапазонда (сантиметрге бірнеше бірлік) өте жоғары электр өткізгіштікке ие және жақсы микротолқынды диапазондағы диэлектрлік қасиеттерді көрсетті. Электрлік тасымалдау термиялық түрде белсендіріледі және әртүрлі ақаулар арқылы электрондардың тасымалдануымен байланысты болуы мүмкін. Графен оксидін (GO) қосудың әртүрлі салмақ коэффициенттері бар BaTiO₃-графен нанокомпозиттерінің сериясы қарапайым гидротермиялық әдіспен синтезделді, оның барысында тотықсыздандырылған графен оксиді және BaTiO₃ нанобөлшектері мен графен нанолистері арасындағы тығыз фазааралық байланыс алынды. Алынған фотокаталитикалық белсенділік BaTiO₃-графен композиттерінің 400 нм толқын ұзындығында көрінетін жарықпен сәулелену кезінде метилен көктің (МБ) ыдырауына әсері зерттелді және таза BaTiO₃-ке қарағанда жоғары фотокаталитикалық белсенділік анықталды.

BaTiO₃ перовскиттері

BaTiO₃ – диэлектрлік конденсаторлардан бейсызық оптикалық құрылғыларға дейін кең ауқымды қолданбалы танымал электрлік. Жұқа BaTiO₃ қабықшаларындағы домен құрылымы негізінен серпімділік константаларымен және электрстрикция коэффициенттерімен анықталады. Жоғары температурада параэлектрлік ВТО кубтық құрылымды. Ол 125°C төмен температурада параэлектрлік кубтық құрылымнан ферроэлектрлік тетрагональды фазаға айналады. 125 және 8 °C температура аралығында барий титанатының тетрагональды фазасы тұрақты. 8 °C-тан -71 °C-қа дейінгі температурада құрылым орторомбты фазада -71 °C-тан төмен температурада ферроэлектрлік барий титанаты ромбоэдрлік фазада болады. BaTiO₃ – тыйым салынған аймағы үлкен жартылай өткізгіш, ол тек күн спектрінде ультракүлгін сәулелерді жұтады.

Графен және көміртегі негізді құрылымдармен модификацияланған BaTiO₃ (001) бойынша теориялық зерттеулер туралы деректер жоқ, бірақ көлемді құрылым [2] және бет (100) үшін бірнеше эксперименттік зерттеулер бар.

Мысалы Паулин зерттеуінде [2] BaTiO₃ нанобөлшектерімен толтырылған 3D басып шығарылған көміртекті құрылымдар төмен (20 Гц–1 МГц) және микротолқынды пеште (26-37 ГГц) зерттелді. Бұл құрылымдар төмен жиілік диапазонында (шамамен бірнеше С/см) өте жоғары электр өткізгіштікке ие және тамаша микротолқынды диапазондағы диэлектрлік қасиеттерді көрсетті. Мұнымен қоса BaTiO₃ қосу сонымен қатар композициялық материалдардың диэлектрлік шығындарын арттырады, сонымен бірге диэлектриктердің өткізгіштігі BaTiO₃ концентрациясына тәуелсіз болатындығын көрсетті.

Зерттеу [3], графеннің әртүрлі салмақ қосу коэффициенттері бар BaTiO₃-графен нанокөмпазиттерінің сериясы оксиді (GO) қарапайым гидротермиялық тәсілмен синтезделді, оның барысында төмендетілген графен оксиді және BaTiO₃ нанобөлшектері мен графен нанопленкалары алынды. Дайындалған үлгілер [4] электронды микроскопия (TEM), жоғары ажыратымдылықтағы трансмиссиялық электронды микроскопия (HRTEM), рентген сәулелерінің дифракциясы (XRD), ультракүлгін-көрінетін (УК-виз.) диффузды шағылыстыру спектроскопиясы, рентгендік фотоэлектрондық спектроскопия (XPS) және Фурье түрлендірілген инфрақызыл (FTIR) спектроскопиясы арқылы зерттеледі [5-6-7]. Алынған үлгінің фотокаталитикалық белсенділігі BaTiO₃ – көрінетін жарық сәулеленуі кезінде метилен көкінің (МБ) ыдырауына арналған графен көмпазиттері l Z 400 нм-де зерттелді және таза BaTiO₃ -тен жоғары фотокаталитикалық белсенділікке ие.

BaTiO₃-графен нанокөмпазиттеріндегі графеннің рөлі органикалық бояғыш тәрізді фотосенсибилизатор ретінде әрекет етеді [8-9] .

Бояғыштың деградациясында BaTiO₃ жартылай өткізгішті көрінетін жарықтың жұтатын фотобелсенділігіне түрлендіреді. Бұл реакция механизмін BaTiO₃-графен нанокөмпазиттерінің күн энергиясын түрлендіруде қолдану аясын кеңейтеді.

