

# КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА  
на тему:

**«Моделирование твердооксидных топливных  
элементов с различными материалами  
электролитов»**

Выполнил:

Научный руководитель:

# Цель и задачи

**Цель** - построить модель ячейки для создания инструмент, помогающего оптимизировать конструкции и процессы работы ячеек ТОТЭ.

## **Задачи:**

1. Выбрать физические явления;
2. Построить 3D модель ячейки и определить границы модели
3. Установить параметры в соответствии с требованиями модели.
4. Назначение параметров для газодиффузионных электродов и газовых каналов.
5. Создание сетки модели.
6. Проведение сравнения ячеек с различными электролитами.

# Актуальность

Быстрое сокращение невозобновляемых источников энергии и ухудшение экологической ситуации ставят человечество перед проблемой поиска новых способов производства электроэнергии. Большинство возможных источников энергии либо не используются, либо используются неэффективно. Например, не используется энергия свального газа. Любое хозяйство ежедневно производит отходы. В Казани производится более 9,5 млн. тонн отходов в год. Все эти отходы отправляются на полигоны. Газ, который накапливается на полигонах, состоит из 40-75%  $\text{CH}_4$ , и 25-50%  $\text{CO}_2$ , включая небольшие примеси  $\text{H}_2\text{S}$  и органических веществ. Большинство полигонов этот газ либо сжигают в факелах, либо сжигают его в механических двигателях для производства электроэнергии. Проблема этих методов в крайне малой эффективности, а так же то, что происходит не полное сжигание газа, что может привести к загрязнению окружающей среды. Проблему свалочного газа можно решить применением твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ). Твердооксидные топливные элементы способны преобразовать напрямую химическую энергию свалочного газа в электрическую энергию с КПД не менее 60 %. Эффективным способ создания ТОТЭ с заданной толщиной электролита является способ магнетронного распыления слоев ТОТЭ. С помощью этого метода можно задать определенную толщину электролита.

# Программное обеспечение

## Интерфейсы:

1. Secondary Current Distribution;
2. Darcy's Law;
3. Transport of Concentrated Species;
4. Heat Transfer in Porous Media.

## Системные требования:

5. Объем оперативной памяти не менее 4 ГБ;
6. 64-разрядный процессор Intel® или AMD® на базе архитектуры Intel® 64 или AMD64;
7. Для установки требуется 10 ГБ на диске.

Для отрисовки геометрии топливного элемента использовалась программа “Solidworks 2019”.

# Моделирование топливного элемента

Основой уравнения диффузии и конвекции Максвелла-Стефана является:

$$\frac{d\rho\omega_i}{dt} + \nabla(j_i + \rho\omega_i u) = R_i$$

Газовые потоки в открытых каналах моделируются с уравнения Навье-Стокса:

$$\rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + u \nabla u \right) = -\nabla p + \nabla(\mu(\nabla u) + (\nabla u)^T) - \frac{2}{3}\mu(\nabla u)I + F$$

Скорости течения в пористых газодиффузионных электродах определяются с помощью уравнений Бринкмана

$$\nabla p = -\frac{\mu}{k} v + \mu_e \nabla^2(v)$$

Уравнение кинетики переноса заряда

$$i_{a,c_t} = i_{0,a} \left( \left( \frac{c_{h2}}{c_{h2,ref}} \right) \exp \left( \frac{0.5F}{RT} \eta \right) - \left( \frac{c_{h2o}}{c_{h2o,ref}} \right) \exp \left( \frac{-1.5F}{RT} \eta \right) \right)$$

