بررسی پارامتری جامع لایه کاتالیست کاتدی پیل سوختی غشا تبادل پروتون بر اساس ساختار کلوخهای

باقر كاظمى نسب '، سوسن روشن ضمير '، حسين قدميان "

تاریخ پذیرش مقاله: ۹۳/۳/۲۵ تاریخ دریافت مقاله: ۹۲/۱۰/۱۸

چکیدہ:

لایه کاتالیست اغلب نازکترین لایه در پیل سوختی است، اما به خاطر چند فازی، تخلخل و واکنشهای الکتروشیمیایی پیچیدهترین قسمت است. عملکرد پیل سوختی غشا تبادل پروتون شدیداً متأثر از عملکرد لایه کاتالیست کاتد است. در این تحقیق یک مدل یک بعدی، دما ثابت و پایا با ساختار کلوخهای برای لایه کاتالیست کاتد در نظر گرفته شده و توسعه یافته است. پس از نوشتن معادلات حاکم لایه کاتالیست، معادلات دیفرانسیلی برای متغیرهای مستقل دانسیته جریان، غلظت اکسیژن و افت فعال سازی حاصل شده که به همراه شرایط مرزی مربوطه یک دستگاه معادلات دیفرانسیل معمولی مرتبه اول غیرخطی را تشکیل میدهند. دستگاه معادلات با کد نویسی در نرمافزار Matlab نسخه ۲۰۱۱، به وسیله روش پرتابی و توابع مسئله مقدار مرزی حل شده است. پس از اعتبار سنجی مدل با نتایج تئوری و تجربی، مطالعه پارامتری جامعی از اثر چهارده پارامتر شامل پارامترهای عملیاتی دما، فشار و اشباع آب و پارامترهای ساختاری لایه کاتالیست مانند مقدار پلاتین، جز حجمی یونومر، تخلخل و ضخامت لایه کاتالیست، شعاع و تخلخل کلوخه و غیره بر عملکرد پیل سوختی انجام شده است. مشخص شد که پارامترهای اشاع آب، شعاع کلوخه و جرز حجمی یونومر بیشترین تأثیر را بر عملکرد لایه کاتالیست دارند.

كلمات كليدى:

پيل سوختي غشا تبادل پروتون، مدل كلوخهاي، عملكرد پيل سوختي، مدلسازي لايه كاتاليست كاتد، مطالعه پارامتري جامع

۱) دانشجوی دکتری دانشگاه آزاد اسلامی، واحد علوم و تحقیقات تهران (نویسنده مسئول) ۲) دانشیار دانشگاه علم و صنعت ایران، آزمایشگاه تحقیقاتی هیدروژن و پیل سوختی ۳) استادیار پژوهشگاه مواد و انرژی، پژوهشکده انرژی

