

Padėklo įtaka bario cerato plonų dangų mikrostruktūrai ir elektrinėms savybėms

Influence of substrate on the microstructure and electrical properties of barium cerate thin films

Kristina Bočkutė, Monica Susana Campos Covarrubias, Giedrius Laukaitis

Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas, Studentų g. 50, LT-51368 Kaunas

kristina.bockute@ktu.lt

Įvairiose elektrocheminėse sistemose, kaip jutikliai ir kietųjų oksidų elektrocheminiai elementai (SOEC), naudojamos plonasluoksnės dangos. Norint kurti ir gaminti tokias plonasluoksnės sistemas, pasižyminčias pageidaujamosiomis savybėmis, labai svarbu suprasti ir kontroliuoti dangų formavimo procesą. Iš daugelio plonų dangų formavimo technologijų, garinimas elektronų pluoštu yra gerai pritaikytas dangų formavimo metodas medžiagoms, kurių lydymosi temperatūra yra aukšta [1], pvz., tokiems metalų oksidams, kaip bario ceratai ir cirkonatai. Šio dangų formavimo metodo pranašumas - galimybė kontroliuoti augimo greitį ir difuziją, dėl kurios gaunama skirtinga morfologija. Taip pat, šis formavimo metodas gali būti tam tikrų struktūrinių defektų šaltinis. Bario cerio oksidas (BaCeO₃, BCO) su priemaišomis yra plačiai tiriamas dėl savo pritaikymo protonams laidžių elektrinių sluoksnių gamybai. Bario cerato pagrindu pagamintų plonų dangų protoninis laidumas yra svarbi funkcinė savybė, susijusi su taškiniais defektais (pvz., vakansijomis, Frenkelio ar Šotkio defektais) ir 1D ar 2D defektais, įskaitant su dislokacijomis susijusį joninį laidumą [2].

Šiame darbe aptariamos ant įvairių padėklų suformuotų garinant elektronų pluoštu BCO plonų dangų savybės. Naudojantis Kurt J. Lesker EB-PVD 75 garinimo elektronų pluoštu sistema, buvo suformuotos BCO plonos dangos ant Inconel 600 lydinio, MgO (001), YSZ (001) ir Al₂O₃ (0001) padėklų, esant 500 °C, 600 °C ir 700 °C padėklo temperatūrai garinimo metu. Visų gautų dangų storis, išmatuotas Ambios Technology XP-200 profilometru, buvo maždaug 1,5 μm. Santykinis suformuotų BCO dangų tankis ant Inconel 600 ir MgO padėklų siekė 98 %, o YSZ ir Al₂O₃ padėklų - 97 %.

Plonų dangų struktūrinė analizė atlikta Bruker D8 Discover rentgeno spindulių difraktometru, o kristalinės gardelės parametrai apskaičiuoti TOPAS ir Le Bail metodais. Tekstūros koeficientai, apibūdinantys kristalinių orientaciją, apskaičiuoti pagal (1) lygtį.

$$TC_{(h_i, k_i, l_i)} = \frac{I_{(h_i, k_i, l_i)}}{I_{0(h_i, k_i, l_i)}} \left\{ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{I_{(h_i, k_i, l_i)}}{I_{0(h_i, k_i, l_i)}} \right\}^{-1}, \quad (1)$$

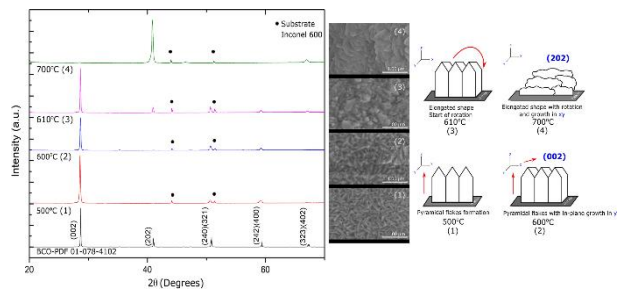
čia $I_{(h_i, k_i, l_i)}$ yra (h_i, k_i, l_i) smailės intensyvumas iš difraktogramos, o $I_{0(h_i, k_i, l_i)}$ atitinka PDF 01-078-4102 šaltinį, N – smailių skaičius difraktogramoje. Paviršiaus topografija ir skerspjūvio vaizdai gauti naudojant skenuojantį elektroninį mikroskopą (SEM) Hitachi S-3400N, elementinė sudėtis įvertinta naudojant Rentgeno spindulių energijos dispersijos spektrometrą (EDS)

Bruker XFlash QUAD 5040. Suformuotų dangų elektrinės savybės tirtos elektrocheminės impedanso spektroskopijos (EIS) metodu.

Šio tyrimo metu nustatyta, kad padėklo temperatūra turėjo įtakos BCO plonų dangų fazinei sudėčiai, morfologijai ir elektrinėms savybėms. BCO plonos dangos, suformuotos ant Inconel 600 padėklo 500 °C - 700 °C temperatūroje, turėjo vienfazę ortorombinę BCO kristalinę fazę. Norint gauti vienfazes plonasluoksnės BCO struktūras, suformuotas ant monokristalinių padėklų, padėklo temperatūra turėjo būti ne mažesnė negu 600 °C. Padėklų temperatūra taip pat turėjo įtakos kristalografinei orientacijai ir plonų dangų morfologijai.

Taip pat buvo nustatyta, kad priklausomai nuo padėklų rūšies ir dangų formavimo temperatūros, kinta BCO plonų dangų augimo mechanizmas, pvz., BCO danga ant Inconel 600 padėklo 500 °C temperatūroje auga dėl adatomų difuzijos kinetinio augimo proceso, o aukštesnėje temperatūroje vyksta grūdelių sukimasis ir tolesnis šoninis augimas; ant monokristalinių padėklų vyrauja šoninis augimas.

Nustatyta, kad laidumo vertės ir aktyvavimo energija labiausiai priklauso nuo plonos dangos mikrostruktūros, ypač nuo kristalografines grūdelių orientacijos, o laidumas mažėja dėl plonų dangų įtempių relaksacijos.



1 pav. BCO plonų dangų, suformuotų 500-700 °C temperatūroje ant Inconel 600 padėklo 2 Å/s greičiu XRD difraktogramos. Plonų dangų, nusodintų ant Inconel 600 padėklo esant skirtingoms temperatūroms, mikrostruktūros raidos modelis

Reikšminiai žodžiai: bario ceratai, mikrostruktūra, plonos dangos, garinimas elektronų pluoštu.

Literatūra

- [1] Y. Lin, X. Chen, Advanced nano deposition methods (Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, Germany, 2016).
- [2] M.D. Armstrong, K.-W. Lan, Y. Guo, and N.H. Perry, ACS Nano 15(6), 9211 (2021).