

PEM TİPİ YAKIT PİLLERİNİN İKİ VE ÜÇ BOYUTLU MODELLENMESİ

İBRAHİM TÜRKMEN

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
MİKRO VE NANO TEKNOLOJİ**

**TOBB EKONOMİ VE TEKNOLOJİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

AĞUSTOS 2012

ANKARA

Fen Bilimleri Enstitü onayı

Prof. Dr. Ünver KAYNAK

Müdür

Bu tezin Yüksek Lisans derecesinin tüm gereksinimlerini sağladığını onaylarım.

Prof. Dr. Turgut BAŞTUĞ

Anabilim Dalı Başkanı

İbrahim TÜRKMEN tarafından hazırlanan PEM TİPİ YAKIT PİLLERİNİN İKİ VE ÜÇ BOYUTLU MODELLENMESİ adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Doç. Dr. Mehmet SANKIR

Tez Danışmanı

Doç. Dr. Derek BAKER

Yardımcı Tez Danışmanı

Tez Jüri Üyeleri

Başkan: Prof. Dr. Turgut BAŞTUĞ

Üye : Doç. Dr. Derek BAKER

Üye : Doç. Dr. Mehmet SANKIR

Üye : Yrd. Doç. Dr. Nurdan SANKIR

Üye : Yrd. Doç. Dr. Barbaros ÇETİN

TEZ BİLDİRİMİ

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada orijinal olmayan her türlü kaynağa eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

İbrahim TÜRKMEN

Üniversitesi	: TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi
Enstitüsü	: Fen Bilimleri
Anabilim Dalı	: Mikro ve Nano Teknoloji
Tez Danışmanları	: Doç. Dr. Mehmet SANKIR Doç. Dr. Derek BAKER
Tez Türü ve Tarihi	: Yüksek Lisans – Ağustos 2012

İbrahim TÜRKMEN

PEM TİPİ YAKIT PİLLERİNİN İKİ VE ÜÇ BOYUTLU MODELLENMESİ

ÖZET

Bu çalışmada, COMSOL® ticari yazılımı kullanılarak, tek hücreli PEM tipi bir yakıt pilinin, iki ve üç boyutlu, izotermal, tek fazlı ve kararlı haldeki modelleri oluşturulmuştur. Oluşturulan modellerde, paralel akış kullanılmıştır. Modelde, elektron akımının iletken katı kısımdan iletimi, gazların akış kanallarındaki transferi ve su molekülleri ile iyonların polimer elektrolit zardan taşınımı bulunmaktadır. Akış kanallarındaki türlerin, gaz akışı sıkıştırılmaz Navier-Stokes denklemleri ile Brinkman denklemlerinin birlikte kullanılması ile çözülürken, su ve iyon transferi genelleştirilmiş Maxwell-Stefan denklemleri ile çözülmektedir. Bu araştırma esas olarak, pil geometrisi, sıcaklığa bağlı olarak değişen zarın iyonik iletkenliği, denge akım yoğunluğu ve difüzyon katsayıları gibi parametrelerin yakıt pili performansına olan etkilerini ortaya çıkarmak için yapılmıştır. Bunu başarabilmek için modeller, farklı denge akım yoğunluğu, zar iyonik iletkenliği ve difüzyon katsayılarında ve farklı geometrilerde çözülmüştür. Bu çalışmada hidrojen, oksijen ve suyun farklı sıcaklık ve hücre çalışma potansiyellerindeki kütle dağılımları da incelenmiştir. Sonuçlara göre; performans, sıcaklık arttıkça artan denge akım yoğunluğu, zarın iyonik iletkenliği ve difüzyon katsayılarının artmasıyla, artmaktadır. Ayrıca, geometrinin performansa olan etkisini belirlemek için iki farklı geometride üç boyutlu modeller oluşturulmuş ve bu modellerin karşılaştırılması yapılmıştır. Bu modellerden biri düz kanal geometrisine, diğeri ise silindirik kanal geometrisine sahiptir. Güç yoğunluğunun en yüksek olduğu hücre çalışma potansiyeli değerlerinde (0,4-0,6 V), silindirik modelden 25 °C’de, 0,58-0,93 A/cm² aralığında, 80 °C’de ise 0,82-1,05 A/cm² aralığında akım yoğunluğu elde edilmiştir. Düz modelde ise aynı çalışma potansiyeli değerlerinde 25 °C’de, 0,54-0,84 A/cm² aralığında, 80 °C’de ise 0,75-0,95 A/cm² aralığında akım yoğunluğu elde edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: PEM yakıt pili, COMSOL, İki ve üç boyutlu modelleme.

University : TOBB Economics and Technology University
Institute : Institute of Natural and Applied Sciences
Science Program : Micro and Nano Technology
Supervisor : Associate Professor Mehmet SANKIR
Co-Supervisor : Associate Professor Derek BAKER
Degree Awarded and Date : M.Sc. – August 2012

İbrahim TÜRKMEN

2-D AND 3-D MODELLING OF PROTON EXCHANGE MEMBRANE FUEL CELLS

ABSTRACT

In this study, 2-D and 3-D steady state, isothermal, and one-phase numerical models of a single Proton Exchange Membrane Fuel Cell were built by using COMSOL Multiphysics® software. A parallel-to-flow model of a single cell was used as the modeling domain. The model consisted of the delivery of electrical current in solid phase, transportation of gases in the flow channels, and transmission of water and ions in the polymer electrolyte membrane. The gas flow of the reactants in the channels was solved by incompressible Navier-Stokes equations with Brinkman equation while water and ion transportation was solved by generalized Maxwell-Stefan equations. The investigation was mainly focused on effects of the geometry and the effects of the parameters that are related with temperature, such as exchange current density, ionic conductivity and diffusivity values. To achieve that, 2-D and 3-D parallel-to-flow models with different exchange current density, ionic conductivity and diffusivity values and different geometries were solved. Mass fraction distribution of hydrogen, oxygen, and water were examined at different temperature and voltage values. It was pointed out from the results that increasing exchange current density, ionic conductivity and diffusivity values results in better performance. To determine the effect of geometry two models with different geometries were built and solved. One of the models has planar channel geometry while the other has cylindrical channel geometry. At middle cell potential values where the power density is high, the current density that is obtain from cylindrical model is between 0.58-0.93 A/cm² at 25 °C and 0.82-1.05 A/cm² at 80 °C. At same cell potential values, the current density that is obtain from planar model is between 0.54-0.84 A/cm² at 25 °C and 0.75-0.95 A/cm² at 80 °C.

Keywords: PEM fuel cell, COMSOL, 2D and 3D modeling.

TEŐEKKÖR

Öncelikle maddi ve manevi desteklerini her zaman yanımda hissettiđim aileme, alıőmalarım boyunca deđerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren hocalarım ve danışmanlarım Do. Dr. Mehmet SANKIR ve Do. Dr. Derek BAKER'a, katkılarından dolayı Mikro ve Nano Teknoloji bölümü öğretim üyelerine ve bu alıőmayı SANTEZ 00277-STZ.2008-1 numaralı projesiyle maddi olarak destekleyen T.C. Bilim Sanayi ve Teknoloji Bakanlığı'na teőekkörü bir bor bilirim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET.....	iv
ABSTRACT.....	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER.....	vii
TABLoların LİSTESİ.....	xi
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	xii
BÖLÜM 1.....	1
1.GİRİŞ.....	1
1.1.Genel Durum.....	1
1.2.Günümüzde Yakıt Pillerinin Kullanıldığı Bazı Alanlar.....	3
1.2.1.Yüksek Güçlü Uygulama Alanları.....	3
1.2.2.Düşük Güçlü Uygulama Alanları.....	6
BÖLÜM 2.....	7
2.YAKIT PİLLERİ.....	7
2.1.Yakıt Pillerinin Tarihi.....	7
2.2.Yakıt Pili Çeşitleri.....	8
2.2.1.Alkali Yakıt Pilleri.....	9
2.2.2.Fosforik Asit Yakıt Pilleri.....	10
2.2.3.Eriyik Karbonat Yakıt Pilleri.....	11
2.2.4.Katı Oksit Yakıt Pilleri.....	12
2.2.5.Polimer Elektrolit Zarlı Yakıt Pilleri.....	12
2.3.Proton Geçirgen Zarlı Yakıt Pillerinin Bileşenleri.....	13

2.3.1.Proton Geçirgen Zar.....	14
2.3.2.Katalizör Katman.....	15
2.3.3.Gaz Yayınım Tabakası.....	16
2.3.4. Çift Kutuplu Plakalar.....	17
2.4.Proton Geçirgen Zarlı Yakıt Pili Kimyası ve Termodinamiği.....	18
2.4.1.Temel Tepkimeler ve Termodinamik.....	19
2.4.2.Sıcaklığın Etkisi.....	21
2.4.3.Tersinir Yakıt Pili Verimliliği.....	22
2.4.4.Basınç Etkisi.....	23
2.5.Elektro-Kimyasal Denge.....	24
2.6.PEM Tipi Yakıt Pillerinde Reaksiyon Kinetiği.....	27
2.6.1.Gerilim Kayıpları.....	28
2.6.1.1.Aktivasyon Kayıpları.....	28
2.6.1.2.Direnç Kayıpları.....	30
2.6.1.3.Konsantrasyon Kayıpları.....	30
2.6.1.4.İç Akımlar ve Kesişme Kayıpları.....	32
2.6.2.Gerçek Yakıt Pili Potansiyeli.....	32
2.7.Literatür Araştırması.....	34
2.7.1.Genel Modelleme Varsayımları.....	35
2.7.2.Bir Boyutlu Modeller.....	36
2.7.3.İki Boyutlu Modeller.....	38
2.7.4.Üç Boyutlu Modeller.....	47
2.7.5.Literatür Araştırması Özeti.....	51
2.7.6.Ticari Yazılımların Literatürde Kullanımı.....	51

BÖLÜM 3.....	54
3.MODELLEME.....	54
3.1.Modelleme Varsayımları.....	54
3.2.Yük Korunumu.....	55
3.3.Momentum Korunumu.....	58
3.4.Maxwell-Stefan Denklemleri.....	59
3.5.Model Analizi.....	61
3.5.1.Model Geometrileri.....	61
3.5.2.Kullanılan Sabitler.....	62
3.5.3.Modelde Kullanılan Uygulama Modları.....	64
3.5.3.1.Incompressible Navier-Stokes.....	64
3.5.3.2.Conductive Media DC.....	65
3.5.3.2.1.Elektrotlar.....	65
3.5.3.2.2.Zar.....	66
3.5.3.3.Maxwell-Stefan Diffusion and Convection.....	67
3.5.3.3.1.Anot.....	67
3.5.3.3.2.Katot.....	67
BÖLÜM 4.....	68
4.SONUÇLAR VE TARTIŞMA.....	68
4.1.Çözüm Prosedürü.....	68
4.2.İki Boyutlu Model.....	69
4.2.1.İki Boyutlu Model Geometrisi ve Çözüm Ağı.....	69
4.2.2.İki Boyutlu Model Sonuçları.....	70

4.3.Üç Boyutlu Düz Model.....	84
4.3.1.Üç Boyutlu Düz Model Geometrisi ve Çözüm Ağı.....	84
4.3.2.Üç Boyutlu Düz Model Sonuçları.....	87
4.4.Üç Boyutlu Silindirik Model.....	104
4.4.1.Üç Boyutlu Silindirik Model Geometrisi ve Çözüm Ağı.....	105
4.4.2.Üç Boyutlu Silindirik Model Sonuçlar.....	107
BÖLÜM 5.....	121
5.DEĞERLENDİRME.....	121
BÖLÜM 6.....	123
6.GELECEK ÇALIŞMALAR.....	123
KAYNAKLAR.....	124
ÖZGEÇMİŞ.....	127

TABLULARIN LİSTESİ

Tablo		Sayfa
Tablo 2.1.	Yakıt Pillerinin Özetlenmesi	9
Tablo 2.2.	Hidrojenin 25°C'deki yükseltgenme reaksiyonu için, Entalpi, Entropi ve Gibbs serbest enerjisi değerleri	21
Tablo 2.3.	Farklı sıcaklıklardaki ΔH , ΔS , ΔG ve E_{rev} değerleri	22
Tablo 3.1.	İki boyutlu modelin geometrik özellikleri	60
Tablo 3.2.	Üç boyutlu düz modelin geometrik özellikleri	60
Tablo 3.3.	Üç boyutlu silindirik modelin geometrik özellikleri	61
Tablo 3.4.	Modellerin çözümünde kullanılan sabitler	62
Tablo 3.5.	Incompressible Navier-Stokes modu için önemli sınır koşulları	64
Tablo 3.6.	Elektrotlarda Conductive Media DC modu için önemli sınır koşulları	65
Tablo 3.7.	Elektrotlarda Conductive Media DC modu için önemli sınır koşulları	65
Tablo 3.8.	Anotta Maxwell-Stefan diffusion and convection modu için sınır koşulları	66
Tablo 3.9.	Katotta Maxwell-Stefan diffusion and convection modu için sınır koşulları	66
Tablo 4.1.	İki boyutlu modelin geometrik özellikleri	68
Tablo 4.2.	İki boyutlu modelin çözüm ağı istatistikleri	69
Tablo 4.3.	Üç boyutlu düz modelin geometrik özellikleri	83
Tablo 4.4.	Üç boyutlu düz modelin çözüm ağı istatistikleri	84
Tablo 4.5.	Üç boyutlu silindirik modelin geometrik özellikleri	103
Tablo 4.6.	Üç boyutlu silindirik modelin çözüm ağı istatistikleri	104

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil		Sayfa
Şekil 1.1.	Yakıtların içerdiği karbon/hidrojen oranı	2
Şekil 1.2.	Honda'nın PEM tipi yakıt pilli aracı, hidrojen istasyonu (Kaliforniya)	4
Şekil 1.3.	Boing Solar Eagle insansız hava aracı	4
Şekil 1.4.	Tokyo'da bir bira fabrikasının güç ihtiyacını karşılayan yakıt pilli güç santrali	5
Şekil 1.5.	Yakıt pilli şarj aleti	6
Şekil 2.1.	Sir William Grove tarafından 1839'da icat edilen yakıt pilinin şematik görünümü	7
Şekil 2.2.	PEM tipi yakıt pilli hücresi bileşenleri	14
Şekil 2.3.	Farklı tip akış kanalları (a) engelli tek serpantin, (b) engelsiz 5 serpantin	18
Şekil 2.4.	PEM tipi yakıt pillerinde gerilim kayıpları ve performans eğrisi	33
Şekil 2.5.	Polimer elektrolit ile kaplanmış gaz difüzyon elektrotu	35
Şekil 2.6.	Zar boyunca net su akışı	38
Şekil 2.7.	(a) Eski geleneksel ve (b)Yeni akış alanı tasarımıyla yakıt pilli hücresi	39
Şekil 2.8.	MEA'nın kesit alanı a) Nafion b)Aktif katalist tabakası	40
Şekil 2.9.	Modelin genel görüntüsü	41
Şekil 2.10.	Yığın(agglomerate) katalist geometrisi	43
Şekil 2.11.	Farklı voltaj değerlerinde, reaksiyona giren gazların kanal boyunca kütle oranları değişimi: (a) 0,6 V (b) 0,7 V	45
Şekil 2.12.	Çözüm prosedürünün akış diyagramı	47
Şekil 2.13.	Farklı polarizasyon eğrileri	49
Şekil 2.14.	PEM tipi yakıt pilinin modellenmesinde kullanılan yazılımlar	51
Şekil 2.15.	PEM tipi yakıt pillerinin, hesaplamalı akışkanlar dinamiği ile modellenmesinde kullanılan ticari ve ticari olmayan yazılımların (a) toplamda karşılaştırılması, (b) 3 boyutlu modellerde karşılaştırma	52

Şekil 3.1.	Akışa paralel model	53
Şekil 3.2.	Sınır değerlerinin numaralandırılması	63
Şekil 4.1.	İki boyutlu model	68
Şekil 4.2.	0,5 V'ta farklı eleman sayısına sahip çözüm ağlarında ortaya çıkan akım yoğunlukları	70
Şekil 4.2.	İki boyutlu model çözüm ağı	71
Şekil 4.3.	0,5 V çalışma potansiyelinde sıcaklık-akım yoğunluğu grafiği	72
Şekil 4.4.	İki boyutlu model için 25 °C'de farklı gerilim değerlerindeki hidrojen kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	73
Şekil 4.5.	İki boyutlu model için 80 °C'de farklı gerilim değerlerindeki hidrojen kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	74
Şekil 4.6.	İki boyutlu model için 25 °C'de farklı gerilim değerlerindeki oksijen kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	75
Şekil 4.7.	İki boyutlu model için 80 °C'de farklı gerilim değerlerindeki oksijen kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	76
Şekil 4.8.	İki boyutlu model için 25 °C'de farklı gerilim değerlerinde anottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	78
Şekil 4.9.	İki boyutlu model için 80 °C'de farklı gerilim değerlerinde anottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	79
Şekil 4.10.	İki boyutlu model için 25 °C'de farklı gerilim değerlerinde katottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	81
Şekil 4.11.	İki boyutlu model için 80 °C'de farklı gerilim değerlerinde katottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	82
Şekil 4.12.	İki boyutlu model için 25 °C'de farklı gerilim değerlerinde hız dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	83
Şekil 4.13.	İki boyutlu model için 80 °C'de farklı gerilim değerlerinde hız dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	84
Şekil 4.14.	İki boyutlu model için performans eğrileri	85
Şekil 4.15.	Üç boyutlu düz model	86
Şekil 4.16.	Üç boyutlu düz model çözüm ağı	87
Şekil 4.17.	Üç boyutlu düz model için 25 °C'de farklı gerilim değerlerindeki hidrojen kütle dağılımı (a) 0,3 V, (b) 1,0 V	89

Şekil 4.18.	Üç boyutlu düz model için 80 °C’de farklı gerilim değerlerindeki hidrojen kütle dağılımı (a) 0,3 V, (b) 1,0 V	90
Şekil 4.19.	Üç boyutlu düz model için 25 °C’de farklı gerilim değerlerindeki oksijen kütle dağılımı (a) 0,3 V, (b) 1,0 V	91
Şekil 4.20.	Üç boyutlu düz model için 80 °C’de farklı gerilim değerlerindeki oksijen kütle dağılımı (a) 0,3 V, (b) 1,0 V	92
Şekil 4.21.	Üç boyutlu düz model için 25 °C’de farklı gerilim değerlerinde anottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	94
Şekil 4.22.	Üç boyutlu düz model için 80 °C’de farklı gerilim değerlerinde anottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	95
Şekil 4.23.	Üç boyutlu düz model için 25 °C’de farklı gerilim değerlerinde katottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	96
Şekil 4.24.	Üç boyutlu düz model için 80 °C’de farklı gerilim değerlerinde katottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	97
Şekil 4.25.	Üç boyutlu düz model için 25 °C’de farklı gerilim değerlerinde hız dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	99
Şekil 4.26.	Üç boyutlu düz model için 80 °C’de farklı gerilim değerlerinde hız dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	100
Şekil 4.27.	Üç boyutlu düz model için performans eğrileri	101
Şekil 4.28.	Değişim akım yoğunluğunun etkisi (1,2 ve 3 nolu eğriler için değişim akım yoğunluğu değerleri sırasıyla; 10^{-2} A/cm ² , 10^{-3} A/cm ² ve 10^{-4} A/cm ²)	102
Şekil 4.29.	Zarın iyonik iletkenliğinin etkisi (1,2 ve 3 nolu eğriler için iyonik iletkenlik değerleri sırasıyla; 0.1 S/cm, 0.15 S/cm ve 0.20 S/cm)	104
Şekil 4.30.	Difüzyon katsayılarının etkisi (1,2 ve 3 nolu eğriler için difüzyon katsayıları sırasıyla; $5E-6$ m ² /s, $4.5E-6$ m ² /s, $4E-6$ m ² /s)	105
Şekil 4.31.	Üç boyutlu silindirik model	106
Şekil 4.32.	Üç boyutlu silindirik model çözüm ağı	107
Şekil 4.33.	Üç boyutlu silindirik model için 25 °C’de farklı gerilim değerlerindeki hidrojen kütle dağılımı (a) 0,3 V, (b) 1,0 V	108
Şekil 4.34.	Üç boyutlu silindirik model için 80 °C’de farklı gerilim değerlerindeki hidrojen kütle dağılımı (a) 0,3 V, (b) 1,0 V	109

Şekil 4.35.	Üç boyutlu silindirik model için 25 °C'de farklı gerilim değerlerindeki oksijen kütle dağılımı (a) 0,3 V, (b) 1,0 V	110
Şekil 4.36.	Üç boyutlu silindirik model için 80 °C'de farklı gerilim değerlerindeki oksijen kütle dağılımı (a) 0,3 V, (b) 1,0 V	112
Şekil 4.37.	Üç boyutlu silindirik model için 25 °C'de farklı gerilim değerlerinde anottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	113
Şekil 4.38.	Üç boyutlu silindirik model için 80 °C'de farklı gerilim değerlerinde anottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	114
Şekil 4.39.	Üç boyutlu silindirik model için 25 °C'de farklı gerilim değerlerinde katottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	116
Şekil 4.40.	Üç boyutlu silindirik model için 80 °C'de farklı gerilim değerlerinde katottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	117
Şekil 4.41.	Üç boyutlu silindirik model için 25 °C'de farklı gerilim değerlerinde hız dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	119
Şekil 4.42.	Üç boyutlu silindirik model için 80 °C'de farklı gerilim değerlerinde hız dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V	120
Şekil 4.43.	Üç boyutlu silindirik model için performans eğrileri	121

BÖLÜM 1

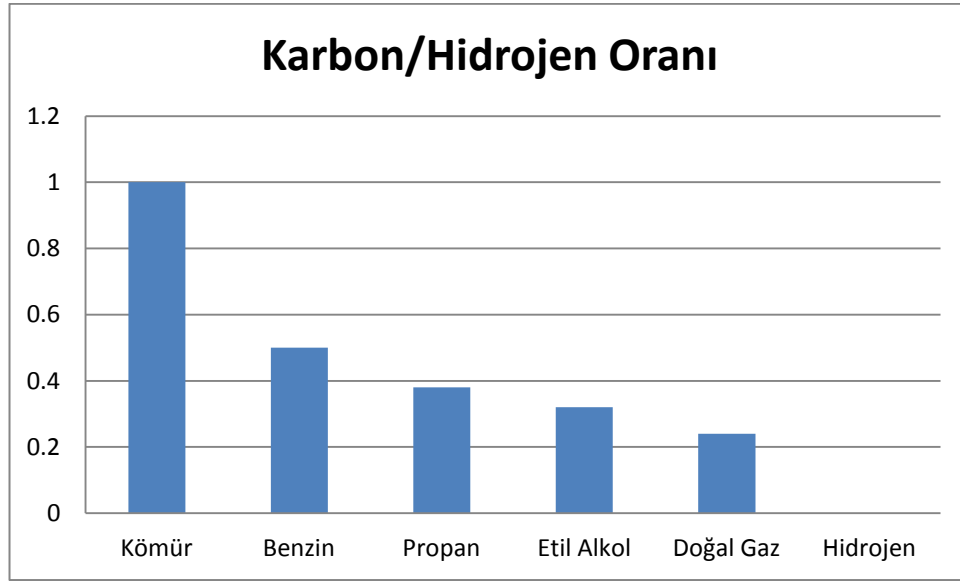
1. GİRİŞ

1.1. Genel Durum

Dünyada enerjiye olan talep, gelişen teknolojiye bağlı olarak günden güne artmaktadır. Uluslararası Enerji Ajansı'nın 2008 Dünya Enerji Görünümü Raporu'na göre, dünyada birincil enerji talebinin 2006 ve 2030 yılları arasında yılda ortalama %1,6, toplamda ise %45 artışla 53,3 GW değerinden, 77,3 GW değerine yükselmesi bekleniyor[1]. Günümüzde toplam birincil enerjinin %80'inin fosil yakıtlardan sağlandığı düşünüldüğünde, mevcut durumda karbon temelli yakıtlara olan bağımlılığımız aşikârdır. Fosil yakıtların yakılmasına olan bu bağımlılık, küresel ısınma ve dünyanın fosil yakıt kaynaklarında büyük bir azalma gibi önemli sorunlara yol açmıştır. Ayrıca fosil yakıtların en önemlisi olan petrolün bulunduğu bölgelerde sürekli savaş olması güvenlik açısından sorun oluşturmaktadır. Bu yüzden, araştırmacılar gelecek için temiz ve sürdürülebilir alternatif enerji kaynakları verimli güç dönüşüm cihazları üzerinde çalışmaktadır.

Günümüzde kullanılan alternatif enerji kaynaklarından biri hidrojenidir. Hidrojen, bütün fosil yakıtlarda ve organik ürünlerde bulunan bir elementtir. Saf moleküler hali (H_2), renksiz ve kokusuzdur. Benzin ve doğalgaz gibi boru hatlarıyla taşınabilir ve tanklarda depo edilebilir. Hidrojenin yakıt pillerinde kullanılması sonucu elde edilen enerji sonucunda çevreye sadece su salınır. Bu özelliği hidrojeni gerçek bir temiz enerji yakıtı haline getirmektedir. Hidrojen en hafif element olmasına karşın, birim kütle başına enerji yoğunluğu en yüksek olan gazdır. 1 pound (0,454 gr) ağırlığındaki hidrojen, 15.225 W'lık bir enerjiye dönüştürülebilir. Bu enerji, aynı miktardaki benzinden elde edilebilecek enerjinin üç kat fazlasıdır. [2]

Tarih boyunca, kömür, benzin, doğalgaz gibi hidrokarbon içeren yakıtlar kullanılmıştır. Hidrokarbonlar yakıldıklarında, karbon içerdiğinden dolayı çevreye yüksek miktarda karbondioksit, hidrojen içerdiğinden dolayı ise su salınımı yaparlar. Bu nedenle, bir hidrokarbonun içerdiği karbon/hidrojen oranı ne kadar az ise çevreye de o kadar az karbon salınımı yapar ve havayı o kadar az kirletir.



Şekil 1.1. Yakıtların içerdiği karbon/hidrojen oranı[2]

Şekil 1.1'den görüldüğü gibi yaygın olarak kullanılan yakıtların tamamı çevreyi kirletmektedir. Bu nedenle, dünya düşük karbon salınımına sahip, verimli bir enerji dönüşüm cihazına ihtiyaç duymaktadır. Bu bağlamda, yakıt pilleri umut veren bir enerji dönüşüm teknolojisi olarak düşünülmektedir. Yakıt pilleri yüksek verimle elektrik üretebilen cihazlardır. Günümüzde, yakıt pilleri elektronik cihazlara, araçlara ve binalara güç sağlamak için kullanılmaktadır. Yakıt pilleri uygulama alanlarına göre her boyutta yapılabilmektedir. Ayrıca yakıt pilleri sessiz çalıştıkları için günün her zamanında kullanılabilir ve güvenilirdir, tekrar şarj etmeye ihtiyaç duymazlar.[2]

Dünyada gerçekleşen teknolojik gelişmelerle birlikte, ülkemizde de yenilenebilir enerji kaynakları üzerine çalışmalar yapılmaktadır. Bu çalışmalar ışığında, 2023 yılı

için, toplam elektrik enerjisi ihtiyacının %30'nun alternatif enerji kaynaklarından elde edilmesi hedefi konulmuştur [3].

1.2. Günümüzde Yakıt Pillerinin Kullanıldığı Bazı Alanlar

Yakıt pilleri güç santrallerinden ulaştırma alanına, askeri uygulamalardan küçük elektronik cihazlara kadar bir çok alanda kullanılmaktadır. Bu uygulama alanları genel olarak yüksek güçlü ve düşük güçlü uygulama alanları olarak ikiye ayrılırlar.

1.2.1. Yüksek Güçlü Uygulama Alanları

Güç santralleri ve taşıtlarda kullanılan yakıt pilleri, yüksek güçlü uygulamaların en yaygın örnekleridir.

Günümüzde temiz ulaşım için, yakıt pilli elektrikli taşıtlar (YPET) tercih edilmektedir. Bataryalı elektrikli taşıtlar gibi, YPET'ler de itme gücü olarak elektrik motorlarını kullanmaktadır. Bu da hiç vites değiştirmeden sessiz ve yumuşak bir hızlanma sağlar. Böylelikle bu taşıtlarda kolay ve iyi performans görülmektedir. Günümüzde kullanılan tüm diğer taşıtlar gibi bu taşıtlara da bir yakıt istasyonda birkaç dakika içinde bir depo hidrojen kolaylıkla konulabilmektedir. Bir depo yakıt ile bu araçlar yüzlerce kilometre yol gidebilmektedir. Ayrıca bu araçlar her türlü koşulda, yaz ya da soğuk kış mevsiminde, yüksek performans sergilemektedir. Yakıt pilleri boyut olarak esneklik sağladığından, araba ve tren gibi birçok taşıt için güç kaynağı olarak kullanılabilir. Son olarak, YPET'ler %100 temizdir ve su buharı dışında hiçbir gaz salınımı yapmazlar. [2]

Şekil 1.2'de Honda'nın ürettiği yakıt pilli araç ve hidrojen istasyonu görülmektedir. Bu istasyonda, güneş panelleri bulunmaktadır ve bu panellerin emdiği güneş ışınları ile güneş pilinden elde edilen enerji ile su elektroliz edilmektedir. Bu olay sonucu elde edilen oksijen havaya salınırken, hidrojen depo edilip istasyona gelen araçlara aktarılmaktadır.

Şekil 1.3'te ise Boing Solar Eagle adlı insansız hava aracı bulunmaktadır. Bu araç gündüzleri güneş enerjisini kullanarak çalışmakta iken geceleri ise katı oksit yakıt pilinden elde ettiği enerji ile çalışmaktadır.



Şekil 1.2. Honda'nın PEM tipi yakıt pilli aracı, hidrojen istasyonu (Kaliforniya) [2]



Şekil 1.3. Boeing Solar Eagle insansız hava aracı [2]

Günümüzde var olan en büyük yakıt pili sistemleri yakıt pili güç santralleridir. Bu santraller yüzlerce watt'tan birkaç megawatt'a kadar güç üretebilmektedir ve uzak baz istasyonlarından geniş ofislere kadar birçok alanda kullanılabilir. Güç santrali yakıt hücrelerinde güç kaynağı olarak doğalgaz ve organik atık buharından üretilen biyogazlar kullanılmaktadır.[2]

Yakıt pili güç santralleri diğer güç kaynakları ile karşılaştırıldığında pek çok avantaja sahiptir. En önemli avantajlarından biri son derece güvenilir yüksek kalite güç üretimi sağlamasıdır. Potansiyeldeki dalgalanmalar hassas elektronik cihazlara zarar verebilir. US şirketleri güç kesintileri yüzünden yaşanan bilgisayar hasarlarından yıllık ortalama 29 milyar \$ zarar etmektedir. Bu yüzden birçok şirket yakıt pili sistemini tercih etmeye başlamıştır. Bu sistem güç kesintisi olduğu süre boyunca da çalışmaya devam ettiği için yedek jeneratöre de ihtiyaç duyulmamaktadır.[2]



Şekil 1.4. Tokyo’da bir bira fabrikasının güç ihtiyacını karşılayan yakıt pili güç santrali[2]

1.2.2. Düşük Güçlü Uygulama Alanları

Küçük elektronik cihazlar, düşük güçlü yakıt pillerinin yaygın olarak kullanıldığı alanlardandır.

Taşınabilir yakıt pilleri genellikle batarya veya jeneratörlerin yerine, hareket halindeyken güç sağlayabilmektedir. Küçük yakıt pili paketleri cep telefonu, laptop gibi kişisel elektronik cihazların uzun süreli kullanımına olanak sağlamaktadır. Yakıt pilleri dizüstü bilgisayar, telefon gibi cihazlarda kullanılan pillere göre on kat daha fazla akım yoğunluğuna sahiptir. Bu da demektir ki bir laptopun kullanım süresi saatlerden günlere, bir telefonun kullanım süresi günlerden haftalara uzamaktadır. Yakıt pilleri günümüzde yaygın kullanılan bataryalardan oldukça farklıdır. Bataryalar güç üretebilmek için tekrar şarj olmaya ihtiyaç duyarken yakıt pilleri yakıt mevcut olduğu süre boyunca çalışmaktadır. Taşınabilir yakıt pilleri güç santrali yakıt pilleri gibi sürekli olarak yakıtla beslenmediklerinden dolayı değiştirilebilir kartuş sistemi ile çalışmaktadır. Bir kartuş bittiği zaman yeni biriyle değiştirilmektedir. [2]



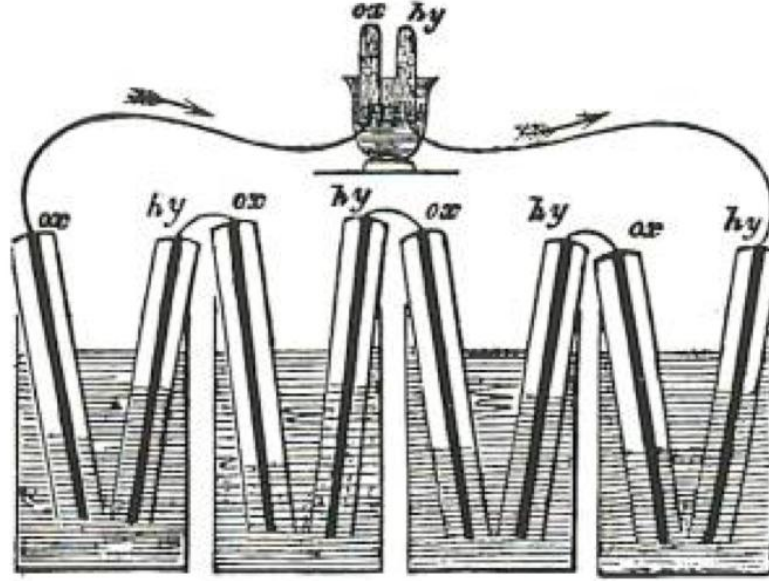
Şekil 1.5. Yakıt pilli şarj aleti[2]

BÖLÜM 2

2. YAKIT PİLLERİ

2.1 Yakıt Pillerinin Tarihi

Yakıt pili fikri bilimde 150 yıldan fazladır bilinmektedir. William Nicholson ve Anthony Carlisle, 1800 yılında, elektrik enerjisini kullanılarak suyu oksijen ve hidrojene ayırtmak için elektroliz yöntemini kullanmışlardır[4]. Onların bu çalışmasından sonra, önceden avukat olan Galli bilim adamı William Robert Grove (1811-1896) elektrotları seri bağlayarak suyu tekrar oluşturup elektrik üretebileceğini fark etmiştir. 1839 yılında bu fikrini gerçekleştirmiş ve ilk yakıt pili cihazını yapmıştır. Bu cihaz, içine iki ayrı platin elektrot batırılmış (hidrojen ve oksijene ayrı ayrı temas eden) olan seyreltilmiş sülfürik asit karışımından oluşmaktaydı. Zamanla yükselen su seviyesiyle birlikte, Şekil 2.1'de gösterildiği gibi bir elektrik akımı gözlemlenmiştir.



Şekil 2.1. Sir William Grove tarafından 1839'da icat edilen yakıt pilinin şematik görünümü[16]

Bu buluştan sonra, yakıt pilleri neredeyse bir asır boyunca yalnızca bilimsel bir merak konusu olarak kalmıştır. Fiziksel kimyayı ortaya çıkaran kişi olan Friedrich Wilhelm Ostwald (1853-1932), yakıt pillerinin nasıl çalıştığının teorik olarak anlaşılmasına büyük katkı sağlamıştır. Kimyacı Ludwig Mond (1839-1909) ve yardımcısı Carl Langer 1889'da 0.73 V altında, yaklaşık 930 cm²'lik bir alanda 6 amperlik akım elde etmiştir.

Aynı zamanlarda, Charles R. Alder Wright (1844-1894) ve C. Thompson benzer bir hücre geliştirmişler, fakat gaz akışlarındaki sızıntı sorunundan dolayı yüksek voltaj değerlerine ulaşamamışlardır. 1986'da, William W. Jacques (1855-1913) tarafından hava enjeksiyonlu bir alkali elektrolit içine bir karbon elektrot batırması ile yakıt pillerinde önemli bir gelişme kaydedilmiş ve bu pile karbon pili adı verilmiştir. 1950'lerin sonlarına kadar, bilimsel merak devam etmiştir. Francis Tom Bacon, Grove'un deneyini tekrar etmek üzere bir yakıt pili üretmiştir. Bacon çift katmanlı elektrotlar kullanarak sıvı baskını ve gaz kabarcıkları sorunlarını çözmüştür. Ayrıca korozyon sorununa, nikel elektrot üzerine oksit kaplamasıyla yeni bir çözüm getirmeye çalışmıştır. 1959'da, 6 kW'lık bir yakıt pili üretmiştir. Bütün bu olaylar, sanayide büyük bir ilgi uyandırmıştır ve 1960'ların başlarında, ilk pratik yakıt pili

ABD uzay programlarında kullanılmıştır[5]. 1960'lar, 1970'ler ve 1980'lerde General Motors birkaç uygulama yapmaya çalışmıştır. Fakat, bu yıllarda yakıt pilleri yalnızca uzay arařtırmalarında başarıyla kullanılmıştır. Yakıt pillerinin yeryüzü uygulamaları için çektiđi ilgi 1990'lara düşük seviyelerde kalmıştır[2]. Günümüzde ise, pek çok otomobil üreticisi proton geçirgen zarlı yakıt pillerinin binek araç uygulamalarındaki büyük potansiyelini fark etmiş ve yakıt pilli arabaları geliřtirmeye başlamıştır[4].

2.2 Yakıt Pili Çeřitleri

Yakıt pilleri genellikle, kullandıkları elektrolite göre sınıflandırılmaktadır. Yakıt pillerinin en genel türleri ve kısaltmaları řu şekildedir: Polimer Elektrolit Zarlı Yakıt Pili (PEZYP), Eriyik Karbonat Yakıt Pili (EKYP), Katı Oksit Yakıt Pili (KOYP), Alkali Yakıt Pili (AYP) ve Fosforik Asit Yakıt Pili (FAYP).

İkinci bir sınıflandırma ise çalışma sıcaklığına göre yapılmaktadır. Yaklaşık 220°C'nin altında çalışan yakıt pilleri, Düşük Sıcaklık Yakıt Pilleri ve 600 – 1000°C arasında çalışan yakıt pilleri ise Yüksek Sıcaklık Yakıt Pilleri olarak adlandırılmaktadır. Düşük Sıcaklık Yakıt Pilleri Proton Geçirgen Zarlı Yakıt Pilleri, Alkali Yakıt Pilleri ve Fosforik Asit Yakıt Pillerini kapsamaktadır. Yüksek Sıcaklık Yakıt pilleri ise Eriyik Karbonat Yakıt Pilleri ile Katı Oksit Yakıt Pillerini içine almaktadır. Aşağıdaki tabloda elektrolit tipi ve çalışma sıcaklığına göre yakıt pilleri özetlenmiştir

Tablo 2.1. Yakıt Pillerinin Özetlenmesi

	AYP	FAYP	EKYP	KOYP	PEMYP
Çalışma Sıcaklığı	50-200 °C	160-220 °C	650 °C	600-1000 °C	50-130 °C
Elektrolit	Alkalin Elektrot	Stabilize Fosforik Asit	Eriyik Karbon Karışımı	Seramik Katı Elektro	Katı Polimer Zar

2.2.1 Alkali Yakıt Pilleri (AYP)

Alkali yakıt pilleri, hem en gelişmiş yakıt pili teknolojilerinden hem de en verimli yakıt pillerindedir. Alkali yakıt pilleri %70'e kadar verimli elektrik üretebildiğinden, NASA tarafından Apollo ve uzay mekiği programlarında kullanılmıştır. Potasyum hidroksit (KOH) su temelli bir karışımı olan alkali potasyum hidroksit, AYP'de elektrolit olarak kullanılmaktadır. Alkali yakıt pillerinin çalışma sıcaklığı 50-100 °C aralığındadır. Yakın zamana kadar alkali yakıt pilleri ticari uygulamalar için oldukça pahalıydı, fakat zamanla firmalar sabit maliyetleri düşürmüş ve uygulamaların esnekliğini arttırmışlardır.