b.kazeminasab@srbiau.ac.ir rowshanzamir@iust.ac.ir h.ghadamian@merc.ac.ir

مقدمه

در لایه کاتالیست کاتد پیل سوختی، سرعت پایین واکنش احیای اکسیژن باعث اتلاف ولتاژ زیاد و در نتیجه، افت عملکرد پیل خواهد شد [۱۰]. لایه کاتالیست اغلب نازکترین لایه در پیل سوختی است، اما به خاطر واکنشهای الکتروشیمیایی، چند فازی و تخلخل پیچیدهترین قسمت است [۱۲]. مدلهای اولیه لایه کاتالیست بهصورت لایه خیلی نازک فرض میشد، اما پیشرفتهای بعدی برای آن ضخامت محدود در نظر گرفت. اخیراً تصاویر میکروسکوپی نشان داد که لایه کاتالیست ترکیبی از ذرات پلاتین روی کربن و احاطهشده با لایهای از یونومر است که کلوخه نامیده میشوند [۲]. وانگ^۱ بهطور جامع مدلهای لایه کاتالیست را مرور کرده است [۱۳]. اسحاق نیمور یک مدل شبه هموژن برای مدلسازی لایه کاتالیست توسعه داد و اثر پارامترهای ولتاژ اضافی، هدایت الکترولیت، تخلخل لایه کاتالیست و سطح فعال کاتالیست را بر دانسیته جریان، غلظت اکسیژن و ولتاژ اضافی، هدایت الکترولیت، تخلخل لایه کاتالیست و سطح فعال کاتالیست برای لایه کاتالیست به کار برد، سپس تأثیر سه پارامتر بارگیری پلاتین، ضخامت لایه کاتالیست و مقدار نفیان را بر عملکرد پیل سوختی بررسی و مقادیر بهینه این پارامترها را برای رسیدن به حداکثر جریان محاسبه نمود [۱]. خواجه حسینی یک مدل کلوخهای یکبعدی برای لایه کاتالیست توسعه داد و مقدار بارگیری پلاتین، ضخامت لایه کاتالیست و مقدار نفیان را بر عملکرد پیل سوختی بررسی و مقادیر بهینه این پارامترها را برای رسیدن به حداکثر جریان محاسبه نمود [۱]. خواجه حسینی یک مدل کلوخهای یکبعدی برای لایه کاتالیست توسعه داد و مقادیر پارامترهای بهینه را به دست آورد [۶]. معین جهرمی با

مدل سازی های انجام شده تاکنون یا قابلیت بررسی تعداد اندکی از پارامترهای لایه کاتالیست را داشتند یا دارای فرضیاتی بودند که از دقت مدل می کاست. بنابراین، نیاز به مدل جامع و دقیق حاوی پارامترهای مقدار پلاتین، مقدار کربن، کسر پلاتین به کربن، جز حجمی یونومر، جز حجمی لایه نفوذ گازی وارد شده به لایه کاتالیست، ضخامت یونومر اطراف کلوخه، شعاع کلوخه، تخلخل لایه نفوذ گاز، تخلخل لایه کاتالیست، ضخامت لایه کاتالیست، تخلخل کلوخه و نیز دما، فشار و اشباع آب احساس می شود. در این تحقیق، یک مدل کلوخهای توسعه یافته و سپس مطالعه پارامتری جامع انجام شده است.

مدلسازى لايه كاتاليست كاتد

در این تحقیق، یک مدل یک بعدی، دما ثابت و پایا با ساختار کلوخه ای برای لایه کاتالیست کاتد توسعه یافته است. لایه کاتالیست کلوخه ای شامل یونومر نفیان، پلاتین و کربن است (شکل۱). فرضیات دیگر مدل سازی عبارتند از:

– گازها ایده آل در نظر گرفته می شوند.
 – واکنش از درجه یک نسبت به اکسیژن فرض می شود.
 – کلوخه ها کروی شکل فرض می شوند.
 – حفره های بین کلوخه ها از آب و اکسیژن اشغال شده اند.

1) Wang, C.Y.

(۲)

نرخ واکنش الکتروشیمیایی اکسیژن درون کلوخه موازنه بقای اکسیژن در حالت پایا داخل کلوخه به صورت زیر است [۷]: (۱)

$$V.N_{0_2} = R_{0_2}$$

که _{و R}0 سرعت واکنش و ₂ N₀ بهوسیله قانون فیک بیان می شود [۷]:

 $N_{0_2} = -D_{02,agg}^{eff} \nabla C_{0_2}$



شکل ۱) لایه کاتالیست کاتد پیل سوختی بر مبنای مدل کلوخهای

که Dff ضریب نفوذ مؤثر اکسیژن در کلوخه را نشان میدهد و از رابطه بروگمن به دست میآید [۸]. از جایگذاری معادلات (۲) و سرعت واکنش در معادله (۱) و بسط معادله حاصل خواهیم داشت [۶]:

$$\frac{D_{O_2,agg}^{eff}}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dC_{O_2}}{dr} \right) - k_1 a. C_{O_2} = 0$$
(7)

