

## Матеріалознавство для паливних комірок

О. Д. Васильєв

Інститут проблем матеріалознавства імені І. М. Францевича НАН України  
Україна, 03142, Київ, вул. Кржижановського, 3  
E-mail: vasilev@ipms.kiev.ua; oleksa.vasylyev@gmail.com

*Наведено безперечні докази потреби у подальшому поглибленню вивчення будови паливних комірок, і керамічних, і полімерних, та їхньої поведінки під час експлуатації. Відповідно, наголошується на потребі оптимізації структури комірок щодо усього комплексу їхніх властивостей, що, в результаті, має привести як до покращення властивостей, так і до їхньої стабілізації протягом тривалого часу використання. Висловлюється сподівання, що оптимізовані за структурою комірки легше і зручніше вдастися запровадити у технології масового виробництва за підходами 3D-друкування.*

**Ключові слова:** паливні комірки, керамічна паливна комірка, комірка на основі протон-обмінної мембрани, електроліт для комірок, електрод для комірок, структурна оптимізація, матеріалознавство паливних комірок.

Паливні комірки... Ці слова, особливо у сполученні з воднем, останнім часом можна побачити і почути чи не найчастіше, коли мова заходить про безпеку країн, про енергетику чи екологію. У цьому разі обізнані згадують і саме паливно-комірчане явище, яке через знанні причини ще є маловідомим в Україні, і пристрой, котрі можуть його здійснювати, і технології, які вже впроваджені у промисловості чи ще тільки задумуються, так і різноманітні пристрой, де використовують енергетичні системи, що виробляють електрику чи то для стимулаторів роботи серця з крові хворого, чи то для літаків та хатніх потреб, тепло та воду і гази для гасіння пожеж (чи й інші речовини), розмаїття яких настільки вже є великим, що легше назвати галузі, де паливні комірки є ще невідомими.

Сама ідея паливних комірок бере свій початок з моменту винаходу явища електролізу води, коли у 1802 році тоді молодий ще британський дослідник Humphrey Davy висловив геніальну ідею, яка дослівно звучить так: якщо під дією електрики вода розкладається на водень і кисень, то, мабуть, в процесі поєднання кисню і водню утворюється і сама електрика.

Пройшло біля 220 років... Першою інновацією вважається те, що у 1842 році здійснив геніальний британець William Grove вслід за думками швейцарця Christian Schönbein (1838). Свій паливно-комірчаний пристрій він назавв gas voltaic battery, який вперше було показано М. Фарадею. В окремих комірках тої газової батареї дві однакові платинові дротини були зануреними у пересичений киснем та воднем розчин сірчаної кислоти. Ці паливно-комірчані системи, які фактично й були першим промисловим використанням не тільки паливних комірок, а й електрики, були застосовані у здійсненні першого Європейсько-Американського телеграфу.

З тих пір і досі вважається, що паливно-комірчаний пристрій то є така собі електрична батарейка з магазину, у якій між двома електродами, зробленими вже з різних матеріалів (бо платина є доволі дорогою

речовиною!), розташовано рідкий електроліт. І вже навіть питання не виникає, звідки ж тут береться електрика. І видається, що потреби у матеріалознавстві також тут начебто й немає.

Перші проблемні матеріалознавчі питання виникли, коли заходилися робити високотемпературні паливні комірки з кераміки, щоб “прямо перетворювати вугілля в електрику” за проектами кінця 19-го століття. Це, як відомо, є окремою темою для розмірковувань, бо кераміка ж вважається ізолятором, яка тут може бути електрика? Ситуація посилилась, коли затягли використовувати електрику для виробництва світла, тобто для освітлення, замість “газових ламп” тощо. Успіхів тут досяг Walter Nernst, який використав так “звану масу Нернста” — кераміку складу 85% (мас.)  $ZrO_2$  + 15% (мас.)  $Y_2O_3$  для виготовлення ниток розжарювання своїх електричних ламп (1897).

Не будемо гадати щодо ще не віднайдених моментів паливно-комірчаної історії, згадки про деякі з яких можна знайти в роботі [1], але вони, очевидно, поклали край думкам, що паливна комірка то є такий пристрій, у якому два електроди просто занурюються у рідкий електроліт, а сама комірка складається з трьох частин — двох електродів та електроліту між ними, контакт між ними є повним. Межа між електродом і електролітом є чимось на кшталт межі між кавою (рідиною) і ложкою у філіжанці.

