

КРИСТАЛОКВАЗІХІМІЧНЕ ПРОГНОЗУВАННЯ ПРИРОДИ ДЕФЕКТІВ ТА ВЛАСТИВОСТЕЙ ШПІНЕЛЬНИХ НЕСТЕХІОМЕТРИЧНИХ ХРОМІТУ ТА ФЕРИТУ МАГНІЮ

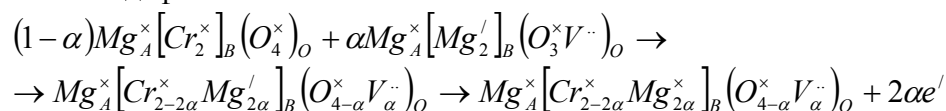
Бойко Г.Д.

Прикарпатський університет імені Василя Стефаника

Важливою проблемою в хімії є прогнозування та встановлення властивостей неорганічних речовин, які в більшості визначаються природою і концентрацією дефектів, тому актуальним є питання одержання матеріалів із заданою природою і концентрацією дефектів. Об'єктами дослідження вибрано магнію хроміт і магнію ферит. Магній хроміт має нормальну структуру $Mg_A^x [Cr_2^x]_B (O_2^x)_O$, а магній ферит обернену структуру, ступінь обернення 0,9 $(Mg_{0,1}^x Fe_{0,9})_A [Mg_{0,9}^x Fe_{1,1}^x]_B (O_4^x)_O$. Крім власних дефектів штучно створюються домішкові дефекти, або дефекти нестехіометрії.

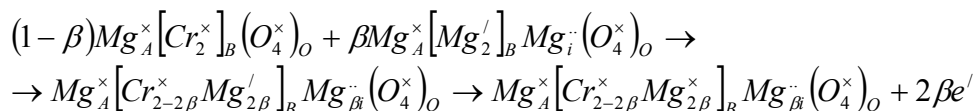
При одержанні магнію хроміту можливі два випадки: надлишок магній оксиду і надлишок хром (III) оксиду.

При надлишку магній оксиду необхідно розглядати стехіометрію по металу і по кисню. Для того, щоб магній оксид був стехіометричний по металу, його потрібно взяти три молі і перетворити у шпінельну структуру, тоді при взаємодії його з магній хромітом утворюється кластер з точковими дефектами:



Одержаний кластер має аніонні вакансії, наявність яких вказує на те, що на них будуть адсорбуватися гази-донори, а саме водень, чадний газ, сірководень, аміак, метан. Провідність, в даному випадку, електронна.

Стехіометричний по кисню магній оксид взаємодіє з магній хромітом утворюючи кластер з вкоріненим магнієм.



При надлишку хром (III) оксиду утворюються сполуки з катіонними вакансіями і вкоріненим киснем, які мають надлишок негативного заряду; на них будуть адсорбуватися гази-акцептори (кисень, вуглекислий газ, водяна пара, хлор). Процес швидше відбувається на катіонних вакансіях, ніж на вкоріненому кисні, на якому густина негативного заряду менша.

При одержанні магній фериту з надлишком магній оксиду утворюються точкові дефекти кількох видів – аніонні вакансії і вкорінений метал, провідність електронна. Надлишок ферум (III) оксиду приводить до виникнення вкоріненого кисню і катіонних вакансій.

Надлишки оксидів металів в сполуках приводять до утворення дефектних структур, а також до появи акцепторів і донорів, які, в свою чергу, можуть визначати властивості цих сполук (електронні, оптичні, реакційну здатність).

Вперше розглянуто кристалоквазіструктурний механізм впливу домішкових дефектів на властивості сполук. Встановлено природу активних центрів адсорбції, наявність яких дає можливість прогнозувати реакційну здатність і адсорбційні властивості сполук.

Автор висловлює подяку своєму науковому керівникові професору Лісняку С.С. за допомогу у виконанні роботи.