Ayrıca, alkali yakıt pillerinin bir diğer karakteristik özelliği ise yakıtta ve havada bulunabilecek olan CO₂'ye karşı çok hassas olmasıdır. CO₂ elektrolitle etkileşir ve onu çabucak zehirler, bu durum yakıt pili performansını olumsuz etkilemektedir. Bu nedenle CO₂'nin en ufak miktarı dahi ortadan kaldırılmalıdır. Bu yüzden, alkali yakıt pilleri için saflaştırılmış veya temizlenmiş hidrojen ile saf oksijen (hava değil) gereklidir. Ancak bu saflaştırma süreci pahalıdır. Alkali yakıt pilleri, diğer yakıt pili çeşitleri arasında en yüksek verime sahip olmasına rağmen yakıtın ve yükseltgenin yüksek saflık ihtiyacı, bu yakıt pilinin uygulama alanlarına büyük sınırlar getirmektedir. Bir diğer önemli engel ise çalışma süresi kapasitesidir. Çalışma süresi kapasitesi, gelişmeyi engelleyen mevcut malzeme dayanıklılığı konusu çözülerek ortalama 8.000 saatten 40.000 saate yükseltilmelidir. Diğer taraftan, alkali yakıt pilleri üretimi en ucuz olan yakıt pilleridir. [6-8].

2.2.2 Fosforik Asit Yakıt Pilleri (FAYP)

Fosforik asit yakıt pilleri, ticarileştirilen ilk yakıt pili türüdür ve günümüzde hâlâ ticari anlamda kullanılmaktadır. Fosforik asit yakıt pillerinin geliştirme süreci 1960'ta başlamış ve 1970'lere kadar sürmüştür. FAYP'ler kararlılık ve performans bakımından önemli ölçüde gelişmiştir. Bu gelişmişlik ve diğer önemli karakteristik özellikler, fosforik asit yakıt pillerini binalarda, otellerde, hastanelerde, havaalanlarında, güç santrallerinde vb. yerleşik uygulamalarda iyi bir tercih haline

getirmiştir. Bir fosforik asit yakıt pili su buhar basıncını en aza indiren, %100'e yakın saflığa sahip fosforik asit elektrolit kullanır. Tıpkı proton geçirgen zarlı yakıt pilleri gibi, pozitif yük taşıyıcısı protondur. Protonlar elektrolitten geçerek katoda ulaşır ve katotta genellikle havadan sağlanan oksijen ile birleşerek elektrik ve yan ürün olan ısıyı üretir. Fosforik asit yakıt pilleri %37'den %47'ye kadar değişen verimlerde elektrik enerjisi üretir. Bu verim alkali yakıt pillerinkinden düşüktür. Çünkü, fosforik asit yakıt pillerinde oksijenin indirgenme kinetiği daha yavaştır. Fosforik asit yakıt pillerinde çalışma sıcaklığı 160 °C ve 220 °C arasındadır. Bu çalışma sıcaklıklarında, atık ısı sıcak su ısıtmada veya atmosferik basınçta buhar üretmede kullanılabilir. Kurulum kolaylığı, elektrolit kararlılığı, ısı, kimyasal ve elektrokimyasal kararlılık ve uzun dönem kararlılığı FAYP'nin diğer avantajlarıdır.

Sıralanan avantajlara rağmen, bu yakıt pilleri platin katalizör kullandıkları için pahalıdırlar. Fosforik asit yakıt pillerini 5 – 200 kW aralığında çalıştırmak kW başına ortalama 4000 – 4500 \$ maliyet getirir ve bu değer mevcut uygulamalar için belirlenen hedeften yaklaşık beş kat daha fazladır [6]. Sonuç olarak, fosforik asit yakıt pilleri için öncelikli amaç, sürdürülebilirliği geliştirmek, güvenilirlik ve performans ile ilgili tecrübe kazanmaktır.[6-8]

2.2.3 Eriyik Karbonat Yakıt Pilleri (EKYP)

Eriyik karbonat yakıt pilleri, katı oksit yakıt pilleriyle birlikte yüksek sıcaklık yakıt pilleri sınıfında yer alır. Eriyik karbonat yakıt pilleri 1960'lı yılların ortalarında geliştirilmeye başlanmıştır. Eriyik karbonat yakıt pillerinde yüksek sıcaklıklarda, doğal gazın yakıt islahı yakıt hücresi içerisinde gerçekleştirilmektedir. Böylece yakıt işleyiciye ihtiyaç duyulmaz. Eriyik karbonat yakıt pillerinde karbonat tuzlarının eriyik karışımından (lityum karbonat ve potasyum karbonat veya lityum karbonat ve sodyum karbonat) oluşan bir elektrolit kullanır.

Yüksek çalışma sıcaklıkları avantajları ve dezavantajları beraberinde getirir. Karbonat tuzlarını eritmek ve karbonat iyonlarına karşı iletken hale getirmek için, eriyik karbonat yakıt pilleri 650 °C gibi yüksek sıcaklıklarda çalışır. Karbonat

iyonları katottan anoda akar ve burada su, karbondioksit, elektronlar (elektrik) ve yan ürün olan ısıyı oluşturmak üzere hidrojenle birleşir. Ayrıca, elektrolitten yüksek iyon hareketliliği sağlamak için de yüksek sıcaklık gereklidir. Oldukça yüksek çalışma sıcaklığı sebebiyle sabit maliyetleri düşüren ucuz katalizörler kullanılabilir. Eriyik karbonat yakıt pilleri %60 düzeyinde verime sahip olabilirler. Buna ilave olarak, verim, içeride CO ve diğer karbon temelli fosil yakıtların yakıt olarak kullanılabilirdiği, yakıtı ıslah eden bir katalizör eklenerek artırılabilir. Dayanıklılık bakımından, bu hücrelerin çalıştığı yüksek sıcaklıklar hücre ömrünü kısaltır. Ayrıca, yüksek sıcaklık çalışma koşullarına ulaşmak için önemli bir başlama zamanı gerekir ve eriyik karbonat yakıt pilleri değişen güç taleplerine yavaş cevap verir. Bu özellikleriyle EKYP'ler sabit güç uygulamaları için daha uygundur. Karbonat elektrolit ayrıca ortaya elektrot korozyon sorunları çıkarabilir. Bunların dışında, CO₂ anotda tüketildiğinden ve katoda transfer edildiğinden, CO₂'nin girişi ve hava akışı içindeki kontrolü en iyi performansı elde etmek için bir sorun haline gelmektedir. Bu sorun diğer yakıt pillerinde mevcut değildir. Ayrıca, eriyik karbonat yakıt pillerinin kükürt toleransı düşüktür. EKYP'nin önemli bir dezavantajı, yüksek sıcaklıklarda meydana gelen malzeme temelli sorunlar nedeniyle düşük mekanik dayanıklılıktır. Bu sorunlar EKYP'leri hareketli ve ulaşım uygulamalarında, proton geçirgen zarlı ve alkali yakıt pillerinin aksine elverişsiz kılar[6, 8].

2.2.4 Katı Oksit Yakıt Pilleri (KOYP)

Katı oksit yakıt pilleri açık ara farkla en yüksek sıcaklıkta çalışan yakıt pilleridir ve 600 – 1000 °C arasında çalışırlar. Böyle yüksek sıcaklıklarda çalışmak için kullanılan elektrolit, oksijen iyonlarına karşı iletken olan ve ince katı bir seramik malzeme olan katı oksittir. Elektrolit katı olduğundan, hücre silindirik, düzlemsel veya tek parça gibi çeşitli şekillerde olabilir. Birim hücrenin katı seramik yapısı hücre içindeki korozyon sorunlarını azaltır. Bu yakıt pilleri, sanayi ve büyük ölçekli merkezi elektrik santralleri için uygun görülmektedir. Bu pillerde, çalışma sıcaklığına ulaşmak için oldukça uzun başlama zamanına ihtiyaç duyulur ve hücreler elektrik talebindeki değişikliklere geç cevap verir. Ayrıca, yüksek sıcaklıklar, yapı için daha pahalı malzemeler gerektirir. Elektrik üretimi için verim, diğer yakıt pillerine göre

oldukça yüksek ve yaklaşık %60 civarındadır. Buna ek olarak, yüksek çalışma sıcaklığı, başka uygulamalarda kullanılmak üzere yüksek basınçlı buhar üretmek için kojenerasyon uygulamalarına izin verir [3, 5]. Ayrıca, bir katı oksit yakıt pilini bir türbinle birleştirmek suretiyle oluşturulacak hibrit yakıt pilinin elektrik enerjisi üretmekteki verimi %70'e yükselebilir [10].

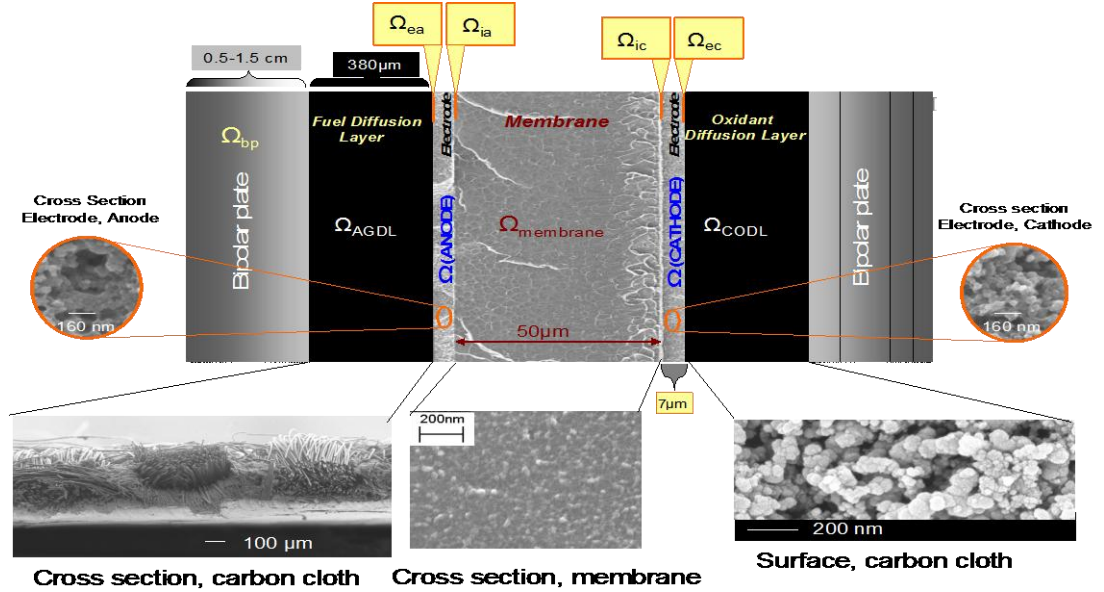
2.2.5 Polimer Elektrolit Zarlı Yakıt Pilleri (PEMYP)

Proton geçirgen zarlı yakıt pilleri elektrolit olarak sülfatlanmış polimer kullanır. Bu yüzden, ayrıca polimer elektrolit zarlı yakıt pilleri olarak da adlandırılırlar. Bir proton geçirgen zarlı yakıt pilinin elektroliti, katı bir polimer zardır (ince bir plastik film). Bu zar, protonların elektrolitten geçmesine izin verir ve aktif bir katalizör olan platin gibi metal alaşımlarının oldukça küçük yayılmış parçacıklarıyla kaplıdır. Katalizör, hidrojen atomlarının proton ve elektronlara ayrışmasına yardımcı olur. Bu protonlar elektrolitten katoda taşınırken elektronlar da dışarıdaki bir devreden akarak elektrik gücü üretir. Eşzamanlı olarak, katoda gönderilen oksijen protonlarla ve elektronlarla tepkimeye girerek suyu oluşturur. Proton geçirgen zarlı yakıt pilleri hızlı başlamaya uygun olan 50 – 100 °C aralığında çalışır. Güç çıkışı sağlama konusundaki bu çabuklukları, onları otomotiv gibi hızlı başlama gereksinimi duyulan uygulamalar için cazip kılar. Ayrıca, yakıt olarak hidrojen kullanıldığında proton geçirgen zarlı yakıt pilleri SO_x, NO_x ve CO_x gibi kirleticiler salmaz. Havadaki N₂ ve O₂, kullanılan yakıtın hidrojen veya hidrokarbon olmasından bağımsız olarak, ısıtıldıklarında NO_x oluştururlar. Fakat, PEMYP'nin düşük çalışma sıcaklıklarında, NO_x oluşumuna termodinamik (denge) veya kinetik (hız) olarak müsaade edilmez. Yine de sıcaklık arttıkça, N₂, O₂ ve NO_x arasındaki denge noktası NO_x'e doğru kayar ve tepkime hızı artar, dolayısıyla NO_x oluşur. Bu yüzden NO_x oluşumu yakıtı değil, yükseltgene ve sıcaklığa bağlıdır [7, 11].

Tüm yakıt pili çeşitleri arasında, Proton Geçirgen Zarlı Yakıt Pilleri en fazla umut veren, en fazla araştırılan ve en çok uygulanmış yakıt pili türüdür [12]. Bu sebepten dolayı, bu çalışmada polimer elektrolit zarlı yakıt pilleri araştırılmıştır.

2.3 Proton Geçirgen Zarlı Yakıt Pillerinin Bileşenleri

Bu bölümde basit bir PEM tipi yakıt pilinin önemli bileşenleri açıklanacaktır. Tek bir PEM tipi yakıt pili hücresi şeması Şekil 2.2’de gösterilmektedir.



Şekil 2.2. PEM tipi yakıt pili hücresi bileşenleri [13]

2.3.1 Proton Geçirgen Zar (Polimer Elektrolit Zar)

Bir PEM tipi yakıt pili için en önemli bileşen, yüksek proton geçirgenliğine sahip katı polimerden yapılmış, polimer elektrolit zardır. Zarın sahip olması gereken önemli özelliklerden biri yüksek seviyede elektrik yalıtkanlığıdır. Zarın ısı bakımından dayanımı ve kimyasal kararlılığı yakıt pilleri için çok kritiktir. PEM tipi yakıt pillerinde zarın görevi, tepkimeye girmiş, tepkimeye girmemiş ve durağan gazların akışını engellerken, protonları etkili bir şekilde anottan katoda iletmektir. Ayrıca elektronların geçişini engellemek ve elektronların dışarıdaki elektrik devresinden geçişini sağlamak da zarın görevidir.

En çok kullanılan standart zar (DuPont’s Nafion®) düşünüldüğünde, süreç aşağıdaki gibidir[7,8].

Perflurosülfonik asit (PFSA) nafionda kullanılan zar malzemesidir. Zar üretiminde ana malzeme olarak PFSA kullanımının iki önemli avantajı vardır. Yapının temeli politetrafluoroethylene (PTFE DuPont's Teflon®) üzerine kurulduğundan, hem yükseltgenme hem de indirgenme tepkimeleri yeterince dayanıklı ve kararlıdır. İyi nemlendirilmiş PFSA zarın proton iletkenliği yaklaşık 80 °C'de 0.1 S/cm olduğunda, 50 µ kalınlığındaki zara sahip hücrenin direnç değeri neredeyse 0.05 Ω/cm² olur ve bu da 1 A/cm² için 50 mV'luk bir gerilim kaybına karşılık gelir. PFSA zarların birkaç dezavantajı vardır. İlk olarak pahalıdırlar (25 \$/kw). Az nemlendirilmiş PFSA zarlarında düşük iletkenlik olduğundan dolayı, genelde ekstra bir nemlendirme birimine ihtiyaç duyulur. Bu da sistemin maliyetini arttırır. Ayrıca yüksek sıcaklıklar birkaç özelliğin azalmasına neden olur. Örneğin; hidrojenin geçirgenliği moleküler yapıdaki morfolojik değişikliklerden dolayı 80 °C sıcaklık civarında artmaya başlar. Bu yüzden, eğer sıcaklık 80 °C'nin üzerine çıkmaya başlarsa, zarın performans ömrü önemli ölçüde azalacaktır[14].

Literatürde PFSA zarlara alternatif bulmak için çok fazla araştırma yapılmasına rağmen, hâlâ şimdiki zarlar nafion® kullanmaktadır.

2.3.2 Katalizör Katman

Elektrottaki yavaş kinetik, reaksiyon hızını sınırlar. Kinetiği hızlandırmak için iki metot yaygın olarak kullanılır:

- Çalışma sıcaklığını arttırmak
- Bir katalizör malzeme kullanmak (zarın katalizör ile kaplanması)

Katalizör katmanının etkinliğini ve güç üretimindeki verimliliğini optimize etmek için platinin yüzey alanı arttırılmalıdır. Bu metot, ticari olarak uygun katalizör katmanlarda yaygın olarak kullanılır[7].

Katalizör katman yakıt pilinin her iki tarafında, zar ile gaz difüzyon katmanı arasında bulunmaktadır. Birçok durumda, düşük sıcaklıklardaki düşük hız probleminin

üstesinden gelmek için CO ile yüksek benzerliğe sahip olan platin, katalizör olarak kullanılır. Platin kullanılması, hidrojen kaynağı alkol veya hidrokarbon yakıt ise, anottaki elektrotta arta kalan CO'dan dolayı CO zehirlenmesine sebep olmaktadır. Saf oksijen kullanılırsa, zehirlenme problemi görülmez. Bu sebepten dolayı, yakıt kaynağına bağlı olarak, PEM tipi yakıt pillerinde kullanılan katalizör CO zehirlenmesine direnci arttırılacak şekilde geliştirilebilir. Metha ve Cooper'ın yayınlarda, PEM tipi yakıt pillerinin anodu için farklı katalizör katmanları tasarımları incelenmiştir[8, 14].

Katottaki katalizör katman için; platin, karbon veya başka parçacıkların üzerine yayılır ve oksijenin indirgenmesi için üstün performans sağlar. Düşük sıcaklıklarda, oksijenin indirgenme oranı yavaşlar ve bunu telafi etmek için katalizör yüklemesi arttırılmalıdır. Bu da yüksek yakıt pili maliyeti ile sonuçlanır[15].

Katalizörde ilk başlarda 2-4 mgPt/cm² platin kullanılmaktaydı. Bu nedenle çalışmalar kullanılan platinin azaltılması üzerine yoğunlaşmıştır. Yapılan bu çalışmalar sonucunda katalizörde 1 mgPt/cm²'den daha az platin kullanılarak aynı performanslar elde edilmiştir. Günümüzde ise araştırmaların çoğu, ticarileşme ve yaygın kullanım potansiyelinin arttırılması amacı ile, Pt yüklemesini azaltmaktan ziyade, daha ucuz aktif metal kullanılmasına yöneliktir.

2.3.3 Gaz Yayınım Tabakası

Gaz difüzyon katmanı, tipik olarak, geçirgen karbon örtü ya da karbon elyafli kağıttır. Gaz difüzyon katmanı, yakıt pilinin hem anot hem de katot tarafında, iki kutuplu plaka ile katalizör katmanının arasında bulunmaktadır. Geçirgen taşıma katmanı olan gaz difüzyon katmanının görevleri aşağıdaki gibidir:

- Katalizör katman ile iki kutuplu plaka arasında yapısal destek köprüsü olarak hizmet etmek
- Tepkimeye giren gazların katalizör katmana dağılımını sağlamak
- İyonlaşmanın oluşması için ara yüz sağlamak

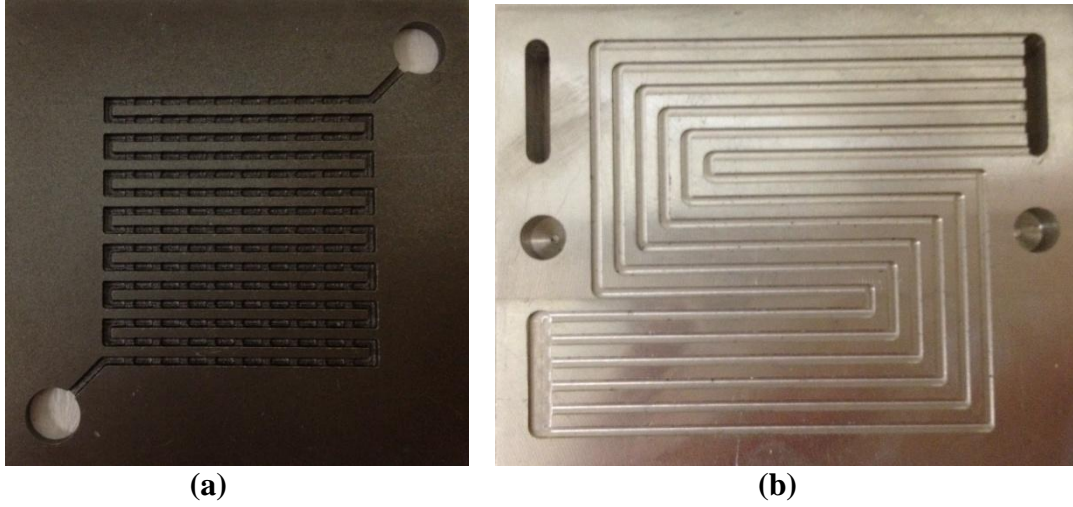
- İhtiyaç duyulduğunda, reaksiyon tarafındaki zardan ısıyı uzaklaştırarak sıcaklığı kontrol etmek
- Anodu aşırı nemlenmekten korumak
- Katalizörden iki kutuplu plakaya karşılıklı olarak elektron transferini sağlamak

Gaz difüzyon katmanı genel olarak politetrafluoroetilen (PTFE) ile sarılmıştır. PTFE, gaz difüzyon katmanını doygunlaştırarak suyun tutulmasını engelleyen, suyu sevmeyen bir malzemedir. Ayrıca bu malzeme yüksek kimyasal direnç sağlamaktadır [5, 8, 16].

2.3.4 Çift Kutuplu Plakalar

Şekil 2.3'teki gibi farklı geometrilerde üretilebilen çift kutuplu plakalar bir yakıt pili sistemi için çok önemli bileşenlerdir. Tsuchiya ve Kobayashiye göre [17] çift kutuplu plakalar 50 kW'lık bir yakıt pili sisteminin, toplam ağırlığının %80'ini ve toplam maliyetin %45'ini oluşturmaktadırlar. 5 milyon birim seri üretim ile üretilmiş olsa bile, çift kutuplu plakaların toplam maliyetin %37'sine sahip olduğu hesaplanmıştır. Bu yüzden maliyetleri ve ağırlığı azaltmak ve pazarda önemli bir etkiye sahip olmak için, çift kutuplu plakalar dikkatlice tasarlanmalıdır. Çift kutuplu plakaların 5 önemli görevi vardır:

1. Tepkimeye girecek gazların akış kanalları üzerinden dağılımını sağlamak
2. Komşu hücrelerin birbirinden ayrılmasını sağlamak
3. Anot ile katot arasında iletici yol sağlamak
4. Hücreden ısıyı uzaklaştırmak, hücreyi soğutmak
5. Zar elektrot montajı (ZEM) için yapısal destek sağlamak



Şekil 2.3.Farklı tip akış kanalları (a) engelli tek serpantin,
(b) engelsiz 5 serpantin [24]

Bütün bu istenen görevlerin dengede tutulması için, Metha ve Cooper[14] aşağıdaki başlıkları tavsiye etmiştir:

- Elektriksel iletkenlik : plaka direnci $< 0.01 \Omega \cdot \text{cm}^{-2}$
- Isıl iletkenlik : mümkün olduğu kadar yüksek
- Hidrojen/gaz geçirgenliği : $< 10^{-4} \text{cm}^3/\text{scm}^2$
- Korozyon direnci : korozyon oranı $< 0.016 \text{mA}/\text{cm}^2$
- Sıkıştırılma gerilmesi : $> 10 \text{kg}/\text{cm}^2$
- Yoğunluk : $< 5 \text{g}/\text{cm}^2$

Bu sebeplerden dolayı çift kutuplu plakanın malzemesi dikkatlice seçilmelidir. Bu zamana kadar, farklı çift kutuplu plaka malzemeleri üzerinde, bu özelliklerin geliştirilmesi için birçok çalışma yapılmıştır. Genel olarak, uzun süredir araştırılan malzemeler şu şekilde sınıflandırılabilir: Ametal, gözeneksiz grafit/elektrografit, metal, kaplanmış veya kaplanmamış kompozitler, polimer-karbon ve polimer-metal[18].

Çift kutuplu plaka üretimi için yapılan ilk girişimler metalik malzemelerle yapılmıştır. Tawfik ile arkadaşları[19], Wind ile arkadaşları[20] ve Davies ile

arkadaşları[21] metalik çift kutuplu plakaları gözden geçirmişler ve yayınlarında bu plakaların avantajları ile dezavantajlarını açıklamışlardır. Busick ile arkadaşları[22] düşük maliyetli bir kompozit malzeme tanımlamışlardır. Ayrıca birkaç yeni malzemede Hentall ile arkadaşları[23] tarafından, başta çift kutuplu plakanın ve yakıt pilinin maliyetinin azaltılması olmak üzere, istenen özelliklerin geliştirilmesi için denenmiştir.

2.4 Proton Geçirgen Zarlı Yakıt Pili Kimyası ve Termodinamiği

2.4.1 Temel Tepkimeler ve Termodinamik

Elektrokimyasal reaksiyonlar yakıt pilinin hem anot hem de katot tarafında meydana gelir ve bu reaksiyonlar yarı-hücre reaksiyonları olarak adlandırılırlar. PEM tipi yakıt pillerindeki temel elektrokimyasal reaksiyonlar aşağıdaki gibidir:

Anot Yükseltgenme Reaksiyonu:



Katot İndirgenme Reaksiyonu:



Toplam Reaksiyon:



Bu reaksiyonlar sadece PEM tipi yakıt pilleri için geçerlidir, diğer tip yakıt pilleri için farklı temel reaksiyonlar meydana gelir. Denklem 2.3 hidrojenin yanma reaksiyonu ile birebir aynıdır. Yanma ısı veren bir süreç olduğundan, reaksiyon süresince ısı üretilir.



Bir kimyasal tepkimenin ısısı, tepkimeye girenler ile ürünlerin oluşum ısıları farkından hesaplanır. Bu nedenle denklem 2.4'teki reaksiyondan dışarıya verilen ısı aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$\Delta H^0 = h_{f,H_2O}^0 - h_{f,H_2}^0 - 1/2 h_{f,O_2}^0 \quad (2.5)$$

Ancak, termodinamiğin ikinci yasasına göre, reaksiyon ısısının tamamı yararlı iş olan elektriğe çevrilemez. Kimyasal süreçler için, reaksiyon ısısının elektriğe dönüştürülecek kısmı Gibbs serbest enerjisi olarak tanımlanır:

$$\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\Delta S^0 \quad (2.6)$$

Mekanik süreçler için, bu kısım kullanışlı iş olarak adlandırılır ve aşağıdaki gibi elde edilir:

$$W = -\Delta H + T\Delta S \quad (2.7)$$

Başka bir söylemle, enerji dönüşümü sırasında, entropi oluşumundan dolayı, bir miktar kayıplar meydana gelir.

Denklem 2.6'daki standart ΔH^0 , ΔG^0 ve ΔS^0 değerleri Tablo 2.2'de verilmiştir. Ayrıca reaksiyonun entalpisi ve üretilen elektrik enerjisi bu tablodan hesaplanabilir.

Tablo 2.2. Hidrojenin 25°C’deki yükseltgenme reaksiyonu için, Entalpi, Entropi ve Gibbs serbest enerjisi değerleri

	ΔH^0 (kJ/kmol)	ΔS^0 (kJ/kmol.K)	ΔG^0 (kJ/kmol)
$H_2 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow H_2O_{liq}$	-286.02	-0.1633	-237.34
$H_2 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow H_2O_{gas}$	-241.98	-0.0444	-228.74

Yakıt pilinin teorik (tersinir) potansiyeli (gerilim farkı) aşağıdaki gibidir:

$$E_{rev}^0 = -\Delta G^0 / n \cdot F \quad (2.8)$$

Denklemden n, H₂ molekülü başına elektron sayısını (2 kmol.e⁻/kmol H₂), F ise Faraday sabitini (96485 C/mol) göstermektedir.

Bu denklemden tersinir gerilim ya da potansiyel fark aşağıdaki gibi bulunur:

$$E_{rev}^0 = 1.23 V \quad (2.9)$$

2.4.2 Sıcaklığın Etkisi

Yukarıda hesaplanan sayısal değerler 25°C sıcaklıkta elde edilmiştir. Ancak sıcaklık değiştiğinde, bütün ifadeler bu değişimden etkilenecektir. ΔH ve ΔS sıcaklığa bağlıdır, bu yüzden ΔG de sıcaklığa bağlıdır. Sonuç olarak, tersinir hücre gerilimi sıcaklığa bağlıdır. PEM tipi yakıt pillerinde, hidrojenin yükseltgenme reaksiyonu için ΔH , ΔS , ΔG ve E_{rev} 'in farklı sıcaklıklardaki sayısal değerleri Tablo 2.2’de gösterilmektedir.

Tablo 2.3. Farklı sıcaklıklardaki ΔH , ΔS , ΔG ve E_{rev} değerleri

T (K)	ΔH (kJ/kmol)	ΔS (kJ/kmol.K)	ΔG (kJ/kmol)	E_{rev} (V)
298.15	-286.02	-237.34	-0.1633	1.230
333.15	-284.85	-231.63	-0.1598	1.200
353.15	-284.18	-228.42	-0.1579	1.184
373.15	-283.52	-225.24	-0.1562	1.167

Tablo 2.2'den görüldüğü gibi sıcaklığın 25°C'den 100°C'ye yükselmesi ile, teorik hücre gerilmesi 1.23 V'tan 1.167 V'a düşmektedir. Buna göre, gerilim ile sıcaklık arasında ters orantı vardır.

2.4.3 Tersinir Yakıt Pili Verimliliği

Bütün enerji sistemlerinde verimlilik, çıkan yararlı enerjinin, giren enerjiye oranı olarak tanımlanır. Bu verimlilik enerjinin dönüşüm verimliliği olarak da tanımlanır. PEM tipi yakıt pilleri için, verimlilik hesabında, yararlı enerji çıkışı, üretilen elektrik ve enerji girişi ise hidrojenin yükseltgenme reaksiyonu sonucunda açığa çıkan ısıdır. Elektrokimyasal olarak gerçekleşen tersinir enerji çevrimlerinde, üretilen elektrik, reaksiyonun Gibbs serbest enerjisi olarak tanımlanır. Buna göre;

$$\eta_{verim} = \Delta G / \Delta H \quad (2.10)$$

Teorik verimlilik, suyun sıvı ya da gaz fazına göre değişir. Yüksek ısı değeri (YID) sıvı fazdaki su için uygundur. Isı değeri, 1 mol hidrojenin tamamının yanması durumunda oluşan ısıdır.

$$YID = -\Delta H^0 = 286.02 \text{ kJ/kmol (25°C'de)} \quad (2.11)$$

Düşük ısı değeri (DID) buhar fazdaki su üretildiğinde uygundur.

$$DID = -\Delta H^0 = 241.98 \text{ kJ/kmol (25}^\circ\text{C 'de)} \quad (2.12)$$

YID ile DID arasında suyun buharlaşması için gerekli ısıdan kaynaklanan 45 kJ/kmol kadar fark vardır. Sonuç olarak, bir yakıt pili için 25°C'de sıvı fazda suyun üretildiği, teorik(tersinir) olarak mümkün olan en yüksek verimlilik:

$$\eta_{ters} = \Delta G/\Delta H = 237.34/286.32 = 83\% \quad (2.13)$$

İçten yanmalı motorlar günümüzde en yaygın olarak kullanılan teknolojidir. İçten yanmalı motorlar için, enerji çevrim verimliliği yakıtın LHV'si ile tanımlanır. Bir yakıt pilinin enerji çevrim verimliliğine kıyasla, bir içten yanmalı motorun enerji çevrim verimliliği, hidrojenin düşük ısı değeri ile açıklanabilir.

$$\eta_{ters} = \Delta G/\Delta H = 228.74/241.98 = 94.5\% \quad (2.14)$$

Yakıt pillerinin enerji çevrim verimliliği, suyun sıvı ya da gaz fazına bağlı olarak HHV ya da LHV ile hesaplanabilir. Her iki durumda da yakıt pillerinin verimliliği, içten yanmalı motorlara göre fazladır. Ancak bu yol verimliliği hesaplamasının en doğru yolu değildir. Bölüm 2.6.2'de yakıt pili veriminin başka yollardan nasıl hesaplandığı gösterilmiştir.

2.4.4 Basınç Etkisi

Tipik bir yakıt pili atmosferik basınçtan 6-7 bara kadar olan basınç aralığından çalışır. Tersinir hücre gerilimini daha iyi anlayabilmek için, sıcaklığa ek olarak, basıncın etkisi de incelenmelidir. İzotermal bir süreç için:

$$dG = vdP \quad (2.15)$$

1 mol ideal gaz için:

$$PV = RT \quad (2.16)$$

Denklem 2.15 ve 2.16 beraber kullanıldığında,

$$dG = RT \frac{dP}{P} \quad (2.17)$$

İntegral alındıktan sonra,

$$G = G_0 + RT \ln \frac{P}{P_0} \quad (2.18)$$

Denklem 2.18 hidrojen/oksijen reaksiyonuna uygulanırsa, aşağıdaki Nernst denklemi elde edilir.

$$\Delta G = \Delta G_0 + RT \ln \left(\frac{P_{H_2O}}{P_{H_2} \cdot P_{O_2}^{0.5}} \right) \quad (2.19)$$

Denklem 2.8 kullanıldığında, Nernst denklemi aşağıdaki formunu alır.

$$E_{rev} = E_0 + \frac{RT}{nF} \ln \frac{P_{H_2} \cdot P_{O_2}^{0.5}}{P_{H_2O}} \quad (2.20)$$

Eğer su üretilirse denklem 2.20’de, P_{H_2O} değeri 1 olarak alınır. Bu yüzden, tepkimeye girenlerin yüksek basınçlı reaksiyona girmesi, yüksek hücre potansiyeli ile sonuçlanır. Tam tersi olarak tepkimeye girenler seyreltilirse, hücre potansiyeli düşer. Ancak bu eşitlikte kısmi basınçlar yerine “aktivite” kavramı kullanılmalıdır. (Bkz. Bölüm 2.5)

2.5. Elektro-Kimyasal Denge

Yakıt pilleri elektro-kimyasal cihazlardır. Bu nedenle, yakıt pillerinin iyi anlaşılabilmesi için elektro-kimyanın bilinmesi gerekmektedir. Bu bölümde elektro-kimyasal denge sürecinden Nernst eşitliğine ulaşılacaktır[25].

Eğer bir bileşenin iki fazı dengedeysen, bu iki fazın kimyasal potansiyelleri eşit olmalıdır. Elektrik alanın olmadığı bir durumda, iki fazlı bir tür için (α, β) :

$$dU = TdS - PdV + \mu_{\alpha}dn_{\alpha} + \mu_{\beta}dn_{\beta} \quad (2.21)$$

Elektrikselsel potansiyel aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\frac{dU}{dq} = \phi \quad (2.22)$$

Dolayısıyla, elektriksel alanın olduğu bir durumda, iç enerji, Denklem 2.21 ve Denklem 2.22'nin birleşiminden:

$$dU = TdS - PdV + \mu_{\alpha}dn_{\alpha} + \mu_{\beta}dn_{\beta} + \phi_{\alpha}dq_{\alpha} + \phi_{\beta}dq_{\beta} \quad (2.23)$$

Enerji tanımlamasına elektriksel iş de dahil edildiğinde, Gibbs Serbest Enerji değeri aşağıdaki denklemlerle tanımlanabilir.

$$G = U + PV - TS \quad (2.24)$$

$$dG = -SdT + VdP + \mu_{\alpha}dn_{\alpha} + \mu_{\beta}dn_{\beta} + \phi_{\alpha}dq_{\alpha} + \phi_{\beta}dq_{\beta} \quad (2.25)$$

Eğer bir faz n mol iyon içeriyorsa ve her bir iyon +ze yüküne sahip ise; toplam yük aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$q = zFn \quad (2.26)$$

$$dq = zFdn \quad (2.27)$$

$$dG = -SdT + VdP + (\mu_{\alpha} + zF\phi_{\alpha})dn_{\alpha} + (\mu_{\beta} + zF\phi_{\beta})dn_{\beta} \quad (2.28)$$

Şimdiye kadar bahsedilen süreç, dinamik denge sürecidir: İyonlar sürekli olarak iki faz arasında değişmektedir.

$$dn_{\alpha} = dn_{\beta} \quad (2.29)$$

$$dG = 0 \quad (2.30)$$

Bu nedenle, sabit basınç ve sabit sıcaklıkta elektro-kimyasal denge koşulu aşağıdaki gibi ifade edilebilir :

$$\mu_{\alpha} + zF\phi_{\alpha} = \mu_{\beta} + zF\phi_{\beta} \quad (2.31)$$

Elektro-kimyasal potansiyel Denklem 2.32'deki gibi tanımlanır.

$$\bar{\mu} = \mu + zF\phi \quad (2.32)$$

Aşağıdaki gibi bir yükseltgenme reaksiyonun olduğunu düşünelim.



Buna göre $O^{z(O)}$ 'nin elektro-kimyasal potansiyeli aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\bar{\mu}(R) = \mu^0(R) + RT \ln a(R) + z(e)F\phi_{sol} \quad (2.34)$$

Benzer şekilde, bir metal içerisindeki elektronun kimyasal potansiyeli:

$$\bar{\mu}(e) = \mu^0(e) - F\phi_{metal} \quad (2.35)$$

Bir çözelti içerisine batırılan, anot ve katot olarak davranan metal çubuklar arasındaki potansiyel fark aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$\phi_{anode} - \phi_{sol} = \left[\frac{\mu^0(O) - \mu^0(R) + n\mu^0(e)}{nF} \right] + \frac{RT}{nF} \ln \frac{a(O)}{a(R)} \quad (2.36)$$

$$\phi_{sol} - \phi_{cathode} = \left[\frac{\mu^0(R') - \mu^0(O') - n\mu^0(e)}{nF} \right] + \frac{RT}{nF} \ln \frac{a(R')}{a(O')} \quad (2.37)$$

Denklem 2.36 ve Denklem 2.37'den,

$$\phi_{cat} - \phi_{an} = - \frac{\mu^0(R') + \mu^0(O) - \mu^0(O') - \mu^0(R)}{nF} + RT \ln Q_a \quad (2.38)$$

Denklemde 2.38'de her hangi bir andaki tepkime katsayısı Q_a değeri aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$Q_a = \frac{a(R') a(O)}{a(R) a(O')} \quad (2.39)$$

İki elektrot arasındaki potansiyel fark elektromotor kuvveti (emk) olarak tanımlanır ve "E" sembolü ile gösterilir.

$$E = \phi_{cat} - \phi_{an} \quad (2.40)$$

Bütün türlerin aktiviteleri 1 olduğundaki "E" değeri standart "emk" olarak tanımlanır. ($Q_a=1$)

$$E^0 = - \frac{[\mu^0(R') + \mu^0(O) - \mu^0(O') - \mu^0(R)]}{nF} \quad (2.41)$$

Denkem 2.38, Denklem 2.40 ve Denklem 2.41 beraber çözüldüğünde Nernst eşitliğine ulaşılır.

$$E = E^0 - \frac{RT}{nF} \ln Q_a \quad (2.42)$$

2.6 PEM Tipi Yakıt Pillerinde Reaksiyon Kinetiği

Hücresinin gerçek potansiyeli ve verimliliği, bazı kayıplardan dolayı her zaman teorik değerlerin altındadır.

$$V = E_{rev} - \sum \Delta V_{losses} \quad (2.43)$$

2.6.1 Gerilim Kayıpları

Gerçek bir yakıt pilinde, açık devre için gerilim kayıpları sıfırdan büyüktür ve akım yoğunluğu arttıkça gerilim kayıpları da artar. Gerçek hücre gerilimini etkileyen 4 farklı kayıp tipi vardır.