Керамічна ж паливна комірка (КПК) фактично є суцільним (нерозбірним) пристроєм, межі між електролітом і електродами у якому можуть бути визначеніми лише на атомному (йонному) рівні.

Тут підходимо до думки, що будова паливної комірки має бути оптимізованою структурно. Важливість цього підходу до нашого дослідницького об'єкту посилюється й тим, що паливна комірка є таким цікавим локально високотемпературним пристроєм, у якому органічно мають бути поєднаними усі його властивості: механічні, електричні, електрохімічні тощо, які б забезпечили йому надійну роботу протягом десятків років, надаючи місце для взаємодії газів, паливного і окиснювального, та виводячи електрику і тепло назовні.

Потреба у високій питомій потужності енергії викликає необхідність того, щоб взаємодія газів відбувалася в нутрі комірки, на поверхнях її поруватої структури, яка має забезпечувати притік газів і відтік продуктів їхньої взаємодії: електрики, тепла, речовин, газів чи навіть рідин. Ця проблема, очевидно, посилюється в комірках з полімерним електролітом, які, хоч зазвичай і вважаються низькотемпературними, насправді локально, саме в місцях, де відбувається взаємодія газів, мають витримувати доволі високу, як для полімерів, температуру.

Таким чином, завданням матеріалознавства стосовно паливних комірок є вивчення не тільки таких очевидних речей, як йонна чи електронна провідність електроліту, механічна поведінка усього паливно-комірчаного пристрою з його очевидним завданням мати хоч якусь міцність та тривкість, бо який завгодно пристрій є механічним у першу чергу. А також й вивчення впливу умов навантаження та постачання енергоносіїв до місця їхньої взаємодії у самій комірці на властивості усієї енергогенеруючої системи тощо.

Матеріалознавці досліджують і розробляють чи вдосконалюють матеріали через вивчення їхньої будови (структурі матеріалів, визначеній

на усіх можливих для наявного стану методів рівнях) та її співвідношення з властивостями, що для них є очевидним. Очевидним є й те, що, оскільки властивості матеріалів є залежними від їхньої структури, вплив будови на властивості такого матеріалознавчого об'єкту-пристрою, як паливна комірка, є надзвичайно складним і, отже, має бути оптимізованим з точки зору його структури на усіх можливих її рівнях від макро до нано.

По суті своїй, паливна комірка є шаруватим поруватим композитом, перегороженим плівкою щільного електроліту, товщина якого має бути мінімальною (декілька мікрометрів) з тим, щоб забезпечити мінімальний внутрішній опір джерела електричного струму та унеможливити пряму взаємодію газів. Взаємодія паливного газу з окисником має відбуватися лише у йонному стані у точці стикання трьох фаз анодного електрода: пори, по якій надходить паливний газ; електроліту, по якому надходять йони кисню чи водню, та електронного провідника, по якому електрони виходять з комірки назовні і на поверхні якого молекули палива йонізуються.

Паливні комірки в Україні фактично до часу її усамостійнення у 1991 році були невідомими. Дослідження з розроблення і вивчення керамічних комірок розпочалися ініціативно у 2001 році. З тих пір фахівці створеної у 2015 році Лабораторії керамічних паливних комірок ПМ у співпраці з колегами інших дослідних установ України та світу за порівняно короткий термін досягли значних результатів. Вони фактично першими у світі й висловили ідею структурної оптимізації комірок, де вже зазнали очевидних успіхів у її здійсненні [1].

Україна вже пройшла свій шлях “Від порошку до електричної потужності” [2]. Комплексні дослідження структури та властивостей електроліту з двоокису цирконію, легованого скандієм та ітрієм, анодних композитів  $\text{NiO}-\text{ZrO}_2$  та  $\text{Ni}-\text{ZrO}_2$  залежно від властивостей вихідних порошків  $\text{ZrO}_2$ , вмісту  $\text{NiO}$  та умов виготовлення з них анодних електродів керамічної паливної комірки вперше надали нам низку матеріалознавчих властивостей, на яких тезово і зупинимось.