2. Есептеу жүргізу негіздері

Жазық толқынды ТФТ (тығыздық функционалы теориясы) есептеулері VASP 5.3.3 [4] бағдарламасының көмегімен проекцияланған кеңейтілген толқын (PAW- Projector Augmented Wave) псевдопотенциалдары және GGA түріндегі алмасу-корреляциялық PBE функционалдығы [10-11-12] арқылы жүргізілді. Неғұрлым дәл PAW псевдопотенциалдар ретінде Ba, Ti_{pv}, O және C потенциалдары қолданылды. Есептеу дәлдігін қамтамасыз ететін псевдопотенциалдар жиынтығын қолдандық. Беттік есептеулер үшін 2x2x1 Монхорст-Пак (Monkhorst-Pack) схемасы арқылы Бриллюэн аймағы таңдалды [13-14]. Жазық толқын негізіндегі жиынтық үшін кинетикалық энергияның шекті мәні 520 эВ болды. Тетрагоналді беттік бірлік ұяшықтың ауданы текшелік (кубтық) бірлік ұяшықтан екі есе үлкен.

1-Кесте. PAW потенциалдар сипаттамасы

Элемент	E_{cut} , эВ	Валенттік электрондар саны	конфигурация
Ba	187.210	10	5s ² 6s ² 5p ⁶
Ti _{pv}	222.335	12	3p ⁶ 4s ¹ 3d ⁶
O	400	6	2s ² p ⁴

3. Зерттеу нәтижелері мен талқылау

3.1. BaTiO₃ құрылымдарын моделдеу және зерттеу

2 Кестеде әртүрлі функцияларды қолдану арқылы алынған көлемдік ВТО тетраэдрлік фазасының қасиеттері көрсетілген. Есептелген мәндер сонымен қатар қолданыстағы эксперименттік және теориялық деректермен салыстырылады. Гибридті PBE функционалдығын тұтастай пайдалану әртүрлі PBE0, LDA функцияларымен алынған эксперименттік деректерге сәйкес қарастырылатын ВТО-ның қасиеттерін болжауға мүмкіндік береді. Негізді өзгерту нәтижеге айтарлықтай әсер етпейтіні көрсетілген. Атап айтқанда, PBE және эксперименттік нәтижелер арасындағы жақсы келісімді а торының тұрақтысы, Ti, O атомдарының бөлшектік ығысулары zTi, xo, zo (идеалды куб орындарына қатысты) көруге болады.

2-Кесте. Негізді өзгерту нәтижеге айтарлықтай әсер етпейтіні көрсетілген. Атап айтқанда, PBE және эксперименттік нәтижелер арасындағы жақсы келісімді а торының тұрақтысы, Ti, O атомдарының бөлшек ығысулары zTi, xo, zo (идеал текше жағдайына қатысты) көруге болады.

Параметрлер	Осы жұмыс	Басқа теориялық жұмыстар					Эксперимент
		[17] ^a	[17] ^b	[17] ^c	[18] ^a	[18] ^c	
Кристалл ұяшық а (Å)							

α (градус)	4,074	4,073	4,029	3,966	4,073	4,001	4,004
z_{Ti}	89,754	89,710	89,727	89,958	89,74	89,87	89,8
x_o	-0,0070	-0,0150	-0,0151	-0,0080	-0,0150	-0,011	-0,01128
z_o	0,0116	0,0143	0,0129	0,0069	0,0141	0,0133	0,0109
тыйым салынған аймақ,	0,0071	0,0249	0,0242	0,0109	0,0245	0,0192	0,0193
E_{qap} (eV)	2,5	2,7	4,9	2,2	-	2,3	-
Энергия, ΔE_o (эВ)	-0,005	-0,061	-0,061	-0,005	-0,060	-0,040	-

Әрі қарай, барий титанаты фазасының беті көлемді құрылымнан (001) модельденді (3-суретті қараңыз).

$BaTiO_3$ (001) беттері сәйкесінше кезектескен BaO және TiO_2 -нің тұратын айна жазықтығына қатысты симметриялы 13 қабат пластиналар арқылы модельденді. Осы пластиналардың бірі $BaTiO_3$ кристалы үшін BaO бетімен аяқталды (1суретті қараңыз). Екінші пластина TiO_2 пластиналарымен аяқталды (2-суретті қараңыз). Бұл пластиналар бетінің қалыпты жазықтығы бойынша стохиометриялық емес және симметриялы.

3-Кесте. (а) TiO_2 - және (b) BaO терминацияланған беттерінің модельдік тақталарындағы атомдық қабаттардың реті

а) $Ba_{0.75}Ti_{0.25}O_2$	б) $BaTi_{0.75}O_{2.5}$
TiO_2	BaO
BaO	TiO_2
TiO_2	LaO
BaO	TiO_2
TiO_2	BaO
BaO	TiO_2
TiO_2	BaO

Үлгі бетіне адсорбцияланған көміртегі атомдарының каталитикалық әсерін зерттеуді бастамас бұрын, адсорбция процесінің өзін зерттеу керек, яғни катализатор атомдары адсорбцияланатын ең тиімді позицияларды және олардың субстратпен байланысу энергияларын анықтау керек. Адсорбциялану энергиясы $S-BaTiO_3$ құрылымдарының тұрақтылығын анықтау және олардың бетінің қозғалғыштығын бағалау критерийі болып табылады.

