

ӘӨЖ541.138

**АВО<sub>3</sub> НАНОКРИСТАЛДАРЫНЫҢ КОМБИНАЦИЯСЫ НЕГІЗІНДЕ ҚАТТЫ  
ОКСИДТІ ОТЫН ЭЛЕМЕНТТЕРІН ТЕОРИЯЛЫҚ ЗЕРТТЕУ**

**Толеген У.Ж.<sup>1</sup>, Асемхан Қ.Қ.<sup>2</sup>, Жеңіс Д.Т.<sup>2</sup>**

*t-ulzhan@list.ru*

<sup>1</sup>Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар кафедрасының магистранты, Нұр-Сұлтан, Қазақстан

<sup>2</sup>Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар кафедрасының 4-курс студенті, Нұр-Сұлтан, Қазақстан

Ғылыми жетекші – Абуова Ф.У.

Жаңа энергетикалық технологиялардың дамуы энергияға деген сұраныстың артуы, энергия бағасының өсуі және жаһандық жылынуға және оның зиянды климатологиялық, экологиялық және әлеуметтік салдарларына қарсы іс-қимыл шараларын күшейту жағдайында маңызды болды [1]. Қазба отындары үнемі азайып келеді, ал кейбіреулер біз мұнай өндірудің шыңына жеттік деп санайды. Бұл химиялық энергияны қазбалы ресурстар және сутегі мен спирттер сияқты туындылар түрінде электр энергиясына айналдыруға қатысты. Ішінара индустрияландыру мен технологиялық прогреске байланысты конверсияның қолданылатын әдістеріне байланысты шығындарды азайту маңызды бола түсуде. Электр энергиясына дәстүрлі түрлендіру газ турбинасы, бу турбинасы немесе генераторды басқаратын поршеньдік қозғалтқыш арқылы жүзеге асырылады, онда Карно циклі тиімділік шегін белгілейді [2]. Отын элементі балама ұсынады, соның арқасында электр энергиясын аз шығынмен және Карно бойынша шектеусіз алуға болады [3]. Ағынды сулар, егер отын таза болса, су, жылу және СО<sub>2</sub> болып табылады.

Энергетикадағы жағдай тұрақты энергетикалық технологиялардың пайда болуына әкелді. Мұнда отын элементтері жаңартылатын энергия секторында энергияны жоғары тиімді түрлендірудің және әсіресе жоғары сенімділіктің арқасында маңызды рөл атқарады. Соңғы онжылдықтар ішінде отын элементтері электр энергиясын өндірудің әлеуетіне байланысты, әдетте Карно циклімен шектелген жылу қозғалтқыштары сияқты электр энергиясын өндіруге қарағанда тиімді болды. ХХ ғасырдың соңында Даму жеделдеп, отын

элементтері технологиясына деген қызығушылық артты. ҚТОЭ технологиясы саласындағы негізгі зерттеулердің бірі ұяшықтың жұмыс температурасын төмендетуге бағытталған. Электролит, анод және катод материалдарының ең жақсы сипаттамалары әдетте 800°C-тан жоғары жұмыс температурасында байқалады. Жұмыс температурасының төмендеуі құрылғының бастапқы құнының едәуір төмендеуімен жұмсақ болат қорытпаларын қолдануға мүмкіндік береді. Алайда, өткізгіштік, сонымен қатар химиялық және механикалық үйлесімділік тұрғысынан төмен температурада жақсы сипаттамаларды көрсететін жаңа материалдарды жасау қажет. Жоғары температурадағы техникалық мәселелерді азайту үшін кеңінен қолданылатын материалдарды онтайландыру қажет. Бұл проблемалар көбінесе электролит пен катодтың термиялық кеңею коэффициенттерінің сәйкес келмеуімен немесе катод материалынан оттегінің жоғалуымен байланысты.

