**Исследование электрохимических процессов и повышение производительности новых катодных материалов на основе оксидов со структурой перовскита для твердооксидных топливных элементов**

***Лу Жундэн***

*Студент 1 курса магистратуры*

*Университет МГУ-ППИ в Шэньчжэне*

Факультет наук о материалах, Шэньчжэнь, Китай

mail: 623185200@qq.com

Твердооксидный топливный элемент (SOFC) - одна из наиболее привлекательных технологий для производства электроэнергии будущего. Однако большинство устройств SOFC работают при высоких температурах (700-1000 ℃), высокая стоимость и низкая долговечность были основными причинами, препятствующими ширкоому внедрению SOFC [1, 2]. Эти проблемы способствовали стремлению снизить рабочую температуру SOFC до диапазона 500-700 °C. Протонпроводящие оксиды стали эффективной альтернативой электролитам твердооксидных топливных элементов средней температуры (IT-SOFCs) [3, 4]. Поскольку энергия активации, необходимая для миграции протонов, намного ниже, чем энергия миграции кислородных вакансий, более высокая проводимость может быть достигнута при более низких температурах с использованием протонопроводящих оксидов. Это привлекательное преимущество протонпроводящих оксидов делает их подходящими кандидатами в качестве электролитов IT-SOFCs. Помимо требований к механическим свойствам и химической совместимости, для электродов и электролитов в промежуточном диапазоне температур необходимы достаточная электропроводность и электрохимическая активность. Производительность отдельной элемента в основном определяется омическими потерями электролита и сопротивлением, вызванным катодной поляризацией, поэтому оптимизация электрических свойств электролитов и электрохимической каталитической активности электродов особенно важна. Модификация интерфейса является эффективной стратегией, которая не только улучшает адгезию между электродом и электролитом, но также может быть полезна для увеличения площади активного реакционного центра. Таким образом, будет внедрен метод микроволнового спекания для облегчения формирования границы раздела электрод/электролит при относительно низкой температуре. Кроме того, анализ механизма электрохимической реакции со стороны катода также будет проведен путем расчета из первых принципов, чтобы получить глубокое понимание катодного каталитического процесса. Поэтому в этом исследовании мы будем работать над следующими аспектами:

1. Среди различных типов катодных материалов, исследованных до настоящего времени, наиболее подходящими катодными материалами в условиях протонпроводящего SOFC является структура перовскита ABO3 и ее производные. По сравнению с другими группами пористые катоды на основе перовскита обладают минимальными перенапряжением и удельным сопротивлением поляризации[5]. Ожидается, что за счет легирования Mo в B-положении катода структуры перовскита Ba0.5Sr0.5Co0.7Mo0.1Fe0.2O3-δ(BSCMF) стабильность фазы и электропроводность будут улучшены при 500-700 °C. Радиус ионов Mo6+, легированных в BSCF, близок к радиусу ионов Fe4+, Co3+, но заряд больше. Кубическая структура BSCF будет стабилизирована при промежуточной температуре, и электрохимические характеристики BSCF в качестве катодного материала H-SOFC будут улучшены. Между тем, энергия образования кислородной вакансии в BSCMF и барьер для переноса протонов будут получены методом теории функционала плотности (DFT) на основе расчета из первых принципов. Этот расчет покажет стадию определения скорости процесса перескока протонов и предоставит ключевые данные для оценки влияния легирования Mo на способность BSCF переносить протоны.
2. Катодный слой твердооксидного топливного элемента с протонным проводником Ba0.5Sr0.5Co0.7Mo0.1Fe0.2O3-δ (BSCF) будет получен методом спекания с помощью микроволновой печи. Традиционная схема спекания в высокотемпературной печи обычно предполагает спекание при температуре более 1000 ℃ в течение нескольких часов. В случае спекания с помощью микроволновой печи, катодный слой BSCF может хорошо прилипать к слою электролита после спекания при 900 ℃ в течение 10 минут [6]. Этот способ позволит сохранить микроструктуру катодного слоя, которая способствует катодной реакции, и уменьшить возможную диффузию элементов между катодным слоем и электролитом BaCe0.7Zr0.1Y0.2O3-δ(BCZY). Чтобы найти оптимальную температуру и время микроволнового спекания, процессы спекания при разной температуре и времени будут сравнены с помощью проведения нескольких параллельных экспериментов.

**Литература**

1. Wachsman E. D., Marlowe C. A., Lee K. T. Role of solid oxide fuel cells in a balanced energy strategy [J]. Energy and Environmental Sciences, 2012, 5(2): 5498-5509.
2. Adams T. A., Nease J., Tucker D., et al. Energy conversion with solid oxide fuel cell systems: a review of concepts and outlooks for the short- and long-term [J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2012, 52(9): 3089-3111.
3. Duan C., Huang J., Sullivan N., et al. Proton-conducting oxides for energy conversion and storage [J]. Applied Physics Reviews, 2020, 7(1): 011314.
4. Abdalla A. M., Hossain S., Azad A. T., et al. Nanomaterials for solid oxide fuel cells: a review [J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2018, 82:353-368.
5. L. Bi, S.P. Shafi, E.H. Da'as, E. Traversa, Tailoring the cathode-electrolyte interface with nanoparticles for boosting the solid oxide fuel cell performance of chemically stable proton-conducting electrolytes, Small 14 (2018) 1801231.
6. L. Bi, S. Boulfrad, E. Traversa, Steam electrolysis by solid oxide electrolysis cells (SOECs) with proton-conducting oxides, Chem. Soc. Rev. 43 (2014) 8255–8270.