

Modelowanie mikrostrukturalnych uwarunkowań procesów zachodzących w porowatych elektrodach węglanowego ogniwa paliwowego

STRESZCZENIE

Węglanowe ogniwa paliwowe to urządzenia, które służą do wytwarzania energii elektrycznej na drodze bezpośredniej konwersji z energii chemicznej paliwa, bez potrzeby spalania. Głównym problemem, który utrudnia ich komercjalizację na dużą skalę w obszarze urządzeń stacjonarnych, jest koszt produkowanej energii w porównaniu do konwencjonalnych technologii. Problem ten może być rozwiązany dzięki opracowaniu nowych materiałów i technologii materiałowych zapewniających uzyskanie ogniw o wyższej wydajności i trwałości a jednocześnie tańszych. Dotychczasowe wyniki badań pokazują, że poprzez optymalizację mikrostruktury elektrod ogniwa można znacząco poprawić sprawność ogniw węglanowych. Jednak pomimo wielu lat badań eksperymentalnych rola mikrostruktury i jej parametrów w kształtowaniu procesów i co za tym idzie właściwości ogniw nie została wystarczająco opisana.

W niniejszej pracy podjęto analizę mikrostrukturalnych uwarunkowań podstawowych procesów występujących w trakcie pracy węglanowego ogniwa paliwowego, z wykorzystaniem nowoczesnych technik obrazowania oraz modelowania komputerowego. W pierwszym etapie badań opracowano metodykę generacji reprezentatywnych mikrostruktur katod węglanowego ogniwa paliwowego, wytwarzanych metodą odlewania z gęstwy. Opracowany model bazował jedynie na danych wejściowych z informacjami o składzie gęstwy z procesu wytwarzania i został dopasowany oraz zweryfikowany poprzez porównanie ilościowe z obrazami tomograficznymi rzeczywistych mikrostruktur materiałów katod. Umożliwiło to odwzorowanie struktury już istniejących materiałów, a także generację nowych wariantów materiałowych, bez konieczności ich wytwarzania i charakteryzacji.

Następnie opracowane modele mikrostruktur zostały wykorzystane jako geometria przy symulacjach numerycznych przepuszczalności gazowej oraz podciągania kapilarnego elektrolitu wewnątrz mikrostruktury porowatej. Przeprowadzona została gruntowna analiza ilościowa podstawowych parametrów porowatości, takich jak porowatość otwarta, rozkład wielkości porów, krętość kanałów oraz powierzchnia właściwa. Następnie zbadany był wpływ wymienionych parametrów na efektywność procesu transportu reagentów gazowych do strefy reakcji. Z kolei badania podciągania kapilarnego umożliwiły określenie wpływu mikrostruktury na proces formowania się interfejsu faza gazowa/elektrolit. Otrzymane wyniki porównano z osiąganymi węglanowego ogniwa paliwowego wykorzystującego wytworzone katody. Na podstawie analizy wyników, zaproponowany został dodatkowy mechanizm reakcji katodowej, tłumaczący uzyskaną poprawę wydajności.

Słowa kluczowe: mikrostruktura, katoda, węglanowe ogniwa paliwowe, modelowanie komputerowe

ABSTRACT

Molten carbonate fuel cells are devices, which generate electricity directly through conversion of the chemical energy of the fuel, without the need for combustion. The main challenge hindering their large-scale commercialization in stationary applications is the cost of the produced energy compared to conventional technologies. This problem can be addressed by developing new materials and material technologies that provide higher efficiency and durability while being more cost-effective. Previous research results indicate that by optimizing the microstructure of electrodes, the efficiency of carbonate fuel cells can be significantly improved. However, despite many years of experimental research, the role of microstructure and its parameters in shaping the processes and, consequently, the properties of fuel cells have not been sufficiently described.

This study presents an analysis of the microstructure parameters influencing the fundamental processes occurring during the operation of a molten carbonate fuel cell, using advanced imaging techniques and computer modeling. In the initial stage of the research, a methodology was developed for the generation of representative microstructures of cathodes of the molten carbonate fuel cell manufactured by tape casting method. The model developed here relied solely on the input data regarding the composition of the cast in the fabrication process and was adjusted and verified through quantitative comparison with tomographic images of actual cathode microstructures. This enabled good representation of the existing material microstructures and the design of new material variants without the need for their production and characterization.

Then, the developed microstructure models were utilized as geometries in numerical simulations of gas permeability and capillary rise of the electrolyte within the porous microstructure. A thorough quantitative analysis of key porosity parameters, such as open porosity, pore size distribution, tortuosity, and specific surface area, was conducted. Subsequently, the impact of these parameters on the efficiency of the gas transport process to the reaction zone was examined. Furthermore, investigations of capillary action enabled the determination of how the microstructure affects the formation of the gas/electrolyte interface. The results within these studies were compared with the performance of a molten carbonate fuel cell utilizing the manufactured cathodes. Based on the analysis of the results, an additional mechanism of cathodic reaction was proposed, explaining the achieved improvement in the fuel cell efficiency.

Keywords: microstructure, cathode, molten carbonate fuel cells, computer modeling