### *Електроліти керамічних паливних комірок*

Електроліт є здатним проводити, а скоріше, пропускати через себе іони, електрично заряджені частинки, тобто значну масу речовини, без чого паливно-комірчане явище було б зовсім неможливим. На прикладі декількох матеріалів на основі двоокису цирконію, які застосовуються як тверді електроліти в керамічних паливних комірках, порівняно і проаналізовано закономірності утворення структури та її впливу на механічні характеристики з урахуванням властивостей порошків, з яких електроліт виготовляється, зокрема особливостей їхньої геометричної будови, складу та розподілу неосновних домішок тощо [3].

Розроблено математичну модель, яка дозволила видокремити в ній впливи поруватості, розмірів зерен та стану меж поділу, зернових та субзернових, на механічні властивості і сформулювати узагальнену аналітичну залежність міцності від цих параметрів. Запропоновано кількісний показник  $k_s$ , який описує стан меж ефективних складових структури, щоє на кшталт ефективної поверхневої енергії, та одержано його залежність від температури спікання для кераміки на основі двоокису цирконію.

В кераміці  $1\text{Ce}10\text{ScSZ}$  (двоокис цирконію, кубічна структура якого стабілізована домішками скандію та церію хімічної чистоти і виготовленого різними методами) визначено існування меж субзеренного та зеренного типів, які змінюють одна одну в інтервалі температур спікання  $1350—1450$  °C. В кераміці  $1\text{Ce}10\text{ScSZ}$  технічної чистоти, порошки якої містять соті долі молярних відсотків кремнію і титану або кремнію і алюмінію, подібних переходів не виявлено.

Температурна залежність киснево-йонної провідності кераміки  $1\text{Ce}10\text{ScSZ}$ , як і інших матеріалів на основі двоокису цирконію, в інтервалі  $400—900$  °C має низько- та високотемпературні інтервали і може бути описана двома рівняннями Арреніуса. Встановлено, що для хімічно чистої  $1\text{Ce}10\text{ScSZ}$  температура переходу та енергії активації провідності обох інтервалів не залежить від внутрішньої будови, яка змінюється зростом температури спікання. Для технічно чистих сполук на основі двоокису цирконію  $1\text{Ce}10\text{ScSZ}$  переход відбувається за більш високих температур, у цьому випадку енергія активації провідності залишається фактично незмінною в низькотемпературному інтервалі і має немонотонну спадну залежність від температури спікання для високотемпературного інтервалу.

Встановлено, що вплив ефективного розміру зерна на нормовану поруватістю йонну провідність відсутній в інтервалі  $400—900$  °C для хімічно чистої кераміки  $1\text{Ce}10\text{ScSZ}$  та обернено пропорційний в низькотемпературному та зовсім відсутній у високотемпературному інтервалі температур спікання для технічно чистих керамік  $1\text{Ce}10\text{ScSZ}$ .

З аналізу зміни поруватості та розміру зерен від температури спікання запропоновано метод визначення температури спікання, за якої відбувається переход до фінальної стадії спікання. Він базується на термодинамічних уявленнях, відповідно до яких критичній температурі спікання  $T_{\text{сп}}$  відповідає точка перетину прямих в координатах Арреніуса  $\ln x - 1/T_{\text{сп}}$ . Кут нахилу цих прямих визначає відповідні уявні енергії активації.

#### *Аноди керамічних паливних комірок*

Порошок  $10\text{Sc}1\text{CeSZ}$ , “м’який” агломерати якого складаються з рівновісних нанорозмірних частинок, є найкращим серед розглянутих для виготовлення анода КПК. Саме цей тип порошку забезпечує формування поруватої (не менше 30%) рівномірної структури анодного композита з міцністю не нижче 100 МПа, яка визначена практикою за тривалого функціонування анода.

За особливостями формування структури і міцності  $\text{ZrO}_2$ -кераміки і  $\text{NiO}—\text{ZrO}_2$ -композитів залежно від температури їхнього спікання можна визначити інтервал температур спікання  $1350—1400$  °C як перехідний через ієрархічність процесів ущільнення під час спікання [4].

На прикладі анодних композитів  $10\text{Sc}1\text{CeSZ}$ —(36, 62, 72% (об.))  $\text{NiO}$  вперше показано, як додавання порошку  $\text{NiO}$  до порошку  $\text{ZrO}_2$  змінює процес формування поруватості та міцності кераміки. Вплив порошку  $\text{NiO}$  на утворення композита з  $\text{ZrO}_2$  є суперечливим; він залежить як від кількості самого  $\text{NiO}$ , так і від температури спікання композита; поширені в паливно-комірчаний практиці аноди з вмістом  $\text{NiO}$  62% (об.) мають недостатню міцність через порушену зв’язність каркасу  $\text{ZrO}_2$  прошарками  $\text{NiO}$ ; в анодах з вмістом  $\text{NiO}$  72% (об.) формування структури здебільшого зумовлено спіканням частинок  $\text{NiO}$ .

