

Modelowanie mikrostrukturalnych uwarunkowań procesów zachodzących w porowatych elektrodach węglanowego ogniwa paliwowego

W XXI wieku społeczeństwo ludzkie staje się coraz bardziej świadome swojego wpływu na środowisko naturalne. Jednym z aspektów rosnącej populacji jest zanieczyszczenie, które musi być znacząco zredukowane. Szczególnie zanieczyszczenie powietrza spowodowane przez przemysł, środki transportu i energetykę. Stąd też rozwój nowych, przyjaznych dla środowiska źródeł energii jest niezwykle ważne. Można to osiągnąć na dwa sposoby: poprzez zastosowanie odnawialnych źródeł energii lub przez wykorzystanie aktualnych, takich jak węgiel czy ropa, w sposób bez emisyjny. Jednym z potencjalnych rozwiązań drugiego podejścia są ogniwa paliwowe, będące elektrochemicznymi urządzeniami do wytwarzania prądu poprzez konwersję chemiczną paliwa (np. wodoru, węglowodorów) do wody. Dzięki temu możliwe jest osiągnięcie praktycznie zerowego poziomu emisji gazów cieplarnianych. Dodatkowo stopień konwersji energii w zależności od typu ogniwa paliwowego mieści się w zakresie 40 - 60% i jest znacznie wyższy niż w przypadku konwencjonalnych źródeł energii.

Węglanowe ogniwa paliwowe (ang. Molten Carbonate Fuel Cell - MCFC) i stałotlenkowe ogniwa paliwowe (ang. Solid Oxide Fuel Cell - SOFC) należą do grupy wysokotemperaturowych ogniw paliwowych pracujących w temperaturach powyżej 600°C. Tak wysoka temperatura pracy umożliwia termiczny rozkład węglowodorów i w konsekwencji wewnętrzną konwersję paliwa. Stąd też ogniwa wysokotemperaturowe mogą być zasilane paliwem innym niż czysty wodór, np. węglowodory (metan, biomasa, alkohole) czy też zgazowany węgiel mogą być wykorzystane. Wysoka temperatura pracy jest też istotna kiedy ogniwo paliwowe będzie wykorzystywane nie tylko jako źródło elektryczności, ale także jako źródło energii cieplnej do ogrzewania mieszkań czy też do kogeneracji. Kogeneracja umożliwia podnieść sprawność układu z ogniwami paliwowymi nawet do 90%. Obie technologie są na etapie wdrożeniowym, jednakże ich sprawność operacyjna jest niższa niż przewidywania teoretyczne. Jest to spowodowane głównie przez problemy materiałowe, które nie zostały rozwiązane przez ostatnich 20 lat. W tym czasie przeprowadzono wiele badań bazujących raczej na metodzie prób i błędów, niż rzeczywistym zrozumieniu procesów zachodzących w ogniwie.

W ostatnim czasie wykazano, że zaprojektowanie struktury porowatej elektrod (porowatość, przestrzenny rozkład wielkości porów) bez ingerencji w skład chemiczny, pozwala uzyskać nawet dwukrotnie wyższą sprawność ogniwa węglanowego (MCFC). Jednym z możliwych wyjaśnień są wzajemnie przenikające się ścieżki transportu jonów i gazowych reagentów. Stąd też wyjaśnienie zjawisk występujących w trakcie pracy ogniw wysokotemperaturowych, a także wpływu mikrostruktury na te zjawiska jest niezwykle istotne, aby w pełni uwolnić potencjał drzemący w tej technologii.

Celem naukowym powyższej pracy doktorskiej jest określenie wpływu mikrostruktury na procesy zachodzące w trakcie pracy ogniwa węglanowego w porowatych elektrodach. Główną hipotezą projektu jest to, że mikrostruktura materiałów elektrod znacząco wpływa na procesy transportu masy i koncentracje obszarów reakcji. Parametry struktury porowatej, takie jak porowatość czy też średnia wielkość porów, mogą znacząco wpływać na przepuszczalność materiału. Stąd też mogą one bezpośrednio wpłynąć na proces dostarczania składników do strefy reakcji na linii styku trzech faz, a także na samą długość tych linii. Zrozumienie zjawisk zachodzących w trakcie pracy ogniw wysokotemperaturowych, pozwoli na rozszerzenie istniejącej wiedzy oraz opracowanie nowych, bardziej wydajnych materiałów elektrod.

Badania niezbędne do realizacji tak zdefiniowanego celu będą obejmować jednoczesne wykorzystanie metod wytwarzania, charakteryzacji oraz zaawansowanego modelowania. W trakcie badań elektrody ogniw MCFC wytwarzane będą metodą odlewania z gęstwy (ang. Tape Casting) i późniejszego procesu wyżarzania. Charakteryzacja wytworzonych materiałów zostanie przeprowadzona przy użyciu mikroskopii elektronowej oraz mikrotomografii komputerowej. Wykonana zostanie ilościowa analiza obrazu otrzymanych struktur 3D z danych tomograficznych, a otrzymane wyniki posłużą jako wytyczne do opracowania reprezentatywnych modeli mikrostruktury materiału. Następnie modele zarówno wytworzonych materiałów, jak i zupełnie nowych wariantów strukturalnych (pod względem np. porowatości, średniej wielkości porów, krętości kanałów porowych) posłużą do symulacji przepływów gazowych oraz podciągania kapilarnego metodą objętości skończonych. Wyniki symulacji numerycznych weryfikowane będą poprzez testy porównawcze wydajności ogniwa MCFC. Dodatkowo, w ramach stażu w Instytucie technologii i systemów ceramicznych im. Fraunhofera planowane jest przeprowadzenie obrazowania materiałów katod po pracy, aby porównać rozkład przestrzenny zastygniętego elektrolitu z wynikami symulacji podciągania kapilarnego.