Российский научный фонд

СО РАН ИХТТМ Институт химии твердого тела и механохимии

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН

Новосибирск | Академгородок

22-24 | 09 | 2025

V Всероссийская с международным участием школа молодых ученых

«Электрохимические устройства: процессы, материалы, технологии»

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ХИМИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА И МЕХАНОХИМИИ СО РАН

«ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ УСТРОЙСТВА: ПРОЦЕССЫ, МАТЕРИАЛЫ, ТЕХНОЛОГИИ»

V Всероссийская с международным участием школа молодых ученых

22-24 сентября 2025

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Новосибирск 2025

УДК 444.6
ББК 24.57

Ответственный редактор
д-р хим. наук *Т.П. Шахтшнейдер*

Электрохимические устройства: процессы, материалы, технологии: V Всероссийская с международным участием школа молодых ученых: Тез. докл. / Ин-т химии тв. тела и механохимии СО РАН. – Новосибирск, 2025. – 78 с.

В сборнике представлены тезисы докладов V Всероссийской с международным участием школы молодых ученых «Электрохимические устройства: процессы, материалы, технологии».

Для широкого круга специалистов, работающих в области физики, химии, химического материаловедения и химической технологии.

При поддержке:
Российского научного фонда (проект № 21-79-30051-П),
Министерства науки и высшего образования Российской Федерации

ISBN 978-5-6049325-5-1

Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, 2025

Школа молодых ученых «Электрохимические устройства: процессы, материалы, технологии» проводится по инициативе Института химии твердого тела и механохимии СО РАН с 2021 года.

Школа традиционно является площадкой для обсуждения современного состояния и перспектив исследований в актуальных областях электрохимии, энергетики и материаловедения.

Основная проблематика школы:

- Закономерности физико-химических процессов в химических источниках тока;
- Новые материалы для энергетики, включая наноразмерные и композиционные;
- Теоретические и практические аспекты химии твердого тела в химических источниках тока;
- Технологии изготовления химических источников тока.

Спонсоры конференции:

Российский научный фонд

ДИЗАЙН СТРУКТУР ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ ДЛЯ ПЕРОВСКИТНЫХ СОЛНЕЧНЫХ БАТАРЕЙ: ВЛИЯНИЕ ДЫРОЧНО-ТРАНСПОРТНОГО МАТЕРИАЛА НА ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ УСТРОЙСТВ

Агафонова Е.Е., Красников Д.В., Насибулин А.Г.

Лаборатория наноматериалов, Сколковский институт науки и технологий, ул. Нобеля, 3, Москва, Россия, 121205, e-mail: ekaterina.agafonova@skoltech.ru

Несмотря на коммерческий успех органических полупроводников (ОПП) в оптоэлектронике, проектирование новых структур сталкивается с проблемой многопараметрической оптимизации. В данном исследовании мы решаем эту задачу для дырочно-транспортных материалов (ДТМ) в n-i-p перовскитных солнечных элементах (ПСЭ). На основе обширной выборки (360 соединений из 177 публикаций) была разработана прогностическая модель для оценки КПД. Анализ показал, что коэффициент заполнения является наиболее чувствительным к свойствам ДТМ параметром. Наибольший вклад в предсказательную способность модели вносят дескрипторы, характеризующие электронное состояние атомов азота и энергию ван-дер-ваальсовых взаимодействий, ответственную за молекулярную упаковку. Достигнутая точность предсказания КПД (±2%) находится в пределах стандартного отклонения экспериментальных данных, что подтверждает адекватность модели и выделяет ключевые направления для молекулярного дизайна высокоэффективных ДТМ.

Таблица 1 — Сравнение предсказательной способности моделей на тренировочной (приведены доверительные интервалы метрик после 10-тикратной кросс-валидации) и тестовой выборках.

Метрика \ Модель	Линейная	Решающие деревья	Градиентный бустинг над решающими деревьями	Иерархическая
MAE	2.9±0.5	1.4±0.1	1.1±0.1	1.1±0.1
RMSE	3.9±0.7	2.0±0.2	1.6±0.3	1.7±0.4
R^2	0.3±0.1	0.82±0.04	0.88±0.03	1.1±0.1
RMSE (валидация)	3.8	2.42	2.11	2.0
Ст. отклон.	5.0			

МОДЕЛИРОВАНИЕ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ЛИТИЕВЫХ И ПОСТЛИТИЕВЫХ АККУМУЛЯТОРОВ: ОТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ К ПРИКЛАДНЫМ РЕШЕНИЯМ

Аксенов Д.А.

Сколковский институт науки и технологий,

121205, г. Москва, Большой бульвар, д. 30, стр. 1, email: d.aksenov@skoltech.ru

Развитие технологий литий-ионных и натрий-ионных аккумуляторов (LIB и NIB) во многом зависит от разработки новых и совершенствования существующих материалов, используемых при создании анода, катода и электролита таких батарей. Одним из перспективных методов поиска новых и улучшения существующих материалов является атомистическое компьютерное моделирование на основе теории функционала плотности. Обеспечивая глубокое понимание свойств материалов, атомистическое моделирование в сочетании с экспериментальными исследованиями даёт рациональный и целенаправленный подход к их разработке [1]. В данном докладе рассматривается применение теории функционала плотности и методов машинного обучения для разработки новых материалов для LIB, NIB и KIB [1,2]. Охватываются как классические аккумуляторы с жидким электролитом, так и перспективные аккумуляторы с твёрдым электролитам. Обсуждается проблема защиты твёрдых электролитов [2]. Особое внимание уделяется уникальным возможностям теории функционала плотности для предсказания локальной атомной структуры, структуры и энергии дефектов и их влияния на электрохимические свойства в сравнении с экспериментальными методами.

Благодарности: Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 24-73-10204.

1. Aksyonov, D. A., Boev, A. O., Fedotov, S. S., and Abakumov, A. M. (2023). Computational insights into ionic conductivity of transition metal electrode materials for metal-ion batteries-A review. Solid State Ionics, 393, 116170.

2. Dembitskiy, A. D., Humonen, I. S., Eremin, R. A., Aksyonov, D. A., Fedotov, S. S., & Budennyy, S. A. (2025). Benchmarking machine learning models for predicting lithium ion migration. npj Computational Materials, 11(1), 131.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЛИТИЯ С MoS_2, ЛЕГИРОВАННЫМ АЗОТОМ

Алексеев В.А., Булушева Л.Г., Окотруб А.В.

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия, Проспект Академика Лаврентьева, 3, 630090, e-mail: alekseev@niic.nsc.ru

Дисульфид молибдена (MoS_2) – перспективный материал для создания электродов литий ионных аккумуляторов (ЛИА) благодаря своей доступности, слоистой структуре и высокой теоретической емкости.[1] Однако, низкие электропроводность и степень обратимости реакции конверсии ограничивают применение MoS_2 в ЛИА. Легирование MoS_2 может послужить путем улучшения целевых параметров за счет увеличения электронной проводимости, включения дополнительных центров накопления ионов лития. Так, азот является привлекательным примесным элементом благодаря его доступности и облегченному введению в структуру MoS_2 по существующим синтетическим методикам. В работах[2,3] продемонстрировано улучшение стабильности работы и емкостных характеристик при легировании атомами азота.

Экспериментальное разделение факторов, влияющих на целевые параметры N-MoS_2 затруднено. В связи с этим, исследовано проводилось расчетными методами в пакете Quantum ESPRESSO. В ходе исследования определены энергетически выгодные распределения дефектов азота в структуре N-MoS_2. Показано, что встраивание азота не способствует избыточному накоплению ионов Li в MoS_2. Увеличение концентрации азота в N-MoS_2 приводит к более раннему протеканию реакции конверсии.

Работа поддержана Российским научным фондом, проект № 23-73-00048.

[1] Stephenson T. et al. Lithium ion battery applications of molybdenum disulfide (MoS2) nanocomposites // Energy Environ. Sci. The Royal Society of Chemistry, 2013. Vol. 7, № 1. P. 209–231.

[2] Qin S. et al. Advanced N-doped mesoporous molybdenum disulfide nanosheets and the enhanced lithium-ion storage performance // J. Mater. Chem. A. Royal Society of Chemistry, 2016. Vol. 4, № 4. P. 1440–1445.

[3] Kotsun A.A. et al. Effect of molybdenum disulfide doping with substitutional nitrogen and sulfur vacancies on lithium intercalation // J. Alloys Compd. 2023. Vol. 947. P. 169689.

КАТАЛИТИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ И ЭЛЕКТРОЛИЗЕРОВ С ПРОТОНООБМЕННОЙ МЕМБРАНОЙ

Алексеенко А.А., Беленов С.В., Гутерман В.Е., Павлец А.С.,
Могучих Е.А., Баян Ю.А., Панкова Ю.А.
Южный федеральный университет, ул. Зорге, 7, Ростов-на-Дону, Россия, 344090,
e-mail: an-an-alekseenko@yandex.ru

Одним из важнейших компонентов топливного элемента с протонообменной мембраной (ТЭПОМ) являются пористые каталитические слои, в которых реализуются электрохимические реакции, производящие электроэнергию и воду из водорода и кислорода. Чем выше качество (функциональные характеристики) содержащегося в этих слоях электрокатализатора, тем большей мощностью и продолжительностью работы могут характеризоваться ТЭПОМ. Электрокатализатор для ТЭПОМ (анодный или катодный) представляет собой наночастицы платины и ее сплавов с другими металлами, распределённые по поверхности углеродного носителя.

Добиться сочетания высоких значений каталитической активности и стабильности является сложной задачей, поскольку эти параметры антибатно зависят от структурно-морфологических характеристик платиносодержащих каталитических систем. Среди различных путей решения проблемы долговечности таких материалов нами были предприняты следующие подходы: получение катализаторов на основе равноразмерных и равномерно распределенных по поверхности углеродного носителя Pt и PtM наночастиц, где M = Co, Ni, Cu; модифицирование углеродных и создание композитных носителей, менее подверженных процессам окисления.

Благодаря применению указанных подходов нам удалось получить ряды электрокатализаторов, характеризующихся повышенной стабильностью, а также сделать прогноз их поведения в различных условиях работы ТЭПОМ.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы стратегического академического лидерства Южного федерального университета («Приоритет 2030»).

ПРОИЗВОДСТВО РОССИЙСКИХ ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗАТОРОВ ДЛЯ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ С ТВЕРДОПОЛИМЕРНОЙ МЕМБРАНОЙ

Алексеенко Д.В. [1,2], Беленов С.В.[1,2], Гутерман В.Е. [1,2], Павлец А.С. [1,2]

[1]Южный федеральный университет, ул. Зорге, 7, Ростов-на-Дону, Россия, 344090

[2]ООО «ПРОМЕТЕЙ РД», ул. Жмайлова, 4г, Ростов-на-Дону, Россия, 344090,

e-mail: alekseenko-da@yandex.ru

Малое инновационное предприятие ООО «ПРОМЕТЕЙ РД» выполняет коммерческое производство электрокатализаторов для электролизеров и низкотемпературных топливных элементов с полимерной мембраной – важных компонентов бурно развивающейся водородной энергетики. В сотрудничестве с учеными Южного федерального университета реализуются разработки в области создания электрокатализаторов с повышенной активностью и стабильностью для реакций выделения кислорода и водорода, окисления водорода и восстановления кислорода.

Производимые на базе предприятия платиноуглеродные катализаторы характеризуются малым размером и равномерным распределением наночастиц платины по поверхности углеродного носителя. Мы полагаем, что позитивные особенности структуры катализаторов серии РМ обусловлены использованием методов коллоидной химии в технологии их синтеза, разработанной в ООО «Прометей РД». Высокие значения функциональных характеристик производимых электрокатализаторов обусловлены не столько малым размером наночастиц платины, сколько равномерностью их пространственного распределения (слабой агрегацией) и высокой доступностью по отношению к реагентам в токообразующих реакциях.

Совершенствование и разработка технологичных методов синтеза новых высокоэффективных электрокатализаторов на основе металлов платиновой группы – одно из перспективных направлений, которое реализует компания.

Исследование микроструктуры катализаторов выполняется на базе ООО «СМА» в рамках микрогранта Сколково. Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания в сфере научной деятельности № FENW-2023-0016.

ПОЛУЧЕНИЕ МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ NiO/C МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ ЭНЕРГЕТИКИ И ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗА

Алексеенко Е.А.[1], Чернышева Д.В.[1,2]

[1]Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) им. М.И. Платова, ул. Просвещения, 132, Новочеркасск, Россия, 346428, e-mail: zhenya.alekseenko.2000@mail.ru

[2]Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Ленинский пр-т., 47, Москва, Россия, 119991, e-mail: da.chernysheva@mail.ru

Благодаря электрохимической активности оксидов металлов (NiO, CoOx, RuO_2 и др.) и высокой проводимости углеродных материалов (УМ), оксид-углеродные композиционные материалы активно исследуются в составе электродов различных устройств электрохимической энергетики и в электрокатализе. Электрохимические свойства таких многофункциональных материалов во многом зависят от их микроструктуры, которая определяется методами синтеза и морфологией исходных компонентов. В связи с этим разработка простого и эффективного метода получения оксид-углеродных композитов, позволяющего контролировать их микроструктуру и обеспечивать высокие удельные электрохимические характеристики, является актуальной как с научной, так и с практической точки зрения задачей.

В данной работе методом электрохимического диспергирования никелевых электродов под действием переменного импульсного тока была получена серия композиционных NiO/C материалов, на основе различающихся микроструктурой УМ из гуминовых отходов каталитической переработки растительной биомассы. В результате комплексного исследования было показано влияние удельной площади поверхности и структуры пористости УМ на электрохимические свойства композиционных NiO/C материалов при тестировании в качестве анодов гибридных суперконденсаторов (СК), а также в качестве электрокатализаторов реакции выделения водорода.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки ПФ (проект FENN-2024-0002).

ИЗУЧЕНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК КИСЛОРОДА В ДОПИРОВАННЫХ ФЕРРИТАХ СТРОНЦИЯ

Арапова М.В., Брагина О.А., Черендина О.В., Чижик С.А., Немудрый А.П.

ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,

ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, Россия, 630090, e-mail: arapova@solid.nsc.ru

Замещенные ферриты стронция представляют важнейший объект фундаментальных исследований и являются ключевыми материалами современных энергетических и экологических технологий твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ), электролизеров и мембран разделения кислорода и конверсии углеводородов. Комплексное изучение кинетики кислородного транспорта в таких оксидах в широком диапазоне условий позволяет установить взаимосвязь замещения тех или иных катионов в решетке феррита с подвижностью кислородных вакансий, протеканием фазовых переходов и других изменений в структуре при изменении температуры или концентрации кислорода, что может быть использовано для целенаправленной оптимизации материалов, а также моделирования и проектирования устройства работы ТОТЭ или мембран, для предсказания их эффективности и долговечности.

В данной работе кинетические характеристики композитов на основе молибден-замещенных ферритов стронция SFM5-GDC были изучены проточным методом релаксации парциального давления кислорода. Анализ взаимодействия образцов композитов с кислородной средой, полученных в широком диапазоне температур, скоростей газовых потоков и масс навески показал, что процесс протекает в диффузионном режиме. Рассчитанные константы химической диффузии D_{chem} для всей серии составили $2\text{-}4\cdot10^{-5}$ см²/с, при этом скорость поверхностного обмена характеризуется константами, на несколько порядков превышающими типичные значения для замещенных ферритов, что подтверждает их перспективность для применения в качестве кислородпроводящих мембран и каталитических мембранных реакторов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 23–43–00130.

ХИМИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ F-ЦЕНТРОВ И ИХ ПРОИЗВОДНЫХ ПО ДАННЫМ ТФП

Афимченко Н.А., Зильберберг И.Л.

ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,

ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, Россия, 630090, e-mail: n.afimchenko@solid.nsc.ru

При облучении ионных кристаллов УФ или при выдержке в парах щелочного металла в их структуре могут возникать анионные вакансии, способные захватывать электрон. Такие структурные дефекты называются F-центрами, представляющие интерес как активационные центры химических реакций.

В рамках ТФП (пакет VASP) рассмотрено образование F-центра на поверхности ионного кристалла NaCl. Были рассчитаны энергетические профили адсорбции и активации метана и кислорода на F-центр. Образование F-центра подтверждается распределением спиновой плотности, положением электронных состояний на DOS и величинами полной и парциальной магнетизации. Активность F-центра соотнесена с величиной энергетических барьеров и разностью полной энергии реакции.

Адсорбция кислорода энергетически выгодна и приводит к образованию супероксида O_2^- (длина связи O-O 1.36 Å, эксп. O_2^- 1.34 Å). Получены энергетические профили разложения метана на F-центре и на супероксиде (рис. 1). Барьеры кислородного и бескислородного маршрутов окисления метана почти одинаковы, однако образование супероксида приводит к понижению энергии, что делает O_2^- центр активатором реакции окисления метана.

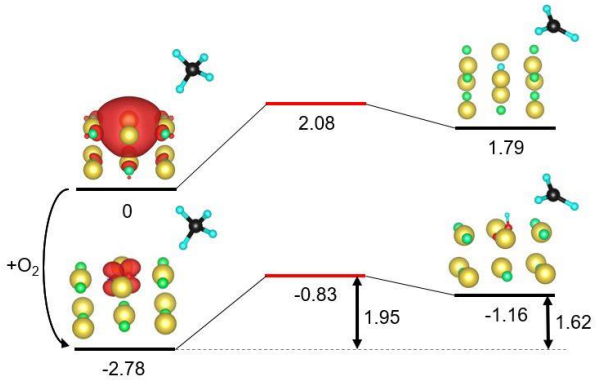

Рисунок 1 — Профиль потенциальной энергии. Энергия приведена в эВ, Na – желтый, Cl – зеленый, C – черный, H – голубой, O – красный, F-центр – красный.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДЕГРАДАЦИИ Pt/C КАТАЛИЗАТОРОВ НА РАЗЛИЧНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НОСИТЕЛЯХ

Баян Ю.А. [1], Криводубский Д.П. [1], Панков И.В. [1], Герасимов Е.Ю. [2], Алексеенко А.А.[1]

[1]ФГБУН Южный федеральный университет,

ул. Большая Садовая, 105/42, Ростов-на-Дону, Россия, 344006, e-mail: bayan@sfedu.ru

[2]ФГБУН Институт катализа имени Г. К. Борескова СО РАН,

пр. Академика Лаврентьева, 5, Новосибирск, Россия, 630090,

e-mail: gerasimov@catalysis.ru

Создание электрокатализаторов на основе наночастиц (НЧ) Pt нанесенных на углеродный носитель является одним из направлений в области электрохимической энергетики. Чтобы оценивать перспективность таких материалов, применяется ряд методов, в том числе оценка микроструктуры. Метод просвечивающей электронной микроскопии идентичных участков (IL-TEM) позволяет изучать деградацию катализаторов в условиях, близких к рабочим, выявляя механизмы деградации.

В работе методом IL-TEM сравнивали деградацию Pt-катализаторов на азот-модифицированном и исходном углеродных носителях. Были синтезированы два 40% катализатора на носителе Ketjenblack EC-300J и его аналоге, допированном азотом. Исходные ПЭМ-изображения показали узкое распределение НЧ Pt близкое к 2.5–3.5 нм с малым количеством агломератов, в отличие от коммерческого аналога HiSPEC 4000. После электрохимических испытаний наблюдалось увеличение среднего размера НЧ за счёт происходящих процессов деградации. Катализатор на азот-модифицированном носителе продемонстрировал наименьший рост размера НЧ в сравнении с другими образцами, что связано с подавлением миграции частиц благодаря лучшему закреплению частиц в местах присутствия азотсодержащих групп. Результаты коррелируют с электрохимическими данными: катализатор на допированном азотом углероду показал наибольшую устойчивость к деградации. В ходе исследования был подтвержден положительный вклад модифицирования носителей азотсодержащими группами в повышение стабильности и активности катализаторов для реакции восстановления кислорода и установлены протекающие механизмы деградации в исследуемых проразцах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда № 24-79-10162 реализуемого в Южном федеральном университете, https://rscf.ru/project/24-79-10162/.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВНЕШНИХ ФАКТОРОВ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ БАТАРЕИ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Белинский Е.В., Фаддеев Н.А.

Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова, ул. Просвещения, 132, Новочеркасск, Россия, 346428,

e-mail: 89183415756b@gmail.com

Топливные элементы с протонообменной мембраной (ПОМТЭ) находят всё более широкое применение в мобильных энергоустановках малой мощности, особенно в системах энергопитания беспилотных летательных аппаратов (БПЛА) [1]. Однако изменение внешних климатических условий (температуры, влажности) во время работы БПЛА может существенно влиять на стабильность работы энергетической установки. Таким образом, для прогнозирования работы батареи ПОМТЭ в условиях работы БПЛА необходимо создать модель, учитывающую влияние внешних факторов.

Для разработки модели был применен комбинированный подход с использованием нескольких программ: Compass 3D и SolidWorks Flow Simulation. Программное обеспечение Compass 3D было применено для построения объекта исследования в масштабе 1:1 с его последующей интеграцией в программное обеспечение SolidWorks Flow Simulation для проведения расчетов. Проведенные расчеты позволили визуализировать температурные поля в батарее ПОМТЭ и определить ее аэродинамические характеристики в различных климатических условиях. Показано, что батарея сохраняет работоспособность в температурном диапазоне окружающей среды от 10 °C до 40 °C при этом перепад температур между входом и выходом из батареи ПОМТЭ находится в допустимых значениях. Повышенной температуры работы батареи ПОМТЭ при 50 °C можно избежать, увеличив скорость подачи окислителя и интенсификации охлаждения.