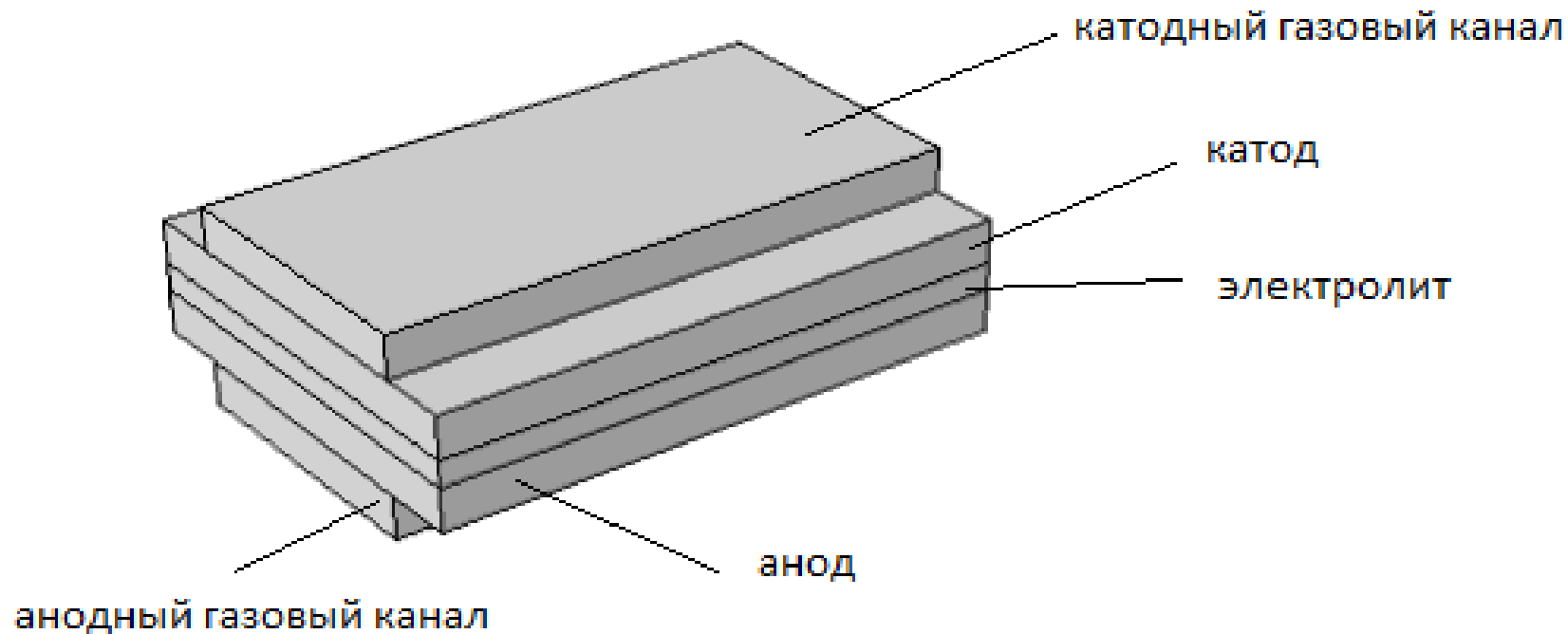
Перенапряжение определяется следующим образом

$$\eta = \Phi_{electronic} - \Phi_{ionic} - \Delta\Phi_{eq},$$

Кинетика переноса заряда катода задается формулой,

$$i_{c,c_t} = i_{0,c} \left( \exp \left( \frac{3.5F}{RT} \eta \right) - x_{o2} \left( \frac{c_t}{c_{o2,ref}} \right) \exp \left( \frac{-0.5F}{RT} \eta \right) \right)$$

