

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛОЖНОГО ПЕРОВСКИТА ($\text{Ba}_x\text{Sr}_{1-x}\text{Co}_{1-y}\text{Fe}_y$) O_3 ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В ТВЕРДОКСИДНЫХ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТАХ И ГАЗОРАЗДЕЛЬНЫХ МЕМБРАНАХ

Толеген Улжан Жанатайқызы

t-ulzhan@list.ru

Студент 5-курса специальности «Ядерная физика» ЕНУ имени Л.Н.Гумилева,
Нур-Султан, Казахстан

Научный руководитель – Абуова Ф. У.

Очевидно, что потребности в энергии у человечества возрастают, а значит должно расти и её производство. Однако решить проблему только строительством атомных станций затруднительно, сжигать постоянно огромное количество органического топлива тоже невозможно по причине ограниченности его запасов, экологии и значительного износа оборудования ТЭЦ. Использование возобновляемых источников энергии также сопряжено с рядом проблем: КПД, особые требования к природным условиям, трудности при включении их в системы большой энергетики, ГЭС практически исчерпали природный ресурс. Перспективы термоядерной энергетики пока то-же туманны, как и 50 лет назад.

На современном этапе все усилия науки направлены на повышение энергоэффективности производства, передачи и использования энергии, а это возможно лишь при условии инновационного развития на основе достижений фундаментальной науки, создания и внедрения новых эффективных, более надежных и долговечных материалов, оборудования и технологий. У России, по мнению экспертов, есть 20% резерв увеличения количества энергии в случае реализации инновационных проектов в области сверхпроводников и умных сетей, накопителей энергии различных типов, водородной энергетики и топливных элементов. Одним из перспективных направлений решения проблем обеспечения электрической энергией потребителей в различных, в том числе и сложных условиях, являются топливные элементы (ТЭ).

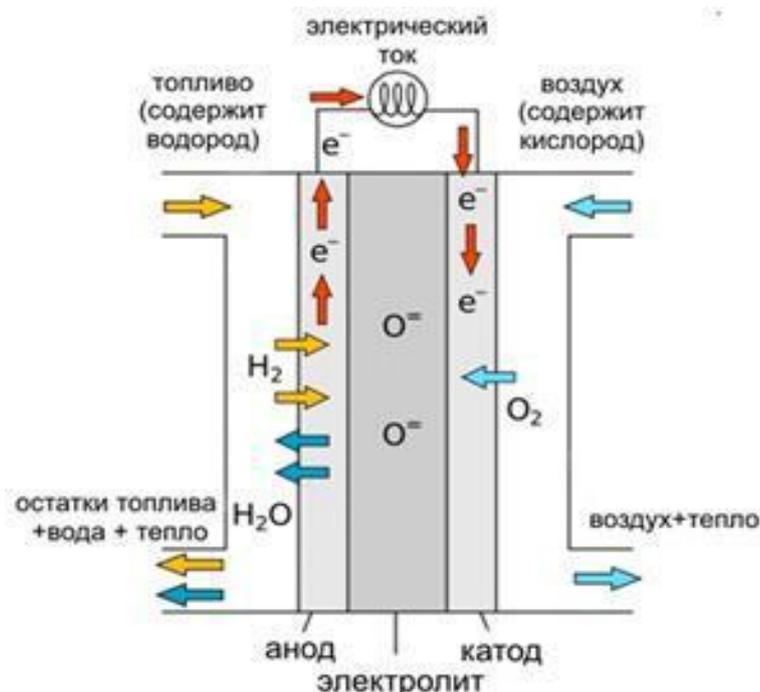


Рис.1 – Принципиальная схема ТЭТЭ

Область применения топливных элементов поистине огромна: замена элементов питания или аккумуляторов в портативных электронных устройствах, полная замена традиционного двигателя внутреннего сгорания или, по крайней мере, дополнение к нему в автомобилях, небольшие энергетические установки для обеспечения энергией и теплом жилых домов и, наконец, мегаваттные электростанции для крупномасштабного производства электроэнергии. Топливные элементы представляют собой устройства для превращения энергии топлива в электрическую энергию и частично в теплоту без вовлечения процесса его сжигания (Схема топливного элемента показана на рис.1).

Можно отметить преимущества процесса получения электроэнергии с использованием ТОТЭ по таким параметрам как КПД, качество топлива, экологичность, уровень шума. ТОТЭ имеют гораздо больший теоретический КПД, чем традиционные технологии преобразования энергии, КПД которых ограничен КПД цикла Отто, Тринклера или Карно. При этом, если предельный КПД электрохимических генераторов на кислород-ионных электролитах достигает 60 %, то с применением протонных электролитов можно получить и 80 %.

Структурная неупорядоченность и устойчивость кристаллической решетки сложного перовскита (Ba, Sr) (Co, Fe) O₃, перспективного катодного материала для твердооксидных топливных элементов и кислородопроницаемых мембран, исследована с помощью расчетов DFT. Предсказано, что ионы Ba и Sr легко обмениваются своими положениями решетки (А-катионное расстройство) аналогично ионам Co и Fe (В-катионное расстройство). Катионные дефекты антисита (обмен катионами типа А и В) обладают относительно высокой энергией образования. Предполагается, что BSCF существует в равновесной смеси нескольких фаз и может экзотермически разлагаться на Ba-и Co- насыщенные гексагональные (Ba,Sr)CoO₃ и Sr - и Fe-насыщенные кубические (Ba,Sr)FeO₃ перовскиты.