Разработанная модель может быть использована при проектировании системы энергопитания на основе ПОМТЭ для БПЛА. Однако при разработке необходимо учитывать систему нагрева и/или рекуперацию выделяемого тепла, чтобы решить проблему обледенения при работе энергосистемы в условиях отрицательных температур окружающей среды.

[1] G. Mariscal, C. Depcik, X. Li // Energy Convers. Manag. 2024. V 301. P. 118005.

ОСОБЕННОСТИ МЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ КОМПОЗИТНЫХ БИПОЛЯРНЫХ ПЛАСТИН ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Беличенко М.А., Фаддеев Н.А.

Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова, ул. Просвещения, 132, Новочеркасск, Россия, 346428,

e-mail: maxim_belichenko@mail.ru

Создание экологически чистых, высокопроизводительных и энергоемких источников энергии является одним из приоритетных направлений научно-технического развития. Особое место в этой сфере занимает водородная энергетика, направленная на использование водорода и его производных в качестве энергоносителей для повышения эффективности различных энергосистем.

Перспективной технологией считаются топливные элементы (ТЭ), в которых электроэнергия генерируется напрямую за счет реакции водорода и кислорода, без промежуточных преобразований. Эффективность преобразования химической энергии в электрическую в ТЭ зависит от множества факторов, включая равномерность распределения реагентов, электропроводность между ячейками и эффективность теплоотвода. Все эти функции выполняет биполярная пластина (БП). Оптимальными материалами для БП считаются проводящие полимерные композиты (ППК), обладающие высокой электропроводностью, механической прочностью, низкой стоимостью и простотой производства. ППК создаются путем введения проводящих наполнителей в полимерную матрицу. Однако разнообразие композитных составов требует тщательного выбора методов их обработки. В настоящее время для высокоточной постобработки ППК методом фрезерования разрабатываются специализированные конструкции фрез и спиральных сверл.

В данном исследовании изучалось влияние конструкции инструментов и режимов обработки на качество композитных БП. Было установлено, что при фрезеровании ППК стружечные канавки фрез с поперечными насечками склонны к забиванию материалом, что ухудшает отвод стружки и снижает качество обработки. Кроме того, такие фрезы без алмазного покрытия быстро теряют остроту режущих кромок.

Таким образом, выбор оптимальных инструментов и режимов обработки играет решающую роль в обеспечении качества биполярных пластин из композитных материалов.

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КАТОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ СО СМЕШАННОЙ ПРОВОДИМОСТЬЮ $La_{0.9}Sr_{0.1}Sc_{1-x}Mn_xO_{3\pm\delta}$

Бервицкая О.С., Ичетовкина В.А., Кузнецова Ю.Е., Строева А.Ю., Кузьмин А.В.

ФГБОУ ВО Вятский государственный университет,

ул. Московская, 36, Киров, 610000, e-mail: bervickaja@rambler.ru

В последние годы протон-проводящие оксидные материалы нашли широкое применение в электрохимических устройствах, таких как топливные элементы, электролизёры и газовые сенсоры. Перспективный электролит $La_{0.9}Sr_{0.1}ScO_{3\pm\delta}$ (LSS) выделяется благодаря высокой химической стабильности, протонной проводимости и подвижности протонов. Для повышения эффективности протон-керамических устройств требуется разработка новых электродных материалов, совместимых по химическим и термическим параметрам с электролитом LSS.

Оксиды на основе $LaMnO_3$ широко изучены как катодные материалы для твердооксидных топливных элементов, характеризуются высокой электропроводностью и каталитической активностью. Однако максимальная электропроводность $LaMnO_3$ достигается при температурах выше 800 °C, что ограничивает его использование в устройствах с протон-керамическим электролитом. Допирование $LaMnO_3$ по A- и B-подрешеткам позволяет создавать катодные материалы с улучшенной химической и термической совместимостью с LSS, а также повышенной ионной проводимостью в среднем температурном диапазоне.

В работе исследован широкий ряд допированных материалов $La_{0.9}Sr_{0.1}Mn_{1-x}Sc_xO_{3\pm\delta}$ (x = 0 – 1) методом импедансной спектроскопии в составе симметричных ячеек с электролитом LSS. Определены поляризационные сопротивления и энергии активации при температурах 300–600 °C в условиях осушенного и увлажнённого воздуха. Отмечено уменьшение поляризационного сопротивления с ростом концентрации скандия. Показано, что для применения в протон-керамических топливных элементах наиболее перспективным может быть материал $La_{0.9}Sr_{0.1}Mn_{0.4}Sc_{0.6}O_{3\pm\delta}$.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ Zn-ДОПИРОВАННОГО ГЕКСАГОНАЛЬНОГО ПЕРОВСКИТА $Ba_7In_6Al_2O_{19}$

Бушуева А.В., Анимица И.Е.

ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»,

ул. Мира, 19, Екатеринбург, Россия, 620062, e-mail: bushuevaaaaa@mail.ru

Фазы состава $Ba_7In_6Al_{2-x}Zn_xO_{19-0.5x}$ ($0 \le x \le 0.10$) являются перспективными протонными проводниками и могут быть использованы как электролиты твердооксидных топливных элементов.

$Ba_7In_6Al_2O_{19}$ – структура когерентного срастания двух кислород-дефицитных блоков Ba_2InAlO_5 и одного катион-дефицитного блока $Ba_3In_4O_9$, которые, в свою очередь, являются производными от структуры перовскита.

По данным рентгенофазового анализа было установлено: полученные образцы не содержат в составе примесей; описываются гексагональной симметрией (пр. гр. P63/mmc); при повышении концентрации допанта увеличиваются параметры элементарных ячеек образцов. Введение цинка как допанта позволило улучшить спекаемость образцов, понизить конечную температуру синтеза и получить керамику с относительной плотностью 95%.

Фаза с наибольшей концентрацией допанта инкорпорирует до 1.45 моль H_2O, что в 3.5 раза больше, чем недопированная фаза.

После термической обработки при 600 °C в токе CO_2 было установлено, что фазы, допированные цинком, не деградируют в данных условиях.

С помощью метода электрохимического импеданса была изучена электропроводность исследуемых фаз в зависимости от температуры и парциального давления кислорода в атмосферах различной влажности. В сухой атмосфере при T>500 °C кислород-ионная проводимость допированных фаз была выше, чем для матричной фазы. Во влажной атмосфере ионная проводимость, в том числе протонная, матричного соединения несколько превышала проводимость допированных фаз во всем исследуемом интервале температур, что может быть объяснено наличием акцепторного допанта Zn'_{Al}, являющегося ловушкой протонов («trapping effect»).

Данная работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда и Правительства Свердловской области (грант № 24-13-20026).

ИЗУЧЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИКИ КИСЛОРОДНОГО ОБМЕНА $La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{1-x}Ta_xO_{3-\delta}$ МЕТОДОМ КВАЗИРАВНОВЕСНОГО ВЫДЕЛЕНИЯ КИСЛОРОДА

Власов С.А.[1, 2], Гонгола М.И.[1], Попов М.П.[1], Немудрый А.П. [1]

[1]*ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, Россия, 630090*

[2]*Новосибирский государственный университет, ул Пирогова, 2, Новосибирск, Россия, 630090, e-mail: s.vlasov1@g.nsu.ru*

Твердооксидные топливные элементы (ТОТЭ) считаются одной из ведущих и перспективных технологий для выработки электроэнергии благодаря своей высокой эффективности и низкому уровню выбросов, однако для широкого распространения ТОТЭ требуются инновации в области новых материалов и производственных процессов для увеличения срока службы и снижения стоимости [1]. Для этого катодные материалы исследуют на каталитическую активность в реакции восстановления кислорода и на сопоставимость коэффициента термического расширения (КТР) с КТР часто используемых электролитов.

Перспективным катодным материалом для ТОТЭ является $La_{0.6}Sr_{0.4}CoO_{3-\delta}$ (LSC), однако в рабочих условиях он обладает КТР, несовместимым с КТР большинства электролитов. Возможным решением этой проблемы является допирование LSC высокозарядными катионами (н-р Ta^{5+}). Объектом исследования в данной работе является $La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{1-x}Ta_xO_{3-\delta}$ (LSCTx), где x = 0-10. С помощью метода квазиравновесного выделения кислорода [2] была изучена высокотемпературная десорбция кислорода, а также был проведен сравнительный анализ термодинамических параметров LSCTx.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-79-30051-П, https://rscf.ru/project/21-79-30051/.

[1] Vinchhi P. et al. Recent advances on electrolyte materials for SOFC: A review //Inorganic Chemistry Communications. – 2023. – Т. 152. – С. 110724.

[2] Starkov I. et al. Oxygen release technique as a method for the determination of “δ–p O 2–T” diagrams for MIEC oxides //Physical Chemistry Chemical Physics. – 2014. – Т. 16. – №. 12. – С. 5527-5535.

НОВЫЙ ПОДХОД К СИНТЕЗУ ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫХ PTCO/C ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗАТОРОВ

Гаврилова А.А., Невельская А.К., Коханов А.А., Беленов С.В.

ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет», ул. Большая Садовая, 105/42, Ростов-на-Дону, Россия, 344006, e-mail: agavrilo@sfedu.ru

Платиносодержащие катализаторы являются важной составляющей топливного элемента с протонообменной мембраной (ТЭПОМ). Ввиду использования благородных металлов для синтеза используемых электрокатализаторов стоимость ТЭПОМ сильно возрастает. Одним из способов удешевления топливных элементов и улучшения функциональных характеристик катализаторов является легирование платины различными d-металлами. Однако применение биметаллических катализаторов имеет свои недостатки, в том числе растворение неблагородного компонента с поверхности катализатора в процессе работы топливного элемента.

Одним из наиболее простых и хорошо масштабируемых способов синтеза электрокатализаторов с биметаллическими наночастицами является высокотемпературный синтез в восстановительной атмосфере, где в качестве темплата используют полученные ранее наночастицы платины на углеродном носителе.

В рамках данного исследования были получены PtCo/C катализаторы с использованием Pt/C материалов с равномерным распределением наночастиц платины по поверхности углеродного носителя (содержание платины от 10 до 40 % масс.).

Полученные PtCo/C катализаторы характеризуются электрохимически активной площадью поверхности до 70 $м^2/г(Pt)$, активностью в реакции восстановления кислорода при потенциале 0.9 В до 1500 А/г(Pt), а при потенциале 0.95 до 260 А/г(Pt), потенциалом полуволны до 0.94 В и максимальной мощностью в мембранно-электродном блоке до 650 $мВт/см^2$. Стоит отметить, что полученные PtCo/C электрокатализаторы обладают более высокими функциональными характеристиками по сравнению с коммерческими платиносодержащими аналогами.

Таким образом, можно сделать вывод о перспективности применения высокотемпературного синтеза – простого и технологичного – для получения высокоэффективных PtCo/C катализаторов с пониженным содержанием платины.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 24-79-00279. Место реализации проекта Южный федеральный университет.

СИНТЕЗ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗАТОРОВ ДЛЯ ВОДОРОДНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

Гаврилова А.А., Мауэр Д.К., Невельская А.К., Беленов С.В.

ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет, ул. Большая Садовая, 105/42, Ростов-на-Дону, Россия, 344006, e-mail: agavrilo@sfedu.ru

В настоящее время для создания конкурентоспособных низкотемпературных топливных элементов и электролизеров актуальна проблема получения высокоэффективных катализаторов с пониженным содержанием дорогостоящих металлов, высокой удельной активностью и повышенной стабильностью. Одним из возможных путей решения данной проблемы является создание электрокатализаторов на основе наночастиц высокоэнтропийных сплавов (ВЭС), нанесенных на углеродный носитель.

Для получения наночастиц ВЭС было использовано несколько подходов к синтезу: (1) использование PtPd/C темплатов в качестве промежуточного компонента при синтезе наночастиц с последующей термообработкой; (2) многостадийный синтез материалов с использованием композитного MO_x/C носителя.

Полученные многокомпонентные катализаторы были изучены методами гравиметрии, порошковой рентгеновской дифракции (РФА), просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), рентгенофлуоресцентной спектроскопии. Каталитическая активность материалов исследовалась методом вольтамерометрии на вращающемся дисковом электроде.

Синтезированные PtPdCoNiCu/C материалы с содержанием металлов платиновой группы до 25 % масс. характеризуется атомным соотношением металлов близким к 1:1:1:1:1, средним размером кристаллитов около 2.3 нм и средним размером наночастиц по данным ПЭМ около 3.7 нм, электрохимически активной площадью поверхности до 66 $м^2$/г(Pt) и масс-активностью в реакции восстановления кислорода до 300 А/г(Pt), что делает данные материалы перспективными для дальнейших исследований стабильности и активности в составе мембранно-электродного блока.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 25-79-20045. Место реализации проекта Южный федеральный университет.

ПРИМЕНЕНИЕ ПЭМВР В ИССЛЕДОВАНИИ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Герасимов Е.Ю.

ФГБУН Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН,

Пр-т Академика Лаврентьева 5, Новосибирск, Россия. 630090,

e-mail: gerasimov@catalysis.ru

ПЭМВР (Просвечивающая электронная микроскопия высокого разрешения) — это аналитический метод, использующий пучок электронов для прохождения через ультратонкий образец. Он предоставляет уникальную информацию о структуре, морфологии, составе и электронных свойствах материалов на атомарном и наноуровне. Поскольку для разработки новых функциональных материалов, используемых в современных технологиях, необходимо детальное понимание структуры на наноуровне, а также анализ различных параметров, включая границу раздела, влияние легирования, дефекты и т.д., что во многом определяет набор необходимых свойств и, следовательно, технологию создания получаемых материалов.

Использование просвечивающих электронных микроскопов в различных областях науки и техники, таких как материаловедение, биология, химия, геология и т.д., определяет различные подходы к проектированию устройств и количеству их экспериментальных возможностей. Таким образом, современные электронные микроскопы позволяют проводить эксперименты в широком диапазоне температур, изучать различные типы материалов (от биологических образцов до металлических сплавов и керамики) и даже работать в режиме химических реакторов. Набор экспериментальных методов, которыми обладает просвечивающая электронная микроскопия, не ограничивается только дифракцией и прямым наблюдением изображений, но позволяет получать актуальную информацию о количественном содержании элементов (EDX), электронной структуре (EELS), взаимной ориентации атомов в структуре материала (HAADF – STEM). Использование комбинации этих методов позволяет получить информацию, которая часто недоступна для анализа другими химическими и физическими методами. В настоящем докладе будут рассмотрены примеры применения ПЭМВР в исследовании функциональных материалов, в частности, каталитических систем, использующихся в электрохимии.

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ КИСЛОРОДНОГО ОБМЕНА $La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{1-x}Mo_xO_{3-d}$ МЕТОДОМ РЕЛАКСАЦИИ ПАРЦИАЛЬНОГО ДАВЛЕНИЯ КИСЛОРОДА

Гонгола М.И., Попов М.П., Немудрый А.П.

ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,

ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, Россия, 630090, e-mail: gongola@solid.nsc.ru

Характеризация скорости поверхностных реакций оксидов со смешанной кислород-электронной проводимостью (СКЭП - оксиды) с кислородом из газовой фазы является важным вопросом с точки зрения применения таких соединений в качестве катодных материалов для твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ). Скорость реакции поверхностного обмена зависит от состава приповерхностного слоя, который определяется диффузией кислорода в твердом объеме. Поэтому для корректного описания поведения системы необходимо применять математическую модель, учитывающую вышеперечисленные процессы и учитывающую геометрию реактора и образца. Метод релаксации парциального давления кислорода (РПДК) позволяет определять кинетические характеристики кислородного обмена оксидов в смешанном режиме [1].

В рамках данной работы исследуются закономерности влияния концентрации молибдена на кинетические характеристики кислородного обмена в перовскитоподобном кобальтите лантана-стронция ($La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{1-x}Mo_xO_{3-\delta}$, x = 0.0 – 0.1), синтезированном твердофазным методом, с целью установления оптимальных параметров состава для применения в качестве катодного материала ТОТЭ.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-79-30051-П, https://rscf.ru/project/21-79-30051/

[1] S.A. Chizhik, S.F. Bychkov, B.V. Voloshin, M.P. Popov, A.P. Nemudry Development of the Crank’s diffusion model for the case of material-gas feedback regime in gas flow reactors. Advanced methodology of oxygen partial pressure relaxation for the kinetics of oxygen exchange in nonstoichiometric oxides // Chemical Engineering Journal, 2021. Vol. 420.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФЕРРИТА ЛАНТАНА, ДОПИРОВАННОГО КАТИОНАМИ КАЛЬЦИЯ, НИКЕЛЯ, КОБАЛЬТА, ДЛЯ ЭЛЕКТРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ТВЕРДООКСИДНЫХ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ И ЭЛЕКТРОЛИЗЕРОВ

Грибанова Н.А., Хохлова М.О., Шубникова Е.В., Черендина О.В., Брагина О.А., Немудрый А.П.

ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,

ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, 630090, e-mail: khokhlova@solid.nsc.ru

Нестехиометрические оксиды, обладающие смешанной кислород-электронной проводимостью, являются перспективными материалами для создания электродов твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ) и электролизеров (ТОЭ). В настоящее время актуальной задачей является улучшение ключевых характеристик известных электродных материалов для придания им высокой долговременной химической и механической стабильности, а также для оптимизации их транспортных свойств. Одним из наиболее эффективных подходов к модификации таких материалов является целенаправленное допирование катионов в A- и B-позициях кристаллической структуры типа $ABO_{3-\delta}$. Целью работы является исследование влияния введения катионов никеля на структуру и транспортные свойства $La_{0.65}Ca_{0.35}Co_{0.2}Fe_{0.8-x}Ni_xO_{3-\delta}$ (LCCFN; $0 \le x \le 0.15$) оксидов. Проведенный рентгеноструктурный анализ показал, что синтезированные оксиды при комнатной температуре кристаллизуются в орторомбической структуре (пространственная группа Pnma). Нагрев приводит к монотонному смещению рефлексов, а также к их расщеплению и уширению, что свидетельствует о структурном переходе из орторомбической фазы Pnma в ромбоэдрическую $R\bar{3}c$. Дилатометрический анализ показал, что КТР материалов LCCFN снижается с ростом содержания Ni, но остаётся высоким ($20 \cdot 10^{-6}$ K^{-1}) по сравнению с электролитом YSZ ($14 \cdot 10^{-6}$ K^{-1}). Термическая совместимость может быть достигнута путем получения двухфазного электрода на основе LCCFN и YSZ. Высокие значения общей проводимости, полученные для оксидов серии LCCFN Методом Ван дер Пау, свидетельствуют о их перспективности для применения в качестве электродов твердооксидных топливных элементов и электролизеров (ТОТЭ/ТОЭ).

Работа выполнена в рамках государственного задания ИХТТМ СО РАН № 122122900042-9.

ОПТИМИЗАЦИЯ РАБОЧЕГО ЦИКЛА ТПТЭ ПРИ РАБОТЕ НА ВОДОРОДЕ С ВЫСОКОЙ ДОЛЕЙ СОДЕРЖАНИЯ МОНОКСИДА УГЛЕРОДА

Грудинин С.О., Смирнова Н.В.

ФГБОУ ВО Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова, ул. Просвещения, 132, Новочеркасск, Россия, 346428, e-mail: gs177@yandex.ru

Цель работы – разработка эффективного метода борьбы с загрязнением катализатора на анодной стороне топливного элемента, используя вспомогательные системы с малой массой (менее 25% от исходной массы энергетической установки).

Предложенный метод включает комбинацию техник: продувка анодной области, переполюсовку, короткое замыкание цепи топливного элемента, короткое замыкание МЭБ, предварительный прогрев и контроль температуры. Комплекс мер позволяет удалять угарный газ (CO) с отравленного катализатора с эффективностью не менее 95%. Эксперименты успешно воспроизведены на трех образцах в течение 600 часов. Применение разработанных комбинаций значительно сокращает время восстановления активности катализатора при загрязнении угарным газом (5%, 10%, 15%, 20%).

Эксперименты показали достижение плотности мощности 240-250 мВт/см2 в течение длительного времени при работе на модельном газе с 10% CO Рис.1.

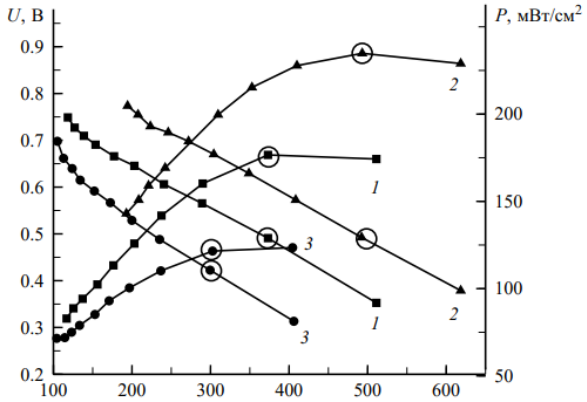

Рисунок 1 — ВАХ кривые и соответствующие им кривые мощности. Влияние загрязненного газа 1 – 5%, 2- 10%, 3- 15% CO на периоде работы до 600 часов.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ СЕРЕБРА В ИМПУЛЬСНЫХ РЕЖИМАХ ЭЛЕКТРОЛИЗА

Губанова А.А., Куриганова А.Б.

ФГБОУ ВО Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова, ул. Просвещения, 132, Новочеркасск, Россия, 346428, e-mail: alexandra20122002w@gmail.com

Исследования влияния импульсных электрических полей на электрохимическую систему как правило обусловлены проблемой разрушения или растворения электродов в этих условиях. В данной работе было исследовано поведение серебра при наложении переменного импульсного тока в водных Na^+ содержащих электролитах различного анионного состава (OH^-, F^-, Cl^-, SO_4^{2-}). Профиль переменного импульсного тока характеризовался наличием анодного и катодного импульсов тока, пауз после анодного и катодного импульсов. Средняя плотность тока составляла 1 А/см^2, частота – 50 Гц.