Катодтың оттегіні электрохимиялық қалпына келтірудің белсенді орталығы ретіндегі рөлі материалды жобалау кезінде ескерілуі керек маңызды параметр болып табылады. ҚТОЭ ұзақ уақыт бойы жоғары температурада жұмыс істейді, сондықтан кейбір талаптар орындалуы керек [12]: (i) жоғары электронды өткізгіштік ( $\sigma > 100 \text{ см}^{-1}$ ); (ii) ҚТОЭ-нің басқа компоненттеріне сәйкес келетін жылу кеңейту коэффициенті (ТЕС); (iii) электролитпен және қосылыс материалдарымен химиялық үйлесімділік; (iv) оттегінің жаппай тасымалдануын қамтамасыз ету үшін жеткілікті кеуектілік; (v) жоғары жылу тұрақтылығы; (vi) оттегінің қалпына келу реакциясы үшін жоғары каталикалық белсенділік (ORR); және (vii) төмен шығындар.

Катод реакциясы өте күрделі және диффузия, адсорбция, диссоциация, ионизация және соңында электролитке оттегінің қосылуы сияқты бірқатар жеке кезеңдерді қамтиды [13]. Оттегі молекулалары бетіне адсорбцияланады, онда олар жартылай азайтылған иондық / атомдық бөлшектерді құрайды. Бұл электроактивті бөлшектерді электрод материалының беттері, бөлу беттері немесе негізгі массасы арқылы электролитке тасымалдау керек, онда олар толығымен  $O^{2-}$  түрінде қосылады.

Алайда, олардың жылу кеңеюінің жоғары коэффициенттері бар, бұл оларды осы уақытқа дейін жасалған электролиттерге сәйкес келмейді. 1-кестеде ҚТОЭ үшін ең көп зерттелген катодты материалдар келтірілген.

1-кесте - ҚТОЭ катодтарының бір және қос перовскит құрылымымен негізгі қасиеттері

Катодты материалдар	Термиялық ұлғаю коэф (K <sup>-1</sup> )	Кедергі		Өткізгішті К		Диффузия		
		( $\Omega \text{ см}^2$ )	T (°C)	$\sigma$ (C/см)	T (°C)	k* (см/с)	D* (см <sup>2</sup> /с)	T (°C)
La <sub>1-x</sub> Sr <sub>x</sub> MnO <sub>3</sub>	11.6 × 10 <sup>-6</sup>	0.18	750	180	800	—	3 × 10 <sup>-9</sup>	800
La <sub>1-x</sub> Sr <sub>x</sub> FeO <sub>3-δ</sub>	12.1 × 10 <sup>-6</sup>	0.1	800	125	800	1 × 10 <sup>-5</sup>	6 × 10 <sup>-7</sup>	1000
La <sub>1-x</sub> Sr <sub>x</sub> Fe <sub>0.8</sub> Co <sub>0.2</sub> O <sub>3-δ</sub>	15.4 × 10 <sup>-6</sup>	0.34	750	404	550	6 × 10 <sup>-6</sup>	3 × 10 <sup>-5</sup>	626
La <sub>1-x</sub> Sr <sub>x</sub> Fe <sub>0.8</sub> Ni <sub>0.2</sub> O <sub>3</sub>	15.6 × 10 <sup>-6</sup>	0.16	700	435	800	—	—	—
La <sub>0.6</sub> Ca <sub>0.4</sub> Fe <sub>0.8</sub> Ni <sub>0.2</sub> O <sub>3</sub>	11 × 10 <sup>-6</sup>	0.10	800	260	600	—	—	—
La <sub>0.6</sub> Sr <sub>0.4</sub> Fe <sub>0.8</sub> Cu <sub>0.2</sub> O <sub>3</sub>	14.6 × 10 <sup>-6</sup>	0.138	750	135	275	---	---	---

