**Звіт про науково-дослідну роботу: „ Дифузійні процеси в керамічних паливних комірках”**

**Мета роботи** - подальше вдосконалення керамічної паливної комірки та створення теорії структурної чутливості її властивостей.

Терміни виконання наукової роботи: початок І кв. 2016 р.

закінчення IV кв. 2018 р.

**Керівник роботи**: Васильєв Олександр Дмитрович, д. ф.-м. н., (Email:fsa@ipms.kiev.ua)

**Скорочений зміст висновків рецензентів.**

Важливою особливістю роботи є те, що розроблені уявлення базуються на ґрунтовних експериментальних даних щодо стану внутрішніх меж поділу, нано- і мікромеханізмів руйнування, а також розміру складових структури і поруватості, які є характкрними для спечених матеріалів. Запропонована феноменологічна теорія формування структури керамічного електроліту. За проведеними дослідженнями запропоновано концепцію оптимізації будови керамічної паливної комірки. Робота в повній мірі відповідає високим науковим і практичним вимогам і заслуговує найвищої оцінки.

**Пропозиції про подальше використання результатів роботи.**

Результати роботи можуть бути використані при виробництві керамічних паливних комірок та паливно-комірчаних систем на їхній основі.

Дані про реєстрацію роботи: № 0116U003503

**РЕФЕРАТ**

Об’єктом дослідження є дифузійні особливості утворення структури керамічного електроліту складу 1-мол. % Ce – 10-мол. % Sc – 89-мол. % ZrO2 при спіканні та її вплив на властивості.

Метою дослідження є подальше вдосконалення керамічної паливної комірки та створення теорії структурної чутливості її властивостей.

Методи дослідження: скануюча електронна мікроскопія, х-променевий аналіз, імпедансна спектроскопія, оцінка щільності, математичне моделювання.

Вважаючи процеси консолідації порошків і створення з них твердого керамічного тіла та вдосконалення його структури термоактивованими, винайдено співвідношення, які узагальнюють залежність міцності твердого електроліту паливної комірки від якості меж поділу і розмірів зерен / субзерен, поруватості.

Властивості меж поділу у структурі твердого електроліту розглянено за даними щодо механічної поведінки і імпеданскої спектроскопії, що вперше дозволило відрізнити межі субзерен і зерен фрактографічно, а й кількісно за їхніми електричними властивостями.

Побудовано діаграму рівноважних станів композиту NiO – ZrO2, (YSZ). Встановлено, що NiO – ZrO2 не утворюють сполук. Натомість, взаємодія у системі NiO – ZrO2 має евтектичний характер. Розчинність NiO у ZrO2 становить~1-мол. %.

Для катодного електроду встановлено, що Ce та Gd, як складові катодного захисного проти дифузії Cr шару, під час відпалу у відновній середі Ar – 30-об. % H2 інтенсивніше дифундують в електроліт, ніж Zr з електроліту у захисний шар.

**Ключові слова**: КЕРАМІЧНА ПАЛИВНА КОМІРКА; ДИФУЗІЯ; ДВООКИС ЦИРКОНІЮ; ОКСИД НІКЕЛЮ; ІМПЕДАНСНА СПЕКТРОСКОПІЯ; МЕХАНІЧНА ПОВЕДІНКА.

