NOUA TEHNOLOGIE DE CAPTARE ȘI CONVERTIRE A CARBONULUI ÎN ENERGIE ELECTRICĂ (CCCE) DE CĂTRE (UCNF) Nano-fibre de carbon compactizate in polimeri stratificati cu memoria formei

Dr rer nat **Paul OLARU**[1],

[1]SCO Consulting GmbH, Luzern / Switzerland

REZUMAT Tehnologia noua, de captare a carbonului si convertirea lui în energie electrică (CCCE) este esențială pentru reducerea emisiilor de CO_2 la nivel mondial. Adoptarea pe scară largă a tehnologiilor clasice CCUS (exemplu, absorbția, adsorbția și separarea prin membrane) este în prezent limitată de cerințele suplimentare de energie asociate cu captarea CO_2, ceea ce duce la costuri mai mari de energie și dificultăți în transportul și stocarea CO2 capturat. Recent, captarea CO_2 a fost demonstrată utila pentru sursele mobile, valorificând energia reziduală a motoarelor cu combustie. Conversia de CO_2 în substanțele chimice utile și combustibilii este înțeleasă ca o cerință pentru succesul comercial al oricărui proces CCUS, dar s-a dovedit a fi foarte dificilă din cauza stabilității termodinamice și cinetice a CO_2.

Cuvinte cheie: pseudo-compozit, SMP, CO_2, electricitate, ccce;

ABSTRACT. New Carbon Capture, Converted in Electricity (CCCE) technology is essential to reduce global CO_2 emissions. Large-scale adoption of classical CCUS technologies (for example, absorption, adsorption, and membrane separation) is currently limited by the additional energy requirements associated with CO_2 capture, resulting in higher cost of energy and difficulties in transporting and sequestering the captured CO_2 . Recently, CO_2 capture has been demonstrated for mobile sources, capitalizing on the waste energy of combustion engines. Conversion of CO_2 to useful chemicals and fuels is understood to be a requirement for the commercial success of any CCUS process but has proven to be very difficult because of the thermodynamic and kinetic stability of CO_2.

Keywords: pseudo-composite, SMP, CO_2, electricity, ccce.

1. INTRODUCERE

Materialul termoelectric convertește o diferență de temperatură de la un potențial electric sau, invers, o tensiune aplicată de la o diferență de temperatură. Acest fenomen a făcut ca aceste materiale să fie atractive pentru potențialul lor în aplicațiile care se extind de la răcirea cu microprocesor la turbo-compresor și industria energetică. Noi Polimeri cu memoria formei (SMP) reprezintă materiale (co-polimeri) a caror structura constă din două tipuri de componente. O componentă, cum ar fi multistraturile cu nanostrip, cu o temperatură de transformare (Ttrans) mai ridicată - componenta grea. Această *componentă grea* (**elastomer**) reprezintă elementul principal al SMP, care îmbunătățește proprietățile tribologice (rezistența la uzură) și oferă mecanismele de rezistență mecanică pentru SMP la temperaturi ridicate.

La Ttrans, *componenta moale* (**termoplastul**), care stabileste fizico-chimic componenta grea la temperaturi scazute, pierde rezistenta. Fenomenele termoelectrice asigură conversia directă a căldurii în energie electrică sau electrică în căldură, fenomenele fiind descrise de trei mecanisme conexe: **efectele Seebeck, Peltier și Thomson.** Obiectivul principal al cercetarii este realizarea **materialului nou, pseudo-compozit**: polimer-compozit cu memorie format din fibre unidirecționale (UCnF) compactizate sub formă de armătură in polimeri cu memorie (SMP) obtinand **Vyborcntmat-SMP (VycnT)** (fig.1). Este o provocare pentru noua generație de turbocompresoare care limitează emisiile de gaze fierbinți și periculoase pentru autoturismele diesel și protejează viața și mediul înconjurător. Ciclul de transformare structurala si returul, a fost efectuat cu probele prezentate in fig.1.