3.2 BaTiO₃ (001) бетіндегі көміртегі атомының адсорбциясын кванттық механикалық модельдеу

Қоспаланған BaTiO₃ (001) бетінің тұрақтылығын зерттеу үшін бір көміртегі атомы беткі ұяшықтағы барлық симметриялы тең емес позицияларға орналастырылды. С атомдары орналасатын нақты позициялар төменде мұқият талқыланады. Көміртегі атомдарының концентрациясының олардың адсорбция процесіне әсерін зерттеу үшін моноқабат жағдайы қарастырылды. Адсорбция энергиясы мына формуламен есептеледі:

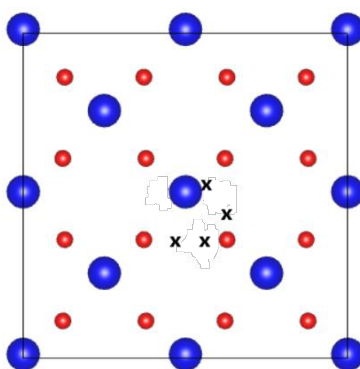
$$E_{\text{адс}} = (E_{[\text{C/пластинка}]} - (E_{[\text{C}]} + E_{[\text{пластинка}]})/2), \quad (1)$$

мұндағы $E_{[\text{C/пластинка}]}$ және $E_{[\text{пластинка}]}$ сәйкесінше бетінде адсорбцияланған көміртегі атомдары бар BaTiO₃ пластинасының және таза пластинаның жалпы энергиясының есептелген мәндері. Формуланың бөлімінде 2 коэффициентінің болуы жоғарыда сипатталған индукцияланған дипольдік моменттің әсерін жою үшін адсорбцияланған көміртегі атомдарының модельдік пластинаның екі жағында симметриялы орналасуына байланысты.

С моноқабатының байланыс энергиясы байланысқан және бөлінген BaTiO₃ және С жүйелерінің жалпы энергиялары арасындағы айырмашылық ретінде есептелді, формула бойынша теріс $E_{\text{адс}}$ мәні BaTiO₃ бетіндегі көміртегі атомдарымен адсорбцияланған кездегі конфигурацияның бөлінген BaTiO₃ және күміспен салыстырғанда анағұрлым қолайлы екенін көрсетеді [15-16].

BaTiO₃-тің TiO₂-мен аяқталатын (001) бетіндегі С атомының адсорбциясы

BaTiO₃-тің TiO₂-терминацияланған бетінде көміртегі атомдарын адсорбциялағанда, біз С атомдарының бес ықтимал орнын қарастырдық: «Ті үсті», «О үсті», «көпір-Ті-О», «О-көпір 3» суретте (4 суретте). Есептелген адсорбция энергиясы «Ті үсті», «О үсті», «көпір-Ті-О», «көпір-О-О» сәйкесінше -1,10 эВ, -1,03 эВ, -1,04 эВ, -1,65 эВ және -1,02 эВ.

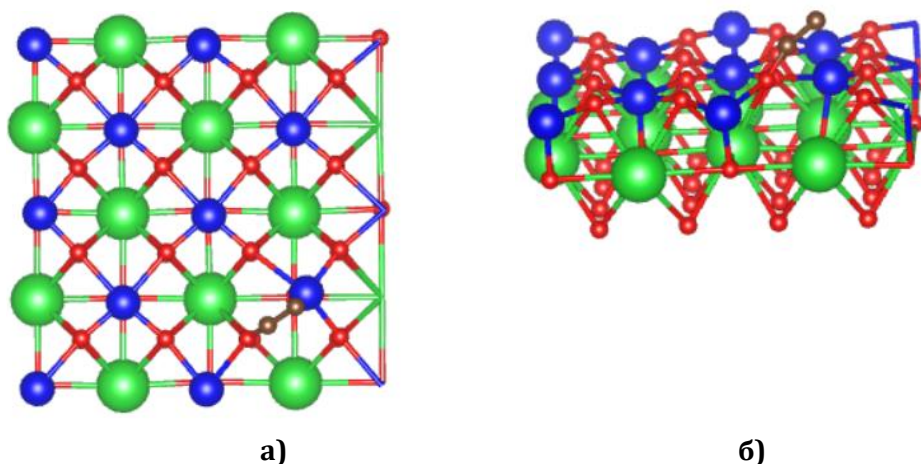


**Сурет 1. Тұрақты позициялар: TiO₂-мен аяқталатын бет - (а) MnO₂-мен аяқталатын бет
1 – «Mn ионының үстінде», 2 – «О ионы үстінде», 3 – «Ті-О көпірі», 4 – «аралық»,
5 – «О-О көпірі» (b). Түсті шарлар: жасыл көк Ті, қызыл О [19, 48 б.]**

Адсорбцияланған С атомының энергетикалық тұрақты орны «О-үсті» позициясы (1-кесте), ол үшін тиімді атомдық зарядтар берілген.

Адсорбцияланған С атомының энергетикалық тұрақты орны О-үсті позициясы (1-кесте), ол үшін тиімді атомдық зарядтар берілген. «Ті үсті» позиция энергиясы бойынша басқа адсорбциялық позицияларға жақын. Тиімді зарядтар С адсорбцияланғаннан кейін зарядтың тасымалдануы болатынын көрсетеді, ол 0,53e құрайды, бұл олардың байланыстарының маңызды коваленттігін көрсетеді.

С адсорбциясының TiO_2 (001) электрондық құрылымына әсерін тереңірек түсіну үшін біз сонымен қатар таза (адсорбцияланған көміртегі атомы жоқ) беттің электрондық күйлерінің тығыздықтарын (3.9-сурет) және сол беттегі, бірақ адсорбцияланған көміртегі атомдары бар электрондық күйлердің тығыздығын есептедік. Алынған нәтижелер адсорбцияланған көміртегінің «Ті үсті» (1-сурет) және «интерстициалды» позициясы үшін 7-суретте көрсетілген.



