

مدل سازی الکتروشیمیایی عملکرد SOFC صفحهای (Flat Plate SOFC)

سید احسان مجتبوی^۱، مرتضی بقالها^۲ دانشگاه صنعتی شریف-دانشکده مهندسی شیمی و نفت <u>ehsanmojtabavi@yahoo.com</u>

چکیدہ

پیلهای سوختی امروزه به عنوان یکی از گزینههای تولید انرژی الکتریکی در مقیاس نیروگاهی مطرح شدهاند. SOFC یکی از انواع پیلهای سوختی با دمای بالاست که امروزه بسیار مورد توجه قرار گرفته است. این مقاله مدل سازی الکتروشیمیایی SOFC صفحهای را به وسیله کد کامپیوتری نرم افزار MATLAB برای تعیین ولتاژ عملیاتی سلول انجام داده است. مهمترین بخش در مدل سازی الکتروشیمیایی SOFC محاسبه تلفات ولتاژ در سلول است. تلفات اهمی، تلفات اکتیواسیون و تلفات نفوذ سه عامل افت ولتاژ سلول هستند. در مقادیر پایین دانسیته جریان مهمترین منبع اتلاف ولتاژ در سلول تلفات اکتیواسیون است. تلفات اهمی و نفوذ با افزایش دانسیته جریان افزایش می ابند. با افزایش دانسیته جریان به بیش از (۸/m^۲) ۲۶۰۰ تلفات اهمی بالاترین تلفات ولتاژ را در سلول را به خود اختصاص میدهد. تلفات نفوذ نیز در مقادیر بالای دانسیته جریان قابل ملاحظه خواهد شد. از طرف دیگر کاهش تخلخل و قطر منافذ الکترودها سبب افزایش تلفات نفوذ در سلول می شود.

وازههای کلیدی: Flat Plate SOFC – مدل سازی الکتروشیمیایی – افت ولتاژ در سلول

۱. مقدمه

پیل سوختی یک راکتور الکترو شیمیایی است که انرژی شیمیایی را به صورت الکتروشیمیایی به انرژی الکتریکی تبدیل می کند. در سادهترین حالت ساختمان پیل سوختی از دو الکترود (کاتد و آند) تشکیل شده است که توسط یک الکترولیت به هم متصل شدهاند.

پیلهای سوختی دما بالا(High Temperature Fuel Cells) که در دماهای عملیاتی بالا مورد بهـره بـرداری قـرار مـی گیرنـد. معمولاً برای مصارف Co-generation یا تولید همزمان انرژی الکتریکی و حـرارت بکـار مـیرونـد. SOFC یکـی از انـواع ایـن پیلهای سوختی است.

در SOFC اکسیژن یا هوا به عنوان گاز اکسید کننده در کاتد تزریق می شود. گاز اکسیژن الکترونها را از مدار خارجی گرفته و تبدیل به یونهای اکسیژن می گردد. یونهای اکسیژن از طریق الکترولیت به طرف آند هدایت می شوند. در آند یونهای اکسیژن با هیدروژن ترکیب شده و تشکیل آب داده و منجر به آزاد شدن الکترون می شوند. الکترونهای آزاد شده در آند از طریق مدار خارجی به طرف کاتد حرکت می کنند و آب تشکیل شده به شکل بخار به همراه اکسیژن اضافی و سوخت مصرف نشده محفظه سلول را ترک می کنند.

واکنشهای الکترو شیمیایی که در آند و کاتد انجام می شود و واکنش کلی سلول به شکل زیر هستند:

۱ - دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک - سیستمهای انرژی
 ۲ - استادیار دانشکده مهندسی شیمی و نفت - دانشگاه صنعتی شریف



$$Cathode = O_2 + 4\bar{e} \rightarrow 2O^{2-}$$
(1)

$$Anode = H_2 + O^{2-} \rightarrow H_2O + 2\bar{e}$$
(2)

$$Overall = H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$$
(3)