2.6.1.1 Aktivasyon Kaybı

Yakıt pillerinde reaksiyona giren ürünler tarafından aşılması gereken bir aktivasyon bariyeri mevcuttur. Bu bariyer, elektronların hareket ettirilmesi, kimyasal bağların koparılması ya da yeni bağ oluşturulması olayları sonucunda hem anotta hem de katotta ortaya çıkmaktadır. Anotta gerçekleşen hidrojenin yükseltgenmesi tepkimesi çok hızlı iken, katotta gerçekleşen oksijenin indirgenmesi tepkimesi oldukça yavaştır. Bu nedenle, anot ve katottaki gerilim eğimi, her bir yarı reaksiyon için ayrı ele alınmalıdır. Akım yoğunluğu ile aktivasyon gerilim kaybı arasındaki bağıntı, Butler-Volmer eşitliği ile açıklanır[26,27].

$$i = i_0 \left\{ \exp \left[\frac{-\alpha_{red} F (E - E_{rev})}{RT} \right] - \exp \left[\frac{-\alpha_{ox} F (E - E_{rev})}{RT} \right] \right\} \quad (2.44)$$

Bu tanıma göre, açık devre gerilimi E_{rev} , 25°C ve atmosferik basıçta, anotta 0 ve katotta 1.23 V 'dur[27]. Yukarıdaki denklemde, akım yoğunluğunu ve açık devre voltajını belirleyen iki önemli faktör, transfer katsayısı, α ve akım yoğunluğu i_0 'dır. Burada, transfer katsayısı deneysel bir parametredir ve genel olarak aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$(\alpha_a + \alpha_c) = \frac{n}{\nu} \quad (2.45)$$

Elektrokimyasal reaksiyonlardaki, değişken akım yoğunluğu, j_0 , kimyasal reaksiyonlardaki oran sabiti ile benzerdir. Elektrot katalizör yüklemesi, katalizör, konsantrasyon türü ve sıcaklık gibi bazı parametreler, değişken akım yoğunluğunu belirler. Referans sıcaklık ve basınçta elde edilen referans değişken akım yoğunluğu parametreleri aşağıdaki gibidir.

$$i_0 = i_0^{ref} \alpha_c L_c \left(\frac{P_r}{P_r^{ref}} \right)^\nu \exp \left\{ -\frac{E_c}{RT} \left(1 - \frac{T}{T_{ref}} \right) \right\} \quad (2.46)$$

Eğer değişken akım yoğunluğu yüksek ise, elektrotun yüzeyi daha aktif olur. PEM tipi yakıt pillerinde, anottaki değişken akım yoğunluğu, katottakinden daha yüksektir. Sabit gerilimde, değişken akım yoğunluğundaki artış, üretilen akımı artırır. Böylece, sabit gerilimde, değişken akım yoğunluğundaki artış, aktivasyon kayıplarını azaltır. Bu kayıplar hem anotta hem de katotta olmasına rağmen, oksijenin katotta indirgenmesi, hidrojenin anotta yükseltgenmesine kıyasla, daha yavaş gerçekleştiğinden dolayı, katotta daha çok aktivasyon kaybı oluşur.

Eğer aktivasyon kayıpları katotta olduğu gibi, denge gerilim değerinden daha az ise, Butler-Volmer denkleminin ilk ifadesi geçerli olur.

$$\Delta V_{act,c} = E_{rev,c} - E_c = \frac{RT}{\alpha_c F} \ln \left(\frac{i}{i_{0,c}} \right) \quad (2.47)$$

Benzer şekilde anotta, potansiyelin denge potansiyelinden fazla olduğu yerde, denklem 2.22 daha baskın hale gelir.

$$\Delta V_{act,a} = E_{rev,a} - E_a = \frac{RT}{\alpha_a F} \ln \left(\frac{i}{i_{0,a}} \right) \quad (2.48)$$

Eğer bir yakıt pilinde kayıplar, sadece aktivasyon kayıplarından oluşuyor ise, denklem 2.25 ve 2.26'nın kombinasyonundan, hücre potansiyeli aşağıdaki gibi elde edilir:

$$V = E_{rev} - \frac{RT}{\alpha_c F} \ln \left(\frac{i}{i_{0,c}} \right) - \frac{RT}{\alpha_a F} \ln \left(\frac{i}{i_{0,a}} \right) \quad (2.49)$$

2.6.1.2 Direnç Kayıpları

Direnç kayıpları, elektrottaki elektriksel dirençten, elektrolitteki iyonların akışından dolayı oluşan iyonik dirençten ve ara yüzeydeki bağlantı dirençlerinden kaynaklanır. Direnç kayıpları Ohm Kanunu ile açıklanır:

$$\Delta V_{ohm} = iR_{in} \quad (2.50)$$

$$R_{in} = R_{in,ion} + R_{in,elec} + R_{in,contact} \quad (2.51)$$

Çift kutuplu plaka olarak grafit ya da grafit/polimer kompozitler kullanıldığında, elektriksel dirençler, genel olarak ihmal edilir. İyonik ve temas dirençleri ise elektriksel dirençler gibi ihmal edilmezler. Ayrıca bu iki direncin büyüklüğü neredeyse aynıdır[28].

2.6.1.3 Konsantrasyon Kaybı

Yakıt pili, anot ve katodundan ayrı ayrı, sırasıyla hidrojen ve oksijen ile beslenir. Bu gazların konsantrasyonlarındaki azalmadan dolayı, küçük bir basınç kaybı meydana gelir. Elektrokimyasal reaksiyonun gerilimi, tepkimeye girenlerin kısmi basınçlarına bağlı olarak değişir ve ilişki Nernst denklemi ile verilmektedir.

$$V_{loss} = \frac{RT}{nF} \ln \left(\frac{c_B}{c_S} \right) \quad (2.52)$$

Tepkimeye girenlerin akışı, Fick Kanunu'na göre;

$$N = \frac{D(C_B - C_S)}{\delta} A \quad (2.53)$$

Ayrıca, Faraday Kanunu'na göre, kararlı halde tepkimeye girenlerin tüketilen kısmı, difüzyon akışına eşittir.

$$N = \frac{i}{nF} \quad (2.54)$$

Denklem 2.31 ve 2.32 birleştirilirse;

$$i = \frac{nFD(C_B - C_S)}{\delta} \quad (2.55)$$

Tepkimeye girenler katalizör yüzeyinde kullanılabilir olduğunda akım elde edilebilir. Akım yoğunluğundaki artış, tepkimeye girenlerin düşük konsantrasyonuna sebep olur. Tüketim oranı, difüzyon oranını aştığında, yüzey konsantrasyonu sıfıra ulaşır. Bu sınır koşulundaki akım yoğunluğu, sınır akım yoğunluğudur:

$$i_L = \frac{nFDC_B}{\delta} \quad (2.56)$$

Denklem 2.30, 2.33 ve 2.34 birleştirildiğinde, konsantrasyon polarizasyonuna bağlı gerilim kaybı elde edilir:

$$\Delta V_{conc} = \frac{RT}{nF} \ln \left(\frac{i_L}{i_L - i} \right) \quad (2.57)$$

Günümüzde farklı bir yaklaşım geçerlidir. Bu yaklaşım teorik değil, tamamen empiriktir. Aşağıdaki empirik denklem, deneysel sonuçlarla çok iyi uyumaktadır[29].

$$\Delta V_{conc} = c \exp\left(\frac{i}{d}\right) \quad (2.58)$$

c ve d empirik değerlerdir. Bu değerler hücre dizaynı ve çalışma koşullarına bağlı olmalarına rağmen, bu değerlerin sırasıyla 3×10^{-5} V ve 0.125 A/cm² olması tavsiye edilir.

2.6.1.4 İç Akımlar ve Kesişme Kayıpları

İdeal koşullarda, polimer elektrolit membran elektriksel iletken değildir ve tepkimeye giren gazları geçirmez. Ancak gerçekte, hidrojen kütesinin küçük bir kısmı ve elektronlar membranı geçmektedir. Her bir hidrojen molekülü anottan katoda geçip oksijenle birleşirken, iki elektron açığa çıkar ve bu elektronlar dıştaki devreden dolaşırlar. Bu kayıp yüksek akım yoğunluğunda ihmal edilebilirken, açık devrelerde, bu kayıplar önemlidir.

2.6.2. Gerçek Yakıt Pili Potansiyeli ve Verimi

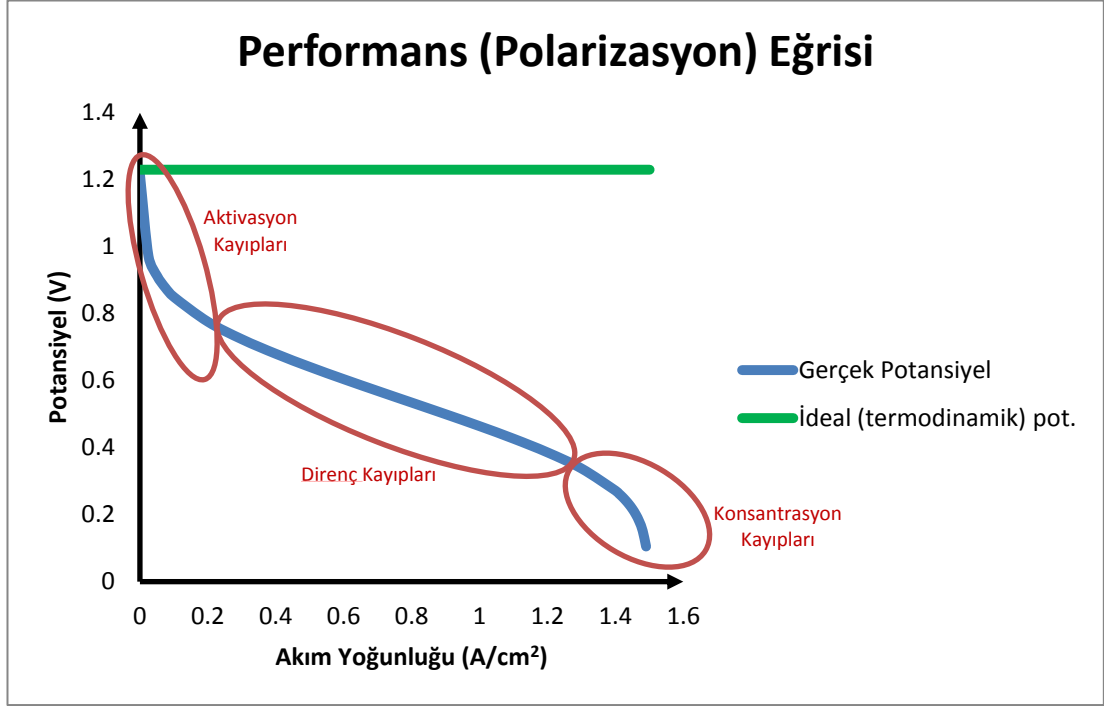
Sonuçta, üç önemli kayıp dikkate alındığında, toplam kayıplar:

$$V = E_{rev} - (\Delta V_{act} + \Delta V_{conc})_a - (\Delta V_{act} + \Delta V_{conc})_c - \Delta V_{ohm} \quad (2.59)$$

Denklem 2.25, 2.26, 2.28 ve 2.35, 2.37'de yerine konulursa;

$$E = E_{rev,T,P} - \frac{RT}{\alpha_c F} \ln\left(\frac{i}{i_{0,c}}\right) - \frac{RT}{\alpha_a F} \ln\left(\frac{i}{j_{0,a}}\right) - \frac{RT}{nF} \ln\left(\frac{i_{L,c}}{i_{L,c}-i}\right) - \frac{RT}{nF} \ln\left(\frac{i_{L,a}}{i_{L,a}-i}\right) - iR_{in} \quad (2.60)$$

PEM tipi yakıt pillerindeki voltaj kayıpları Şekil 2.5'teki grafikte gösterilmiştir.



Şekil 2.4. PEM tipi yakıt pillerinde gerilim kayıpları ve performans eğrisi[30]

Gerçek yakıt pili verimi üç farklı verimin kombinasyonundan hesaplanabilir ve bu hesaplamalar aşağıda gösterilmiştir. Birinci verim potansiyel verimliliğidir. Bu verim, hücre çalışma potansiyelinin, elde edilebilecek en büyük potansiyele oranı olarak tanımlanır. Örneğin 0.6 V değerinde çalışan bir yakıt pili için verim:

$$\eta_{pot} = \frac{E}{E_r} = \frac{0,6V}{1,229V} = 0,49 \quad (2.61)$$

İkinci verim akım verimliliği olarak adlandırılabilir. Bu verim aşağıdaki gibi hesaplanabilir. Hesaplama sonucundan 1'e yakın bir değer elde edilir. Bu da akım verimliliğinin %100'e yakın olduğu anlamına gelir.

$$\eta_{akım} = \frac{I}{nF\left(\frac{dN_F}{dt}\right)} \quad (2.62)$$

Üçüncüsü ise tersinir enerji verimliliği olarak adlandırılır. Bu verim, tersinir hücre potansiyelinin, termonötral potansiyele oranıdır. Yüksek ısıl değerde ve düşük ısıl değerde olmak üzere iki farklı şekilde hesaplanır.

$$\eta_{tersinir} = \frac{1,229}{1,48} = 0,83 \quad (YID) \quad (2.63)$$

$$\eta_{tersinir} = \frac{1,229}{1,25} = 0,98 \quad (DID) \quad (2.64)$$

Yukarıda anlatılan verim hesaplarına göre 0.6 V'ta çalışan bir yakıt pilinin gerçek verimi:

$$\eta_{YP} = \eta_{tersinir} * \eta_{pot} * \eta_{akım} = \frac{E_{tersinir}}{E_{tn}} * \frac{E}{E_{tersinir}} * 1 = \frac{E}{E_{tn}} \quad (2.65)$$

$$\eta_{YP} = \frac{0,6}{1,48} = 0,40 \quad (YID) \quad \eta_{YP} = \frac{0,6}{1,25} = 0,48 \quad (DID) \quad (2.66)$$

2.7. Literatür Araştırması

1990'lı yılların başından bu yana, PEM tipi yakıt pillerinin performanslarını etkileyen faktörleri anlamak için, modelleme üzerine ilgi artmıştır. Modeller, tek boyutlu basit modellerden üç boyutlu kompleks modellere kadar gelişmiştir. Farklı boyuttaki modellerin yanı sıra, farklı fazlarda modellerde mevcuttur.

Yakıt pilleri basit bir tasarıma sahip olmalarına rağmen, onları modellemek çok zordur. Çünkü, yakıt pilleri malzeme bilimi, elektrokimya, ısı transferi, akışkanlar mekaniği ve termodinamik gibi disiplinler arası bir konudur. Ayrıca tatmin edici bir performans için, çalışma koşullarının eniyileştirilmesi gerekmektedir. Deneyler optimum çalışma koşullarını ve en iyi performansı elde etmek için kullanılır. Değişik disiplinlerle uğraşılması ve bu disiplinlerin bağlantılı olması nedeniyle, performansı etkileyen tek bir faktörün incelenmesi oldukça zordur.

Ayrıca, yakıt pilini test etmek için karmaşık deney düzeneği kurmak oldukça maliyetli ve zaman alıcı bir süreçtir. Bu problemleri aşmak için modelleme kullanılmaktadır. Modelleme farklı koşulları deneme esnekliği sağlayarak para ve zamandan kazanç sağlar. Öte taraftan, farklı disiplinlerle uğraşılması ve her bir disiplinin karmaşık denklemlerinin olması çözümü zorlaştırmaktadır.

Literatürde, modelleme için farklı yaklaşımlar vardır. Araştırmaların bazıları reaksiyonlar ve etkileşimleri daha iyi anlayabilmek için yakıt pilinin genel prensipleri üzerine yoğunlaşırken, bazı çalışmalar daha çok tek parçalar üzerine ve bu parçaları geliştirmek amacıyla yapılmıştır. Ayrıca bu yaklaşımlar karmaşıklık ve boyutsal olarak sınıflandırılırlar. Bu çalışmada literatür araştırması boyut olarak organize edilmiştir. İlk çalışmalar göreceli olarak, daha basit modeller üzerine 1990ların başında yapılmıştır, son zamanlarda ise daha karmaşık çalışmalarla devam edilmiştir.

Tezin, bu bölümü hazırlanmadan önce yüzden fazla makale ve yüksek lisans tezi araştırılmış ve bunların 26 tanesi bu çalışmada kullanılmak üzere dikkate alınmıştır.

2.7.1. Genel Modelleme Varsayımları

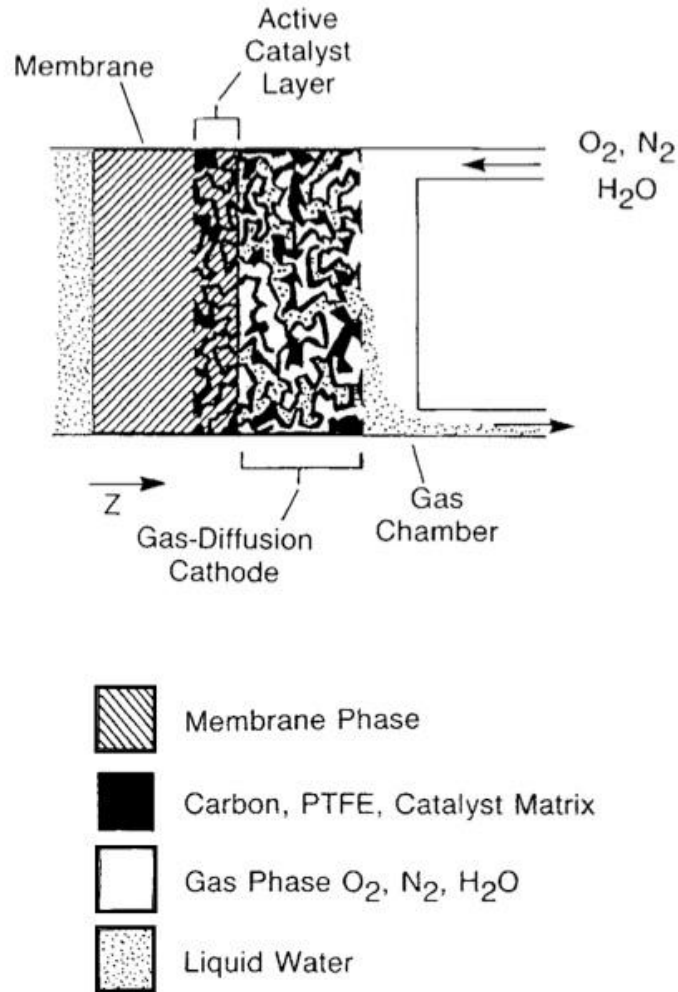
Modelin niteliği, modelin basitleştirilmesi üzerine tanımlanmıştır. İlerleyen bölümlerde tekrardan kaçınmak için, makalelerde incelenen genel kabuller aşağıda belirtilmiştir:

- Gaz türleri ve karışımlar ideal ve sıkıştırılabilir olarak düşünülür.
- Elektrotlar, zar ve kanallar izotropik malzeme olarak kabul edilir.
- Bütün fazların(gaz, sıvı ve katı) bölgesel ısı transferi dirençleri sıfır olarak kabul edilir, gaz/sıvı/katı arasındaki sıcaklık her zaman aynıdır.
- İndirgenme reaksiyonunda oluşan su bazı modellerde tek (gaz) fazda, bazı modellerde ise çift fazda kabul edilir.
- Sıvı su ile su buharı arasında bir denge vardır.

2.7.2. Bir Boyutlu Modeller

1990'ların başında fosforik asit yakıt pilindeki gelişmeler ve empirik çalışmaların yardımıyla Bernardi ve Verbrugge ile Springer tarafından ilk önemli PEM yakıt pili modelleri geliştirilmiştir.

1991'de yarım yakıt pili hücresi için Bernardi ve Verbrugge[31] tarafından bir boyutlu, izotermal ve kararlı haldeki model yayınlanmıştır. Şekil 2.5'te görüldüğü gibi sistem 4 parçadan oluşmaktadır.



Şekil 2.5. Polimer elektrolit ile kaplanmış gaz difüzyon elektrotu[31]

Tam ıslatılmış zar ile gaz difüzyon tabakası arasında kalan aktif (katalist) bir tabaka vardır. Zarın tam olarak ıslatılmış olması kabulünden sonra yapılan diğer önemli kabuller ise şunlardır:

1. Gaz difüzörlerindeki gaz basıncı sabittir.
2. Gaz difüzörlerindeki ve gaz boşluklarındaki sıvı su dengededir
3. Aktif katalist tabakasındaki gaz boşlukları hidrofobiktir. (Sıvı su içermez)
4. Gaz boşluklarının hacim oranı tüm aktif katalist tabakada aynıdır.

Bu kabuller sayesinde düşük akım yoğunluklarında reaksiyon oranının düzgün olduğu sonucuna varılmıştır. Ancak, reaksiyon miktarının yüksek akım yoğunluklarında yüksek oranda doğrusal olmadığı ve oksijen miktarının fazla olduğu bölgelerde yoğunlaştığı ortaya çıkmıştır. Bunun sonucunda, katalist tabakasında konsantrasyonu düzenlemenin, maliyeti düşürmede önemli bir yardımcı etken olacağı sonucu çıkarılmıştır.

Neredeyse aynı zamanlarda, Springer[32] bir başka bir boyutlu, izotermal ve kararlı haldeki PEM tip yakıt pili modelini yayınlamıştır. Bu model ilk Nafion R 117 zar çalışmasıdır. Model katot gaz kanalları ve gaz difüzyon tabakaları, zar, anot gaz kanalları ve gaz difüzyon tabakalarından oluşmaktadır. Deneysel değerlerin yardımıyla farklı nemlendirme değerlerinin, bağıl nemin bir fonksiyonu olan Nafion R aktivasyonu üzerine etkileri incelenmiştir. Anodik gerilim kayıpları göz ardı edilmiştir. Kütle transferindeki sınırlamaların olmaması sebebiyle bu model sadece anodik ve katodik gerilim kayıplarının incelenmesine olanak sağlamaktadır. Bununla beraber zardaki su transferi sadece elektro-osmotik sürüklenme kuvveti ve difüzyon kaynaklı olarak tanımlanmış ve basınç etkisiyle gerçekleşen su transferi ihmal edilmiştir. Springer bu modeli, bir yandan zardaki suyun taşınımını incelemek, diğer yandan ise stokiyometrinin ve sıcaklığın etkisini incelemek için oluşturmuştur.

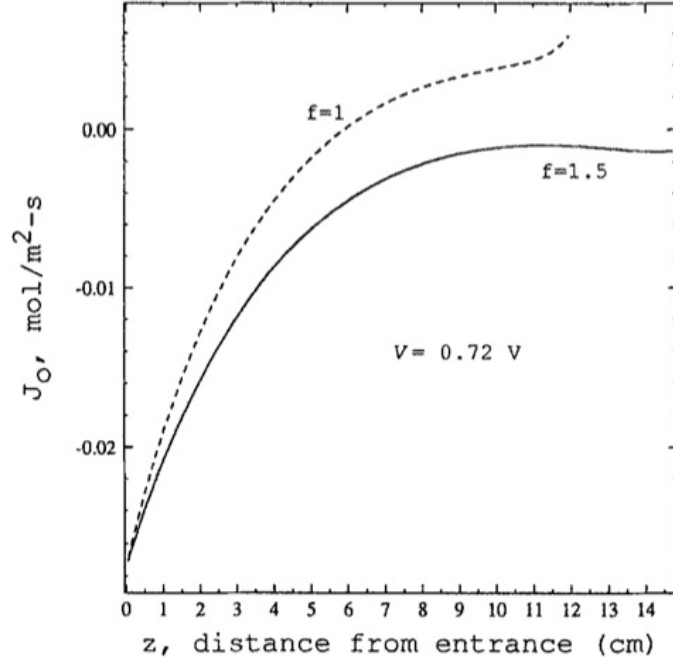
Bernardi ve Verbrugge[33] bir yıl önceki modellerini genişleterek tekrar yayınlamışlardır. Bu modeldeki en büyük değişiklik modelin büyük hücreyi yani anot ve katot taraflarını da kapsamasıdır. Direnç ve aktivasyon polarizasyonu kayıpları, zar kuruması ve transfer limitleri performansı sınırlayan faktörler olarak

incelenmiştir. İlk modellerinde olduğu gibi bu modelde de modelin geçerliliği deney sonuçları ile karşılaştırılması sonucunda yapılmıştır. Son olarak farklı zar özelliklerinin yakıt pili performansı üzerindeki etkileri araştırılmıştır.

Springer[34] iki yıl öncesinde yayınladığı makalenin geliştirilmiş versiyonu olan başka bir makaleyi bu yılda yayınladı. Bu modelde, diğer modelden farklı olarak, katot tarafındaki gaz transfer limitlerini hesaba katmıştır. İyi derecede nemlendirilmiş saf hidrojen gazı için anot kayıpları bu modelde ihmal edilmiştir. Model geçerliliği doğrulama faktörüyle yapılmıştır.

2.7.3. İki Boyutlu Modeller

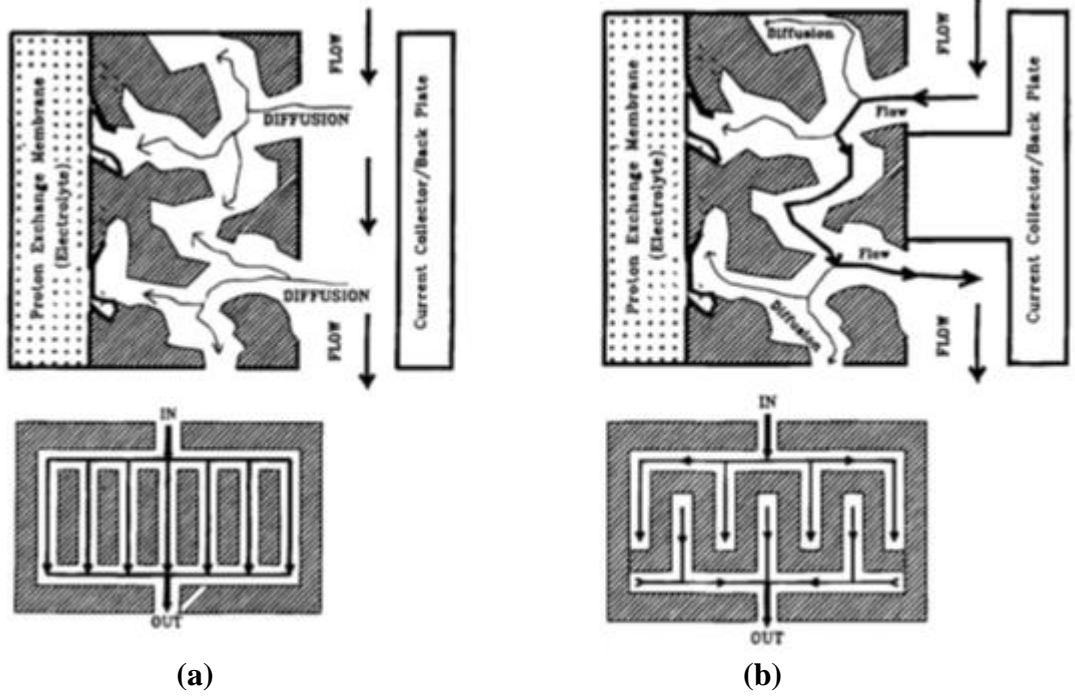
Yapılan bir boyutlu analizler sonrasında, ilk olarak Fuller ve Newman[35] iki boyutlu, izotermal olmayan ve kararlı haldeki MEA'yı yayınladılar. Model önce 2 boyutlu uzayda çözülmekte ve daha sonra kanal boyunca ilerletilmektedir. Bu nedenle model sözde iki boyutlu model olarak tanımlanabilir. Fuller ve Newman gaz difüzyon tabakası dışarısında kalan gazın aynı fazda olduğunu kabul etmişlerdir. Modellerini 3 bölüm üzerine kurmuşlardır. Birinci bölümde birim hücre boyunca bir kesitte sabit sıcaklık kabul edilmiştir. İkinci bölümde hava ve yakıtın akış çizgileri incelenmiştir. Bu modelde hava ve yakıtın ilerlerken harcandığı ve suyun üretildiği belirtilmiştir. Sabit hücre geriliminde yerel akım yoğunluğu ve su akışındaki değişim Şekil 2.6'daki gibi ortaya çıkmıştır. Üçüncü bölümde ise montaj boyunca sıcaklık değişimi sıfır kabul edilmiş ve kanal boyunca ısı transferi yok sayılmıştır.



Şekil 2.6. Zar boyunca net su akışı[35]

Nguyen ve White[36] 2 boyutlu, izotermal olmayan ve kararlı haldeki modeli 1993 yılında yayınladılar. Bu modelde zar boyunca basınç tarafından oluşturulan konvektif basınç taşınımı, doğal konveksiyon tarafından ısı artışı, düz ve ters akış için ısı değiştirici bulunuyordu. Sıvı suyun iyonik iletkenlik ve entalpi üzerindeki etkisi bu modelde dikkate alınmıştır. Gaz fazdaki iletim ile ısı taşınımı ihmal edilmiştir. Sonuç olarak farklı nemlendirme tasarımları için kanal boyunca su konsantrasyonu, sıcaklık, yerel basınç ve akım yoğunluğu profilleri sunulmuştur. Bununla birlikte oksijen reaksiyonu yüzünden yaşanan gerilim kaybı da tartışılmıştır.

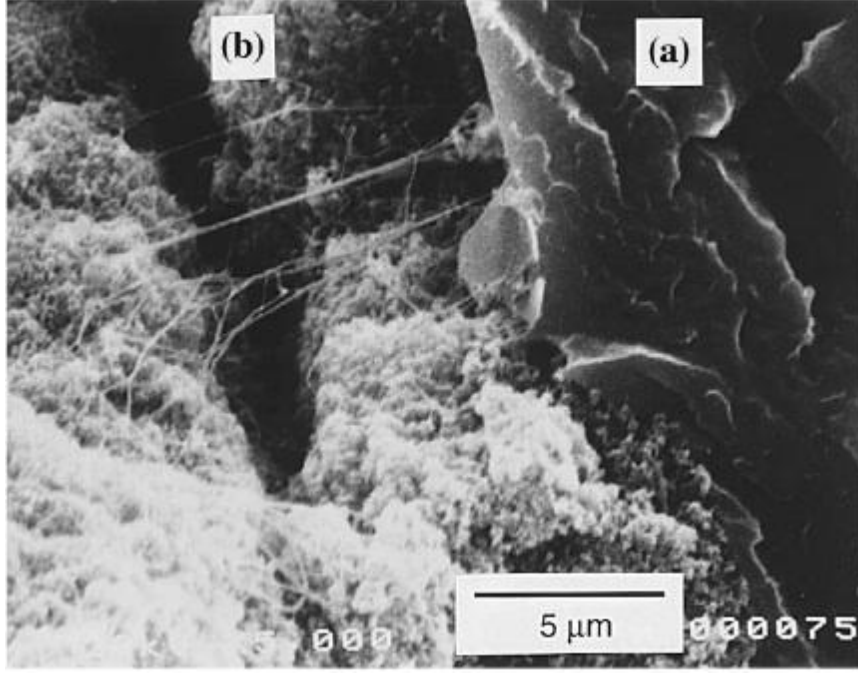
Nguyen[37] iç içe akış alanlarının verimliliğinin incelenmesini, kendi oluşturduğu model ile geleneksel paralel modelleri deneysel olarak karşılaştırıp polarizasyon eğrisini çizerek yapmıştır.(Şekil 2.7)



Şekil 2.7. Yeni (b) ve eski geleneksel (a) akış alanı tasarımıyla yakıt pili hücresi[37]

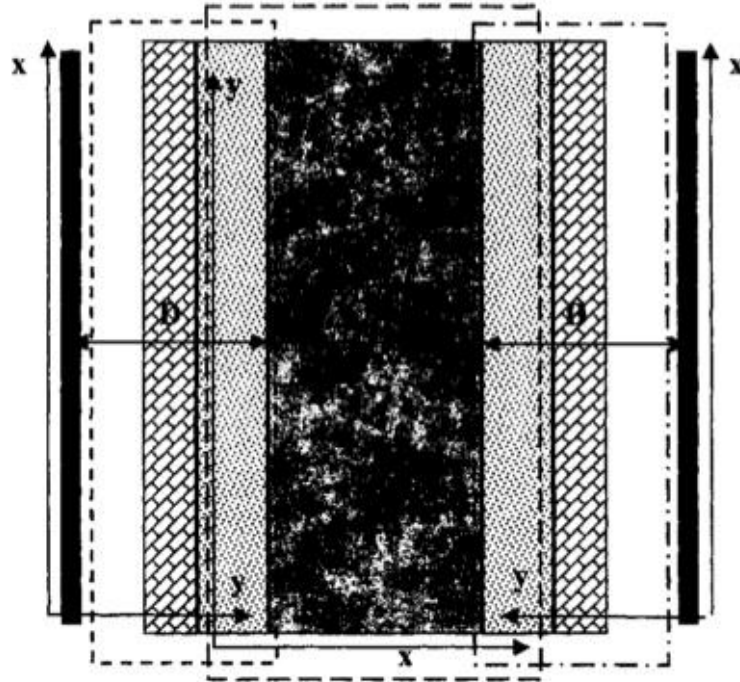
Bu yeni tasarım sayesinde kanalların giriş ve çıkış bölümleri çıkmaz sokak haline gelmişti ve gazlar gaz difüzyon tabakasından geçmeye zorlanmıştı. Sonuçlara göre, tıpkı maksimum güç yoğunluğu değerinde olduğu gibi, polarizasyon eğrisindeki kütle transferini sınırlayıcı bölge de belirgin bir şekilde genişlemiştir.

Broka ve Ekdunge[38] iki farklı katalist tabaka modelini karşılaştırdı: pseudo-homogenous film modeli ve yığın(agglomerate) modeli. Birinci uygulamada katalist tabakası 4 farklı bindirilmiş ortamdaki oluşan (difüzyon ortamı, iyonların iletim ortamı, elektronların iletim ortamı ve elektrokimyasal reaksiyonun gerçekleştiği katalist ortam) macropseudohomogenous film şeklinde modellenmişti. Ancak yığın modelinde aktif katalist tabaka, gaz delikleri ile ayrılmış gözenekli küçük karbon yığınları, platin ve Nafion karışımında oluşuyordu. Şekil 2.8’de görülen simülasyon sonuçları ve SEM gözlemlerine göre deneysel verilerle yığın model daha uyuyordu. Bunun sonucunda da bu model önerilmişti.







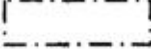
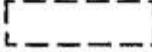


Şekil 2.8. MEA'nın kesit alanı a) Nafion b)Aktif katalist tabakası[38]

Gurau, Liu and Kakac[38] tarafında bilgisayar destekli, akışkanlar dinamiği teknikleriyle yapılmış PEM tipi yakıt pili modeli yayınlandı. Bu da aynı şekilde iki boyutlu, izotermal olmayan ve kararlı haldeki bir modeldi. Bu modelde gaz kanalları, gaz difüzyon tabakaları ve katalist tabaka birleşik alan olarak tanımlanmıştır. Böylece temas yüzeylerinde sınır koşulları tanımlamalarına gerek kalmamıştır. Bu özelliği sayesinde bu model oldukça önemlidir. Çünkü model, kanallar ve yakıt pili arasındaki etkileşimi incelemiştir.



Legend

-  collector plate
-  gas channel
-  gas diffuser
-  catalyst layer
-  membrane
-  domain for humid hydrogen
-  domain for humid air
-  domain for liquid water

Şekil 2.9. Modelin genel görüntüsü[39]

Buradaki önemli kabuller ise aşağıda sıralanmıştır:

- Gaz kanallarındaki akış laminar olarak gerçekleşmektedir
- İhmal edilebilecek kadar ince bir katalist tabakası mevcuttur
- Sıvı su ve buhar arasında bir dönüşüm yoktur

- Bütün malzemeler homojen kabul edilmiştir
- Viskoz yayılım terimleri ihmal edilmiştir.

Daha fazlası Şekil 2.9’da görülmektedir. Çözüm alanı üçe ayrılmıştır: nemlendirilmiş hidrojen, nemlendirilmiş hava ve sıvı su.

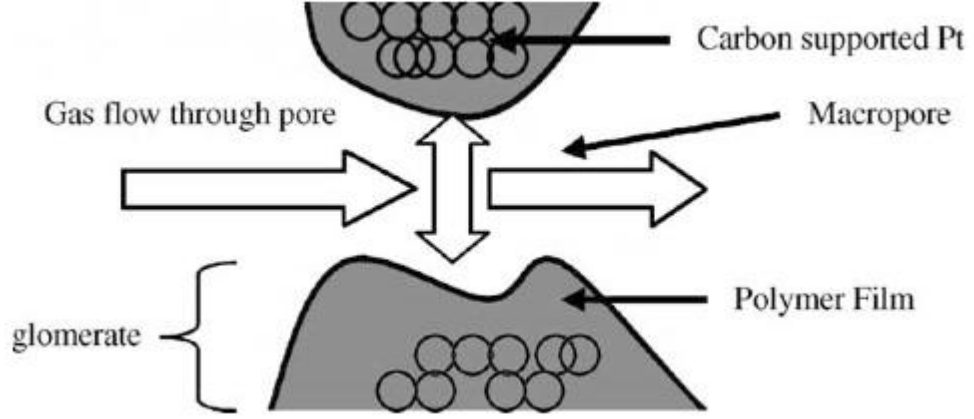
Bu modelde, oksijen mol oranlarında kanal boyunca lineer olmayan değişim gözlemlenmiş ve sıcaklık, gözeneklilik, akışkan hızı gibi farklı parametrelerin yakıt pili performansı üzerindeki etkileri incelenmiştir. Ayrıca, modellerin doğrulanması için ölçü faktörü kullanılmış ve polarizasyon eğrileri deneysel sonuçlarla karşılaştırılmıştır.

Diğer modellerden farklı olarak zamana bağlı PEM tipi yakıt pili modeli Um[40] tarafından 2000 yılında yayınlanmıştır. Bu model Gurau tarafından oluşturulan modele benzer bir CFD modeliydi. Bu modelin önemi ise şuydu; bu modelde hücre potansiyelinin değişmesiyle PEM yakıt pilinin zamana bağlı davranışı belirlenmiştir. Akım yoğunluğundaki tepki süresi birkaç saniye sürüyordu. Bunun yanında Henry Kanunu kullanılarak gaz ve sıvı oksijen konsantrasyonundaki fark dikkate alınmıştır. Ek olarak, Um saf hidrojenin yerine, saf olmayan hidrojen kullanıldığında hücre geriliminin düştüğünün farkına varmıştır.