Сурет 2. Адсорбцияланған көміртегінің «Ті үсті» үстінен а) және б) бүйірінен көрінісі

4-Кесте. (001) TiO_2 терминацияланған бетіндегі С атомы үшін есептелген адсорбция энергиясының мәндері

Адсорбциялану орны	$E_{адс}$, эВ	қашықтық, Å		Заряд, e		
		Ag-O	Ag-Mn	Ag	O	Mn
«Ті үсті»	-1.10	3.38	2.59	-0.01	-1.16	1.59
«О үсті»	-1.03	2.50	2.87	-0.08	-1.17	1.61
«Ti-O көпір»	-1.04	2.86	2.62	-0.04	-1.18	1.58
«O-O көпір»	-1.02	2.65	2.79	-0.03	-1.18	1.57
С димері	-0.88	3.24	2.98	-0.01	-0.98	1.65

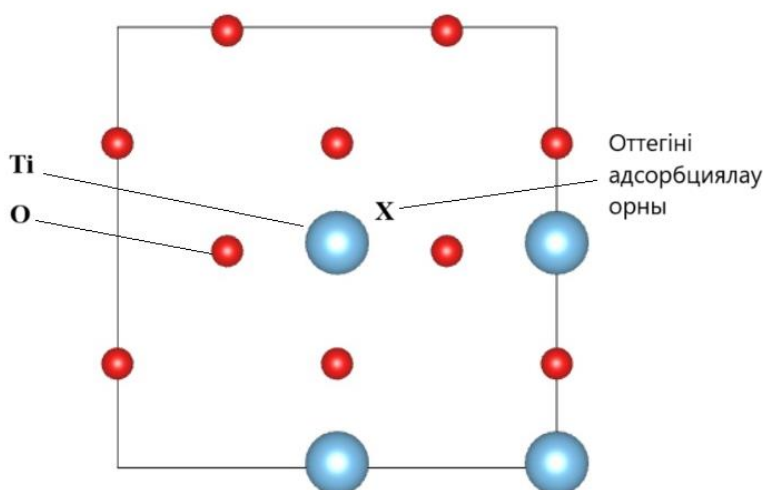
3.3 (001) BaTiO₃ бетіндегі оттегінің адсорбциясының кванттық механикалық моделі. Адсорбция кислорода на LaMnO₃ (001) на MnO₂-терминированной поверхности

Жоғарыда айтылғандай, SOFC-де оттегі BaTiO₃ катодының бетіне адсорбцияланады, содан кейін электролитке беріледі.

Бұл тарауда біз молекулалық мүмкіндігін зерттейміз, яғни O₂ молекуласының атомдарға ыдырауынсыз, сонымен қатар диссоциативті, т.б. O₂ молекуласының атомдарға ыдырауымен, SOFC катодының бетінде оттегінің адсорбциясы.

Беттік модель адсорбцияланған оттегі атомын TiO₂-мен аяқталатын (Ba_{0,75}Ti₂O_{7,75}) 7-жазықтық стехиометриялық емес симметриялы пластинаның екі жағына орналастыру арқылы құрастырылды (4-кесте).

Үлгінің беткі ұяшығы 2a×2b кеңеюіне ие (2-сурет), қоспа атомдарының минималды концентрациясы бір беттік элементке (TiO₂) 12,5% құрайды. Біздің есептеулеріміз 0 К температураға сәйкес болғандықтан, көлемі үшін оңтайландырылған a = 5,56 Å, b = 5,61 Å параметрлері бар сәйкес тетрагональды бірлік ұяшықты қолдандық.



Сурет 3. Атомдық оттегін адсорбциялау орны: TiO₂-мен терминацияланған бет: «Ti үсті» позициясының маңы

Оттегі атомдары мен молекулалары үшін ең қолайлы адсорбция сайттары 3-суретте көрсетілгендей, беттік атомдардың үстіндегі позициялар және интерстициалды сайттағы жоғары симметриялы орын болып табылады.

$$E_{\text{адс}}^{\text{атом}}(0) = \frac{-1}{2} [E_{\text{пластина}}^{\text{адс}}(0) - E_{\text{пластина}} - 2E^{(0)}] \quad 2)$$

Атомдық оттегі адсорбцияланғанда

$$E_{\text{адс}}^{\text{атом}}(\text{O}_2) = \frac{-1}{2} [E_{\text{пластина}}^{\text{адс}}(\text{O}_2) - E_{\text{пластина}} - 2E^{(\text{O}_2)}] \quad (3)$$

Молекулалық оттегінің адсорбциясы. (1) және (2) теңдеулерде $E_{\text{пластина}}^{\text{адс}}$ (0) (0) – екі жағынан адсорбцияланған атомдық (O) және (O₂) молекулалық оттегі адсорбцияланған пластинка энергиясы кислородом, $E_{\text{плас}}$ – таза пластинаның негізгі күйінің энергиясы, $E^{(\text{O}_2)}$ – оқшауланған оттегі атомының негізгі күйінің энергиясы және $E^{(\text{O}_2)}$ – оқшауланған оттегі молекуласының негізгі күйінің энергиясы. Mn ионының үстінде атомдық оттегінің адсорбциясы Зарядтардың қайта бөлінуінің есептеулері (4-кесте) адсорбцияланған оттегі атомының беттік Mn иондарымен күшті химиялық әрекеттесуін растады.

