

Historia wodorków metali sięga końca XIX wieku, kiedy to zsyntetyzowano pierwszy wodorek, wodorek palladu (PdH). W ciągu kolejnych dziesięcioleci odkryto szeroką gamę wodorków, w tym Mg, Ti, Ni i Zr, a także wodorków stopów międzymetalicznych Fe-Ti, La-Ni lub Ti-Mn. Wodorki metali wykazują ogromne zalety w wielu zastosowaniach, np. do przechowywania wodoru, sprężania wodoru, oczyszczania wodoru lub jako elektrody do baterii niklowo-wodorkowych (NiMH). Opracowywanie stopów mogących stanowić rezerwuary wodoru jest obecnie kosztowne i czasochłonne z uwagi na wykorzystanie metody prób i błędów przy testowaniu kolejnych materiałów.

Projekt Materials Genome Initiative, polegający na digitalizacji danych dotyczących materiałów daje szansę na oparcie badań o przewidywanie właściwości nowych materiałów. Dzięki uczeniu maszynowemu, przewidującemu właściwości stanu podstawowego, takie jak stabilność i przerwa energetyczna można projektować nowe materiały. Jednakże w odniesieniu do wodorków metali problem jest bardziej złożony z uwagi na mnogość czynników wpływających na parametry wodorków, w tym warunków aktywacji materiału i tworzenia się wodorków, pojawiających się naprężeń/rozszerzalności, kinetyki sorpcji wodoru, histerezy i nachylenia krzywych koncentracji-ciśnienia, stabilności wodorków, czasu życia, stopnia degradacji i utleniania. Aby sprostać tym wyzwaniom, konieczne jest opracowanie uogólnionych modeli uczenia maszynowego, które przewidują te parametry dla różnych pierwiastków w ramach wielkoskalowej strategii symulacji i proponowanych badań. Realizacja projektu pozwoli na kompleksową i szybką ocenę wszystkich niezbędnych parametrów nowych wodorków metali.

W ramach projektu HYPHAD zostanie wdrożony wielkoskalowy proces wyszukiwania i projektowania materiałów (wodorków metali) w oparciu o stopy FeTi oraz TiMn₂, tak aby zaproponować nowe materiały o lepszych właściwościach. Dzięki opracowaniu własnych baz danych, symulacje oparte na sztucznej inteligencji i CALPHAD (obliczanie diagramów fazowych) będą mogły wiarygodnie sugerować pewne klasy materiałów, które należy przetestować w warunkach laboratoryjnych. Ostatnio wykazano, że potencjał uczenia maszynowego sieci CHGNet, który został opracowany poprzez uczenie na 15 milionach wyników obliczeń teorii funkcjonału gęstości (DFT), może zostać wykorzystany do szybkich, uogólnionych przewidywań struktury elektronowej. W przypadku wodorków metali aby przełożyć strukturę elektronową na obserwowalne właściwości konieczne jest zintegrowanie tych obliczeń z pakietami CALPHAD oraz kinetycznymi metodami Monte Carlo. Do optymalizacji modeli CALPHAD zostanie wykorzystane kryterium informacyjne Akaike, regresja symboliczna i łańcuchy Markowa Monte Carlo. Zaproponowane związki zostaną poddane walidacji ich parametrów w skali laboratoryjnej (TRL 1), a następnie syntezy i testów na dużą skalę (TRL 4), co pozwoli na udokładnienie algorytmów szukających nowych materiałów. Do analizy i optymalizacji wodorków metali wykorzystana zostanie analiza dyfrakcji rentgenowskiej in-situ, mikroskopia elektronowa oraz badania sorpcyjne wodoru w oparciu o układy Siewertsza.

HYPHAD znacząco przyczyni się do realizacji celów obszaru "Sustainable advanced materials for energy" w ramach programu M-ERA.NET 2023. Projekt łączy siły czołowych międzynarodowych ekspertów z Niemiec (Fraunhofer IFAM), Polski (AGH w Krakowie) i Korei Południowej (KENTECH) przy udziale koreańskiego partnera przemysłowego (WONIL). Przy podobnym dostępie do odnawialnych źródeł energii, ten wspólny wysiłek daje szansę na wyniki będące podstawą przyszłych projektów niosących ogromne korzyści dla gospodarek uczestniczących krajów.