**Публікації**

1. Characterization of SOFC electrolytes using impedance spectroscopy analysis (overview), I. Brodnikovska. ElectronComm, 2015, Vol. 20, №1(84) 9-17.
2. The boundaries and their impact on properties of zirconia electrolyte. O. Vasylyev, M. Brychevskyi, Yе. Brodnikovskyi, I. Brodnikovska, S. Firstov. Electron Microscopy and Strength of Materials, Proc. Institute for Problems of Materials Science, Ser. Physical Materials Science, Structure and Properties of Materials, Ed. S. Firstov et al, Kyiv, Vol. 21, 2015, p. 47-62. / DOI: 10.13140/RG.2.1.3295.1449
3. The Structural Optimization of Ceramic Fuel Cells. O. Vasylyev, M. Brychevskyi, Ye. Brodnikovskyi. Universal Journal of Chemistry 4(2): 31-54, 2016, DOI: 10.13189/ujc.2016.040201
4. Influence of reduction conditions of NiO on its mechanical and electrical properties. Ye. Brodnikovskyi, B. Vasyliv, V. Podhurska, M. Andrzejczuk, N. McDonald, O. Kyrpa, O. Ostash, O. Vasylyev, R. Steinberger-Wilckens, M. Lewandowska. J. Electrochem. Sci. Eng. 6(1) (2016) 113-121; doi: 10.5599/jese.220
5. EB-PVD Helium-Tight Zirconia Ceramic Coating on Porous Ceramic Substrate, O. Vasylyev, M. Brychevskyi, .Ye. Brodnikovskyi, M. Andrzejczuk, M. Spychalski, M. Lewandowska, J. Mertens. Zastita Materijala 57 (2) 244 – 252 (2016)
6. The quasi-perpetual electricity generating device based on ceramic fuel cell for closed systems. Yu. Basaraba, Ye. Brodnikovskyi, M. Brychevskyi, N. Lysunenko, I. Polishko, O. Vasylyev, I. Perekopskyi. 7th Avia Congress, Kyiv, 2016.
7. Influence of Treatment Temperature on Microstructure and Properties of YSZ–NiO Anode Materials. V. Podhurska, B. Vasyliv, O. Ostash, Ye. Brodnikovskyi, O. Vasylyev. Nanoscale Research Letters (2016) 11:93
8. Керамічні паливні комірки. Бродніковський Є.М. Вісн. НАН України, 2016, № 2. – 91-95 c.
9. Вплив поруватостi на мiцнiсть i електричну провiднiсть композиту NiO–3,5YSZ та його кермету Ni–3,5YSZ. І. О. Полішко, Є. М. Бродніковський, Д. М. Бродніковський, Б. Д. Василів, В. Я. Подгурська, С. М. Шевченко, В. І. Чедрик, М. Андрейчук, О. Д. Васильєв. Порошкова металургія, № 5/6, с. 80-94, 2017
10. Межі поділу та їхній вплив на властивості полікристалів. Частина 1. Огляд літератури. Металознавство та обробка металів. – 2018. – 1. – C. 44-52. Васильєв О.Д., Бродніковська І.В., Бричевський М.М. Бродніковський Є.М., Фірстов С.О.
11. Межі поділу та їхній вплив на властивості полікристалів. Частина 2. Дослідні дані. Металознавство та обробка металів. – 2018. – 2. – C. 56-65.Васильєв О.Д., Бродніковська І.В., Бричевський М.М., Бродніковський Є.М., Фірстов С.О.
12. Catalytic Activity and Resistance to Sulfur Poisoning of Nickel-Containing Composites Based on Stabilized Zirconia in Tri-Reforming of Methane. Theoretical and Experimental Chemistry, –Vol. 53, –6, January. –2018, –С. 387-394. DOI 10.1007/s11237-018-9536-z, (in Russian too, ­–Vol. 53, – No. 6, November-December, 2017, M.R. Kantserova, S.M. Orlyk, O.D. Vasylyev.
13. Розроблення режимів виготовлення аноду та електроліту керамічної паливної комірки та електроліту керамічної паливної комірки методом стрічкового лиття Фундаментальні аспекти відновлювано-водневої енергетики і паливно-комірчаних технологій / за загальною редакцією Ю.М. Солоніна. - К.: "КІМ", 2018.– 184-189. Полішко І. О., Бродніковський Є. М., Іванченко С. Е., Лисуненко Н.О., Бродніковський Д.М., Бродніковська І. В., Барановський Д. І., Бричевський М. М. Васильєв О.Д., Рагуля А.В., Білоус А. Г., В’юнов О. І., Янчевський О. З., Коваленко Л. Л., Солопан С.О.
14. Багатошарові структури на основі товстих плівок для низькотемпературної (600 ºС) паливної комірки. Фундаментальні аспекти відновлювано-водневої енергетики і паливно-комірчаних технологій / за загальною редакцією Ю.М. Солоніна. - К.: "КІМ", 2018. – С. 190-195. Білоус А. Г., В’юнов О. І., Янчевський О.З., Коваленко Л.Л., Солопан С.О., Васильєв О. Д., Рагуля А. В., Бродніковський Є. М., Полішко І.О., Іванченко С.Е., Бродніковський Д. М., Лисуненко Н. О., Бродніковська І. В., Барановський Д. І.