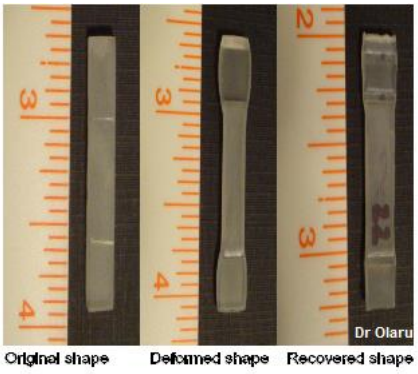

Figura 1. Specimene testate Vyborcntmat-SMP (VycnT).

Etapele transformarilor structurale -probe (fig.1):

• Specimenul este încălzit la 100 ° C care este deasupra temperaturii de tranziție vitroasă, *Tg = X* ° C, [2, 13, 18];

• La 100 ° C, specimenul a primit o deformare de tracțiune de 50%. prin aplicarea unei forțe de tracțiune pe ea.

• După deformare, temperatura eșantionului a fost răcită sub temperatura camerei, menținând sarcina pe turbocompresor.

• La temperatură sub temperatura de tranziție vitroasă, sarcina este îndepărtată și specimenul este scos din dispozitiv. Forma rezultată se numește forma deformată sau temporară. În această condiție, lungimea eșantionului a fost măsurată, [4, 11, 17].

• Apoi se încălzește din nou la 100 ° C, care se află deasupra temperaturii de tranziție în stare de sticlă și nu se impune nicio constrângere pe specimen pentru recuperarea formei originale.

• În final, se răcește la temperatura camerei și se măsoară lungimea eșantionului, din care se calculează proprietatea memoriei de formă a eșantionului.

2.COMPONENTE DE CATALIZATOR (MODELARE MATLAB)

Pentru a respecta reglementările privind emisiile de gaze, un sistem complet de post-tratare pentru un motor diesel trebuie să îndepărteze monoxidul de carbon, hidrocarburile nereacționate, oxizii de azot (NO_X) și pulberile în suspensie. Ca rezultat, un sistem complet de post tratare *Johnson Matthey* cuprinde un catalizator de oxidare diesel (DOC), un filtru de particule diesel (DPF), un catalizator pt reducere catalitică selectivă de amoniac (NH3 SCR) și un anammonia slip catalyst (ASC) [5,10]. Modelele prezinta o captare complexă in cazul proceselor fizice de transfer de masa si caldura si a cineticii reactiilor chimice. Procesele fizico-chimice includ fluxurile de gaze, precum și transferul de căldură și masă în catalizator. Cinetica reactiilor descrie procentul de reusite al reacțiilor chimice și arată o variatie procentuala în funcție de temperatură și compoziția gazului.

Pentru a dezvolta un model nou de catalizator începem cu ecuații care descriu fizica sistemului, inclusiv energia și balanțele de masă pentru fazele gaz și solide (catalizator), împreună cu ecuațiile care descriu transportul de căldură și masă între aceste faze. Apoi, am efectuat experimente în laborator, care ne permit să măsuram cu exactitate performantele catalizatorului, controlând cu precizie parametrii de intrare și de exhaustare [12, 14]. Exemplu- metoda de măsurare a conversiei monoxidului de carbon în funcție de temperatură pentru diferitele amestecuri de gaze. Obținerea datelor pentru blocul de alimentare prin captarea datelor de exhaustare de la un motor diesel real pe măsură ce execută ciclul de antrenare (fig.2).