He ve arkadaşlarının[41] parçalı tip kanal geometrisi kullanarak oluşturdukları modelde, iki boyutlu, iki fazlı inceleme yapmışlardır. Oluşturulan bu model ile basınç farkı, elektrot kalınlığı, kanal sayısının değişimi, kanal/plaka oranının değişimi gibi parametrelerin performansa olan etkileri incelenmiştir. Bunun sonucunda, basınç farkı, elektrot kalınlığı arttıkça performansın arttığı sonucuna varmışlardır.

Siegel ve arkadaşları[42] elektrot boşluklarında sıvı su taşınımını da dikkate alan iki boyutlu kararlı haldeki modeli yayımlamıştır. Elektrokimyasal reaksiyonun meydana geldiği katalist tabakasını modellemek için yığın katalist geometrisini

kullanılmışlardır(Şekil 2.10). Modellerini doğrulamak için 50 cm² farklı koşullarda çalışan ElectroChem® hücresi kullanılmışlardır.



Şekil 2.10 Yığın(agglomerate) katalist geometrisi[42]

Oluşturulan bu model ile, katalist tabakasındaki boşluk oranının yakıt pili performansı üzerinde büyük öneme sahip olduğu sonucuna varılmıştır. Bunun yanında, karakteristik uzunluğu arttırmak difüzyon direncine sebep olduğundan, bu durumun yakıt pili performansı üzerinde olumsuz etkiye sahip olduğu belirtilmiştir.

Hermann ve arkadaşları[43] oluşturdukları modelde çift kutuplu plakaların PEM yakıt hücreleri için önemini ortaya koymuşlardır. Yaptıkları çalışmalarda, çift kutuplu plakaların; yakıtı ve havayı eşit miktarda dağıttıklarını, elektrik akımının hücreden hücreye iletimini sağladıklarını, ısıyı aktif alandan uzaklaştırdıklarını belirtmişlerdir. Ayrıca, çift kutuplu plakaların, gazların ve soğutucunun kaçak yapmasını önlediklerinden bahsetmiş ve çift kutuplu plaka imalatı için kullanılan malzemeleri özetlemişlerdir.

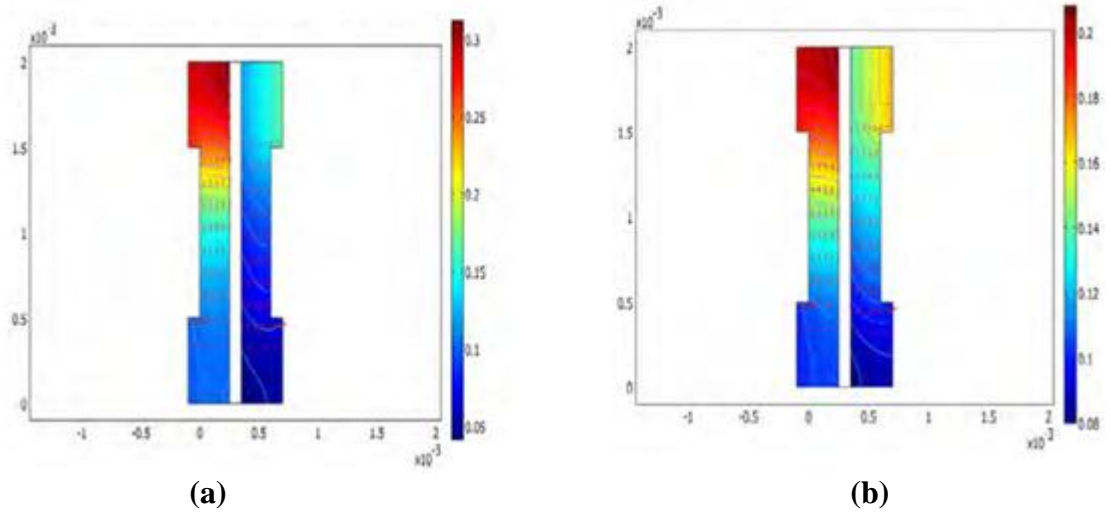
Shimpalee ve Zee[44] oluşturdukları modelde, çift kutuplu plakalarda farklı akış kanallarını incelemişlerdir. Değişik tasarımlardaki serpantin gaz akış kanal kesit alanlarının, hücre performansına ve hücre içindeki reaksiyona giren gazların konsantrasyon dağılımına etkileri sayısal olarak incelenmiştir. Bir PEM tipi yakıt

pilinde, reaksiyona giren gazların konsantrasyonlarındaki deęişiklik, pilin bölgesel akım yoğunluęunu, sıcaklıęını ve oluşan suyun konsantrasyon daęılımını etkilemektedir. PEM tipi yakıt pillerinde reaksiyona giren gazların konsantrasyonlarında deęişikliğe sebep olan en önemli etkenlerden biri de çift kutuplu plakalardaki akış kanallarının geometrisidir. Gerekli analizler yapılmadıęı takdirde, bu akış kanallarının farklı bölgelerinde gerilmeler meydana gelebilir. Bu gerilmeleri azaltmanın veya ortadan kaldırmanın en etkili metotlarından biri akış alanının boyutlarını deęiştirmektir. Yapılan bu çalışmada, gazların konsantrasyon daęılımlarını, en verimli şekilde gerçekleştirecek kanal geometrisi belirlenerek hücre performansının artırılması amaçlanmıştır. Bunun yanında, akışın gerçekleştięi yönün, yakıt pilinin performansına ve reaksiyona giren gazların konsantrasyon daęılımlarına etkileri incelenmiştir. Yapılan bu çalışmanın sonucunda, PEM tipi yakıt pilinin hareketli olmasını gerektirmeyen kullanım alanlarında, kanalların dar ve kanallar arası mesafenin fazla olmasının performansı olumlu etkiledięi, hareketli kullanım alanlarında ise, kanalların geniş ve kanallar arası mesafenin az olmasının daha uygun olduęu belirlenmiştir.

Soo Kim ve arkadaşları[45] çalışmalarında, iki boyutlu modeller ile üç boyutlu modellerin karşılaştırılmasını yapmışlardır. Yaptıkları çalışmaların sonucunda, üç boyutlu modellerin iki boyutlu modellere göre daha gerçekçi ve daha öğretici olduğunu belirtmişlerdir. Bunun yanında, iki boyutlu modellerin ihmal ettikleri üçüncü boyuttaki kütle, ısı ve yük transferinin önemsiz olduğunu göstermişlerdir. Sonuç olarak üç boyutun bazı avantajları olmasına rağmen, iki boyutlu modellerde elde edilen sonuçlar ile üç boyutlu modellerden elde edilen sonuçların çok farklı olmadığı ortaya konulmuştur. Bu nedenle, iki boyutlu modellere kıyasla, çözüm süresi oldukça uzun olan ve çözüm yapılan bilgisayarların maliyeti yüksek olan üç boyutlu modeller yerine iki boyutlu modeller oluşturmanın daha cazip olduğu vurgulanmıştır.

Ameri ve Oroojie[46] yayınladıkları konferans makalesinde; Şekil 2.11’de gösterildięi gibi iki boyutlu, izotermal, kararlı halde ve akışa dik PEM tipi bir yakıt pili modeli oluşturmuşlardır. Model, sol tarafı anot, ortası zar ve sağ tarafı katot

olmak üzere üç ana bölgeden oluşmaktadır. Anoda nemlendirilmiş hidrojen kanalın üst kısmından girip, alt kısmından çıkarken; katoda nemlendirilmiş hava kanalın alt tarafından girip üst tarafından çıkmaktadır. Oluşturdukları model ile yakıt pilinde, farklı voltaj değerlerinde çalışırken oluşan farklılıkları incelemişlerdir. Yaptıkları çalışmanın sonucunda, anotta kanalın çıkışına doğru hidrojen kütle oranının yükselmesinin, her bir proton atomunun katoda üç su molekülü ile taşınmasının sebep olduğunu belirtmişlerdir. Ayrıca, katottaki suyun kütle oranının artması da aynı sebebe bağlanmıştır. Bunun yanı sıra, oksijenin kütle oranının azalmasına ise kanal boyunca reaksiyona girip tükenmesinin sebep olduğu ortaya atılmıştır. Bu çalışmadan çıkarılacak en önemli sonuç ise, yakıt pilinin düşük voltajda çalışırken daha çok reaksiyonun gerçekleştiği ve buna bağlı olarak daha çok akım ve su üretildiğidir.



Şekil 2.11. Farklı voltaj değerlerinde, reaksiyona giren gazların kanal boyunca kütle oranları değişimi: (a) 0,6 V (b) 0,7 V [46]

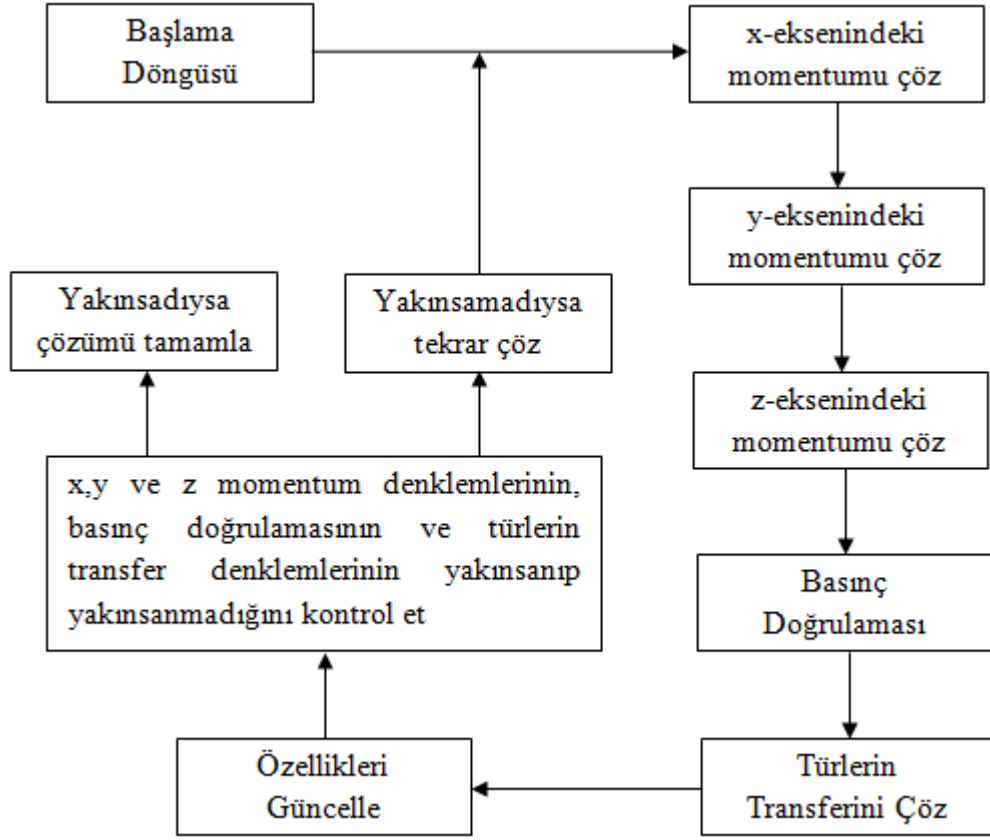
Agar[47] yapmış olduğu yüksek lisans tez çalışmasında, tek fazlı, iki boyutlu, izotermal, akışa dik ve akışa paralel modeller oluşturmuştur. Oluşturduğu modellerde, hem girişte hem de çıkışta basınç tanımlamış ve modelleri 0,3-1,2 V arasında çözümlenmiştir. Bu sayede, performans eğrileri elde etmiştir. Yaptığı çalışmaların sonucunda, hücre potansiyelini artırmanın O_2 girişindeki akım

yoğunluğunun artmasına sebep olduğunu ve bu durumun da H₂ ve O₂ tüketimini arttırdığını vurgulamıştır.

Ekiz[48] yüksek lisans tez çalışmasında, Agar'ın oluşturduğu modele benzer kabulleri kullanarak akışa paralel bir model oluşturmuştur. Oluşturduğu bu modelin en büyük farkı girişte basınç yerine hız tanımlaması olmuştur. Bu modelde, kanal boyu, giriş hızları, çıkış basınçları ve kanallara yerleştirilen engellerin performansa olan etkileri araştırılmıştır. Sonuç olarak, kanal boyunun artması performansı olumsuz yönde etkilerken, giriş hızları, çıkış basınçları ve kanallara yerleştirilen farklı geometrilerdeki engellerin derinliklerinin artması performansın artmasını sağlamıştır.

2.7.4. Üç Boyutlu Modeller

PEM tipi yakıt pillerinde 2000'li yıllardan itibaren boyutta ilerleme gözlemlenmiş ve üç boyutlu analizler yapılmaya başlanmıştır. Dutta[49] tarafından, üç boyutlu, izotermal ve kararlı haldeki model bu yılda yayınlanmıştır. Elektrokimyasal reaksiyona ek olarak modifikasyon kaynağı eklenmiş ve model ticari yazılım Fluent'in kullanılmasıyla oluşturulmuştur. Üç boyutun sebep olduğu uzun hesaplama zamanından kurtulabilmek için şekil 2.12'de gösterilen çözüm prosedürü izlenmiştir.



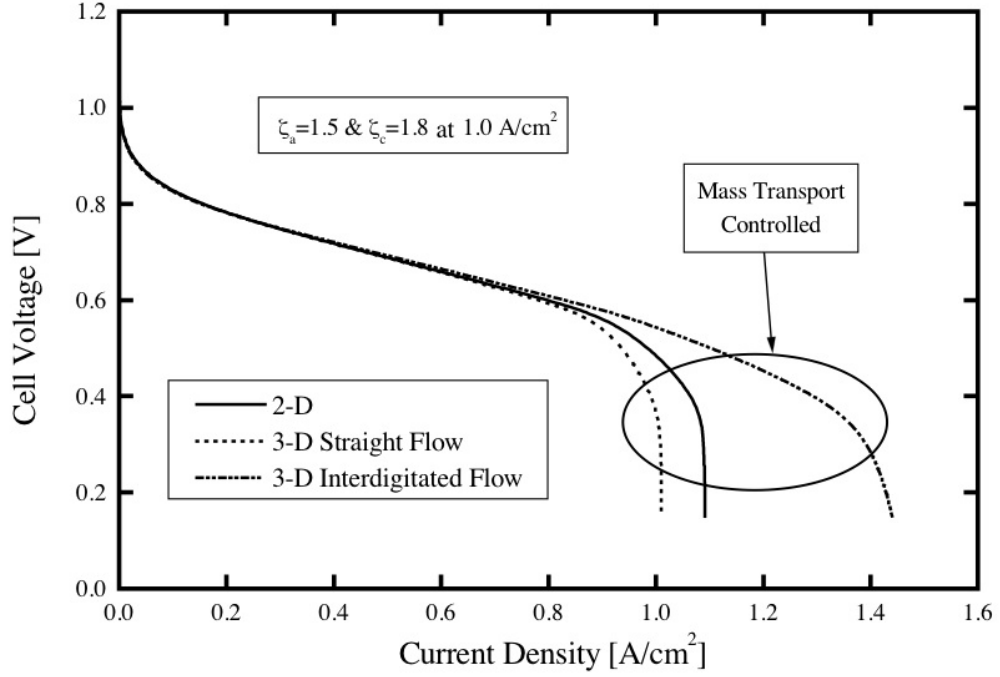
Şekil 2.12. Çözüm prosedürünün akış diyagramı[49]

Sonuç olarak; gaz difüzyon tabakalarının konvektif akışa karşı bir direnç olarak görülmelerine rağmen, daha geniş reaksiyon alanı yaratmada yardımcı olduğu belirtilmiştir. Bu sebeple, gaz difüzyon tabakalarının daha yüksek akım yoğunlu sağladığı sonucuna varılmıştır.

Berning ve arkadaşları[50] tarafından kapsamlı bir üç boyutlu, izotermal olmayan PEM yakıt pili oluşturuldu. Dutta'nın oluşturduğu modeldeki gibi, bu model de anot, katot, zar ve temas yüzeylerinin oluşturduğu katalist tabakasından meydana geliyordu. Oluşturulan bu model tek fazlı olmasına rağmen, tüm önemli taşınım olaylarını dikkate alıyordu. Sonuç olarak, model gaz sıcaklık dağılımını ve suyun zar boyunca net akısını üç boyutlu olarak veriyordu. Bununla beraber yazarlar, homojen olmayan bir katalist tabakasının, düzgün dağılım göstermeyen akım yoğunluğu için çözülmesini tavsiye etmişlerdir.

Natarajan ve Nguyen[51] kanal boyunca temel ilkeleri daha iyi anlayabilmek için, daha önceden oluşturdukları iki boyutlu modellerini üç boyutlu modele genişlettiler. Gaz kanallarında sadece konveksiyon ile taşınımın dikkate alındığı bu modelde, gaz difüzyon tabakasında, difüzyon, taşınım için geçerli olan tek mekanizma olarak kabul edilmiştir. Modelin doğrulanmasının ardından ise, kanallar içerisindeki oksijen kütle oranının, reaksiyon ve suyun buharlaşması sonucu değiştiği belirtilmiş ve oksijen kütle oranındaki bu değişimin, kanal boyunca gerçekleşen akım yoğunluğu değişimiyle bağlantılı olduğu gösterilmiştir. Bu nedenle, pilin çalışma sıcaklığının yükseltilmesi ve gazların giriş nemliliğinin azaltılması pilin performansını arttırmıştır.

Um ve Wang[52] tarafından yayınlanan makalede iç içe ve klasik kanal geometrisi karşılaştırılmış ve kanal geometrisinin yakıt pili performansı üzerindeki etkisi incelenmiştir. Bu model onların daha önce yayınladıkları iki boyutlu modelin üç boyuta genişletilmiş versiyonudur. Modelin doğrulanması bir önceki gibi gerçekleştirildi ancak bu yayında farklı olarak Penn State Elektrokimyasal Motor Merkezi'nden alınan deneysel polarizasyon eğrileri de eklenmiştir. Sonuç olarak, iç içe akış alanı tasarımlarının, oksijen taşınımını arttırdığı ve bunun da yakıt pili performansını, kütle taşınım limitini artırarak yükselttiği belirlenmiştir.(Şekil 2.13)



Şekil 2.13. Farklı polarizasyon eğrileri[51]

Güvelioglu ve Stenger[53] yayınladıkları makalede kanal geometrisi ve hidrojenin nemlendirilmesi üzerine çalışmışlar ve bu durumun yakıt pili performansı üzerindeki etkileri belirlemişlerdir. Yaptıkları çalışmada çift kutuplu plakların akış kanalları çıkışına farklı basınç değerleri uygulamışlardır. Yaptıkların bu çalışmaların sonucunda, daha yüksek akım yoğunluğu elde etmek için daha küçük akış kanalı boyu ve yakıt pili geometrisinin gerekli olduğunu belirtmişlerdir.

Lobato ve arkadaşları[54], yaptıkları çalışmada 50 m²'lik aktif alana sahip, üç boyutlu bir yakıt pili modeli oluşturmuşlardır. Oluşturulan modelin incelenmesi, hesaplamalı akışkanlar dinamiği(CFD) yöntemi ile yapılmıştır. Model üzerinde yaptıkları denemelerin sonucunda, yakıt pilini düşük oksijen debileri ile beslediklerinde kütle transferi sorunları görülmüş ve buna bağlı olarak konsantrasyon kayıplarının arttığı ve düşük akım yoğunluğu elde edildiği belirtilmiştir. Bunun yanında, gazların giriş hızını kademeli olarak arttırdıklarında, performansın belli bir

değere kadar arttığı, fakat o değerden sonra performansın çok fazla artmadığı görülmüştür.

Ramesh ve arkadaşları [55] yayınladıkları makalede, COMSOL ticari uygulamasını kullanarak üç boyutlu PEM tipi bir yakıt pili modeli oluşturmuşlardır. Oluşturdukları modelin doğrulanmasını, modelden elde ettikleri polarizasyon eğrisi ile kendi yaptıkları deneylerin sonucunda elde ettikleri polarizasyon eğrilerini karşılaştırarak yapmışlardır. Modeli doğruladıktan sonra, akış kanalı ve akış kanal sırtı genişliğinin performans üzerine olan etkisini incelemişlerdir. Sonuç olarak, kanal genişliği 0.5 mm 'den, 2 mm'ye genişlediğinde yakıt pili performansının azaldığını belirtmişlerdir. Aynı şekilde, akış kanalı sırtının genişlemesi de performansı olumsuz etkilemektedir.

2.7.5. Literatür Araştırmasının Özeti

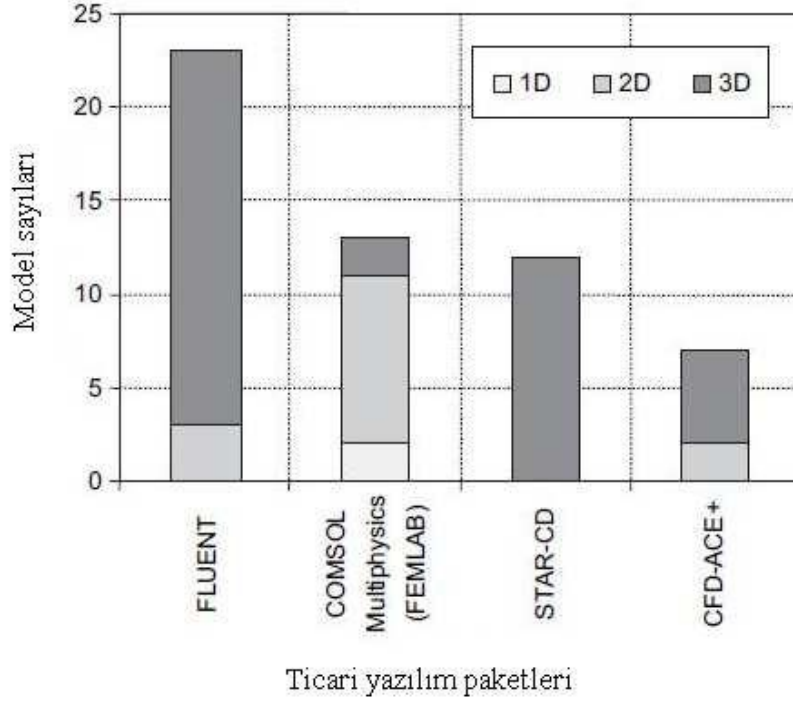
Araştırılan makalelere göre model boyutu karşılaştırıldığında, üç boyutlu PEM tipi yakıt pili modellerinin en önemli farkı daha detaylı sonuçlar vermesi ve ayrıca kanal boyunca türlerin dağılımını gösterebilmesidir. Bunun yanında, üç boyutlu model daha karmaşık bir geometriyi ve daha yüksek sayıda noktayı çözümlediği için daha fazla zamana ihtiyaç duymaktadır.

Katalist modelleme üzerine yapılan çalışmalar karşılaştırıldığında, yığın uygulamasının, katalist modeli olarak diğerlerinden daha uygun bir model olduğu görülmektedir. Bu yüzden bu çalışmada yığın modelin uygulanmasına karar verilmiştir.

2.7.6. Ticari Yazılımların Literatürde Kullanımı

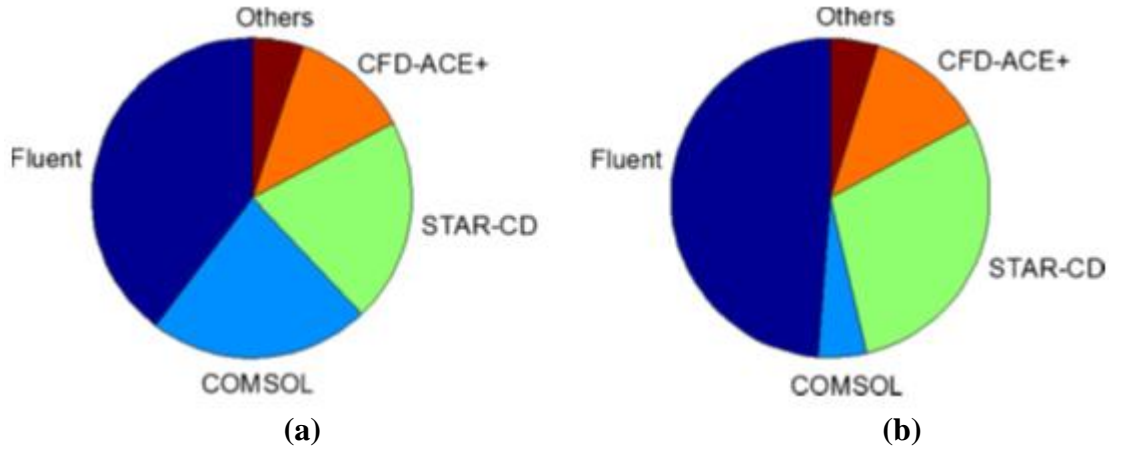
Ticari yazılım programlarının önemi, bütün yakıt pili türlerinin modellenmesinde gün geçtikçe artmaktadır. Bu kısımda ticari yazılımların kullanımını karşılaştırılacaktır.

Siegel[56] yapmış olduđu çalışmada, PEM tipi yakıt pilinin modellenmesinde sıklıkla kullanılan ticari yazılım programlarını karşılaştırmıştır. (Şekil 2.14)



Şekil 2.14. PEM tipi yakıt pilinin modellenmesinde kullanılan yazılımlar [56]

Khan ve arkadaşlarının[57] çok fazlı PEM tipi yakıt pili modellerindeki, taşınım olayını ve katalist reaksiyonlarını inceledikleri çalışmalarında, ticari yazılımların kullanımı ile ilgili, Fluent'in en çok kullanılan yazılım olduğunu belirtmişlerdir. Ayrıca, COMSOL programının iki boyutlu uygulamalarda, üç boyutlu uygulamalara kıyasla daha çok tercih edildiği Şekil 2.15 ile gösterilmiştir.



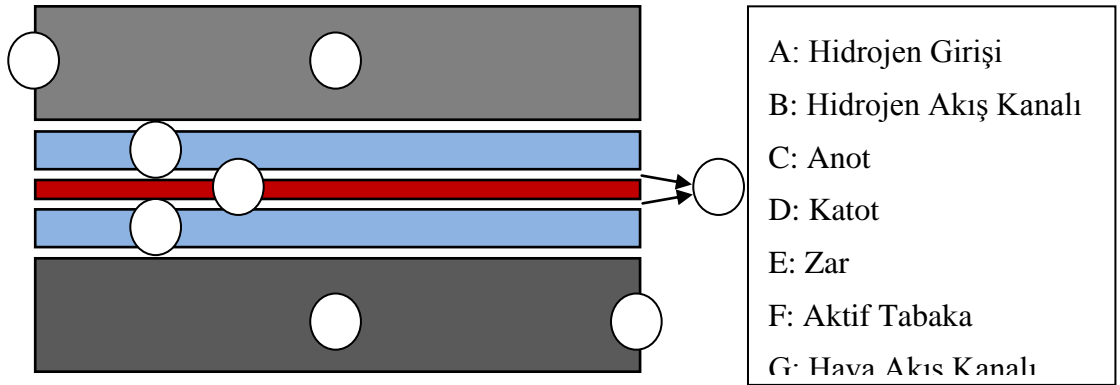
Şekil 2.15. PEM tipi yakıt pillerinin, hesaplamalı akışkanlar dinamiği ile modellenmesinde kullanılan ticari ve ticari olmayan yazılımların (a) toplamda karşılaştırılması, (b) 3 boyutlu modellerde karşılaştırma [57]

BÖLÜM 3

3. MODELLEME

3.1. Modelleme Varsayımları

Bu çalışma serpantin akış alanlı PEM tipi yakıt pilinin nümerik modellenmesini anlatmaktadır. Oluşturulan modeller akışa paralel kesit alana sahip iki boyutlu ve üç boyutlu modellerden oluşmaktadır.



Şekil 3.1. Akışa paralel model

Nemlendirilmiş hidrojen ve nemlendirilmiş hava kanallarının girişlerinden gönderilmektedir. Anot tarafında hidrojen, katalist tabakada tepkimeye girmektedir ve iyonik akımı katot tarafına ulaştıran protonları oluşturmaktadır. Hem iki boyutlu hem de üç boyutlu modellerde bir protonun bir su molekülünü anot tarafından katot tarafına sürüklediği kabul edilmiştir. Katot katalist tabakasında ise bu protonlar oksijenle birlikte reaksiyona uğramakta ve su oluşmasını sağlamaktadır.

Bu model tek fazlı bir modeldir, bu yüzden türler sadece gaz fazındadır ve sıvı formları ihmal edilmiştir. Nemlendirilmiş hidrojen ve nemlendirilmiş hava ideal gaz olarak kabul edilmiş, hem konveksiyonla hem de difüzyonla taşındığı varsayılmıştır.

Elektrot ve kanalların gözeneklilik, geçirgenlik veya iletkenlik gibi özelliklerinin homojen olduğu kabul edilmiştir.

Katalist tabakasındaki reaksiyonlar için yığın (agglomerate) modeli kullanılmıştır. Katalist tabakasının karbon, katalist metali ve elektrolitten oluşan ve gaz delikleri tarafından ayrılan bir yapıya sahip olduğu kabul edilmiştir. Gazlar öncelikle difüzyon tabakasındaki delikler tarafından daha sonra ise elektrolit tarafından difüze edilir, sonrasında ise gaz katalist tabakasına ulaşır.

3.2. Yük Korunumu

PEM Yakıt pilindeki potansiyel dağılımını tanımlamak için yüklerin korunumu denklemleri kullanılmıştır.

$$\nabla \cdot (-\kappa_s \nabla \phi_s) = 0 \quad (3.1)$$

$$\nabla \cdot (-\kappa_m \nabla \phi_m) = 0 \quad (3.2)$$

Burada κ_s katı halin(anot ve katot) elektronik iletkenliği ve κ_m zarın iyonik iletkenliğidir. ϕ_s ve ϕ_m zar boyunca oluşan potansiyel farkı belirlemektedir. Burada Denklem 3.1, C ve D bölgelerinde ve Denklem 3.2 ise E bölgesinde tanımlanmaktadır.

Literatür araştırmasındaki çalışmaların büyük çoğunluğunda kullanıldığı gibi bu çalışmada da Butler-Volmer denklemleri katalist tabakasında sınır koşulu olarak gerilim ve akım yoğunluğu arasında ilişkiyi bulmak için kullanılmıştır.

Zarda içeri doğru iyonik akım yoğunlu anot ve katot taraflarında tanımlanmıştır. Bu değerler ise i_a ve i_c olup aşağıdaki denklem sayesinde elde edilmiştir:

$$i_e = L_{act}(1 - \varepsilon_{mac})j_{agg,e} \quad (3.3)$$

Burada;

- “e” anot için kullanıldığında “a”, katot için kullanıldığında “c” olarak değişmektedir
- L_{act} aktif tabakanın kalınlığıdır (m)
- ϵ_{mac} makroskobik gözeneklilik
- $i_{agg,e}$ agglomerate model tarafından verilen akım yoğunluğu

Kullanılan bu yığın modelde, katalist tabakasındaki akım yoğunluğu bölgesel olarak tanımlanmaktadır. Bu yerel akım yoğunlukları difüzyon denklemleri ile Butler-Volmer denklemlerinin birlikte analitik olarak çözümlenmesiyle verilmektedir.

$$i_{agg,e} = -6n_e \frac{D_{agg}}{R_{agg}^2} (1 - \lambda_e \coth \lambda_e) \beta_e \quad (3.4)$$

Denklem 3.2’teki β ve λ değerleri anot ve katot için farklıdır ve her iki elektrottaki akım yoğunluklarının hesaplanması için bilinmesi gereken değerlerdir. Oluşturulmuş olan mevcut modelde, aşağıda verilen formüller kullanılarak bulunabilirler.

$$\lambda_a = \sqrt{\frac{i_{0a} S R_{agg}^2}{2 F c_{H_2,ref} D_{agg}}} \quad (3.5)$$

$$\lambda_c = \sqrt{\frac{i_{0c} S R_{agg}^2}{4 F c_{O_2,ref} D_{agg}}} \exp\left(-\frac{F}{2RT} \eta_c\right) \quad (3.6)$$

$$\beta_a = \left[c_{H_2,ref} - c_{H_2,ref} \exp\left(\frac{-2F}{RT} \eta_a\right) \right] \quad (3.7)$$

$$\beta_c = c_{O_2,agg} \quad (3.8)$$

Denklemlerde kullanılan simgelerin açıklaması aşağıdaki gibidir:

- D_{agg} yığın gaz difüzyon katsayısı (m^2/s)
- R_{agg} yığın yarıçapı (m)

- n_e yük transfer sayısı (H^+ için 1 ve O_2^{-2} için -2)
- S yığın içerisindeki aktif tabakanın spesifik alanı (1/m)
- F Faraday sabiti (C/mol)
- $c_{i,ref}$ türlerin referans konsantrasyonu (mol/m^3)
- $c_{agg,i}$ yığın yüzeyindeki konsantrasyonlar (mol/m^3)
- i_{0a} ve i_{0c} değişim akım yoğunlukları (A/m^2)
- R gaz sabiti (J/(molK))
- T sıcaklık (K)

Bunların yanı sıra anotta ve katotta gerçekleşen potansiyel kayıpları aşağıdaki denklemlerle tanımlanmıştır (η_a ve η_c) :

$$\eta_a = \phi_s - \phi_m - E_{eq,a} \quad (3.9)$$

$$\eta_c = \phi_s - \phi_m - E_{eq,c} \quad (3.10)$$

Denklemlerdeki $E_{eq,a}$ ve $E_{eq,c}$ anot ve katottaki denge gerilimlerini ifade etmektedir.

Aktif tabakalarda gerçekleşen reaksiyonlarla birlikte oksijen ve hidrojen tükenmektedir. Bu nedenle tanımlanan yığın model yüzeyindeki aktif tabaka içindeki hidrojen ve oksijen konsantrasyonları değişmektedir. Bu değişim Henry kanunu ile tanımlanmaktadır.

$$c_{agg,H2} = \frac{p_H x_H}{K_H} \quad (3.11)$$

$$c_{agg,O2} = \frac{p_O x_O}{K_O} \quad (3.12)$$

Denklemlerdeki K_H , ve K_O , sırasıyla hidrojen ve oksijen için Henry sabitlerini temsil etmektedir.

Modelde akım toplayıcı plakalara temas ettiği varsayılan yüzeyler dışındaki diğer tüm yüzeylerinin sınır koşulu “elektriksel yalıtım” olarak kabul edilmiştir. Gerçekte olduğu gibi anot tarafındaki çift kutuplu plaka ile katot tarafındaki çift kutuplu plaka arasındaki potansiyel fark toplam hücre potansiyelini vermektedir. Modelde anot tarafındaki gerilim değeri sıfıra eşitlenirken katot tarafındaki gerilim değeri ise hücrenin çalışma potansiyeline (V_{cell}) eşitlenmiştir. Hücrenin potansiyeli bu iki değer farkına eşittir.

$$\phi_{s,a} = 0 \quad (3.13)$$

$$\phi_{s,k} = V_{cell} \quad (3.14)$$

3.3. Momentum Korunumu

Akışa paralel olarak oluşturulan bu modelde, gözenekli ortamdaki akış için Brinkman Denklemleri kullanılmıştır. Bu durum, mevcut model ile literatürdeki modeller arasındaki en önemli farklılıktır. Literatürdeki modellerde gözenekli ortamdaki momentum korunumunu açıklamak için Darcy Kanunu kullanılmıştır.

Brinkman Denklemleri’nde kayma gerilmesinin sebep olduğu momentum transferi önem arz etmektedir. Bu da Brinkman Denklemleri’nin, Darcy Kanunu’nda göz ardı edilen viskoz etkileri dikkate alan, genişletilmiş bir versiyon olduğu anlamına gelmektedir. Ayrıca, Brinkman Denklemleri COMSOL içerisinde tanımlanan serbest akış ile uyumlu bir şekilde çalışabilmektedir.

Bununla beraber, bu uygulama moduyla birlikte B ve C bölgeleri ile E ve F bölgeleri arasında sınır koşulu tanımlamaya gerek kalmaz. Bu sayede kanallar ile elektrotları ayrı ayrı modellemeye gerek yoktur, anot kanalı ile anot ve katot kanalı ile katot beraber modellenebilir. Bu yüzden, kanallar ile elektrotlar arasında sınır koşulu tanımlama gereksinimi de ortadan kalkar.

Çift kutuplu plakalar üzerindeki akış kanallarında gerçekleşen akış Navier-Stokes denklemleri ile tanımlanmaktadır.

$$\nabla(\rho_{mix}u) = 0 \quad (3.15)$$

$$\nabla[-\eta(\nabla u + (\nabla u)^T) + pI] = -\rho_{mix} (u\nabla)u \quad (3.16)$$

Denklemdaki simgelerin açıklaması aşağıdaki gibidir.

- η , dinamik viskozite (Pa.s)
- u , akışkanın hızı (m/s)
- P , akışkan karışımının yoğunluğu (kg/m³)
- p , basınç (Pa)

Gözenekli ortamda gerçekleşen akışın tanımlanmasında ise Brinkman Denklemleri kullanılmaktadır.

$$\nabla(\rho_{mix}u) = 0 \quad (3.17)$$

$$\nabla \left[\frac{-\eta}{\epsilon_p} (\nabla u + (\nabla u)^T) + pI \right] = \frac{-\eta}{\kappa_p} u \quad (3.18)$$

Denklemlerde:

- κ , geçirgenlik (m²)
- ϵ_p , gözeneklilik (birimsiz)

3.4. Maxwell-Stefan Denklemleri (Kütle Transferi)

Maxwell-Stefan denklemlerine göre kütle transferinde daha yaygın olarak kullanılan Fick Kanunu, türlerin sadece çözücü ile etkileşime girmesi kabulüne dayanmaktadır. Ayrıca, böyle etkileşimlerde konsantrasyon, difüzyon katsayılarını etkilememektedir. Buna rağmen, gaz fazındaki karışımlarında, bütün türler birbirleri

ile etkileşim halindedir. Bu nedenle difüzyon katsayıları basınç ve sıcaklığın yanı sıra, konsantrasyona da bağlı olarak değişmektedir.

Mevcut model, anot tarafında H₂ ve H₂O olmak üzere iki farklı tür, katot tarafında ise O₂, N₂ ve H₂O olmak üzere üç farklı tür içermektedir. Modelde, Maxwell-Stefan denklemlerinin bir örneği hem anot hem de katot için ayrı ayrı çözümlenmiştir. Modelde kütle oranlarını bulmak için kullanılan çok bileşenli Maxwell-Stefan difüzyon denklemi aşağıdaki gibidir:

$$R_i = \frac{\partial}{\partial t} p w_i + \nabla \cdot \left[-\rho w_i \sum_{j=1}^N D_{ij} \left\{ \frac{M}{M_j} \left(\nabla w_j + w_j \frac{\nabla M}{M} \right) + (x_j - w_j) \frac{\nabla p}{p} \right\} + w_i \rho u + D_i^T \frac{\nabla T}{T} \right] \quad (3.19)$$

Mevcut modelde, sıcaklıkla etkilenen difüzyon önemsiz kabul edilmiş ve R_i değeri sıfır olarak alınmıştır. Katot tarafındaki gazlar için kütle transferi, (oksijen 1, su 2 ve nitrojen 3 olmak üzere) aşağıdaki üç denklem ile tanımlanmaktadır.

$$\nabla \cdot \left\{ -\rho w_1 \sum_j \left[D_{1j} \left(\nabla x_j + (x_j - w_j) (\nabla p / p) \right) \right] \right\} = -(\rho u \cdot \nabla w_1) \quad (3.20)$$

$$\nabla \cdot \left\{ -\rho w_2 \sum_j \left[D_{2j} \left(\nabla x_j + (x_j - w_j) (\nabla p / p) \right) \right] \right\} = -(\rho u \cdot \nabla w_2) \quad (3.21)$$

$$w_3 = 1 - w_1 - w_2 \quad (3.22)$$

Denklemlerde, “p” basınç (Pa), “T” sıcaklık (K) ve “u” hız olarak tanımlanmıştır. D_{ij} nümerik modelinden hesaplanan Maxwell-Stefan difüzyon matrisidir (m²/s). Akış kanallarının girişinde besleme gazlarının kütle oranları programa girdi olarak verilmiştir. Anot tarafında hidrojenin kütle akısı ile katot tarafındaki oksijen ve suyun kütle akısı elektrokimyasal reaksiyonların hızı ile belirlenmiştir. Akış kanallarının çıkışında ise zorlanmış akış sınır koşulu olarak tanımlanmıştır. Bunun anlamı, çıkışlarda konveksiyonla akış baskın gelmektedir. Sınır koşullarındaki, kütle transferini tanımlamak için ise aşağıdaki denklemler kullanılmıştır.

$$-n \cdot N_{H_2} \Big|_{anot} = \frac{j_{anot}}{2F} M_{H_2} \quad (3.23)$$

$$-n \cdot N_{O_2} \Big|_{katot} = \frac{j_{katot}}{4F} M_{O_2} \quad (3.24)$$

$$-n \cdot N_{H_2O} \Big|_{katot} = \frac{j_{katot}}{F} (0.5 + \lambda_{H_2O}) M_{H_2O} \quad (3.25)$$

3.5. Model Analizi

Önceki kısımlarda, matematiksel model hakkında temel eşitlikler sunulmuştur. Bu kısımda ise, modellerin COMSOL ticari yazılımı vasıtasıyla nasıl oluşturulduğu anlatılacaktır.

