

Ograniczenie strat elektrochemicznych w ogniwach paliwowych typu SOFC poprzez optymalizację polidispersyjności mikrostruktury za pomocą algorytmu PSO

Ogniwa paliwowe z elektrolitem stałotlenkowym (SOFC) to urządzenia konwertujące energię chemiczną paliw na energię elektryczną. Pomimo wysokiej sprawności i niewielkiego wpływu na środowisko, szerokie zastosowanie SOFC jest ograniczone przez wyzwania związane z ich wytwarzaniem i długotrwałym działaniem. Niniejszy projekt koncentruje się na poprawie efektywności SOFC poprzez optymalizację mikroskopijnej struktury ich elektrod przy użyciu zaawansowanych metod obliczeniowych i eksperymentalnych, ze szczególnym uwzględnieniem materiałów hierarchicznych.

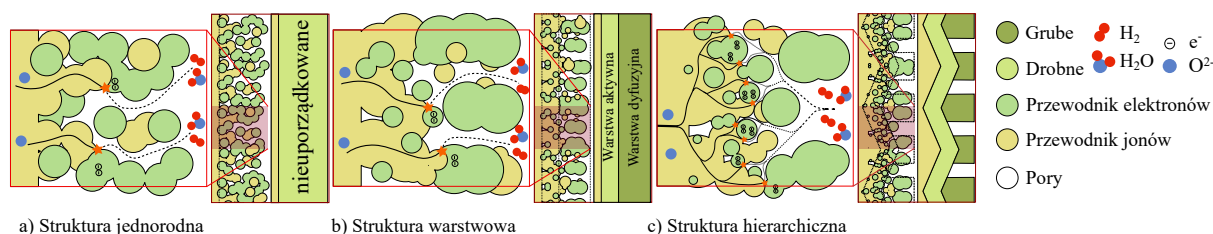
Problem: Elektrody SOFC są zbudowane ze złożonych, wielofazowych materiałów, w których każda faza ma specyficzną funkcję - przewodnik jonów, przewodnik elektronów, pory umożliwiające dyfuzję gazów do miejsc reakcji. Właściwości spieku, takie jak wielkość, kształt i rozkład cząstek, mają wpływ na te funkcje. Standardowe techniki produkcji często opierają się o jednorodne mikrostruktury, które mogą nie wykorzystywać w pełni potencjału materiału.

Materiały hierarchiczne, charakteryzujące się różnymi cechami strukturalnymi na różnych skalach. W tym kontekście celowa niejednorodność może pomóc jednocześnie spełnić wymagania dotyczące dyfuzji gazów, przewodnictwa i gęstości miejsc reakcji. Wprowadzając zróżnicowane wielkości cząstek (polidispersyjność) oraz strategiczną organizację strukturalną, można zwiększyć zarówno wydajność, jak i długoterminową odporność. Elektrody hierarchiczne (patrz Rysunek 1) naśladują systemy naturalne, takie jak tkanki czy koryta rzek, w których struktura i funkcje są różne na różnych skalach, co zmniejsza opory przepływu.

Celem badawczym projektu jest określenie, w jaki sposób polidispersyjność —zróżnicowanie wielkości cząstek— wpływa na wydajność hierarchicznych elektrod SOFC. Główna hipoteza zakłada, że wprowadzenie cech hierarchicznych poprzez zwiększoną polidispersyjność może zmniejszyć straty energii w porównaniu z mniej zróżnicowanymi mikrostrukturami. **Metodologia** obejmuje:

- **Symulację i modelowanie:** Model pola fazowego przewidzi procesy zachodzące w trakcie wytwarzania ogniwa. Następnie *trójwymiarowy model transportowy* zasymuluje, jak jony, elektrony i gazy płyną przez elektrodę, wiążąc cechy mikrostruktury z jej właściwościami elektrochemicznymi.
- **Optymalizację:** Optymalizacja rojem cząstek (PSO), metoda obliczeniowa inspirowana zachowaniami naturalnymi, zostanie zastosowana do identyfikacji optymalnych rozkładów wielkości cząstek w celu maksymalizacji efektywności. Ponadto zaawansowane narzędzia statystyczne, takie jak *Gaussian Mixture Modeling* oraz *Kernel Density Estimation*, pozwolą na ilościowe określenie polidispersyjności i ocenę jej wpływu.
- **Walidację eksperymentalną:** Komórki z hierarchicznymi rozkładami cząstek zostaną wykonane i poddane elektrochemicznym testom. Techniki obrazowania materiałów - *FIB-SEM* oraz *PFIB-SEM* - dostarczą szczegółowych wizualizacji mikrostruktury.

Potencjalne efekty projektu wykraczają poza ogniwa SOFC—struktury hierarchiczne mogą być stosowane w bateriach, elektrolizerach i innych technologiach. **Badania przyczynią się do transformacji w kierunku zrównoważonych i wydajnych systemów energetycznych.**



Rysunek 1: Hierarchiczność w elektrodach ogniw SOFC