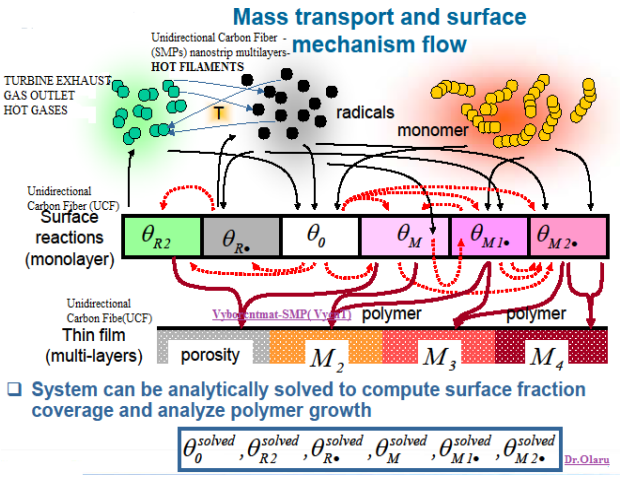

Figura 2. Reacții de suprafață: multistraturi nanostrip de polimeri cu memoria formei (SMPs), multistrat din fibre unidirecționale (UCnF). Pe măsură ce crește temperatura, efectul catalytic al polimerului cu memorie a formei este activat (în imagine) și acest lucru va crea tensiune în SMP ceea ce va conduce la reculul diafragmele, înapoi la pozițiile inițiale.

3. EFECTUL FRECVENȚEI ELECTRICE ASUPRA TEMPERATURII TTRANS

4. EFECTUL TERMOELECTRIC

Fenomenele termoelectrice oferă metoda directă de transformare a căldurii în electricitate sau electricitate în căldură, fenomenul fiind descris de trei mecanisme conexe: **efectele Seebeck, Peltier și Thomson. Efectul Seebeck** descrie transformarea diferențelor de temperatură direct în electricitate; La scara atomică, un gradient de temperatură aplicat determină ca purtătorii de sarcina atomica sa difuzeze din material de la partea fierbinte la partea rece, generând un flux de curent electric recuperabil..

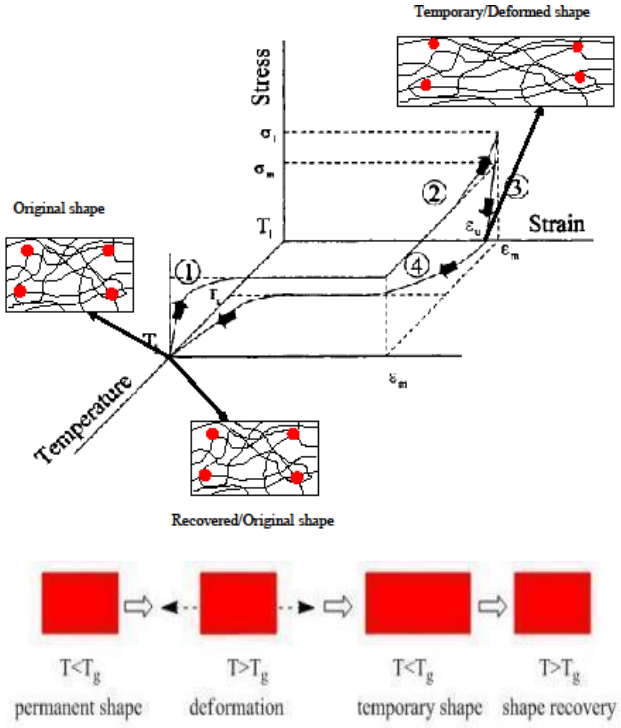

Figura 3. Ciclul transformarilor ***go and back*** al polimerului statificat cu memoria formei-***VycnT.***

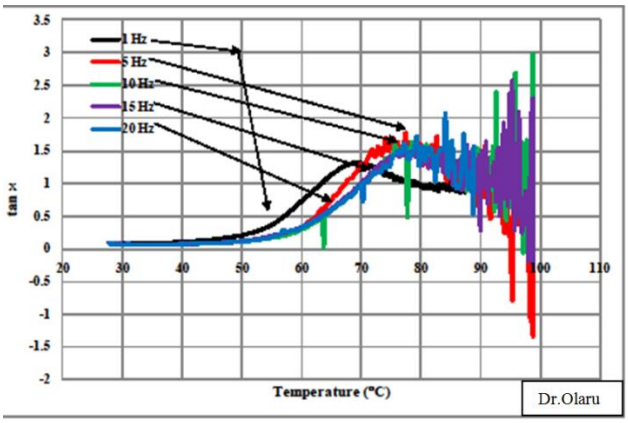

Figura 4. Efectul frecvenței electrice asupra temperaturii de tranziție Ttrans a SMP.