# Геометрия топливного элемента

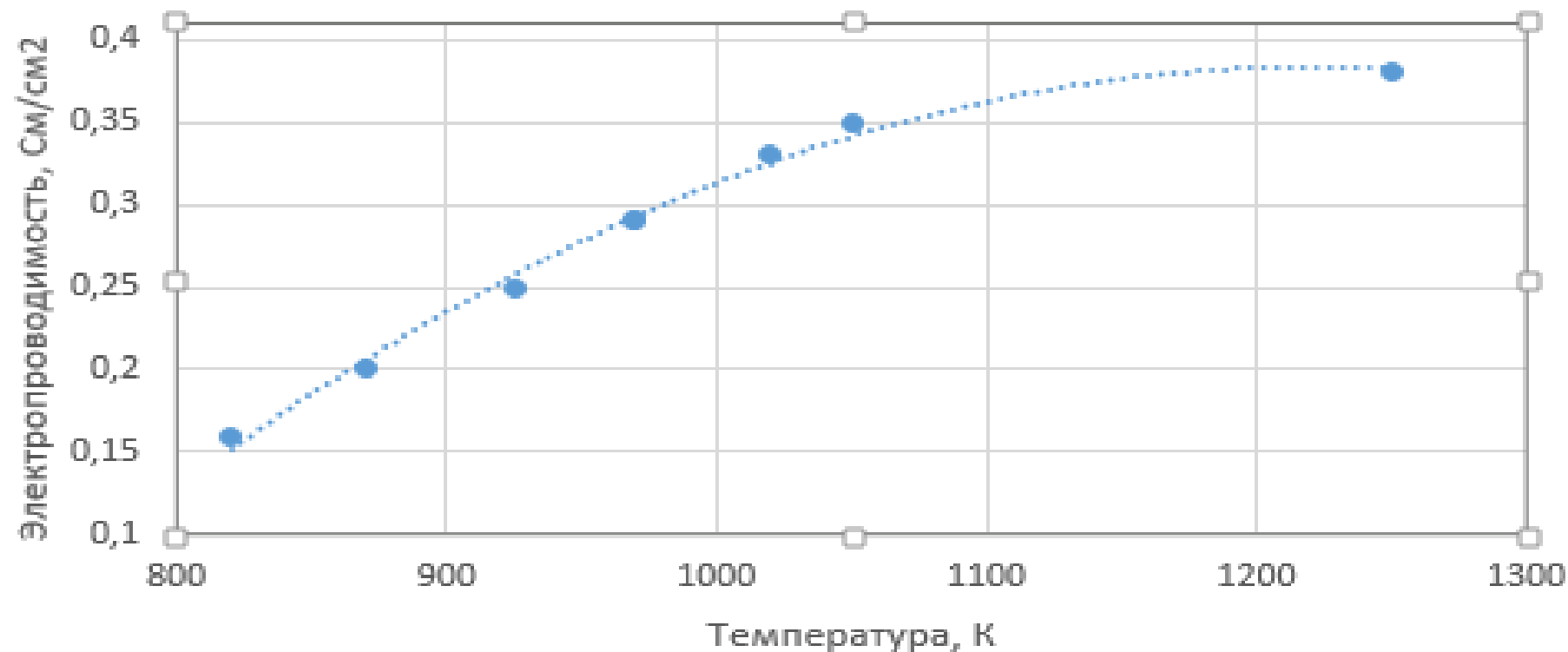


# Экспериментальные данные проводимости электролита LSGM

| Температура, К | Электропроводность, См/см <sup>2</sup> |
|----------------|----------------------------------------|
| 1250           | 0,38                                   |
| 1050           | 0,35                                   |
| 1020           | 0,33                                   |
| 970            | 0,29                                   |
| 925            | 0,25                                   |
| 870            | 0,2                                    |
| 820            | 0,16                                   |

