

STRESZCZENIE

1. Cel prowadzonych badań/hipoteza badawcza

Celem proponowanego projektu badawczego jest określenie wpływu właściwości mikrostrukturalnych i porowatości elektrod oraz elektrolitu ceramicznych przewodników jonowych na przebieg procesu elektrolizy. Pozwoli to na zrozumienie mechanizmów limitujących reakcję elektrochemiczną oraz wyznaczenie kluczowych parametrów, których modyfikacja umożliwi ograniczenie negatywnego wpływu procesów degradacyjnych na przebieg elektrolizy realizowanej w wysokiej temperaturze w stałotlenkowych ogniwach elektrochemicznych (ang. *SOEC – solid oxide electrolysis cells*).

Znaczenie wpływu porowatości, krętości kanałów porowych, rezystancji elektronowej i jonowej na pracę ogniwa elektrochemicznego zostały poznane podczas pracy w trybie ogniwa paliwowego (ang. *SOFC – solid oxide fuel cell*). Wpływ tych parametrów na przebieg elektrolizy pary wodnej w regeneracyjnym trybie pracy (SOEC) pozostaje w znacznym stopniu niepoznany.

Główna hipoteza badawcza zakłada możliwość stworzenia w pełni fizyczno-chemicznego modelu opartego na danych eksperymentalnych oraz wiedzy teoretycznej z zakresu elektrochemii, termodynamiki, transportu masy i energii oraz inżynierii materiałowej. Model ten pozwoli na uogólnienie opisu procesów elektrolizy realizowanej z zastosowaniem ceramicznych przewodników jonowych. **Dodatkowa hipoteza badawcza** zakłada, że mikrostruktura oraz porowatość elektrod ceramicznych przewodników jonowych ma wpływ na kształtowanie przebiegu reakcji elektrochemicznej. Optymalizacja parametrów mikrostruktury umożliwi intensyfikowanie reakcji elektrochemicznej oraz możliwe jest określenie korelacji obu parametrów za pomocą zaawansowanego modelu numerycznego. Próba potwierdzenia obu hipotez badawczych zostanie podjęta z wykorzystaniem sprzężonych eksperymentalnych i numerycznych metod badawczych, uzupełnionych analizą statystyczną i interpretacją wyników. Pozwoli to na opracowanie metod minimalizacji wpływu negatywnych czynników na przebieg elektrolizy, a w efekcie poznania mechanizmów oddziaływania parametrów na badany proces. W ramach projektu wykonane zostaną trzy serie ogniw SOEC o modyfikowanych parametrach mikrostrukturalnych (modyfikacje elektrod i elektrolitów).

2. Zastosowana metoda badawcza/metodyka

Proponowany projekt łączy w sobie zastosowanie numerycznych i eksperymentalnych technik badawczych. Część obliczeniowa projektu wykorzystuje sprzężone metody modelowania matematycznego i symulacji komputerowej z użyciem własnych kodów obliczeniowych, komercyjnych algorytmów bilansowych (np. Aspen HYSYS) oraz metod obliczeniowej mechaniki płynów (np. ANSYS Fluent). Integracja modeli o parametrach skupionych z ciepło-przepływowymi modelami 1D-3D pozwoli na uwzględnienie kluczowych procesów zachodzących podczas reakcji chemicznych, elektrochemicznych, wymiany masy i energii oraz wpływu bilansu cieplnego na parametry materiałowe i architekturę ceramicznych przewodników jonowych. Część eksperymentalna projektu obejmuje zastosowanie szeregu metod, w tym: SEM-EDS – skaningowej mikroskopii elektronowej z detektorem energodispersyjnym; TEM – transmisyjnej mikroskopii elektronowej; XRD – badań rentgenowskich opartych o dyfrakcje monochromatycznego promieniowania rentgenowskiego penetrującego badaną próbkę; TG - analizy termogravimetrycznej, z której zastosowaniem rejestrowane będą zmiany masy badanej próbki w różnych reżimach temperaturowych; EIS - spektroskopii impedancyjnej, która jest szeroko stosowaną metodą charakteryzacji przewodników jonowych. Analizy mikrostrukturalne pozwolą ocenić zakres degradacji próbek, podczas pracy w trybie elektrolizy w warunkach wysokich obciążeń prądowych w zakresie poniżej $-0,5 \text{ A/cm}^2$. Wykonane zostaną modyfikowane ogniwa SOEC, których struktura będzie wynikała z przeprowadzonych obliczeń numerycznych. Dane eksperymentalne będą kluczowe do walidacji i strojenia modeli numerycznych.

3. Wpływ spodziewanych rezultatów na rozwój nauki, cywilizacji, społeczeństwa

Przewodniki jonowe oparte na materiałach ceramicznych stosowane są w nowatorskich układach energetycznych wykorzystujących stałotlenkowe ogniwa paliwowe. W ostatnich latach udowodniono, że istnieje możliwość zmiany polaryzacji ogniwa i wykorzystanie go do wytwarzania wodoru. Z punktu widzenia globalnych problemów energetycznych, poszukiwane są nowe rozwiązania umożliwiające magazynowanie energii. W przyszłości, elektrolizery oparte na odwracalnych ogniwach paliwowych zbudowanych z ceramicznych przewodników jonowych mogą stanowić wiodącą technologię z tego obszaru. Ich rozwój wymaga jednak zrozumienia korelacji pomiędzy właściwościami materiałów na poziomie mikrostruktury a uzyskiwanym strumieniem czystego wodoru i charakterystyką pracy. Wartość poznawcza projektu obejmuje określenie optymalnych właściwości mikrostrukturalnych wymaganych do przeprowadzenia procesu elektrolizy, które różnią się od pożądaných parametrów dla potrzeb wytwarzania energii elektrycznej (w trybie ogniwa paliwowego).

Efektami projektu będą publikacje w czasopiśmie z wysokim współczynnikiem impact factor, w tym: International Journal of Hydrogen Energy, Journal of Power Sources, Journal of Energy Research and Technology oraz Energy.