

Εικονικά Μοντέλα για την Αριθμητική Προσομοίωση Νανοδομημένων Ηλεκτροαγωγίμων Μεμβρανών και Πειραματικός Χαρακτηρισμός τους για Παραγωγή Υδρογόνου από Διάσπαση Νερού σε Χαμηλές Θερμοκρασίες

Καστρινάκη Γεωργία¹, Δάσκαλος Εμμανουήλ¹, Παγγούρα Χρυσούλα¹, Βλάχος Νικόλαος Δ.¹, Σκευής Γεώργιος¹, Κωνσταντόπουλος Αθανάσιος Γ.^{1,2}, Βαρδαβούλιας Μιχάλης³, Jaén, Maria⁴, Saracco, Guido⁵

¹Εργαστήριο Τεχνολογίας Σωματιδίων και Αερολυμάτων, ΙΔΕΠ/ΕΚΕΤΑ, 6^ο χλμ. Χαριλάου-Θέρμης, Τ.Θ. 60361, 57001 Θέρμη, Θεσσαλονίκη

²Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τ.Θ. 1517, 54006, Θεσσαλονίκη

³Πυρογένεσις Α.Ε., Τεχνολογικό Πάρκο Λαυρίου, 19500, Λαύριο, Αθήνα

⁴Tecnología Navarra de Nanoproductos (TECNAN S.L.), Perguita Industrial Area, A Street, 1, Los Arcos, Navarre, SPAIN

⁵Applied Science and Technology Department, Politecnico di Torino, C.so Duca degli Abruzzi 24, 10129 Torino, Italy

Σε έναν διαρκώς αναπτυσσόμενο κόσμο με ένα σαφώς επιβαρυνόμενο περιβάλλον σε παγκόσμια κλίμακα τόσο η διασφάλιση της ενεργειακής αυτάρκειας όσο και η μείωση των εκπομπών αερίων του θερμοκηπίου έχει οδηγήσει την διεθνή κοινότητα στην στρατηγική στροφή ανάπτυξης βιώσιμων τεχνολογιών αξιοποίησης της ηλιακής ενέργειας. Χαρακτηριστικό παράδειγμα μιας τέτοιας τεχνολογίας αποτελεί η παραγωγή ανανεώσιμου υδρογόνου από την ηλιακή διάσπαση του νερού, η οποία όμως μπορεί να επιτευχθεί σε σχετικά υψηλές θερμοκρασίες [1]. Για την παραγωγή ανανεώσιμου υδρογόνου σε θερμοκρασίες περιβάλλοντος μία καινοτόμος μέθοδος θα μπορούσε να μιμηθεί την διεργασία της φωτοσύνθεσης με την οποία τα φύλλα μπορούν να διαχωρίσουν το νερό σε O₂ και H₂ με τη βοήθεια της ηλιακής ενέργειας. Αυτή είναι και η προσέγγιση του ευρωπαϊκού ερευνητικού προγράμματος ArtipHyction στα πλαίσια του οποίου αναπτύχθηκε πρότυπη εργαστηριακή μονάδα τεχνητής φωτοσύνθεσης. Η διάταξη αποτελείται από δύο ηλεκτρόδια που διαχωρίζονται από ποσότητα νερού. Η άνοδος εκτίθεται στο φως του ήλιου, και κατασκευάζεται από κατάλληλο διαφανές ηλεκτροαγωγίμο (TCO, Transparent Conductive Oxide) πορώδες υλικό. Η διάσπαση του νερού πραγματοποιείται στην πορώδη άνοδο και το παραγόμενο οξυγόνο απομακρύνεται μέσω των υδρόφοβων πόρων υποβοηθούμενο από επαγόμενη παλμική κίνηση του νερού μέσα στην νανοδομή της ανόδου. Τα παραγόμενα ηλεκτρόνια και πρωτόνια συνενώνονται στην κάθοδο σε καθαρό υδρογόνο.

Η απόδοση της διάσπασης του νερού εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από την επιλογή κατάλληλου TCO και την βελτιστοποίηση της νανοδομής της μεμβράνης. Η παρούσα εργασία επικεντρώνεται στον παραμετρικό σχεδιασμό της πορώδους νανοδομημένης ανόδου με συνδυασμό δεδομένων τόσο από πειραματικό χαρακτηρισμό νανοδομών όσο και αριθμητικών προσομοιώσεων. Σε πρώτο στάδιο πραγματοποιήθηκε μορφολογικός χαρακτηρισμός TCO κόνεων και μεμβρανών με χρήση ηλεκτρονικής μικροσκοπίας (SEM, TEM). Παράλληλα αναπτύχθηκαν εργαλεία αριθμητικής προσομοίωσης για το σχεδιασμό της μικροπορώδους μεμβράνης μέσω εικονικών μοντέλων (virtual material models) βασιζόμενων στη δημιουργία 3-D ψηφιακών δειγμάτων μεμβράνης μέσω στοχαστικών αλγόριθμων εναπόθεσης σωματιδίων (random sequential addition). Με αυτόν τον τρόπο είναι δυνατή η ψηφιακή αναπαράσταση μεμβρανών και η αξιολόγηση διαφορετικών δομών συναρτήσει μεταβλητών που εξαρτώνται από μικροδομικά χαρακτηριστικά. Οι παράμετροι βελτιστοποίησης περιλαμβάνουν το πάχος και το συνολικό πορώδες του ηλεκτροδίου, το μέσο μέγεθος και την κατανομή μεγέθους των σωματιδίων, τον βαθμό συσσωμάτωσης κτλ. Επιπλέον, παρουσιάζονται τυπικά αποτελέσματα και συγκριτική αξιολόγηση κόνεων/μεμβρανών. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων μπορούν επίσης να χρησιμοποιηθούν για την εξαγωγή σταθμισμένων τιμών μακροσκοπικών ιδιοτήτων της μεμβράνης (διαπερατότητα, θερμική και

ηλεκτρική αγωγιμότητα, κτλ.) για χρήση σε τρισδιάστατους CFD υπολογισμούς.

Η εργασία αυτή χρηματοδοτήθηκε από το Hydrogen & Fuel Cell Joint Technology Initiative και συγκεκριμένα από το ερευνητικό έργο “*Fully artificial photo-electrochemical device for low temperature hydrogen production, ArtipHycion*” (Contact No. 303435).

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

[1] Konstandopoulos A.G., Lorentzou S. (2010) "Novel Monolithic Reactors for Solar Thermochemical Water Splitting", In (Vayssieres L., Ed.) *On Solar Hydrogen and Nanotechnology*, John Wiley & Sons, pp. 623-639