Efectul Peltier descrie producerea de căldură la o joncțiune electrica a două materiale conductoare diferite, datorita fluxului forțat al purtătorilor încărcați ca urmare a diferenței de temperatură. **Efectul Thomson** descrie încălzirea sau răcirea unui conductor care poartă curentul în prezența unui gradient de temperatură. Pentru a analiza efectul frecvenței electrice (fig.4) trebuie să fie rezolvate cu exactitate ecuațiile câmpului termoelectric. **Coeficientul Seebeck, S,** măsoară amplitudinea unei tensiuni termoelectrice induse ca răspuns la o diferență de temperatură între materialul respectiv și entropia materialui. O diferență de temperatură aplicată determină ca purtătorii încărcați din material să difuzeze de la partea caldă la partea rece. Purtătorii mobili încărcați pozitiv, migrând la rece, vor lasă în urma,la partea caldă, nuclee încărcate cu semn opus dând astfel naștere unei tensiuni termoelectrice [1, 8] . Astfel, o polaritate diferita a sarcinilor atomice creează un potențial electric, iar acumularea încărcăturilor la rece, în cele din urmă, încetează la o valoare maximă acumulata. **Temperatura și structura noului material influențează S; CnF (nanofibre de carbon) are coeficienți de referință ai lui Seebeck**, în timp ce semiconductorii pot fi dopați pentru a se adapta la comportamentul ciclic și pentru a crește coeficientul Seebeck [16].

5. REZULTATE - LUCRĂRI DE LABORATOR

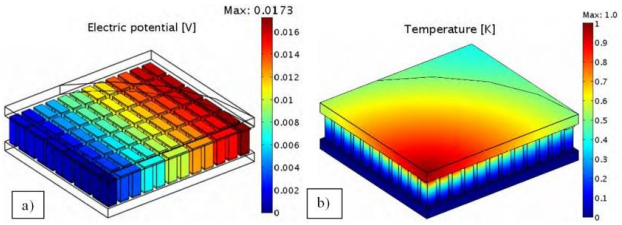

Figura 5. Potențialul electric pentru un modul termoelectric alcătuit dintr-o serie de pseudo-compozite UCnF & SMP (VycnT) datorită impunerii unei distribuții de temperatură neuniformă: *efect Seebeck*..

Tabelul 1. **Proprietățile apecifice ale materiale pentru aplicațiile termoelectrice**

Parameters	UCnF & VycnT	Copper electrode
Seebeck coefficient, V/K	200x 10^{-6}	3.8x 10^{-6}
Electrical conductivity, S/m	1.1x 10^{-5}	6x 10^{7}
Thermal conductivity, W/m.K	1.7	400
Heat capacity, J/kg.K	554	385
Density, g/cm^3	Bulk: 0.2-0.4	8800

6. DISCUTII

Controlul asupra orientării sau aranjării unei nano-structuri poate oferi avantaje și beneficii suplimentare pentru anumite aplicații; *Exemplu*: 1D orientat: Unidirectional Carbon nFiber -UCnF (nano-strip multi-straturi), Vyborcntmat-SMP (VycnT), poate depăși performanțele vechilor materiale în anumite aplicații. S-a demonstrat că probele *VycnT* orientate pe verticală au caracteristici atractive ca surse de electroni de emisie în câmp pentru dispozitive care includ afișaje cu ecran plat [15], tuburi de descărcare a gazelor și lămpi. Atunci când se aplică un potențial electric (fig.5) între o rețea *VycnT* și un anod, pot fi produse câmpuri electrice locale

înalte datorită razei foarte mici a vârfului *VycnT*. Fenomenul este determinăt de conjunctia noxele – electroni, realizandu-se un efect de tunnel pentru captarea, adsorbția și absorbția de la turbină de evacuare a gazelor fierbinți (fig.6) a majoritatii impurităților nocive..