В исследованных растворах электролитов серебро демонстрировало три основных сценария электрохимического поведения: пассивация, образование нерастворимых осадков на поверхности электрода и формирование дисперсных продуктов в объеме электролита. Так, например, в 1 М NaOH электролите Ag электрод пассивировался за счет последовательного формирования оксидов серебра $Ag \rightarrow Ag_2O \rightarrow AgO$. В 1 М NaF электролите наблюдалось формирование дисперсных продуктов со скоростью 115.0 мг/(см^2 ч). Аналогично в 0.5 М Na_2SO_4 электролите также происходило формирование дисперсных продуктов со скоростью 95.0 мг/(см^2 ч). Полученные дисперсные продукты, согласно данным рентгенофазового анализа и электронной микроскопии, представляли собой частицы серебра размером до 100 нм. В 1 М NaCl электролите Ag электрод растворялся с образованием на электроде нерастворимого осадка AgCl. Результаты исследований Ag в импульсном режиме электролиза в совокупности с исследованиями электрохимического поведения Ag методами циклической вольтамперометрии и хронопотенциометрии позволили установить возможные совокупности процессов, протекающих на Ag электроде в зависимости от анионного состава электролита.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (Соглашение № 25-23-00192).

ОКСИДЫ СО СТРУКТУРОЙ ПЕРОВСКИТА КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ КАТОДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТОТЭ: ВЛИЯНИЕ ДОПИРОВАНИЯ ВЫСОКОВАЛЕНТНЫМИ КАТИОНАМИ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА

Гуськов Р.Д., Попов М.П., Ковалев И.В., Гонгола М.И., Немудрый А.П.

ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,

ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, Россия, 630090, e-mail: rostislav.guskov@yandex.ru

В последние десятилетия изучение реакций кислородного обмена в оксидах со смешанной ион-электронной проводимостью с общей формулой $ABO_{3-\delta}$ привлекло большое внимание ученых со всего мира [1]. Первые попытки заместить катионы в подрешетках A и B привели лишь к стабилизации фазового состава за счет "блокировки" структурных переходов, а транспортные характеристики значительно снизились. Однако было показано, что допирование высоковалентными катионами часто улучшает транспортные свойства оксидов. Чтобы установить закономерность влияния допирования на функциональные характеристики оксидов при кислородном обмене, необходимо иметь глубокое представление о его механизме учитывая, что изучаемые вещества способны к значительным отклонениям стехиометрии, что влияет на определенные характеристики, характеризующие взаимосвязь между их равновесием и кинетическими параметрами.

Таким образом, целью данного исследования является изучение влияния допантов на структуру, а также на зависимости кинетических и равновесных параметров от нестехиометрии δ и температуры T (в том числе проверка наличия линейных энергетических соотношений в соответствии с принципом Бренстеда-Эванса-Поляни) [2,3]. Для этих целей были выбраны кобальтиты стронция, модифицированные высокозарядными катионами Ta, Mo, Nb и W.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ №25-73-10268.

[1] Den Otter, M. W., et. al. Theory of Oxygen Isotope Exchange. Solid State Ion. 2001, 139 (1–2), 89–94.

[2] Bychkov, S. F. et. al. Novel Oxygen Partial Pressure Relaxation Technique for Study of Oxygen Exchange in Nonstoichiometric Oxides. The Model of Relaxation Kinetics. Solid State Ion. 2018, 320, 297–304.

[3] Starkov, I. et. al. Oxygen Release Technique as a Method for the Determination of “δ-PO2-T” Diagrams for MIEC Oxides. Phys. Chem. Chem. Phys. 2014, 16 (12), 5527–5535.

СИНТЕЗ ЭЛЕКТРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИМ ТЕМПЛАТНЫМ МЕТОДОМ: ВОЗМОЖНОСТИ И ОГРАНИЧЕНИЯ

Дмитриев Д.С.

ФГБУН Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, ул. Политехническая, 26, Санкт-Петербург, Россия, 194021, e-mail: elchemorg@gmail.com

Электрохимический темплатный метод (ЭТМ) является комбинацией двух классических химических подходов к получению материалов – электроосаждение и темплатный синтез. Использование темплатов с морфологически развитой поверхностью позволяет формировать 3D структуры для применения их в фото- и электрокатализе. Апробация ЭТМ для синтеза материалов для катодных и анодных реакций электролиза воды показала увеличение эффективности процессов как за счёт увеличения электрохимически активной площади поверхности, так и благодаря возможности тонкой регулировки морфологии и химического состава полиметаллических систем. За последнее время ЭТМ были получены системы в виде микротрубок Cu, Ni-Cu, Ni-Ag, NiO, Co_3O_4, Ag-CuO, ZnO, Bi_2O_3 для электро- и фотоэлектрокаталитического разложения воды [1–3].

Однако, на данный момент для ЭТМ имеются препятствия, затрудняющие переход от лабораторного к промышленному уровню технологии получения электродов для целевых устройств. Основными ограничениями являются отсутствие темплатов на территории РФ и неопределенность параметров для воспроизводимого синтеза самоподдерживающихся структур.

[1] Dmitriev D.S., Martinson K.D., Popkov V.I. Electrochemical template synthesis of copper hollow microtubes with dendritic surface and advanced HER performance // Mater. Lett. Elsevier B.V., 2021. Vol. 305. P. 130808.

[2] Dmitriev D.S. et al. Coaxial structures based on NiO/Ni@Carbon felt: Synthesis features, electrochemical behavior and application perspectives // J. Electroanal. Chem. 2022. Vol. 911. P. 116216.

[3] Dmitriev D.S., Tenevich M.I. Electrocatalytic performance of nickel coating on carbon felt with silver particles inclusions // J. Taiwan Inst. Chem. Eng. 2022. Vol. 141. P. 104591.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ С МЕМБРАНОЙ НА ОСНОВЕ CsH_2PO_4 И ЭЛЕКТРОДАМИ РАЗЛИЧНЫХ СОСТАВОВ

Дормидонова Д.О., Багрянцева И.Н., Пономарева В.Г.

ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,

ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, Россия, 630090, e-mail: ponomareva@solid.nsc.ru

В среднетемпературном диапазоне (150-250˚С) высокой протонной проводимостью обладает кислая соль CsH_2PO_4, претерпевающая обратимый фазовый переход, сопровождающийся увеличением проводимости на несколько порядков величины ($3*10^{-2}$ См/см, Т=235°С). Топливные элементы с мембранами на основе дигидрофосфата цезия (CsH_2PO_4) имеют ряд преимуществ, включая высокую устойчивость к отравлению Pt-катализатора сопутствующими газами (CO, H_2S, NH_3), быструю кинетику электродных реакций. В то же время уменьшение толщины мембраны, поиск оптимальных составов электродов и способов создания эффективного интерфейса с электролитом остаются важными вопросами для данного типа ТЭ.

Целью данной работы являлось исследование электрохимических характеристик ТЭ с мембраной из CsH_2PO_4 и наноалмаза. В качестве электродных композиций использовались электрокатализаторы состоящие из мелкодисперсной соли CsH_2PO_4, полученной с помощью бисерной мельницы и Pt/C с различным содержанием платины компании ООО «Прометей РД». Одна из задач изучения состояла в минимизации содержания платины при максимальной площади поверхности носителя.

В данной работе исследован метод получения наноразмерных частиц CsH_2PO_4 путем обработки в бисерной мельнице Dispermat (APS Germany). Методами РФА, СЭМ и лазерной дифракции показано, что обработка в бисерной мельнице позволяет получать монодисперсные частицы CsH_2PO_4 размером 100–200 нм с сохранением кристаллической структуры ($P2_1/m$). Для измерений в режиме ТЭ была создана специальная электрохимическая ячейка, предусматривающая контроль температуры, скорости, влажности и состава подаваемых газов. Первые экспериментальные данные по удельным электрохимическим характеристикам ТЭ (Ерц=1.05 В, I=180 мА/см^2 при 235°С) показывают перспективу дальнейших исследований и совершенствования состава электродных композиций, метода сборки, а также уменьшения толщины мембраны.

Работа была выполнена при финансовой поддержке проекта Минобрнауки России в рамках госзадания ИХТТМ СО РАН №121032500065–5

БИНАРНАЯ СИСТЕМА $N_{22}pip$-$LiBF_4$ ДОПИРОВАННАЯ Al_2O_3 КАК КОМПОЗИТНЫЙ ЛИТИЕВЫЙ ЭЛЕКТРОЛИТ

Измоденова А.В. [1,2], Улихин А.С. [2]

[1]Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова, 1, Новосибирск, Россия, 630090

[2]ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, Россия, 630090, e-mail: r.zhitkeev@g.nsu.ru

Пластические кристаллы — твёрдые вещества, обладающие регулярной кристаллической решёткой, в которой молекулы или ионы обладают высокими ориентационными или вращательными степенями свободы. Несмотря на активное изучение с 1960-х годов, эти материалы сохраняют научную актуальность благодаря следующим свойствам: низкой летучести, высокой термодинамической и электрохимической стабильности. Это делает их перспективными твёрдотельными электролитами для литиевых и кремниевых батарей, а также топливных элементов [1, 2].

В данной работе исследована тройная система на основе тетрафторобората N-этил-N-этилпиперидиния ($[N_{22}pip]BF_4$), тетрафторобората лития ($LiBF_4$) и γ-оксида алюминия (γ-Al_2O_3). Изучены структурные, термические, транспортные и электрохимические свойства композита. Показано, что гетерогенное легирование увеличивает ионную проводимость композита. Исследования методом линейной вольтамперометрии подтвердили электрохимическую стабильность системы. Результаты демонстрируют перспективность использования полученных материалов в качестве электролитов для твердотельных литиевых батарей.

[1] Zhu H. [и др.]. Organic Ionic Plastic Crystals as Solid-State Electrolytes // Trends in Chemistry. 2019. № 1 (1). С. 126–140.

[2] Ulihin A. S. [и др.]. Thermal, structural and transport properties of composite solid electrolytes (1-x)(C4H9)4NBF4–xAl2O3 // Solid State Ionics. 2022. № September 2021 (378). С. 115889.

СБОРКА АСИММЕТРИЧНОГО СУПЕРКОНДЕНСАТОРА НА ОСНОВЕ ГИБКИХ ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОДОВ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ГЕКСАЦИАНОФЕРРАТАМИ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Канева М.В.[1], Лобинский А.А.[1], Левшакова Л.А.[2], Хайруллина Е.М.[2]

[1]ФГБУН Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,

ул. Политехническая, 26, Санкт-Петербург, Россия, 194021

[2] ФГБОУВО Санкт-Петербургский государственный университет,

Университетская наб., д. 7–9, Санкт-Петербург, Россия, 199034,

e-mail: m.v.kaneva@mail.ioffe.ru

Разработка гибких электрохимических накопителей энергии представляет собой актуальное направление, обусловленное растущим интересом к носимой электронике и интегрируемым энергосистемам. Одним из эффективных подходов к созданию подобных устройств является использование лазерно-индуцированного осаждения, позволяющего формировать гибкие металлические (медные, никелевые и их сплавы) и углеродсодержащие электроды. Такие материалы могут выполнять роль анодов суперконденсаторов, тогда как катодные электроды целесообразно модифицировать гексацианоферратами переходных металлов, обладающими высокой электрохимической активностью и обеспечивающими увеличение емкости за счет протекания обратимых окислительно-восстановительных реакций.

В данном исследовании различные асимметричные суперконденсаторы были собраны с применением в качестве анодов немодифицированных лазерно-индуцированных графенсодержащих электродов и с использованием в качестве катодов соответствующих электродов, модифицированных методом ионного наслаивания гексацианоферратами переходных металлов, таких как цинк, кобальт и марганец. Для сборки устройств использовался гелевый электролит на основе ПВС/Na_2SO_4. Согласно гальваностатическим испытаниям, для таких устройств значения удельной емкости варьировались от 100 до 160 мФ/см² при плотности тока 0,25 мА/см² в зависимости от состава гексацианоферратов, модифицирующих электрод.

ТЕОРИЯ И ПРАКТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ИЗУЧЕНИЯ СТРУКТУРЫ ПОРОШКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДОМ РИТВЕЛЬДА

Кардаш Т.Ю.

Новосибирский государственный университет,

ул. Пирогова, 1, Новосибирск, Россия, 630090, e-mail: t.kardash@g.nsu.ru

Порошковая рентгеновская дифракция (XRD) — ключевой метод исследования структуры материалов, широко используемый в материаловедении, кристаллографии, химии и смежных областях. Метод Ритвельда — мощный инструмент для количественного анализа и уточнения кристаллической структуры по порошковым дифракционным данным. Он позволяет не только определить фазовый состав, но и получить точные параметры кристаллической решетки, атомные координаты и информацию о дефектах и микронапряжениях. Актуальность метода обусловлена ростом требований к точности и полноте структурного анализа современных материалов.

Метод основан на моделировании экспериментальной дифракционной кривой с помощью теоретической функции, учитывающей вклад каждой фазы и каждого отражения с последующей минимизацей разницы между экспериментальным и расчетным дифракционным профилем. В ходе уточнения можно одновременно определить параметры решетки, атомные координаты, тепловые параметры, размеры областей когерентного рассеяния и т.д.

В рамках мастер-класса будут рассмотрены основные теоретические аспекты и проведено два демонстрационных расчета. Первый - моделирование инструментального профиля по дифракционной картине высококристаллического стандарта. Второй – уточнение структуры методом Ритвельда на примере данных, полученных на лабораторном рентгеновском дифрактометре. Будет показан полный цикл анализа: от подготовки данных, выбора модели, описания инструмента до интерпретации результатов.

Для расчетов будет использован бесплатный и мощный программный пакет GSAS-II [1].

[1] B.H. Toby, R.B. Von Dreele // J. Appl. Cryst., 46, 544-549 (2013)

ИЗУЧЕНИЕ КИНЕТИКИ КИСЛОРОДНОГО ОБМЕНА НА ПОВЕРХНОСТИ МИКРОТРУБЧАТЫХ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ ПЕРОВСКИТОПОДОБНЫХ ОКСИДОВ

Ковалев И.В., Попов М.П., Гуськов Р.Д., Чижик С.А., Немудрый А.П.

ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,

ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, 630090 e-mail: kovalev@solid.nsc.ru

Перовскитоподобные оксиды со смешанной ион-электронной проводимостью представляют интерес для изучения в связи со своими выдающимися показателями электронной и кислород-ионной проводимости и каталитической активности. Данные оксиды могут быть использованы в качестве: мембранных материалов, в том числе в каталитических мембранных реакторах; электродных материалов в твердооксидных топливных элементах и электролизерах и пр.

Эффективность кислород-проницаемых мембран в основном зависит от таких параметров материала, как коэффициент объемной диффузии D и константа скорости поверхностного обмена k. Эти параметры обычно определяют методами релаксационной кинетики или находят из зависимости величин кислородных потоков планарной мембраны [1]. Изучение кислородной проницаемости микротрубчатых мембран может стать эффективным методом определения этих параметров, но для этого необходима достоверная модель процесса.

Таким образом, в ходе работы была разработана и апробирована математическая модель кислородного транспорта в микротрубчатых кислород-проницаемых мембранах на основе оксидов со смешанной кислород-электронной проводимостью. Показано соответствие кинетических параметров мембран, определенных методом кислородной проницаемости, с параметрами, рассчитанными по результатам релаксационного эксперимента.

Работа выполнена при финансовой поддержке госзадания ИХТТМ СО РАН, проект 121032500059-4.

[1] Chen G. et al. Roadmap for sustainable mixed ionic-electronic conducting membranes //Advanced Functional Materials. – 2022. – Т. 32. – №. 6. – С. 2105702.

ПОЛУЧЕНИЕ ВЫСОКОСТАБИЛЬНОГО IrPt АНОДНОГО ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗАТОРА ДЛЯ ЭЛЕКТРОЛИЗЁРОВ С ПРОТОНООБМЕННОЙ МЕМБРАНОЙ

Кожокарь Е.Л., Могучих Е.А., Павлец А.С., Алексеенко А.А.

Южный федеральный университет, ул. Зорге, 7, Ростов-на-Дону, Россия, 344090, e-mail: ekaterina.kozhokar01@mail.ru

Электролизёры с протонообменной мембраной – это важнейшая технология получения чистого водорода, необходимого в качестве топлива для топливных элементов [1]. Для снижения высокого перенапряжения анодной реакции выделения кислорода (РВК) в электролизёрах используют катализаторы на основе иридия. Легирование иридия платиной позволяет создать катализаторы для РВК с повышенной активностью, стабильностью и сниженным содержанием дорогостоящего иридия, что критически важно для развития электролизёров с протонообменной мембраной [2].

Данное исследование направлено на изучение активности и стабильности IrPt электрокатализатора в РВК.

Активность IrPt материала в РВК превышает коммерческого Ir-black аналог в 4 раза. Стабильность материалов изучалась методом хроноамперометрии при выдержке потенциала 1.55В в течение 12 часов в атмосфере аргона. Деградация IrPt катализатора составила 62%, что на 10% ниже коммерческого аналога. Анализ абсолютных значений после стресс-тестирования показал, что активность IrPt катализатор в 3 раза выше Ir-black. Таким образом, жидкофазным методом синтез был получен высокоактивный и высокостабильный IrPt катализатор с пониженным содержанием Ir (не более 50%).

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ № 24-79-00280, реализуемого в Южном федеральном университете.

[1] Böhm H., Goers S., Zauner A. Estimating future costs of power-to-gas – a component-based approach for technological learning // International Journal of Hydrogen Energy. 2019. Vol. 44 Iss. 59. P. 30789-30805.

[2] Zhang T., Liao S.A., Dai L.X., Yu J.W., Zhu W., Zhang Y.W. Ir-Pd Nanoalloys with Enhanced Surface-Microstructure-Sensitive Catalytic Activity for Oxygen Evolution Reaction in Acidic and Alkaline Media // Science China Materials. 2018. Vol. 61. Iss. 7. P. 926-938

ПОЛУЧЕНИЕ АКТИВНОГО И СТАБИЛЬНОГО БИМЕТАЛЛИЧЕСКОГО PtNi/C ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗАТОРА ДЛЯ КАТОДА ТОПЛИВНОГО ЭЛЕМЕНТА С ПРОТОНООБМЕННОЙ МЕМБРАНОЙ

Кожокарь Е.Л., Новомлинская И.А., Меньшиков В.С., Алексеенко А.А.

Южный федеральный университет, ул. Зорге, 7, Ростов-на-Дону, Россия, 344090, e-mail: ekaterina.kozhokar01@mail.ru

Несмотря на преимущества в эффективности и экологичности, широкое использование топливных элементов с протонообменной мембраной (ПОМТЭ) ограничивается дороговизной компонентов, в том числе катализаторов [1]. Разработка высокоактивных платиносодержащих катализаторов с уменьшенным содержанием Pt является актуальной задачей электрохимической энергетики на сегодняшний день [2].

В исследовании приведена оптимизация боргидридного метода синтеза катализаторов на основе наночастиц PtNi, осаждённых на углеродный носитель, выполнена оценка их состава, а также морфологических и электрохимических характеристик.

По результатам исследования микроструктуры и электрохимического поведения установлено оптимальное соотношение смеси двух органических растворителей (этиленгликоля и диметилсульфоксида) положительно влияющее на активность и стабильность PtNi/C электрокатализаторов в реакции восстановления кислорода. Полученный PtNi/C катализатор обладал более равномерным распределением НЧ на поверхности углеродного носителя. Кроме того, полученный образец превосходит коммерческий аналог HiSPEC3000 по масс-активности в РВК в 2 раза, и проявляет большую стабильность и остаточную масс-активность после стресс-тестирования.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ № 23-79-00058, реализуемого в Южном федеральном университете.

[1] K. Jiao, J. Xuan, Q. Du, Z. Bao, B. Xie, B. Wang, Y. Zhao, L. Fan, H. Wang, Z. Hou, S. Huo, N. P. Brandon, Y. Yin, M. D. Guiver. Designing the next generation of proton-exchange membrane fuel cells // Nature. – 2021. – Vol. 595. – P. 361-369.

[2] Electrocatalysts for Oxygen Reduction Reaction. // Chem. Rev. 2016. P. 116, 3594-3657.

ИЗГОТОВЛЕНИЕ ТВЕРДООКСИДНЫХ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ НА НЕСУЩЕМ АНОДЕ С ТОНКОПЛЁНОЧНЫМ ЭЛЕКТРОЛИТОМ НА ОСНОВЕ СТАБИЛИЗИРОВАННОГО ОКСИДА ЦИРКОНИЯ

Левакова А.С. [1,2], Гуськов Р.Д. [2], Тропин Е.С. [2], Немудрый А.П. [2]

[1]*Новосибирский государственный технический университет, ул. Проспект Карла Маркса, 20, Новосибирск, 630073, e-mail: annalevakova@bk.ru*

[2]*ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, 630090*

Исследование посвящено разработке основ технологии изготовления микротрубчатых ТОТЭ на несущем аноде новым методом погружения в суспензии. Были подобраны параметры процесса получения несущих анодных микротрубок, такие как вязкость суспензии, скорость вытягивания и диаметр стержня, режимы сушки и термообработки для получения изделий, характеризующихся высокой воспроизводимостью геометрических размеров: внешнего и внутреннего диаметров, толщины стенки, степени соосности. Исследовано влияние специфики метода изготовления на микроструктуру и пористость микротрубок. Исследованы функциональные свойства полученных изделий, включающие механическую прочность, газопроницаемость и электропроводность.