15. Каталітичні та ресурсні характеристики композитів-прототипів анодів КПК в процесах оксилювального риформінгу С1-С4 алканів». Фундаментальні аспекти відновлювано-водневої енергетики і паливно-комірчаних технологій / за загальною редакцією Ю.М. Солоніна. - К.: "КІМ", 2018. – С. 205-211. Канцерова М. Р., Губарені Є. В., Чедрик В. І., Орлик С. М., Васильєв О. Д.
16. Дослідження закономірностей впливу робочого середовища на фізико-механічні характеристик матеріалів твердооксидних паливних комірок та розроблення методів їх підвищення». Фундаментальні аспекти відновлювано-водневої енергетики і паливно-комірчаних технологій / за загальною редакцією Ю.М. Солоніна. - К.: "КІМ", 2018. – С. 232-241. Осташ О.П., Подгурська В.Я., Василів Б.Д., Івасишин А.Д., Васильєв О.Д., Пріхна Т.О., Свердун В.Б., Бродніковський Є.М.
17. From Powder to Power: Ukrainian Way SF Journal of Material and Chemical Engineering. – 2018. – 1(1). – P. 1-12. Vasylyev O.D., Brodnikovskyi Y.M., Brychevskyi M.M., Polishko I.O., Ivanchenko S.E., Vereshchak V.G.
18. Zirconium oxide stabilized by scandium (iii) and cerium (iv) complex oxides as the basis for preparation of thick films and multilayer structures for low temperature (600 °C) fuel cell French-Ukrainian Journal of Chemistry. – 2018. – Vol. 06, Is. 01. – P. 16-20 Vasylyev O.D., Brodnikovskyi Y.M., V'yunov OI., Kovalenko L.L., Yanchevskii O. Z., Belous A. G..
19. Behaviour of Solid Oxide Fuel Cell Materials in Technological Environments French-Ukrainian Journal of Chemistry. – 2018. – Vol. 06, Is. 01. – P. 115-127. Podhurska V., Vasyliv B. , Ivasyshyn A. , Ostash O., Vasylyev O.(від. 22), Prikhna T., Sverdun V., Brodnikovskyi Y.
20. Joint Impedance Spectroscopy and Fractography Data Analysis of Ceria Doped Scandia Stabilized Zirconia Solid Electrolyte modified by powder types and sintering temperature French-Ukrainian Journal of Chemistry. – 2018. – Vol. 06, Is. 01. – P. 128-141. Brodnikovska I.V., Brychevskyi M.M., Brodnikovskyi Y.M., Brodnikovskyi D.M., Vasylyev O.D., Smirnova A.L.
21. The quasi-perpetual electricity generating device based on ceramic fuel cell for closed systems French-Ukrainian Journal of Chemistry. – 2018. – Vol. 06, Is. 01. – P. 141-150. Basaraba Y., Brychevskyi M., Brodnikovskyi Y., Vasylyev O., Perekopskyi I.
22. Патент на винахід №111082 «Матеріал для виготовлення з’єднувальних елементів твердооксидних паливних комірок». Зареєстровано в Державному реєстрі патентів України на винаходи 25.03.2016. Осташ О.П., Пріхна Т.О., Івасишин А.Д., Подгурська В.Я., Басюк Т.В., Васильєв О.Д., Бродніковський Є.М.
23. Патент на корисну модель №107260 «Пристрій для 3D-друкування за допомогою концентрованого сонячного випромінювання». Зареєстровано в Державному реєстрі патентів України на корисні моделі 25.05.2016. Солонін Ю.М., Васильєв О.Д., Бродніковський Є.М., Литвиненко Ю.М.
24. Polishko, Y. Brodnikovskyi, D. Brodnikovskyi, M. Brychevskyi, B. Vasyliv, V. Podhurska, O. Vasylyev. The influence of pore-former content on porosity, mechanical strength, and electrical conductivity of 3,5YSZ – 60-wt. % NiO anode, E-MRS 2016 Fall Meeting Conference 18th-22th September 2016, Warsaw University of Technology, Warsaw, 2016.
25. Yu. Basaraba, Ye. Brodnikovskyi, M. Brychevskyi, N. Lysunenko, I. Polishko, O. Vasylyev, I. Perekopskyi. The quasi-perpetual electricity generating device based on ceramic fuel cell for closed systems. The Seventh World Congress “AVIATION IN THE XXI-st CENTURY” – “Safety in Aviation and Space Technologies”, the National Aviation University, Kyiv, Ukraine, September 19-21, 2016.
26. В. Баклан, О. Васильєв, В. Згонник, Є. Бродніковський. Автономні паливно-комірчані джерела електричного струму, Міжнародний Чорноморський Транспортний Форум, 19-21 жовтня 2016, Одеса.
27. N. Lysunenko, V. Mokiychuk, Mykola Brychevskyi. Electrical properties of electrolyte-supported versus anode-supported SOFC, E-MRS 2016 Fall Meeting, Warsaw, p.26
28. Н.О. Лисуненко, В.М. Мокійчук. Вимірювання характеристик керамічних паливних комірок, як складових енергогенеруючих батарей, Всеукраїнська науково-технічна конференція молодих вчених у царині метрології «Technical Using of Measurement-2016»: тези доповідей, Київ: Академія метрології України, 2016. – с. 64-65
