



NARODOWE CENTRUM NAUKI

OPUS-27

2024/53/B/ST8/02813

Wykorzystanie modelowania 3D, rentgenowskiej mikro i nano tomografii komputerowej oraz uczenia maszynowego do optymalizacji energooszczędnej i ekologicznej metody wytwarzania i poprawy właściwości materiałów do konwersji energii

Prof. dr hab. inż. Robert Filipek

Kierownik projektu

Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica
w Krakowie

Wydział Inżynierii Materiałowej i Ceramiki

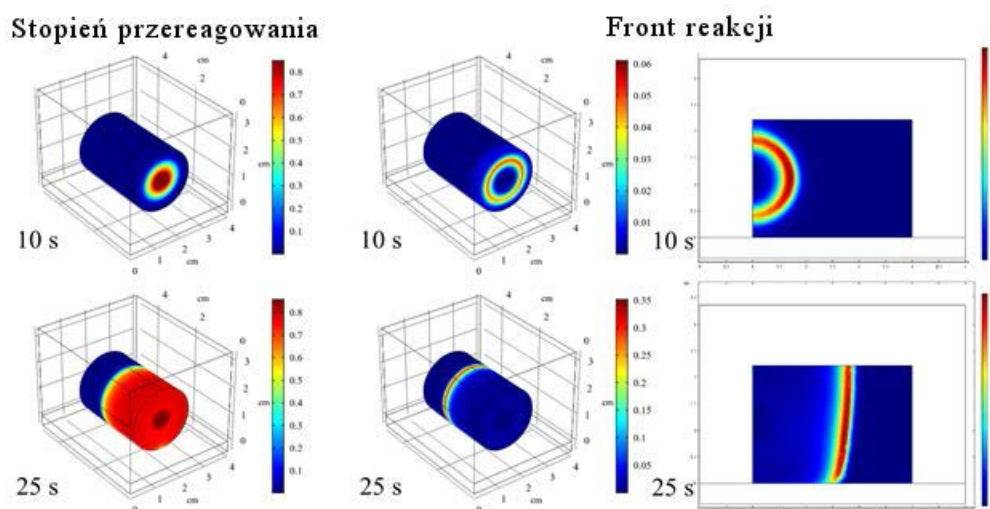
Streszczenie

W nadchodzącej erze zrównoważonego rozwoju przemysł będzie musiał przestawić się na przyjazne dla środowiska, wysoce energooszczędne i niskoodpadowe nowe technologie. Niedawno w ramach poszukiwań nowych materiałów termoelektrycznych, odkryto obiecujące składy półprzewodnikowych krzemków, selenków i antymonków, które mogą być wytwarzane metodą *samorozwijającej się syntezy wysokotemperaturowej* (ang. SHS). Materiały te mogą być wykorzystane do konstrukcji termoelektrycznych urządzeń chłodniczych lub termoelektrycznych generatorów przetwarzających ciepło odpadowe w energię elektryczną. Niektóre z nich mają też właściwości przydatne w innych zastosowaniach, takich jak elementy do chłodzenia mikroprocesorów i czujników w urządzeniach mikroelektronicznych, absorbery światła w ultracienkich ogniwach słonecznych, źródła energii w fototermicznej terapii tkanek nowotworowych, układy do magazynowania wodoru czy elektrody w ogniwach elektrochemicznych.

W porównaniu do tradycyjnych metod wytwarzania materiałów w drodze reakcji w fazie stałej, które są na ogół czasochłonne i energochłonne, SHS ma wiele zalet: jest szybka, przebiega podobnie do rozprzestrzeniania się płomienia w czasie spalania materiałów palnych. Syntezę w sprasowanej mieszaninie proszków inicjuje lokalny zapłon (iskra elektryczna lub grzejnik oporowy). Po rozpoczęciu reakcja przebiega samoczynnie dzięki temu, że towarzyszy jej wydzielanie ciepła (efekt egzotermiczny). Front reakcji przesuwa się wzdłuż próbki aż do momentu, gdy cała objętość przekształci się w produkt. Nie wytwarza żadnych, albo bardzo mało produktów odpadowych i ogólnie można ją zakwalifikować jako technologię zieloną. Ponadto przesuwający się front reakcji powoduje wypieranie zanieczyszczeń, przez co poprawia się jakość otrzymywanego materiału. Jednakże, pomimo wielu zalet SHS, nadal aktualne pozostają pewne problemy do rozwiązania. Do nich należą na przykład, kłopotliwe skalowanie (tzn. przejście od skali laboratoryjnej do przemysłowej), trudności w zapewnieniu warunków adiabatycznych, wystarczającej prędkości propagacji i wysokiego stopnia przereagowania w całej objętości mieszaniny proszkowej.

W naszym projekcie chcemy skupić się na kompleksowym opisie i optymalizacji wytwarzania materiałów termoelektrycznych techniką SHS. Jesteśmy przekonani, że do zaprojektowania efektywnej ekonomicznie metody otrzymywania materiałów termoelektrycznych, potrzebny jest trójwymiarowy (3D) model fizykochemiczny uwzględniający transport energii (w postaci ciepła, promieniowania i konwekcji), kinetykę reakcji, mikrostrukturę mieszaniny reagentów, a także dynamikę płynu w komorze reaktora SHS. Trójwymiarowy model można wykorzystać do optymalizacji parametrów procesu SHS przy użyciu standardowych metod optymalizacji lub sztucznych sieci neuronowych.

Oczekiwany rezultatem projektu jest usprawnienie procesów SHS, tak aby wyeliminować istniejące ograniczenia, np. kłopoty ze skalowaniem. Projekt ma szansę otworzyć nowe możliwości ultraszybkiej, ekonomicznej i wielkoskalowej produkcji materiałów termoelektrycznych. Może on również przyczynić się do lepszego zrozumienia przebiegu SHS, a także rozszerzyć listę materiałów, które będzie można syntetyzować w podobny sposób.



Rys. 1. Przykładowe wyniki symulacji modelu SHS po 10 s i 25 s od momentu zapłonu. Obrazy pokazują stopień przereagowania oraz miejsce frontu reakcji.