$\text{Pr}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{Co}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{O}_3$	$19.6 \times 10^{-6}$	0.04 6	800	1040	300	---	$9.4 \times 10^{-5}$	600
$\text{LaNi}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{O}_3$	$11.4 \times 10^{-6}$	0.01 8	800	600	600	---	$2 \times 10^{-7}$	950
$\text{Pr}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Co}_{0.2}\text{Fe}_{0.8}\text{O}_3$	$14 \times 10^{-6}$	0.45 4	600	2190	600	---	---	---
$\text{Sm}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_{3-\delta}$	$22.8 \times 10^{-6}$	0.20	600	1000	850	$6 \times 10^{-5}$	$8.6 \times 10^{-7}$	890
$\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Zn}_{0.2}\text{Fe}_{0.8}\text{O}_{3-\delta}$	$16.5 \times 10^{-6}$	0.48	650	9.4	590	---	---	---
$\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Co}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{O}_3$	$19.9 \times 10^{-6}$	0.15	600	30	600	---	$7.3 \times 10^{-5}$	---
$\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$	$20 \times 10^{-6}$	0.11	600	2000	150	$1 \times 10^{-3}$	$1 \times 10^{-5}$	350
$\text{PrBaCoFeO}_{5+\delta}$	$21 \times 10^{-6}$	0.04 9	800	321	350	---	---	---
$\text{NdBaCoFeO}_{5+\delta}$	$19.5 \times 10^{-6}$	0.06 2	800	172	350	---	---	---
$\text{GdBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$	$20.1 \times 10^{-6}$	0.15	750	512	500	$2 \times 10^{-6}$	$3 \times 10^{-7}$	350
$\text{SmBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$	$16 \times 10^{-6}$	0.09 8	750	815	500	---	---	---
$\text{SmBa}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Cu}_2\text{O}_{5+\delta}$	$14.1 \times 10^{-6}$	0.25	650	277.7	485	---	---	---
$\text{YBaCo}_2\text{O}_{5+\delta}$	$16.3 \times 10^{-6}$	0.11	700	315	325	---	---	---

Соңғы жылдары катодты материалдардың қасиеттерін жақсартуда көптеген қасиеттері бар әртүрлі перовскит оксидтері зерттелген кезде жетістіктерге қол жеткізілді. Алайда, болашақта жоғары өнімділікті қамтамасыз ететін көптеген химиялық заттар әлі зерттелмеген.

#### Қолданылған әдебиеттер тізімі

1. Goto S, Oguma M.. EAS-ERIA Biodiesel Fuel Trade Handbook. 2010. P. 6–15.
2. Ruiz de Larramendi, I.  $\text{Ln}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Fe}_{0.8}\text{M}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$  (Ln = Pr, Gd; M = Co, Ni, Cr, Ga; x = 0.1, 0.2, 0.3) Perovskite Type Oxides as Cathode Materials for Solid Oxide Fuel Cells// University of the Basque Country .2007. 315 p.
3. Primdahl, S. Nickel/Yttria-Stabilized Zirconia Cermet Anodes for Solid Oxide Fuel Cells. Denmark. 1999.
4. Grove, W.R. Philos. Mag.. Ser. 3–14. P. 127–130.
5. Ortiz-Vitoriano N, Bernuy-López C, Ruiz de Larramendi I, Knibbe R, Thydén K, Hauch A, Holtappels P, Rojo T. Optimizing solid oxide fuel cell cathode processing route for intermediate temperature operation // Appl. Energy. 2013. P. 984–991.
6. Tu H, Stimming U. Advances, aging mechanisms and lifetime in solid-oxide fuel cells // J. Power Sources. 2004. P. 284–293.
7. Blenow, P. Strontium-Titanate-Based Anodes for Solid Oxide Fuel Cells. Lund University, Sweden. 2007.
8. Zhao Y, Xia C, Jia L, Wang Z, Li H, Yu J, Li Y. Recent progress on solid oxide fuel cell:

- Lowering temperature and utilizing non-hydrogen fuels. // *Int. J. Hydrogen Energ.* 2013. P.16498–16517.
9. West AR. Inorganic functional materials: optimization of properties by structural and compositional control // *The Chem. Rec.* 2007. P. 206–216.
  10. Mogensen M, Lybye D, Bonanos N, Hendriksen PV, Poulsen FW. Factors controlling the oxide ion conductivity of fluorite and perovskite structured oxides // *Solid State Ionics.* 2012. P.279–286.
  11. Sun C, Hui R, Roller J. Cathode materials for solid oxide fuel cells: a review.// *J Solid State Electrochem.* 2009. P. 1125–1144.
  12. Zhou W, Ran R, Shao Z..Progress in understanding and development of  $\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Co}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$ -based cathodes for intermediate-temperature solid-oxide fuel cells