BaTiO₃-тегі валенттілік аймағының жоғарғы бөлігі негізінен Ti иондарындағы d күйлерінен түзіледі. Ең жақын беттік иондардан адсорбцияланған оттегі атомына берілген зарядтың шамасы 0.65 е (ең жақын Ti-дан 0,18 е және ең жақын төрт оттегі ионынан 0,16 е, қалған 0,28 е басқа суперклеткалық иондардан). Адсорбция нәтижесінде Ti ионының спин сәті айтарлықтай төмендейді. Оттегінің адсорбциясы жүретін Ti ионы өз орнын өзгертеді және адсорбцияланған оттегі бағытында 0,24 Å-ге ауысады (3-сурет), ал беттік оттегі атомдары пластинкаға аздап (0,03-0,06 Å) енеді. Жоғарыда көрсетілген зарядтың Ti беткі ионынан адсорбцияланған O атомына ауысуы толық және айырмашылық электронды тығыздық картасында көрсетілген.

Көміртек атомдарының оттегі молекуласының адсорбциясы, оның диссоциациясы және атомдық оттегінің тотықсыздану процесіне каталитикалық әсерін анықтау үшін BaTiO₃ бетінде TiO₂ зерттелді – көміртектің қатысуымен оттегінің адсорбциясы мен диссоциациясын модельдеу терминацияға бұрын жасалған модель пайдаланылды, онда O₂ молекулалары TiO₂ терминациясында «O үстінде» адсорбцияланған. Көміртек атомы үшін, жоғарыда алынған мәліметтерге сәйкес, TiO₂ терминациясындағы "O ионы үстінде" позиция болып табылатын ең энергетикалық тиімді орындар таңдалды [17-18].

Бетінде адсорбцияланған көміртегі атомы болған кезде молекулалық оттегі адсорбция энергиясының абсолют шамасы -1.5 эВ-ден -2.82 эВ-ге дейін артады, бұл Ti беттік иондарындағы заряд мөлшерінің өзгеруімен түсіндіріледі. Атап айтқанда, көміртегі атомы зарядтың бір бөлігін Ti беттік иондарынан алады, бұл теріс зарядталған адсорбцияланған O₂ молекуласы мен оң зарядталған Ti иондары арасындағы кулондық өзара әрекеттесудің жоғарылауына әкеледі. Теріс зарядталған адсорбцияланған O₂ мен Ti арасындағы итеру әсері O₂-Ti қашықтығымен салыстырғанда олардың арасындағы үлкен қашықтыққа байланысты әлсіз көрінеді. 3.19-кестеден қосымша бетте адсорбцияланған оттегі молекуласындағы атомдар арасындағы байланыс ұзындығы 1.28 Å-ден 1.30 Å-ге дейін өсетінін көруге болады, бұл оның заряд күйінің өзгеруіне байланысты.

Адсорбцияланған оттегі молекуласы мен Ti беттік ионы арасындағы қашықтық 1.89 Å-ден 1.92 Å-ге дейін аздап артады. Көміртегінің қатысуымен O₂ молекуласының адсорбция процесінде зарядтың бетінен оған берілген шама 0.38 е құрайды, бұл таза бет жағдайында ұқсас мәннен едәуір асады, ол 0.24 е. бұл әсер және жоғарыда көрсетілген

O₂ адсорбция энергиясының ұлғаюына әкеледі. 4-кестеде келтірілген мәліметтерден адсорбцияланған оттегі мен қосымша көміртегінің арасында 2.47 Å қашықтықта әлсіз иондық байланыс пайда болатындығын көруге болады.

Қорытынды

Бұл зерттеуде тығыздық функционалы теориясы әдісі жазық толқындар базисінде псевдопотенциал әдісімен бірге қолданылады. Псевдопотенциал әдісі көп атомдардан тұратын көп электронды жүйені зерттеуді тек атомаралық өзара әрекеттесуге айтарлықтай үлес қосатын электрондарды, атап айтқанда сыртқы электронды қабықшаларда орналасқан валенттік электрондарды қарастыру арқылы жеңілдетуге мүмкіндік береді. Қалған электрондар оларды ядромен біріктіру арқылы қарастырылады, нәтижесінде ядродағы Кулон орталығының орнына валенттік электрондар үшін салыстырмалы түрде аз потенциалды шұңқыр беретін «псевдоатом» қарастырылады, бұл толқындық функцияны құру үшін негізгі жазық толқындардың санын айтарлықтай азайтуға мүмкіндік береді.

TiO₂-терминациялы тетрагоналді (001) BaTiO₃ бетіндегі көміртегі атомының адсорбциясы үшін энергетикалық тұрғыдан ең тиімді позициялар адсорбция энергиясы -1.8 эВ болатын "O- үсті" позициясы және адсорбция энергиясы бар TiO₂-терминалды беті -1.65 эВ екендігі анықталды. Көміртегі концентрациясын арттыру шағын байланыс энергиялары TiO₂ терминалды беттерінде байқалатыны көрсетілген. Энергияның шамалары сәйкесінше -0.31 эВ және -0.88 эВ құрайды.

