

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СЛОЕВ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ С ТВЕРДЫМ ПОЛИМЕРНЫМ ЭЛЕКТРОЛИТОМ

Баранов И.Е.*, Николаев И.И., Григорьев С.А., Белоглазов В.Ю.

Российский Научный Центр «Курчатовский институт»

Россия, 123182, Москва, пл. Курчатова 1

* E mail: iv3000@mail.ru

Топливные элементы с твердополимерным электролитом широко предлагаются в качестве автономных источников тока. На их основе возможно создание силовых установок для транспортных приложений. Среди преимуществ таких установок – простота устройства, высокий КПД.

Производительность топливного элемента в значительной степени определяется качеством разработки его каталитических слоев. Основной задачей разработки каталитических слоев является создание оптимальной структуры слоя. В таком слое должна реализоваться максимально большая поверхность раздела между частицами катализатора и электролита, при обеспечении хорошей электронной и ионной проводимости. Необходимо так же обеспечить транспорт газообразных реагентов по разветвленной пористой системе существующей в каталитическом слое. Для обеспечения хорошей электронной и ионной проводимости в слое необходимо существование систем замкнутых частиц – катализатора и электролита. Таким образом, в слое должно существовать три системы замкнутых между собой частиц или объемов: система частиц катализатора, электролита и пор. Необходимость существования в слое трех замкнутых систем приводит к тому, что объемная доля каждой системы оказывается невелика, что может привести к потере протекания в ней. Все это говорит о сложности задачи создания оптимального слоя и необходимости широкого использования методов моделирования.

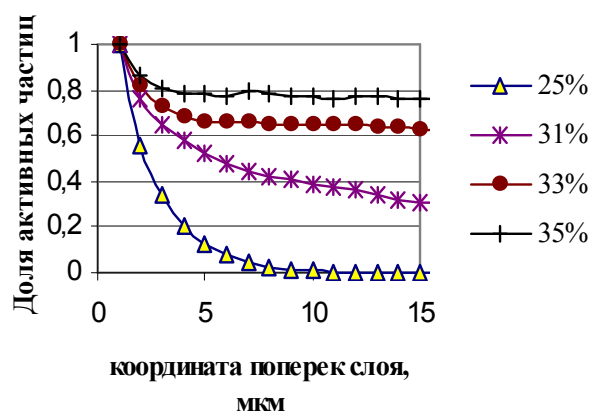


Рис 1. Распределение активных частиц по толщине каталитического слоя, при различной объемной доле катализатора. Размер частиц катализатора 1 мкм.

В результате численного моделирования структуры каталитического слоя, с использованием метода Монте-Карло и положений перколяционной теории, удалось установить существование двух эффектов, существенно влияющих на производительность каталитических слоев. Это эффект граничного увеличения количества активных частиц (электрически связанных с коллектором тока) за счет контакта с плоскостью токоподвода отдельных изолированных кластеров. (Рис. 1)

Второй эффект – эффект формы частиц приводит к снижению перколяционного предела для частиц существенно неравноосной формы. (Рис 2.).

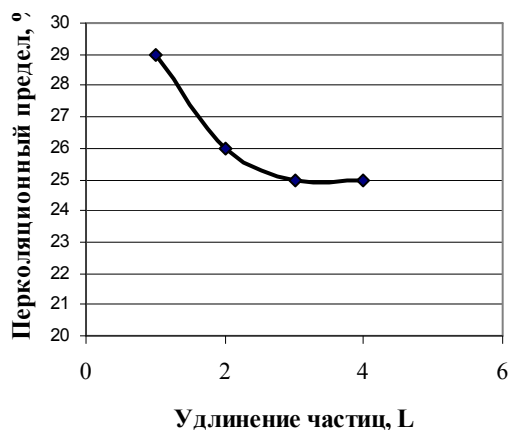


Рис 2. Зависимость перколяционного предела от удлинения частиц. Размеры частиц - 3*3*3L.

Перколяционные эффекты также учитывались в модели макрокинетики и переноса реагентов по пористой системе каталитического слоя. Моделирование позволило рассчитать условия затопления анодного слоя водой, выделяющейся в результате реакции.

Дан перколяционный критерий доли затопленных пор. Критический размер пор $d_{кр}$, заполненных жидкостью, можно найти из следующего условия:

$$\frac{\int_{-\infty}^{\infty} f(r)dr}{\int_{-\infty}^{\infty} f(r)dr} = 0,31$$

где: $f(r)$ - функция объемного распределения пор по размерам; 0,31 - перколяционный предел. Из этого уравнения можно найти диаметр, выше которого поры заполнены жидкостью, а ниже газом.

Экспериментальные исследования показали влияние структуры и состава слоя на его производительность. Показано, что при концентрации иономера близкой к перколяционному пределу, наблюдается максимальная производительность слоя.

Литература

1. И.Е. Баранов, В.Н. Фатеев, Сысоев А.В.; Моделирование тонких слоев катализатора со случайным расположением частиц // Доклады Академии наук, "Химия".-1997. -Т.354. -№1. -С.55-58.
2. Баранов И.Е. и др.; Моделирование каталитических слоев топливного элемента с твердополимерным электролитом //Электрохимия, Том 33(1997), №8, стр.967-970.
3. Чирков Ю.Г. Пшеничников А.Г. // Электрохимия,. Том 29 (1993). № 10. стр.1216.