29. Vasylyev OD, Brodnikovskyi YM, Brychevskyi MM, Polishko IO, Ivanchenko SE, and Lysunenko NO. From Powder to Power: Ukrainian Way. IX International Conference in Chemistry “Kyiv-Toulouse” (ICKT-9), 2017
30. Comparison of tape casted SOFC based on Ukrainian 8YSZ with commercial SOFC / I. Polishko, S. Ivanchenko, N. Lysunenko, Y. Brodnikovskyi, O. Vasylyev, A. Ragulya // IX International Conference in Chemistry Kyiv-Toulouse (ICKT-9), 4th-9th June 2017, Kyiv, Ukraine.
31. Creation of suspensions and obtaining of ceramic tapes for fuel cells by tape casting method / S. Ivanchenko, I. Polishko // IX International Conference in Chemistry Kyiv-Toulouse (ICKT-9), 4th-9th June 2017, Kyiv, Ukraine.
32. The quasi-perpetual electricity generating device based on ceramic fuel cell for closed systems / Yu. Basaraba, M. Brychevskyi, Y. Brodnikovskovkyi, I. Polishko, S. Ivanchenko, N. Lysunenko, O. Vasylyev, I. Perekopskyi // IX International Conference in Chemistry Kyiv-Toulouse (ICKT-9), 4th-9th June 2017, Kyiv, Ukraine.
33. Performances of tape caster SOFC based of Ukrainian yttria stabilized zirconia powder / Polishko I., Ivanchenko S., Lysunenko N., Brodnikovskyi Y., Vasylyev O., Ragulya A. // International research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO 2017), 23th-26th August 2017, Chernivtsi, Ukraine.
34. Advanced zirconia composites for IT-SOFC application / Brodnikovskyi Y., Shevchenko S, Kovalchyk U., Polishko I., Kovalenko L., Brodnikovska I., Brodnikovskyi D., Vasylyev O. // International research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO 2017), 23th-26th August 2017, Chernivtsi, Ukraine.
35. Creation of defect-free ceramic tapes for solid oxide fuel cell by tape casting method / Ivanchenko S., Polishko I., Baranovskyi D., Brodnikovskyi Y., Vasylyev O., Ragulya A. // International research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO 2017), 23th-26th August 2017, Chernivtsi, Ukraine.
36. Elaboration of highly porous 3,5YSZ skeleton for SOFC anode-support application / I. Polishko, Y. Brodnikovskyi, D. Brodnikovskyi, B. Vasyliv, V. Podhurska, O. Vasylyev // E-MRS 2017 Fall Meeting, Conference 18th-21th September 2017, Warsaw, Poland.
37. Yttria- and scandia-stabilized zirconia composite for SOFC application / Y. Brodnikovskyi, I. Brodnikovska, L. Kovalenko, D. Brodnikovskyi, I. Polishko, O. Vasylyev, A. Belous // E-MRS 2017 Fall Meeting, Conference 18th-21th September 2017, Warsaw, Poland.
38. Vasylyev OD, Brodnikovskyi YM, Brychevskyi MM, Polishko IO, Ivanchenko SE, and Lysunenko NO. From Powder to Power: Ukrainian Way. IX International Conference in Chemistry “Kyiv-Toulouse” (ICKT-9), 2017
39. Brodnikovska I.V., Brychevskyi M.M., Brodnikovskyi Y.M., Brodnikovskyi D.M., Vasylyev O.D., Smirnova A.L. Joint Impedance Spectroscopy and Fractography Data Analysis of Ceria Doped Scandia Stabilized Zirconia Solid Electrolyte Modified by Powder Types and Sintering Temperature. Materials of Reports and Performances. IXth Internat. Chemistry Conf. “Kyiv-Toulouse”, Kyiv, 4-9 June, 2017, T. Shevchenko National Univ. of Kyiv, 2017, P. 199.
40. Brodnikovska I.V., Brodnikovskyi I.M., Brychevskyi M.M. Joint Impedance Spectroscopy analysis of 10Sc1CeSZ and 8YSZ Solid Electrolytes for SOFC. EMRS 2017 Fall Meeting, Warsaw University of Technology – Poland, 18 - 21 September 2017.
41. From Powder to Power: Ukrainian Way AMT – 2018. 10th International conference: advanced materials and technologies. From Idea to Market. 24-26 Oct., 2018. Ninghai, China. P. 144. Vasylyev O., Brodnikovskyi Y., Brychevskyi M., Polishko I., Ivanchenko S.E., Ostash O., Vasyliv B., Podhurska V., Chedryk V., Orlyk S., Horda R., Vereshchak V., Nosyk A.
42. The comparative study of 8YSZ zirconia powders and their ceramics. Abstract book, International research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO-2018). – Kyiv, – 27-30 August 2018, p. 196. Polishko I., Brodnikovskyi Ye., Horda R., Brodnikovskyi D., Brodnikovska I., Kovalenko L., Lysunenko N., Brychevskyi M., Vasylyev O., Belous A.

.