

# Лантаны феррит ( $\text{LaFeO}_3$ ) нэгдлийн цахилгаан химийн шинж чанарын судалгаа

Б.Номин<sup>а</sup>, Э.Нямдаваа<sup>б</sup>, Ж.Даваасамбуу<sup>а,с</sup>, Г.Сэвжидсүрэн<sup>а</sup>

<sup>а</sup>ШУА-ийн Физик, технологийн хүрээлэн, Энергийн судалгааны лаборатори

<sup>б</sup>ШУА-ийн Физик, технологийн хүрээлэн, Инноваци технологийн лаборатори

<sup>с</sup>Монгол улсын их сургууль, Шинжлэх ухааны сургууль, Физикийн тэнхим

Энэхүү судалгааны ажилд перовскит бүтэцтэй лантан феррит ( $\text{LaFeO}_3$ ) нэгдлийн бүтэц, оптик шинж чанарыг хэт ягаан туяаны спектроскопоор (UV-vis spectroscopy), цахилгаан химийн шинж чанарыг циклик вольтамметрийн (Cyclic voltammetry) аргуудаар тодорхойлов. Үр дүнд  $\text{LaFeO}_3$  нэгдлийн кристаллитийн хэмжээ  $D = 38.9$  нм, эгэл үүрийн эзлэхүүн  $V = 241.871 \text{ \AA}^3$ , кристалл бүтэц нь орторомбик бүхий  $R\bar{3}m$  огторгуйн групптэй байсан ба хэт ягаан туяаны спектрометрийн үр дүнгээс хориотой бүсийн өргөнийг тооцоолоход  $E_g = 2.26$  эВ байсан. Циклик вольтамметрийн хэмжилтийн үр дүнд цахилгаан багтаамжийг тооцоолоход  $C_s = 1.96$  Ф/г байв.

## I. ОРШИЛ

Эдийн засаг, дэд бүтэц, нөөц боломжоос хамааран хот суурин газар, үйлдвэрлэл, тээвэрлэлт болон хүн төрөлхтөний өдөр тутмын эрчим хүчний хэрэглээний ихэнх хувийг уламжлалт түлш хангаж байна [1]. Уламжлалт түлш нь байгаль орчинд хор нөлөө их, хүртээмж бага зэрэг сул талуудтай учир түүний хэрэглээг багасгахын тулд сэргээгдэх эрчим хүчний эх үүсвэрүүд (нар, салхи, ус, газрын гүн, биомасс) – ийг хэрэглээнд нэвтрүүлэх шаардлагатай юм [2,3]. Гэсэн хэдий ч сэргээгдэх эрчим хүч нь байршил, цаг уураас шууд хамааралтай байдаг учир түүнийг хэрэглээнд нэвтрүүлэхийн тулд тогтвортой байдлыг хангах, ачааллын тэнцвэрийг хадгалах зэрэг асуудлууд тулгардаг [4]. Энэхүү асуудлыг эрчим хүчний хуримтлуур болох суперконденсатор, батарейн системтэй хослуулан хэрэглэснээр шийдвэрлэх боломжтой. Эрчим хүч хуримтлуулах технологи нь сэргээгдэх эрчим хүчний эх үүсвэрийн тасалдлын асуудлыг нөхөх, хадгалах, хэрэгцээтэй үедээ ашиглах боломжийг олгодог [5-7].

Суперконденсатор нь батарейтэй харьцуулахад чадлын нягт өндөр, цэнэглэгдэх/цэнэгээ алдах хурд их, цикл процессын тогтворжилт сайтай байдаг хэдий ч энергийн нягт багатай байдаг [8]. Энэхүү сул талыг сайжруулах судалгааны ажлуудын үр дүнд энергийн нягт өндөртэй рутины оксидыг ( $\text{RuO}_2$ ) олж тогтоосон боловч

түүний өртөг өндөр учир хэрэглээнд нэвтрүүлэхэд бэрхшээлтэй байна. Тиймээс рутины оксидтой өрсөлдөхүйц өртөг хямд, энергийн нягт өндөр материалын судалгааг хийх хэрэгцээ шаардлага тулгараад байна [9,10]. Перовскит нэгдэл нь  $\text{ABO}_3$  бүхий химийн томьёотой ба А катион нь газрын ховор элемент эсвэл газрын шүлтийн металлын ион, В катион нь ихэвчлэн шилжилтийн металлын ион байдаг. Бидний судалгааны объект болох  $\text{LaFeO}_3$  нэгдэл нь  $\text{La}^{3+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{O}^{2-}$  исэлдэхүйн хэмтэй ионуудаас тогтох перовскит төрлийн нэгдэл бөгөөд дулаанд тэсвэртэй, тогтвортой бүтэцтэй, өртөг хямд, хоруу чанар бага зэрэг шинж чанаруудтай байдаг учраас эрчим хүчний хуримтлуур, тэр дундаа суперконденсаторын электродын материалаар ашиглах боломжтой юм [11,12].