همانطور که در واکنشهای فوق دیده می شود، به ازای تولید هر ملکول آب و مصرف هر ملکول هیدروژن، دو الکتـرون یـا $2N_A$ الکترون(که N_A عدد آووگادرو میباشد) از طریق مدار خارجی منتقل میشوند. اگر e برابر بار یـک الکتـرون باشـد، میـزان بـار الکترون(که منتقل شده برابر خواهد بود با:

 $-2N_{A}e = -2F$ (4) در رابطه فوق F ثابت فارادی یا بار یک مول الکترون است. اگر E برابر ولتاژ سلول باشد، کار الکتریکی انجام شده در انتقال الکترونها از آند به کاتد برابر خواهد بود با:

 $W_{el} = \text{charge} \times \text{voltage} = -2FE$ (5) اگر سیستم را بازگشت پذیر تصور کنیم، کار الکتریکی انجام شدہ با انرژی آزاد گیبس آزاد شدہ برابر خواہد بود. لـذا خـواهیم داشت:

$$\Delta G = -2FE \qquad (6)$$
$$E = \frac{-\Delta G}{2F} \qquad (7)$$

معادله فوق نیروی محرکه الکتریکی استاندارد یا Electromtive force) EMF) را که اغلب به آن پتانسیل بر گشت پذیری استاندارد اطلاق میشود را برای یک سلول نشان میدهد. برای واکنش کلی سلول در دماها و فشارهای مختلف، انرژی آزاد گیبس تشکیل واکنش را میتوان به صورت زیر بیان کرد.

$$\Delta G = \Delta G^0 - RT \ln(\frac{PH_2 PO_2^{1/2}}{PH_2 O})$$
(8)

p که در این رابطه ΔG^0 نمایانگر تغییر انرژی آزاد گیبس واکنش کلی در شـرایط اسـتاندارد اسـت. همچنـین در رابطـه فـوق فشار جزیی واکنش دهندهها و محصولات را نشان میدهد. بنابراین ولتاژ سلول مدار – باز برگشت پذیر را می توان به صورت زیر نوشت:

$$E = \frac{-\Delta G^{0}}{nF} + \frac{RT}{nF} \ln(\frac{PH_{2}PO_{2}^{1/2}}{PH_{2}O})$$
(9)

در سلولهای SOFC ولتاژ برگشت پذیر سلول به دلیل افتهای ولتاژ اهمی، اکتیواسیون و نفـوذ تـا ولتـاژ عملیـاتی کـاهش پیـدا میکند.

۲- مدل سازی الکتروشیمیایی SOFC صفحهای

مدل سازی الکتروشیمیایی و حرارتی دو نوع مدل سازی هستند که تا به حال در مورد SOFC انجام شده اند. مدل سازی الکتروشیمایی، مقدار انرژی الکتریکی تولید شده در سلول را مورد بررسی قرار می دهد و مدل سازی حرارتی نحوه انتقال حرارت، توزیع دما و تغییرات دما را در سلول مورد بررسی قرار می دهد.



در مدل سازی الکترو شیمایی، هر سلول به تعداد زیادی المان حجمی تقسیم می شود که هر المان متشکل از کاتـد، آنـد و الکترولیت به همراه کانال عبور هوا و سوخت می باشد. این المانها هر یک راکتـور الکتروشـیمایی هـستند کـه انـرژی الکتریکـی توسط واکنشهای الکتروشیمایی در آنها تولید می شود. حل معادلات الکتروشیمیایی در مورد هر یک از ایـن راکتورهـا جریـان و ولتاژ عملیاتی آنها را تعیین می کند. در نهایت به وسیله انتگراسیون تمامی این المانهای حجمی، ولتاژ و جریان عملیـاتی سـلول مشخص می شود.

مهمترین بخش در مدل سازی الکتروشیمیایی SOFC محاسبه تلفات ولتاژ در سلول است که در این مقاله هر یک از تلفات به صورت مجزا مورد بررسی قرار می گیرد.