3.5.1. Model Geometrileri

Akışa paralel olarak oluşturulan modellerin basit şekli daha önce gösterilmişti (Şekil 3.1). Oluşturulan iki boyutlu, üç boyutlu düz ve üç boyutlu silindirik modellerin boyutları ise sırasıyla Tablo 3.1, Tablo 3.2 ve Tablo 3.3'te gösterilmiştir.

Tablo 3.1. İki boyutlu modelin geometrik özellikleri

	Zar	Elektrot	Akış Kanalı
Uzunluk	10 mm	10 mm	10 mm
Yükseklik	0,1 mm	0.25 mm	1 mm

Tablo 3.2. Üç boyutlu düz modelin geometrik özellikleri

	Zar	Elektrot	Akış Kanalı
Uzunluk	10 mm	10 mm	10 mm
Yükseklik	0,1 mm	0.25 mm	1 mm
Genişlik	1 mm	1 mm	1 mm

Tablo 3.3. Üç boyutlu silindirik modelin geometrik özellikleri

	Katot Akış Kanalı	Katot	Zar	Anot	Anot Akış Kanalı
Yarıçap	4 mm	3 mm	2.75 mm	2.65 mm	2.4 mm
Yükseklik	1 mm	0.25 mm	0.1 mm	0.25 mm	1 mm
Genişlik	1 mm	1 mm	1 mm	1 mm	1 mm

3.5.2. Kullanılan Sabitler

Oluşturulan modellerin çözümünde kullanılan sabitler Şekil 3.4'te verilmiştir. Bu tablodan yakıt hücresine giren elemanların giriş ağırlık oranları bilinmektedir. Ayrıca, katottaki akış kanalına giren havanın %21'inin oksijen olduğu kabul edilmiştir. Bu bilinenlere göre anot ve katottaki akış kanallarında, gaz karışımlarının yoğunlukları aşağıdaki formüllerle hesaplanmıştır. Denklem 3.26 anot için, Denklem 3.27 ise katot için kullanılmaktadır.

$$\rho_{mix} = \frac{p}{RT} (x_{H_2} M_{H_2} + x_{H_2O_a} M_{H_2O}) \quad (3.26)$$

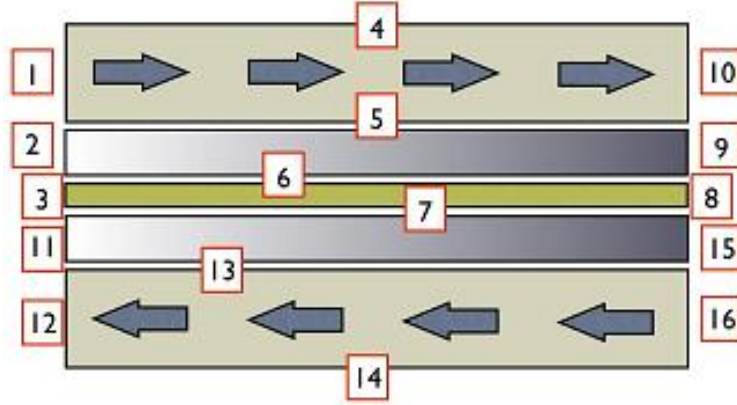
$$\rho_{mix} = \frac{p}{RT} (x_{O_2} M_{O_2} + x_{H_2O_c} M_{H_2O} + x_{N_2} M_{N_2}) \quad (3.27)$$

Tablo 3.4. Modellerin çözümünde kullanılan sabitler

İsim	Tanım	Değer	Açıklama
kappa_s	1000[S/m]	1000[S/m]	Elektrotların elektronik iletkenliği
kappa_m	9[S/m]	9[S/m]	Zar iletkenliği
V_cell	0.6[V]	0.6[V]	Hücre voltajı
R	8.314[J/(mol*K)]	8.314[J/(mol*K)]	İdeal Gaz sabiti
T	353[K]	353[K]	Sıcaklık
F	96485[C/mol]	96485[C/mol]	Faraday sabiti
kappa_p	1e-13[m^2]	(1e-13)[m2]	Elektrot geçirgenliği
eta	2.1e-5[Pa*s]	(2.1e-5)[kg/(m*s)]	Elektrot gözeneklerindeki gaz viskozitesi
p_ref	1.013e5[Pa]	1.013e5[Pa]	Referans basıncı
p_a_in	1.00001*p_ref	1.01301e5[Pa]	Anot girişi basıncı
p_c_in	1.00001*p_ref	1.01301e5[Pa]	Katot girişi basıncı
drag	1	1	Su sürüklenme katsayısı
E_eq_a	0[V]	0[V]	Anot denge potansiyeli
E_eq_c	1[V]	1[V]	Katot denge potansiyeli
i0_a	1e5[A/m^2]	1e5[A/m2]	Anot kısmı değişim akım yoğunluğu
i0_c	1[A/m^2]	1[A/m2]	Katot kısmı değişim akım yoğunluğu
S	1e7[1/m]	1e7[1/m]	Elektrotların özgül yüzey alanı
R_agg	0.1[um]	(1e-7)[m]	Yiğın parçacık çapı
l_act	10[um]	(1e-5)[m]	Katalizör katmanı kalınlığı
eps_mic	0,2	0,2	Yiğın içindeki mikroskobik gözeneklilik
eps_mac	0,4	0,4	Yiğınlar arasındaki makroskobik gözeneklilik
D_agg	1.2e-10[m^2/s]*((1-eps_mac)*(eps_mic))^1.5	(4.988306e-12)[m2/s]	Yiğın içerisinde gaz yayılım katsayısı
D_effH2_H2O	0.915e-4[m^2/s]*(T/307.1[K])^1.5*(eps_mac)^1.5	(2.852682e-5)[m2/s]	H2 - H2O arasındaki efektif ikili yayılım
D_effO2_H2O	0.282e-4[m^2/s]/(T/308.1[K])^1.5*(eps_mac)^1.5	(5.817208e-6)[m2/s]	O2 - H2O arasındaki efektif ikili yayılım
D_effO2_N2	0.22e-4[m^2/s]*(T/293.2[K])^1.5*(eps_mac)^1.5	(7.352394e-6)[m2/s]	O2 - N2 arasındaki efektif ikili yayılım
D_effH2O_N2	0.256e-4[m^2/s]*(T/307.5[K])^1.5*(eps_mac)^1.5	(7.965707e-6)[m2/s]	H2O - N2 arasındaki efektif ikili yayılım
wH2_in	0.1	0.1	Anot girişindeki, hidrojen ağırlık oranı
wO2_in	0.21*0.8	0.168	Katot girişindeki, oksijen ağırlık oranı
wH2Oc_in	0.2	0.2	Katot girişindeki, su ağırlık oranı
MH2	2[g/mol]	0.002[kg/mol]	Hidrojenin mol kütlesi
MO2	32[g/mol]	0.032[kg/mol]	Oksijenin mol kütlesi
MH2O	18[g/mol]	0.018[kg/mol]	Suyun mol kütlesi
MN2	28[g/mol]	0.028[kg/mol]	Azotun mol kütlesi
xH2_in	(wH2_in/MH2)/(wH2_in/MH2+(1-wH2_in)/MH2O)	0.5	Anot girişindeki, hidrojen mol oranı
xO2_in	(wO2_in/MO2)/(wO2_in/MO2+wH2Oc_in/MH2O+(1-wO2_in-wH2Oc_in)/MN2)	0.134849	Katot girişindeki, oksijen mol oranı
KH2	3.9e4[Pa*m^3/mol]	39000[J/mol]	Yiğın içindeki hidrojen için Henry konsantrasyon sabiti
KO2	3.2e4[Pa*m^3/mol]	32000[J/mol]	Yiğın içindeki oksijen için Henry konsantrasyon sabiti
cH2_ref	xH2_in*p_ref/KH2	1.298718[mol/m3]	Katalizör katmanında referans hidrojen Konsantrasyonu
cO2_ref	xO2_in*p_ref/KO2	0.42688[mol/m3]	Katalizör katmanında referans oksijen Konsantrasyonu
epsilon	0.4	0.4	Elektrotların kuru gözenekliliği
rho_mix_a	0.8[kg/m^3]	0.8[kg/m3]	Anot yoğunluğu
rho_mix_c	0.7[kg/m^3]	0.7[kg/m3]	Katot yoğunluğu

3.5.3. Modelde Kullanılan Uygulama Modları

Oluşturulan modellerin hepsinde COMSOL ticari yazılımının kütüphanesinde bulunan 3 farklı uygulama modu kullanılmıştır. Bunlar: Incompressible Navier-Stokes, Conductive Media DC (2 adet) ve Maxwell-Stefan Diffusion and Convection (2 adet). Bu kısımda bahsi geçen modların, model oluşturulurken nasıl kullanıldığından ve her bir mod için sınır koşullarından bahsedilecektir. Modlarda belirlenen sınır koşullarının daha iyi anlaşılabilmesi için, sınırlar Şekil 3.2'deki gibi numaralandırılmıştır.



Şekil 3.5. Sınır değerlerinin numaralandırılması

3.5.3.1. Incompressible Navier-Stokes

Bu moda sıkıştırılamaz akışı tanımlamak için Navier-Stokes denklemleri ile Brinkman denklemleri birlikte kullanılmıştır. Bu modelde, gözenekli alan akışı için Darcy Kanunu uygulama modu yerine Brinkman Eşitliği uygulama modu kullanılmıştır. Brinkman Eşitliğinin kullanılma sebebi, bu modda kanaldaki serbest akış ve gözenekli alan akışı arasında bir kombinasyon bulunmasıdır. COMSOL yazılımı, Brinkman Eşitliği uygulama modunda bu iki akışı kombine edebilme özelliğine sahiptir.

Incompressible Navier-Stokes ve Brinkman denklemleri hem anot hem katot tarafındaki akış kanalları ile elektrotlarda çözülmüştür. Zarda bu denklemlerde her hangi bir çözüm yapılmamıştır. Elektrotların elektron iletkenliği (κ_p), elektrotların geçirgenliği (η) ve gaz karışımlarının yoğunluğu (ρ), bu moda girdi olarak verilmiştir. Bu modda kullanılan önemli sınır koşulları ve sınır numaraları Tablo 3.5'te gösterilmiştir. Tabloda verilmeyen sınırlar için sınır koşulu kayma olmayan (no slip) olarak belirlenmiştir.

Tablo 3.5. Incompressible Navier-Stokes modu için önemli sınır koşulları

Sınırlar	1,16	9	12
Tip	Çıkış	Giriş	Giriş
	Basınç	Hız	Hız
Değer	p_ref (Pa)	0.2 (m/s)	0.4 (m/s)

Tablodan anlaşıldığı gibi bu modda, kanal çıkışları için basınç değerleri, girişleri için ise hız değerleri tanımlanmıştır. Sınır koşullarının bu şekilde belirlenmesindeki amaç, akış kanallarında sabit bir debide sürekli akış elde etmek ve bu sayede oluşabilecek basınç düşmelerinin önüne geçmektir. Bu sayede, akış kanallarındaki hidrojen ve havanın yüksek miktarlarda konsantrasyon kaybına uğraması engellenmiştir.

3.5.3.2. Conductive Media DC

Modellerde, bu moddan iki adet kullanılmıştır. Bunlardan biri elektrotlarda diğeri ise zarda aktiftir.

3.5.3.2.1. Elektrotlar

Bu modda zar alt alanı inaktif edilir ve girilecek olan sınır koşulları sadece elektrotlar için kullanılır. Elektrotların elektrik iletkenliği (κ_s), bu moda girdi olarak verilmiştir. Bu modda kullanılan önemli sınır koşulları ve sınır numaraları Tablo 3.6'da

gösterilmiştir. Tabloda verilmeyen sınırlar için sınır koşulu elektriksel yalıtım (electrical insulation) olarak belirlenmiştir.

Tablo 3.6. Elektrotlarda Conductive Media DC modu için önemli sınır koşulları

Sınırlar	4	6	8	10
Tip	Elektriksel Potansiyel	İç Akım	İç Akım	Elektriksel Potansiyel
Değer	V_cell (V)	-i_c (A/m ²)	-i_a (A/m ²)	0 (V)

Tablodaki değerlerden de anlaşıldığı gibi, anot ve katot arasında bir potansiyel fark oluşturulmuştur. Katotta tanımlana V_cell (hücre çalışma potansiyeli) için farklı değerler girilerek model çözülmüş. Ve performans eğrileri bu şekilde elde edilmiştir.

3.5.3.2.2. Zar

Bu modda elektrotların alt alanları inaktif edilir. Girilecek olan sınır koşulları ise sadece zar için kullanılır. Zarın iyonik iletkenliği (κ_m) bu moda girdi olarak verilmiştir. Bu modda kullanılan önemli sınır koşulları ve sınır numaraları Tablo 3.7'de gösterilmiştir. Tabloda verilmeyen sınırlar için sınır koşulu elektriksel yalıtım (electrical insulation) olarak belirlenmiştir.

Tablo 3.7. Elektrotlarda Conductive Media DC modu için önemli sınır koşulları

Sınırlar	6	8
Tip	İç Akım	İç Akım
Değer	i_c (A/m ²)	i_a (A/m ²)

Tablodan da görüldüğü üzere, zarın elektrotlar ile temas halinde olan kısımları için iç akım tanımlanmıştır.

3.5.3.3. Maxwell-Stefan Diffusion and Convection

Modellerde, bu moddan iki adet kullanılmıştır. Bunlardan biri anotta diğeri ise katotta aktiftir.

3.5.3.3.1. Anot

Bu modda katot akış kanalı, katot ve zar inaktif edilir. Girilecek olan sınır koşulları ise anot ve anot akış kanalında kullanılır. Bu modda kullanılan önemli sınır koşulları ve sınır numaraları Tablo 3.8’de gösterilmiştir. Tabloda verilmeyen sınırlar için sınır koşulu yalıtım/simetri (insulation/symmetry) olarak belirlenmiştir.

Tablo 3.8. Anotta Maxwell-Stefan diffusion and convection modu için sınır koşulları

Sınırlar	8	9	16
Tip	Akış	Kütle Kesri	Zorlanmış Akış
Değer	$-i_a \cdot M_{H_2} / (2 \cdot F)$ [kg/(m ² /s)]	wH2_in	wH2_in

3.5.3.3.2. Katot

Bu modda anot akış kanalı, anoot ve zar inaktif edilir. Girilecek olan sınır koşulları ise katot ve katot akış kanalında kullanılır. Bu modda kullanılan önemli sınır koşulları ve sınır numaraları Tablo 3.9’da gösterilmiştir. Tabloda verilmeyen sınırlar için sınır koşulu yalıtım/simetri (insulation/symmetry) olarak belirlenmiştir.

Tablo 3.9. Katotta Maxwell-Stefan diffusion and convection modu için sınır koşulları

Sınırlar	1	6	12
Tip	Zorlanmış Akış	Akış	Kütle Kesri
Değer	wO2_in	$i_c \cdot M_{O_2} / (4 \cdot F)$ [kg/(m ² /s)]	wO2_in

BÖLÜM 4

4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada farklı boyutlarda ve farklı çalışma koşullarındaki tek hücreli PEM tipi yakıt pili modellerinin performansı test edilmiştir. Modeller COMSOL® ticari yazılımında oluşturulmuş ve çözümleri yine bu programda yapılmıştır. Hücre çalışma potansiyellerine karşılık çizilen akım yoğunluğu grafikleri performansın tanımlanması için kullanılmıştır. Performans eğrisi olarak adlandırılan bu grafiklerin elde edilebilmesi için 0.1 V'tan 1.2V'a kadar, 0.1 V artış aralığı ile farklı hücre çalışma potansiyellerinde çözümler yapılmıştır. Ayrıca hücreden elde edilebilecek en yüksek akım yoğunluğunu öğrenebilmek için model 0.01 V'luk çalışma potansiyelinde de çözülmüştür. Oluşturulan modellerde kullanılan çözüm prosedürü bütün modellerde aynıdır ve bir sonraki kısımda anlatılmıştır. Ancak modellerin boyutları ve geometrileri değiştiğinden her bir modelin çözüm ağı birbirinden farklıdır.

4.1. Çözüm Prosedürü

COMSOL® ticari yazılımı kullanılarak çözülen bu modellerde, iterasyon sayısı en fazla 25 olarak ve göreceli tolerans ise 10^{-6} olarak kabul edilmiştir. Doğrusal olmayan (non-linear) çözüm metodu kullanılmıştır. Çözüm yakınsama sağlandığında gerçekleşmektedir. Bu nedenle yakınsamayı, dolayısıyla sonuçları elde etme süresini hızlandırmak için, 3 adımda çözüm gerçekleşmektedir. İlk olarak “Conductive Media DC” modu çözülür. Ardından bu modda alınan çözümler kullanılarak, “Incompressible Navier-Stokes” ve “Conductive Media DC” modları birlikte çözülür. Son olarak ise bir önceki adımdan elde edilen sonuçlar kullanılarak bütün modlar birlikte çözülür ve sonuçlar elde edilmiş olur. Bu basamaklı çözüm yöntemi oluşturulan bütün modellerde kullanılmıştır.

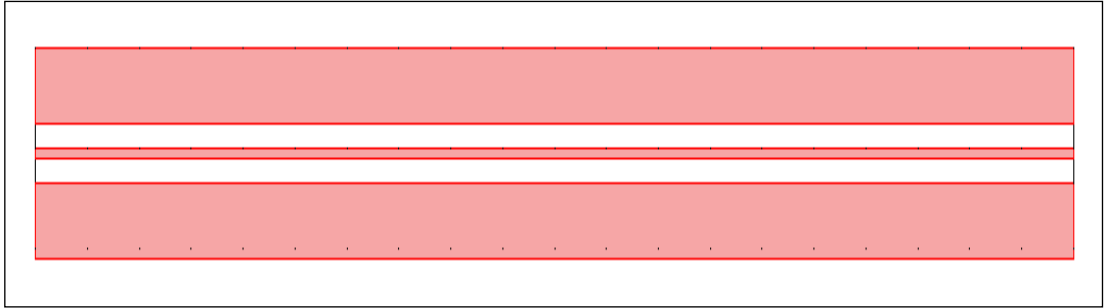
4.2. İki Boyutlu Model

4.2.1. İki Boyutlu Model Geometrisi ve Çözüm Ağı

İki boyutlu model akışa paralel olarak oluşturulmuştur. Anot akış kanalı, anot, zar, katot ve katot akış kanalı olmak üzere 5 bölgeden oluşmaktadır. Modelin geometrik özellikleri Tablo 4.1’de, geometrisi ise Şekil 4.1’de gösterilmiştir.

Tablo 4.1. İki boyutlu modelin geometrik özellikleri

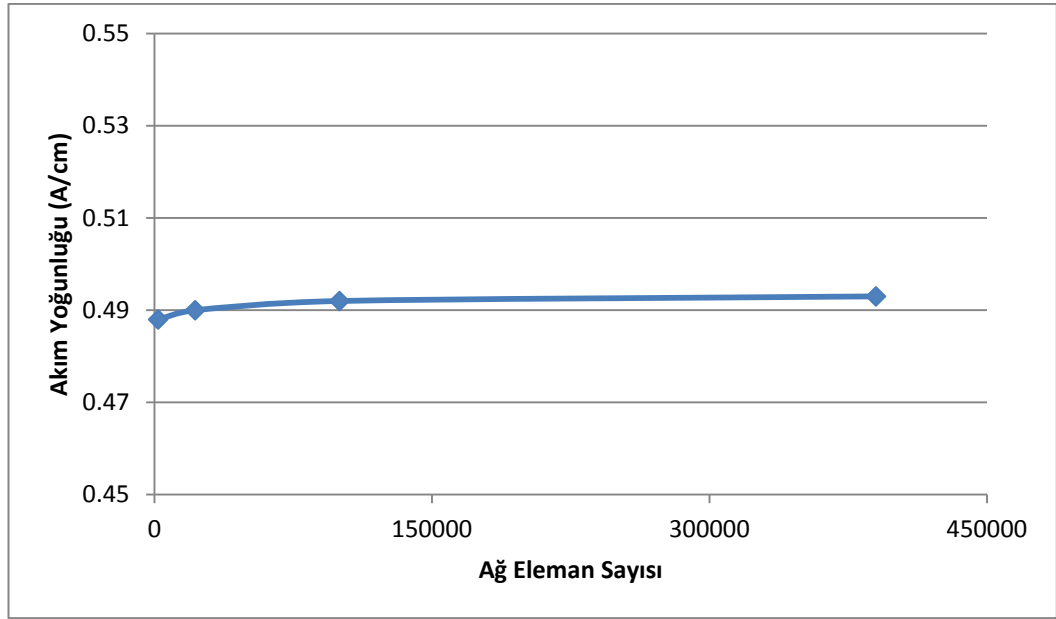
	Elektrotlar	Zar	Akış kanalları
Uzunluk	25 mm	25 mm	25 mm
Yükseklik	0.25 mm	0.1 mm	1 mm



Şekil 4.1. İki boyutlu model

Çözüm ağı oluşturulurken, COMSOL[®] ticari yazılımında bulunan “Serbest Çözüm Ağı Parametresi” (Free Mesh Parameters) kullanılmıştır. Öncelikle normal çözüm ağı oluşturulmuş fakat normal çözüm ağı yeterli bulunmamış ve daha iyi (finer) çözüm ağı oluşturulmuştur. Oluşturulan çözüm ağı istatistikleri Tablo 4.2’de, şekli ise Şekil 4.2’de gösterilmiştir.

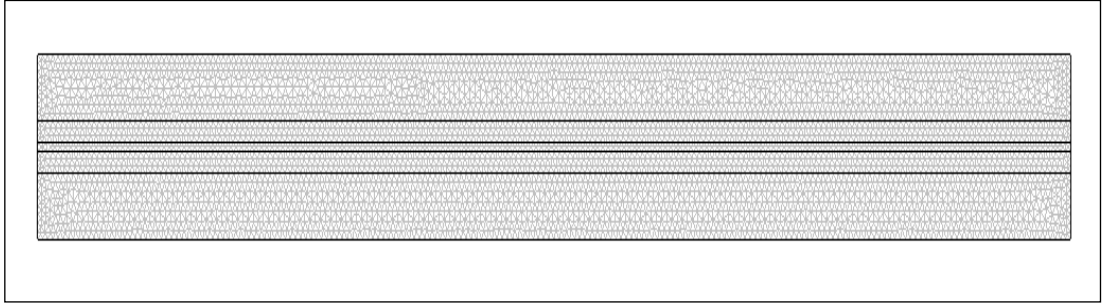
Sonlu eleman yöntemi ile hesaplama yapılan bu model çalışmasında, çözüm ağı eleman sayısının sonuçlar üzerinde etkili olması kaçınılmazdır. Fakat bu çalışmada kullanılan 2 boyutlu hesaplama geometrisinde çözüm ağı eleman sayısının sonuçlar üzerindeki etkisinin ihmal edilebilir derecede küçük olması öngörülmüştür. Bu öngörüü doğrulamak adına, çözüm ağı, farklı eleman kaliteleri seçilerek değiştirilmiş ve her bir çözüm ağı için 0,5 V altında akım yoğunlukları hesaplanmıştır. Çözüm ağı eleman sayısı, elle belirlenen eleman kalitesinin bir fonksiyonudur. Görüldüğü üzere (Şekil 4.2) ağ eleman sayısının arttırılmasının sonuçlar üzerinde önemli bir etkisi yoktur. Bu sebeple ağ elemanı sayısı çözüm hızının artması amaçlı düşük tutulmuştur.



Şekil 4.2. 0,5 V'ta farklı eleman sayısına sahip çözüm ağlarında ortaya çıkan akım yoğunlukları

Tablo 4.2. İki boyutlu modelin çözüm ağı istatistikleri

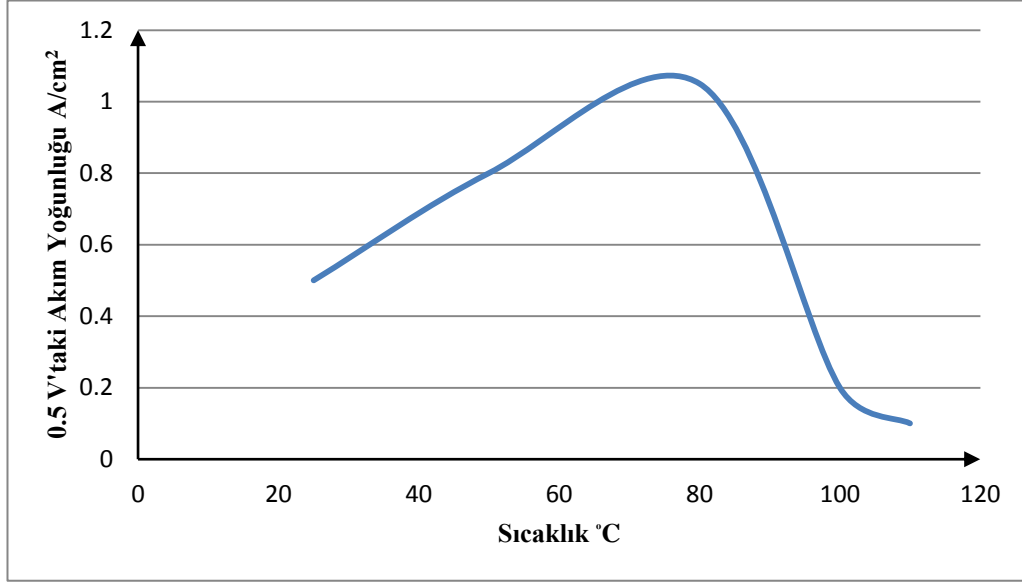
Serbestlik derecesi	72587
Çözüm ağı noktası sayısı	4736
Element sayısı	9024
Üçgen	9024
Sınır element sayısı	1246
Köşe element sayısı	12
En küçük element kalitesi	0.7097
Element alan oranı	0.1824



Şekil 4.3. İki boyutlu model çözüm ağı

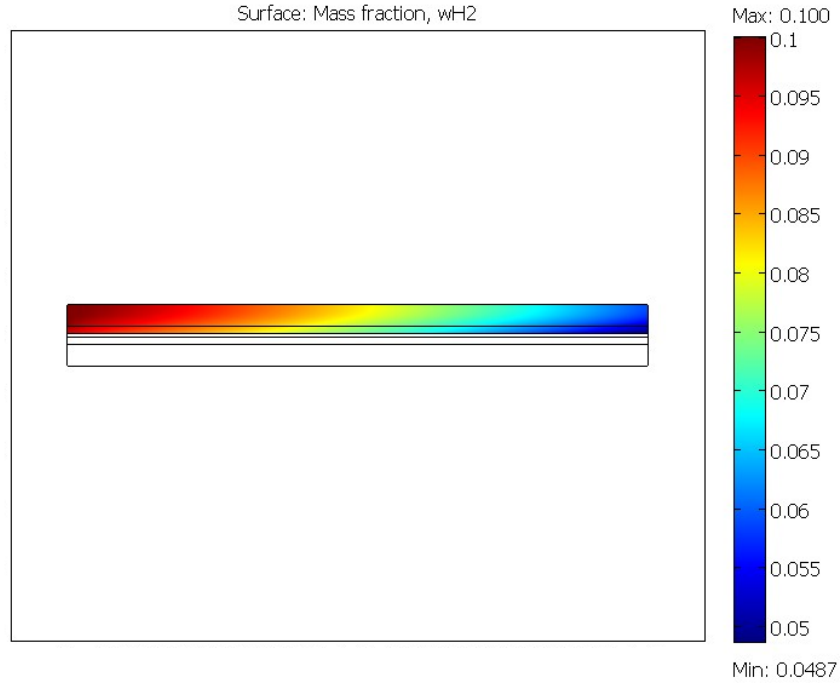
4.2.2. İki Boyutlu Model Sonuçları

Öncelikle model 0.5 V sabit çalışma potansiyelinde, 25 °C, 50 °C, 80 °C, 100 °C ve 110 °C'de çözülmüştür. Her bir sıcaklıkta elde edilen akım yoğunluğu değerleri Şekil 4.3'te gösterilmiştir. Sonuçlara göre, elde edilen akım yoğunluğunun 25 °C'den 80 °C'ye doğru arttığı gözlemlenmiştir. Fakat 80 °C'den sonra elde edilen akım yoğunluğunun dramatik bir şekilde azalmaktadır.

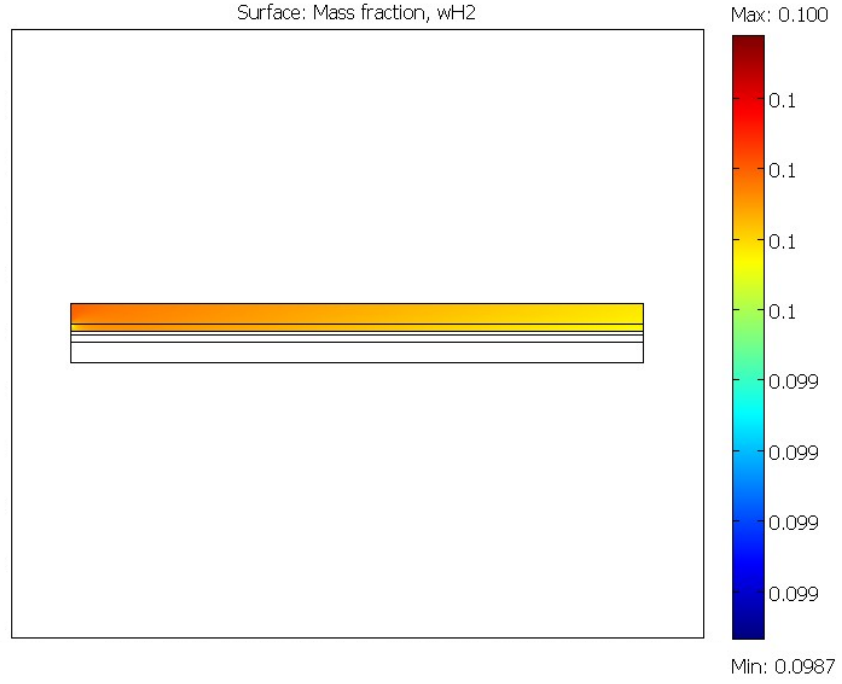


Şekil 4.4. 0,5 V çalışma potansiyelinde sıcaklık-akım yoğunluğu grafiği

Bu nedenle model sadece 25 °C ve 80 °C olmak üzere iki farklı sıcaklıkta çözülmüştür. Hız dağılımı, oksijen, hidrojen ve suyun kütle dağılımı her iki sıcaklık değeri için gösterilmiştir.

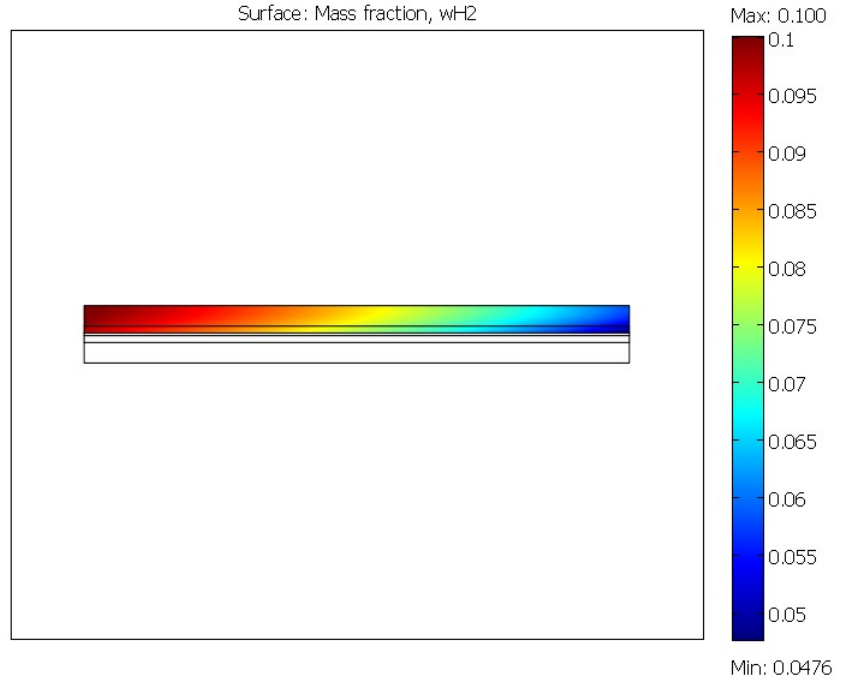


(a)

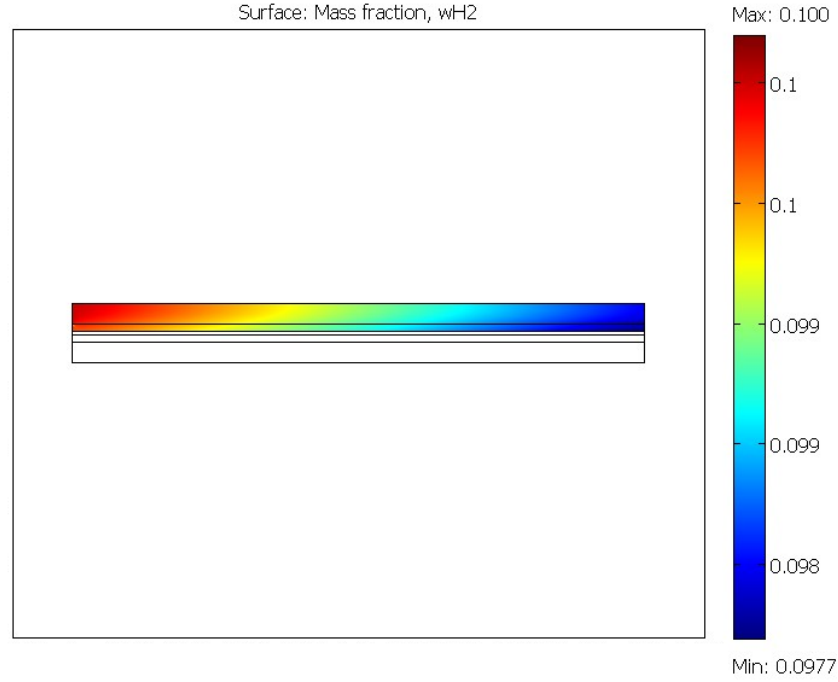


(b)

Şekil 4.5. İki boyutlu model için 25 °C’de farklı gerilim değerlerindeki hidrojen kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V



(a)

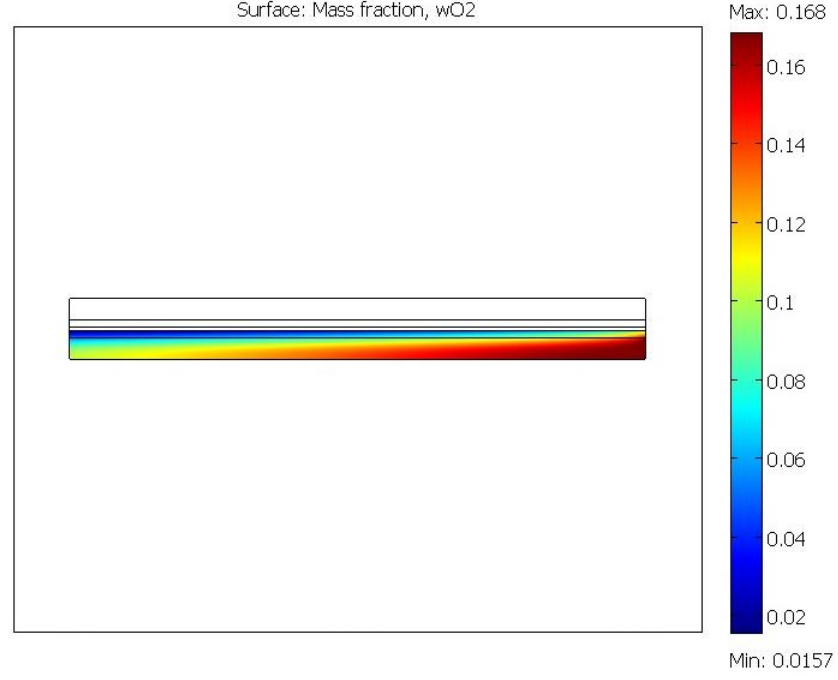


(b)

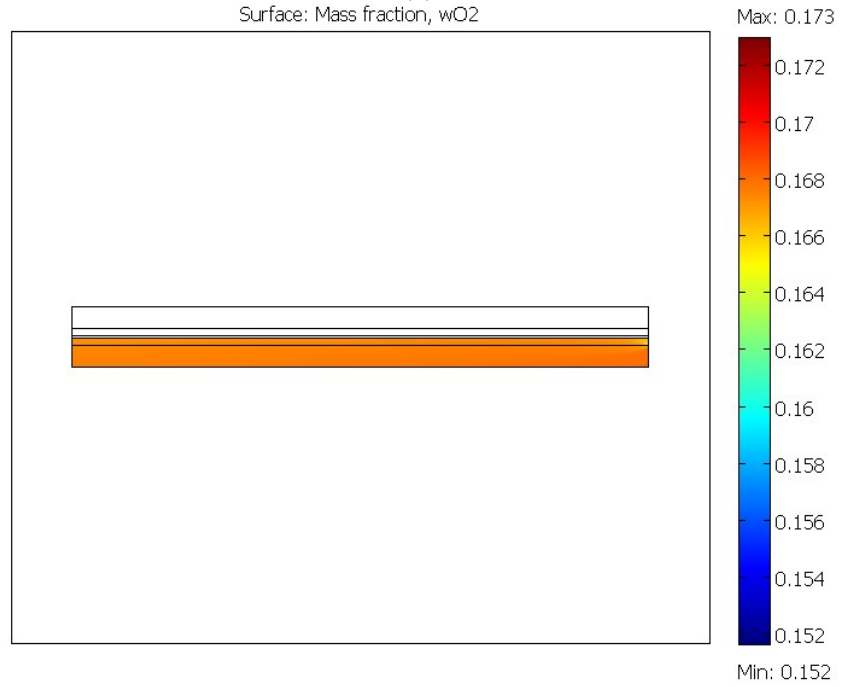
Şekil 4.6. İki boyutlu model için 80 °C’de farklı gerilim değerlerindeki hidrojen kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V

Şekil 4.4 iki boyutlu modelde 25 °C’de üç farklı gerilim değeri için anot akış kanalındaki hidrojen kütle dağılımı gösterilmektedir. Hidrojen kanal boyunca anoda difüze olmakta ve burada tepkimeye girerek elektron ve protonlarına ayrışmaktadır. Bu nedenle beklendiği gibi hidrojenin kanal girişinden çıkışına doğru kütle dağılımı azalmaktadır. Dikkat edilmesi gereken bir diğer konu ise yakıt pilinin çalışma potansiyeli azaldıkça hidrojen kütle dağılımı da azalmıştır. Bunun anlamı, hidrojen düşük çalışma potansiyellerinde daha çok reaksiyona girmektedir. Buna bağlı olarak çalışma potansiyeli düştükçe, yakıt pilinden elde edilen akım yoğunluğunun arttığı söylenebilir. Şekil 4.5 iki boyutlu modelde 80 °C’de üç farklı gerilim değeri için anot akış kanalındaki hidrojen kütle dağılımı gösterilmektedir. 25 °C’de elde edilen hidrojen kütle dağılımına benzer sonuçlar elde edilmiştir. 80 °C’de de hidrojenin kanal girişinden çıkışına doğru kütle dağılımı azalmış ve yakıt pilinin çalışma potansiyeli azaldıkça hidrojen kütle dağılımı da azalmıştır. Fakat iki farklı sıcaklık değeri için aynı potansiyelde edilen sonuçlar karşılaştırıldığında, 80 °C’de daha çok hidrojenin tükendiği ve kütle dağılım değerlerinin daha küçük olduğu

anlaşılmaktadır. Buna göre, yakıt pilinin performansının sıcaklık arttıkça arttığı söylenebilir.