Щодо каталітичної активності анодів із різним вмістом NiO встановлено, що за температур 600 °C і нижче серед досліджених складів аноди з мінімальною кількістю NiO (36% (об.)) маютьвищу каталітичну активність за парової конверсії метану, ніж аноди з більшою кількістю катализатора — 62 і 72% (об.). Цей результат безперечно свідчить про те, що на каталітичну активність анода впливає не стільки кількість катализатора, скільки його рівномірний розподіл по об'єму анода. За температур, вищих 700 °C, різниця в каталітичній активності між анодами з різним вмістом катализатора є практично не суттєвою. Це вказує на те, що висока температура є основним чинником конверсії метану.

Циклювання “відновлення-окиснення” анода покращує зв'язність нікелевої фази у структурі анодного електрода, що одночасно збільшує як електропровідність, так і міцність. Це може розглядатися як спосіб покращення властивостей готового анода на заключній стадії його формування вже у складі паливної комірки.

Як крок до подальшого вдосконалення анодного електрода через його структурну оптимізацію застосовано каркасну концепцію, за якої міцний поруватий каркас з ZrO<sub>2</sub> насичується розплавом солі нітрату нікелю з подальшим його відновленням до Ni. Це забезпечує анодові після відновлення у ньому Ni міцність на рівні 130 МПа і оптимальний розподіл трьох фаз: ZrO<sub>2</sub>, Ni і пор, що покращує електрохімічну стабільність анода та його механічну поведінку.

### ***Електроди паливних комірок з полімерним електролітом***

Розроблено метод оцінювання ефективності паливної комірки та електролізера з полімерним електролітом за даними йонної мас-спектрометрії продуктів реакцій і одночасної реєстрації електрохімічних властивостей, що дозволило визначити структурні аспекти оптимізації та формування електродів паливної комірки та електролізера [5, 6].

Систематизовано та оптимізовано використання платинових матеріалів з високою каталітичною активністю для водневої протон-проводінної паливної комірки високої ефективності до 1,1 Вт·см<sup>-2</sup>. Вміст платини становить 1—50 мкг·см<sup>-2</sup> замість 400—2000 мкг·см<sup>-2</sup>, що зазвичай використовується у промисловості. Встановлено, що високі стабільність та ефективність застосування платини як катализатора забезпечується за допомогою CeO<sub>x</sub> та CN<sub>x</sub>, введених у розроблені анодні електроди.

За результатами структурних досліджень катодного електрода комірки розроблено високоефективний поруватий матеріал високої каталітичної активності на основі Pt та C, якому характерним є низький вміст платини. Цей композит має вищий потенціал до корозії (до 2,5 В) у порівнянні з відомими та найвищий коефіцієнт масової активності 1967 мА·мг<sub>Pt</sub><sup>-1</sup>, що підтверджено за реальних умов роботи паливної комірки та її довготривалих тестів. Оптимізовано методи утворення каталітичного шару електродів паливної комірки для промислового нанесення.

За мас-спектрометричними дослідженнями корозії анодного та катодного електродів паливної комірки визначено стійкість матеріалу Pt-CN<sub>x</sub> до потенціалу комірки 1,7 В. Встановлено, що аморфний вуглець у структурі анодного електрода паливної комірки є схильним до корозії навіть у робочому діапазоні напруг паливної комірки 0,5—1,0 В.

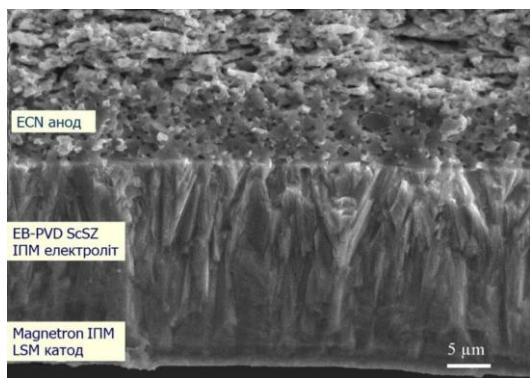


Рис. 1. Вигляд поверхні руйнування керамічної паливної комірки з осадженими на поруватий анод 8YSZ у електронно-променевий спосіб електролітом 10ScCeSZ та у магнетронний — LSM катодом у скануючому електронному мікроскопі Superprobe-733.