Бид өмнөх ажилдаа лантан феррит нэгдлийг зол-гелийн аргаар гарган авч, түүний рентген дифракц болон нил улаан туяаны спектрийн үр дүнг нийтлэсэн [13]. Энэхүү ажилд бид тус нэгдлийнхээ бүтэц, оптик шинж чанар болон цахилгаан химийн шинж чанарыг судалж, үр дүнг хэлэлцүүлэв.

## II. СУДАЛГААНЫ АРГА ЗҮЙ

$\text{LaFeO}_3$  нэгдлийг зол-гелийн аргаар нийлэгжүүлэх горимыг [13]-г дэлгэрэнгүй үзүүлэв. Түүний кристалл бүтцийг рентген туяаны дифрактометрээр (XRD), оптик шинж чанарыг хэт ягаан туяаны спектроскопоор (UV-vis spectroscopy), цахилгаан химийн шинж

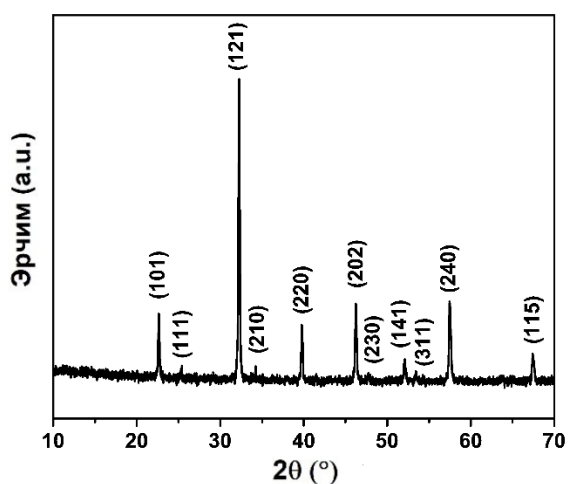
чанарыг циклик вольтамметрийн (Cyclic voltammetry) аргуудаар тодорхойлов.

Рентген туяаны дифрактометрийн анализыг Maxima\_X7000 дифрактометрээр тасалгааны температурт,  $10-80^\circ$  сарнилын өнцгийн мужид ( $2\theta$ ),  $0.01$  алхамтайгаар, алхам тус дээр  $1.54$  сек хугацаатайгаар шарж гүйцэтгэсэн [13]. Хэт ягаан туяаны спектрометрийн анализыг UV-2550 спектрометрээр  $200-800$  нм мужид гүйцэтгэв. Циклик вольтамметрийн хэмжилтийг эргэдэг диск электрод бүхий Epsilon Eclipse загварын потенциометрээр гүйцэтгэв. Энд харьцуулагч электродоор  $\text{Ag}/\text{AgCl}$ , тоологч электродоор цагаан алт (Pt), ажлын электродоор  $6$  мм диаметртэй нүүрстөрөгч (glassy carbon)-ийн электродыг ашигласан. Тус хэмжилтэнд ашиглах зуурмагийг  $0.02$  г нунтаг электродын материал болон  $10$  мкл нафионы уусмалыг  $1$  мл этанолд хийж хэт авиагаар үйлчилж бэлтгэв. Бэлтгэсэн зуурмагаа ажлын электродын гадаргуу дээр түрхэн нимгэн үе үүсгэж, потенциалыг  $1\text{M}$  КОН уусмалд хэмжиж тодорхойлов.

### III. ҮР ДҮН, ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

*XRD* анализ:

Зураг 1-г  $\text{LaFeO}_3$  нэгдлийн рентген туяаны дифрактограммыг үзүүлэв. Хэвтээ тэнхлэгийн дагуу рентген туяаны сарнилын өнцөг  $2\theta$ , босоо тэнхлэгийн дагуу рентген туяаны сарнилын эрчим тус тус харгалзана.



