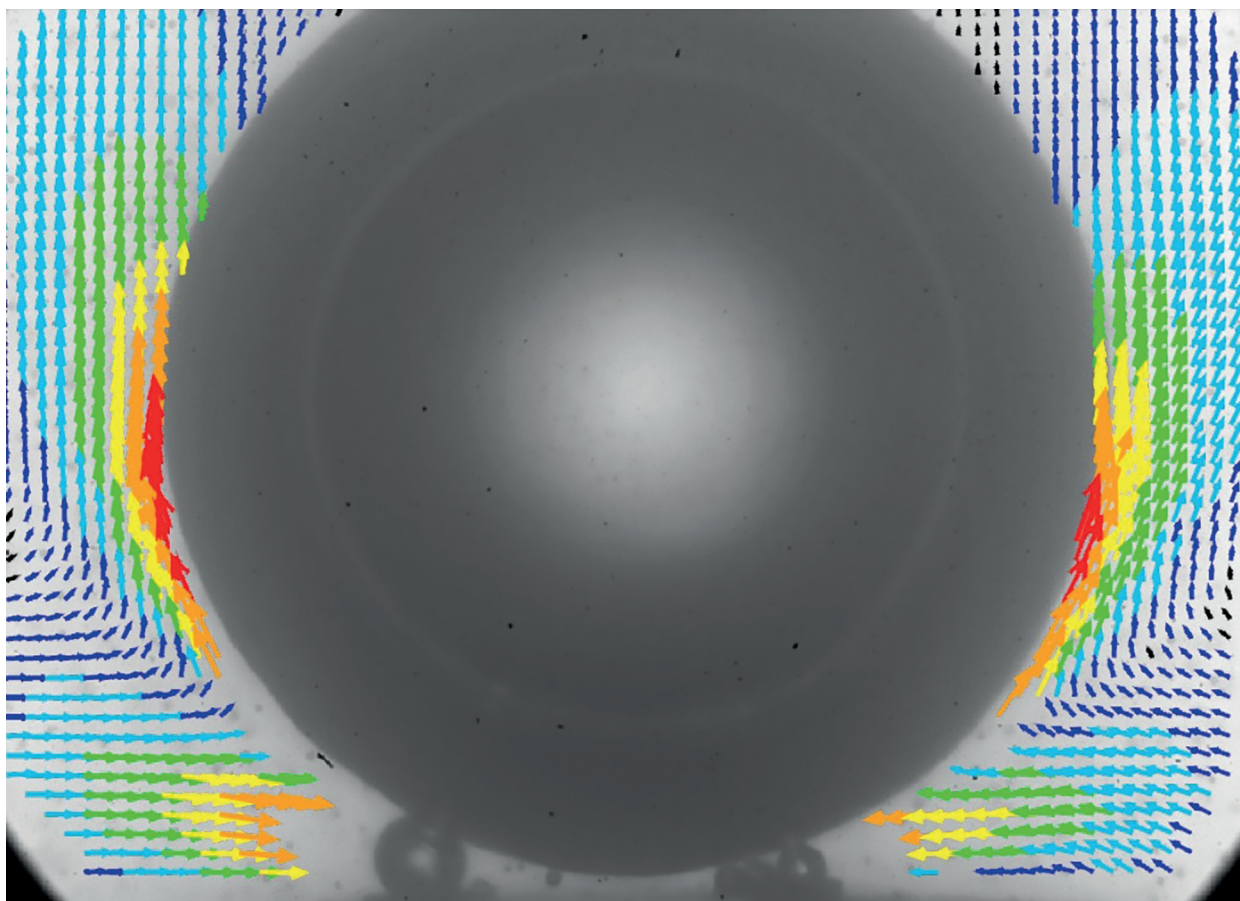


Simulatie van nanobellen geeft inzicht in waterstofproductie

Wetenschappers van de Universiteit Twente presenteren nieuwe inzichten in hoe ongewenste nanobellen zich hechten en groeien aan een elektrodeoppervlak en daarmee de productie van waterstof flink hinderen. Het onderzoek kan helpen om methodes te vinden om deze nanobellen gecontroleerd te verwijderen, wat uiteindelijk kan bijdragen aan een hogere efficiëntie van waterstofproductie.



Nieuwe moleculaire dynamische simulaties geven een kijkje in het turbulente bestaan van ongewenste nanobellen aan een elektrodeoppervlak.

Groene economie

Waterstof is een veelgenoemd alternatief voor fossiele brandstof, door het bijvoorbeeld te gebruiken als energiedrager in een batterij. Het kan door zonne- en/of windenergie opgewekt worden, wat het daarmee volledig groen en hernieuwbaar maakt. Het is op te wekken uit water door middel van elektrolyse. Hierbij splitst water aan twee verschillende elektrodes op in waterstof en zuurstof. Waterstof is een belangrijke component in de toekomstige energiemix, maar om dit mogelijk te maken is het noodzakelijk dat dit proces op grote schaal kan worden toegepast. Maar juist in het opschalen zijn er nog problemen die om een oplossing vragen.