TiO₂-терминациялық бетіндегі көміртегі атомының диффузиясы энергиясы өте төмен және шамамен -0.41 графен тәріздес сақиналардың түзілуіне әкеледі.

(001) TiO₂-терминациялық бетіндегі оттегінің адсорбциясы үшін ең тиімді позициялар Ti ионының үстіндегі позиция болып табылады, атомдық оттегі үшін адсорбция энергиясы -0.78 эВ, ал молекулалық үшін -2.12 эВ кендігіне ықпал етті.

Авторлардың қосқан үлесі

Сатанова Б.М. – мәтін жазу және оның мазмұнын сыни тұрғыдан қарау, зерттеу нәтижелерін жинау, талдау, зерттеу жұмысын жүргізу.

Абуова Ф.У., Абуова А.У. – деректердің дұрыстығына, мақаланың барлық бөліктерінің тұтастығына байланысты мәселелерді реттеу, жариялау үшін мақаланың соңғы нұсқасын бекіту

Байкадамова Л.С. – идея қалыптастыру, негізгі мақсаттар мен идеяларды дамыту, мақаланың рәсімделуіне үлес.

Қаптағай Г.Ә., Инербаев Т.М. – зерттеулер жүргізу, деректерді және дәлелдемелерді жинау талдау және алынған деректерді түсіндіру.

Қойлық Н.О. – зерттеу нәтижелеріне статистикалық талдау жүргізу.

Әдебиеттер тізімі

1. Wang Q. H., Kalantar-Zadeh K., Kis A., Coleman J. N. & Strano M. S. *Electronics and optoelectronics of twodimensional transition metal dichalcogenides* // Nat. Nanotechnol. – 2012. – Vol.7. – P. 699–712. – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
2. Geim A. K. & Grigorieva I. V. *A comprehensive review of stacking 2DLMs into diverse vdWHs*. Van der Waals heterostructures // Nature. – 2013. – Vol. 499. – P. 419– 425. – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
3. Andres, C.-G. [et al.] *Deterministic transfer of twodimensional materials by all-dry viscoelastic stamping*. 2D Mater. – 2014.– Vol. 1. – P. 011002. – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
4. Halim U. [et al.] *A rational design of cosolvent exfoliation of layered materials by directly probing liquid–solid interaction* // Nat. Commun. – 2013. – Vol. 4. – P. 2213.
5. Ye J. [et al.] *Superconducting dome in a gate-tuned band insulator* // Science. – 2012. – Vol. 338. – P.1193–1196. – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
6. Feng Q. [et al.] *Growth of MoS₂(1-x)Se_{2x} (x=0.41–1.00) monolayer alloys with controlled morphology by physical vapor deposition* // ACS Nano. – 2015. – Vol. 9. – P. 7450–7455. – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
7. Cao Y. *Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices* // Nature. – 2018. – Vol. 556. – P. 43.
8. Cao Y. *Correlated insulator behaviour at half-filling in magic-angle graphene superlattices* // Nature. – 2018. – Vol. 556. – P. 80. – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
9. Petoukhoff C. E., Kosar S., Goto M., Bozkurt I., Chhowalla M., and Dani K. M. *Charge transfer dynamics in conjugated polymer/MoS₂ organic/2D heterojunctions* // Mol. Syst. Des. Eng. – 2019. –Vol. 4. – P. 929–938. – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
10. Petoukhoff C. E., Krishna M. B. M., Voiry D., Bozkurt I., Deckoff-Jones S., Chhowalla M., O’Carroll D.M., and Dani K. M. *Ultrafast Charge Transfer and Enhanced Absorption in MoS₂-Organic van der Waals Heterojunctions Using Plasmonic Metasurfaces* // ACS Nano. – 2016. – Vol. 10. – P.9899-9908. – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
11. Karmakar A., Al-Mahboob A., Petoukhoff C. E., Kravchyna O., Chan N. S., Taniguchi T., Watanabe K., and Dani K. M. *Dominating Interlayer Resonant Energy Transfer in Type-II 2D Heterostructure* // ACS Nano. – 2022. – Vol. 16. – P. 3861–3869. – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
12. Gusynin V.P., Sharapov S.G., Carbotte J.P. *Magneto-optical conductivity in graphene* // J. Phys. Condens. Matter. – 2006. – Vol. 13. – P. 026222. – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
13. Hanson G.W. *Dyadic Green’s functions for an anisotropic, non-local model of biased graphene* // IEEE Trans Antennas Propag. – 2008. – Vol. 5. – P. 747–57. – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
14. Gusynin V.P., Sharapov S.G., Carbotte J.P. *On the universal ac optical background in graphene* // New. J.Phys. – 2009. – Vol. 11. – P. 095013. – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**
15. P. Blyweert, A. Zharov, D. Meisak, A. Plyushch, J. Macutkevič, Banys. J. *Applied 2023 Electromagnetic properties of 3D-printed carbon–BaTiO₃* Physics Letters. -2023. – Vol. 12. – P. 012903 – **ағылшын тіліндегі журнал мақаласы**