Зураг 1.  $\text{LaFeO}_3$  нэгдлийн рентген туяаны дифрактограмм

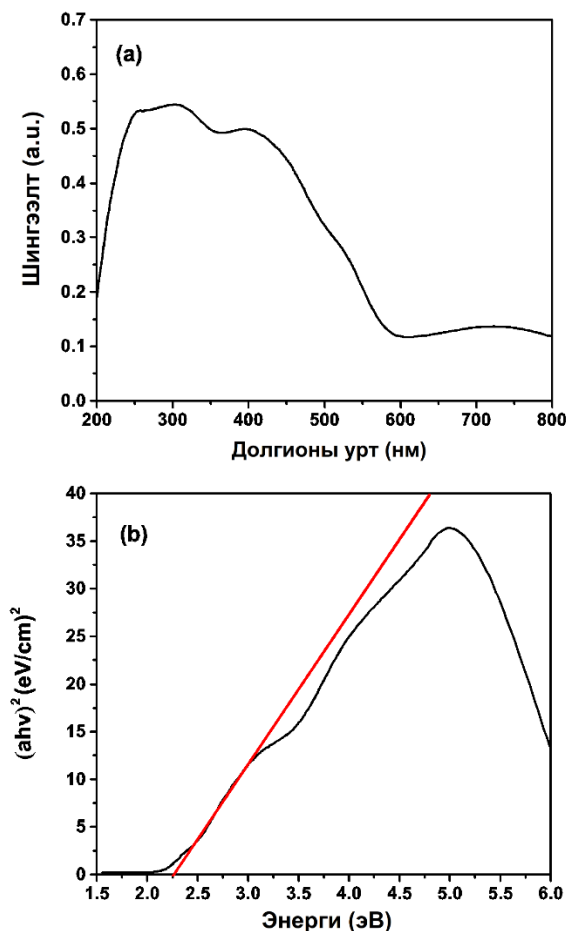
$2\theta = 22.5^\circ, 32.2^\circ, 39.7^\circ, 46.1^\circ, 57.4^\circ$  сарнилын өнцгийн мужид (101), (121), (220), (202), (240) сарнилын хавтгайд харгалзах өндөр эрчим бүхий пикүүд тус тус илэрсэн. Үүнээс үзэхэд

гарган авсан  $\text{LaFeO}_3$  нэгдэл нь *Pnma* огторгуйн групп бүхий орторомбик бүтэцтэй, нэмэлт фазгүй, цэвэршилт өндөртэй болохыг харуулж байна.

Рентген дифракцын үр дүнгээс торын параметруудийг тодорхойлоход  $a = 5.552 \text{ \AA}$ ,  $b = 7.856 \text{ \AA}$ ,  $c = 5.545 \text{ \AA}$ ,  $V = 241.871 \text{ \AA}^3$  байсан ба кристаллитын хэмжээг Дебай-Шеррьерын томъёогоор үнэлэхэд  $D = 38.9$  нм байсан нь бид өндөр цэвэршилттэй, кристалл бүтэцтэй  $\text{LaFeO}_3$  нэгдлийг гарган авсныг илтгэж байна.

*UV-Vis* анализ:

Зураг 2-г  $\text{LaFeO}_3$  нэгдлийн хэт ягаан туяаны шингээлтийн спектр болон хориотой бүсийн өргөнийг тодорхойлсон үр дүнг үзүүлэв. Зураг 2 (a) – д долгионы уртын  $400-450$  нм мужид илэрсэн шингээлтийн пик нь валентын бүсийн O 2p орбиталын электрон дамжууллын бүсийн Fe 3d орбитал руу шилжих шилжилтэнд харгалзана [14].



Зураг 2.  $\text{LaFeO}_3$  нэгдлийн (a) Хэт ягаан туяаны шингээлтийн спектр болон (б) Хориотой бүсийн өргөн

Валентийн бүсэд орших электрон өдөөгдөн дамжууллын бүс рүү шилжихэд харгалзах шингээлтээр тухайн материалын хориотой бүсийн өргөнийг тодорхойлдог.

Хориотой бүсийн өргөнийг тодорхойлоход хэмжилтийн утгыг туссан фотоны энерги  $h\nu$  болон шингээлтийн коэффициент  $\alpha$  – ийн хамаарлын тэгшитгэл (1)-г хувирган график байгуулан, шүргэгч татах экстраполяцийн аргаар үнэлдэг.

$$(\alpha h\nu)^2 = A(h\nu - E_g) \quad (1)$$

Үүнд:  $\alpha$  – шингээлтийн коэффициент,  $h$  – Планкийн тогтмол ( $6.626 \times 10^{-34}$  Ж·с),  $\nu$  – давтамж (Гц),  $E_g$  – хориотой бүсийн өргөн болно.