Значения механической прочности микротрубок из композитного материала NiO-YSZ (кермета) находится в диапазоне 120-220 МПа в зависимости от наличия/отсутствия тонких функциональных слоев и состояния кермета (NiO или Ni в его составе) и практически не зависят от диаметра микротрубки в диапазоне диаметров 1.5-3.0 мм. Значения газопроницаемости изделий, полученных методом погружения в суспензии, превышают таковые для метода экструзии при сопоставимых значениях толщины стенки. Сопротивление электрическому току изготовленных микротрубок находится в диапазоне 20-60 мОм/см в диапазоне температур 100-750 °С и сопоставимо со значениями для метода экструзии.

Полученные результаты показывают перспективность использования нового метода изготовления анодных микротрубок благодаря его простоте и высокому потенциалу автоматизации.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-79-30051-П

ЭЛЕКТРОДНЫЙ МАТЕРИАЛ НА ОСНОВЕ НАНОРАЗМЕРНОГО КОМПОЗИТА CoS/NiS ДЛЯ АСИММЕТРИЧНОГО СУПЕРКОНДЕНСАТОРА

Лобинский А.А., Канева М.В., Мелешко А.А., Кодинцев И.А.

ФГБУН Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,

ул. Политехническая, 26, Санкт-Петербург, Россия, 194021, e-mail: lobinski.a@mail.ru

Асимметричные суперконденсаторы (АС), обладая большой плотностью мощности и устойчивостью к многократным циклам заряда-разряда, являются одними из перспективных источников тока для применения в различных областях возобновляемой энергетики, переносных портативных устройствах и устройствах микроэлектроники. Основная задача при создании высокоэффективных АС заключается в разработке недорогих и экологически безопасных электродных материалов с высокими показателями удельной емкости.

Сульфиды переходных металлов (CoS, NiS) обладают хорошей электронной проводимостью и окислительно-восстановительной активностью, что обеспечивает их превосходные емкостные характеристики. Возможность наноструктурирования и получения композитных структур для таких материалов позволяет увеличить значение удельной емкости за счет проявления синергетического эффекта, а также снизить негативное влияние от объемного расширения в процессе заряда-разряда.

В данной работе мы предлагаем стратегию синтеза электродного материала для АС на основе наноструктурированного композита CoS/NiS, основанную на последовательном осаждении сульфидов из жидкой фазы на поверхности пеноникеля по методике ионного наслаивания с промежуточной термообработкой. Особенностью данного подхода является возможность синтезировать наноструктурированные сульфиды с наименьшим размером частиц и развитой морфологией непосредственно на подложке без использования связующих компонентов, что в свою очередь обеспечивает большее число активных центров и улучшает проводимость в электроактивном слое. Полученный электродный материал показал высокие емкостные характеристики (2680 Ф/г при плотности тока 1 А/г), а также хорошую устойчивость в щелочной среде электролита и сохранение исходного значения емкости после более чем 1000 циклов заряда-разряда.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ № 24-19-20060.

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ МОЛИБДАТОВ РЗЭ ДЛЯ СИММЕТРИЧНЫХ ТОТЭ

Лысков Н.В.

ФГБУН Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, пр-т Академика Семенова, 1, Черноголовка, Россия, 142432, e-mail: lyskov@icp.ac.ru

Поиск новых электродных материалов для симметричных твердооксидных топливных элементов (С-ТОТЭ) является одним из активно развивающихся направлений в области усовершенствования ТОТЭ. Создание С-ТОТЭ должно позволить сократить энергозатраты, связанные с их производством, по сравнению с традиционными ТОТЭ и нивелировать проблему деградации анода при работе на углеводородном топливе (отравление серой и углеродными отложениями) за счет кратковременной деполяризации устройства. В настоящее время в качестве электродов С-ТОТЭ повсеместно рассматриваются материалы со структурой перовскита [1]. Вместе с тем поиск альтернативных материалов с неперовскитной структурой остается актуальной задачей. Перспективными кандидатами на эту роль могут являться флюоритоподобные оксиды состава $Ln_5Mo_3O_{16+\delta}$ (Ln = РЗЭ), проявляющие стабильность как в окислительных, так и восстановительных условиях.

В данной работе проведен сравнительных анализ физико-химических свойств молибдатов $Ln_5Mo_3O_{16+\delta}$ (Ln = Pr, Nd) с точки зрения оценки перспектив их использования в качестве электродных материалов С-ТОТЭ. В рамках проведенного исследования на воздухе и в восстановительных (Ar/H_2) условиях изучена их высокотемпературная электропроводность, определены коэффициенты термического расширения, электрохимическая активность в реакциях восстановления кислорода и окисления водорода, а также исследованы мощностные характеристики модельных образцов С-ТОТЭ электролит-поддерживающей конструкции.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 25-29-00323, https://rscf.ru/project/25-29-00323/).

[1] С.Я. Истомин, Н.В. Лысков, Г.Н. Мазо, Е.В. Антипов. Электродные материалы на основе сложных оксидов d-металлов для симметричных твердооксидных топливных элементов // Успехи химии, 2021, т. 90, №6, с. 644-676. DOI: 10.1070/RCR4979.

МЕТОД НАКЛОННОГО НАПЫЛЕНИЯ С ВРАЩЕНИЕМ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ КРЕМНИЕВЫХ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ ЭЛЕКТРОДОВ

Максимкин А.А. [1], Кулова Т.Л. [1], Трушин О.С. [2], Фаттахов И.С. [2], Мазалецкий Л.А. [2]

[1]Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук, Ленинский пр-т, 31к4, Москва, 119071, e-mail: artem.maksimkin18@gmail.com

[2]ЦНИТ-Ярославль, ОФТИ им. К.А. Валиева, НИЦ Курчатовский институт, ул. Университетская, 21, Ярославль, 150067

В данной работе при помощи метода наклонного напыления с вращением были получены тонкопленочные кремниевые электроды, структура которых состояла из частиц сферической формы, образующих систему пор на поверхности титановой фольги. Средний диаметр сфер составлял 600 нанометров, высота напыленного слоя кремния составляла 1,6 микрон. Циклические вольтамперограммы, зарегистрированные при различных скоростях развертки потенциала, показали хорошую повторяемость как по форме, так и по амплитуде и расположению токовых пиков в катодной и анодной областях. При гальваностатическом заряде-разряде током 254 мА/г среднее снижение емкости за цикл составило 0,84%. На 160 цикле разрядная емкость составила 236 мА·ч/г. Коэффициент диффузии ионов лития был посчитан с использованием уравнения Рендлса-Шэвчика и составил $3{,}4 \cdot 10^{-12}$ см^2/с. Для электродов после циклирования были получены SEM-изображения, которые показали, что несмотря на значительное увеличение в объеме как отдельных сфер, так и всей структуры в целом, активная масса сохранила контакт с поверхностью титана, что говорит о хорошей адгезии кремния в условиях отсутствия полимерных связующих компонентов, что также положительно влияет на удельные характеристики электрода. Вместе с этим, система пор позволила обеспечить дополнительное пространство между отдельными массивами сфер для компенсации объемного увеличения кремния при литировании.

Работа выполнена в рамках государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Диагностика микро- и наноструктур».

РОЛЬ ДОПИРОВАНИЯ АЛЮМИНИЕМ В ИЗМЕНЕНИИ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ПЕРОВСКИТОПОДОБНОГО ОКСИДА $La_{0.4}Sr_{0.6}Fe_{1-x}Al_xO_{3-\delta}$

Мамонова В.Е. [1,2], Арапова М.В. [1], Брагина О.А. [1], Немудрый А.П. [1]

[1]Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,

ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, 630090, e-mail: mamonova@solid.nsc.ru

[2]Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, ул. Пирогова, 1, Новосибирск, 630090, e-mail: v.mamonova1@g.nsu.ru

Исследование равновесных термодинамических параметров процесса выделения кислорода является важным этапом прогнозирования стабильности и долговечности материалов на основе перовскитоподобных оксидов в реальных рабочих условиях. Химический потенциал кислорода в оксиде, энтальпия и энтропия выхода кислорода из оксида оказывают влияние на ключевые характеристики материала, такие как фазовая стабильность, кислород-электронная проводимость и каталитическая активность в реакциях окисления углеводородов. Понимание механизма влияния допирования на свойства системы позволяет проводить целенаправленные модификации для достижения оптимальных эксплуатационных характеристик.

Целью работы является исследование влияния допирования алюминием на диапазон изменения нестехиометрии и характеристики процесса выделения кислорода из серии оксидов с общей формулой $La_{0.4}Sr_{0.6}Fe_{1-x}Al_xO_{3-\delta}$.

Процессы выделения кислорода из оксидов были исследованы методами термогравиметрического анализа, температурно-программированной десорбции ТПД–O_2 и квазиравновесного выделения кислорода. Получены детальные равновесные диаграммы "$T - pO_2 - 3\text{-}\delta$" в диапазоне температур 650-850 °C и парциальных давлений кислорода 0.14 - 1×10^{-4} атм. для образцов с x = 0; 0.1; 0.2. Полученные зависимости представляют собой гладкие кривые, типичные для составов без фазовых переходов. Показано комплексное влияние допирования алюминием на свойства оксидов: снижение температуры начала выделения кислорода, увеличение общего диапазона изменения нестехиометрии. Проведен анализ равновесных параметров процесса выделения кислорода из оксидов, исследовано влияние концентрации допанта на энергетический барьер реакции выделения кислорода.

Работа выполнена в рамках государственного задания № 122122900042-9.

ИЗМЕРЕНИЯ КАТАЛИЗАТОРОВ В СОСТАВЕ ЕДИНИЧНОГО ТОПЛИВНОГО ЭЛЕМЕНТА С ПРОТОНООБМЕННОЙ МЕМБРАНОЙ

Меньшиков В.С., Мауэр Д.К., Бескопыльный Е.Р.

Южный федеральный университет, ул. Зорге, 7, Ростов-на-Дону, Россия, 344090, e-mail: men.vlad@mail.ru

Топливные элементы с протонообменной мембраной (ПОМТЭ) являются перспективными источниками электроэнергии для ряда портативных применений. ПОМТЭ представляют собой набор последовательно соединенных мембранно-электродных блоков (МЭБ). Токообразующие реакции протекают в катодном и анодном каталитических слоях МЭБ, состоящих из частиц электрокатализатора, покрытых пленкой иономера. Поскольку реакция электровосстановления кислорода, протекающая на катоде МЭБ, является кинетически затрудненной, эффективность работы катодных каталитических слоёв в значительной степени определяет производительность ПОМТЭ. Для повышения удельных характеристик ПОМТЭ в его катодных каталитических слоях должно быть оптимизировано содержание иономера, а также использован высокоэффективный электрокатализатор. Известно, что сплавы платины с d-металлами проявляют повышенную относительно чистой платины активность в реакции электровосстановления кислорода, поэтому биметаллические платиносодержащие катализаторы являются перспективными для использования на катоде МЭБ ПОМТЭ.

В ходе данной работы проводили оптимизацию содержания иономера в катодном каталитическом слое МЭБ, а также выявление наиболее эффективно работающих на катоде МЭБ электрокатализаторов.

По результатам работы установлено, что наиболее эффективными катодными электрокатализаторами являются PtCo/C-материалы, использующие в качестве носителя Ketjenblack EC300J, допированный азотом, а также Pt/C-электрокатализатор на носителе Ketjenblack EC600JD. Установлено, что для таких материалов оптимальное соотношение m(иономер)/m(углерод) в катодном каталитическом слое составляет 0.9.

ПОЛУЧЕНИЕ ОКСИДА ЦЕРИЯ ПУТЁМ ЛАЗЕРНОГО ПИРОЛИЗА ПРЕКУРСОРА

Миллер Я.А., Багишев А.С., Титков А.И.

ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, 630090, e-mail: ya.44iller@yandex.ru

Одним из направлений развития водородной энергетики является разработка эффективных высокотемпературных электрохимических устройств, таких как твердооксидные топливные элементы (ТОТЭ) и электролизеры (ТОЭ). ТОТЭ позволяют эффективно (КПД 60-70%) преобразовывать органическое топливо и водород в электроэнергию. Использование ТОЭ позволяет эффективно генерировать водород с помощью дешевых и доступных источников.

Оксид церия является одним из самых широко используемых и востребованных материалов для электролитов и анодов ТОТЭ и ТОЭ. Использование оксида церия с различными допантами позволяет снизить их рабочую температуру с 800-900 ^{o}C до 600 ^{o}C, что является критически важным для их практического использования. При этом, развитие эффективных и экологичных методов получения оксида церия с заданными свойствами является актуальной и практически важной задачей. В данной работе был разработан метод получения оксида церия различной морфологии и размеров лазерным пиролизом прекурсора - оксалата церия. Исследовано влияние параметров лазерной обработки прекурсора на структурные и морфологические свойства оксида церия (Рис.1). Варьируя параметры лазерного воздействия, а также подбирая определенную морфологию исходного реагента, можно управлять структурой и морфологией продукта пиролиза. Так, получен наноразмерный оксид церия (CeO_2), а также псевдоморфозы различной морфологии.

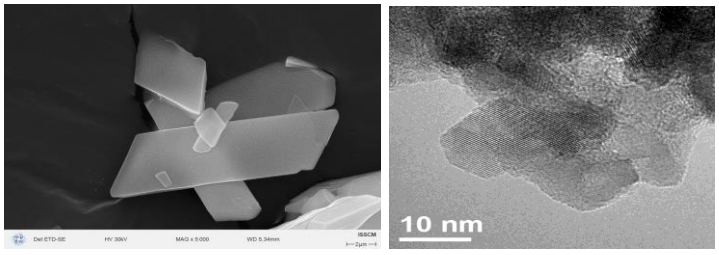

Рисунок 1 — Микрофотографии наноструктурной псевдоморфозы и наноразмерного оксида церия CeO_2.

Работа выполнена в рамках государственного задания Института химии твердого тела и механохимии СО РАН (проект № 122032900069-8).

ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫЕ ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗАТОРЫ НА ОСНОВЕ ИРИДИЯ ДЛЯ АНОДНОЙ РЕАКЦИИ ВЫДЕЛЕНИЯ КИСЛОРОДА ПОМ-ЭЛЕКТРОЛИЗЕРОВ

Могучих Е.А., Кожокарь Е.Л., Павлец А.С., Соловьева А.А., Астравух Я.В., Алексеенко А.А.

Южный федеральный университет, ул. Зорге, 7, Ростов-на-Дону, Россия, 344090

liza.moguchix@mail.ru

Электролизеры на основе протонообменных мембран представляют собой одну из наиболее перспективных технологий для получения «зеленого» водорода. Ключевым компонентом таких систем являются катализаторы для анода, на котором протекает реакция выделения кислорода, где наиболее эффективны иридий содержащие материалы. Однако высокая стоимость и дефицит иридия ограничивают их применение в промышленном масштабе. Важной задачей является создание материалов со сниженным содержанием иридия при сохранении их эффективности. Легирование иридия металлами Ru и Pt приводит к образованию би- и триметаллических сплавов. Синергетический эффект позволяет снизить стоимость катализаторов, сохранив их активность и стабильность.

В рамках данного исследования были получены IrPt и IrPtRu электрокатализаторы и изучена взаимность между структурно-морфологическими характеристиками и активностью в реакции выделения кислорода. Все материалы представляет собой совокупность мелких наночастиц 2-3 нм, собранных в крупные агломераты диаметром 50 - 100 нм с хорошо окристаллизованной структурой. Каталитическая активность материалов оценивалась по величине плотности тока и значению угла наклона в координатах Тафеля. Угол наклона Тафеля изменяется в ряду IrPt>IrPtRu. Значение плотности тока и масс-активности, нормированной на количество МПГ на электроде изменятся аналогично наклону Тафеля. Все материалы показали активность в 1.5 – 2 раза выше коммерческого аналога.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ № 24-79-00280, реализующееся в Южном федеральном университете.

ИССЛЕДОВАНИЕ Na^+-ИОННОЙ ПРОВОДИМОСТИ В $Na_2Er(MoO_4)(PO_4)$

Морхова Е.А. [1], Кабанов А.А. [1], Орлова Е.И. [2], Шиндров А.А. [3]

[1]*СамГТУ, ул. Молодогвардейская, 244, Самара, 443100*

[2]*Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, ГСП-1, Москва Ленинские горы, дом 1, строение 2, Москва, 119991*

[3]*ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, 630090, e-mail: eliztimofeeva@mail.ru*

Недавно мы провели высокопроизводительный скрининг базы данных неорганических соединений ICSD с целью поиска новых Na^+-ионных проводников среди различных полианионных оксидов, в результате чего был выявлен перспективный класс соединений $Na_2Ln(MO_4)(PO_4)$ (*Ln* = Er, Y, Tb, Ho; M = Mo, W) [1]. Наилучшими показателями, согласно расчётным данным, обладал $Na_2Er(MO_4)(PO_4)$: 2D диффузия с барьером 0.49 эВ, ионная проводимость $2.6 \cdot 10^{-4}$ См/см при 300 К. В текущем исследовании мы экспериментально изучили данное соединение, получив его твердофазным синтезом согласно работе [2] (Рис. 1а), а также расширили расчёты, оценив ионную проводимость при помощи *ab initio* молекулярной динамики.

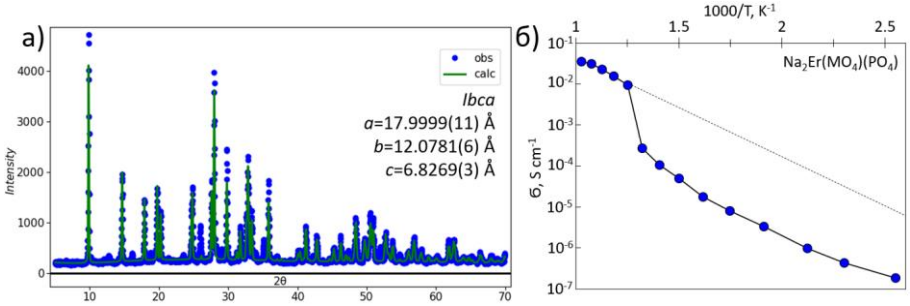

Рисунок 1 — а) уточнение структуры $Na_2Er(MoO_4)(PO_4)$ в программе GSAS-II (GOF = 2.73); б) график Аррениуса из данных импеданс-спектроскопии.

Далее мы измерили общую проводимость в образце методом импеданс-спектроскопии, которая показала значения проводимости порядка 10^{-7} См/см при 100 °С. Однако при температурах от 500 °С наблюдалось резкое возрастание проводимости на несколько порядков (Рис. 1б), которое коррелировало с обратимыми тепловыми аномалиями на кривых дифференциальной сканирующей калориметрии. В настоящее время ведутся работы по стабилизации высокотемпературной фазы.

Результаты по определению структурных данных получены при поддержке Благотворительного фонда Владимира Потанина (Грант № ГСГК-015/25).

[1] Morkhova Y. A., et al. (2024). J. Solid State Electrochem., 28(10), 3665-3671.

[2] Ryumin M. A., et al. (2007). Russ. J. Inorg. Chem., 52(5), 653-660.

ИЗУЧЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СВОЙСТВ МИКРОТРУБЧАТЫХ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА $SrFe_{1-x}W_xO_{3-\delta}$–$Ce_{0.9}Gd_{0.1}O_{2-\delta}$

Новиков А.Д., Хохлова М.О., Шубникова Е.В., Черендина О.В., Арапова М.В., Брагина О.А., Немудрый А.П.

ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,

ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, 630090, e-mail: bragina@solid.nsc.ru

Ферриты со структурой перовскита обладают смешанной кислород-электронной проводимостью, что обуславливает их потенциал для применения в каталитических мембранных реакторах (КМР). Принцип работы таких реакторов основан на совмещении процессов сепарации кислорода (из воздуха или CO_2) и окисления топлива, что значительно увеличивает энергоэффективность. Для повышения стабильности материала в восстановительной среде в его состав вводят вторую фазу, например, $Ce_{0.9}Gd_{0.1}O_{2-\delta}$, обладающую структурой флюорита. Настоящая работа направлена на комплексное исследование структурных, транспортных и каталитических характеристик микротрубчатых мембран, изготовленных на основе композитных материалов состава $SrFe_{1-x}W_xO_{3-\delta}$ – $Ce_{0.9}Gd_{0.1}O_{2-\delta}$. Нестехиометрические оксиды $SrFe_{1-x}W_xO_{3-\delta}$ и $Ce_{0.9}Gd_{0.1}O_{2-\delta}$ были синтезированы, соответственно, керамическим и цитрат-нитратным методами. Фазовый состав, кристаллическая структура и морфология синтезированных порошков исследованы с помощью рентгенофазового, рентгеноструктурного анализа и сканирующей электронной микроскопии. Методом фазовой инверсии из полученных порошков были изготовлены микротрубчатые мембраны композита $SrFe_{1-x}W_xO_{3-\delta}$ – $Ce_{0.9}Gd_{0.1}O_{2-\delta}$, которые характеризуются сложной асимметричной микроструктурой: газоплотный слой (~100 мкм), расположенный между двумя пористыми слоями. Были проведены исследования температурных зависимостей электропроводности синтезированных материалов в различных газовых атмосферах. На специализированной установке изучены величины потока кислорода через микротрубчатые мембраны в зависимости от температуры, парциального давления кислорода и фазового состава материала. Кроме того, выполнена оценка каталитической активности мембран в процессе окислительного дегидрирования этана в условиях градиентов составов газовых смесей воздух/этан и CO_2/этан.

Работа выполнена в рамках проекта РНФ № 23-43-00130.

ИССЛЕДОВАНИЕ $CuSnO_3$ В КАЧЕСТВЕ ПОТЕНЦИАЛЬНОГО АНОДНОГО МАТЕРИАЛА ДЛЯ ЛИТИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

Новожилов Д.В., Шиндров А.А., Улихин А.С., Толочко Б.П.

ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,

ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, 630090, e-mail: novozhilov@solid.nsc.ru

Широко используемый в коммерческих литий-ионных аккумуляторах анодный материал из графита имеет низкую теоретическую удельную энергоемкость 372 мАч/г (соответствует образованию LiC_6). Это стимулирует поиск новых анодных материалов с более высокой удельной энергоемкостью. Предполагается, что материалы на основе олова могут являться перспективной альтернативой графиту. При взаимодействии олова с литием образуется соединение, в котором на один атом олова приходится 4,4 атома Li, что приводит к высокой теоретической энергоемкости 994 мАч/г. Однако, коммерческое применение анодов на основе олова ограничено быстрым снижением энергоемкости из-за механической деградации: растрескивания и измельчения, вызванного большими изменениями объема во время цикла заряда-разряда.

В данной работе в качестве предшественника было выбрано соединение $CuSn(OH)_6$, которое в дальнейшем подвергалось дегидратации с целью получения заданного материала $CuSnO_3$, поскольку известно, что уменьшение размера частиц и формирование пористой структуры могут уменьшить деградацию материала. Была отработана методика синтеза $CuSn(OH)_6$ с заданными свойствами методом соосаждения. Исследована морфология продукта после дегидратации предшественника и его физико-химические свойства. Получены результаты электрохимической стабильности материала в течении 100 циклов, а также с помощью методов in-situ синхротронного излучения и ex-situ рентгеноструктурного анализа показано формирование фаз в ходе первого цикла заряда-разряда. В работе использовался однокоординатный скоростной рентгеновский детектор ОД-3, разработанный в ИЯФ СО РАН.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ 23-72-00060.

ОСОБЕННОСТИ КИНЕТИКИ ЭЛЕКТРОДНЫХ РЕАКЦИЙ В ТВЕРДООКСИДНЫХ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ЯЧЕЙКАХ С БЛИЗКИМ КАТИОННЫМ СОСТАВОМ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СЛОЕВ

Осинкин Д.А.[1,2]

[1]Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Академическая ул., 20, Екатеринбург, Россия, 620137

[2]Уральский федеральный университет, просп. Ленина, 51, Екатеринбург, Россия, 620075, e-mail: osinkinda@mail.ru

Глобальное изменение климата и истощение невозобновляемых источников энергии ставят перед человечеством новые задачи: поиск эффективных методов преобразования энергии и снижения негативного воздействия существующих технологий на окружающую среду. В связи с этим многие страны по-новому взглянули на энергетические проблемы, запустив программы развития водородной энергетики и снижения углеродной нагрузки.

Электрохимические технологии – одни из наиболее привлекательных подходов для решения данных задач. Среди них технологии, основанные на использовании средне- и высокотемпературных твердооксидных электрохимических устройств, представляют значительный интерес из-за высокой эффективности преобразования энергии, гибкости эксплуатации и перспектив масштабирования.

Современные электрохимические устройства представляют собой многослойные конструкции, состоящие из разнообразных материалов с разным химическим и структурным составами. Это приводит к необходимости использовать множество разнообразных прекурсоров и проводить серии высокотемпературных обжигов. Также подобный химический дизайн является причиной как химического взаимодействия между материалами на стадии формирования устройства, так и нежелательной диффузии катионов в процессе его эксплуатации. Избавиться от ряда указанных недостатков позволяет использование симметричного дизайна, т.к. когда оба электрода имеют одинаковый химический и структурный состав. В докладе будут представлены особенности электродной кинетики на таких электродах, а также представлен новый подход к химическому дизайну ячеек, в рамках которого анод, катод и электролит ячейки имеют идентичный ионный состав.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-19-00040, https://rscf.ru/project/24-19-00040.

СИНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В КАТАЛИЗАТОРАХ PtNi/N-C ДЛЯ РЕАКЦИИ ВОССТАНОВЛЕНИЯ КИСЛОРОДА

Павлец А.С. [1], Астравух Я.В. [1], Баян Ю.А. [1], Герасимов Е.Ю. [2], Алексеенко А.А. [1]

[1]*Южный федеральный университет, ул. Зорге, 7, Ростов-на-Дону, Россия, 344090*

[2]*ФГБУН Институт катализа имени Г. К. Борескова СО РАН,*

пр. Академика Лаврентьева, 5, Новосибирск, 630090,

e-mail: pavlec@sfedu.ru

Разработка высокоактивных катализаторов для реакции восстановления кислорода (РВК) остается критически важной задачей для развития топливных элементов. В данной работе исследован синергетический эффект сочетания биметаллического состава наночастиц (НЧ) PtNi и модификации углеродного носителя азотом. Синтезированы катализаторы с массовой долей Pt 20% и 40% на азот-модифицированном носителе Ketjenblack EC-300J (KBN) и проведено их сравнение с коммерческими аналогами Pt/C.

Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия подтвердила содержание азота 1.5 ат.%, представленного пиридиновой (50.8%) и графитовой (49.2%) формами. Просвечивающая электронная микроскопия выявила значительное улучшение морфологии PtNi/KBN катализаторов: повышение равномерности распределения НЧ и уменьшение их среднего размера на ∼1 нм по сравнению с катализаторами на немодифицированном носителе.

Модифицирование носителя азотом привело к повышению площади электрохимически активной поверхности (ЭХАП) и масс-активности в РВК в 1.5 раза. PtNi/KBN катализаторы демонстрируют двукратное превосходство в масс-активности по сравнению с коммерческими Pt/C аналогами при сопоставимых значениях ЭХАП. Улучшение характеристик биметаллических катализаторов объясняется синергетическим эффектом между улучшенной микроструктурой катализаторов, непосредственным участием азотных групп в катализе и изменением электронной структуры платины.

Полученные результаты демонстрируют перспективность совмещения биметаллических PtNi НЧ и модификации углеродного носителя азотом для создания высокоэффективных электрокатализаторов РВК.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда №23-79-00058 реализуемого в Южном федеральном университете.

МЕХАНИЗМЫ ДЕГРАДАЦИИ PtCuC–N КАТАЛИЗАТОРОВ ДЛЯ ПОМТЭ: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ IL-TEM

Павлец А.С., Астравух Я.В., Могучих Е.А., Панков И.В., Алексеенко А.А.

Южный федеральный университет, ул. Зорге, 7, Ростов-на-Дону, Россия, 344090

e-mail: pavlec@sfedu.ru

Широкое коммерческое внедрение энергоустановок на основе топливных элементов с протонообменной мембраной (ПОМТЭ) сдерживается высокой стоимостью и недостаточной долговечностью катализаторов реакции восстановления кислорода (РВК). В данной работе представлен высокоэффективный биметаллический катализатор PtCu/C–N, синтезированный простым и масштабируемым жидкофазным методом без использования поверхностно-активных веществ. Благодаря интеркаляции атомов азота в углеродный носитель синтезированный катализатор характеризуется высокой степенью равномерности размерного и пространственного распределения наночастиц (НЧ) со средним размером 2.9 нм. Масс-активность в РВК PtCu/C-N катализатора достигла значения 1.4 А/мг(Pt), что в 5.5 раз превышает показатели коммерческого Pt/C образца (HiSPEC3000).

Для всесторонней оценки стабильности были проведены ускоренные стресс-тесты (УСТ) по трем протоколам, которые позволили идентифицировать основные механизмы деградации. Структурная стабильность катализатора была детально исследована с помощью просвечивающей электронной микроскопии идентичных участков (IL-TEM). Анализ одних и тех же областей до и после УСТ подтвердил исключительную морфологическую стабильность образца. Средний размер НЧ после испытаний изменялся на ±0.4 нм. После 30 000 циклов УСТ катализатор сохранил 67% масс-активности, что удовлетворяет требованиям к катализаторам для ПОМТЭ.

Проведенное исследование подчеркивает необходимость комплексного подхода к анализу биметаллических катализаторов, так как механизмы их деградации могут существенно различаться в зависимости от протокола УСТ. Комбинация электрохимических и структурных методов анализа позволяет установить взаимосвязь между микроструктурой катализатора на легированном носителе и его долговременной стабильностью.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда №24-79-10162 реализуемого в Южном федеральном университете.

ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОМАТЕРИАЛОВ МЕТОДОМ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ВТОРИЧНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В ПРОСВЕЧИВАЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

Панков И.В.

ФГАОУ ВО Южный Федеральный Университет,

ул. Большая Садовая, 105/42, Ростов-на-Дону, 344006, e-mail: ipankov@sfedu.ru

Исследование тонкой структуры и морфологии поверхности наноразмерных материалов — одна из ключевых задач современного материаловедения и одним из мощнейших методов для решения этой задачи является просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ). ПЭМ, однако, имеет несколько очевидных недостатков, одним из которых является невозможность точно передать сложную трехмерную геометрию объекта, поскольку снимок ПЭМ представляет собой плоскую проекцию исследуемого объекта. Решение этой проблемы можно найти в интегрированных в современные ПЭМ-микроскопы детекторы вторичных электронов.

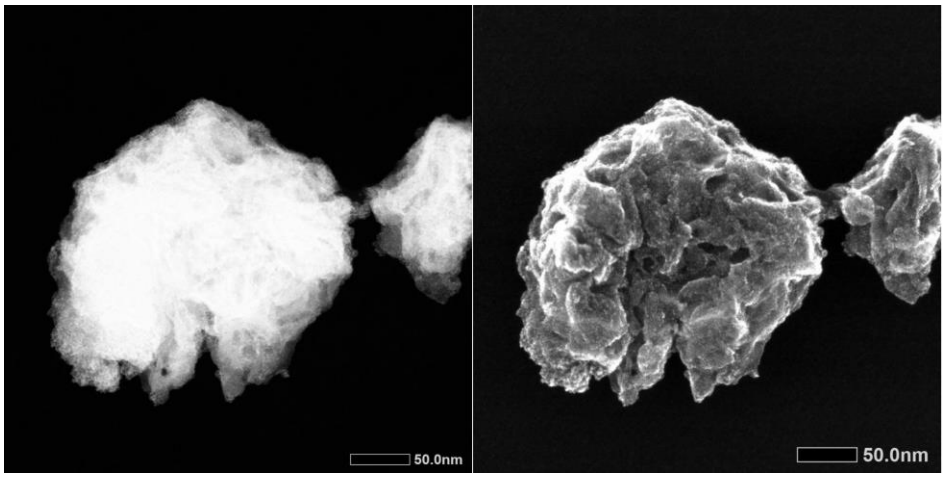

Рисунок 1 — Изображение одной и той же области в СПЭМ (слева) и SE (справа).

Эти детекторы, оптимизированные для захвата низкоэнергетических вторичных электронов (Secondary electron, SE, ВЭ), функционируют аналогично детекторам ВЭ в сканирующем электронном микроскопе. Дополняя изображения высокого разрешения, полученные с помощью ПЭМ, детектор ВЭ обеспечивает получение трехмерных изображений из той же области интереса с разрешением, близким или равным атомному, что позволяет избежать трудоемкого и длительного процесса, связанного, например, с 3D-ПЭМ томографией (рисунок 1).

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ ПРОВОДИМОСТИ ПОЛИМЕРНОГО КОМПЛЕКСА ПОЛИ-[PdMeOSaltmen]

Петрова Д.А. [1,2], Смирнова Е.А. [1,2]

[1] ФГБУН Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Политехническая ул., 26, Санкт-Петербург, Россия, 194021

[2] ФГБОУ ВО Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена, наб. реки Мойки 48, Санкт-Петербург, Россия, 191186,

e-mail: petrovadarik@gmail.com

К настоящему моменту строение и электрохимические свойства полимерных комплексов переходных 3d-металлов с лигандами *Salen*-типа изучены достаточно подробно, однако комплексам поли-[Pd*Salen*] уделяется меньше внимания, вследствие сложности и дороговизны синтеза. Электронная проводимость полимеров на основе данных комплексов ранее не была исследована, что ограничивает возможности направленного синтеза функциональных материалов. В представленной работе определена электропроводность (G) полимера поли-[PdMeOSaltmen]. Измерение проводимости осуществлялось *in situ* по методике, представленной в [1]. Установлено, что кривая проводимости (рис. 1) характеризуется наличием двух максимумов, совпадающих с максимумами на вольтамперограммах полимерной пленки.

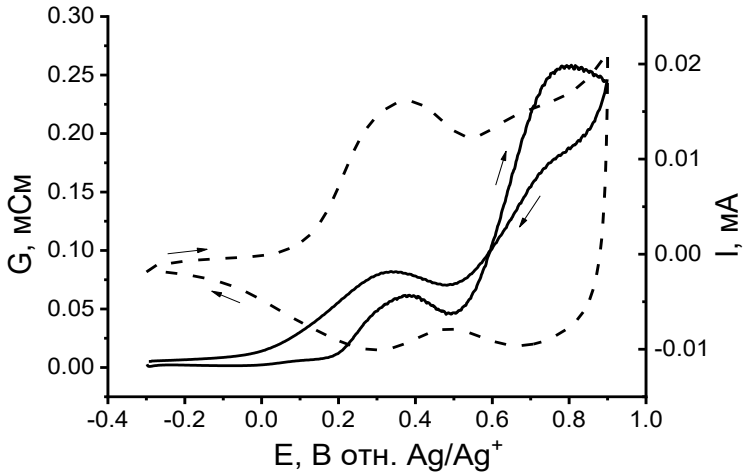

Рисунок 1 — Зависимость G от потенциала (сплошная линия) и ЦВА (пунктирная линия) полимера поли-[PdMeOSaltmen] в растворе 0,05 М Et_4NBF_4 в ацетонитриле.

[1] Смирнова Е.А., Чепурная И.А. // Письма в ЖТФ. 2022. Т. 48. Вып. 1. С. 12.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТВЕРДЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИУРЕТАНА ДЛЯ ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ СУПЕРКОНДЕНСАТОРОВ

Подгорнова О.А., Федоров Н.А., Уваров Н.Ф.

ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,

ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, 630090, e-mail: podgornova.nsk@gmail.com

Одним из ключевых компонентов суперконденсаторов является электролит. Переход от жидких электролитов, ограничивающих возможность широкого применения суперконденсаторов из-за возможной утечки электролита, к твердым электролитам позволяет создавать твердотельные суперконденсаторы, обладающие длительным сроком хранения и высокой безопасностью. Твердотельные суперконденсаторы просты в изготовлении, а также в них отсутствует возможность утечки электролита.

В данной работе были исследованы свойства твердых полимерных электролитов на основе полиуретанового эластомера, синтезированного из коммерческого преполимера ПФЛ 100 и сшивающего агента 3,3'-дихлор-4,4'-диаминодифенилметана $C_{12}H_{12}N_2Cl_2$ (MOCA) и наполненного раствором органической соли $LiBF_4$ в N-метил-2-пирролидоне (NMP), а также показана возможность их применения в качестве электролита для твердотельных суперконденсаторов.

Было установлено, что механические свойства и ионная проводимость полученных электролитов зависят от концентрации $LiBF_4$ в NMP. Оптимальными показателями обладает полиуретановый электролит с 7 масс. % $LiBF_4$ (PU-PFL100). Для исследования электрохимических свойств PU-PFL100 были собраны симметричные и гибридные суперконденсаторные ячейки. Согласно данным циклической вольтамперометрии и гальваностатического заряда/разряда удельная емкость собранных ячеек составляет 40 Ф/г.

Таким образом, твердые полимерные электролиты на основе полиуретанового эластомера PU-PFL100 могут быть успешно использованы для создания твердотельных суперконденсаторов.

Работа выполнена в рамках Государственного задания, проект 121032500065-5.

МЕХАНОХИМИЧЕСКИЙ *IN SITU* СИНТЕЗ МЕТАЛЛОМАТРИЧНЫХ КОМПОЗИТОВ Cu/TiC

Ридель Н.С. [1], Ковалева С.А. [2], Девяткина Е.Т. [1], Восмериков С.В. [1], Григорьева Т.Ф. [1]

[1]*ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, 630090*

[2]*ГНУ Объединенный институт машиностроения НАН Беларуси, ул. Академическая, 12, Минск, Беларусь, 220072*

e-mail: ridelns@solid.nsc.ru

Основу большинства электротехнических изделий составляет медь и её сплавы благодаря их высокой электропроводности. Однако использование Cu в чистом виде ограничено её недостатками: низкой твёрдостью, высоким сродством к кислороду, низкой электроэрозионной стойкостью. Эти проблемы можно решить использованием композиционных материалов на основе Cu-матрицы, упрочнённой высокодисперсными керамическими частицами. Это позволит сохранить ключевое преимущество меди, одновременно устраняя ограничения, связанные с её недостатками. В качестве упрочняющих компонентов широко используются карбиды, отличающиеся высокой температурой плавления, высокой микротвёрдостью, термической стабильностью и хорошей смачиваемостью металлами. Перспективным методом получения наноразмерных композитов является механохимический *in situ* синтез (МХС) высокодисперсных керамических частиц в металлической матрице, протекающий в режиме механически стимулированной реакции (МСР). Наиболее предпочтительными для осуществления МСР являются системы, в которых $T_{ад}>T_{пл}$ карбидообразующего металла. В исследуемой смеси $T_{ад}$ составляет 2228 K, что выше $T_{пл}$ компонентов, в связи с этим ожидается появление жидкой металлической фазы Cu. Методом рентгеноструктурного анализа изучен процесс МХС TiC в тройной системе Ti–C–50 мас.%Cu при стехиометрическом соотношении Ti:C. Синтез идет в режиме МСР с участием жидкой фазы Cu. Индукционный период составляет 110 с, затем происходит скачкообразный рост скорости реакции TiC, и в течение следующих 10 с образуется 50 мас.%TiC с упорядоченной структурой и составом, близким к стехиометрическому, размер кристаллитов ~47 нм и низкий уровнень микродеформаций ~0.24%. За это же время формируется твердый раствор Cu (~2% Ti) с уровнем микродеформаций ~1%.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИХТТМ СО РАН (№121032500062-4).

МОДЕЛИРОВАНИЕ БИПОЛЯРНЫХ ПЛАСТИН С ЗАКРЫТЫМ КАТОДОМ ДЛЯ ПЕРОКСИДНОГО ТОПЛИВНОГО ЭЛЕМЕНТА

Рожков Я.Д., Фаддеев Н.А., Смирнова Н.В.

Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова, ул. Просвещения, 132, Новочеркасск, 346428

e-mail: naava11@mail.ru

Особый интерес в качестве альтернативы H_2 вызывает перекись водорода (H_2O_2) – вещество, известное, прежде всего как окислитель. В топливных элементах H_2O_2 демонстрирует уникальные свойства: не только превосходит кислород по эффективности в роли окислителя, но и способна участвовать в обоих электрохимических процессах – окислении (до O_2 при +0,68 В) и восстановлении (до воды при +1,77 В), что открывает новые перспективы для разработки пероксидных топливных элементов (ПТЭ) [1]. Производительность ПТЭ зависит от многих факторов, в том числе от равномерности распределения реагентов, отвода тепла. За выполнение всех указанных функций отвечает биполярная пластина (БП). Основная задача проектирования БП заключается в создании оптимальной конфигурации каналов, обеспечивающей равномерное распределение реагентов в активной зоне, минимизацию гидравлических потерь и эффективный отвод продуктов реакции.

Для разработки модели БП ПТЭ был применен комбинированный подход с использованием нескольких программ: Compass 3D и COMSOL Multiphysics®. Показано, оптимальное соотношение ширины канала $b_к$ и ширины ребра канала $b_р$ биполярной пластины ($b_к/b_р = 1$), позволяющее минимизировать сопротивление всем потокам и эффективно отводить продукты реакции и теплоту. Расчет показал, что поле скорости реагентов однородно, отсутствуют завихрения и застойные зоны, что обеспечивает их равномерное распределение в объеме.

Разрабатываемая модель в дальнейшем позволит производить имитацию процессов подвода реагентов, отвода тепла и продуктов реакции в зависимости от дизайна и геометрии каналов, что позволит максимально эффективно использовать БП.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-19-00280).

[1] C.J. McDonnell-Worth, D.R. MacFarlane // Aust. J. Chem. 2018. V. 71. P. 781-788.

ЭЛЕКТРОЛИТ С ПРОВОДИМОСТЬЮ ПО АНИОНАМ $AlCl_4^-$ НА ОСНОВЕ МОЧЕВИНЫ

Рубилкин П.А. [1], Улихин А.С. [1,2], Уваров Н.Ф. [1,2]

[1]*Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, e-mail: p.rubilkin@g.nsu.ru*

[2]*ФГБУН Институт химии твёрдого тела и механохимии СО РАН, ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, 630090, e-mail: ulikhin@solid.nsc.ru*

Перезаряжаемые алюминиевые источники тока являются перспективными устройствами для накопления энергии благодаря повышенной ёмкости и плотности тока. Одними из электролитов, используемых в данных системах, являются глубокоэвтектические растворители (ГЭР). Они образуются при смешивании кислоты и основания Льюиса [1].

В данной работе был синтезирован электролит на основе $AlCl_3$ – Urea в мольном соотношении $n(AlCl_3)/n(Urea) = 1.4$. Была исследована зависимость удельной ионной проводимости от температуры в диапазоне от 25℃ до 100℃. Установлено, что при температуре 25℃ она составляет ~10^{-3} См/см , а при 100℃ ~10^{-2} См/см.

Были проведены гальваностатические испытания электролита в симметричной ячейке с алюминиевыми электродами. В ходе циклирования наблюдается обратимость алюминиевых электродов и при этом снижение поляризации. Наблюдаемый эффект обусловлен формированием устойчивого контакта на границе электрод/электролит.

В результате исследований было установлено, что полученный электролит обладает хорошими значениями удельной ионной проводимости. Гальваностатические испытания показали, что алюминиевый электрод является обратимым по отношению к электролиту, что свидетельствует о том, что полученный материал может быть использован в перезаряжаемых алюминиевых источниках тока.

[1] Malik M., Ng K. L., Azimi G. Physicochemical characterization of AlCl3-urea ionic liquid analogs: speciation, conductivity, and electrochemical stability //Electrochimica Acta. – 2020. – Т. 354. – С. 136708.