۲-۱- افت ولتاژ در سلول

نتایج عملی نشان میدهد که ولتاژ جریان الکتریکی تولید شده، هنگام گذر کردن از سلولها کاهش مییابد. افت ولتاژ در سلولهای SOFC به سه دسته تقسیم میشود. نفوذ اکسیژن و هیدروژن از داخل جریان اکسید کننده و سوخت گازی به منافذ الکترودهای کاتد و آند و نفوذ از این منافذ به مکانهای انجام واکنشTTPB (Triple Phase Boundary) منجر به اتلاف ولتاژ نفوذ در سلول میشود. در مقابل حرکت الکترونها در بستر فلزی نیز مقاومت اهمی وجود دارد که منجر به تلفات اهمی میشود. سومین عامل افت ولتاژ در سلول تلفات ولتاژ اکتیواسیون است. انرژی فعال سازی مورد نیاز برای انجام واکنشهای الکتروشیمیایی به دلیل بازگشت ناپذیری موجب کاهش ولتاژ سلول میشود. بنابراین این تلفات موجب کاهش ولتاژ ایده آل سلول تا ولتاژ واقعی یا عملیاتی خواهد شد.

 $U = E - V_{Pol}$ (10) در رابطه فوق V_{pol} تلفات پولاریزاسیون را نشان میدهد که شامل تلفات اهمی، اکتیواسیون و نفوذ میباشد.

$$V_{Pol} = \eta_{ohm} + \eta_{act} + \eta_{diff}$$
(11)

۱-۱-۲- تلفات اهمی

محاسبه تلفات اهمی در SOFC صفحهای به شکل هندسی سلول و جنس الکترودها، الکترولیت و اتصال دهندههای درونی AEC وابسته است. تلفات اهمی در سلول به دو بخش تقسیم میشود. بخش اول تلفات در ساختار AEC وابسته است. تلفات اهمی در انصال دهندههای (Anode/Electrolyte/Cathode) است که V_{AEC} نامیده میشود و بخش دوم مربوط به تلفات در اتصال دهندههای درونی (Interconnect) است.

$$\eta_{ohm} = V_{AEC} + V_{IC} = I \times \sum_{k=1}^{3} R_k + I \times R_{IC}$$
(12)

که در رابطه فوق I نشان دهنده جریان سلول و R_k نشان دهنده مقاومت آند، الکترولیت و کاتد است. که میتوان مقادیرشان را از قانون اهم محاسبه کرد:

$$R_{k} = \frac{\rho_{k} \times \delta_{k}}{A_{k}} \tag{13}$$

در رابطه بالا A_k نشان دهنده سطح موثر k امین جزء در لایه AEC و δ_k ضخامت آن جزء میباشد. ho_k نیز مقاومت ویژه هـر یک از اجزاء را نشان میدهد که با توجه به جنس هر یک تعیین میشود.



ولی محاسبه مقاومت مربوط به اتصال دهندههای درونی به دلیل شکل هندسی آنها از محاسبه مقاومت در ساختار AEC پیچیده تر است. ازای محاسبه مقاومت در است. [۱] در این پیچیده تر است. برای محاسبه مقاومت در اتصال دهندههای درونی روشی توسط Solheim توسعه داده شده است. [۱] در این روش اتصال دهندههای درونی می شود. مقاومت هر یک از قسمتها با توجه به هندسه و مقاومت و تر نهایت با محاسبه مقاومت هر سه قسمت مقاومت اتصال دهنده می می شود. مقاومت های درونی محاسبه مقاومت در اتصال دهنده می درونی روشی توسط Solheim توسعه داده شده است. [۱] در این موش اتصال دهندههای درونی می شود. مقاومت هر یک از قسمتها با توجه به هندسه و مقاومت و تر نهایت با محاسبه مقاومت هر سه قسمت مقاومت اتصال دهنده درونی محاسبه می شود. مقاومت هر یک از مسمتها با توجه به مندسه و در نهایت با محاسبه مقاومت هر سه قسمت مقاومت اتصال دهنده درونی قابل محاسبه است و در نهایت با محاسبه مقاومت هر سه قسمت مقاومت اتصال دهنده درونی محاسبه است و در نهایت با محاسبه مقاومت هر سه قسمت مقاومت اتصال دهنده درونی قابل محاسبه است و در نهایت با محاسبه مقاومت هر سه قسمت مقاومت اتصال دهنده درونی قابل محاسبه است و در نهایت با محاسبه مقاومت هر می می می شود.