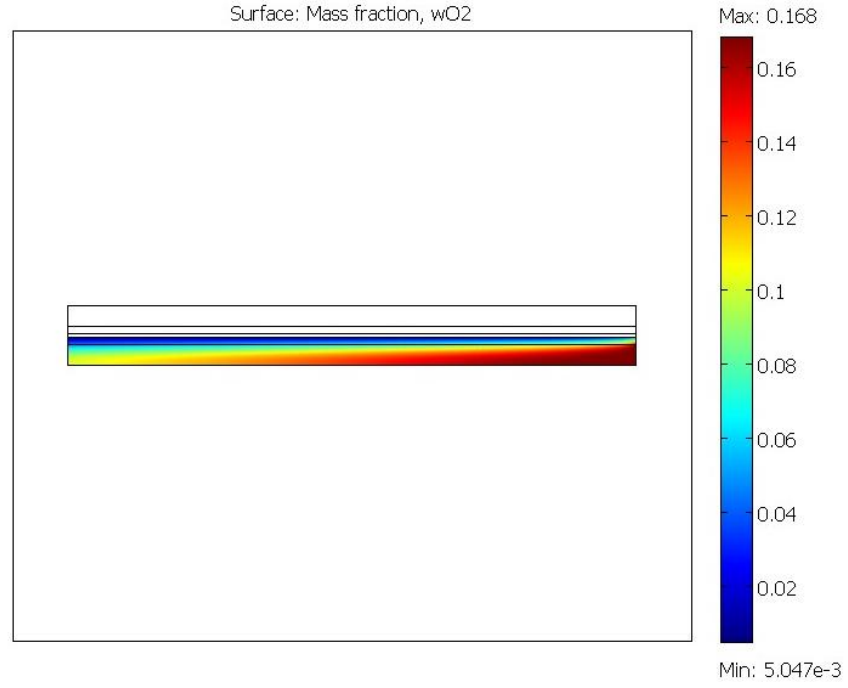


(a)

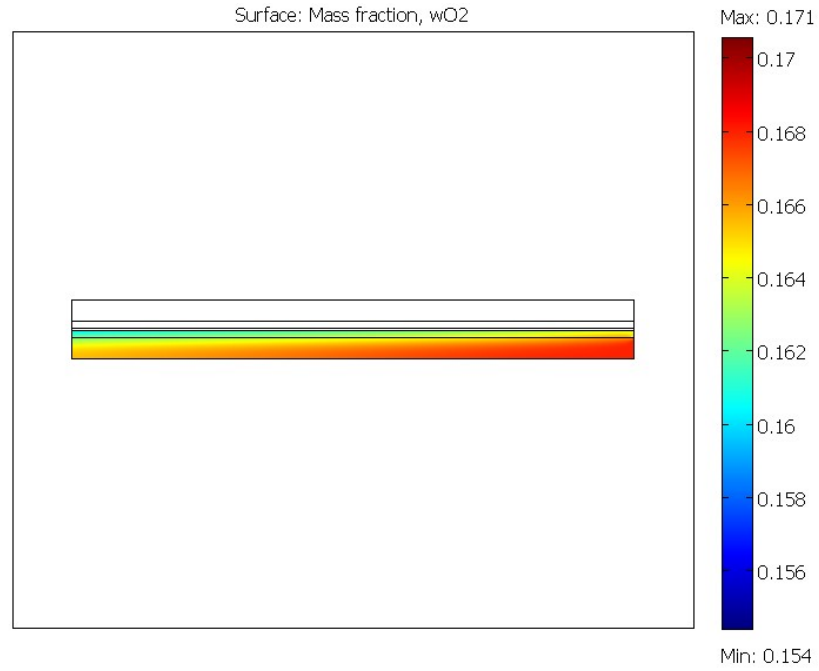


(b)

Şekil 4.7. İki boyutlu model için 25 °C’de farklı gerilim değerlerindeki oksijen kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V



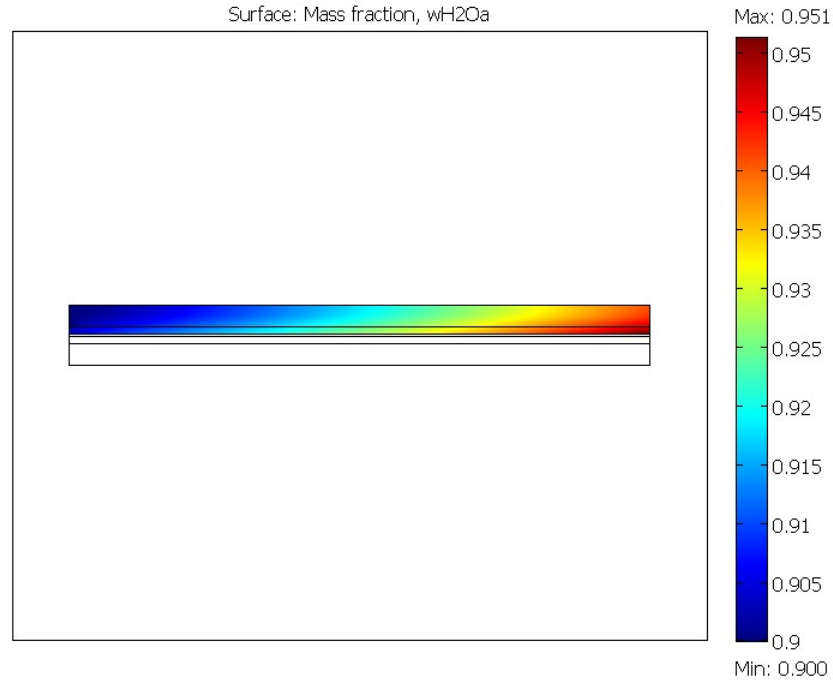
(a)



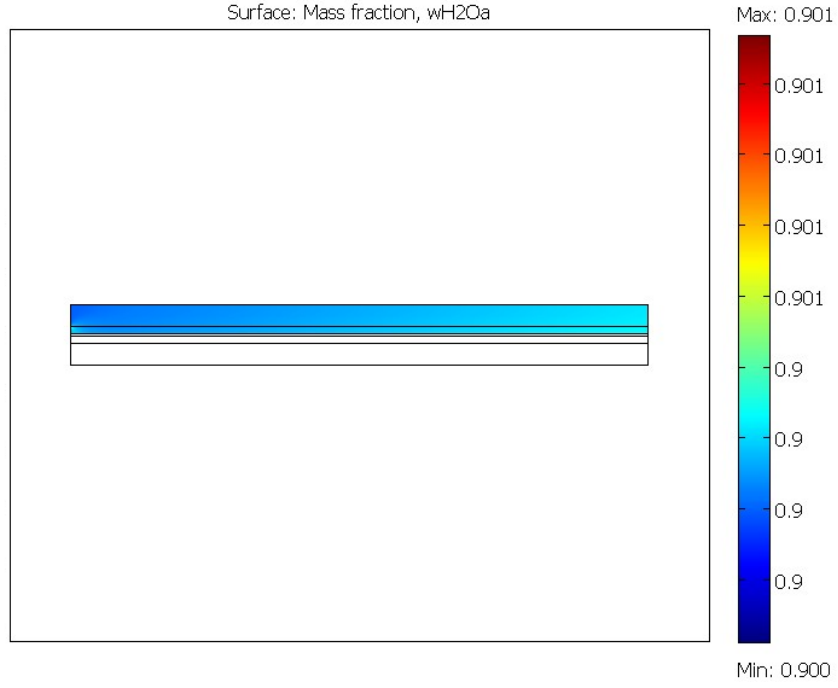
(b)

Şekil 4.8. İki boyutlu model için 80 °C’de farklı gerilim değerlerindeki oksijen kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V

Şekil 4.6 iki boyutlu modelde 25 °C’de üç farklı gerilim değeri için katot akış kanalındaki oksijen kütle dağılımı gösterilmektedir. Oksijen kanal boyunca katoda difüze olmakta ve burada anottan gelen proton ve elektronlarla reaksiyona girerek suyu oluşturmaktadır. Bu nedenle beklendiği gibi oksijenin kanal girişinden çıkışına doğru kütle dağılımı azalmaktadır. Ayrıca, yakıt pilinin çalışma potansiyeli azaldıkça oksijen kütle dağılımı da azalmıştır. Bunun sebebi, oksijenin düşük çalışma potansiyellerinde daha çok reaksiyona girmektedir. Sonuç olarak, elde edilen akım yoğunluğunun, çalışma potansiyeli düştükçe arttığı söylenebilir. Şekil 4.7 iki boyutlu modelde 80 °C’de üç farklı gerilim değeri için katot akış kanalındaki oksijen kütle dağılımı gösterilmektedir. 25 °C’de elde edilen hidrojen kütle dağılımına benzer sonuçlar elde edilmiştir. 80 °C’de de oksijenin kanal girişinden çıkışına doğru kütle dağılımı azalmış ve yakıt pilinin çalışma potansiyeli azaldıkça oksijen kütle dağılımı da azalmıştır. Fakat iki farklı sıcaklık değeri için aynı potansiyelde edilen sonuçlar karşılaştırıldığında, 80 °C’de daha çok oksijenin tükendiği ve kütle dağılım değerlerinin daha küçük olduğu anlaşılmaktadır. Buna göre, yakıt pilinin performansının sıcaklık arttıkça arttığı söylenebilir.

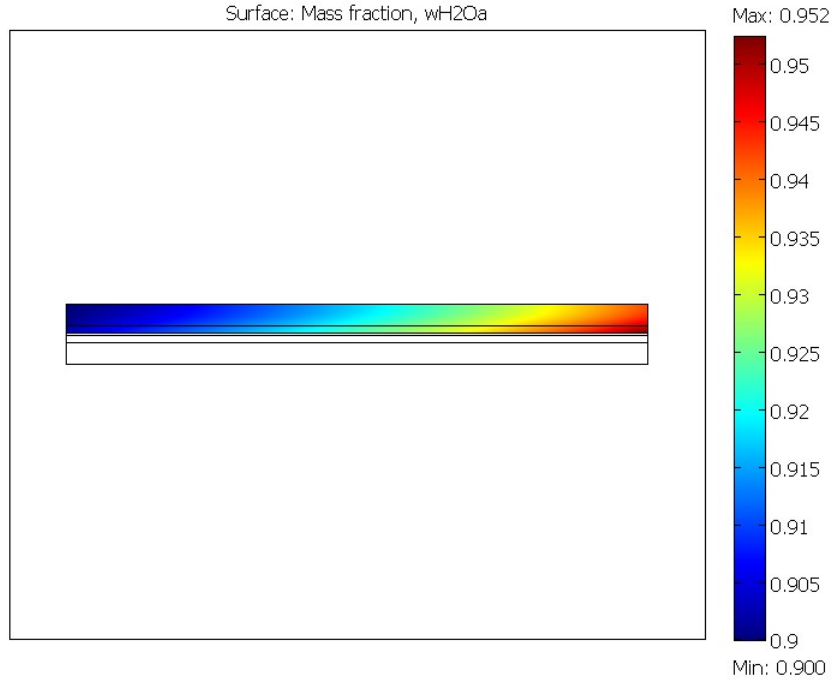


(a)

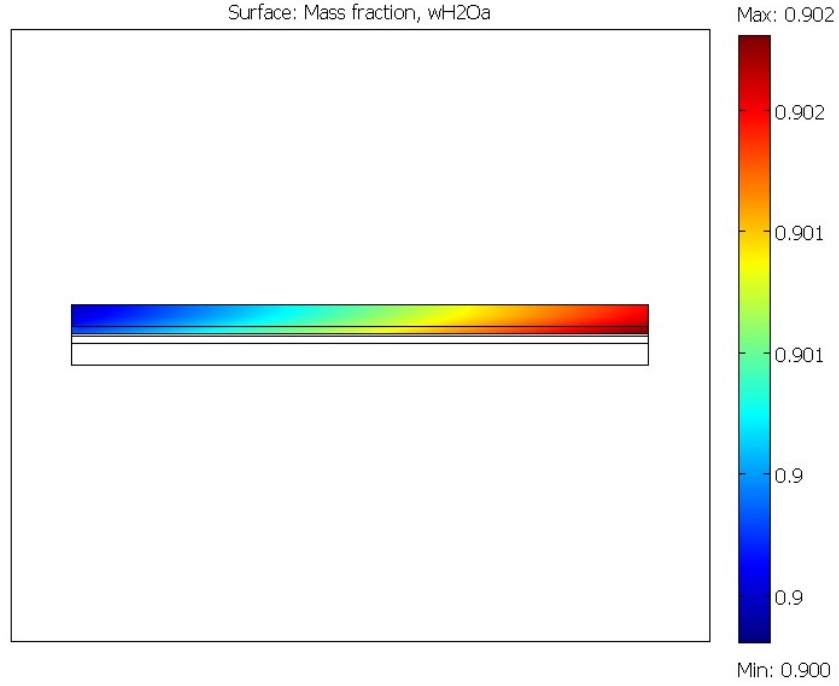


(b)

Şekil 4.9. İki boyutlu model için 25 °C’de farklı gerilim değerlerinde anottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V



(a)

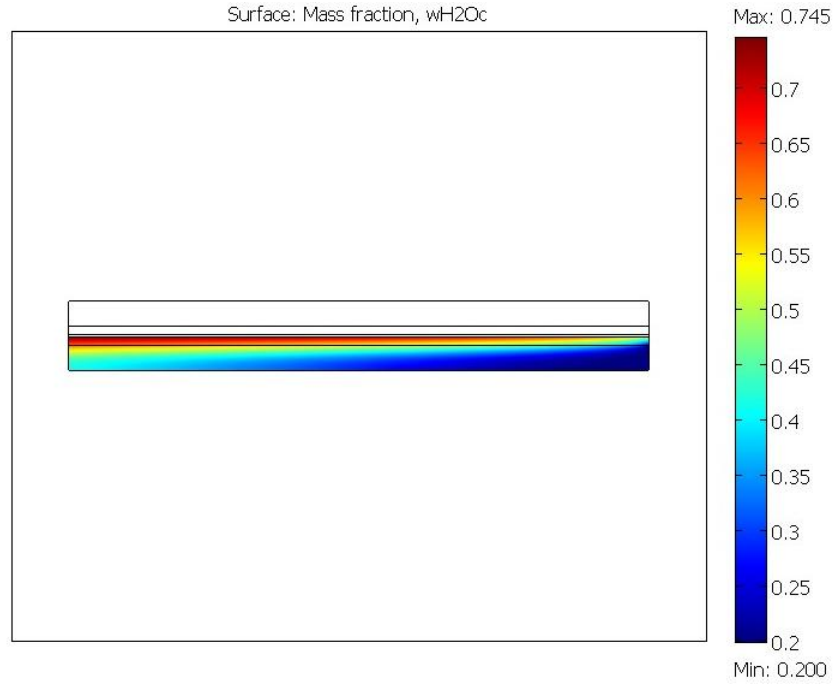


(b)

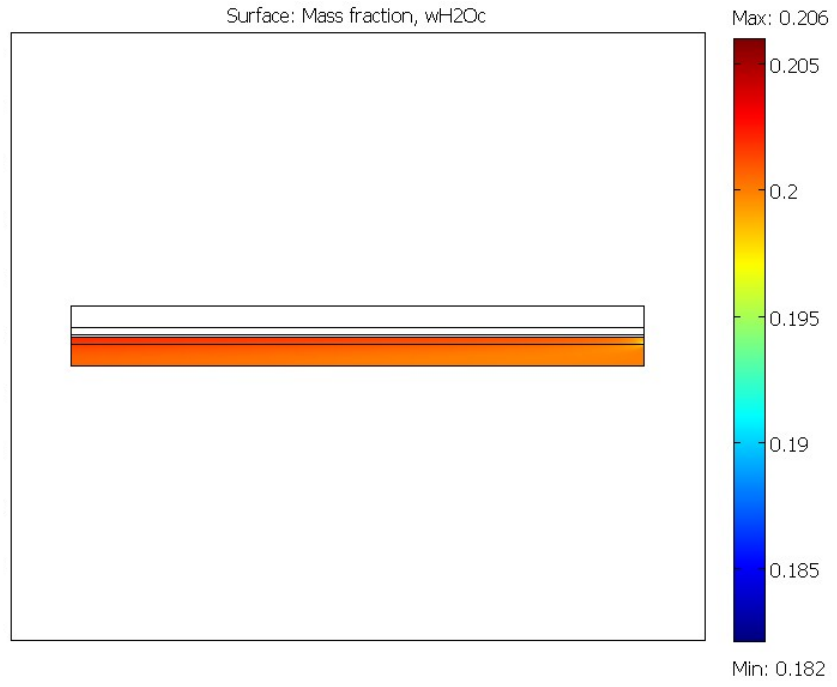
Şekil 4.10. İki boyutlu model için 80 °C’de farklı gerilim değerlerinde anottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V

Şekil 4.8 iki boyutlu modelde 25 °C’de üç farklı gerilim değeri için anot akış kanalındaki suyun kütle dağılımı gösterilmektedir. Anot akış kanalında su ve hidrojen olmak üzere iki tür vardır. Hidrojen kanal boyunca anoda difüze olup reaksiyona girdiğinden kütle dağılımı azalmıştır. Buna bağlı olarak suyun kütle dağılımının artması beklendiği gibi gözlemlenmiştir.

Şekil 4.9 iki boyutlu modelde 80 °C’de üç farklı gerilim değeri için anot akış kanalındaki suyun kütle dağılımı gösterilmektedir. 25 °C’de elde edilen anot akış kanalındaki suyun kütle dağılımına benzer sonuçlar elde edilmiştir. 80 °C’de de suyun kanal girişinden çıkışına doğru kütle dağılımı artmıştır. Fakat 25 °C’den farklı olarak 80 °C’de suyun kütle miktarı daha çok artmıştır. Bunun sebebi yüksek sıcaklıkta daha fazla hidrojenin reaksiyona girmesi ve tükenmesidir.

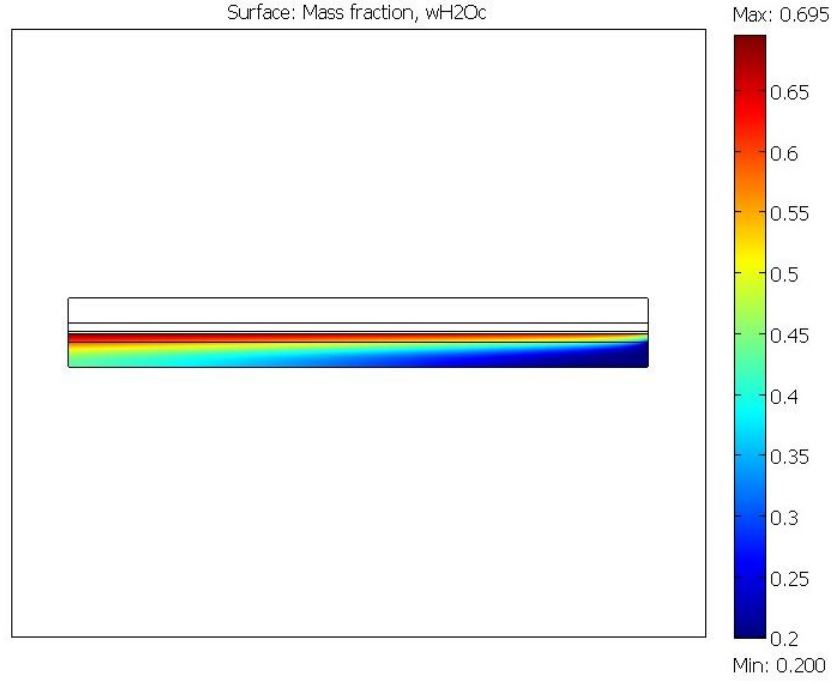


(a)

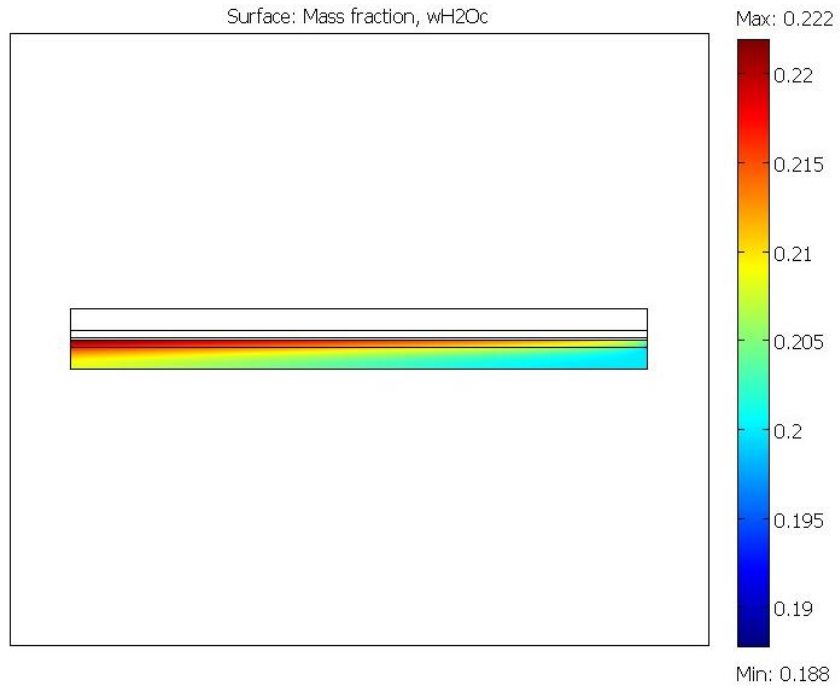


(b)

Şekil 4.11. İki boyutlu model için 25 °C’de farklı gerilim değerlerinde katottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V



(a)

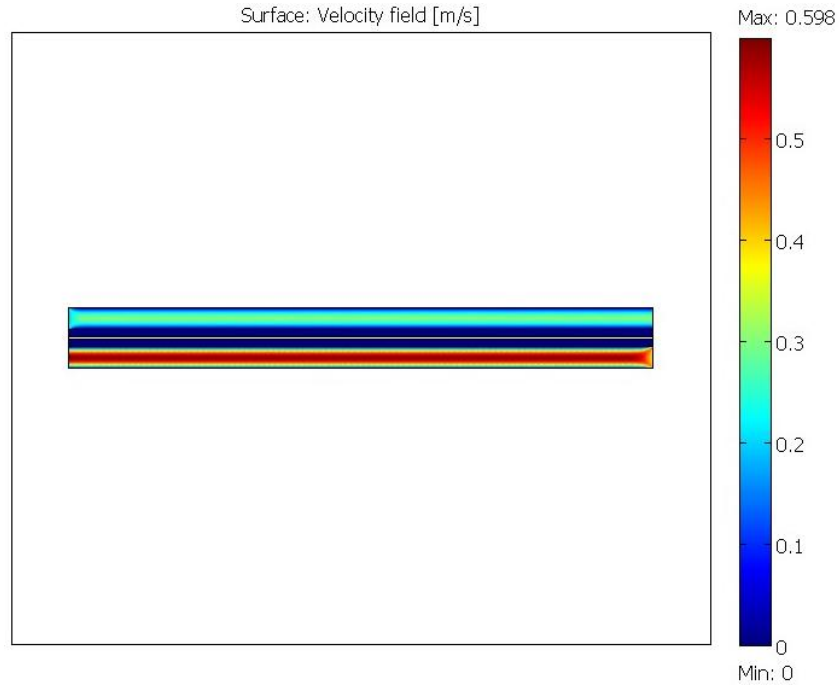


(b)

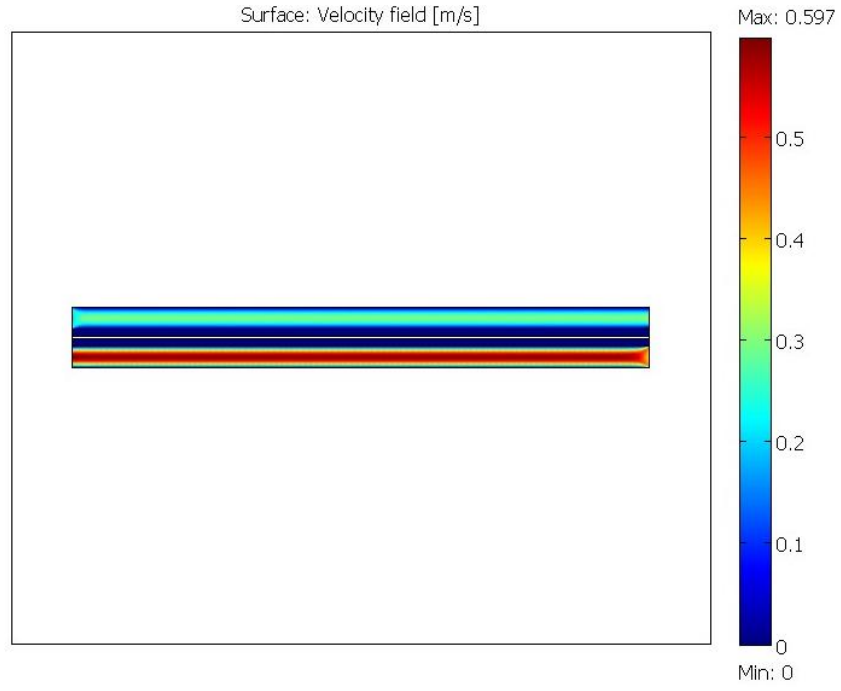
Şekil 4.12. İki boyutlu model için 80 °C’de farklı gerilim değerlerinde katottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V

Şekil 4.10 iki boyutlu modelde 25 °C’de üç farklı gerilim değeri için katot akış kanalındaki suyun kütle dağılımı gösterilmektedir. Katot akış kanalında su, azot ve oksijen olmak üzere üç tür mevcuttur. Katot kanalı içerisindeki azotun miktarı sabit kalırken, oksijen, kanal boyunca anottan gelen proton ve elektronlar ile reaksiyona girip su oluşturmaktadır. Buna bağlı olarak suyun kütle dağılımının artması beklenmektedir. Suyun katot akış kanalındaki kütle dağılımı beklendiği gibi girişten çıkışa doğru artış göstermiştir.

Şekil 4.11 iki boyutlu modelde 80 °C’de üç farklı gerilim değeri için katot akış kanalındaki suyun kütle dağılımı gösterilmektedir. 25 °C’de elde edilen katot akış kanalındaki suyun kütle dağılımına benzer sonuçlar elde edilmiştir. 80 °C’de de suyun kanal girişinden çıkışına doğru kütle dağılımı artmıştır. Fakat 80 °C’de, 25 °C’ye kıyasla daha fazla reaksiyon gerçekleştiğinden daha fazla su oluşmuştur. Bu nedenle 80 °C’de suyun kütle miktarı daha çok artmıştır.



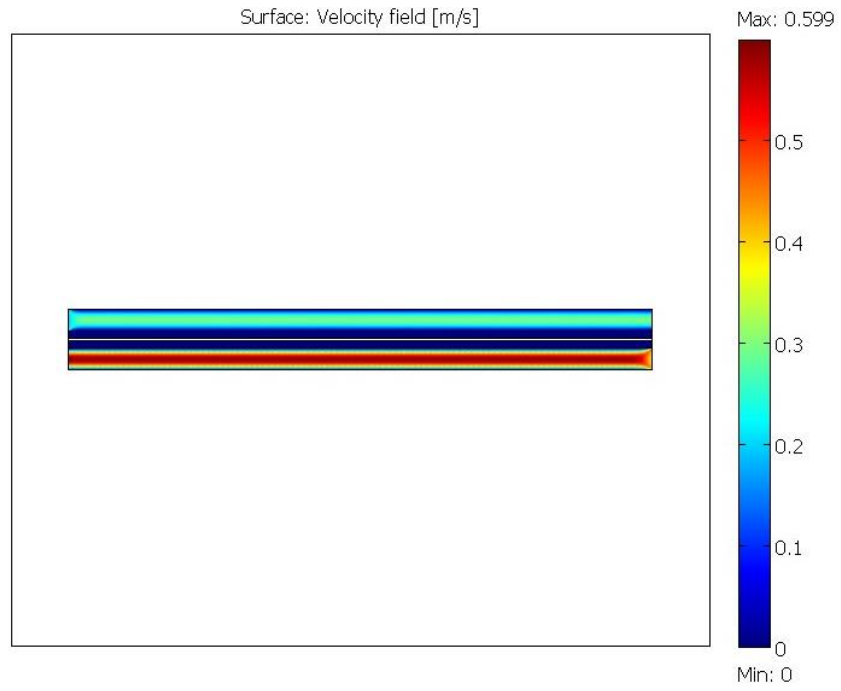
(a)



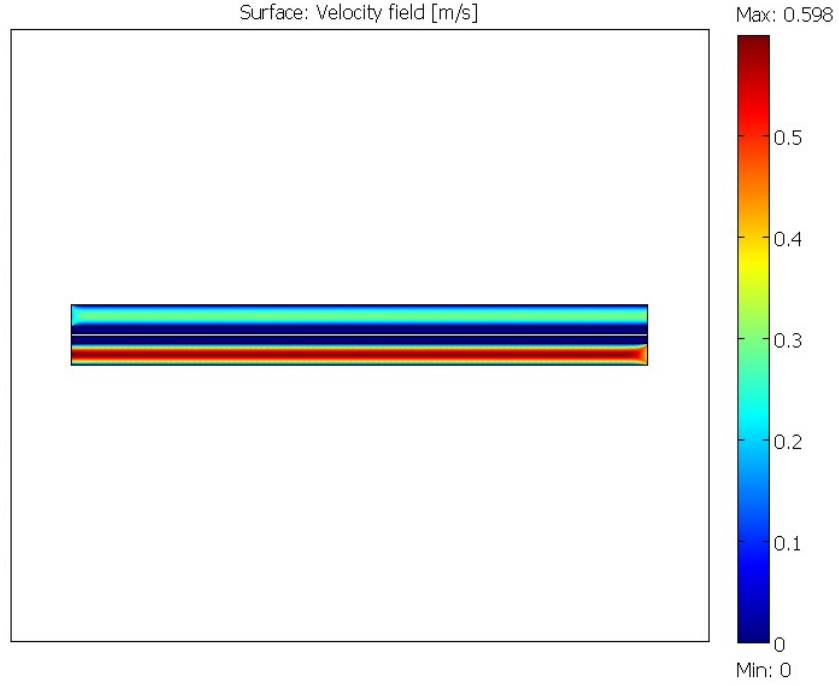
(b)

Şekil 4.13. İki boyutlu model için 25 °C’de farklı gerilim değerlerinde hız dağılımı

(a) 0,3 V (b) 1,0 V



(a)

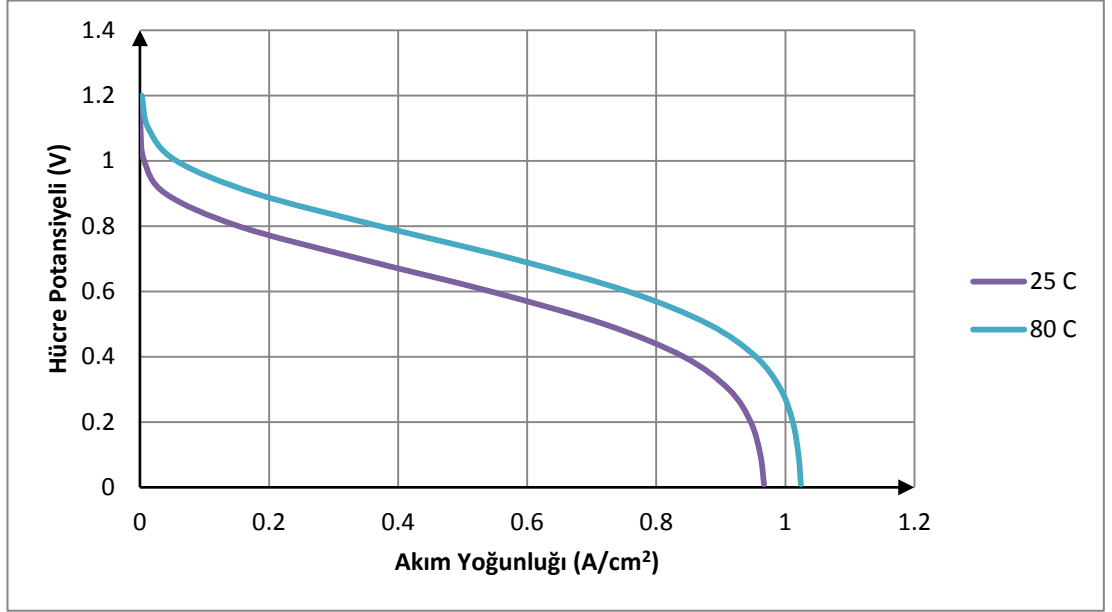


(b)

Şekil 4.14. İki boyutlu model için 80 °C’de farklı gerilim değerlerinde hız dağılımı

(a) 0,3 V (b) 1,0 V

Şekil 4.12 ve Şekil 4.13 farklı sıcaklık ve farklı yakıt pili çalışma potansiyeli değerleri için hız dağılımı değerlerini göstermektedir. Şekillere göre, hız dağılımındaki en büyük ve en küçük değerlerin sıcaklık ve potansiyel ile değişimi yok denecek kadar azdır.



Şekil 4.15. İki boyutlu model için performans eğrileri

Şekil 4.14'ten anlaşıldığı gibi, sıcaklık arttıkça yakıt pilinin performansı artmaktadır. Bunun sebebi yakıt pili kinetiğinin artmasıdır. Bunun sonucunda daha çok hidrojen ve oksijenin reaksiyona girmesi sağlanmış ve aynı potansiyel değerlerinde yüksek sıcaklık yüksek akım yoğunluğu elde edilmiştir. 0,6 V'ta 25°C'de elde edilen akım yoğunluğu 0,54 A/cm² iken, 80°C'de bu değer 0,76 A/cm²'ye çıkmıştır.

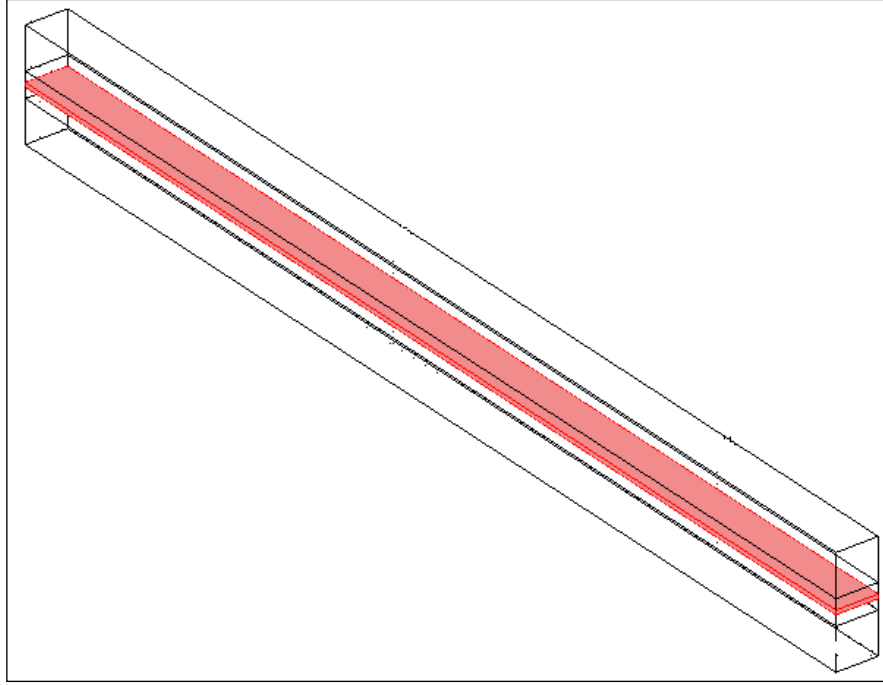
4.3. Üç Boyutlu Düz Model

4.3.1. Üç Boyutlu Düz Model Geometrisi Ve Çözüm Ağı

Üç boyutlu düz model de iki boyutlu model gibi akışa paralel olarak oluşturulmuştur. Bu modelde, anot akış kanalı, anot, zar, katot ve katot akış kanalı olmak üzere 5 bölgeden oluşmaktadır. Modelin geometrik özellikleri Tablo 4.3'te, geometrisi ise Şekil 4.15'te gösterilmiştir.

Tablo 4.3. Üç boyutlu düz modelin geometrik özellikleri

	Elektrotlar	Zar	Akış kanalları
Uzunluk	25 mm	25 mm	25 mm
Yükseklik	0.25 mm	0.1 mm	1 mm
Genişlik	1 mm	1 mm	1 mm

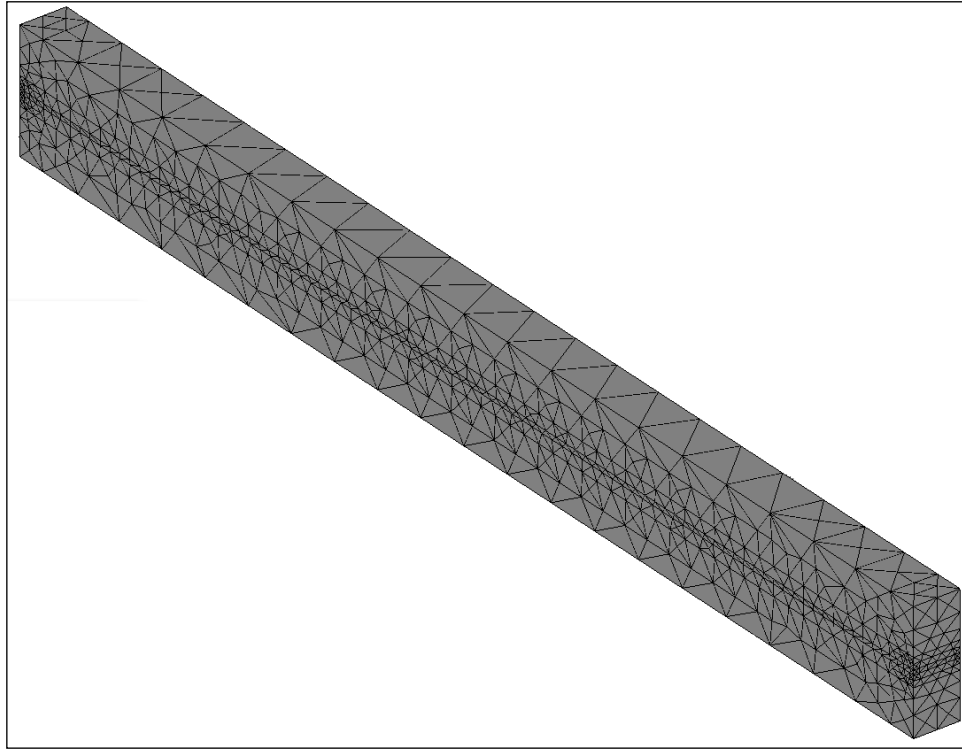


Şekil 4.16. Üç boyutlu düz model

Üç boyutlu düz modelde çözüm ağı oluşturulurken, iki boyutlu modelde izlenen yolun aynısı takip edilmiştir. Buna göre oluşturulan çözüm ağı istatistikleri Tablo 4.4'te, şekli ise Şekil 4.16'da gösterilmiştir.