Зураг 2 (б) – д үзүүлснээр  $\text{LaFeO}_3$  нэгдлийн хориотой бүсийн өргөнийг тооцоход  $E_g = 2.26 \pm 0.09$  эВ гарсан нь түүнийг хагас дамжуулагч материал болохыг харуулж байна. Хүснэгт 1 – т бусад судалгааны ажлын үр дүнтэй харьцуулсан харьцуулалтыг үзүүлэв. Үүнээс харахад арган авсан  $\text{LaFeO}_3$  нэгдлийн хориотой бүсийн өргөн  $E_g$ - ийн утга онолын болон туршлагын утгуудтай нийцэж байна.

Хүснэгт 1.  $\text{LaFeO}_3$  нэгдлийн хориотой бүсийн өргөнийг бусад судалгааны ажлын үр дүнтэй харьцуулсан харьцуулалт

$\text{LaFeO}_3$	Хориотой бүсийн өргөн (эВ)	Эх сурвалж
Онолын утга	2.04	[14]
Туршлагын утга	2.08	[15]
	2.18	[16]
	2.10	[17]
	2.15	[18]
	2.40	[19]
	2.26	Энэ ажилд

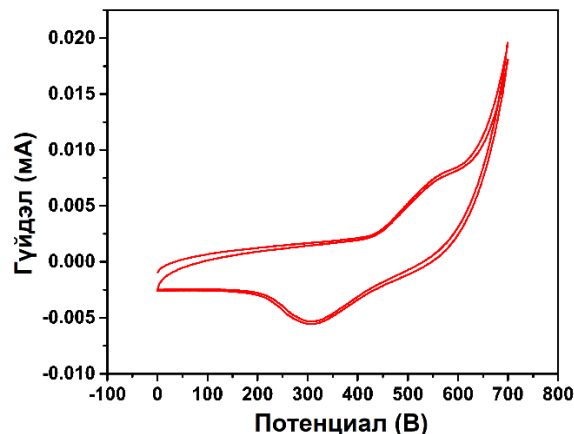
CV анализ:

$\text{LaFeO}_3$  нэгдлийн гүйдэл хүчдэлийн хамаарлын циклик вольтамметрийн хэмжилтийн үр дүнг Зураг 3 – т үзүүлэв. Тус хэмжилтийг 0 – 700 мВ потенциалын мужид, 50 мВ/с хэмжилтийн хурдтай (scan rate) – гаар гүйцэтгэв.

$$C_s = \frac{A}{2m\nu\Delta V} \quad (2)$$

Үүнд:  $A$  – циклик вольтаммограммын нийт талбай ( $A \cdot B$ ),  $m$  – дээжний масс (г),  $\nu$  – хэмжилтийн хурд (В/с),  $\Delta V$  – хэмжилтийн потенциалын муж (В)

Циклик вольтамметрийн хэмжилтийн үр дүнгээс тэгшитгэл (2) – ийг ашиглан хувийн цахилгаан багтаамжийг тооцоолоход  $C_s = 1.96$  Ф/г байв.



Зураг 3.  $\text{LaFeO}_3$  нэгдлийн циклик вольтаммограмм

#### IV. ДҮГНЭЛТ

Гарган авсан  $\text{LaFeO}_3$  нэгдлийн кристалл бүтцийн судалгааг рентген дифрактометрын аргаар судалсан. Үр дүнд нэгдлийн кристаллитийн хэмжээ  $D = 38.9$  нм, эгэл үүрийн эзлэхүүн  $V = 241.871 \text{ \AA}^3$ , кристалл бүтэц нь орторомбик бүхий  $Pnma$  огторгуйн групптэй байсан. Хэт ягаан туяаны спектрометрийн шингээлтийн спектрийн үр дүнгээс хориотой бүсийн өргөнийг тооцоолоход  $E_g = 2.26$  эВ байсан нь онолын болон туршлагын утгуудтай нийцэж байв. Циклик вольтамметрийн хэмжилтийн үр дүнд цахилгаан багтаамжийг тооцоолоход  $C_s = 1.96$  Ф/г байв. Үүнээс үзэхэд гарган авсан  $\text{LaFeO}_3$  нэгдэл нь цахилгаан химийн идэвхтэй бөгөөд электродын материал болох бүрэн боломжтой гэж дүгнэж байна.