**Сатанова Б.М.¹, Абуова Ф.У.¹, Абуова А.У.¹, Байкадамова Л.С.², Қаптағай Г.Ә.*², Қойлық Н.О.²,
Инербаев Т.М.¹**

¹*Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан*

²*Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан*

**Автор для корреспонденции: gulbanu.kaptagai@mail.ru*

Исследование влияния легирования углерода на адсорбцию кислорода на поверхности ВаTiO₃ (001) с первых принципов

Аннотация. Твердотельные тонкопленочные фотоэлектрические технологии перспективны для преобразования солнечной энергии в электрическую, чтобы удовлетворить потребности мировой экономики в энергии. Новые тонкопленочные солнечные элементы, такие как органические солнечные элементы, солнечные элементы с красителями и перовскитные солнечные элементы, стали эффективными подходами к их проектированию. Такие функциональные материалы должны быть конкурентоспособными по сравнению с устоявшимися технологиями, такими как кремниевые солнечные элементы, в дополнение к простоте методов их применения и меньшему количеству производственных затрат при их проектировании, а также эффективности преобразования энергии. Тонкопленочные технологии в настоящее время являются одним из основных направлений в исследованиях фотоэлектрической пленки из-за впечатляющего роста производительности за несколько лет исследований. Различные подходы были использованы для обеспечения долгосрочной работы и повышения энергетической эффективности перовскитных солнечных элементов. Для устойчивого функционирования солнечных элементов наиболее эффективным является легирование элементами на основе углерода.

В работе теоретический исследуется каталитическая роль углерода на поверхности ВаTiO₃ в сочетании метода теории функционала плотности с методом псевдопотенциала в базисе плоских волн. На основе теории функционала плотности был исследован процесс адсорбции атомарного и молекулярного кислорода на чистой и допированной (001) поверхности титаната бария в тетрагональной фазе. Наиболее эффективными положениями для адсорбции углерода на TiO₂ – терминированной (001) поверхности были положения «над ионом Ti». На чистой поверхности энергия адсорбции была -0,5 эВ для атомарного кислорода, адсорбированного вблизи энергетически эффективного места, определенного для углерода, и -2,12 эВ для молекулярного. Для атомарного кислорода, адсорбированного на поверхности, легированной углеродом, энергия адсорбции уменьшилась на -0,2 эВ, а для молекулярного-на -0,4 эВ.

Ключевые слова: ВаTiO₃, адсорбция кислорода, расчеты из первых принципов, комбинации с графеновыми живыми структурами

**B.M. Satanova¹, F.U.Abuova¹, A.U.Abuova¹, L.S.Baikadamova², G.A. Kaptagai*², N.O. Koilyk²,
Inerbaev T.M.¹**

¹*L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan*

²*Kazakh National Women's Pedagogical University, Astana, Kazakhstan*

**Correspondence: gulbanu.kaptagai@mail.ru*

Study of the effect of carbon impurity on oxygen adsorption on the surface of BaTiO₃ (001) from the first principles

Abstract. Solid-state thin-film photovoltaic technologies are promising for converting solar energy into electrical energy to meet the energy needs of the global economy. New thin-film solar cells such as organic solar cells, dye-coated solar cells, and perovskite solar cells have become effective approaches to their design. Such functional materials must be competitive with established technologies such as silicon solar cells, in addition to the simplicity of their application methods and lower production costs in their design, as well as energy conversion efficiency. Thin-film technology is currently one of the main directions in photovoltaic film research due to the impressive performance growth over several years of research. Various approaches have been used to ensure long-term operation and increase the energy efficiency of perovskite solar cells. For the sustainable functioning of solar cells, doping of the carbon base with elements is the most effective.

The paper investigates the catalytic role of a carbon dopant on the surface of BaTiO₃ in the theoretical combination of the density functional theory method with the pseudopotential method in the basis of plane waves. Based on the theory of the density functional, the process of adsorption of atomic and molecular oxygen on the TiO₂-terminated (001) surface of barium titanate of in the tetragonal phase, which was pure and doped with carbon atoms, was investigated. The most effective places for carbon adsorption on the TiO₂ terminated (001) surface were the positions of the “Ti atop”. On a clean surface, the adsorption energy was -0.5 eV for atomic oxygen adsorbed near the energy efficient site defined for carbon, and -2.12 eV for molecular oxygen. For atomic oxygen adsorbed on a carbon-doped surface, the adsorption energy decreased by -0.2 eV, and for molecular oxygen by -0.4 eV.

Keywords: BaTiO₃, oxygen adsorption, first-principle calculations, combinations with graphene living structures

References

1. Wang Q. H., Kalantar-Zadeh K., Kis A., Coleman J. N. & Strano M. S. *Electronics and optoelectronics of twodimensional transition metal dichalcogenides* // Nat. Nanotechnol. – 2012. – Vol.7. – P. 699–712.
2. Geim A. K. & Grigorieva I. V. *A comprehensive review of stacking 2DLMs into diverse vdWHs. Van der Waals heterostructures* // Nature. – 2013. – Vol. 499. – P. 419– 425.
3. Andres, C.-G. [et al.] *Deterministic transfer of twodimensional materials by all-dry viscoelastic stamping*. 2D Mater. – 2014.– Vol. 1. – P. 011002.
4. Halim U. [et al.] *A rational design of cosolvent exfoliation of layered materials by directly probing liquid–solid interaction* // Nat. Commun. – 2013. – Vol. 4. – P. 2213.
5. Ye J. [et al.] *Superconducting dome in a gate-tuned band insulator* // Science. – 2012. – Vol. 338. – P.1193–1196.