Точечные дефекты и устойчивость решетки исследовались с помощью *ab initio* DFT расчетов, выполненных с использованием больших суперячеек и многообразия идеальных и дефектных BSCF -родственных кристаллических структур. Установлено, что сложность кристаллического расположения BSCF приводит к возможности размещения в решетке множества вариаций точечных дефектов и определяет ее химическую стабильность. Катионная кластеризация металлов типа А или требует низкой энергии, подразумевая, что распределение металлов в решетке BSCF не обязательно является высокоупорядоченным, в то время как образование дефектов антисита гораздо более энергетически затратно. Расстройство Френкеля предпочтительнее расстройств Шоттки. Что еще более важно, исходя из термодинамических соображений, предполагается, что BSCF состоит из равновесной смеси нескольких фаз перовскита, и существует несколько альтернативных путей, которые приводят к его разложению на комбинацию кубических и гексагональных перовскитов. Более точный анализ (в настоящее время) позволит учесть энтропийные эффекты при реальных температурах и кинетику процессов диффузии катионов. Полученные результаты согласуются с имеющимися экспериментальными наблюдениями и позволяют надежно предсказывать поведение BSCF в различных условиях. Эти исследования необходимы для изучения возможности использования сложных перовскитов в качестве катодов SOFC и газоразделительных керамических мембран. Полученные результаты помогут разработать рекомендации для химиков-синтетиков и инженеров-химиков по улучшению функции BSCF (и других материалов) преобразования энергии путем оптимизации их химического состава.

Список использованных источников

1. Пенионжкевич Ю.Э. Физика экзотических ядер // Соросовский образовательный журнал. 1995, № 1, 92-93 стр.
2. Ципенюк Ю. М. Долина ядерной стабильности. М.: Соросовский образовательный журнал. 1999, №5, 87-89 стр.

3. Объединенному институту ядерных исследований- 55 лет: 029 Сб. Ст.- Дубна: ОИЯИ, 2011,17-79стр.
4. Дубна Остров стабильности. Юбилейное издание очерков по истории Объединенного института ядерных исследований. 2006 г.

УДК 504.32:54

РАДОН И ЕГО ВКЛАД В ОБЛУЧЕНИЕ НАСЕЛЕНИЯ

Хамыт Ахмедияр Айтмаханұлы

Ahmediyar_kaznu@mail.ru

Магистрант 2 курса специальности «Ядерная физика» ЕНУ им. Л.Н. Гумилева,

Нур-Султан, Казахстан

Научный руководитель –А.Г.Шаханова

Радон - радиоактивный химический элемент 18 группы периодической системы Менделеева; атомный номер 86, относится к *инертным газам*. Три α -радиоактивных изотопа радона встречаются в природе как члены естественных *радиоактивных рядов*: ^{219}Rn (член ряда актиноурана; период полураспада $T_{1/2}=3,92 \text{ сек}$); ^{220}Rn (ряд тория, $T_{1/2}=54,5 \text{ сек}$) и ^{222}Rn (ряд урана — радия, $T_{1/2} = 3,823 \text{ сут}$). Изотоп ^{219}Rn называется также актинон (An), ^{220}Rn — торон (Tn), а ^{222}Rn называется истинным радоном и часто обозначают просто символом Rn . Искусственно, с помощью ядерных реакций получено свыше 20 изотопов радона с массовыми числами между 201 и 222. Для синтеза нейтроно-дефицитных изотопов радона с массовыми числами 206—212 в Объединённом институте ядерных исследований (г. Дубна, СССР) создана специальная газохроматографическая установка, позволяющая за полчаса получать сумму этих изотопов в радиохимически чистом виде.

Открытие радона — результат ранних работ по изучению *радиоактивности*. В 1899 американский физик Б. Оуэнс обнаружил, что при распаде Th образуется некая радиоактивная субстанция, которую можно удалить из растворов, содержащих Th , потоком воздуха. Эту субстанцию Э. Резерфорд назвал эманацией. В 1899 Резерфорд, работавший тогда в Канаде, доказал, что открытая Оуэнсом эманация тория — радиоактивный газ. В том же году Э.Дорн в Германии и А. Дебьерн во Франции сообщили, что и при распаде радия образуется эманация (эманация радия, радон). В 1903 была открыта и эманация актиния, актинон (природные изотопы радона и в настоящее время часто называют эманациями). Таким образом, в случае радона учёные практически впервые столкнулись с существованием у одного элемента нескольких разновидностей атомов, которые позднее и были названы изотопами. Э. Резерфорд, У. Рамзай, Ф. Содди и другие показали, что эманация радия — новый химический элемент, относящийся к инертным газам. За способность люминесцировать в конденсированном состоянии радон предполагали назвать нитоном.

Радон — один из самых редких элементов. Содержание его в земной коре глубиной до 1,6 км около 115 т. Образующийся в радиоактивных рудах и минералах радон постепенно поступает на поверхность земли, в гидросферу и в атмосферу. Средняя концентрация радона в атмосфере около 6-10% (по массе); в морской воде — до 0,001 пкюри/л.

При нормальных условиях радон — газ без цвета, запаха и вкуса; $T_{\text{кип}} -61, 8 \text{ }^\circ\text{C}$, $T_{\text{плав}} -71 \text{ }^\circ\text{C}$. Плотность при $0 \text{ }^\circ\text{C}$ около 9,9 г/л. В 1 объёме воды при $0 \text{ }^\circ\text{C}$ растворяется около 0,5 объёма радона (в органических растворителях значительно больше). На внешней электронной оболочке атома радона находится 8 электронов (конфигурация $6s^2 6p^6$), именно поэтому химически радон весьма недейтелен. Как и ксенон, радон даёт фторид (вероятно, состава RnF_2), который при 500°C восстанавливается водородом до элементарного радона. Как установил Б. А. Никитин, радон может образовывать *клатраты* с водой, фенолом, толуолом и т.д.