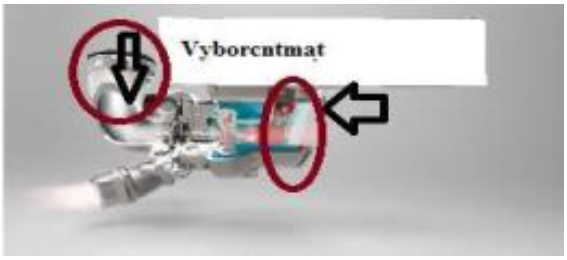

Figura 6. Efectul tunelului pt noxe- VycnT pentru captarea, adsorbția și absorbția de la turbină de evacuare a gazelor fierbinti cu impurități majoritare .

Orientarea pseudo-compozitului VycnT pe un substrat poate fi schimbată de la orizontală (orientată în mod aleator sau paralel cu suprafața substratului) la verticală (perpendiculară pe suprafața substratului), pentru a forma V-O; Astfel se obtin în mod eficient toate proprietățile si caracteristicile suplimentare ale lui VycnT datorită pozitionarii libere. Eficiența UCnF și Vyborcntmat-SMP (VycnT) în întărirea polimerului compozit SMP depinde foarte mult de structura chimică a VycnT la scară atomică, în timp ce transferul de sarcină de la matrice la VycnT prin faza intermediere joacă un rol-cheie la scară micro Cu toate acestea, rezolvarea unor astfel de probleme este o chestiune de timp, deoarece tehnologiile de procesare și caracterizare avanseaza rapid. Pe partea de fabricație, de exemplu, cercetatorii au dezvoltat o nouă abordare care să permită realizarea unui VycnT perfectionat, controlând structura și lungimea sa. Dintre aceste metode de simulare atomică, **dinamica moleculară (MD**) a fost recunoscută a fi o metodă noua pentru a oferi o mai bună înțelegere a rolului structurilor atomice ale materialelor la scară macroscopic.

7. CONCLUZII

Această lucrare de sinteză a demonstrat implementarea ecuațiilor câmpului termoelectric pentru efectele Peltier-Seebeck cu ajutorul COMSOL Multiphysics. Exemple de aplicare a implantării au fost furnizate atât pentru conversia diferențelor de temperatură direct în energie electrică, cât și pentru generarea de căldură datorită impunerii unui potențial electric. COMSOL Multiphysics poate fi utilizat pentru a modela conductivitatea electrică a SMP-urilor, tip (UCnF) armate unidirectional (VycnT) ca pseudo-compozite. Modelele de conductivitate au fost produse sub pragul de percolare. Modelul de percolare a fost validat prin similitudine cu rezistența de contact determinată experimental între două fibre. Conductivitatea electrică a fost modelată pe întreaga gamă de încărcare UCnF. Aceste modele de bază au fost adaptate pseudo-compozit industrial tipic, compus din mai multe straturi cu configurații de contact diferite.

AVANTAJE

- Performanța termică a fost validată și este în acord cu experimentele - FACVD (tehnologie de vacuum fără plasmă) capabilă să producă suficiente UCnF pentru interconectări avansate;
- Determinarea coeficientul de lipire a polimerilor cu memoria formei (SMPs) nanostrip, ($\mu \sim 0{,}035$) și a energiei de activare (~ 4,23 J / mol) pentru "polimerizarea modului FACVD"
- Coeficientii Peltier / Seebeck implementați utilizând metode noi. Proprietățile materialelor sunt dependente de temperatură de cuplare totala;
- Prezintă efectul gradientilor termici impuși;
- Prezintă efectul curentului electric;

LIMITARI

- Prea mulți parametri ajustați și necunoscuți; Chimia suprafețelor trebuie îmbunătățită.
- Proprietățile materialelor, care controlează microstructura, sunt cheia optimizării performanței termoelectrice. Două domenii specifice sunt cercetate pentru a îmbunătăți eficiența:textura cristalografică și aranjarea limitelor granulatiilor.
- Oferă mai multe mile pe galon în comparație cu mot oarele pe benzină și limitați poluarea.
- Practic este evacuăt mai puțin gazul otrăvitor (ex: CO_2, CO, NO_x etc.)
- Cu toate acestea, motoarele diesel produc oxizi de azot și particule mai mult decât motoarele pe benzină. Emisia de oxizi de azot și particule în suspensie conduc la probleme de calitate a aerului în orașe.
- Deci, din cauza calității aerului și a impactului asupra sănătății , în ansamblu, motoarele diesel nu sunt mai verzi?.