۲-۱-۲- تلفات اكتيواسيون

محاسبه تلفات اکتیواسیون آندیک و کاتدیک از طریق معادله چگالی جریان-پتانسیل (Current density-overpotental) که به نام معادله معادله Bulter-Volmer شناخته می شود مقدور است.

$$i = i_0 \{ \exp(\beta \, \frac{nF\eta_{act}}{RT}) - \exp[-(1-\beta) \frac{nF\eta_{act}}{RT}] \}$$
(14)

که β در این رابطه ضریب انتقال (Transfer coefficient) و i_0 چگالی جریان تبادلی (Exchange current density) نامیده می شود. پارامتر ضریب انتقال به عنوان ضریبی از تغییرات پولاریزاسیون در نظر گرفته می شود که در نهایت منجر به تغییر ثابت سرعت واکنش خواهد شد. مقدار این متغیر برای پیل سوختی معمولاً برابر ۵/۰ در نظر گرفته می شود.[۳،۲] چگالی جریان تبادلی در حقیقت سرعت رفته می شود.[۳،۲] چگالی جریان تبادلی در حقیقت سرعت رفت و برگشت واکنش الکترودی در پتانسیل تعادلی است. چگالی جریان تبادلی بالا به معنی سرعت یا در می شود.[۴،۲] چگالی جریان تبادلی در حقیقت سرعت رفت و برگشت واکنش الکترودی در پتانسیل تعادلی است. چگالی جریان تبادلی بالا به معنی سرعت بالای واکنش الکتروشیمیایی است که در این حالت کارایی عملکرد بالایی برای پیل سوختی مورد انتظار است.[۴] معندی معادله (۱۴) را می توان به صورت کاربردی تر دو حالت بازنویسی کرد. اگر پولاریزاسیون اکتیواسیون دارای مقدار بالایی باشد. معادله (۱۴) را می توان به صورت کاربردی تر در دو حالت بازنویسی کرد. اگر پولاریزاسیون اکتیواسیون دارای مقدار بالای باشد. مقدار اولین ترم نمایی بسیار بزرگتر از ترم دوم خواهد بود. لذا می توان از ترم دوم در مقابل ترم اول صرفنظر کرد. لذا معادله

$$\eta_{act} = -\left(\frac{RT}{\beta nF}\right)\ln(i_0) + \left(\frac{RT}{\beta nF}\right)\ln(i) = a + b \times \log(i)$$
(15)

در حالت دوم پولاریزاسیون اکتیواسیون پایین بررسی میشود. در این حالت عبارت نمایی در معادله (۱۱) را میتوان به صورت سری باز کرد. از ترمهای بزرگتر از ترمهای خطی میتوان صرفنظر کرد.[۳] در این شرایط رابطه پتانسیل-جریان به صورت زیـر خواهد بود:[۵]

$$\eta_{act} = \frac{RT}{nFi_0}i$$
(16)

بنابراین نمودار i برحسب η در ناحیه تلفات پایین به صورت خطی خواهد بود. بهترین ملاک تشخیص بالا یا پایین بودن تلفات اکتیواسیون، بررسی عبارت شرطی روبرو در هر بار تکرار محاسبات است.