#### V. АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

[1]. Chow, Jeffrey, Raymond J. Kopp, and Paul R. Portney. "Energy resources and global development." *Science* 302.5650 (2003): 1528-1531.

[2]. Omer, Abdeen Mustafa. "Energy, environment and sustainable development." *Renewable and sustainable energy reviews* 12.9 (2008): 2265-2300

- [3]. Şen, Zekai. "Solar energy in progress and future research trends." *Progress in energy and combustion science* 30.4 (2004): 367-416.
- [4]. Abolhosseini, Shahrouz, and Almas Heshmati. "The main support mechanisms to finance renewable energy development." *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 40 (2014): 876-885.
- [5]. Mamen, Attapong, and Uthane Supatti. "A survey of hybrid energy storage systems applied for intermittent renewable energy systems." *2017 14th International Conference on Electrical Engineering/Electronics, Computer, Telecommunications and Information Technology (ECTI-CON). IEEE* (2017).
- [6]. Ise, Toshifumi, Masanori Kita, and Akira Taguchi. "A hybrid energy storage with a SMES and secondary battery." *IEEE Transactions on Applied Superconductivity* 15.2 (2005): 1915-1918.
- [7]. Shim, Jae Woong, et al. "Synergistic control of SMES and battery energy storage for enabling dispatchability of renewable energy sources." *IEEE transactions on applied superconductivity* 23.3 (2013): 5701205-5701205.
- [8]. Kryzhanovsky, Leonid N. "Richmann's Experiment and the Electrophorus." *Centaurus* 34.2 (1991):119-124
- [9]. Raistrick, Ian D., and Ruth J. Sherman. "Electrical response of electrochemical capacitors based on high surface area ruthenium oxide electrodes." *Electrode materials and processes for energy conversion and storage* (1987).
- [10]. Muhammed Shafi, P. "Perovskite Oxides as Advanced Energy Materials for Solid Oxide Fuel Cell and Supercapacitor Applications." *Advances in Energy Materials* (2020): 181-204.
- [11]. Venkaiah, G., et al. "Solution combustion synthesis and characterization of nano crystalline lanthanum ferrite using glycine as a fuel." *International Journal of Materials, Methods and Technologies* 1.1 (2013): 1-7.
- [12]. Anajafi, Zakie, Mahmoud Naseri, and G. Neri. "Optical, magnetic and gas sensing properties of  $\text{LaFeO}_3$  nanoparticles synthesized by different chemical methods." *Journal of Electronic Materials* 48 (2019): 6503-6511.
- [13]. Б.Номин, Э.Нямдаваа, Г.Сэвжидсүрэн, Ж.Даваасамбуу, "Суперконденсаторт ашиглах перовскит нэгдлийг гидротермал аргаар гарган авах", *Физик, технологийн хүрээлэн, Бүтээл №49* (2022): 93-100, ISSN 2414-9756.
- [14]. Shein, I. R., et al. "Band structure and the magnetic and elastic properties of  $\text{SrFeO}_3$  and  $\text{LaFeO}_3$  perovskites." *Physics of the Solid State* 47 (2005): 2082-2088.
- [15]. Parida, K. M., et al. "Fabrication of nanocrystalline  $\text{LaFeO}_3$ : An efficient sol-gel auto-combustion assisted visible light responsive photocatalyst for water decomposition." *International journal of hydrogen energy* 35.22 (2010): 12161-12168.
- [16]. Iervolino, Giuseppina, et al. " $\text{LaFeO}_3$  Modified with Ni for Hydrogen Evolution via Photocatalytic Glucose Reforming in Liquid Phase." *Catalysts* 11.12 (2021): 1558.
- [17]. Arima, T., Y. Tokura, and J. B. Torrance. "Variation of optical gaps in perovskite-type 3d transition-metal oxides." *Physical Review B* 48.23 (1993): 17006.
- [18]. Wiranwetchayan, Orawan, et al. "Characterization of perovskite  $\text{LaFeO}_3$  synthesized by microwave plasma method for photocatalytic applications." *Ceramics International* 45.4 (2019): 4802-4809.
- [19]. Pawar, Govinder S., and Asif A. Tahir. "Unbiased spontaneous solar fuel production using stable  $\text{LaFeO}_3$  photoelectrode." *Scientific reports* 8.1 (2018): 3501.