Tablo 4.4. Üç boyutlu düz modelin çözüm ağı istatistikleri

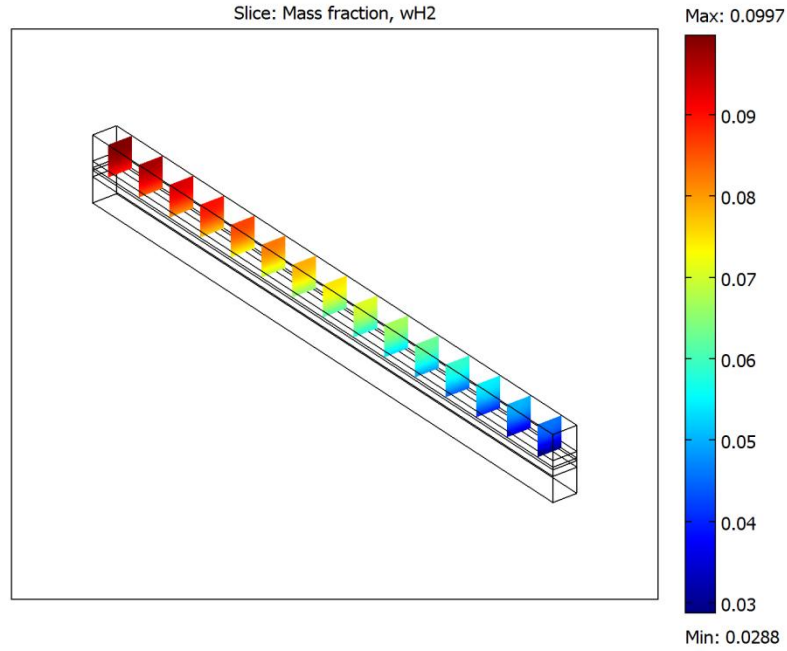
Serbestlik derecesi	82192
Çözüm ağı noktası sayısı	2400
Element sayısı	10273
Üçgen	10273
Sınır element sayısı	5202
Kenar element sayısı	811
Köşe element sayısı	24
En küçük element kalitesi	0.2609
Element hacim oranı	4.44 E-4



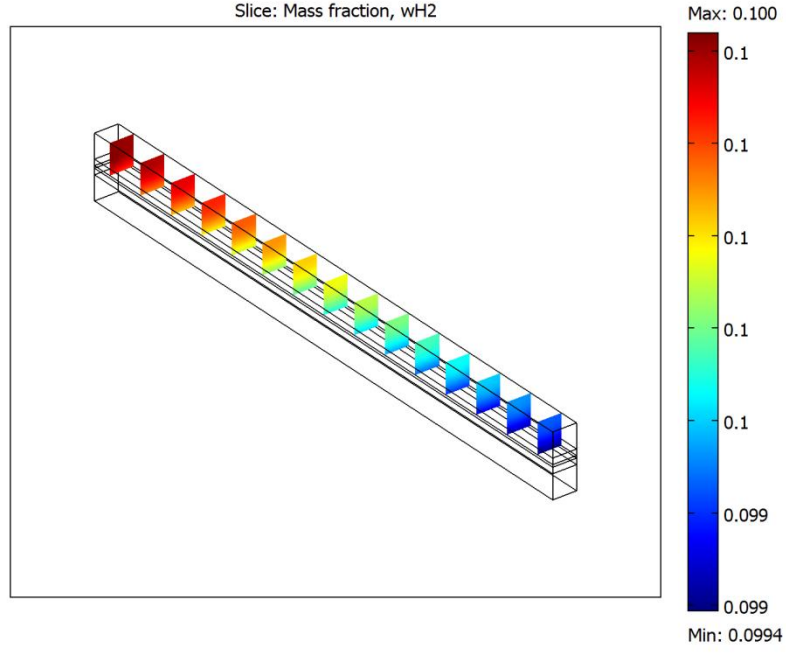
Şekil 4.17. Üç boyutlu düz model çözüm ağı

4.3.2. Üç Boyutlu Düz Model Sonuçlar

Üç boyutlu düz model 25 °C ve 80 °C olmak üzere iki farklı sıcaklıkta çözülmüştür. Hız dağılımı, oksijen, hidrojen ve suyun kütle dağılımı analizleri her iki sıcaklık değeri için de gösterilmiştir. Ayrıca bu modelde değişim akım yoğunluğu, zarın iyon iletkenliği ve difüzyon katsayıları gibi sıcaklıkla değişen parametrelerin performansa etkisi de incelenmiştir.

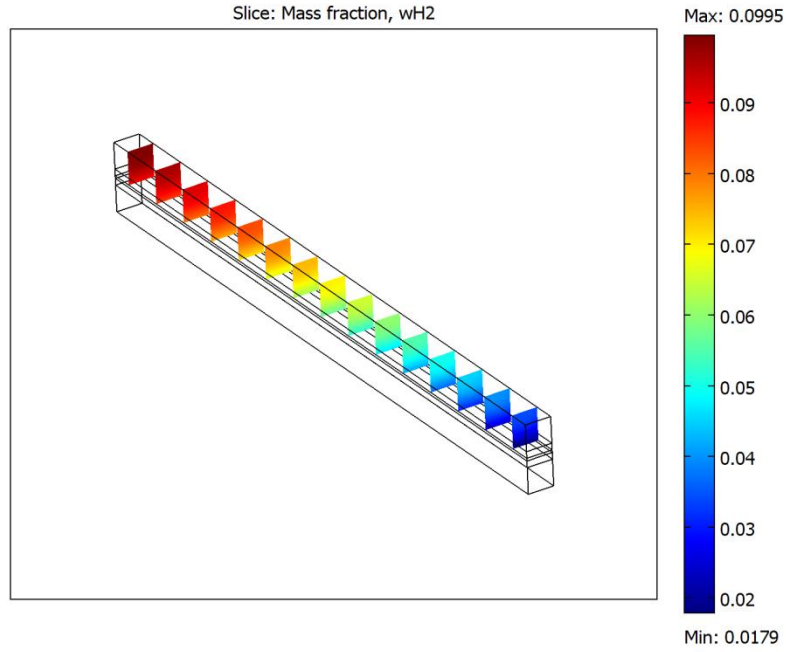


(a)

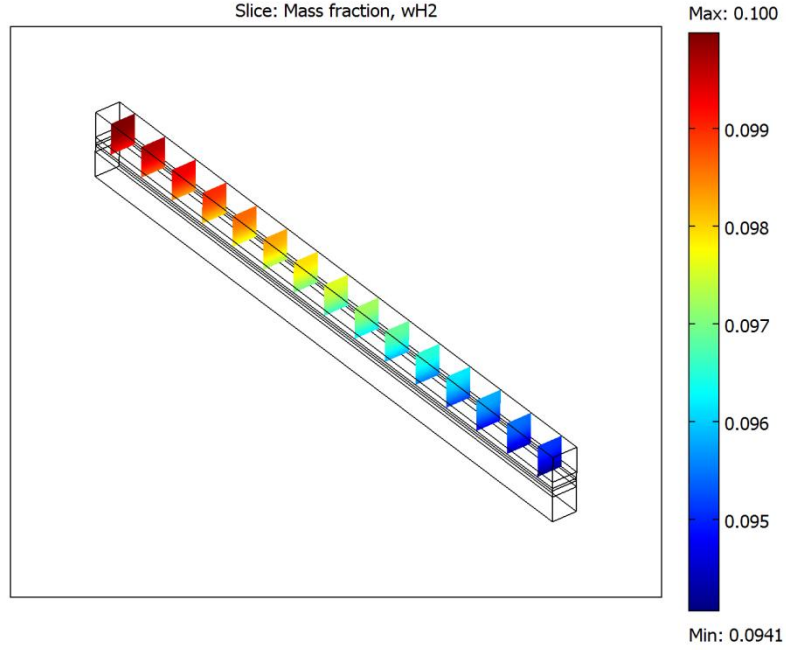


(b)

Şekil 4.18. Üç boyutlu düz model için 25 °C’de farklı gerilim değerlerindeki hidrojen kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V



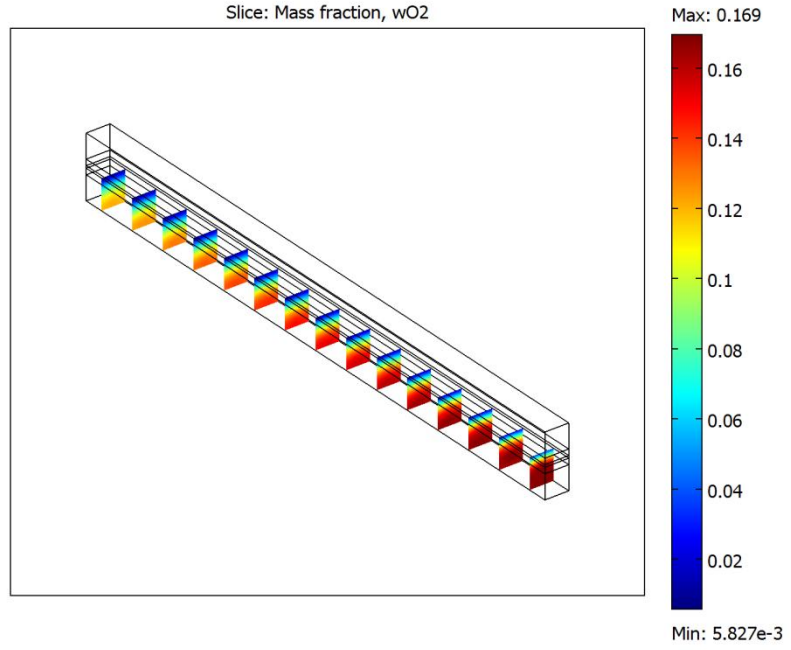
(a)



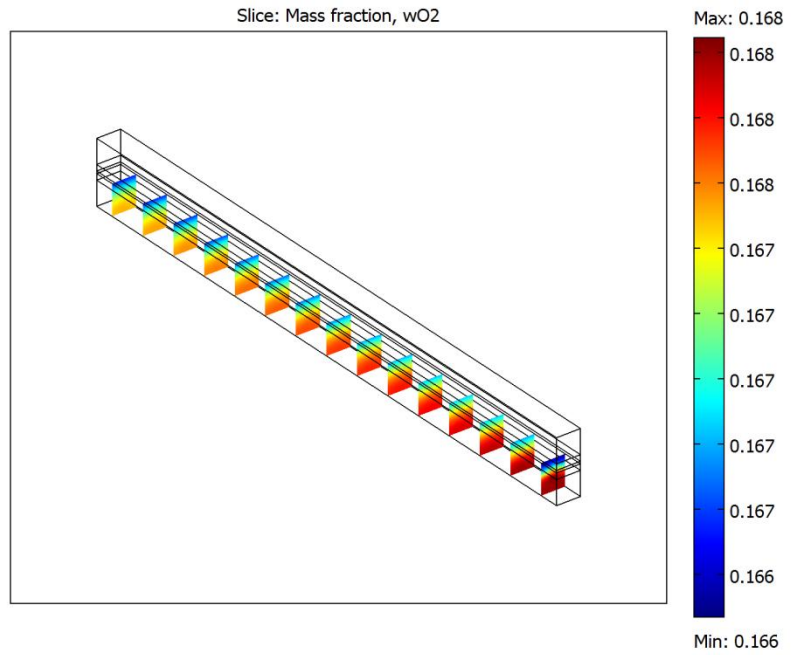
(b)

Şekil 4.19. Üç boyutlu düz model için 80 °C’de farklı gerilim değerlerindeki hidrojen kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V

Şekil 4.17 ve Şekil 4.18 üç boyutlu düz modelde 25 °C’de ve 80°C’de iki farklı gerilim değeri için anot akış kanalındaki hidrojen kütle dağılımı gösterilmektedir. Bu model iki boyutlu modelin sahip olduğu matematiğin aynısını kullanmaktadır. Bu nedenle iki boyutlu modelde elde edilen sonuçlara benzer sonuçlar edilmiştir. Bu sonuçlara göre; sıcaklık arttıkça daha çok hidrojenin difüze olması ve daha çok reaksiyonun gerçekleşmesi sağlanmıştır. Dolayısıyla, yüksek sıcaklıkta daha düşük hidrojen kütle dağılımı elde edilir.

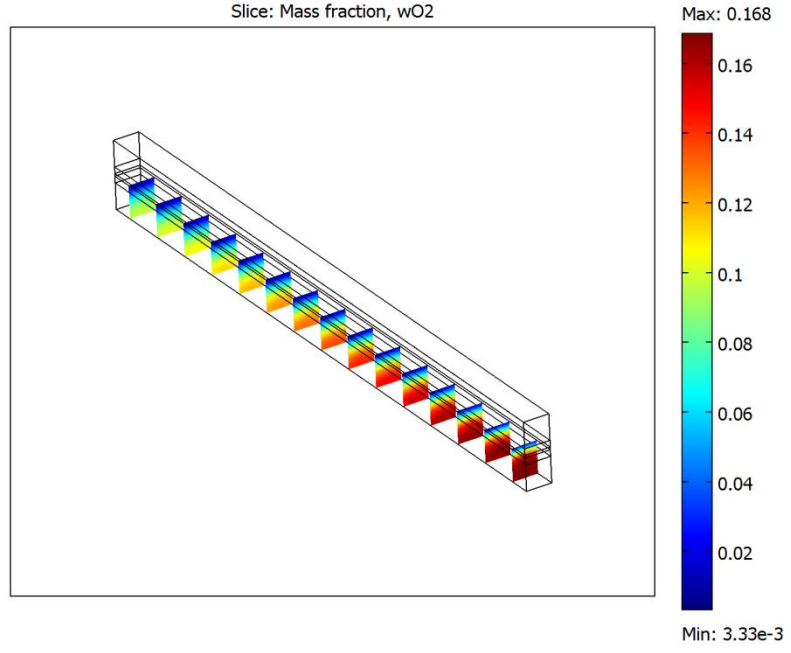


(a)

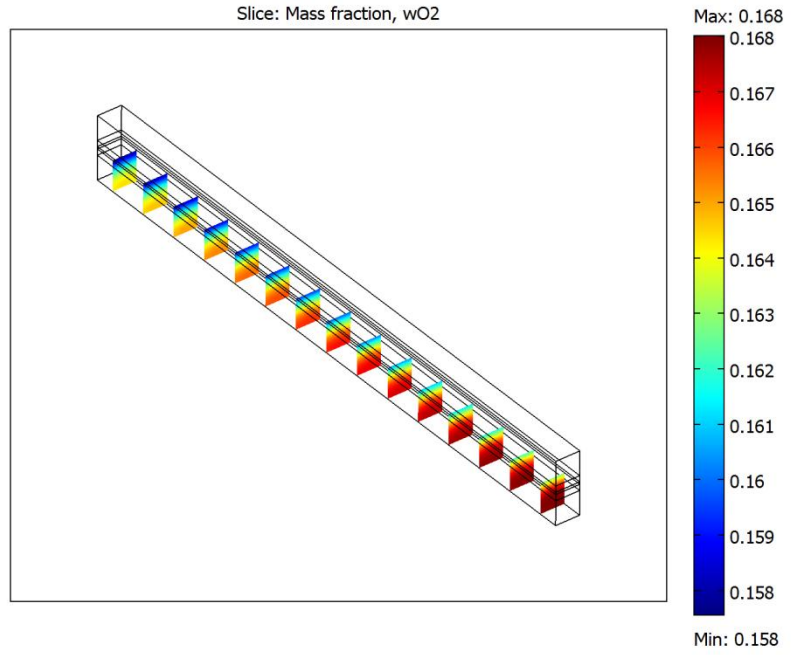


(b)

Şekil 4.20. Üç boyutlu düz model için 25 °C’de farklı gerilim değerlerindeki oksijen kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V



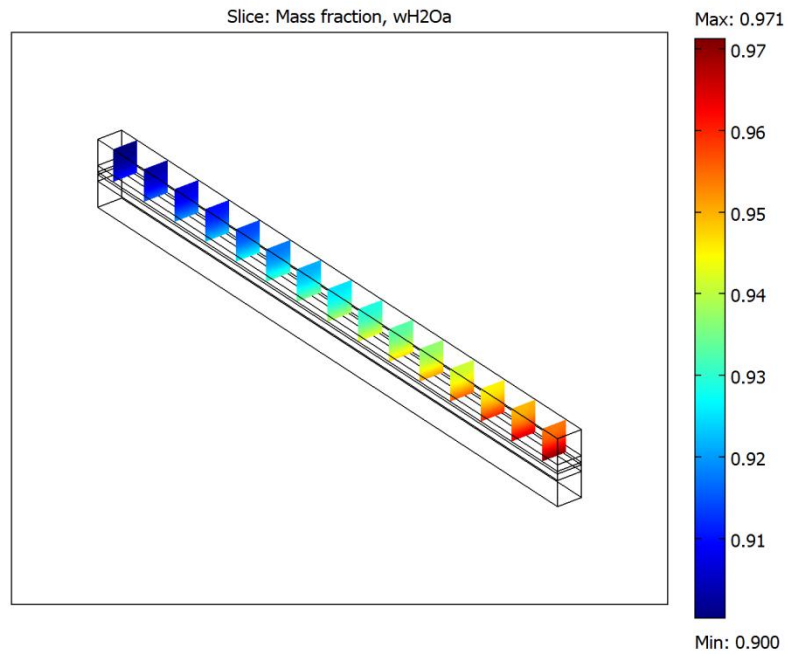
(a)



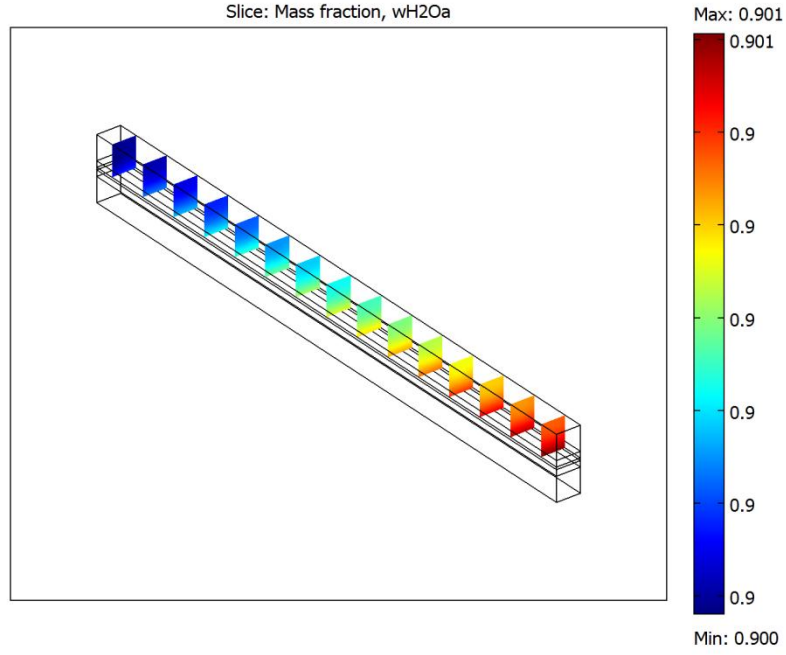
(b)

Şekil 4.21. Üç boyutlu düz model için 80 °C’de farklı gerilim değerlerindeki oksijen kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V

Şekil 4.19 ve Şekil 4.20 üç boyutlu düz modelde 25 °C’de ve 80 °C’de iki farklı gerilim değeri için katot akış kanalındaki oksijen kütle dağılımını göstermektedir. Bu sonuçlar da iki boyutlu modelden elde edilen sonuçlarla benzerlik göstermektedir. Sıcaklık arttıkça daha çok oksijenin difüze olması ve daha çok reaksiyonun gerçekleşmesi sağlanmıştır. Dolayısıyla, yüksek sıcaklıkta daha düşük oksijen kütle dağılımı elde edilir.

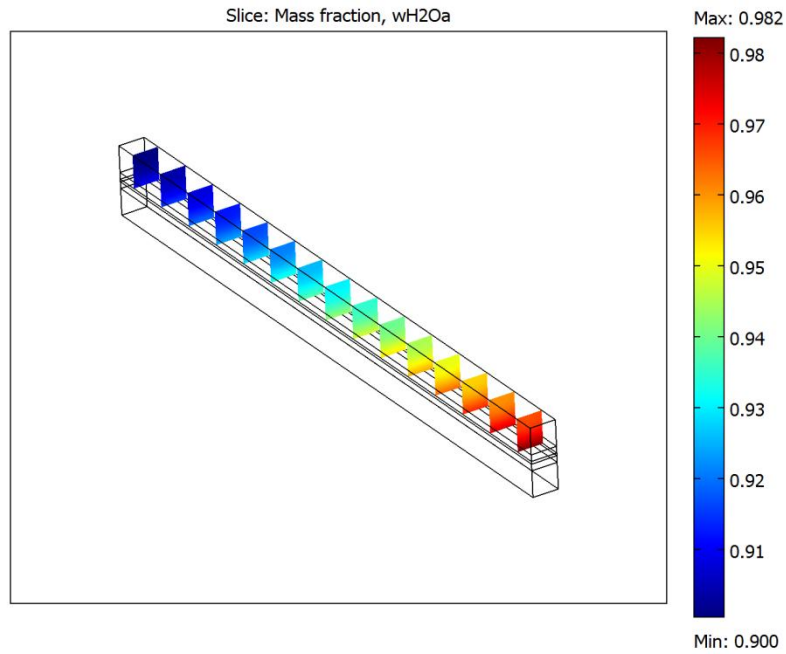


(a)

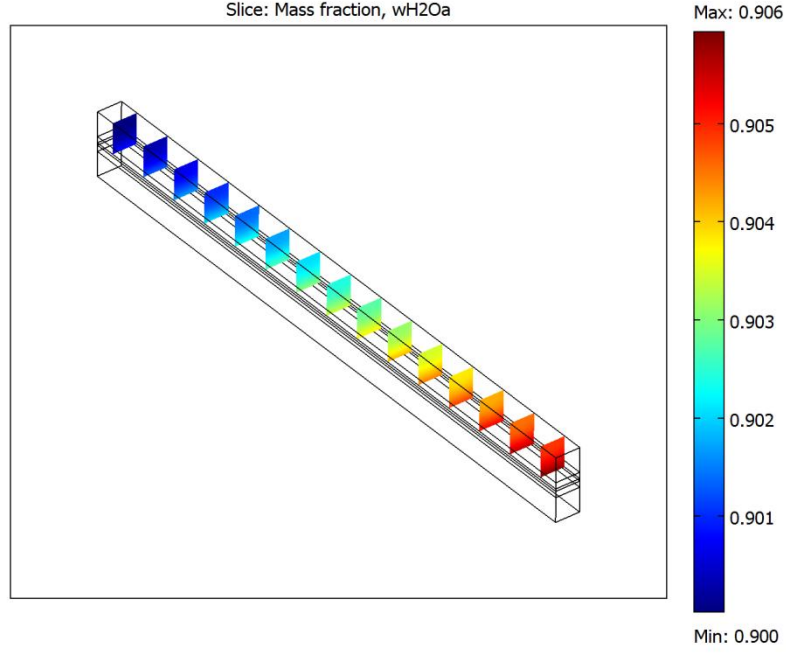


(b)

Şekil 4.22. Üç boyutlu düz model için 25 °C’de farklı gerilim değerlerinde anottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V



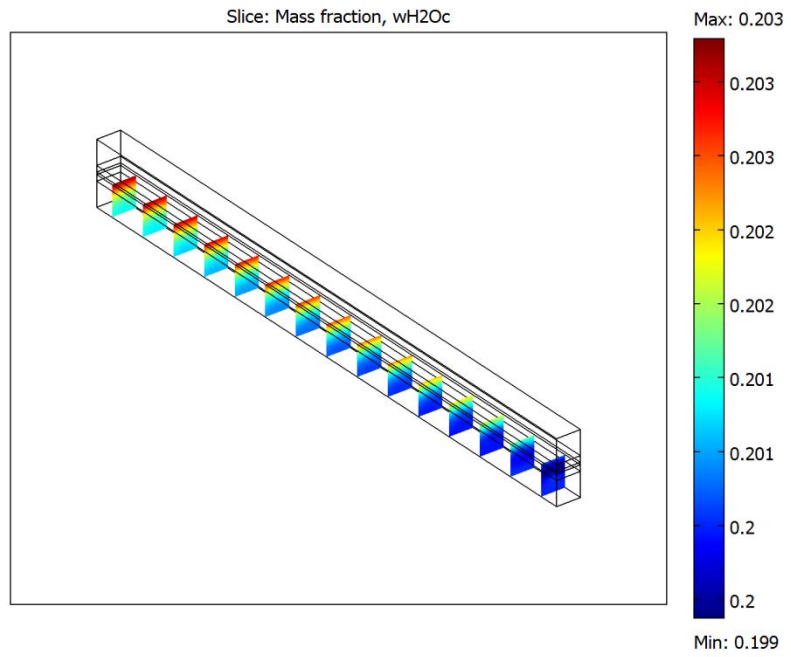
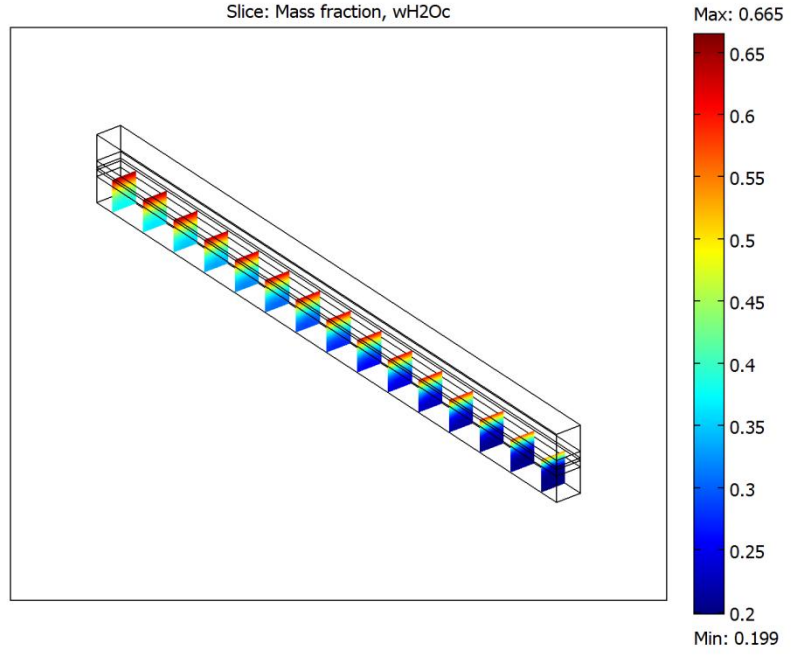
(a)



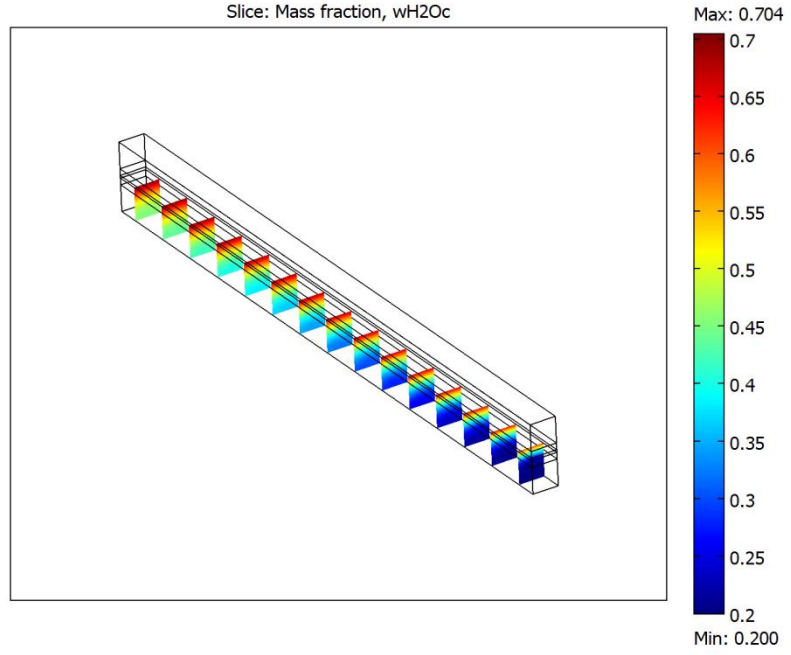
(b)

Şekil 4.23. Üç boyutlu düz model için 80 °C’de farklı gerilim değerlerinde anottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V

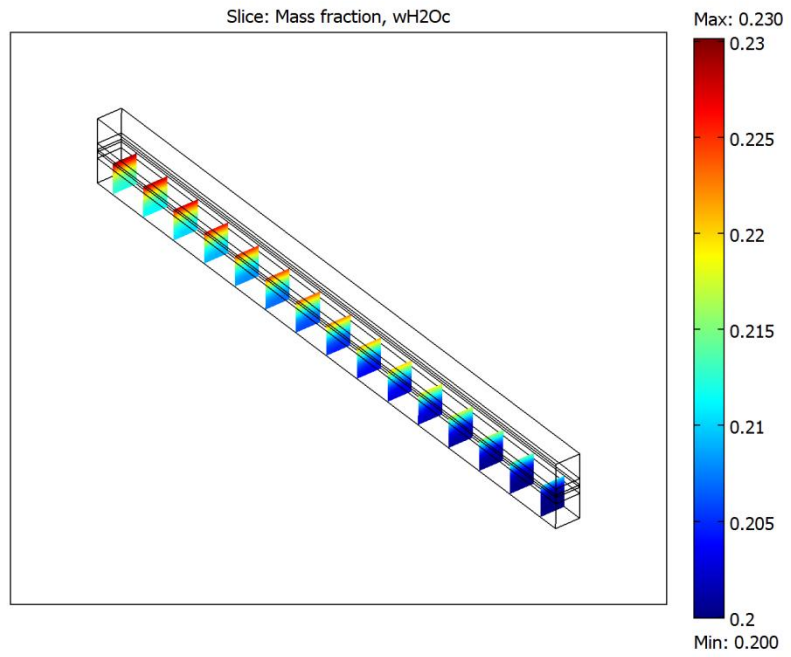
Şekil 4.21 ve Şekil 4.22 üç boyutlu düz modelde 25 °C’de ve 80 °C’de iki farklı gerilim değeri için anot akış kanalındaki suyun kütle dağılımını göstermektedir. İki boyutlu modelden elde edilen sonuçlarla benzerlik gösteren üç boyutlu düz model sonuçlarına göre, kanal girişinden çıkışına kadar hidrojen aktif tabakaya difüze olmakta ve reaksiyona girmektedir, yani tükenmektedir. Hidrojen miktarı azaldığından dolayı, suyun kütle dağılımı çıkışa doğru artmaktadır. Ayrıca, sıcaklık arttıkça tepkimeye giren hidrojen miktarı arttığından, suyun kütle dağılımı da artmaktadır. Bunların dışında, yüksek voltajda suyun kütle dağılımı çok az artmıştır. Buna göre yüksek voltajda gerçekleşen reaksiyon miktarının ve elde edilen akımın oldukça az olduğu söylenebilir.



Şekil 4.24. Üç boyutlu düz model için 25 °C’de farklı gerilim değerlerinde katottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V



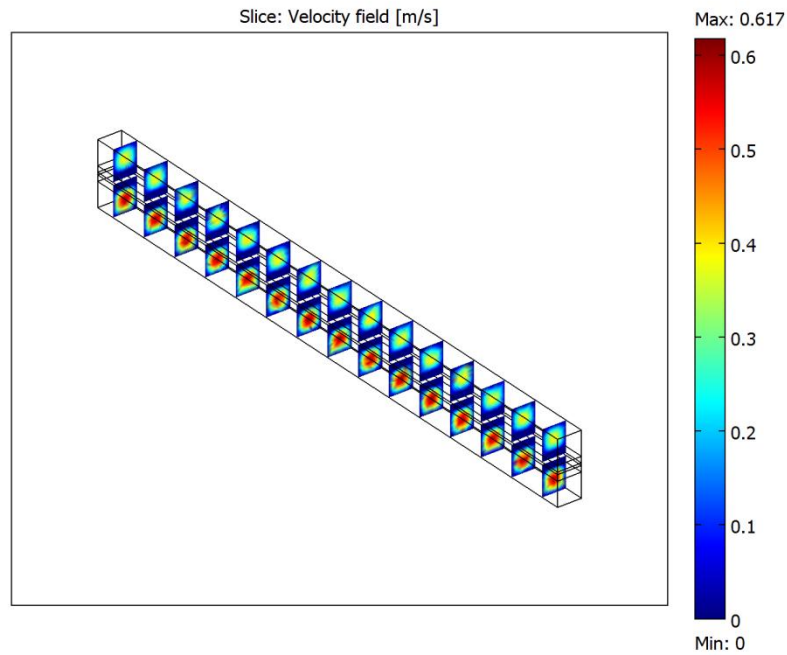
(a)



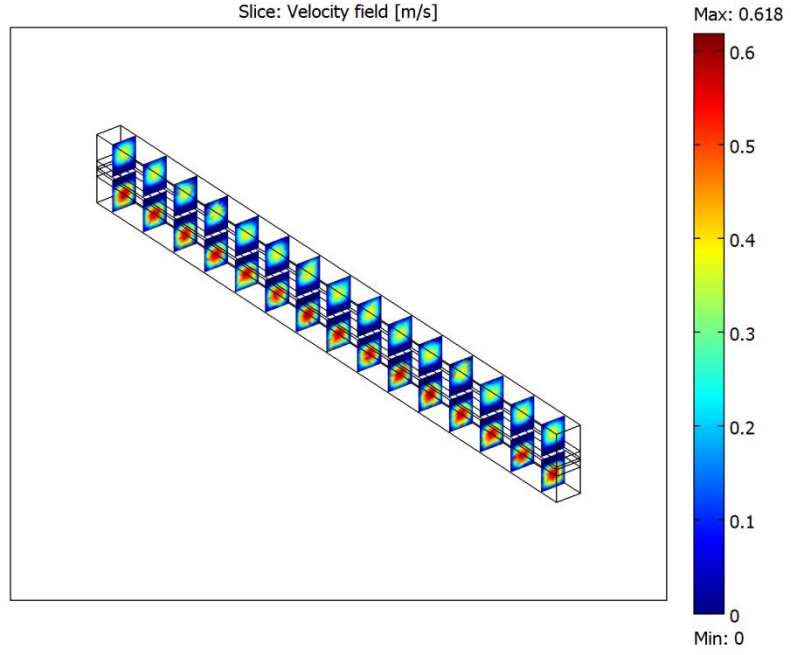
(b)

Şekil 4.25. Üç boyutlu düz model için 80 °C’de farklı gerilim değerlerinde katottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V

Şekil 4.23 ve Şekil 4.24 üç boyutlu düz modelde 25 °C’de ve 80 °C’de iki farklı gerilim değeri için katot akış kanalındaki suyun kütle dağılımı gösterilmektedir. İki boyutlu modelden elde edilen sonuçlarla benzerlik gösteren üç boyutlu düz model sonuçlarına göre, kanal girişinden çıkışına kadar oksijen anot tarafından gelen proton ve elektronlarla tepkimeye girerek suyu oluşturmaktadır. Bu süreç içerisinde ise katottaki üçüncü tür olan azotun miktarı değişmemektedir. Oksijenin miktarı azalır, suyun miktarı arttığından dolayı, suyun kütle dağılımı çıkışa doğru artmaktadır. Ayrıca, sıcaklık arttıkça gerçekleşen reaksiyon miktarı arttığından, daha çok su oluşmakta ve suyun kütle dağılımı da artmaktadır. Yüksek voltaj değerlerinde ise suyun kütle dağılımındaki artış miktarı, düşük voltaj değerlerine kıyasla oldukça azdır. Bu nedenle, yüksek voltaj değerlerinde daha az reaksiyon gerçekleştiği ve daha az akımın elde edileceği söylenebilir.