رابطه (۳) یک معادله دیفرانسیل معمولی مرتبه دوم است که بهصورت تحلیلی حل می شود [۷]:

$$\mathbf{C}^* = \frac{\sinh(3\varphi r)}{r^*\sinh(3\varphi)} \qquad (\varphi = \frac{r_{\text{agg}}}{3} \sqrt{\frac{\mathbf{k}_{\perp} \cdot \mathbf{a}}{\mathbf{D}_{0_{2},\text{agg}}^{\text{eff}}}}) \qquad (\mathsf{F})$$

همچنین فاکتور تأثیر کلوخه به صورت زیر تعریف می شود [۷]:

$$\mathbf{E}_{\mathrm{r}} = \frac{\overline{\mathbf{R}}_{\mathrm{O}2}}{\mathbf{R}_{\mathrm{O}2},\mathrm{max}} = \left[\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{\varphi}} \left(\frac{1}{\tanh\left(3\phi\right)} - \frac{1}{3\phi}\right)\right] \tag{a}$$

نرخ مصرف اكسيژن در واحد حجم لايه كاتاليست مرتبط با دانسيته جريان پروتون i بهصورت زير است [۶]:

$$R_{0_2} \frac{A}{a} = -\frac{1}{4F} V. i \tag{8}$$

از آنجایی که مدل یک بعدی انتخاب شده، می توان **∇.**۱ را با di dz جایگزین کرد. بنابراین [۶]:

$$\frac{\mathrm{di}}{\mathrm{dz}} = 4\mathrm{F}\left(\frac{1}{\mathrm{E_rk_2A}} + \frac{\delta}{\mathrm{a_{agg}D_{O_2}N}}\frac{\mathrm{r_{agg}+\delta}}{\mathrm{r_{agg}}}\right)^{-1}\frac{\mathrm{C}_{O_2}}{\mathrm{H}_{O_2}} \tag{V}$$

نفوذ اكسيژن

نفوذ اکسیژن با استفاده از قانون فیک و بقا مولی اکسیژن به صورت زیر با i مرتبط است [۱۱]:

$$\frac{dC_{O_2}}{dz} = \frac{1 - l_5}{4FD_{O_2}^{\text{eff}}CL} \tag{A}$$

افت فعالسازى

افت فعالسازي يا مقاومتي كه در مقابل انتقال پروتونها و الكترونها وجود دارد، توسط قانون اهم بيان ميشود [١١]:

$$\frac{\mathrm{d}\eta}{\mathrm{d}z} = \frac{\mathrm{i}}{\mathrm{k}^{\mathrm{eff}}} + \frac{\mathrm{i} - \mathrm{I}_{0}}{\sigma^{\mathrm{eff}}} \tag{9}$$

شرايط مرزى

روش حل

معادلات (۷) تا (۹) با شرایط مرزی (۱۰) تا (۱۱) یک دستگاه معادلات دیفرانسیل معمولی با شرایط مرزی را تشکیل

میدهد. در این تحقیق، با کد نویسی در نرمافزار Matlab، دستگاه معادلات به روش پرتابی و مطابق الگوریتم شکل (۲) حلشده است. حدس اولیه برای در Z=0 برابر V 0.1 و در Z=Lc برابر V 0.3 مناسب است.

منحنى عملكرد

$$V_{cell} = V_{ocv} - \eta_{con} - \eta_{act} - R_{ohm} I_{tot}$$
(17)

$$V_{ocv} = 1.229 - 0.85 \times 10^{-3} (T - 298.15) + 4.31 \times 10^{-5} \times T(\ln(P_{H_2}) + 0.5\ln(P_{O_2}))$$
(17)

$$\eta_{\rm con} = \frac{\kappa_{\rm I}}{n_{\rm F}} \ln(1 - I_{\rm g}/I_{\rm lim}) \tag{16}$$

اعتبارسنجى مدل

مدل حاضر با دادههای تجربی چانگ^۱ [۳] و مدلسازی سهبعدی، دوفازی و دما متغیر ابت^۲ [۸] در شکل (۳) مقایسه شده است. چنانچه دیده می شود نتایج حاصل در تمام طول منحنی پلاریزاسیون با نتایج مذکور مطابقت بسیار خوبی دارد. باباراین، اگر از مدل کلوخهای دارای متغیرهای عملیاتی و ساختاری متعددی استفاده شود، حتی فرضهای یک بعدی، دما ثابت و پایا از دقت نتایج نمی کاهد. مقادیر پارامترهای ورودی مدل برای حالت مبنا در جدول (۱) آمده است (۲).

