

微流体仿真助力3D打印微反应器合成钙钛矿纳米晶

李冲¹ 庄园²

1. 化工学院, 大连理工大学, 辽宁, 大连

2. 化工学院, 大连理工大学, 辽宁, 大连

简介: $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ (X=Br, I) 钙钛矿纳米晶的合成通常是使用批次式搅拌系统进行。宏观间歇式反应器在高耗能的同时, 并不能保证制备的纳米晶的尺寸均匀可控, 实验的重复性也不好。而微流体具有高效的传质传热特性, 以及良好的可操纵性。同时体系反应体积的急剧下降使得反应过程的不确定性大大降低。这样保证所有晶体拥有相同的成核和生长环境。所以使用微反应器制备的纳米晶的尺寸均匀可控。

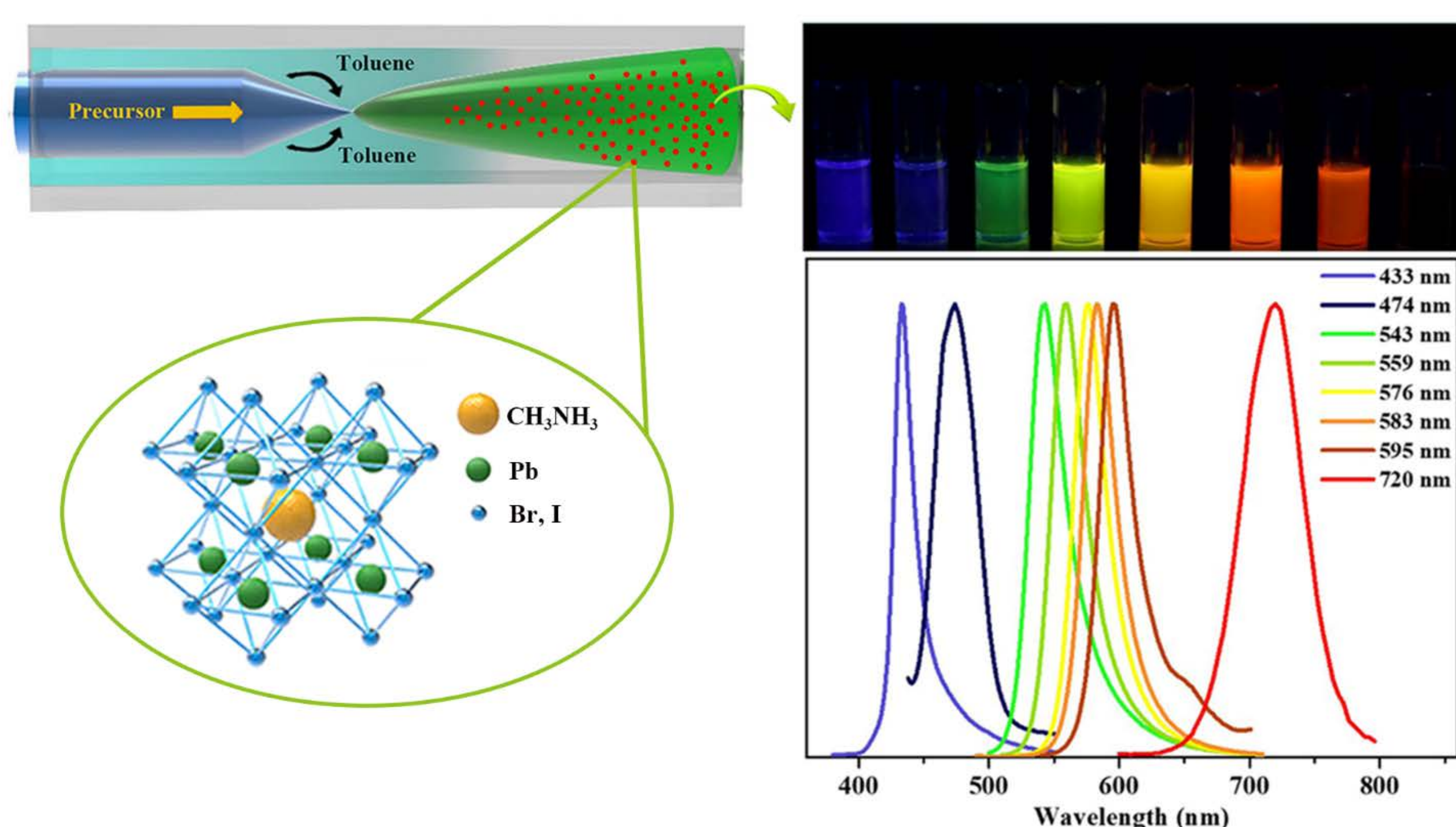


图 1. 微反应器制备钙钛矿纳米晶示意图

计算方法: 我们使用comsol内置建模功能进行建模。为了比较微反应器与传统间歇式反应器在合成钙钛矿纳米晶过程中的速度场与浓度场的差异。我们选择了层流接口 (CFD模块) 和稀物质传递接口进行计算。

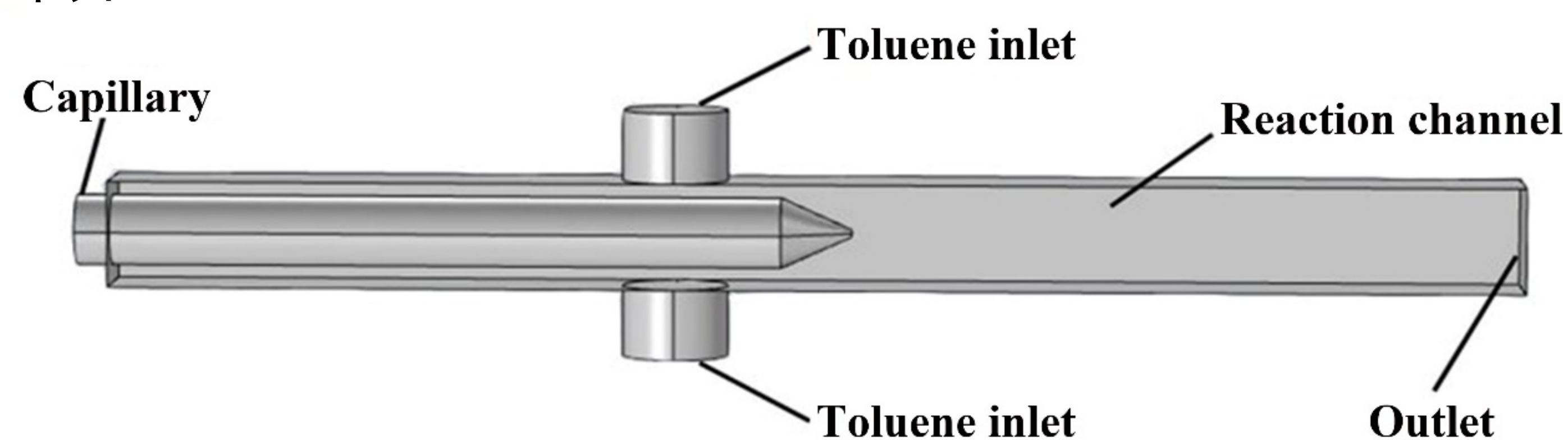


图 2. 微反应器示意图

在图2中, 毛细管入口处注射前驱液 (内相), 设为层流接口的入口1与稀物质传递接口入口1。甲苯 (不良溶剂) 入口 (外相) 设为层流接口的入口2与稀物质传递接口入口2。反应器Outlet为层流与稀物质传递物理场的出口。

