образцом. Далее в газовом контуре, изолированном от кварцевого реактора с образом, скачкообразно изменяют давление кислорода. Началом эксперимента по релаксации давления кислорода считают момент открытия соединения между газовым контуром и кварцевым реактором с образцом. Изменение общего давления кислорода во времени контролируют с помощью датчика общего давления. Эксперимент заканчивают по достижении образцом равновесия, которое контролируют по стабильно неизменном во времени общем давлении кислорода. В ходе эксперимента получают кинетические зависимости релаксации давления кислорода от времени, при математической обработке которых вычисляется скорость химического коэффициента обмена и диффузии кислорода.

Кинетика взаимодействия кислорода из газовой фазы со сложным оксидом $BaFeO_{3-\delta}$ *

А. В. Ходимчук[1,2], Д. М. Захаров[1], Е. В. Гордеев[1,2]
[1]*Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН*
[2]*Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина*

Одним из современных направлений в области чистой и ресурсосберегающей энергетики является разработка и усовершенствование электрохимических устройств, таких как твердооксидные топливные элементы на протонпроводящих твердых электролитах (H-SOFC). Перспективным базовым материалом для катодов H-SOFC является феррит бария, проявляющий смешанную кислород-ионную и электронную проводимость. Среди основных характеристик таких материалов, определяющих эффективность их работы в H-SOFC, является скорость межфазного обмена с газовой

* Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-23-00086, https://rscf.ru/project/24-23-00086/ и с использованием оборудования ЦКП «Состав вещества» ИВТЭ УрО РАН.

© Ходимчук А. В., Захаров Д. М., Гордеев Е. В., 2024

фазой. В настоящей работе проведено исследование кинетики взаимодействия кислорода газовой фазы с оксидом $BaFeO_{3-\delta}$.

Исследование проводили методом изотопного обмена кислорода с импульсной подачей изотопно-обогащенной смеси на порошкообразном образце оксида $BaFeO_{3-\delta}$ ($S_{уд.}$ = 0,7 ± 0,06 м^2/г) в диапазоне температур 300–600 °C при pO_2 = 21,3 кПа. Рассчитаны значения скоростей межфазного обмена кислорода (r_H) и индивидуальных стадий: диссоциативной адсорбции (r_a) и инкорпорирования кислорода (r_i), исследовано влияние температуры на них и определены эффективные энергии активации этих процессов.

Обработка экспериментальных данных показала, что механизм обмена кислорода между газовой фазой и оксидом $BaFeO_{3-\delta}$ хорошо описывается в рамках двухступенчатой модели. Двухступенчатый механизм состоит из двух последовательных элементарных стадий: на первой стадии обмена происходит диссоциативная адсорбция кислорода с образованием хемосорбированных адатомов на поверхности оксида; на второй стадии обмена происходит инкорпорирование адатомов кислорода в решетку оксида из адсорбционного слоя. Установлено, что во всем исследованном температурном интервале скоростьопределяющей стадией процесса обмена кислорода является диссоциативная адсорбция кислорода. В настоящей работе обсуждаются соответствующие модели, описывающие кинетику обмена кислорода и возможные механизмы, протекающие в оксиде $BaFeO_{3-\delta}$.