ИЗУЧЕНИЕ ОБРАТИМОЙ ИНТЕРКАЛЯЦИИ ИОНОВ Li^+ В СТРУКТУРУ ЛИТИЙ-ТАНТАЛОФОСФАТНОЙ БРОНЗЫ $LiTa_2PO_8$

Скачилова М.Г. [1,2], Морхова Е.А. [3], Шиндров А.А. [1,2]

[1]*ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, 630090, e-mail: m.skachilova@g.nsu.ru.*

[2]*Новосибирский государственный университет, ул. Ляпунова, 2, Новосибирск, 630090*

[3]*Самарский государственный технический университет, ул. Молодогвардейская, 244, Самара, 443100*

В настоящее время литий-ионные аккумуляторы (ЛИА) повсеместно используются в качестве накопителей энергии. Широкое применение ЛИА обусловлено их высокой энергетической плотностью, большим временем службы и безопасностью использования. Однако для улучшения производительности и электрохимических показателей проводятся исследования по изучению и разработке новых материалов для ЛИА. Соединение $LiTa_2PO_8$ может выступать в качестве нового электродного материала для ЛИА, поскольку обладает высокой ионной проводимостью, наличием вакансий для ионов Li^+ и переходного металла. В данной работе был изучен процесс обратимой интеркаляции ионов Li^+ в структуру $LiTa_2PO_8$. Соединение $LiTa_2PO_8$ было получено с использованием твердофазного синтеза. Проведены расчеты энергий образования структур $Li_{1+x}Ta_2PO_8$ (x = 0,5; 1; 1,5) с различной стехиометрией. Установлено, что введение ионов Li^+ и образование дополнительных вакансий снижают энергию образования соединения по сравнению с исходной стехиометричной структурой. Полученные результаты указывают на возможность протекания обратимой интеркаляции. Электрохимические свойства $LiTa_2PO_8$ были исследованы с использованием гальваностатического циклирования, циклической вольтамперометрии и гальваностатического прерывистого титрования в диапазоне напряжений от 1,0 – 3,0 В. По результатам циклирования, начальная зарядная и разрядная емкость при скорости C/20 составили 45,4 мА·ч/г (60% от теор. емкости) и 67 мА·ч/г (88% от теор. емкости) соответственно. На основании данных *ex situ* РФА при обратимой интеркаляции ионов лития наблюдается реализация мезанизмов твердого раствора (1,1 – 3,0 В) и двухфазного механизма (1,0 – 1,1 В). Кинетика процесса накопления заряда была изучена с помощью циклической вольт-амперометрии. При напряжении в 1,1 В наблюдается диффузионный контроль, при напряжении 0,8 – 0,9 В — протекание псевдоёмкостных/адсорбционных процессов. Из полученных данных можно сделать вывод о гибридном протекании процесса накопления заряда. С помощью гальваностатического прерывистого титрования были получены коэффициенты диффузии ионов Li^+, равные $5{,}7\cdot10^{10}$ см^2/с на разряде и $8{,}8\cdot10^{10}$ см^2/с на заряде.

Работа выполнена в рамках государственного задания, проект №121032500072-3.

ПОЛУЧЕНИЕ ЧАСТИЦ СЕРЕБРА В УСЛОВИЯХ ИМПУЛЬСНОГО ЭЛЕКТРОЛИЗА

Ставенчук Э.А., Куриганова А.Б.

ФГБОУ ВО Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова, ул. Просвещения, 132, Новочеркасск, 346428,

e-mail: eleonora_staven@mail.ru

Наноструктурированные материалы на основе частиц Ag находят применение в устройствах хранения и преобразования энергии, фото(электро)катализе, плазмонном катализе, биомедицине, в составе электрохимических сенсоров. Поэтому разработка экологически безопасных способов получения дисперсных материалов на основе частиц Ag, является актуальной проблемой современных химических технологий. Импульсный электролиз в водных электролитах благодаря сочетанию целого ряда процессов, протекающих как на границе электрод/электролита, так и в твердой фазе (электрод) под действием импульсных электрических полей, может рассматриваться как эффективный процесс получения дисперсных материалов, свойства которых определяются природой электрода и свойствами межфазной границы электрод/электролит.

В данной работе частицы Ag были получены путем электрохимического диспергирования Ag электродов в водных растворах электролитов Na_2SO_4 и NaF под действием переменного импульсного тока средней плотностью 1.0 А/см^2 и частотой 50 Гц. Согласно данным рентгенофазового анализа размер кристаллитов Ag в полученных материалах составил 33,2 и 49,0 нм для NaF и Na_2SO_4 электролитов соответственно. Параметр элементарной ячейки наночастиц Ag, синтезированных в обоих электролитах, идентичен (4,086 Å) и хорошо совпадает со значением параметра элементарной ячейки массивного серебра.

Таким образом, импульсный электролиз может быть рекомендован в качестве подхода к синтезу материалов на основе частиц Ag.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (Соглашение № 25-23-00192).

РАЗРАБОТКА МОДЕЛИ ДЛЯ ЦЕЛЕНАПРАВЛЕННОГО ПОИСКА ВЫСОКОПРОВОДЯЩИХ ОРГАНИЧЕСКИХ ИОННЫХ ПЛАСТИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИХ ДАННЫХ

Стебницкий И.А. [1,2], Матейшина Ю.Г. [1,2]

[1]*ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, 630090,*

[2]*Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, ул. Пирогова, 1, Новосибирск, 630090*

e-mail: i.stebnitskii@g.nsu.ru

Органические ионные пластические кристаллы (ОИПК) в последние годы активно рассматриваются в качестве кандидатов на роль твёрдых электролитов благодаря комбинации значительной термической и электрохимической стабильности и пластичности [1]. Считается, что наличие вращательных степеней свободы в пластической фазе ОИПК приводит к повышенной проводимости как собственных, так и примесных ионов (например, в бинарных системах с солями Li^+ или Na^+) [2]. Целенаправленный поиск высокопроводящих ОИПК — это актуальная, зачастую весьма трудоемкая, научная задача. Однако, в настоящий момент не найдена взаимосвязь между химическим строением органических солей и их физико-химическими свойствами, в частности транспортными характеристиками.

На основе комплексного анализа имеющихся литературных данных в данной работе впервые установлено влияние термических свойств и геометрии ионов на транспортные свойства ОИПК, позволяющее проводить целенаправленный поиск перспективных органических солей. На основе предложенной модели проведен синтез четырёх ранее неизвестных производных морфолина, несколько из которых обладают высокой ионной проводимостью $3 \cdot 10^{-4}$ – 10^{-3} См/см при повышенной температуре.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 25-23-00263.

[1] Zhu H. et al. Organic ionic plastic crystals as solid-state electrolytes // Trends in Chemistry. – 2019. – Т. 1. – №. 1. – С. 126-140.

[2] Thomas M. L. et al. Organic ionic plastic crystals: flexible solid electrolytes for lithium secondary batteries // Energy Advances. – 2023. – Т. 2. – №. 6. – С. 748-764.

АДДИТИВНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ КОМПОНЕНТОВ ТОТЭ

Титков А.И.

ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,

ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, 630128, e-mail: a.titkov@solid.nsc.ru

Водород признан перспективным материалом для альтернативной энергетики ввиду относительной безвредности продуктов его сгорания для окружающей среды, высокой плотности энергии на единицу веса [1]. Для преобразования химической теплоты сгорания водорода в электричество активно разрабатываются и используются топливные элементы (ТЭ), и, в частности, твердооксидные топливные элементы (ТОТЭ), отличающиеся высоким КПД и низким уровнем выбросов по сравнению с классическими процессами сжигания топлива. Уникальные возможности 3D-печати, такие как высокая автоматизация процесса, низкие потери материала в процессе изготовления, возможность программируемого изготовления деталей со сложной иерархичной структурой, могут в перспективе позволить упростить как технологический процесс изготовления ТОТЭ, улучшить эксплуатационные и мощностные характеристики топливных элементов, так и формировать изделия с уникальной микроструктурой и геометрией. В докладе представлен краткий обзор современного состояния дел в области развития аддитивных технологий изготовления компонентов ТОТЭ. Также приведены результаты исследования образцов анодов, электролитов и полуячеек ТОТЭ, изготовленных в ИХТТМ СО РАН «гибридными» вариантами 3D-печати с использованием керамических паст на основе наноразмерных оксидных наполнителей с интегрированной послойной лазерной постобработкой [3,4]. Проведено послойное формирование и исследование анодов ТОТЭ планарной геометрии на основе композитов NiO/ZrO_2-10%Y_2O_3 и $NiO/Ce_{0.8}Gd_{0.2}O_2$, электролитов составов ZrO_2-10%Y_2O_3 и $Ce_{0.8}Gd_{0.2}O_2$ и полуячеек на основе соответствующих составов с дополнительными функциональными слоями. Показана возможность формирования газоплотных электролитных слоев, а также полуячеек ТОТЭ, состоящих из нескольких различных по функциональным характеристикам слоев с контролируемой пористостью и микроструктурой.

Работа с анодными материалами выполнена в рамках гранта РНФ (No. 21-79-30051), с материалами для интерконнекторов в рамках гранта РНФ (No. 21-79-30051-П), работа с материалами для электролитов выполнена в рамках государственного задания ИХТТМ СО РАН (проект № № 122032900069-8).

[1] Kamlungsua K. et al., *Fuel Cells*, vol.20, N6, pp.644–649, (2020).
[2] Malbakhova I. et al., Ceramics. 2023. V. 6. №. 3. P. 1384-1396.
[3] Asmedianova A. et al., Ceram. Int., Volume 50, Issue 8, 2024, P. 13508-13516.

ВЛИЯНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ РЕЖИМОВ НАНОКОМПОЗИТА НА ВЕЛИЧИНУ СКОРОСТИ ЕГО ОСАЖДЕНИЯ

Трифонов Г.И., Жачкин С.Ю.

Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина»,

ул. Старых Большевиков, 54А, 394064, e-mail: i@gtrifonov.ru

В работе представлены результаты исследования, направленного на оценку влияния технологических режимов на величину скорости осаждения нанокомпозитного покрытия на основе хрома. Проведены регрессионный и корреляционный анализы [1], которые позволили создать математическую модель (1), объясняющую, как технологические параметры нанокомпозита влияют на скорость осаждения (μ):

$$\mu = 2{,}872 + 0{,}012i - 0{,}004t - 0{,}012p \quad (1)$$

где i – плотность тока, кА/м^2, t – температура электролита, ^{o}C, p – давление инструмента, МПа.

Установлено, что при оптимизации технологических параметров [2], скорость осаждения нанокомпозитных покрытий на основе хрома может достигать значений в диапазоне 2,6-2,9 мкм/мин. Этот показатель демонстрирует значительное превосходство по сравнению с традиционными методами нанесения хромовых покрытий, где максимальная скорость осаждения обычно не превышает 0,8-0,9 мкм/мин. Наблюдаемое увеличение скорости осаждения в 3-5 раз свидетельствует о высокой эффективности применения нанокомпозитных технологий в различных областях промышленности. Кроме того, оценена структура наносимых покрытий. Визуального сопоставление структуры традиционных покрытий и нанокомпозитных покрытий на основе хрома установило, что у композитных слоев деформации отсутствую, а стандартных покрытий они находятся на недопустимом уровне.

[1] Трифонов Г.И. Применение многофакторного эксперимента при исследовании свойств покрытий, нанесенных плазменным методом напыления // Механическое оборудование металлургических заводов. №2 (19). 2022. С. 32-38.

[2] Жачкин С.Ю., Завражнов А.И., Трифонов Г.И. Выбор режимов нанесения покрытий при гальваноконтактном методе // Технический сервис машин. 2024. Т. 62. №3. С. 103-108.

КЕРАМИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ГАЗОВЫХ ПОТОКОВ В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ТВЕРДООКСИДНЫХ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТАХ

Устюжанинов И.Д., Дубовцев Д.Ю., Вепрева А.И., Саетова Н.С., Кузьмин А.В.

ФГБОУ ВО Вятский государственный университет,

ул. Московская, 36, Киров, 610000, e-mail ivanustya@gmail.com

В большинстве конструкций трубчатых твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ) применяются системы для распределения газовых потоков. Как правило, их изготавливают из коррозионностойких нержавеющих сталей. Ключевым недостатком в применении стальных газовых систем является миграция хрома из стали, что может привести к отравлению катода и снижению рабочих характеристик всей установки. Также в результате воздействия водорода, который применяется в качестве топлива, со сталью, возникает водородное охрупчивание стали, в связи с чем необходима дополнительная защита стальных деталей. Альтернативой могут служить системы, выполненные из керамических деталей. Такие детали не восприимчивы к высокотемпературной коррозии и инертны к газам, применяемым в ТОТЭ.

В ВятГУ проводятся исследования стека трубчатого ТОТЭ, в котором газовая система выполнена из керамических деталей (Рис. 1).



Рисунок 1 — Трубчатый ТОТЭ с керамической газовой системой.

Применение керамики обеспечивает надежную герметичность, благодаря высокой относительной плотности более 99 %. Также они обладают низким термическим коэффициентом линейного расширения ~10,8 · 10^{-6} K^{-1} (100-600 °C), что обеспечивает лучшую совместимость с материалами единичных элементов ТОТЭ.

Исследования проводятся при финансовой поддержке программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030».

ПОСТЛИТИЕВЫЕ ХИМИЧЕСКИЕ ИСТОЧНИКИ ТОКА

Федотов С.С.

Сколковский институт науки и технологий (Сколтех),

Большой бульвар, 30 стр. 1, Москва, 121205, e-mail: s.fedotov@skoltech.ru

Современная энергетика и быстрое развитие электротранспорта стимулируют поиск как альтернативных, так и комплементарных литий-ионным аккумуляторам (ЛИА) технологий накопления электроэнергии. Активно исследуются так называемые «постлитиевые» системы: натрий-, калий-, магний- и цинк-ионные аккумуляторы, а также системы на основе полимерных и твёрдых электролитов. Среди них наиболее перспективными на сегодняшний день являются натрий-ионные аккумуляторы (НИА), обладающие близостью архитектуры и электрохимии к ЛИА, но характеризующиеся более низкой стоимостью исходного сырья, отсутствием редких, дорогостоящих и токсичных компонентов, таких как кобальт, а также возможностью эффективной работы в более широком диапазоне температур и толерантностью к глубокому или полному разряду («ноль вольт»), что существенно повышает безопасность.

НИА позиционируются для использования в стационарных системах хранения энергии, в том числе, в тандеме с возобновляемыми источниками – солнечными и ветряными электростанциями, отвечают за сглаживание колебаний в производстве и потреблении электроэнергии, играя роль буферного накопителя в электросетях. Основное внимание в развитии НИА сосредоточено на разработке новых электродных материалов и электролитов.

В докладе будут обзорно рассмотрены постлитиевые технологий накопления электроэнергии с фокусом на НИА, в том числе, их преимущества и ограничения, технологические особенности, примеры коммерциализации и успешного применения. Особое внимание будет уделено химии и материалам в рамках НИА, а также текущим исследовательским проектам в Сколтехе и перспективам развития НИА в ближайшие годы.

Работа поддержана грантом РНФ 23-73-10125.

РАЗРАБОТКА МАТЕРИАЛОВ И ТЕСТОВАЯ 3D-ПЕЧАТЬ КЕРАМИЧЕСКИХ ИНТЕРКОННЕКТОРОВ НА ОСНОВЕ YSZ

Фроленкова А.Д., Титков А.И.

ФГБУН институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,

ул. Кутателадзе,18, Новосибирск, 630090, e-mail: frolenkova@solid.nsc.ru

Развитие новых энергетических технологий, в частности, изготовления твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ), является одной из ключевых задач современного материаловедения и электрохимии [1]. Важнейшим структурным компонентом ТОТЭ является интерконнектор, который обеспечивает механическую целостность ячейки и соединяет последовательно несколько ячеек в батарею. Использование керамических интерконнекторов на основе диоксида циркония, стабилизированного оксидом иттрия (YSZ), позволяет решить проблему совместимости термических коэффициентов расширения с другими компонентами ячейки. Однако традиционные методы изготовления керамических деталей сложной формы часто являются многостадийными и затратными. В этой связи аддитивные технологии (3D-печать) открывают новые возможности для создания изделий со сложной архитектурой каналов. Целью данной работы являлось сравнительное исследование потенциала трех методов 3D-печати – прямого и непрямого селективного лазерного спекания (dSLS иiSLS), а также струйной 3Д-печати – для изготовления газоплотных макетов интерконнекторов на основе YSZ. Для получения композитных порошковых материалов, содержащих YSZ и полимерное связующее, требуемых для процесса SLS, была использована технология распылительной сушки. Были оптимизированы параметры процесса для получения гранул порошка с улучшенными реологическими свойствами и регулируемым содержанием полимерной фазы. Параллельно была разработана и охарактеризована паста на основе YSZ для струйной 3D-печати. Для каждого из методов были отработаны базовые режимы печати и проведены предварительные эксперименты по формированию образцов. Исследованы такие свойства, как морфология, плотность и микротвердость полученных интерконнекторов.

Работа выполнена в рамках гранта РНФ (No. 21-79-30051-П).

[1] Singh, M., Zappa, D., Comini, E. Solid oxide fuel cells: Fundamentals, design and applications / M. Singh, D. Zappa, E. Comini // *Nano Energy*. – 2021. – Vol. 84. – P. 105906.

ИССЛЕДОВАНИЕ РАВНОВЕСНЫХ И КИНЕТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ NNO И LNO МЕТОДАМИ КВАЗИРАВНОВЕСНОГО ВЫДЕЛЕНИЯ КИСЛОРОДА И РЕЛАКСАЦИИ ПАРЦИАЛЬНОГО ДАВЛЕНИЯ КИСЛОРОДА

Фуад Марио

Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,

ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, 630090, e-mail: fouad@solid.nsc.ru

Смешанные ионно-электронные проводники (СИЭП) стали ведущими материалами для электродов твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ) благодаря сочетанию высокой электронной проводимости, значительной диффузионной подвижности кислорода и высокой скорости поверхностного обмена. Среди них сверхстехиометрические никелаты, такие как никелат неодима (NNO) и никелат лантана (LNO), являются перспективными кандидатами на роль катодных материалов ТОТЭ [1]. Материалы NNO и LNO были выбраны в качестве объектов данного исследования. Для определения равновесных и кинетических параметров перовскитов LNO и NNO методами релаксации парциального давления кислорода (РПДК) [2] и квазиравновесного выделения кислорода (КРВК) [3] была использована оригинальная экспериментальная установка, разработанная ранее в ИХТТМ СО РАН.

Оксиды на основе NNO и LNO были получены цитратно-нитратным методом и охарактеризованы методами рентгеновской дифракции и сканирующей электронной микроскопии. Равновесные и кинетические свойства были исследованы методами РПДК и КРВК. Построены равновесные изотермические диаграммы «lg pO_2-(4+δ)-T» для NNO и LNO. Определены значения равновесной скорости обмена (R_0) и коэффициента химической диффузии в оксиде (D_{chem}). Показаны линейные энергетические соотношения в соответствии с принципом Бренстеда–Эванса–Поляни.

[1] L. Minervini, R.W. Grimes, J.A. Kilner, K.E. Sickafus, Oxygen migration in La2NiO4+δ, J. Mater. Chem. 10 (10) (2000) 2349–2354.

[2] S.F. Bychkov, I.I. Gainutdinov, S.A. Chizhik, A.P. Nemudry, Novel oxygen partial pressure relaxation technique for study of oxygen exchange in nonstoichiometric oxides. The model of relaxation kinetics, Solid State Ionics 320 (2018) 297–304.

[3] I. Starkov, S. Bychkov, A. Matvienko, A. Nemudry, Oxygen release technique as a method for the determination of “δ–pO2–T” diagrams for MIEC oxides, Phys. Chem. Chem. Phys. 16 (12) (2014) 5527–5535.

МТ ТОТЭ С ЭЛЕКТРОЛИТНЫМ СЛОЕМ, СФОРМИРОВАННЫМ МЕТОДОМ МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ

Хохлова М.О. [1], Шипилова А.В. [2], Шубникова Е.В. [1], Шмаков А.Н. [3], Брагина О.А. [1], Смолянский Е.А. [4], Соловьев А.А. [2], Немудрый А.П. [1]

[1]ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, 630090

[2]ФГБУН Институт сильноточной электроники СО РАН, пр. Академический, 2/3, Томск, 634055

[3]ЦКП «СКИФ», Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, пр. Никольский, 1, Кольцово, 630559

[4]Национальный исследовательский Томский политехнический университет, пр. Ленина, 30, Томск, 634050

e-mail: khokhlova@solid.nsc.ru

В настоящее время одной из ключевых задач в области исследований твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ) является повышение стабильности и долговечности устройств, что может быть достигнуто снижением рабочих температур до среднетемпературного диапазона (500–800 ºС) [1].

В данной работе композит LSFMN ($La_{0.4}Sr_{0.6}Fe_{0.85}Mo_{0.1}Ni_{0.05}O_{3-\delta}$)-SDC был исследован в качестве материала катодного функционального слоя микротрубчатых (МТ) твердооксидных топливных элементов. Было проведено сравнение электрохимических характеристик МТ ТОТЭ, электролитный слой которых был сформирован методами погружения и магнетронного распыления. Микроструктура исследуемых образцов была изучена с использованием сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Полученные результаты свидетельствуют о перспективности использования метода магнетронного распыления для формирования электролитного слоя МТ ТОТЭ.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 24-29-00435.

[1] Shao, Z., Zhou, W., & Zhu, Z. (2012). Advanced synthesis of materials for intermediate-temperature solid oxide fuel cells. Prog. Mater. Sci., *57*(4), 804-874.