 $\frac{F\eta_{act}}{n_e RT} < 1.0 \tag{17}$



۳-۱-۲-تلفات نفوذ

سرعت انتقال جرم در نواحی انجام واکنش که در محیط متخلخل الکترودها در SOFC واقع شدهاند را می توان توسط تئوری نفوذ گاز در محیطهای متخلخل تشریح کرد. واکنش کنندهها باید از منافذ محیط متخلخل الکترود نفوذ کرده و به محل انجام واکنش برسند. به همین ترتیب محصولات واکنش نیز در جهت مخالف یعنی از داخل محیط متخلخل به داخل گاز نفوذ می کنند. در این زمان پولاریزاسیون غلظت حائز اهمیت است. هنگامی که در سلول جریان تولید می شود، ف شار جزیی در مکانهای انجام واکنش کمتر از فشار جریان بالک گاز می باشد. پولاریزاسیون غلظت نرمال هنگامی به اتلاف ولتاژ زیاد نزدیک می شود که جریان به جریان محدود کننده(Limiting current) نزدیک شود. جریان محدود کننده هنگامی برقرار می شود که مهمترین مکانیزم اتلاف ولتاژ در الکترودها به صورت نفوذ باشد که این حالت در غلظتهای پایین واکنش دهنده و یا درصد تبدیل ۱۰۰٪ واکنش رخ می دهد.

فرض می کنیم فشار جزیی واکنش دهندهها و محصولات در جریان بالک با اندیس "0" و فـشار جزیـی آنهـا در مکانهـای انجـام واکنش را با اندیس "*" نشان داده شود. در این حالت پتانسیل سلول هنگامی که جریان برابر صفر و هنگامی که جریان برابـر i میباشد را میتوان به صورت زیر نوشت:

$$E_{i=0} = E_0 + \frac{RT}{nF} \ln(\frac{P_{H_2}^0 P_{O_2}^{01/2}}{P_{H_2O}^0})$$
(18)

$$E_{i=i} = E_0 + \frac{RT}{nF} \ln(\frac{P_{H_2}^* P_{O_2}^{*1/2}}{P_{H_2O}^*})$$
(19)

بنابراین تلفات نفوذ η_{diff} به صورت زیر محاسبه خواهد شد:

$$\eta_{diff} = E_{i=i} - E_{i=0} = \frac{RT}{nF} \ln(\frac{P_{H_2}^* P_{H_2O}^0}{P_{H_2}^0 P_{H_2O}^0}) + \frac{RT}{2nF} \ln(\frac{P_{O_2}^*}{P_{O_2}^0})$$
(20)

اولین ترم در طرف راست معادله بالا تلفات نفوذ آندی و دومین ترم تلفات نفوذ کاتدی را نشان میدهد. در طرف کاتد، نفوذ اکسیژن را میتوان یک بعدی فرض کرد. ولی به دلیل اینکه نیتروژن در واکنش شرکت نمی کند، فلاکس کلی جرمی نفوذ نیتروژن به مکانهای انجام واکنش و نفوذ از این مکانها برابر صفر است. برای محاسبه پولاریزاسیون نفوذ درکاتد، رابط ه $y_{O_2}^0$ در معادله (۲۰) مشخص شده است.[8]

$$y_{O_2}^* = 1 + (y_{O_2}^0 - 1) \times \exp(\frac{iRTt_{ca}}{4FD_{eff,ca}P})$$
(21)

از معادلات (۲۰) و (۲۱) می توان افت ولتاژ ناشی از نفوذ در کاتد را برحسب تابعی از جزء مولی اکسیژن در بالک محاسبه نمود.

$$\eta_{diff,ca} = \frac{RT}{2nF} \ln[\frac{1}{y_{O_2}^0} - (\frac{1}{y_{O_2}^0} - 1)\exp(\frac{iRTt_{ca}}{4FD_{eff,ca}P})]$$
(22)

در طرف آند، واکنش شیمیایی در انتهای مسیر نفوذ و در ناحیه مشترک میان آند و الکترولیت انجام می شود. مسیر نفوذ در واقع تمامی ضخامت آند _a است. همانند کاتد، محاسبه پولاریزاسیون نفوذ از طریق معادله (۲۰) نیازمند مشخص بودن جزء

یازدهمین کنگره ملی مهندسی شیمی ایران تهران – دانشگاه تربیت مدرس – ۷ الی ۹ آذرماه ۱۳۸۵