نتايج و بحث

پروفایل متغیرهای مستقل

نتایج مدلسازی نشان میدهد که دانسیته جریان پیل در مرز مشترک لایه نفوذ گاز/ کاتالیست از صفر شروع شده و در مرز لایه کاتالیست/ غشا به مقدار نهایی و برابر دانسیته کل پیل میرسد. افت فعالسازی در مرز لایه نفوذ گاز/ کاتالیست به علت پایین بودن دانسیته جریان کمترین مقدار خود را دارد و در طول لایه کاتالیست افزایش یافته تا در مرز لایه کاتالیست/ غشا به بیشترین مقدار خود برسد. غلظت اکسیژن در مرز لایه نفوذ گاز/ لایه کاتالیست از مقدار اولیه و بیشینه خود در طول لایه کاتالیست کاهش مییابد و در مرز لایه کاتالیست/ غشا به کمترین حد خود میرسد.

1) Chang, W.R. 2) Obut, S.

Downloaded from necjournals.ir on 2025-08-13]



شكل ٢) الكوريتم حل معادلات ديفرانسيل لايه كاتاليست كاتد

اثر دما و فشار بر عملکرد پیل

افزایش فشار و بالطبع افزایش غلظت واکنشگرها مطابق رابطه نرنست، منجر به افزایش ولتاژ مدار باز و نهایتاً ولتاژ و عملکرد پیل سوختی میشود (شکل۴ الف). اگرچه بحث دما در پیل سوختی کمی پیچیده است، اما بهطورکلی، افزایش دما باعث افزایش هدایت یونی، انتقال جرم، انرژی حرارتی داخل سیستم و نرخ واکنش احیای اکسیژن میشود. (شکل۴ ب).

اثر پارامترهای ساختاری لایه کاتالیست

پارامترهای زیادی در ساختار لایه کاتالیست وجود دارند ازجمله ضخامت لایه یونومر اطراف هر کلوخه، شعاع کلوخه، مقدار پلاتین، مقدار کربن، کسر جرمی پلاتین به کربن، جز حجمی یونومر، جز حجمی لایه نفوذ گازی وارد شده به لایه کاتالیست، تخلخل لایه نفوذ گاز، تخلخل لایه کاتالیست، ضخامت لایه کاتالیست و تخلخل کلوخه. علاوه بر پارامترهای ساختاری، پارامتر عملیاتی اشباع آب مایع (8) نیز بر عملکرد پیل اثرگذار است.

اثر تخلخل كلوخه

طبق رابطه بروگمن، با افزایش تخلخل، ضریب نفوذ مؤثر اکسیژن در کلوخه افزایش مییابد. با افزایش تخلخل، یونومر آن افزایش یافته و در نتیجه، رسانایی پروتون نیز افزایش مییابد و نهایتاً دانسیته جریان و توان افزایش مییابد (شکل۵ الف).