СТРУКТУРНЫЕ МЕХАНИЗМЫ РЕАЛИЗАЦИИ НЕСТЕХИОМЕТРИИ В ПЕРОВСКИТАХ И ПЕРОВСКИТОПОДОБНЫХ ОКСИДАХ

Цыбуля С.В.

ФГБУН Институт катализа им Г.К.Борескова СО РАН,

пр. Ак. Лаврентьева, 5, Новосибирск, 630090, e-mail: tsybulya@catalysis.ru

Сложные перовскитоподбные оксиды – весьма широкий и очень популярный у исследователей класс объектов, обладающих самыми разнообразными химическими и физическими свойствами.

Вариации состава, кристаллической структуры и наноструктуры в этих оксидах возможны за счет различных замещений элементов, в том числе, приводящих к нарушениям стехиометрии как по соотношению катионов к анионам, так и вследствие неполного заполнения кристаллографических позиций. При этом нестехиометрия – это далеко не всегда точечные дефекты, случайным образом распределенные в структуре. В докладе будут рассмотрены также иные структурные способы реализации нестехиометрии – планарные дефекты, 2D и 3D наноразмерные блоки с упорядоченным расположением вакансий (структуры браунмиллерита, фаз Гринье), когерентно встроенные в матрицу перовскита [1].

Примеры реализации нестехиометрии в оксидах формально стехиометрического состава будут показаны для оксидов Раддлесдена-Поппера $A_{n+1}B_nO3_{n+1}$. Для них характерно образование дефектов чередования слоев (RP faults в англоязычной литературе), которые можно рассматривать как когерентно встроенные в матричную структуру A_2BO_4 двумерные фрагменты фаз второго и третьего членов ряда. Будут рассмотрены особенности дифракционных картин, характерные для структур с подобным типом дефектов на примере тетрагональных фаз Sr_2TiO_4.

[1] Наноструктурированные оксиды / Под ред. С.В. Цыбули. Новосибирский государственный университет. Новосибирск. 2016. – 206 с.

[2] Gorkusha A.S., Cherepanova S.V., Tsybulya S.V. Simulation of Diffraction Patterns for Ruddlesden–Popper (RP) Tetragonal Structures with RP Faults //J.Appl. Crystallography. 2024. V.57. P.1578-1587.

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФФУЗИИ ИОНОВ ЛИТИЯ В СЕРИИ СОСТАВОВ $Ti_{2-2x}Fe_xNb_{10+x}O_{29}$, АНОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ЛИТИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

Цыдыпылов Д.З., Косова Н.В.

ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,

ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, 630090, e-mail: tsydypylov@solid.nsc.ru

В коммерческих литий-ионных аккумуляторах (ЛИА) в качестве анодного материала используют графит. К недостаткам графита относят неспособность работать при высоких скоростях заряда/разряда, что ограничивает его применение в электромобилях. Для создания аккумуляторов, способных к быстрому заряду/разряду, исследуют новые оксидные анодные материалы, в частности смешанные оксиды ниобия ($TiNb_2O_7$, $Ti_2Nb_{10}O_{29}$, $FeNb_{11}O_{29}$). Мощность аккумулятора определяется скоростью переноса заряда в электродах и диффузией ионов лития в структуре электродных материалов. Поэтому требуются электродные материалы с высокой электронной и ионной проводимостью. Электронную проводимость можно улучшить путем создания композитов с углеродом. В то время как оптимизировать ионную проводимость можно либо наноструктурированием, либо допированием.

В данной работе исследована серия составов $Ti_{2-2x}Fe_xNb_{10+x}O_{29}$. Результаты гальваностатического прерывистого титрования показали, что с увеличением содержания железа значение химического коэффициента диффузии лития D_{Li+} растет при 1,67 В, в то время как в области 1,5–1,2 В оно снижается. Анализ путей миграции лития в структуре $Fe_yTi_{2-2y}Nb_{10+y}O_{29}$ показал, что с увеличением содержания железа растут барьеры миграции лития для перколирующих путей, что коррелирует со снижением значения D_{Li+} для области 1,5–1,2 В. При этом уменьшаются барьеры миграции лития для неперколирующих путей, что облегчает структурные превращения в двухфазном плато при 1,67 В и увеличивает коэффициент диффузии. Состав $Fe_{0,5}TiNb_{10,5}O_{29}$ представляет собой компромисс между этими двумя корреляциями, поэтому этот образец имеет наибольшее среднее значение D_{Li+} среди остальных составов. Следовательно, оптимальный состав $TiFe_{0.5}Nb_{10.5}O_{29}$ продемонстрировал значение удельной емкости заряда 249 мАч/г при скорости циклирования 5C, что выше, чем для $Ti_2Nb_{10}O_{29}$ (215 мАч/г), $FeNb_{11}O_{29}$ (212 мАч/г) и $TiNb_2O_7$ (161 мАч/г).

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ ОКСИДОВ НА ОСНОВЕ $La_{0.6}Sr_{0.2}Ba_{0.2}Fe_{0.8-x}Co_{0.2}Ni_xO_{3-\delta}$

Черендина О.В.[1], Гуськов Р.Д. [1], Шубникова Е.В.[1], Брагина О.А.[1], Кабанов А.А.[2], Немудрый А.П.[1]

[1]ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, 630090

[2]Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

e-mail: cherendina@solid.nsc.ru

Прогресс в получении новых материалов электродов твердооксидных топливных и электролизных элементов (ТОТЭ и ТОЭ), устойчивых к восстановительным и окислительным атмосферам, обладающих высокой каталитической активностью, а также эффективных, селективных, стабильных, экологичных, необходим и крайне важен для развития технологий ТОТЭ.

Данная работа направлена на исследование функциональных свойств новых высокоэнтропийных оксидов на основе $La_{0.6}Sr_{0.2}Ba_{0.2}Fe_{0.8-x}Co_{0.2}Ni_xO_{3-\delta}$ (x=0.02; 0.05; 0.07; 0.1), обладающих высокой смешанной кислород-электронной проводимостью (СКЭП).

Перовскитоподобные оксиды состава $La_{0.6}Sr_{0.2}Ba_{0.2}Fe_{0.8-x}Co_{0.2}Ni_xO_{3-\delta}$ (x=0.02; 0.05; 0.07; 0.1) были получены твердофазным методом и исследованы методом высокотемпературной рентгеновской дифракции. Исследование кинетических и термодинамических параметров осуществлялось методами квазиравновесного выделения кислорода и методом релаксации парциального давления кислорода.

Методом квазиравновесного выделения кислорода исследована фазовая стабильность материала в широком диапазоне температур и парциального давления кислорода, а также рассчитаны термодинамические параметры процесса и плотность электронных состояний. Энергетические барьеры диффузии кислорода E_m и ионная проводимость были рассчитаны с использованием метода валентных связей (BVSE) и методом Монте-Карло.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ № 122122900042-9

XD1DD: ПРОГРАММА ДЛЯ АНАЛИЗА СТРУКТУРЫ ОДНОМЕРНО РАЗУПОРЯДОЧЕННЫХ КРИСТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ДИФРАКЦИОННЫХ ДАННЫХ

Черепанова С.В., Яценко Д.А.

Институт катализа СО РАН, Новосибирск, пр. Лаврентьева 5

Рентгеновская дифракция является основным методом исследования объемной структуры твердых тел. Традиционные методики рентгеноструктурного анализа, например, полнопрофильный анализ Ритвельда, разработаны для трехмерно упорядоченных структур и анализируют положение, интенсивность, уширение и форму только брэгговских пиков. Довольно часто как на этапе синтеза, так и в результате полиморфных или топотактических превращений, а также при спинодальном распаде в кристаллах может возникать разупорядочение в одном из трех направлений. К таким нарушениям относятся двойниковые и антифазные границы, деформационные дефекты упаковки, турбостратное разупорядочение, образование ламеллярных доменных структур. Нарушения структуры в одном направлении вызывают разнообразные дифракционные эффекты, а именно, уширение, смещение, расщепление отдельных дифракционных пиков, появление диффузного рассеяния, что вызывает проблемы и, соответственно, ошибки в определении фазового состава, структуры и микроструктуры исследуемых материалов.

Одним из подходов для корректной интерпретации рентгеновских дифракционных данных является расчет рентгеновских дифракционных картин исходя из статистических моделей одномерно разупорядоченных кристаллов ограниченных размеров, содержащих планарные дефекты, с последующим сравнением модельных кривых с экспериментальными. Метод позволяет учитывать дифракционные эффекты, вызванные разупорядочением, и давать информацию о дефектной структуре, такую как тип и концентрация планарных дефектов, средние размеры доменов и т.д. Именно с отклонениями структуры исследуемого образца от идеальной могут быть связаны его особые свойства.

В ходе мастер-класса будет изложена краткая теория метода. С использованием программы XD1DD (X-ray Diffraction for 1D Disorder) на нескольких примерах будет разобрано создание статистических моделей одномерно разупорядоченных кристаллов для различных случаев нарушений структуры в одном направлении и рассчитаны соответствующие дифракционные картины. Программа XD1DD доступна на сайте https://sourceforge.net/projects/xd1dd/.

ПОДБОР ОПТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА ЭЛЕКТРОДНОГО МАТЕРИАЛА $Na_4Nb_8P_4O_{32}$ ДЛЯ НАТРИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

Шиндров А.А. [1,2], Скачилова М.Г. [1,2]

[1]*ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, 630090, e-mail: A.Shindrov@yandex.ru*

[2]*Новосибирский государственный университет, ул. Ляпунова 2, Новосибирск, 630090*

В течение последних трех десятилетий литий-ионные аккумуляторы (ЛИА) успешно применяются в качестве накопителей энергии. Однако из-за постепенного истощения литиевых ресурсов существует необходимость в поиске их альтернативы. Натрий-ионные аккумуляторы (НИА) привлекают внимание благодаря равномерному географическому распределению натриевого сырья, дешевизне и аналогичному принципу работы с ЛИА. Одним из компонентов аккумуляторов является анодный материал, который существенно влияет на эксплуатационные характеристики батареи. В качестве новых анодных материалов могут выступать натрийсодержащие Nb-фосфатные бронзы, среди которых $Na_4Nb_8P_4O_{32}$ рассматривается как новый анодный материал для НИА.

В литературе наиболее распространенным методом получения $Na_4Nb_8P_4O_{32}$ является высокотемпературный твердофазный синтез, время которого варьируется от 10 часов до 2 месяцев. В данной работе был проведен подбор оптимальных условий твердофазного синтеза $Na_4Nb_8P_4O_{32}$. Основным направлением оптимизации синтеза был выбор соотношения летучих реагентов с последующим сокращением времени синтеза. Установлено, что использование стехиометрического соотношения реагентов не приводит к получению однофазового соединения, так как длительное нагревание приводит к улетучиванию Na и P. Добавление углерода к смеси реагентов позволяет избежать вспенивания образца и исключить стадию предварительной дегазации. Регулирование натрий- и фосфорсодержащих реагентов, исключение стадии предварительной дегазации позволили снизить время синтеза $Na_4Nb_8P_4O_{32}$ до 1 часа. Фазовый состав был определен с помощью рентгенофазового анализа с последующим уточнением кристаллической структуры с использованием метода Ритвельда. Полученные значения параметров решетки соответствуют литературным данным.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 25-73-00012).

МОДИФИКАЦИЯ ПОВЕРХНОСТИ МИКРОТРУБЧАТЫХ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ СКЭП ОКСИДОВ МЕТАЛЛИЧЕСКИМИ НАНОЧАСТИЦАМИ ДЛЯ УЛУЧШЕНИЯ КИСЛОРОДНОГО ТРАНСПОРТА И КАТАЛИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ: ЭКСПЕРИМЕНТ И DFT-МОДЕЛИРОВАНИЕ

Шубникова Е.В. [1], Черендина О.В. [1], Хохлова М.О. [1], Герасимов Е.Ю. [2], Брагина О.А. [1], Шубин А.А. [1], Зильберберг И.Л. [1], Немудрый А.П. [1]

[1]ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, 630090,

[2]ФГБУН Институт катализа имени Г. К. Борескова СО РАН, пр. Академика Лаврентьева, 5, Новосибирск, 630090

e-mail: shubnikova@solid.nsc.ru

Каталитические мембранные реакторы (КМР) представляют собой перспективную технологию для одностадийной переработки природного газа, позволяющую интегрировать процесс разделения кислорода из воздуха и реакцию парциального окисления метана в одном устройстве. Данный подход устраняет необходимость в дорогостоящем и энергозатратном этапе предварительного получения чистого кислорода, что обеспечивает значительное повышение эффективности и селективности процесса по сравнению с традиционными промышленными методами.

В данной работе проведено исследование структурных и транспортных свойств оксида $La_{0.4}Sr_{0.6}Fe_{0.95}Nb_{0.05}O_{3-\delta}$ (LSFNb), допированного катионами Ni. Показано, что формируемые in situ металлические наночастицы на поверхности микротрубчатой (МТ) мембраны значительно повышают кислородный поток, а также снижают кажущуюся энергию активации процесса кислородного транспорта в два раза. МТ КМР на основе LSFNbNi10 с модифицированной наночастицами Ni-Fe поверхностью продемонстрировал высокую каталитическую активность как на воздухе, так и CO_2-содержащей атмосфере. Для определения механизма реакции и природы активных центров выполнены расчеты методом DFT.

Полученные результаты демонстрируют высокий потенциал применения LSFNbNi МТ мембран с модифицированной металлическими наночастицами поверхностью в КМР для конверсии углеводородов.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИХТТМ СО РАН № 122122900042-9.

МЕМБРАННЫЙ КАТАЛИТИЧЕСКИЙ РЕАКТОР НА ОСНОВЕ BSCFM5 ДЛЯ ОКИСЛИТЕЛЬНОГО ДЕГИДРИРОВАНИЯ ЭТАНА

Шубникова Е.В., Черендина О.В., Хохлова М.О., Брагина О.А., Немудрый А.П.

ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,

ул. Кутателадзе, 18, Новосибирск, 630090, e-mail: shubnikova@solid.nsc.ru

Этилен играет ключевую роль в производстве широкого спектра химических продуктов, включая полиэтилен, поливинилхлорид, окись этилена, этиловый спирт, этилбензол и уксусный альдегид. Традиционно его получают методом парового крекинга нефтяного сырья — процесса, отличающегося высокой энергоёмкостью и стоимостью, что делает его одним из наиболее затратных в нефтехимической промышленности. Перспективной альтернативой является окислительное дегидрирование этана (ОДЭ). Этот метод считается более энергоэффективным и обладает потенциалом для значительного сокращения углеродного следа при производстве этилена. Однако для его коммерциализации необходима разработка катализаторов с повышенной селективностью и стабильностью. Целью данной работы являлось исследование каталитической активности микротрубчатых (МТ) мембран на основе оксида BSCFM5 в реакции ОДЭ путем нагрева мембраны с помощью переменного электрического тока.

Эксперименты по нагреву МТ мембраны переменным электрическим током проводились в градиентах составов газовых потоков: воздух/(C_2H_6/Ar) и CO_2/(C_2H_6/Ar) в температурном диапазоне 760–880 °C при варьировании концентрации этана и парциального давления кислорода. Результаты показали, что данный метод нагрева позволяет значительно повысить выход этилена и снизить образование побочных продуктов по сравнению с традиционными методами. При температуре 880 °C и $pO_{2.1}$ ~ 0.6 атм конверсия этана достигла 95%, а селективность по этилену составила около 70%. Полученные данные демонстрируют высокий потенциал применения каталитических мембранных реакторов на основе BSCFM5 для энергоэффективного получения этилена методом окислительного дегидрирования этана (ОДЭ) без использования дорогостоящих катализаторов.

Работа выполнена в рамках проекта РНФ (№ 23-43-00130).

СОДЕРЖАНИЕ

ДИЗАЙН СТРУКТУР ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ ДЛЯ ПЕРОВСКИТНЫХ СОЛНЕЧНЫХ БАТАРЕЙ: ВЛИЯНИЕ ДЫРОЧНО-ТРАНСПОРТНОГО МАТЕРИАЛА НА ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ УСТРОЙСТВ

АГАФОНОВА Е.Е., КРАСНИКОВ Д.В., НАСИБУЛИН А.Г. 4

МОДЕЛИРОВАНИЕ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ЛИТИЕВЫХ И ПОСТЛИТИЕВЫХ АККУМУЛЯТОРОВ: ОТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ К ПРИКЛАДНЫМ РЕШЕНИЯМ

АКСЕНОВ Д.А...... 5

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЛИТИЯ С MOS_2, ЛЕГИРОВАННЫМ АЗОТОМ

АЛЕКСЕЕВ В.А., БУЛУШЕВА Л.Г., ОКОТРУБ А.В...... 6

КАТАЛИТИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ И ЭЛЕКТРОЛИЗЕРОВ С ПРОТОНООБМЕННОЙ МЕМБРАНОЙ

АЛЕКСЕЕНКО А.А., БЕЛЕНОВ С.В., ГУТЕРМАН В.Е., ПАВЛЕЦ А.С., МОГУЧИХ Е.А., БАЯН Ю.А., ПАНКОВА Ю.А...... 7

ПРОИЗВОДСТВО РОССИЙСКИХ ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗАТОРОВ ДЛЯ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ С ТВЕРДОПОЛИМЕРНОЙ МЕМБРАНОЙ

АЛЕКСЕЕНКО Д.В., БЕЛЕНОВ С.В., ГУТЕРМАН В.Е., ПАВЛЕЦ А.С. 8

ПОЛУЧЕНИЕ МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ NIO/C МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ ЭНЕРГЕТИКИ И ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗА ИЗУЧЕНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК КИСЛОРОДА В ДОПИРОВАННЫХ ФЕРРИТАХ СТРОНЦИЯ

АРАПОВА М.В., БРАГИНА О.А., ЧЕРЕНДИНА О.В., ЧИЖИК С.А., НЕМУДРЫЙ А.П.. 10

ХИМИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ F-ЦЕНТРОВ И ИХ ПРОИЗВОДНЫХ ПО ДАННЫМ ТФП

АФИМЧЕНКО Н.А., ЗИЛЬБЕРБЕРГ И.Л...... 11

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДЕГРАДАЦИИ PT/C КАТАЛИЗАТОРОВ НА РАЗЛИЧНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НОСИТЕЛЯХ

БАЯН Ю.А., КРИВОДУБСКИЙ Д.П., ПАНКОВ И.В., ГЕРАСИМОВ Е.Ю., АЛЕКСЕЕНКО А.А. 12

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВНЕШНИХ ФАКТОРОВ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ БАТАРЕИ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

БЕЛИНСКИЙ Е.В., ФАДДЕЕВ Н.А...... 13

ОСОБЕННОСТИ МЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ КОМПОЗИТНЫХ БИПОЛЯРНЫХ ПЛАСТИН ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

БЕЛИЧЕНКО М.А., ФАДДЕЕВ Н.А...... 14

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КАТОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ СО СМЕШАННОЙ ПРОВОДИМОСТЬЮ $LA_{0.9}SR_{0.1}SC_{1-X}MN_XO_{3\pm\Delta}$

БЕРВИЦКАЯ О.С., ИЧЕТОВКИНА В.А., КУЗНЕЦОВА Ю.Е., СТРОЕВА А.Ю., КУЗЬМИН А.В.. 15

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ZN-ДОПИРОВАННОГО ГЕКСАГОНАЛЬНОГО ПЕРОВСКИТА $BA_7IN_6AL_2O_{19}$

БУШУЕВА А.В., АНИМИЦА И.Е...... 16

ИЗУЧЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИКИ КИСЛОРОДНОГО ОБМЕНА $LA_{0.6}SR_{0.4}CO_{1-X}TA_XO_{3-\Delta}$ МЕТОДОМ КВАЗИРАВНОВЕСНОГО ВЫДЕЛЕНИЯ КИСЛОРОДА

ВЛАСОВ С.А., ГОНГОЛА М.И., ПОПОВ М.П., НЕМУДРЫЙ А.П. 17

НОВЫЙ ПОДХОД К СИНТЕЗУ ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫХ PTCO/C ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗАТОРОВ

ГАВРИЛОВА А.А., НЕВЕЛЬСКАЯ А.К., КОХАНОВ А.А., БЕЛЕНОВ С.В.. 18

СИНТЕЗ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗАТОРОВ ДЛЯ ВОДОРОДНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

ГАВРИЛОВА А.А., МАУЭР Д.К., НЕВЕЛЬСКАЯ А.К., БЕЛЕНОВ С.В.. 19

ПРИМЕНЕНИЕ ПЭМВР В ИССЛЕДОВАНИИ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

ГЕРАСИМОВ Е. Ю. 20

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ КИСЛОРОДНОГО ОБМЕНА $LA_{0.6}SR_{0.4}CO_{1-X}MO_XO_{3-D}$ МЕТОДОМ РЕЛАКСАЦИИ ПАРЦИАЛЬНОГО ДАВЛЕНИЯ КИСЛОРОДА

ГОНГОЛА М.И., ПОПОВ М.П., НЕМУДРЫЙ А.П. 21

ИССЛЕДОВАНИЕ ФЕРРИТА ЛАНТАНА, ДОПИРОВАННОГО КАТИОНАМИ КАЛЬЦИЯ, НИКЕЛЯ, КОБАЛЬТА, ДЛЯ ЭЛЕКТРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ТВЕРДООКСИДНЫХ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ И ЭЛЕКТРОЛИЗЕРОВ