مولی واکنش دهندهها و محصولات در انتهای مسیر نفوذ است. این بدان معناست که ابتـدا بایـد مقـادیر اجـزاء مـولی در بالـک یعنی ₁4₄ و $y_{H_2O}^*$ را تعیین نمود.[۶]

$$y_{H_{2}}^{*} = y_{H_{2}}^{0} - \frac{iRTt_{an}}{2FD_{eff,an}P}$$

$$y_{H_{2}O}^{*} = y_{H_{2}O}^{0} + \frac{iRTt_{an}}{2FD_{eff,an}P}$$
(23)
(24)

با جایگزینی معادلات (۲۳) و (۲۴) در معادله (۲۰) می توان پولاریزاسیون نفوذ را در آند به صورت زیر محاسبه کرد:

$$\eta_{diff,an} = \frac{RT}{nF} \ln(\frac{1 - \frac{iRt_{an}}{2FD_{eff,an}y_{H2}^{0}P}}{1 + \frac{iRt_{an}}{2FD_{eff,an}y_{H2O}^{0}P}})$$
(25)

۲–۲–**ضریب نفوذ موثر** ضریب نفوذ موثر را میتوان با استفاده از فرمول Bosanquet محاسبه کرد.[۷]

$$\frac{1}{D_{\text{eff}}} = \frac{1}{D_{12}} + \frac{1}{D_{1K}}$$
(26)

Spotz و Bird ،Hirschfelder که ضریب نفوذ برای سیستمهای دو جزئی D_{12} را می توان از معادله پیشنهاد شده توسط Bird ،Hirschfelder و Spotz محاسبه نمود.[۲]

$$D_{12} = 1.858 \times 10^{-7} \times \frac{T^{3/2} \times (\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2})^{1/2}}{P \times \sigma_{12}^2 \times \Omega_D}$$
(27)

مقادیر σ_{12} و σ_D که پارامترهای Lennard-Jones نامیده می شوند را می توان در کتابهای مرجع یافت. ضریب نفوذ Knudsen برای جزء اول(هیدروژن یا اکسیژن) از تئوری جریان ملکولی قابل محاسبه است.

$$D_{1K} = \frac{3}{3} \times r_e \times v_1 \tag{28}$$

که در این فرمول r_e شعاع موثر و v_1 سرعت ملکولی میانگین برای جزء اول است.

$$v_1 = \left(\frac{8RT}{\pi M_1}\right)^{1/2}$$
(29)

یازدهمین کنگره ملی مهندسی شیمی ایران تهران – دانشگاه تربیت مدرس – ۷ الی ۹ آذرماه ۱۳۸۵



در مورد مواد متخلخل، معادلات (۲۷) و (۲۸) به وسیله θ که بیانگر تخلخل الکترودهاست بازنویسی می شود که جهت محاسبه کاهش سطح مقطع عرضی استفاده می شود. معادلات همچنین بر τ تقسیم می شوند که پارامتر پیچ وخم(Tortuosity factor) منافذ است. این فاکتور جهت محاسبه افزایش طول نفوذ ناشی از پیچ وخم در منافذ حقیقی و تأثیرات تنگی انتهای منافذ استفاده می شود. در نهایت از معادله (۲۶) خواهیم داشت:

$$D_{\text{eff}} = \frac{D_{12} \times D_{1K} \times \theta}{(D_{12} + D_{1K}) \times \tau}$$
(30)

۴– نتایج مدل سازی

مدل سازی برای SOFC صفحهای با سلول مربع شکل هم دما به ابعاد 10*cm*×10*cm* انجام شده و کد کامپیوتری توسط نرم افزار MATLAB نوشته شده است. هر سلول به ۳۲۴ المان مربع شکل تقسیم شده است که مساحت سطح هر المان برابر ۳۱/۳۶ میلیمتر مربع است. جریان سوخت و هوا به صورت هم جهت فرض شده و معادلات برای حالت یکنواخت نوشته شده است.(شکل ۱) علاوه بر این فرض شده است که توزیع گازها در داخل کانالها یکنواخت باشد.