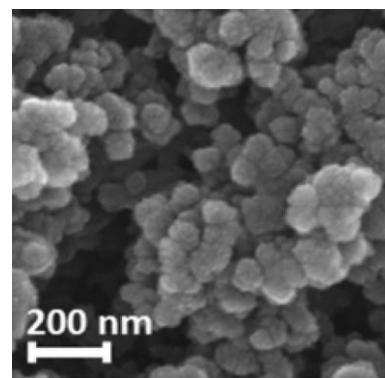


Рис. 2. Вигляд перерізу шару композита Pt—C, осадженого магнетроном на шар вуглецю з тефлоном, у скануючому електронному мікроскопі Mira3Tescan.

Розроблено структуру каталітичного шару з низьким вмістом Ir для високоефективного протон-провідного електролізера за допомогою додаткового шару з TiC. Визначено неефективність використання каталітичного матеріалу у примембраний області, що може бути використано для розроблення каталітичного шару анодних електродів для зменшення кількості коштовного іридію в технологіях створення електролізерів протон-провідного типу з полімерним електролітом.

Як бачимо, застосування фізичних методів формування шарів структури комірок, електронно-променевих та магнетронних, дозволяє суттєво покращити щільність електроліту та зв'язок його зі складовими електродів, що, безперечно, лише позитивно впливає на електрохімічні та механічні властивості всього енергетичного пристрою (рис. 1, 2).

### **Випробування оптимізованої керамічної паливної комірки [2]**

Оптимізовані комірки, виготовлені методом стрічкового ліття, який широко застосовується у вже існуючій світовій паливно-комірчаній промисловості, дають вражаючі результати навіть з використанням традиційного електроліту 8YSZ ( $ZrO_2$ —8% (мол.)  $Y_2O_3$ , сучасна маса Нернста), про що свідчать дані порівняльних випробувань (рис. 3, 4).



Рис. 3. Вольт-амперні характеристики керамічних комірок, виготовленої в Лабораторії КПК (1) та комерційної (2).

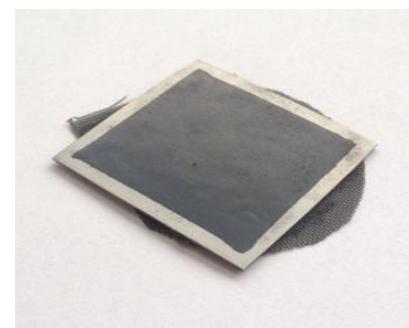


Рис. 4. Загальний вигляд комірки, виготовленої в Лабораторії КПК ПМ методом стрічкового ліття.

Виготовлену в ПМ та аналогічну їй комерційну комірку складу анод — 8YSZ—NiO, електроліт — 8YSZ, катод — 8YSZ—LSM було випробувано за допомогою стенду для вимірювання електричних властивостей паливних комірок “Scribner Teledyne” (США) за умов: температура — 800 °C, на анод і катод подавали паливну суміш 5% (об.) H<sub>2</sub>—95% (об.) Ar та кімнатне повітря зі швидкістю 90 мл/хв відповідно. Дані щодо вольт-амперних властивостей комірок та їхній загальний вигляд наведено на рис. 3, 4.

Очевидно, що комірка, розроблена в ПМ, має у 1,5 разивищі властивості, ніж комерційна. Так, за однакових умов випробування модельним паливом максимальна потужність нашої комірки становила 4,2 мВт/см<sup>2</sup>, комерційної — 2,8 мВт/см<sup>2</sup>.

Наведені дані, таким чином, неупереджено свідчать, що структурна оптимізація комірок, яка стосується усіх їхніх складових, як керамічних, так і комірок з полімерним електролітом, є безперечно необхідним заходом щодо вдосконалення як електрохімічних властивостей комірок, так й кількості коштовних складових в ній, що у кінцевому підсумку позитивно має відбиватися на вартості усіх енергетичних систем. Оптимізація структури також позитивно вплине і на виготовлення комірок методами 3D-друку, які вже нестримно розвиваються за прикладом великих інтегральних схем в електроніці тощо.