BIBLIOGRAFIE

[1] KCA Crane, Laser-Induced Ablation of Fibre/Epoxy Composites, *Journal of Applied*, *Physics,* 14, 1981.
[2] KT Voisey, Fibre Swelling During Laser Drilling of Carbon Fiber Composites, *Opticsand Lasers in Engineering,* 44, 2006.
[3] CT Pan, Evaluation of Anisotropic Thermal Conductivity for Unidirectional FRP in laser Machining, *Composites Part A*, 32, 2001.
[4] CT Pan, Prediction of Extent of HAZ in Laser Grooving of Unidirectional Fiber Reinforced Plastics, *Journal of EngineeringMaterials and Technology,* 120, 1998.

[5] E Uhlmann, The Extent of Laser Induced Thermal Damage of UD and Crossply Composite Laminates, *International Journalof Machine Tools & Manufacture*, 39, 1999.
[6] WSO Rodden, A Comprehensive Study of the Long Pulse Nd:YAG Laser Drilling of Multi-Layer Carbon Fiber Composites, *Optics Communications,* 210, 2002.
[7] MD Islam, Thermal Conductivity of Fiber Reinforced Composites by the FEM, *Journal of Composite Materials*, 33, 1999.
[8] CF Cheng, Application of a 3-D Heat Flow Model to Treat Laser Drilling of Carbon Fiber Composites, *Acta Metallurgica,* 1998.
[9] LN Nikitin, Calculation of the Temperature of Polymer or Composite Surfaces Placed in an Infrared Laser Field, *Mechanics ofComposite Materials*, 31, 1995.
[10] Toshiki Hirogaki, Prediction of Damage Width in Laser Drilling of Printed Wiring Board using FEM, *ICCM Proceedings*, 1997.
[11] Robert Cozzens, High Energy Laser Interactions with Organic Matrix Composites, *Naval Research Laboratory*, 2007.
[12] Solid State laser Technology Maturation program WAREX, *ONR*, 2012.
[13] Christopher Lloyd, Ablative Polymeric Materials for Near-Infrared High-Energy Laser Beam Diagnostics, *Journal ofDirected Energy*, 3, 2009.
[14] M Dell'erba, An Experimental Study on Laser Drilling and Cutting of Composite.
[15] The Boeing Company. *787 Advanced Composite Design*. 2008-2013
[16] Brian A. Davis, North Carolina State University, North Carolina, Investigation of the Thermomechanical Response of Shape Memory Alloy Hybrid Composite Beams, NASA/CR-2005-213929.
[17] Guo, Q., Figueiredo, P., Thomann, R., Gronski, W.: Phase behavior, morphology and interfacial structure in thermoset/thermoplastic elastomer blends of poly(propylene glycol)- type epoxy resin and polystyrene-b-polybutadiene. Polymer 42, 10101–10110 (2001)
[18] Yan, L.: Mullins effect recovery of a nanoparticle-filled polymer. J. Polym. Sci. Part B Polym. Phys. (2010)..

Despre autor

Dr.rer.nat. **Paul Olaru**[1]
SCO Consulting GmbH, Luzern / Switzerland

EU Expert: EX2013D137043. Professional Activity: 2013-today-Sr.Expert Engineer Metallurgist- SCO Expert, CH-Luzern,Switzerland; 2011-2013, Sr.Expert Engineer Metallurgist – C. Casting, Rotocasting,- DANIELI & C. S.p.A.ITALY; 2010-2011, Scientific Manager, Head Technologic & Lab. team,IMNR-Romania; 2006-2010, Senior Materials Engineer and Tribology, Honeywell Brno, CZECH Rep; 2002 - 2006, Manager engineering casting & heat treatments-INAV Bucharest, RO; 1990-2002, Sr.Scientific Researcher & Technologist, FAUR Bucharest.