شکل۱: شکل المان حجمی و جانمایی آند، کاتد، الکترولیت و اتصال دهنده درونی

شکل هندسی سلول و المان حجمی در محاسبه تلفات ولتاژ اهمی و اکتیواسیون تأثیر گذار است. جدول(۱) ابعاد قسمتهای مختلف المان را نشان داده است.

۰/۰۰۵۶ (m)	d1	طول المان
۰/۰۰۵۶ (m)	d1	عرض المان
۰/۰۰۰۵(m)	δ_{c}	ضخامت كاتد
۰/۰۰۰۱۵ (m)	δ_{e}	ضخامت الكتروليت
۰/۰۰۰۵(m)	$\delta_{_a}$	ضخامت آند
۰/۰۰۲۵ (m)	d2	ارتفاع اتصال دهنده دروني
•/•• (m)	d4	ارتفاع کانال عبور سوخت و هوا
۰/۰۰۳(m)	d3	عرض کانال عبور سوخت و هوا

جدول۱: ابعاد قسمتهای مختلف المان حجمی



تخلخل الکترودها، قطر و پارامتر پیچ وخم منافذ از جمله ثوابتی هستند که مقدار آنها به جنس الکترودها بستگی دارد و به عنوان متغیرهای تأثیر گذار روی مدل پولاریزاسیون نفوذ به شمار میروند. نمودار(۱) تأثیر تغییرات تخلخل را روی تلفات نفوذ نشان میدهد. محدوده نرمال مقدار پارامتر پیچ وخم منافذ برای مواد متخلخل $6 \ge \tau \ge 2$ است که برای مواد بکار رفته در SOFC نیز در مقالات مختلف گزارش شده است.[۹] تخلخل نیز معمولاً بالاتر از ۱/۲ میباشد.[۹] تخلل کمتر مواد و قطر کوچکتر منافذ عبور تلفات بیشتر نفوذ را به دنبال دارد.(تأثیر مربوط قطر منافذ در شکل نشان داده نشده است.)

با افزایش دانسیته جریان مقدار تلفات نفوذ افزایش مییابد.(نمودار ۱) به طوریکه در مقادیر بالای دانسیته جریان تلفات نفوذ قابل ملاحظه خواهد شد. افزایش یا کاهش دانسیته جریان وابسته به ضخامت الکترودها است. با افزایش ضخامت الکترودها دانسیته جریان نیز افزایش مییابد. ولی افزایش ضخامت الکترودها میزان نفوذ واکنش دهندهها را به مکانهای انجام واکنش در سطح مشترک الکترودها و الکترولیت کاهش میدهد و همین موضوع منجر به بالاتر رفتن تلفات نفوذ در سلول میشود.



شکل۱: تأثیر تغییرات تخلخل روی تلفات نفوذ در سلول

با افزایش دانسیته جریان، تلفات اهمی نیز تقریباً به صورت خطی افزایش مییابند.(نمودار۲) در مقادیر پایین دانسیته جریان مهمترین منبع تلفات ولتاژ در سلول تلفات اکتیواسیون است. ولی با افزایش دانسیته جریان تلفات اهمی و بعد از آن تلفات نفوذ مهمترین منبع تلفات ولتاژ در سلول هستند.





شکل۲: تغییرات افت ولتاژ اکتیواسیون و اهمی با دانسیته جریان

تغییرات تلفات اهمی، اکتیواسیون و نفوذ در سلول با تغییرات دانسیته جریان در نهایت منجر به تغییرات ولتاژ نهایی سلول با دانسیته جریان خواهد شد. همانطور که در نمودار(۳) نشان داده شده است. ولتاژ سلول با افزایش دانسیته جریان کاهش مییابد. با رسم این نمودار برای هر سلول میتوان دانسیته جریان و ولتاژ عملیاتی بهینه سلول را برای دستیابی به حداکثر توان مشخص نمود.