На завершення, автор відзначає, що перелічені матеріалознавчі результати за сучасних умов в Україні були б неможливими без співпраці з науковими колективами України, США, Європи та фінансової підтримки НАТО і Європейських програм. Особливо з приємністю і вдячністю відзначаємо плідну співпрацю з нашими українськими колегами Prof. V. Vereshchak, Prof. O. Ostash, Dr. O. Koval, Dr. A. Kotko, Dr. M. Beha, Dr. B. Vasyliv, Dr. A. Ivasyshyn, Dr. V. Podhurska, Dr. D. Brodnikovsky, інж. А. Samelyuk, інж. М. Holovkova, інж. В. Чедрик та іноземними: Prof. J. Irvine, Prof. A. Smirnova, Prof. R. Steinberger-Wilckens, Prof. J. Kilner, Dr. C. Savaniyu, Dr. M. Andrzejchuk, Dr. J. Grzhonka, Prof. K. Kurzynowski, Eng. B. Rietveld, Prof. V. Matolin, Dr. V. Johanek, Dr. M. Dubau, Dr. P. Kush, Dr. P. Kush, Dr. I. Kalakhan, Dr. J. Novakova, Dr. B. Smid та Dr. Hany El-Sayed за їхню ентузіастичну діяльність зі здобуття нового знання щодо паливно-комірчаних матеріалів.

Автор вважає за потрібне щиро подякувати колективові Лабораторії керамічних паливних комірок ПМ НАН України, перш за все, її керівників С. М. Бродніковському та співробітникам І. О. Полішко, Д. М. Бродніковському, Н. О. Лисуненко, А. С. Островерх, Є. М. Островерх та М. Є. Головковій за активну і плідну діяльність.

За фінансову підтримку також щиро вдячні Національній Академії наук України: проєкти “Структурні основи матеріалів для цирконієво-керамічних паливних комірок”, “Структурно-оптимізовані електроди керамічної паливної комірки” тощо; проєкт Національного Фонду Досліджень України, проєкт 2020.02/0301 “Розроблення нових функціональних матеріалів для потреб водневої енергетики”; НАТО — проєкт №. 980878 “Solid Oxide Fuel Cells for Energy Security” програми “Science for Peace”; Європейські FP6, проєкти №. SES6-2006-020089 “Demonstration of SOFC stack technology for operation at 600 °C (SOFC600)”; FP7, Project №. 608906, “Deploymen of Societally Beneficial Nano- and Material Technologies in

European Partnership Countries" (NANOMAT-EPC); та програми обміну студентів "RealSOFC"; INTAS — "Structure Optimization of SOFC Based on Scandia Doped Zirconia Ceramics for Space Application". Також широко вдячні Карловому університетові (Charles University) та Технічному Університетові Мюнхена за їхню допомогу у розвиткові полімерних паливних комірок тощо.

### Цитована література

1. Vasylyev O., Brychevskyi M., Brodnikovskyi Ye. The structural optimization of ceramic fuel cells. *Universal J. Chem.* 2016. Vol. 4 (2). P. 31—54. doi: 10.13189/ujc.2016.040201.
2. Vasylyev O.D., Brodnikovskyi Y.M., Brychevskyi M.M., Polishko I.O., Ivanchenko S.E., Vereshchak V.G. From Powder to Power: Ukrainian Way. SF J. Mater. Chem. Eng. 2018. Vol. 1 (1). 1001 p.
3. Бричевський М.М. Утворення структури, механічна поведінка і киснево-йонна провідність кераміки на основі двоокису цирконію: автореф. дис. ... канд. фіз.-мат. наук: 01.04.07 — фізика твердого тіла. Київ: Ін-т пробл. матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України, 2018. 22 с.
4. Бродниковський Є.М. Закономірності формування структури, механічних та електрохімічних властивостей анода Ni—ZrO<sub>2</sub> керамічної паливної комірки: автореф. дис. канд. техн. наук: 05.02.01 — матеріалознавство. Київ: Ін-т пробл. матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України, 2012. 20 с.
5. Островерх А.С. Науково-технологічні засади створення шаруватих композитів для паливної та електролізної комірок з полімерним електролітом та зниженим вмістом благородних металів: автореф. дис. ... д-ра техн. наук: 05.02.01 — матеріалознавство. Київ: Ін-т пробл. матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України, 2021. 44 с.
6. Ostroverkh A., Johanek V., Dubau M., Kus P., Veltruska K., Vaclavu M., Fiala R., Smid B., Ostroverkh Y., Matolin V. Novel fuel Cell MEA based on Pt—C deposited by magnetron sputtering. *ECS Transactions.* 2017. Vol. 80 (8). P. 225—230.