结果: 展示仿真研究的结果。可以用图片或表格的形式对结果进行呈现。

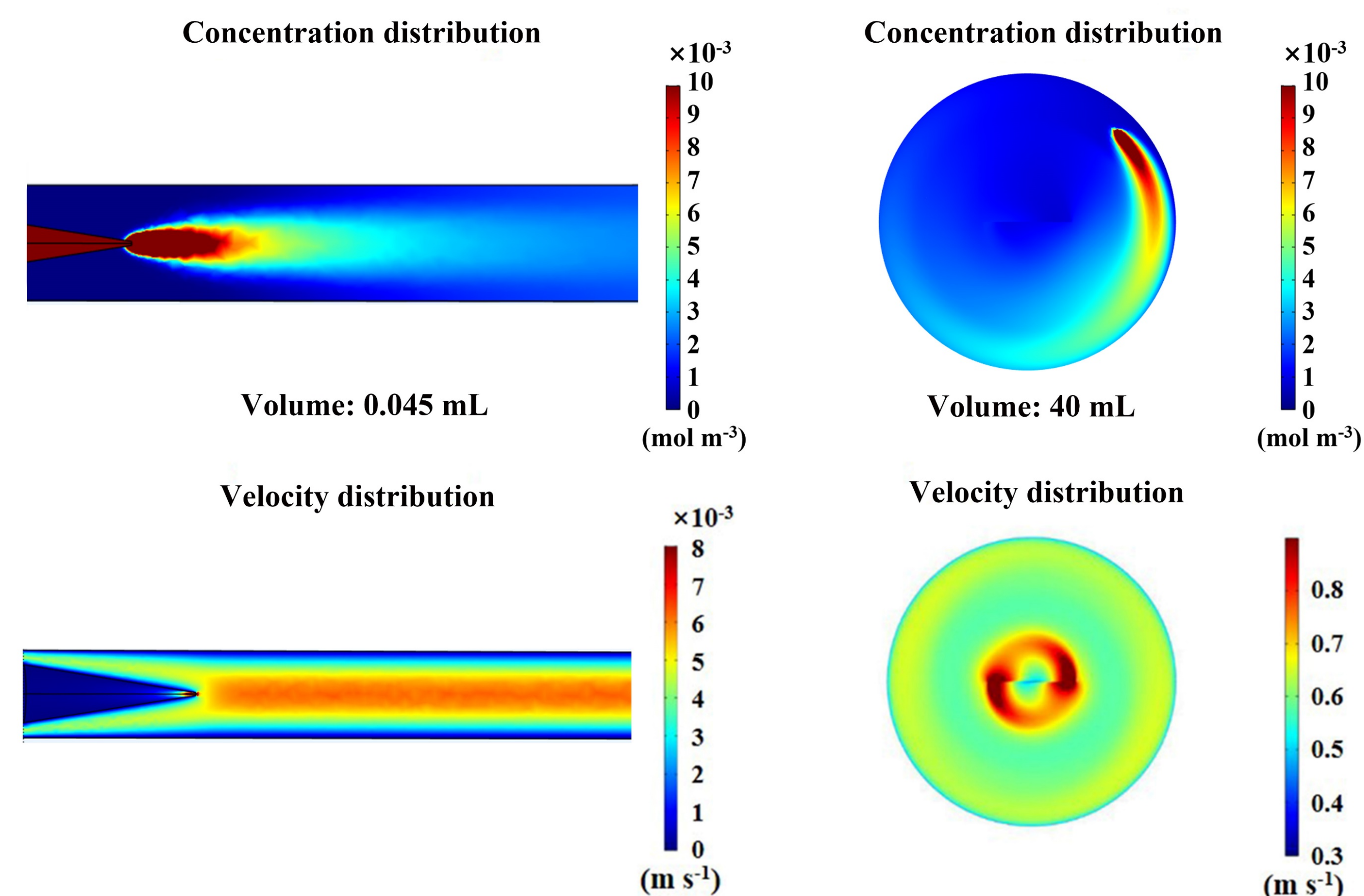


图 3. 微反应器与间歇式反应器运行时, 浓度场和速度场的对比

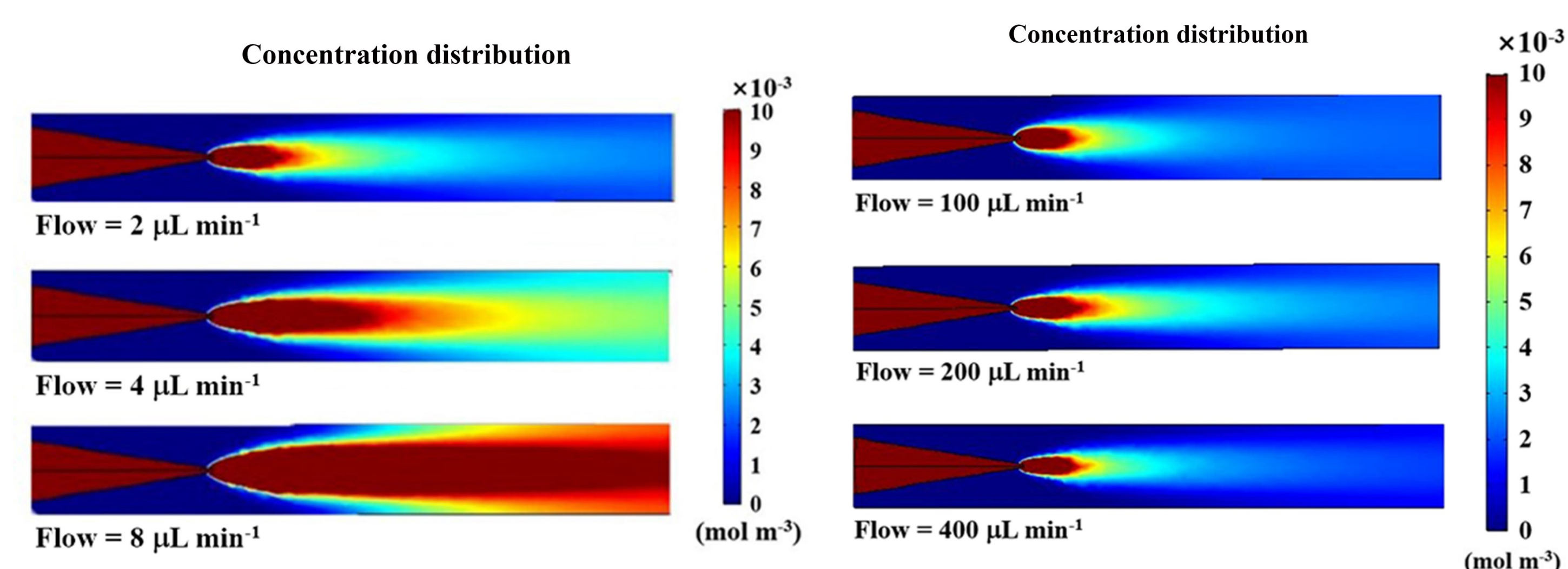


图 4. 改变内相流量和外相流量时, 微反应器内浓度场变化

结论: 仿真结果展示了传统间歇式反应器与微反应器的速度场与浓度场的差异。微反应器中改变不同相的流量也会对浓度场产生影响。这些结果对于对速度场和浓度场敏感的结晶过程是至关重要的。通过对体系的浓度场的计算使得我们合成了高质量的甲胺铅卤钙钛矿纳米晶。同样的类似的结果还可以加入流体传热接口来丰富其结晶领域的应用。结合结晶学原理, 有望可以指导合成所期望的晶体。

参考文献:

1. Li, Chong, et al. "3D-printed continuous flow reactor for high yield synthesis of $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ (X= Br, I) nanocrystals." *Journal of Materials Chemistry C* 7.30 (2019): 9167-9174.)