

**МЕЖФАЗНЫЙ ОБМЕН ВОДОРОДА
В СИСТЕМАХ «ВОДОРОД-ОКСИД» И «МЕТАН-ОКСИД»**

Шишков А.В.⁽¹⁾, Захаров Д.М.⁽²⁾, Гордеев Е.В.^(1,2), Федорова К.А.⁽²⁾

(1) Уральский федеральный университет

620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

(2) Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН

620137, г. Екатеринбург, ул. Академическая, д. 20

Поиск и создание материалов для твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ) и электролизеров является востребованным направлением исследований в области экологической и ресурсосберегающей энергетики. Сложные оксиды со структурой флюорита и перовскита с общими формулами $A(IV)B(III)O_2$ и $A(II)B(IV)O_3$ привлекают внимание ученых в качестве перспективных материалов ТОТЭ благодаря своей высокой ионной проводимости. В рамках данной работы выполнено изучение кинетики межфазного обмена водорода на поверхности некоторых представителей сложных оксидов в среде водорода и метана.

В качестве образцов были выбраны $Zr_{0.84}Y_{0.16}O_{1.92}$, который выступал в качестве образца сравнения с преимущественно кислород-ионной проводимостью, и $BaCe_{0.7}Zr_{0.1}Y_{0.1}Yb_{0.1}O_3$ в качестве образца со смешанной кислород-ионной и протонной проводимостью. Образцы использовались в порошкообразной форме с удельной поверхностью 41.5 м²/г и 3.6 м²/г, соответственно. Измерения проводились в интервале температур 300–650 °С при общем давлении водородсодержащего газа 1–2 мбар. Перед измерениями образцы отжигались в условиях высокого вакуума (10⁻⁶ мбар) для очистки поверхности от адсорбированной влаги и других примесей. Затем образцы уравнивались в водороде или метане, обогащенными по противу. После уравнивания образца подавали газ, обогащенный по дейтерию, и проводили прямой эксперимент по изотопному обмену. Для оценки изотопных эффектов межфазного обмена, по завершению прямого эксперимента образцы уравнивали в газе, обогащенном по дейтерию, и напускали газ, обогащенный противом проводя обратный эксперимент. Экспериментальные данные обрабатывали, используя статистические модели на основе типов обмена с учётом и без учёта изотопных эффектов.

По результатам исследований были рассчитаны вероятности обмена по каждому из типов обмена, значения общей скорости обмена, значения скорости межфазного обмена. Были определены механизмы межфазного обмена водорода для H_2 и CH_4 , рассчитаны скорости элементарных стадий межфазного обмена водорода, а также количество поглощенного водорода в оксиде. Проведена оценка изотопных эффектов обмена.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда и Правительства Свердловской области № 24-23-20001, <https://rscf.ru/project/24-23-20001/>