# Проводимость от температуры

Проводимость LSGM



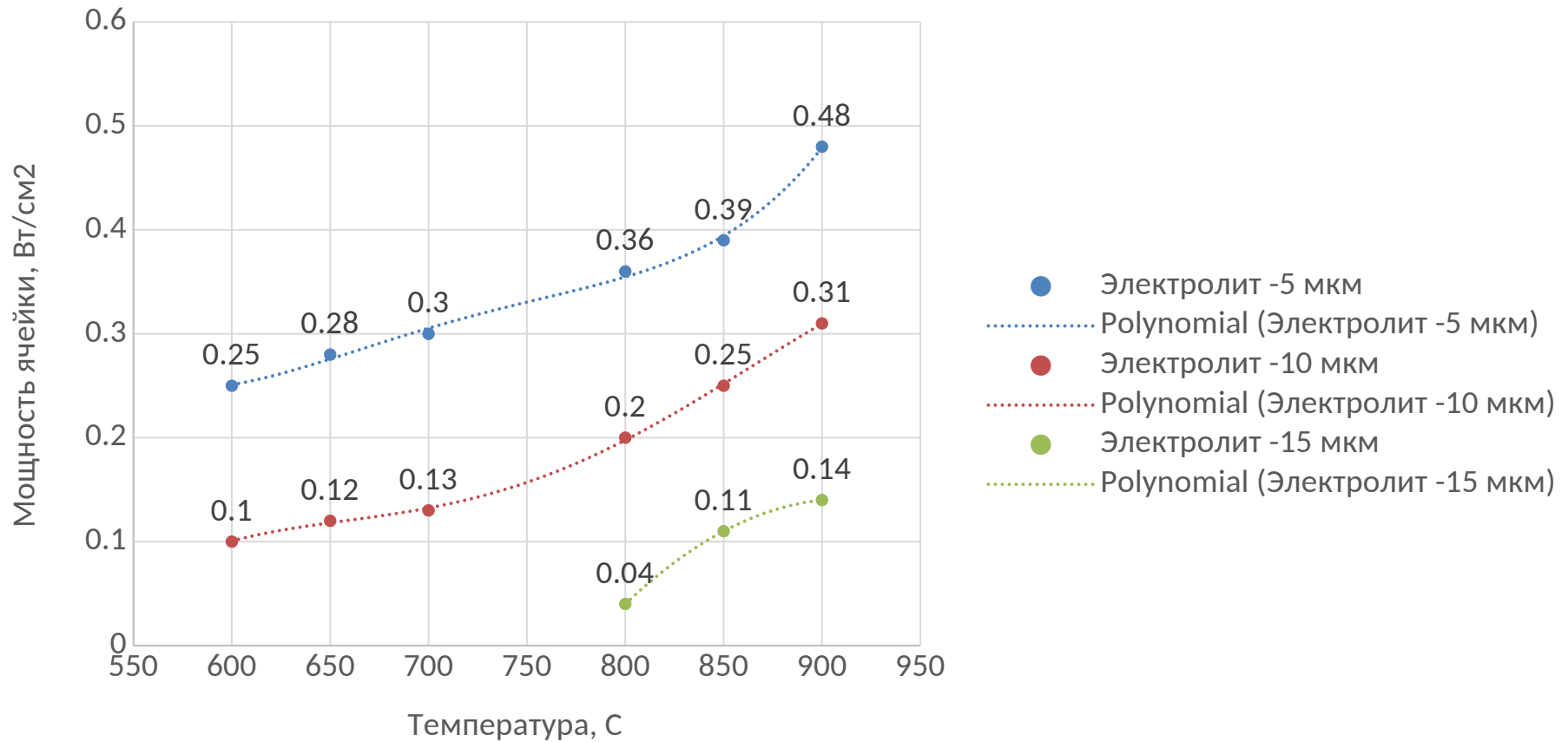
# Экспериментируемые ячейки

| № | Катод                                                           | Электролит                                                          | Анод |
|---|-----------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------|------|
| 1 | $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_{3-x}$                | $\text{ZrO}_2\text{-Y}_2\text{O}_3$                                 | Ni   |
| 2 | $\text{Sm}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_3$                        | $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{MnO}_{3-x}$     | Ni   |
| 3 | $\text{Y}_{0.8}\text{Ca}_{0.2}\text{BaCo}_4\text{O}_{7+\delta}$ | $\text{BaCe}_{0.5}\text{Zr}_{0.3}\text{Y}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$ | Ni   |

