

Υπολογιστική μελέτη της χωρο-χρονικής απόκρισης ταλαντούμενων ηλεκτροχημικών συστημάτων σε διαμορφώσεις δύο και τριών ηλεκτροδίων

Παναγιώτης Σταματόπουλος, Αντώνης Καραντώνης

Τομέας Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών, Σχολή Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ

Οι ηλεκτροχημικές τεχνικές χρησιμοποιούνται ευρύτατα σε βιομηχανικές και τεχνολογικές εφαρμογές. Η παραγωγή ενέργειας μέσω συσσωρευτών ή κελιών καυσίμου, η ηλεκτροχημική παραγωγή αλουμινίου και χλωρίου όπως επίσης και η διάβρωση ή η παθητικοποίηση μετάλλων είναι μερικές από αυτές τις εφαρμογές. Επίσης ηλεκτροχημικές διεργασίες παρατηρούνται συχνά σε φυσικά συστήματα όπως η φωτοσύνθεση των φυτών αλλά και η μετάδοση πληροφορίας μέσω νευρικών παλμών.

Κατά τις ηλεκτροχημικές διεργασίες παρατηρούνται πολλά φαινόμενα τα οποία αλληλεπιδρούν μεταξύ τους. Λόγω των μικρών χρονοκλιμάκων αλλά και της περιπλοκότητας αυτών των φαινομένων είναι δύσκολο να εξεταστούν μέσα από πειραματικές συνθήκες. Η ανάπτυξη και η χρήση υπολογιστικών μοντέλων δίνει τη δυνατότητα αναλυτικής μελέτης αλλά και πιστοποίησης συμπερασμάτων από πειραματικά μοντέλα με όσο το δυνατόν μικρότερο κόστος σε χρόνο αλλά και πειραματικά υλικά.

Στην παρούσα εργασία θα μελετηθεί η συμπεριφορά διατάξεων ζευγών ηλεκτροδίων ανόδου Fe και καθόδου Cu τα οποία είναι βυθισμένα σε λουτρό ηλεκτρολυτικού διαλύματος H_2SO_4 και $CuSO_4$. Κάθε τέτοιο ζεύγος ταλαντεύεται περιοδικά υπό την επίδραση κατάλληλης διαφοράς δυναμικού στα άκρα του. Από πειραματικά αποτελέσματα έχει παρατηρηθεί πως κατά τη σύζευξη ζευγών τέτοιου είδους ταλαντωτών το σύστημα συγχρονίζεται γρήγορα, μετά από λίγους κύκλους ταλαντώσεων. Η ενίσχυση ή η απόσβεση των ταλαντώσεων εξαρτάται από τη γεωμετρία του συστήματος δηλαδή τη θέση των ηλεκτροδίων μέσα στο λουτρό. Σκοπός της υπολογιστικής μελέτης είναι η βαθύτερη κατανόηση τέτοιων φαινομένων καθώς και πιθανές συμπεριφορές του συστήματος για διαφορετικές γεωμετρίες.

Με τη χρήση του λογισμικού COMSOL Multiphysics ξεκινώντας από τη μελέτη ενός μονοδιάστατου μοντέλου καταλήγουμε στη μελέτη του πλήρους τρισδιάστατου προβλήματος με όλα τα φαινόμενα που το περιγράφουν. Στην περίπτωση αυτή το πρόβλημα αφορά στη λύση ενός προβλήματος τριτογενούς κατανομής του ρεύματος με συνοριακές συνθήκες τις ηλεκτροκινητικές εξισώσεις που περιγράφουν τις αντιδράσεις στην επιφάνειες του σιδήρου και του χαλκού. Οι αντιδράσεις που λαμβάνονται υπόψη είναι:

- Ηλεκτροδιάλυση του σιδήρου προς ιόντα δισθενούς σιδήρου στην άνοδο
- Δημιουργία επιφανειακού οξειδίου (παθητικοποίηση) στην άνοδο
- Καταβύθιση άλατος θειικού σιδήρου στην άνοδο
- Αναγωγή ιόντων δισθενούς χαλκού προς στοιχειακό χαλκό στην κάθοδο

Η υπολογιστική αυτή μελέτη και ο προσδιορισμός των κατανομών των συγκεντρώσεων και του δυναμικού στο ηλεκτροχημικό κελί επιτρέπει την βαθύτερη κατανόηση του μηχανισμού σύζευξης και επικοινωνίας ηλεκτροχημικών διεπιφανειών καθώς και της διάδοσης ηλεκτρικών παλμών σε ηλεκτροχημικά δίκτυα.