واحد / نشانه	مقدار	كميت
T / °C	۶.	دما
P / bar	١/١	فشار
x _{O2} / %	71	کسر مولی اکسیژن در کاتد
8	۰/۵	اشباع آب مایع
$L_{CL}/\mu m$	٣٠	ضخامت لايه كاتاليست
R_{ohmic} / m^2	•/ ۴ Y*1• ^{-۴}	مقاومت اهمى
m_{Pt} / kg m ⁻²	•/••٣	بارگیری پلاتین در واحد سطح کاتد
$_{Pt}/$ kg m ⁻³	714	چگالی پلاتین
$_{\rm C}$ / kg m ⁻³	۱۸۰۰	چگالی کربن
$r_{Pt/c}$	•/٢	کسر جرمی پلاتین به کربن
C_{O2} , ref / mol m ⁻³	۲/۲۸	غلظت اكسيژن مرجع
С	١	ضريب انتقال كاتدى
а	۰/۵	ضریب انتقال آندی
/ ⁻¹ m ⁻¹	۳۰۰	هدایت پروتونی توده
/ ⁻¹ m ⁻¹	۷۲۰۰۰	هدايت الكتروني توده
	۱/۵	پیچش لایه کاتالیست
r_{agg} / μm	• /٣	شعاع كلوخه
agg	۰/۴۵	تخلخل كلوخه كروى
_{agg} / nm	۳۰	ضخامت لايه يونومر اطراف كلوخه
CL	•/٢	تخلخل لايه كاتاليست
g	•/٧۴	تخلخل لايه نفوذ گاز
L _{mc}	- /٣	کسر حجمی یونومر لایه کاتالیست
L_{gc}	•/١	کسر حجمی لایه نفوذ وارد شده به لایه کاتالیست
ap	اگر ap=۳ ۲۰۰۰<	پارامتر تطبيق
	اگر ap=∙/۳ ۲۰۰۰> i	

جدول ۱) مقادیر پارامترهای ورودی مدل (شرایط حالت مبنا) [۸-۳٫۶]

اثر ضخامت لايه كاتاليست

اثر اصلی ضخامت بر بارگیری پلاتین است، هنگامی که L_c افزایش مییابد در m_Pt ثابت، m_c نیز افزایش یافته و باعث کاهش عملکرد در اثر مقاومتهای اهمی میشود. بهطور خلاصه، لایههای ضخیم تر کاتالیست دارای دانسیته جریان و توان بیشتری به واحد سطح کاتالیست است اما لایههای نازک تر دارای بهرموری مؤثر تری هستند (شکل ۵ ب).



شکل ۳) مقایسه نتایج مدل با دادههای تئوری [۸] و تجربی[۳]



شکل ٤) الف _ اثر فشار بر عملکرد پیل در دمای ثابت ب _ اثر دما بر عملکرد پیل در فشار ثابت

اثر ضخامت لايه يونومر اطراف كلوخه

لایه یونومر اطراف کلوخه دو نقش متفاوت انتقال پروتونها و اکسیژن را بر عهده دارد. با افزایش آن، هدایت پروتونی افزایش یافته اما مقاومت در مقابل نفوذ اکسیژن نیز افزایش مییابد. در دانسیتههای پایین جریان، ضخامت لایه یونومر اثر محسوسی بر عملکرد پیل ندارد، اما در دانسیتههای بالای جریان، هنگام افزایش ضخامت لایه یونومر اثر افزایش مقاومت در مقابل نفوذ اکسیژن بر اثر هدایت یونی غلبه میکند و برآیند آن باعث کاهش عملکرد پیل می گردد (شکل۵ج).

اثر تخلخل لايه كاتاليست

تخلخل لایه کاتالیست دو اثر متفاوت بر عملکرد پیل دارد. با افزایش تخلخل، نفوذ اکسیژن افزایش مییابد، از طرفی، با ثابت بودن ضخامت لایه کاتالیست، جز حجمی یونومر و جامد لایه کاتالیست کاهش مییابد که منجر به کاهش انتقال الکترون و پروتون میشود. برآیند این دو اثر باعث کاهش دانسیته جریان و توان به ازای واحد سطح پیل میشود (شکل ۵ د).

اثر تخلخل لايه نفوذ گازى

اثر سه مقدار تخلخل لایه نفوذ گازی بر عملکرد لایه کاتالیست در شکل (۶ الف) نشان داده شده است. بهطوری کـه مشاهده می شود، تخلخل لایه نفوذ گازی تغییر محسوسی بر عملکرد لایه کاتالیست ندارد.