6. Feng Q. [et al.] *Growth of MoS₂(1-x) Se₂x (x=0.41–1.00) monolayer alloys with controlled morphology by physical vapor deposition // ACS Nano. – 2015. – Vol. 9. – P. 7450–7455.*
7. Cao Y. *Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices // Nature. – 2018. – Vol. 556. – P. 43.*
8. Cao Y. *Correlated insulator behaviour at half-filling in magic-angle graphene superlattices // Nature. – 2018. – Vol. 556. – P. 80.*
9. Petoukhoff C. E., Kosar S., Goto M., Bozkurt I., Chhowalla M., and Dani K. M. *Charge transfer dynamics in conjugated polymer/MoS₂ organic/2D heterojunctions // Mol. Syst. Des. Eng. – 2019. –Vol. 4. – P. 929-938.*
10. Petoukhoff C. E., Krishna M. B. M., Voiry D., Bozkurt I., Deckoff-Jones S., Chhowalla M., O'Carroll D.M., and Dani K.M. *Ultrafast Charge Transfer and Enhanced Absorption in MoS₂-Organic van der Waals Heterojunctions Using Plasmonic Metasurfaces // ACS Nano. – 2016. – Vol. 10. – P.9899-9908.*
11. Karmakar A., Al-Mahboob A., Petoukhoff C. E., Kravchyna O., Chan N. S., Taniguchi T., Watanabe K., and Dani K. M. *Dominating Interlayer Resonant Energy Transfer in Type-II 2D Heterostructure // ACS Nano. – 2022. – Vol. 16. – P. 3861–3869.*
12. Gusynin V.P., Sharapov S.G., Carbotte J.P. *Magneto-optical conductivity in graphene // J. Phys. Condens. Matter. – 2006. – Vol. 13. – P. 026222.*
13. Hanson G.W. *Dyadic Green's functions for an anisotropic, non-local model of biased graphene // IEEE Trans Antennas Propag. – 2008. – Vol. 5. – P. 747–57.*
14. Gusynin V.P., Sharapov S.G., Carbotte J.P. *On the universal ac optical background in graphene // New. J.Phys. – 2009. – Vol. 11. – P. 095013.*
15. P. Blyweert, A. Zharov, D. Meisak, A. Plyushch, J. Macutkevič, Banys. J. *Applied 2023 Electromagnetic properties of 3D-printed carbon–BaTiO₃ Physics Letters. -2023. – Vol. 12. – P. 012903*

Авторлар туралы мәліметтер:

Сатанова Б.М. – PhD, оқытушы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көш., 13, Астана, Қазақстан

Абуова Ф.У. – PhD, доцент, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көш., 13, Астана, Қазақстан

Абуова А.У. – PhD, доцент, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көш., 13, Астана, Қазақстан

Байкадамова Л.С. – 2 курс докторанты, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан

Қаптағай Г.Ә. – хат-хабар авторы, PhD, доцент, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан

Қойлық Н.О. – Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан

Инербаев Т.М. – Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көш., 13, Астана, Қазақстан

Information about authors:

Satanova B. – PhD, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan str., Astana, Kazakhstan

Abuova F. – PhD, Associate Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan str., Astana, Kazakhstan

Abuova A. – PhD, Associate Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan str., Astana, Kazakhstan

Baikadamova L.S. – Kazakh National Women's Pedagogical University, Astana, Kazakhstan

Kaptagai G.A. – corresponding author, PhD, Associate Professor, Kazakh National Women's Pedagogical University, Astana, Kazakhstan

Koilyk N.O. – Kazakh National Women's Pedagogical University, Astana, Kazakhstan

Inerbaev T.M. – L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan str., Astana, Kazakhstan

Сведения об авторах:

Сатанова Б.М. – PhD, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Кажымукана, 13, Астана, Казахстан.

Абуова Ф.У. – PhD, доцент, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Кажымукана, 13, Астана, Казахстан.

Абуова А.У. – PhD, доцент, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Кажымукана, 13, Астана, Казахстан.

Байкадамова Л.С. – Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан

Қаптағай Г.Ә. – автор для корреспонденции, Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан

Қойлық Н.О. – Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан

Инербаев Т.М. – Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Кажымукана, 13, Астана, Казахстан.



Copyright: © 2025 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).

Бас редакторы: К.Ш. Жумадилов
Компьютерде беттеген: Д. Нурушева

Авторларға арналған нұсқаулықтар,
жарияланым этикасы журнал сайтында берілген: <http://bulphysast.enu.kz>

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің Хабаршысы.
Физика. Астрономия сериясы.
№1(150)/2025 – Астана: ЕҰУ. – 219 б.
Шартты б.т. – 27. Таралымы – сұраныс бойынша
Басуға қол қойылды: 30.03.2025 ж.
Ашық қолданыстағы электронды нұсқа: <http://bulphysast.enu.kz>

Мазмұнына типография жауап бермейді

Редакция мекен-жайы: 010008, Қазақстан Республикасы Астана қ., Сәтбаев көшесі, 2.
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті Тел.: +7(71-72) 70-95-00 (ішкі 31-410)
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің баспасында басылды.