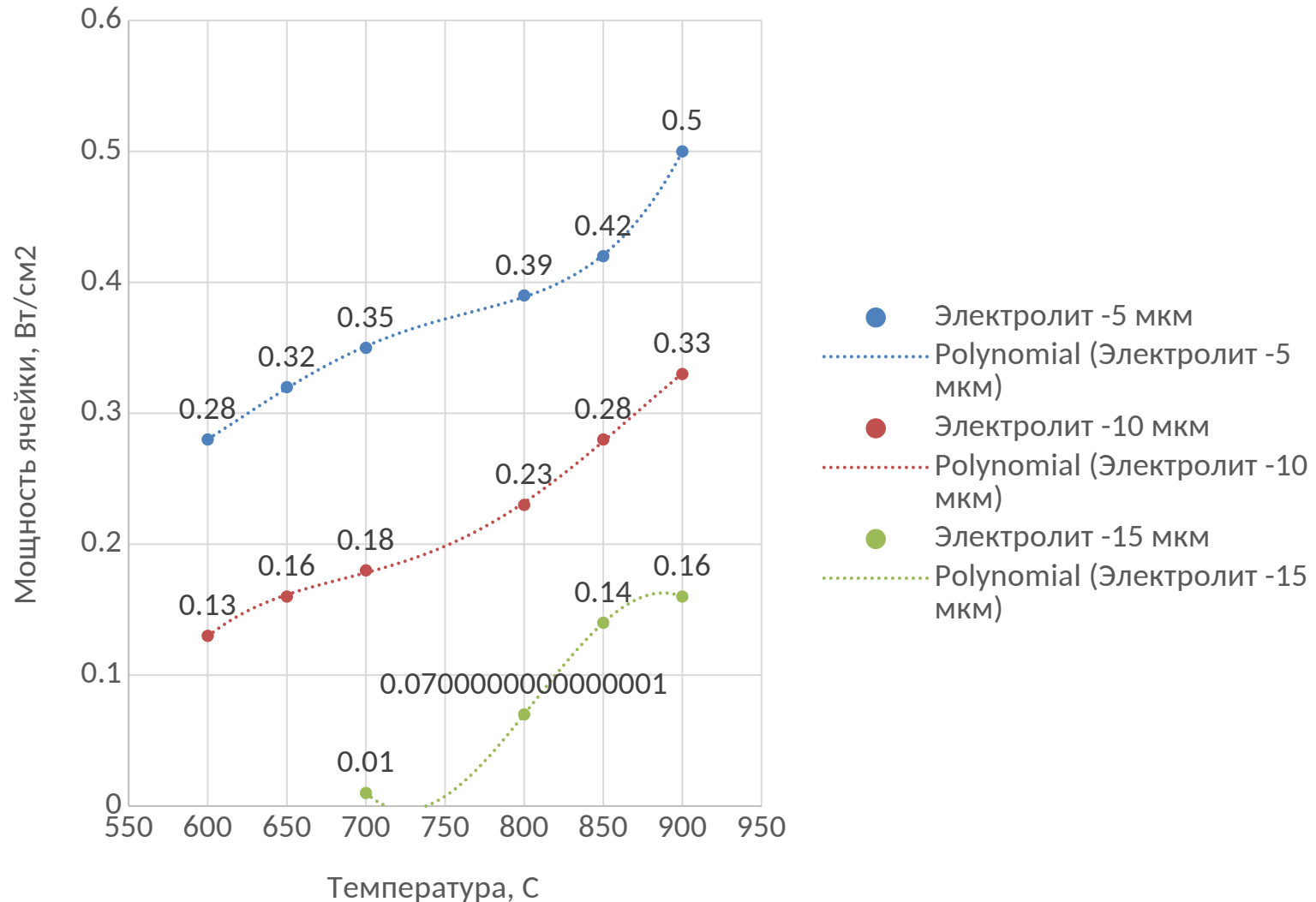
# Параметры модели

|        |                     |                                 |
|--------|---------------------|---------------------------------|
| p_atm  | 1[atm]              | Атмосферное давление            |
| T      | от 600 до 900[degC] | Температура                     |
| mu     | 3e-5[Pa*s]          | Вязкость воздуха                |
| dp_a   | 2[Pa]               | Разность давления, анод         |
| dp_c   | 6[Pa]               | Разность давления, катод        |
| i0_a   | 0.1[A/m^2]          | Плотность обменного тока, анод  |
| i0_c   | 0.01[A/m^2]         | Плотность обменного тока, катод |
| Sa_a   | 1e9[1/m]            | Удельная поверхность анода      |
| Sa_c   | 1e9[1/m]            | Удельная поверхность катода     |
| V_pol  | 0.05[V]             | Начальная поляризация ячеек     |
| perm_a | 1e-10[m^2]          | Проницаемость анода             |
| perm_c | 1e-10[m^2]          | Проницаемость катода            |
| Eeq_a  | 0[V]                | Равновесное напряжение, анод    |
| Eeq_c  | 1[V]                | Равновесное напряжение, катод   |
| V_cell | Eeq_c-Eeq_a-V_pol   | Напряжение ячейки               |
| vh2    | 6,00E-06            | Кинетический объем, H2          |
| vo2    | 16.6e-6             | Кинетический объем, O2          |
| vn2    | 17.9e-6             | Кинетический объем, N2          |