اثر بارگیری پلاتین

با توجه به ارتباط کسر جرمی و بارگیری پلاتین با تغییر m_{Pt} ، یکی از عوامل r_{Pt/c} یا m_c نیز تغییر میکند. با فـرض

ثبات m_c، وقتی m_{Pt} افزایش یابد، یابد، r_{Pt/c} زیاد شده، دو اثر متفاوت بر روی As و a می گذارد به طوری که As کاهش و a افزایش می یابد. برآیند این دو اثر متقابل نشان می دهد که سطح فعال کل در واحد حجم لایـه کاتالیست بـا r_{Pt/c} نسـبت مستقیم دارد. در نتیجه، انتظار می رود با افزایش m_{Pt} و درنتیجه r_{Pt/c} عملکرد پیل بهبود یابد (شکل ۶ ب).

اثر کسر جرمی پلاتین

کسر جرمی پلاتین، مقدار بارگیری پلاتین لایه کاتالیست را به ازای مقادیر ثابت پارامترهای دیگر بیان میکند. افزایش ۲_{Pt/c} مقدار بارگیری پلاتین را افزایش و سطح فعال مخصوص ذرات کاتالیست را کاهش میدهد. برآیند این دو اثر متقابل نشان میدهد که سطح فعال کل در واحد حجم لایه کاتالیست، با ۲_{Pt/c} متناسب است (شکل ۶ ج).

شعاع كلوخه

با افزایش شعاع کلوخه، حجم جامد افزایش و حجم یونومر کاهش مییابد. افزایش جز جامد باعث افزایش هـدایت الکتریکی شده اما به خاطر کاهش یونومر هدایت پروتونی کاهش مییابد. در مجموع، با افزایش شعاع کلوخه، عملکرد پیـل خصوصاً در دانسیتههای بالا جریان کاهش یافته که بیانگر غلبه هدایت یونی بر هدایت الکتریکی است (شکل ۶ د).

اثر جز حجمي يونومر

با افزایش L_{mc} تا ۳۰٪ ، عملکرد پیل بهطور قابل توجهی افزایش یافته، سپس ثابت شده و در مقادیر بزرگتر بویژه در دانسیتههای بالا کاهش می ابد. بهطور کلی، L_{mc} دو اثر متفاوت بر عملکرد پیل دارد؛ با افزایش آن، مقادیر م و D_{O2} کاهش اما رسانایی مؤثر پروتون افزایش می یابد. بر آیند این دو اثر متفاوت، در شکل (۷ الف) نشان داده شده است.





شکله) اثر پارامترهای ساختاری لایه کاتالیست بر عملکرد آن: الف ـ تخلخل کلوخه ب ـ ضخامت لایه کاتالیست ج ـ لایه یونومر اطراف کلوخه د ـ تخلخل لایه کاتالیست

اثر بارگیری کربن

طبق رابطه کسر جرمی و بارگیری پلاتین، چنانچه m_c افزایش یابد، با ثابت بودن $r_{Pt/c}$ مقدار m_p افزایش مییابـد. از طرفی، هنگامی که m_c افزایش مییابد، سهم ذرات کربن افزایش یافته، c_0 و D_{02} کاهش مییابد که باعث افت عملکـرد خواهد شد. به عبارتی، افزایش m_c دو اثر متقابل بر عملکرد دارد که برآیند آنها باعث کاهش عملکرد پیل می گردد (شـکل ب).

اثر اشباع آب

اشباع آب یکی از پارامترهای عملیاتی لایه کاتالیست است که با افزایش آن، به دلیل افزایش مقاومت در برابـر نفـوذ اکسیژن، ضریب نفوذ مؤثر اکسیژن کاهش مییابد که افت عملکرد را سبب میشود. اشباع آب جـز مـؤثرترین پارامترهـای لایه کاتالیست است و زمانی که مقدار آن از ۵/. بزرگتر شود، باعث افت شدید عملکرد پیل خواهد شد (شکل۷ ج).



شکل٦) اثر پارامترهای ساختاری لایه کاتالیست بر عملکرد آن: الف ـ تخلخل لایه نفوذ گازی بـ ـ بارگیری پلاتین ج ـ کسر جرمی پلاتین به کربن د ـ شعاع کلوخه

جز حجمي لايه نفوذ گازي وارد شده به لايه كاتاليست

هنگام پرس کردن مجموعه الکترود-غشا^۲، مقداری کمی از ماده لایه نفـوذ گـازی بـه داخـل لایـه کاتالیسـت نفـوذ میکند. با افزایش L_{ec} عملکرد پیل به علت کاهش ضریب نفوذ اکسیژن بهطور جزئی کاهش مییابد (شکل۲ د).