### References

1. Vasylyev, O., Brychevskyi, M., Brodnikovskyi, Ye. (2016). The structural optimization of ceramic fuel cells. *Universal J. Chem.*, Vol. 4 (2), pp. 31—54. <https://doi.org/10.13189/ujc.2016.040201>
2. Vasylyev, O. D., Brodnikovskyi, Y. M., Brychevskyi, M. M., Polishko, I. O., Ivanchenko, S. E., Vereshchak, V. G. (2018). From Powder to Power: Ukrainian Way. SF J. Mater. Chem. Eng., Vol. 1 (1), 1001 p.
3. Brychevskyi, M. M. (2018). Structure formation, mechanical behavior and oxygen-ionic conductivity of zirconia based ceramics. Manuscript. Thesis of physics and mathematics PhD degree of solid state physics specialty: 01.04.07. I. M. Frantsevich Institute for Problems of Materials Science of National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv [in Ukrainian].
4. Brodnikovskyi, Ye. M. (2012). The regularities of structure formation, mechanical behavior and electrochemical properties of Ni—ZrO<sub>2</sub> anode for solid oxide fuel cell. Manuscript. Thesis for a candidate degree in technical sciences by specialty: 05.02.01 — Materials science. I. M. Frantsevich Institute for Problems of Materials Science of National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv [in Ukrainian].
5. Ostroverkh, A. S. (2021). Scientific and technological bases for the creation of multilayer composites for fuel and electrolysis cells with polymer electrolyte and low content of noble metals. On the rights of the manuscript. The Doctor degree in Technical Science thesis on specialty: 05.02.01 — Materials science. I. M. Fran-

- tsevich Institye for Problems of Materials Science of National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv [in Ukrainian].
6. Ostroverkh, A., Johanek, V., Dubau, M., Kus, P., Veltruska, K., Vaclavu, M., Fiala, R., Smid, B., Ostroverkh, Y., Matolin, V. (2017). Novel fuel cell MEA based on Pt-C deposited by magnetron sputtering. ECS Transactions, Vol. 80 (8), pp. 225—230. <https://doi.org/10.1149/08008.0225ecst>

## Materials science for fuel cells

O. D. Vasylyev

I.M. Frantsevich Institute for Problems of Materials Science of the NAS of Ukraine, Kyiv

E-mail: vasilev@ipms.kiev.ua; oleksa.vasylyev@gmail.com

*The words on fuel cells, especially joined with hydrogen, take more and more rooms in discussions on security, energy and ecology. The paper addresses questions concerning the structural optimization of electrolytes and electrodes applying both zirconia and proton exchange membrane. The final, optimized, chemical composition and structure of entire fuel cells would be tuned by considering the structural altering occurring during both production and long-term operation. The paper evidences undeniably that the structure of fuel cells, ceramic and polymeric ones, direct and reversible, require a deep detailed comparative study in states after both production and different time of operation. Respectively, a structural optimization of fuel cells to be related to all the complex of their properties that finally has to result in an improvement both properties themselves and their stabilization for a long term of usage is required. It is clear that up-to-date fuel cells cannot be considered more as some just chemical devices producing electricity. They have to be so intricately designed that each their atom is attached to each of its neighbors in such an optimal way in order to ensure the properties of whole the fuel cell as a device, which produces useful energy in the best possible manner during rather long period of time. It means that from materials science point of view the structure of fuel cell must be optimized to meet a wide spectrum of requirements to cell as high temperature electrochemical device of a long-term of operation. Now, materials science concerning fuel cells is a study not only such the obvious topics as ionic or electronic conductivities, structure of dense electrolyte and both three phase porous electrodes, mechanical behavior of entire fuel cell device etc. The study of an influence of loading and gases delivery to their interaction sites on properties of entire energy system is obvious also. In general, the fuel cell technologies are rather mature already and they might be put into commercial production. Nevertheless, the opportunities for development are endless. 3D printing is imminent.*

**Keywords:** fuel cell, ceramic fuel cell, fuel cell based on proton exchange membrane, fuel cell electrolyte, fuel cell electrode, structural optimization, materials science for fuel cells.