Gedurende het elektrolyseproces vormen zich namelijk gasbellen op de elektrodes. Het oppervlak dat een gasbel inneemt, kan niet meer gebruikt worden om waterstof op te vormen. Dit kan het proces tot wel 25% minder efficiënt maken. Het verwijderen of voorkomen van het vormen van deze bellen is dus cruciaal. Helaas is de belvorming een nogal complex proces. De gasbellen komen voort uit minuscule nanobellen van minder dan tien nanometer in doorsnee, die zich vormen op het elektrodeoppervlak. Deze blijven initieel vrij stabiel in omvang, maar bij het passeren van een grenswaarde in hun volume kunnen ze ongelimiteerd blijven groeien. Dit gaat door totdat de bel ongeveer zes micrometer in doorsnee is, waarna die groot genoeg is om, door middel van de opwaartse kracht, zich van het oppervlak te verwijderen om naar boven te drijven.

Nanobellen

Om tot een oplossing te komen staan twee vragen centraal: lost het lokaal ontstane waterstofgas op of vormt het een nanobel? En als er een nanobel vormt en die de elektrode blokkeert, hoe kan deze bel dan verwijderd worden? Wat onderzoek moeilijk maakt, is dat nanobellen zeer moeilijk individueel te bestuderen zijn. Ze kunnen wel indirect

gemeten worden, door bijvoorbeeld een dip in het piekvermogen van een nano-elektrode te meten. En met bijvoorbeeld atoomkrachtmicroscopie kan het effect van een grote groep nanobellen gemeten worden. Maar het is juist nodig om het gedrag van individuele nanobellen goed in kaart te brengen om zodoende een oplossing te zoeken om te voorkomen dat de nanobellen gaan groeien.

Een groep onderzoekers van de Physics of Fluids Group van de Universiteit Twente presenteerde onlangs een nieuw model [1] waarin de kritieke fase van een elektrolytische nanobel kan worden voorspeld. Dit kan mogelijk helpen om een methode te vinden om ze gecontroleerd minuscule en stabiel te houden. Het onderzoek is gebaseerd op een bestaand model dat de stabiliteit van nanobellen aan een oppervlak beschrijft. Het zogenoemde Lohse-Zhang-model is ontwikkeld door dezelfde Physics of Fluids Group en is nu uitgebreid voor de elektrolysetoepassing, waarbij ook de elektrolytische stroomdichtheid en de lokale gasverzadiging is toegevoegd. De modellen zijn gevalideerd met moleculaire dynamische simulaties en vergeleken met gepubliceerde experimentele resultaten. Het nieuwe model gaat ook een stap verder dan bestaande modellen die 'reactiegecontroleerde' mechanismen beschrijven, waarbij het gevormde gas zich direct toevoegt aan de bel. Deze bestaande modellen beschrijven het groeien van grote bellen vrij accuraat. Het nieuwe model daarentegen kijkt naar 'diffusiegecontroleerde' mechanismen en kijkt specifiek naar de groei van nanobellen, waarbij het dus flink kan afwijken van het oude model dat keek naar groei op de macroschaal en op de nanoschaal ongeldig is.

Hydrofoob en hydrofiel

In hun moleculair dynamische simulaties creëerden de onderzoekers een nano-elektrode met geïsoleerde oppervlaktelocaties met een hydrofoob karakter, omringd door hydrofiel plekken. De hydrofobe eilandjes zijn specifieke plekken waar nanobel-

len makkelijk kunnen ontstaan en groeien. Dit vormt daardoor een gecontroleerde omgeving voor deze studie. Binnen de simulaties worden de elektrolytische stroomdichtheid en de hoeveelheid toegestroomd gas aangepast. Er wordt gekeken naar het oppervlak dat de nanobel inneemt op het elektrodeoppervlak in combinatie met de stabiliteit van de nanobel, dus of het de grenswaarde overstijgt en ongelimiteerd zal groeien.

De simulaties lieten zien dat er bij een voldoende lokale verzadiging van gas een grenswaarde bestaat voor de elektrolytische stroomdichtheid, waarboven de nanobellen instabiel zijn en ongelimiteerd blijven groeien. De studie liet ook zien dat als nanobellen combineren in een grotere bel ze makkelijker instabiel worden, aangezien ze eerder de grenswaarde voor de stroomdichtheid overschrijden. Daarmee kan in toekomstig experimenteel onderzoek gekeken worden naar methodes waarin het aanpassen van de stroomdichtheid helpt om van ongewenste gasbellen af te komen.

Volgens hoofdonderzoeker Detlef Lohse van de Universiteit Twente geven de simulaties een beter inzicht in de dynamiek van het ontstaan en de groei van nanobellen. Ze kunnen ook uitgebreid worden naar andere toepassingen, bijvoorbeeld in de katalyse. De nieuwe inzichten kunnen leiden tot betere controle over deze nanobellen, wat uiteindelijk moet leiden tot het halen van een hogere efficiëntie bij waterstofproductie. Over vervolgstappen zegt hij dat er experimenten gedaan zullen worden en overgestapt wordt van molecular dynamics-simulaties naar finite difference-simulaties om grote systemen te kunnen behandelen. "De grootste uitdaging blijft de stap van de theorie naar de praktijk en naar de grootschalige elektrolyzers", aldus Lohse.

REFERENTIE

- 1 Y. Zhang, X. Zhu, J.A. Wood en D. Lohse, Threshold current density for diffusion-controlled stability of electrolytic surface nanobubbles, PNAS 1-9 (2024).