نتيجەگىرى

بهطوری که مشاهده شد، نتایج حاصل از مدلسازی لایه کاتالیست در تمام طول منحنی پلاریزاسیون با نتایج تجربی و

¹⁾ Gas Diffusion Layer (GDL)

²⁾ Membrane Electrode Assembly (MEA)

تئوری مطابقت بسیار خوبی دارد که علت آن در نظر گرفتن ساختار کلوخهای و تعدد پارامترهای عملیاتی و ساختاری لایه کاتالیست است. همچنین فرضهای یک بعدی، دما ثابت و پایا نهتنها دقت نتایج را کاهش نداده، بلکه باعث که هش حجم وزمان محاسبات نیز شده است. اثر چهارده پارامتر شامل سه پارامتر عملیاتی و یازده پارامتر ساختاری لایه کاتالیست بر عملکرد پیل بررسی گردید. افزایش دما و فشار باعث افزایش عملکرد پیل شده در صورتی که با افزایش اشباع آب بویژه در دانسیتههای جریان بالا عملکرد پیل کاهش یافته است. افزایش ضخامت لایه کاتالیست در مقدار ثابت پلاتین تا مقدار مشخصی و نیز تخلخل کلوخه ها باعث بهبود عملکرد شده است در صورتی که افزایش تخلخل لایه کاتالیست در مقدار ثابت ضخامت لایه کاتالیست و ضخامت لایه یونومر اطراف کلوخه عملکرد را کاهش داده است. افزایش مقدار پلاتین و نیز کسر جرمی پلاتین عملکرد پیل را بهبود بخشید. از طرفی، افزایش مقدار کربن و قطر کلوخه ها باعث افت عملکرد پیل شده است. با افزایش جز حجمی یونومر تا ۳۰٪ حجمی، عملکرد پیل افزایش یافته است. نهایتا مشخص شد پارامترهای تخلخل لایه نفوذ گاز و مقدار ماده لایه نفره راه ده به لایه کاتالیست تا باین و نیز



منابع

۲٨

- [2] Castagne, D., (2008) "Mathematical modeling of PEM Fuel Cell cathodes", *MS Thesis, Department of Chemical Eng. Queen's Univ.*, Kingston, Ontario, Canada.
- [3] Chang, W.R., et. al., (2007) "Effect of clamping pressure on the performance of a PEM fuel cell, *Journal of Power Sources*, Vol.166, pp. 149-154.
- [4] Eshagh Nimvar, T., et. al., (2004) "Modeling of the cathode catalyst layer in PEM fuel cell", 9th Iranian Ch. Eng. Congress, 23-25 November.
- [5] Gao, F., et. al., (2012) Proton Exchange Membrane Fuel cell Modeling, John Wiley & Sons, USA., pp. 30-36,72-83.
- [6] Khajeh-Hosseini-Dalasm, N., et.al., (2012) "A study of the agglomerate catalyst for the cathode side of a proton exchange membrane fuel cell: Modeling and optimization", *Electrochimica Acta*, pp. 6055-6065.
- [7] Moein-Jahromi, M., Kermani M.J., (2012) "Performance prediction of fuel cell cathode catalyst layer using agglomerate model", *International journal of hydrogen energy*, Vol.37, pp. 17954-17966.
- [8] Obut, S., Alper E., (2011) "Numerical assessment of dependence of polymer electrolyte membrane fuel cell performance on cathode catalyst layer parameters", *Journal of power sources*, Vol. 196, pp.1920-1931.
- [9] O'hyre, R.P., et. al., (2006) Fuel Cell Fundamentals, John Wiley & Sons, New York.
- [10] Othman, R., et al., (2012) "Review of Non precious metal catalysts for the PEM fuel cell cathode", *International journal of hydrogen energy*, Vol.37, pp. 357-372.
- [11] Song, D., et. al., (2005) "A method for optimizing distributions of Nafion and Pt in cathode catalyst layers of PEM fuel cells", *Electrochimica Acta*, V0I. 50, pp. 3347–3358.
- [12] Spiegel, C., (2008) PEM fuel cell modeling and simulation using Matlab. Elsevier Inc.
- [13] Wang, C.Y., (2004) "Fundamental models for fuel cell engineering", Chem. Rev. Vol. 104, pp. 4727-4766