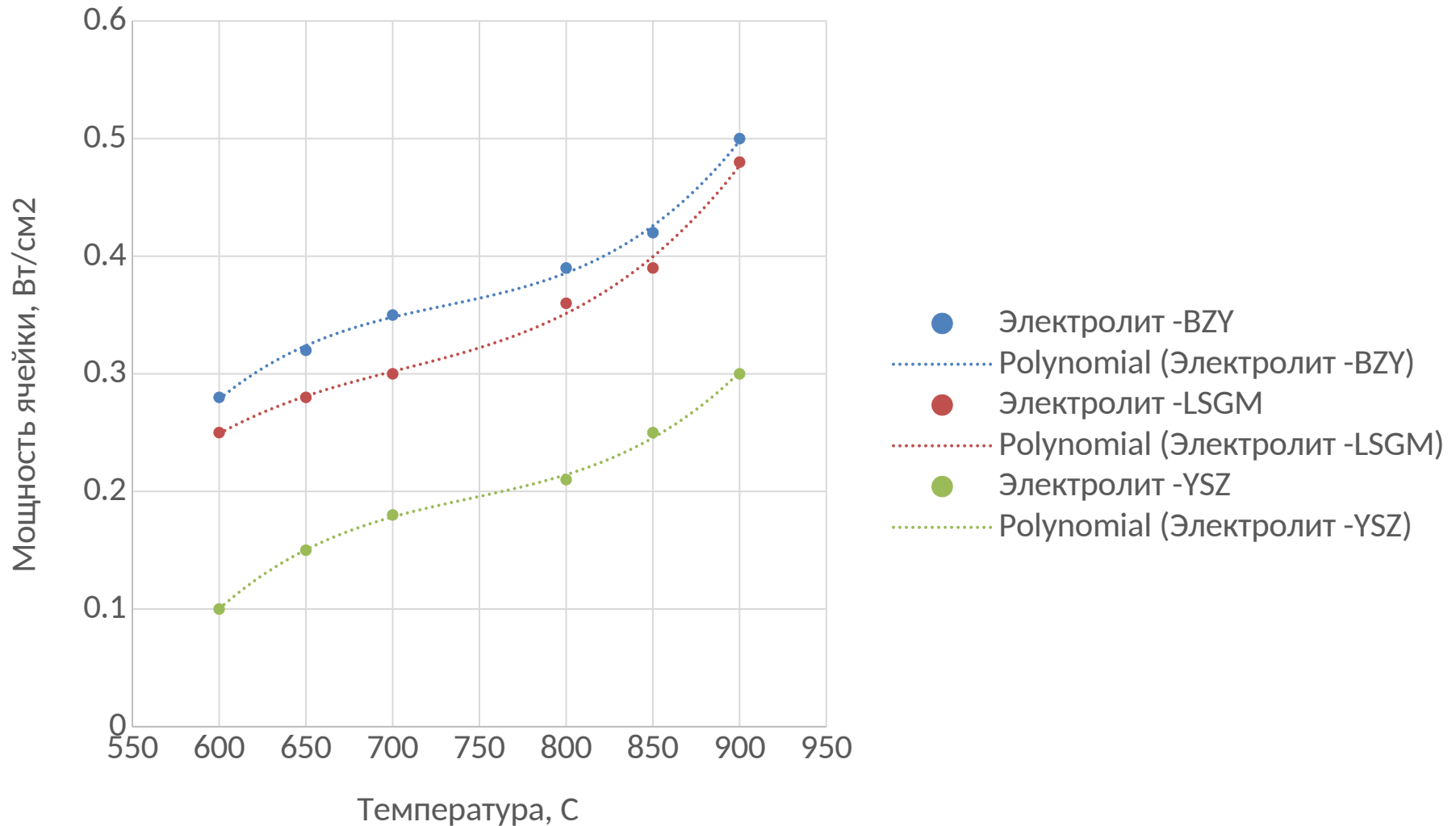
# Сравнение ячеек на электролите LSGM с различной толщиной электролита



# Сравнение ячеек на электролите ВЗУ с различной толщиной электролита



# Сравнение ячеек на электролите LSGM, BZY, YSZ



# Заключение

- На модели были проведены эксперименты с тремя ячейками с электролитами YSZ, BZY, LSMG. Было доказано что при понижении толщины электролита понижается и рабочая температура ячейки. Например: ячейка BZY при толщине электролита 5мкм работает с мощностью 0,32Вт/см при рабочей температуре 650 оС, а с толщиной электролита 10мкм при той же мощности рабочая температура уже 900 оС.
- В результате сравнения трех ячеек наибольшей мощностью обладает ячейка с электролитом BZY (0.28Вт/см при температуре 600 оС), по сравнению с ячейками на основе LSGM (0.25Вт/см при температуре 600 оС), YSZ (0.1Вт/см при температуре 600 оС).

**БЛАГОДАРЮ ЗА ВНИМАНИЕ!**