۵- نتیجه گیری

مدل سازی الکترو شیمیایی SOFC صفحهای مقدار تلفات اهمی، اکتیواسیون و نفوذ را با توجه به مشخصات فیزیکی الکترودها و دانسیته جریان در سلول تعیین میکند. ولتاژ ایدهآل سلول به دلیل تلفات ذکر شده تا ولتاژ عملیاتی کاهش مییابد. با افزایش دانسیته جریان تلفات اهمی و نفوذ در سلول افزایش مییابد. تلفات اکتیواسیون نسبت به دانسیته جریان دارای یک



مقدار كمينه است. با افزايش دانسيته جريان در ابتدا تلفات اكتيواسيون و يس از آن تلفات اهمي و نفوذ مهمترين منبع تلفات در سلول هستند. كاهش تخلخل الكترودها سبب افزايش تلفات نفوذ در سلول مى شود. ولتاژ عملياتى سلول نيز با افزايش دانسىتە جريان كاھش مےيابد.

۶- منابع

- 1. A.Solheim and K. Nisancioglu, Resistance and Current distribution in fuel Cell Elements, Second International Symposium on SOFC, Athens, Greece, July 1991.
- J.M. Bockris and S. Srinivasan, Fuel Cells: Their Electrochemistry, McGraw-Hill, New York, USA, 1969.
 P.Costamagna, Modeling of Solid Oxide Heat Exchanger Integrated Stacks and Simulation at high Fuel Cell Utilisation, Electrochemical Society Proceedings, Vol. 145, No. 11, pp. 3995-4007, 1998.
- 4. T.Takahashi and N.Q. Minh, Science and Technology of Ceramic Fuel Cell, Elsevier Science, B.V. Amsterdam, The Netherlands, 1995.
- 5. M. Lemanski, J. Badur, Parametrical analysis of a tubular pressurized SOFC. The Szewalski institue of fluid-flow machinery, Polish academy of sciences, archives of thermodynamics, No. 153-72, 2004
- 6. A. Selimovic, Solid Oxide Fuel Cell Modeling for SOFC/Gas Turbine Combined Cycle Simulations, Technical report, ISRN LUTMDN/TMVK-7039-SE, Lund University, Department of Heat and Power Engineering, 2000.
- 7. A.F. Mills, Basic Heat and Mass Transfer, IRWIN, Irwin heat transfer series, Boston, USA, 1995
- 8. R.B. Bird, W.E. Stewart and E.N. Ligthfoot, Transfer Phenomena, John Willey & Sons, New York, USA 1960.
- 9. U.G. Bossel, Facts and Figures, Final report on SOFC data, International Energy Agency report, Operating task II, Swiss Federal Office of Energy, 1992.

یازدھمین کنگرہ ملی مہندسی شیمی ایران تهران – دانشگاه تربیت مدرس – ۷ الی ۹ آذرماه ۱۳۸۵



Electro-chemical modeling of the operation of flat plate SOFC

Seyed Ehsan Mojtabavi, Morteza Baghalha Sharif University of technology, chemical engineering Department ehsanmojtabavi@yahoo.com

Abstract

Nowadays, fuel cell is considered as an important option in the production of electrical energy in the power plant scale. SOFC is one of the high temperature fuel cells which have recently gained significance. This paper is to apply the electro-chemical modeling of the flat plate SOFC by means of MATLAB computer software code to demonstrate the performance voltage of the cell. The most integral part in the SOFC electro-chemical modeling is demonstrating the losses of voltage in cell. The ohmic, activation and diffusion overvoltage are 3 factors in the loss of voltage in cell. In low current density the most important cause of the voltage subsidence is considered to be the overvoltage in the activation process. Ohmic and diffusion overvoltage increase along with the increase in the current density. By the increase in the current density to higher than 2600(A/m²) the ohmic overvoltage will devote the highest overvoltage in the cell to itself. In high current density the diffusion overvoltage will also become significant. On the other hand decrease in porosity and the diameter of the electrode's pores will cause an increase in the diffusion overvoltage of the cell.

Keywords: Flat plate SOFC, Electro-chemical modeling - loss of voltage in cell