حروف يونانى		نشانه ها	
ضريب انتقال	А	مساحت سطح فعال کلوخه، m ⁻¹	а
ضخامت لايه يونومر،m	agg	${ m m}^{-1}$ کل مساحت سطح فعال جانبی کلوخه در واحد حجم لایه کاتالیست،	a _{agg}
تخلخل كلوخه	agg	کل مساحت سطح فعال کلوخه در واحد حجم لایه کاتالیست، m ⁻¹	А
تخلخل لايه كاتاليست	с	مساحت سطح واکنش در واحد جرم پلاتين، m² Kg ⁻¹	As
تخلخل لايه نفوذ	g	${ m mol}~{ m m}^{-3}$ غلظت،	с
افت فعالسازى،V		لايه كاتاليست	CL
$\mathrm{Kg}\mathrm{m}^{-3}$ دانسیته کربن	с	${ m m}^2~{ m s}^{-1}$ ضریب نفوذ،	D _{O2}
دانسيته پلاتين، ³⁻ Kg m	Pt	$\mathrm{m}^2~\mathrm{s}^{-1}$ ضريب نفوذ نودسن،	D _{Kn}
هدایت الکترونی، S m ⁻¹		فاكتور تأثير	Er
هدایت پروتونی، ¹⁻ S m		کسر جرمی پلاتین به کربن	r _{Pt/c}
مدول تیل		ثابت فارادی، ⁻¹ couloms mol	F
پیچش لایه کاتالیست		لايه نفوذ گازي	GDL
ويسكوزيته آب،cP	$\mu_{\rm H2O}$	ثابت بدون بعد هنری	H _{O2}
پارامتر تجمع آب		دانسیته جریان محلی، ^{2–} A m	i
زيرنويس ها		دانسیته جریان تبادلی، ^{2–} A m	i ₀
		A m $^{-2}$ دانسیته جریان کل	Ι
آند	a	ثابت سرعت واکنش، ⁻¹ m s	k _l
كلوخه	agg	ضخامت لایه کاتالیست،m	lc
اكسيژن	02	کسر حجمی لایه نفوذ وارد شده به لایه کاتالیست	Lg,c

حروف يونانى		نشانه ها	
نفيان	Ν	کسر حجمی یونومر لایه کاتالیست	Lm,c
شعاع	r	جرم مولکولی، ¹⁻ kg mol	М
واکنش درجه اول	1	مجموعه الكترود-غشا	MEA
شرايط مرجع	ref	بارگیری پلاتین، ^{2–} kg m	m _{Pt}
لايه كاتاليست	CL	بارگیری کربن، ² -kg m	m _C
کاتد	с	شار مولی اکسیژن حلشده در یونومر کلوخه	N _{O2}
گاز	g	معادله ديفرانسيل معمولى	ODE
آب	W	m^{-3} ،تعداد کلوخهها در واحد حجم لایه کاتالیست	n _{agg}
کل	tot.	فشار،Pa	Р
مقاومت اهمى	ohm.	توان پیل،W	P _{cell}
ولتاژ مدار باز	ocv.	شعاع کلوخه،m	r _{agg}
غلظت	con.	نرخ مولی اکسیژن حلشده در واحد کلوخه، mol m	R
فعال سازى غلظت	act.	ثابت جهانی گاز، ¹⁻¹ K mol	R
بالانويس ها		اشباع آب مایع	S
مۇثر	eff	دما،K	Т
شعاع یا غلظت نسبی	*	m³،حجم،	V
مرجع	ref	ولتاژ پیل،V	Vcell
		مختصات،m	r, z