ГРИБАНОВА Н.А., ХОХЛОВА М.О., ШУБНИКОВА Е.В., ЧЕРЕНДИНА О.В., БРАГИНА О.А., НЕМУДРЫЙ А.П.. 22

ОПТИМИЗАЦИЯ РАБОЧЕГО ЦИКЛА ТПТЭ ПРИ РАБОТЕ НА ВОДОРОДЕ С ВЫСОКОЙ ДОЛЕЙ СОДЕРЖАНИЯМОНОКСИДА УГЛЕРОДА

ГРУДИНИН С.О., СМИРНОВА Н.В...... 23

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ СЕРЕБРА В ИМПУЛЬСНЫХ РЕЖИМАХ ЭЛЕКТРОЛИЗА

ГУБАНОВА А.А., КУРИГАНОВА А.Б.. 24

ОКСИДЫ СО СТРУКТУРОЙ ПЕРОВСКИТА КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ КАТОДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТОТЭ: ВЛИЯНИЕ ДОПИРОВАНИЯ ВЫСОКОВАЛЕНТНЫМИ КАТИОНАМИ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА

ГУСЬКОВ Р.Д., ПОПОВ М.П., КОВАЛЕВ И.В., ГОНГОЛА М.И., НЕМУДРЫЙ А.П.. 25

СИНТЕЗ ЭЛЕКТРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИМ ТЕМПЛАТНЫМ МЕТОДОМ: ВОЗМОЖНОСТИ И ОГРАНИЧЕНИЯ

ДМИТРИЕВ Д.С. 26

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ С МЕМБРАНОЙ НА ОСНОВЕ CSH_2PO_4 И ЭЛЕКТРОДАМИ РАЗЛИЧНЫХ СОСТАВОВ

ДОРМИДОНОВА Д.О., БАГРЯНЦЕВА И.Н., ПОНОМАРЕВА В.Г. 27

БИНАРНАЯ СИСТЕМА N_{22}PIP-LIBF_4 ДОПИРОВАННАЯ AL_2O_3 КАК КОМПОЗИТНЫЙ ЛИТИЕВЫЙ ЭЛЕКТРОЛИТ

ИЗМОДЕНОВА А.В. , УЛИХИН А.С. 28

СБОРКА АСИММЕТРИЧНОГО СУПЕРКОНДЕНСАТОРА НА ОСНОВЕ ГИБКИХ ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОДОВ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ГЕКСАЦИАНОФЕРРАТАМИ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

КАНЕВА М.В., ЛОБИНСКИЙ А.А., ЛЕВШАКОВА Л.А., ХАЙРУЛЛИНА Е.М. 29

ТЕОРИЯ И ПРАКТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ИЗУЧЕНИЯ СТРУКТУРЫ ПОРОШКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДОМ РИТВЕЛЬДА

КАРДАШ Т.Ю. 30

ИЗУЧЕНИЕ КИНЕТИКИ КИСЛОРОДНОГО ОБМЕНА НА ПОВЕРХНОСТИ МИКРОТРУБЧАТЫХ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ ПЕРОВСКИТОПОДОБНЫХ ОКСИДОВ

КОВАЛЕВ И.В., ПОПОВ М.П., ГУСЬКОВ Р.Д., ЧИЖИК С.А., НЕМУДРЫЙ А.П. 31

ПОЛУЧЕНИЕ ВЫСОКОСТАБИЛЬНОГО IRPT АНОДНОГО ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗАТОРА ДЛЯ ЭЛЕКТРОЛИЗЁРОВ С ПРОТОНООБМЕННОЙ МЕМБРАНОЙ

КОЖОКАРЬ Е.Л., МОГУЧИХ Е.А., ПАВЛЕЦ А.С., АЛЕКСЕЕНКО А.А. 32

ПОЛУЧЕНИЕ АКТИВНОГО И СТАБИЛЬНОГО БИМЕТАЛЛИЧЕСКОГО PTNI/C ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗАТОРА ДЛЯ КАТОДА ТОПЛИВНОГО ЭЛЕМЕНТА С ПРОТОНООБМЕННОЙ МЕМБРАНОЙ

КОЖОКАРЬ Е.Л., НОВОМЛИНСКАЯ И.А., МЕНЬЩИКОВ В.С., АЛЕКСЕЕНКО А.А. 33

ИЗГОТОВЛЕНИЕ ТВЕРДООКСИДНЫХ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ НА НЕСУЩЕМ АНОДЕ С ТОНКОПЛЁНОЧНЫМ ЭЛЕКТРОЛИТОМ НА ОСНОВЕ СТАБИЛИЗИРОВАННОГО ОКСИДА ЦИРКОНИЯ

ЛЕВАКОВА А.С. , ГУСЬКОВ Р.Д. , ТРОПИН Е.С., НЕМУДРЫЙ А.П. 34

ЭЛЕКТРОДНЫЙ МАТЕРИАЛ НА ОСНОВЕ НАНОРАЗМЕРНОГО КОМПОЗИТА COS/NIS ДЛЯ АСИММЕТРИЧНОГО СУПЕРКОНДЕНСАТОРА

ЛОБИНСКИЙ А.А., КАНЕВА М.В., МЕЛЕШКО А.А., КОДИНЦЕВ И.А. 35

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЭЛЕКТРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ МОЛИБДАТОВ РЗЭ ДЛЯ СИММЕТРИЧНЫХ ТОТЭ

ЛЫСКОВ Н.В. 36

МЕТОД НАКЛОННОГО НАПЫЛЕНИЯ С ВРАЩЕНИЕМ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ КРЕМНИЕВЫХ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ ЭЛЕКТРОДОВ

МАКСИМКИН А.А. , КУЛОВА Т.Л. , ТРУШИН О.С. , ФАТТАХОВ И.С. , МАЗАЛЕЦКИЙ Л.А. 37

РОЛЬ ДОПИРОВАНИЯ АЛЮМИНИЕМ В ИЗМЕНЕНИИ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ПЕРОВСКИТОПОДОБНОГО ОКСИДА $LA_{0.4}SR_{0.6}FE_{1-X}AL_XO_{3-\Delta}$

МАМОНОВА В.Е. , АРАПОВА М.В., БРАГИНА О.А., НЕМУДРЫЙ А.П. 38

ИЗМЕРЕНИЯ КАТАЛИЗАТОРОВ В СОСТАВЕ ЕДИНИЧНОГО ТОПЛИВНОГО ЭЛЕМЕНТА С ПРОТОНООБМЕННОЙ МЕМБРАНОЙ

МЕНЬШИКОВ В.С., МАУЭР Д.К., БЕСКОПЫЛЬНЫЙ Е.Р...... 39

ПОЛУЧЕНИЕ ОКСИДА ЦЕРИЯ ПУТЁМ ЛАЗЕРНОГО ПИРОЛИЗА ПРЕКУРСОРА

МИЛЛЕР Я.А., БАГИШЕВ А.С., ТИТКОВ А.И. 40

ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫЕ ЭЛЕКТРОКАТАЛИЗАТОРЫ НА ОСНОВЕ ИРИДИЯ ДЛЯ АНОДНОЙ РЕАКЦИИ ВЫДЕЛЕНИЯ КИСЛОРОДА ПОМ-ЭЛЕКТРОЛИЗЕРОВ

МОГУЧИХ Е.А., КОЖОКАРЬ Е.Л., ПАВЛЕЦ А.С., СОЛОВЬЕВА А.А., АСТРАВУХ Я.В., АЛЕКСЕЕНКО А.А. 41

ИССЛЕДОВАНИЕ NA^{+}-ИОННОЙ ПРОВОДИМОСТИ В $NA_2ER(MOO_4)(PO_4)$

МОРХОВА Е.А., КАБАНОВ А.А., ОРЛОВА Е.И. , ШИНДРОВ А.А...... 42

ИЗУЧЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СВОЙСТВ МИКРОТРУБЧАТЫХ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА $SRFE_{1-X}W_XO_{3-\Delta}–CE_{0.9}GD_{0.1}O_{2-\Delta}$

НОВИКОВ А.Д., ХОХЛОВА М.О., ШУБНИКОВА Е.В., ЧЕРЕНДИНА О.В., АРАПОВА М.В., БРАГИНА О.А., НЕМУДРЫЙ А.П. 43

ИССЛЕДОВАНИЕ $CUSNO_3$ В КАЧЕСТВЕ ПОТЕНЦИАЛЬНОГО АНОДНОГО МАТЕРИАЛА ДЛЯ ЛИТИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

НОВОЖИЛОВ Д.В., ШИНДРОВ А.А., УЛИХИН А.С., ТОЛОЧКО Б.П. 44

ОСОБЕННОСТИ КИНЕТИКИ ЭЛЕКТРОДНЫХ РЕАКЦИЙ В ТВЕРДООКСИДНЫХ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ЯЧЕЙКАХ С БЛИЗКИМ КАТИОННЫМ СОСТАВОМ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СЛОЕВ

ОСИНКИН Д.А...... 45

СИНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В КАТАЛИЗАТОРАХ PTNI/N-C ДЛЯ РЕАКЦИИ ВОССТАНОВЛЕНИЯ КИСЛОРОДА

ПАВЛЕЦ А.С., АСТРАВУХ Я.В., БАЯН Ю.А., ГЕРАСИМОВ Е.Ю., АЛЕКСЕЕНКО А.А...... 46

МЕХАНИЗМЫ ДЕГРАДАЦИИ PTCUC–N КАТАЛИЗАТОРОВ ДЛЯ ПОМТЭ: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ IL-TEM

ПАВЛЕЦ А.С., АСТРАВУХ Я.В., МОГУЧИХ Е.А., ПАНКОВ И.В., АЛЕКСЕЕНКО А.А. 47

ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОМАТЕРИАЛОВ МЕТОДОМ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ВТОРИЧНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В ПРОСВЕЧИВАЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

ПАНКОВ И.В...... 48

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ ПРОВОДИМОСТИ ПОЛИМЕРНОГО КОМПЛЕКСА ПОЛИ-[PDMEOSALTMEN]

ПЕТРОВА Д.А. , СМИРНОВА Е.А...... 49

ИССЛЕДОВАНИЕ ТВЕРДЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИУРЕТАНА ДЛЯ ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ СУПЕРКОНДЕНСАТОРОВ

ПОДГОРНОВА О.А., ФЕДОРОВ Н.А., УВАРОВ Н.Ф.. 50

МЕХАНОХИМИЧЕСКИЙ *IN SITU* СИНТЕЗ МЕТАЛЛОМАТРИЧНЫХ КОМПОЗИТОВ CU/TIC

РИДЕЛЬ Н.С., КОВАЛЕВА С.А., ДЕВЯТКИНА Е.Т., ВОСМЕРИКОВ С.В., ГРИГОРЬЕВА Т.Ф. 51

МОДЕЛИРОВАНИЕ БИПОЛЯРНЫХ ПЛАСТИН С ЗАКРЫТЫМ КАТОДОМ ДЛЯ ПЕРОКСИДНОГО ТОПЛИВНОГО ЭЛЕМЕНТА

РОЖКОВ Я.Д., ФАДДЕЕВ Н.А., СМИРНОВА Н.В. 52

ЭЛЕКТРОЛИТ С ПРОВОДИМОСТЬЮ ПО АНИОНАМ $AlCl_4^-$ НА ОСНОВЕ МОЧЕВИНЫ

РУБИЛКИН П.А. , УЛИХИН А.С., УВАРОВ Н.Ф. 53

ИЗУЧЕНИЕ ОБРАТИМОЙ ИНТЕРКАЛЯЦИИ ИОНОВ LI^+ В СТРУКТУРУ ЛИТИЙ-ТАНТАЛОФОСФАТНОЙ БРОНЗЫ $LITA_2PO_8$

СКАЧИЛОВА М.Г. , МОРХОВА Е.А., ШИНДРОВ А.А. 54

ПОЛУЧЕНИЕ ЧАСТИЦ СЕРЕБРА В УСЛОВИЯХ ИМПУЛЬСНОГО ЭЛЕКТРОЛИЗА

СТАВЕНЧУК Э.А., КУРИГАНОВА А.Б. 55

РАЗРАБОТКА МОДЕЛИ ДЛЯ ЦЕЛЕНАПРАВЛЕННОГО ПОИСКА ВЫСОКОПРОВОДЯЩИХ ОРГАНИЧЕСКИХ ИОННЫХ ПЛАСТИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИХ ДАННЫХ

СТЕБНИЦКИЙ И.А. , МАТЕЙШИНА Ю.Г. 56

АДДИТИВНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ КОМПОНЕНТОВ ТОТЭ

ТИТКОВ А.И. 57

ВЛИЯНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ РЕЖИМОВ НАНОКОМПОЗИТА НА ВЕЛИЧИНУ СКОРОСТИ ЕГО ОСАЖДЕНИЯ

ТРИФОНОВ Г.И., ЖАЧКИН С.Ю. 58

КЕРАМИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ГАЗОВЫХ ПОТОКОВ В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ТВЕРДООКСИДНЫХ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТАХ

УСТЮЖАНИНОВ И.Д., ДУБОВЦЕВ Д.Ю., ВЕПРЕВА А.И., САЕТОВА Н.С., КУЗЬМИН А.В. 59

ПОСТЛИТИЕВЫЕ ХИМИЧЕСКИЕ ИСТОЧНИКИ ТОКА

ФЕДОТОВ С.С. 60

РАЗРАБОТКА МАТЕРИАЛОВ И ТЕСТОВАЯ 3D-ПЕЧАТЬ КЕРАМИЧЕСКИХ ИНТЕРКОННЕКТОРОВ НА ОСНОВЕ YSZ

ФРОЛЕНКОВА А.Д., ТИТКОВ А.И. 61

ИССЛЕДОВАНИЕ РАВНОВЕСНЫХ И КИНЕТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ NNO И LNO МЕТОДАМИ КВАЗИРАВНОВЕСНОГО ВЫДЕЛЕНИЯ КИСЛОРОДА И РЕЛАКСАЦИИ ПАРЦИАЛЬНОГО ДАВЛЕНИЯ КИСЛОРОДА

МАРИО ФУАД 62

МТ ТОТЭ С ЭЛЕКТРОЛИТНЫМ СЛОЕМ, СФОРМИРОВАННЫМ МЕТОДОМ МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ

ХОХЛОВА М.О., ШИПИЛОВА А.В., ШУБНИКОВА Е.В., ШМАКОВ А.Н., БРАГИНА О.А., СМОЛЯНСКИЙ Е.А. , СОЛОВЬЕВ А.А., НЕМУДРЫЙ А.П. 63

СТРУКТУРНЫЕ МЕХАНИЗМЫ РЕАЛИЗАЦИИ НЕСТЕХИОМЕТРИИ В ПЕРОВСКИТАХ И ПЕРОВСКИТОПОДОБНЫХ ОКСИДАХ

ЦЫБУЛЯ С.В. 64

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФФУЗИИ ИОНОВ ЛИТИЯ В СЕРИИ СОСТАВОВ $TI_{2-2X}FE_XNB_{10+X}O_{29}$, АНОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ЛИТИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

ЦЫДЫПЫЛОВ Д.З., КОСОВА Н.В. 65

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ ОКСИДОВ НА ОСНОВЕ $LA_{0.6}SR_{0.2}BA_{0.2}FE_{0.8-X}CO_{0.2}NI_XO_{3-\Delta}$

ЧЕРЕНДИНА О.В., ГУСЬКОВ Р.Д. , ШУБНИКОВА Е.В., БРАГИНА О.А., КАБАНОВ А.А., НЕМУДРЫЙ А.П. 66

XD1DD: ПРОГРАММА ДЛЯ АНАЛИЗА СТРУКТУРЫ ОДНОМЕРНО РАЗУПОРЯДОЧЕННЫХ КРИСТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ДИФРАКЦИОННЫХ ДАННЫХ

ЧЕРЕПАНОВА С.В., ЯЦЕНКО Д.А. 67

ПОДБОР ОПТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА ЭЛЕКТРОДНОГО МАТЕРИАЛА $NA_4NB_8P_4O_{32}$ ДЛЯ НАТРИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

ШИНДРОВ А.А., СКАЧИЛОВА М.Г. 68

МОДИФИКАЦИЯ ПОВЕРХНОСТИ МИКРОТРУБЧАТЫХ МЕМБРАН НА ОСНОВЕ СКЭП ОКСИДОВ МЕТАЛЛИЧЕСКИМИ НАНОЧАСТИЦАМИ ДЛЯ УЛУЧШЕНИЯ КИСЛОРОДНОГО ТРАНСПОРТА И КАТАЛИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ: ЭКСПЕРИМЕНТ И DFT-МОДЕЛИРОВАНИЕ

ШУБНИКОВА Е.В., ЧЕРЕНДИНА О.В., ХОХЛОВА М.О., ГЕРАСИМОВ Е.Ю., БРАГИНА О.А., ШУБИН А.А., ЗИЛЬБЕРБЕРГ И.Л., НЕМУДРЫЙ А.П. 69

МЕМБРАННЫЙ КАТАЛИТИЧЕСКИЙ РЕАКТОР НА ОСНОВЕ BSCFM5 ДЛЯ ОКИСЛИТЕЛЬНОГО ДЕГИДРИРОВАНИЯ ЭТАНА

ШУБНИКОВА Е.В., ЧЕРЕНДИНА О.В., ХОХЛОВА М.О., БРАГИНА О.А., НЕМУДРЫЙ А.П. 70

А

Агафонова Е.Е 4
Аксенов Д.А. 5
Алексеев В.А.....6
Алексеенко А.А. ..7, 12, 32, 33, 41, 46, 47
Алексеенко Д.В. 8
Алексеенко Е.А.....9
Анимица И.Е.....16
Арапова М.В. 10, 38, 43
Астравух Я.В. 41, 46, 47
Афимченко Н.А. 11

Б

Багишев А.С.....40
Багрянцева И.Н. 27
Баян Ю.А. 7, 12, 46
Беленов С.В.....7, 8, 18, 19
Белинский Е.В. 13
Беличенко М.А. 14
Бервицкая О.С.....15
Бескопыльный Е.Р. 39
Брагина О.А. 10, 22, 38, 43, 63, 66, 69, 70
Булушева Л.Г 6
Бушуева А.В.....16

В

Вепрева А.И. 59
Власов С.А. 17
Восмериков С.В. 51

Г

Гаврилова А.А. 18, 19
Герасимов Е.Ю. 12, 20, 46, 69
Гонгола М.И.....17, 21, 25
Грибанова Н.А. 22
Григорьева Т.Ф. 51
Грудинин С.О. 23
Губанова А.А. 24
Гуськов Р.Д. 25, 31, 34, 66
Гутерман В.Е. 7, 8

Д

Девяткина Е.Т. 51
Дмитриев Д.С.....26
Дормидонова Д.О. 27
Дубовцев Д.Ю.....59

Ж

Жачкин С.Ю. 58

З

Зильберберг И.Л. 11, 69

И

Измоденова А.В. 28
Ичетовкина В.А. 15

К

Кабанов А.А. 42, 66
Канева М.В. 29, 35
Кардаш Т.Ю. 30
Ковалев И.В. 25, 31
Ковалева С.А. 51
Кодинцев И.А. 35
Кожокарь Е.Л. 32, 33, 41
Косова Н.В. 65
Коханов А.А. 18
Красников Д.В 4
Криводубский Д.П. 12
Кузнецова Ю.Е. 15
Кузьмин А.В. 15, 59
Кулова Т.Л. 37
Куриганова А.Б. 24, 55

Л

Левакова А.С. 34
Левшакова Л.А. 29
Лобинский А.А. 29, 35
Лысков Н.В. 36

М

Мазалецкий Л.А. 37
Максимкин А.А. 37
Мамонова В.Е. 38
Матейшина Ю.Г. 56
Мауэр Д.К. 19, 39
Мелешко А.А. 35
Меньшиков В.С. 33, 39
Миллер Я.А. 40
Могучих Е.А. 7, 32, 41, 47
Морхова Е.А. 42, 54

Н

Насибулин А.Г. 4
Невельская А.К. 18, 19

Немудрый А.П. .10, 17, 21, 22, 25, 31, 34, 38, 43, 63, 66, 69, 70
Новиков А.Д.....43
Новожилов Д.В. 44
Новомлинская И.А. 33

О

Окотруб А.В.....6
Орлова Е.И. 42
Осинкин Д.А. 45

П

Павлец А.С. 7, 8, 32, 41, 46, 47
Панков И.В.....12, 47, 48
Панкова Ю.А. 7
Петрова Д.А. 49
Подгорнова О.А.....50
Пономарева В.Г. 27
Попов М.П.....17, 21, 25, 31

Р

Ридель Н.С. 51
Рожков Я.Д.....52
Рубилкин П.А. 53

С

Саетова Н.С.....59
Скачилова М.Г.....54, 68
Смирнова Е.А. 49
Смирнова Н.В. 23, 52
Смолянский Е.А. 63
Соловьев А.А. 63
Соловьева А.А. 41
Ставенчук Э.А. 55
Стебницкий И.А. 56
Строева А.Ю. 15

Т

Титков А.И. 40, 57, 61
Толочко Б.П. 44
Трифонов Г.И. 58
Тропин Е.С. 34
Трушин О.С. 37

У

Уваров Н.Ф. 50, 53
Улихин А.С.....28, 44, 53
Устюжанинов И.Д.....59

Ф

Фаддеев Н.А. 13, 14, 52
Фаттахов И.С.....37
Федоров Н.А.....50
Федотов С.С. 60
Фроленкова А.Д. 61
Фуад Марио.....62

Х

Хайруллина Е.М. 29
Хохлова М.О. 22, 43, 63, 69, 70

Ц

Цыбуля С.В.....64
Цыдыпылов Д.З.....65

Ч

Черендина О.В. 10, 22, 43, 66, 69, 70
Черепанова С.В. 67
Чернышева Д.В. 9
Чижик С.А. 10, 31

Ш

Шиндров А.А. 42, 44, 54, 68
Шипилова А.В.....63
Шмаков А.Н. 63
Шубин А.А. 69
Шубникова Е.В. 22, 43, 63, 66, 69, 70

Я

Яценко Д.А. 67