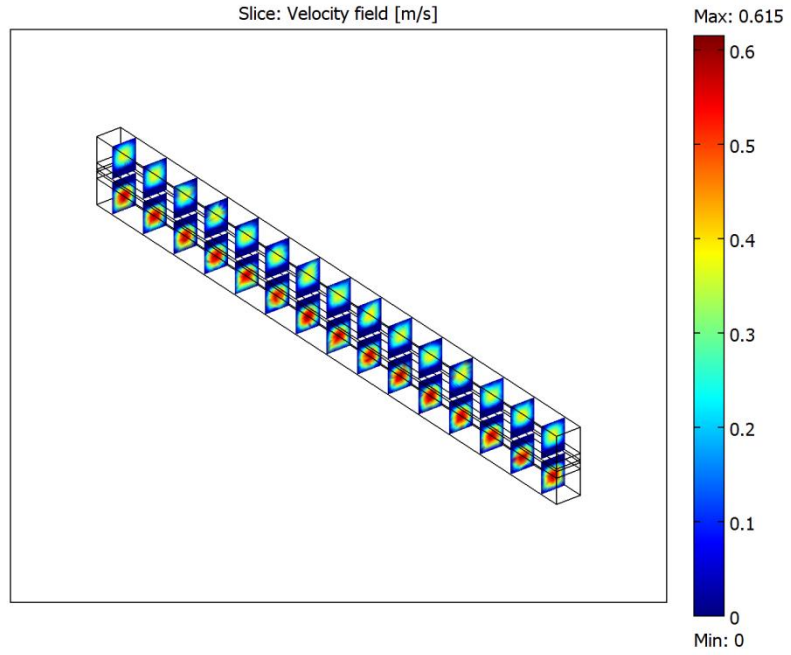


(a)

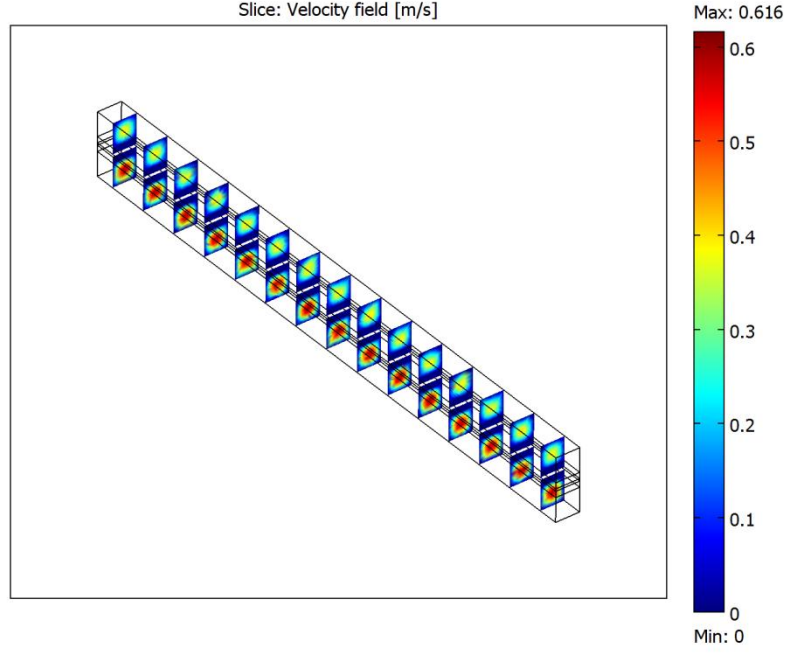


(b)

Şekil 4.26. Üç boyutlu düz model için 25 °C'de farklı gerilim değerlerinde hız dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V



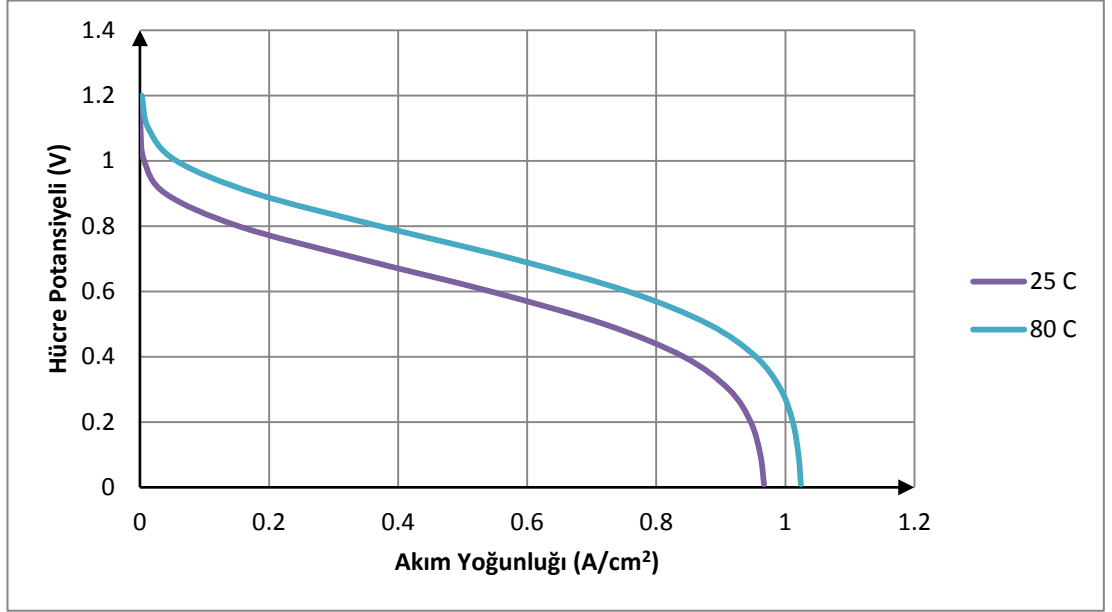
(a)



(b)

Şekil 4.27. Üç boyutlu düz model için 80 °C’de farklı gerilim değerlerinde hız dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V

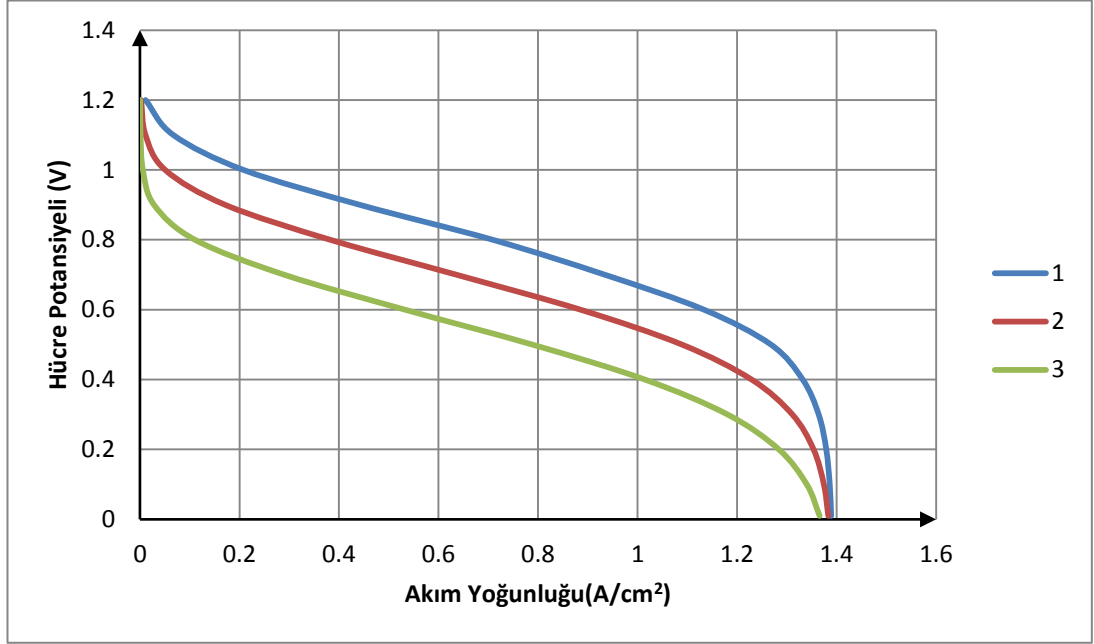
Şekil 4.25 ve Şekil 4.26, 25 °C ve 80 °C sıcaklık değerleri ile 0.3 V ve 1 V hücre çalışma potansiyellerindeki hız dağılımı değerlerini göstermektedir. Şekillere göre, hız dağılımının sıcaklık ve potansiyele bağlı olarak değişimi yok denecek kadar azdır.



Şekil 4.28. Üç boyutlu düz model için performans eğrileri

Yakıt pilinin çalışma sıcaklığı arttıkça termodinamik olarak, performansının düşmesi beklenir. Ancak, sıcaklık arttıkça yakıt pilinin kinetiğinde gerçekleşen artış, termodinamik kaynaklı düşüşe baskın gelir. Bu nedenle yakıt pilinin performansı sıcaklık arttıkça artış gösterir.

Yakıt pilinde sıcaklık arttıkça artan ve yakıt pilinin performansını artıran üç önemli parametre vardır. Bu parametreler; aktivasyon kayıplarının azalmasını sağlayan değişim akım yoğunluğu, iyonik direnç kaynaklı kayıpları azaltan zarın iyonik iletim katsayısı ve konsantrasyon kayıplarını azaltan difüzyon katsayılarıdır. Bu parametrelerin performans eğrisinin hangi bölgelerinde, hangi hücre potansiyeli değerlerinde etkili olduğu incelenmiştir ve sonuçlar bu devam eden kısımda verilmiştir.



Şekil 4.29. Değişim akım yoğunluğunun etkisi (1,2 ve 3 nolu eğriler için değişim akım yoğunluğu değerleri sırasıyla; 10^{-2} A/cm², 10^{-3} A/cm² ve 10^{-4} A/cm²)

Şekil 4.28'de üç boyutlu modelin farklı değişim akım yoğunlukları ile çözülmesi sonucunda elde edilen performans eğrileri gösterilmiştir. Değişim akım yoğunluğu, dengedeki reaksiyon hızı olarak tanımlanır. Başka bir ifadeyle, ileri ve geri yönlü reaksiyonların akım yoğunluklarının eşittir ve bu akım yoğunlukları değişim akım yoğunluğu olarak (j_0) adlandırılırlar. Ve dengeden uzaklaştıkça ileri ve geri yönlü reaksiyonların akım yoğunlukları arasındaki fark (net akım), değişim akım yoğunluğuna bağlı olarak ifade edilir. Denklem 4.1'de de görüldüğü gibi, yakıt pilinden elde edilen akım yoğunluğu, değişim yoğunluğu arttıkça artmaktadır.

$$j = j_0(e^{\alpha n F \eta / (RT)} - e^{-(1-\alpha) n F \eta / (RT)}) \quad (4.1)$$

Değişim akım yoğunluğu elektrotun türü, elektrot yüzeyinin pürüzlülüğü, sıcaklık gibi bir çok parametreye bağlı olarak değişir. Sıcaklığın, değişim akım yoğunluğunun artması veya azalması üzerinde önemli bir etkisi vardır. Ayrıca, değişim akım yoğunluğu ile aktivasyon kayıpları arasında güçlü bir ilişki vardır. Buna göre, değişim akım yoğunluğu arttığında, özellikle aktivasyon kayıplarının

baskın olduğu yüksek hücre potansiyeli değerlerinde yüksek akım yoğunluğu elde edilir. Şekil 4.27'den görüldüğü gibi, performans eğrileri arasında önemli farklar mevcuttur. Değişim akım yoğunluğunu arttırmak, beklendiği gibi, özellikle yüksek voltaj değerlerinde baskın olan aktivasyon kayıplarını azaltmış ve elde edilen akım yoğunluğu artmıştır.

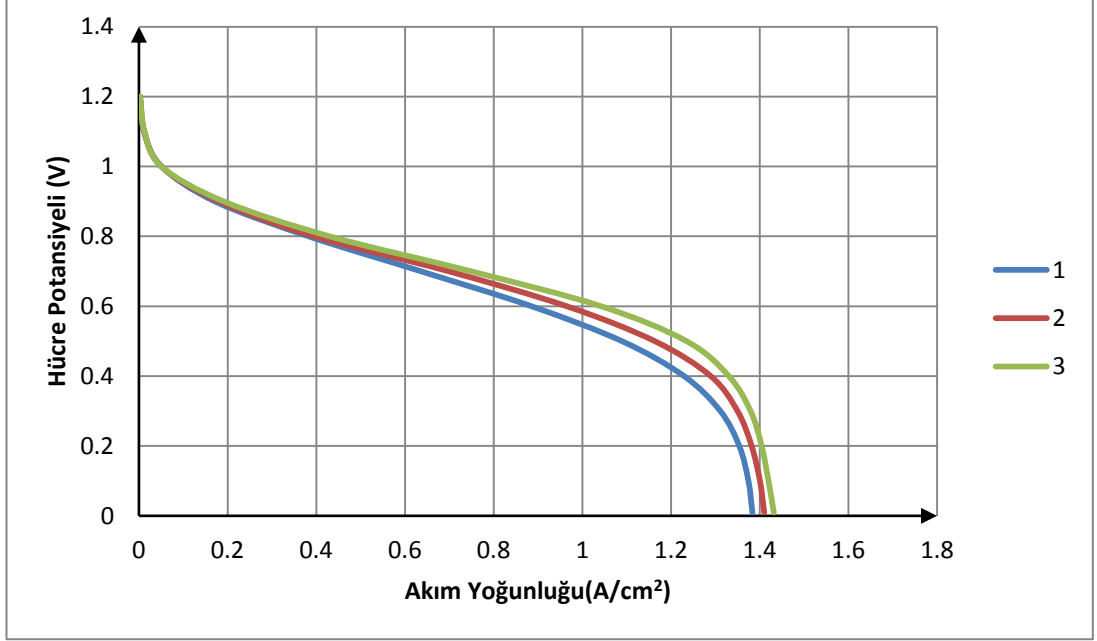
Orta büyüklükteki hücre potansiyeli değerlerinde, değişim akım yoğunluğunun arttığında elde edilen akım yoğunluğu da artmıştır. Ancak, bu durum değişim akım yoğunluğunun omik kayıpları da azalttığı anlamına gelmez. Değişim akım yoğunluğunun, omik kayıplar üzerindeki etkisini anlamak için, omik kayıpların baskın olduğu bölgede, performans eğrilerinin eğimlerine bakmak gerekmektedir. Üç performans eğrisinin de, orta büyüklükteki hücre potansiyeli değerlerinde eğimleri eşittir. Buna göre, değişim akım yoğunluğunun omik kayıpları etkilemediği söylenebilir.

Son olarak düşük hücre potansiyeli değerlerine bakıldığında, elde edilen en yüksek akım yoğunluğu değerlerinin birbirine oldukça yakın olduğu görülmektedir. Bu durum, en yüksek akım yoğunluğunun, değişim akım yoğunluğundan bağımsız olduğu gerçeği düşünüldüğünde şaşırtıcı değildir. (Denklem 4.2)

$$j_L = nFD \frac{c_R^0}{\delta} \quad (4.2)$$

Yakıt pillerinde hem elektronların hem de protonların transferi gerçekleşmektedir ve bu taşınım olaylarının ikisi de potansiyel kayıplarına neden olmaktadır. Potansiyeldeki bu kayıplar omik kayıplar olarak adlandırılır ve orta büyüklükteki hücre potansiyeli değerlerinde baskındırlar. Proton transferinden kaynaklı potansiyel kayıpları, elektron iletiminden kaynaklı kayıplara göre oldukça büyüktür ve zarın iyonik iletkenliği ile ilgilidir. Zarın iyonik iletkenliği, sahip olduğu su içeriğine ve sıcaklığa bağlı olarak değişmektedir. Sıcaklığın artması, iyonik iletkenliği üssel olarak artırır ve bu durum omik kayıpların azalmasını sağlar. (Denklem 4.3)

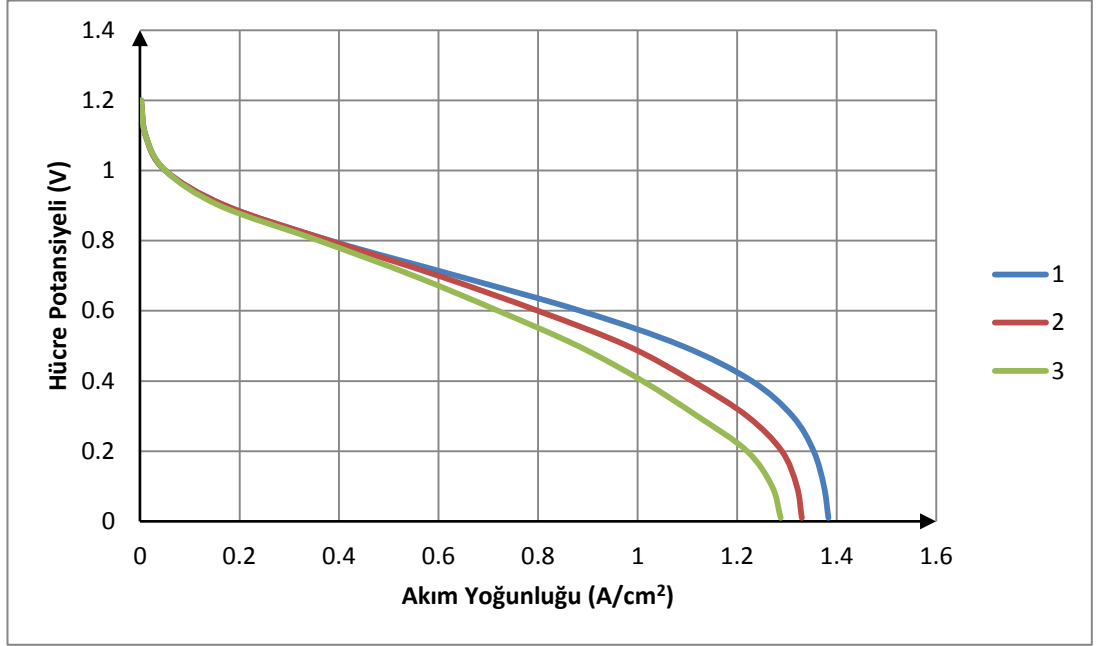
$$\sigma(T, \lambda) = \sigma_{303K}(\lambda) \exp \left[1268 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (4.3)$$



Şekil 4.30. Zarın iyonik iletkenliğinin etkisi (1,2 ve 3 nolu eğriler için iyonik iletkenlik değerleri sırasıyla; 0.1 S/cm, 0.15 S/cm ve 0.20 S/cm)

Şekil 4.29'a göre, doğrusal bölgenin eğimi zarın iyonik iletkenliği arttıkça azalmaktadır. Bunun anlamı, omik kayıplar zarın iyonik iletkenliği arttıkça azalmaktadır. Ayrıca, diğer bölgelerde dikkate değer değişiklikler gerçekleşmemiştir.

Düşük hücre potansiyeli değerlerinde baskın olan konsantrasyon kayıpları, kütle transferi ile yakından ilişkilidir. Bu kayıplar, elde edilecek en büyük akım yoğunluğu değerini de belirleyen, difüzyon katsayıları ile ilişkilidir. Difüzyon katsayıları, moleküler ağırlık, türlerin kısmi basınçları ve sıcaklığa bağlı olarak değişmektedir. Sıcaklık difüzyon katsayılarının artmasına ve dolayısıyla daha yüksek akım yoğunlukları elde edilmesine neden olur. Başka bir ifade ile, kütle transferi sınırlamalarının sebep olduğu konsantrasyon kayıpları sıcaklıkla azalmaktadır.



Şekil 4.31. Difüzyon katsayılarının etkisi (1,2 ve 3 nolu eğriler için iyonik iletkenlik değerleri sırasıyla; $5E-6 \text{ m}^2/\text{s}$, $4.5E-6 \text{ m}^2/\text{s}$, $4E-6 \text{ m}^2/\text{s}$)

Şekil 4.30'a göre, difüzyon katsayıları arttıkça konsantrasyon kayıpları azalmış ve bunun sonucunda düşük gerilim değerlerinde daha yüksek akım yoğunlukları elde edilmiştir. Ayrıca, elde edilebilecek en yüksek akım yoğunluğu değeri de, difüzyon katsayısı ile artmıştır.

4.4. Üç Boyutlu Silindirik Model

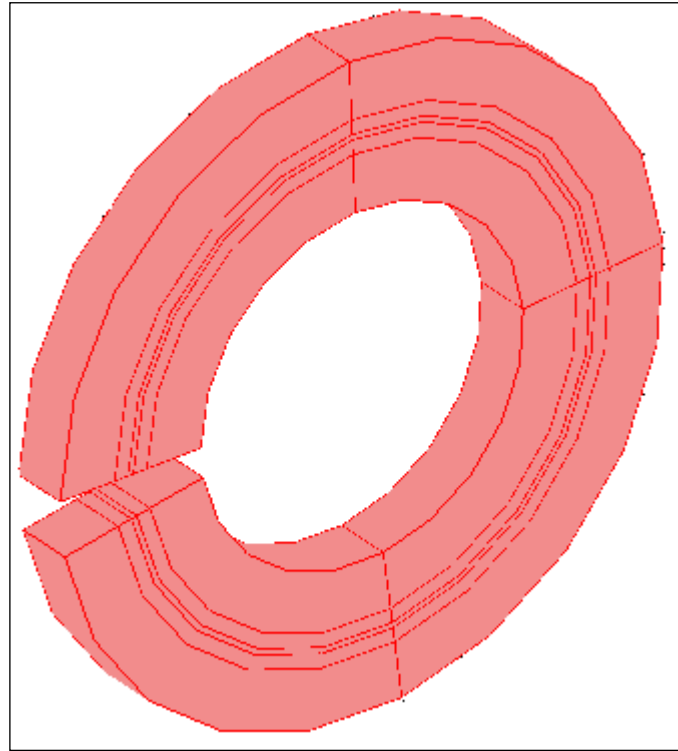
Yakıt pillerinden elde edilen akım yoğunluğunu arttırmak, nemlendirme gibi sorunlara çözüm bulmak nedeniyle araştırmacılar tarafından farklı geometrilere tasarımlar yapılmaktadır. Bu bölümde, farklı bir geometrinin yakıt pili performansına olan etkisini incelemek amaçlanmıştır. Bu nedenle üç boyutlu silindirik model oluşturulmuştur.

4.4.1. Üç Boyutlu Silindirik Model Geometrisi Ve Çözüm Ağı

Üç boyutlu silindirik model, diğer modeller gibi anot akış kanalı, anot, zar, katot ve katot akış kanalı olmak üzere 5 bölgeden oluşmaktadır. Bu bölgeler dıştan içe katot akış kanalı, katot, zar, anot ve anot akış kanalı şeklinde sıralanır. Modelin geometrik özellikleri Tablo 4.5'te, geometrisi ise Şekil 4.31'da gösterilmiştir.

Tablo 4.5. Üç boyutlu silindirik modelin geometrik özellikleri

	Katot Akış Kanalı	Katot	Zar	Anot	Anot Akış Kanalı
Yarıçap	4 mm	3 mm	2.75 mm	2.65 mm	2.4 mm
Yükseklik	1 mm	0.25 mm	0.1 mm	0.25 mm	1 mm
Genişlik	1 mm	1 mm	1 mm	1 mm	1 mm

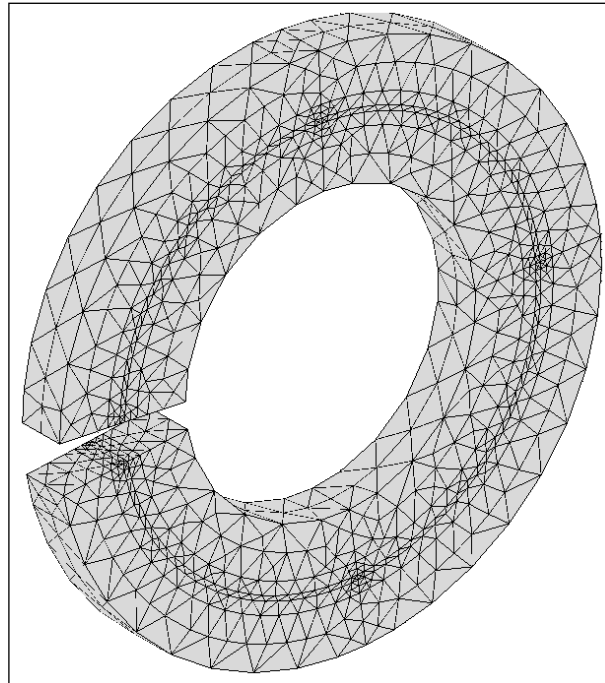


Şekil 4.32. Üç boyutlu silindirik model

Üç boyutlu silindirik modelde çözüm ağı oluşturulurken, diğer modellerde izlenen yollar takip edilmiştir. Buna göre oluşturulan çözüm ağı istatistikleri Tablo 4.6'da, şekli ise Şekil 4.32'da gösterilmiştir.

Tablo 4.6. Üç boyutlu silindirik modelin çözüm ağı istatistikleri

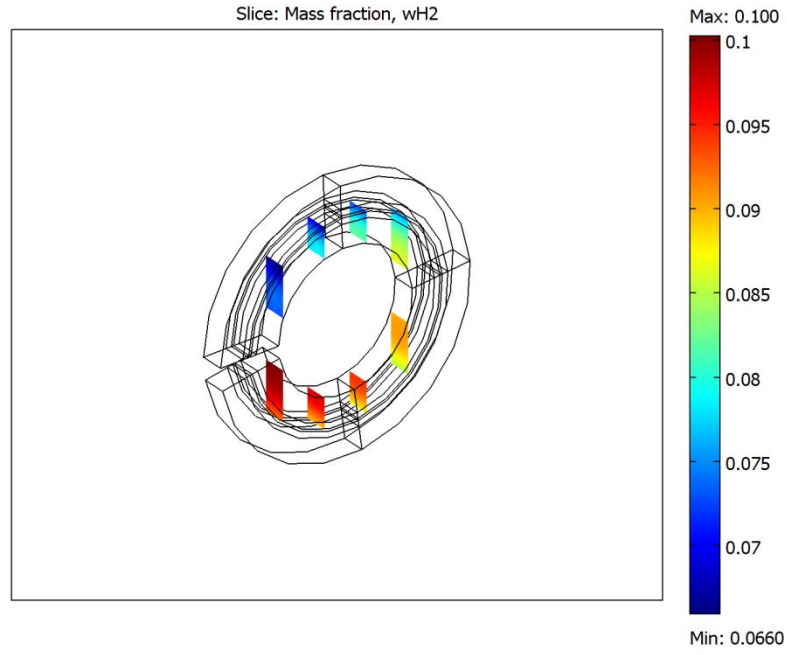
Serbestlik derecesi	107738
Çözüm ağı noktası sayısı	3135
Element sayısı	13898
Dörtüzlü	13898
Sınır element sayısı	6470
Kenar element sayısı	1054
Köşe element sayısı	60
En küçük element kalitesi	0.2788
Element hacim oranı	8.03 E-4



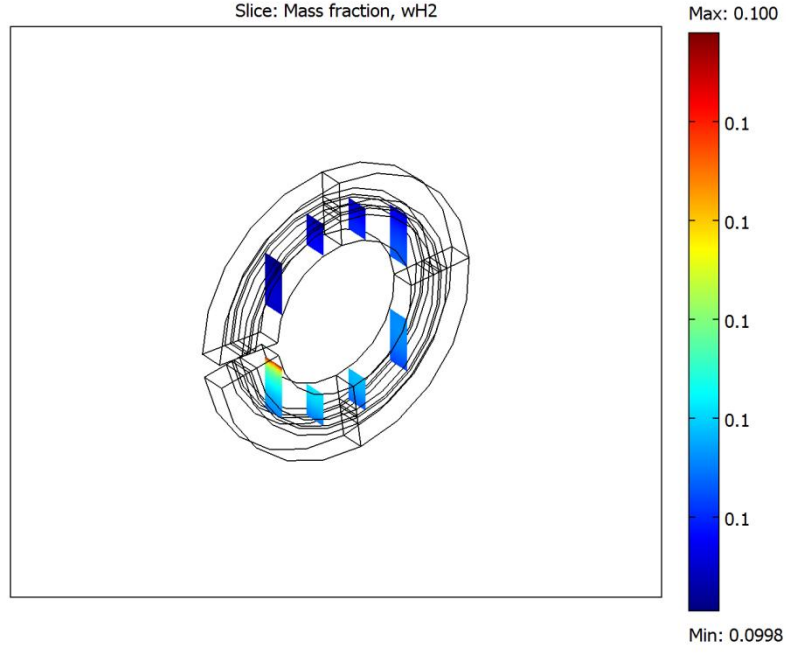
Şekil 4.33. Üç boyutlu silindirik model çözüm ağı

4.4.2. Üç Boyutlu Silindirik Model Sonuçlar

Üç boyutlu silindirik model, diğer modeller gibi 25 °C ve 80 °C olmak üzere iki farklı sıcaklıkta çözülmüştür. Hız dağılımı, oksijen, hidrojen ve suyun kütle dağılımı analizleri her iki sıcaklık değeri için de gösterilmiştir.

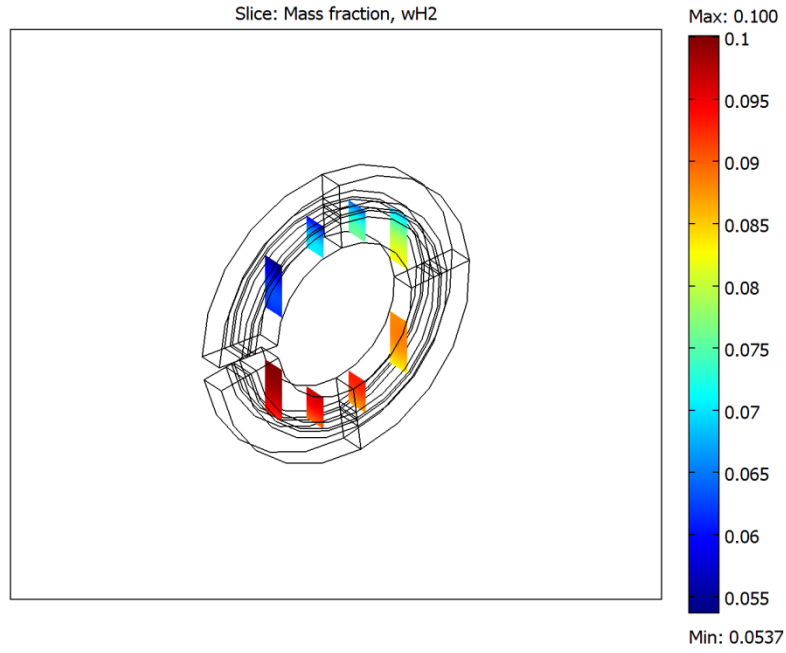


(a)

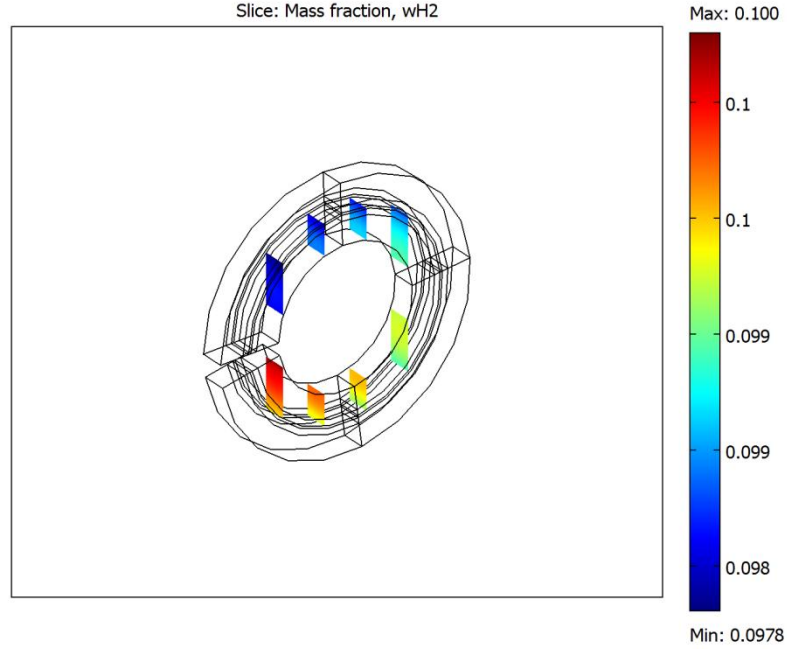


(b)

Şekil 4.34. Üç boyutlu silindirik model için 25 °C’de farklı gerilim değerlerindeki hidrojen kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V



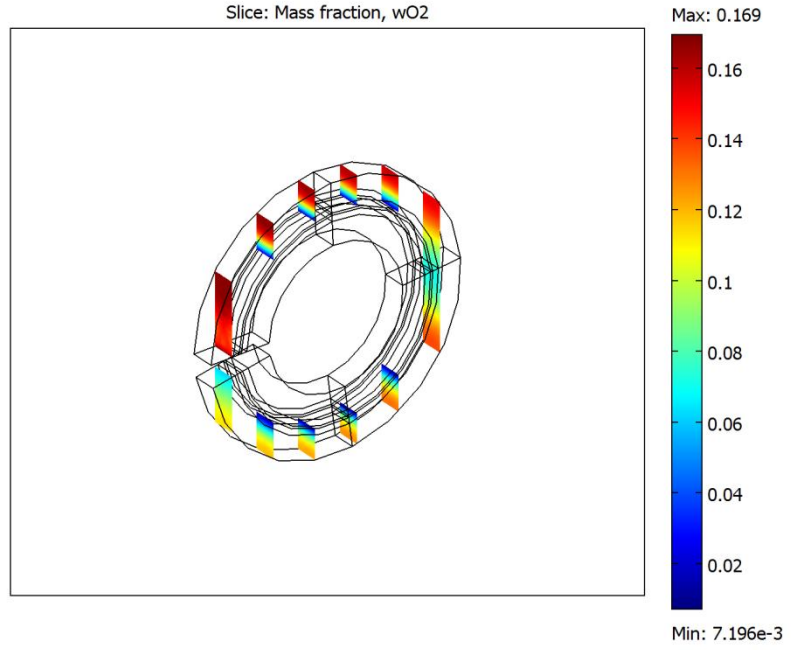
(a)



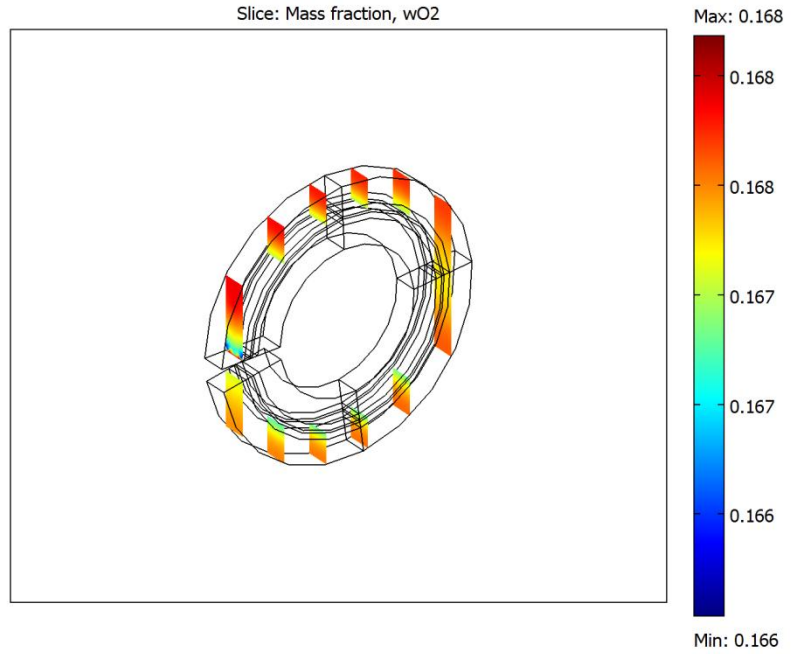
(b)

Şekil 4.35. Üç boyutlu silindirik model için 80 °C’de farklı gerilim değerlerindeki hidrojen kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V

Şekil 4.33 ve Şekil 4.34’te üç boyutlu silindirik modelde 25 °C’de ve 80°C’de iki farklı gerilim değeri için anot akış kanalındaki hidrojen kütle dağılımı gösterilmektedir. Bu modelde de diğer modeller ile aynı matematik altyapı kullanıldığından sonuçlar diğer modellerle benzerlik göstermektedir. Şekil 4.33 ve Şekil 4.34’e göre; sıcaklık arttırılarak daha çok hidrojenin difüze olması ve daha çok reaksiyonun gerçekleşmesi sağlanmıştır. Dolayısıyla, yüksek sıcaklıkta daha düşük hidrojen kütle dağılımı elde edilir. Ayrıca düşük hücre potansiyelinde, daha düşük kütle dağılımı elde edilmiştir. Bu durum düşük hücre potansiyellerinde daha çok reaksiyon gerçekleştiği şeklinde yorumlanabilir.

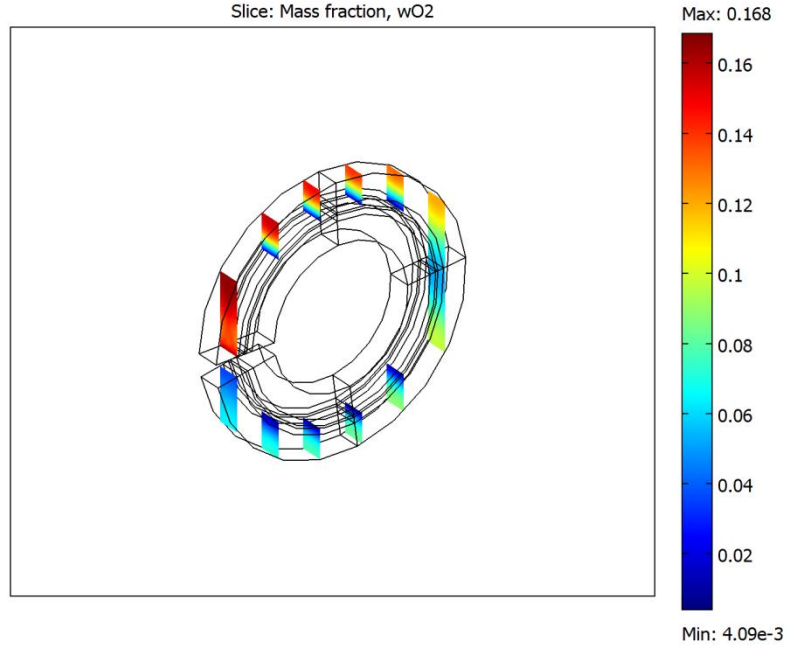


(a)

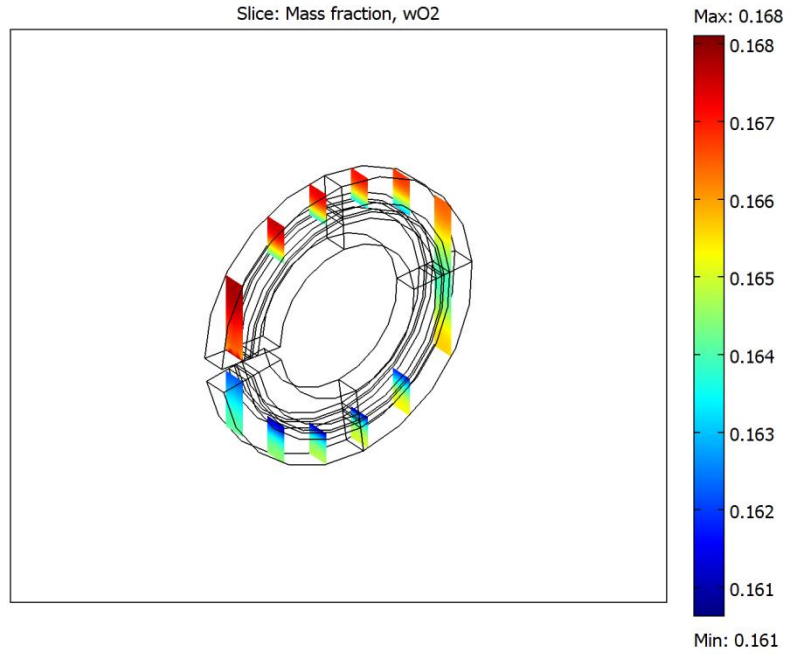


(b)

Şekil 4.36. Üç boyutlu silindirik model için 25 °C’de farklı gerilim değerlerindeki oksijen kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V



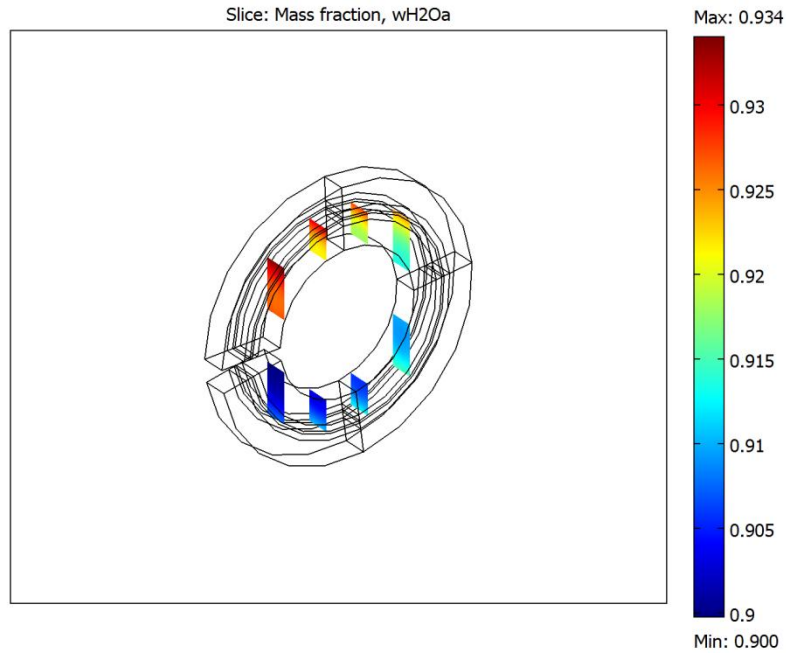
(a)



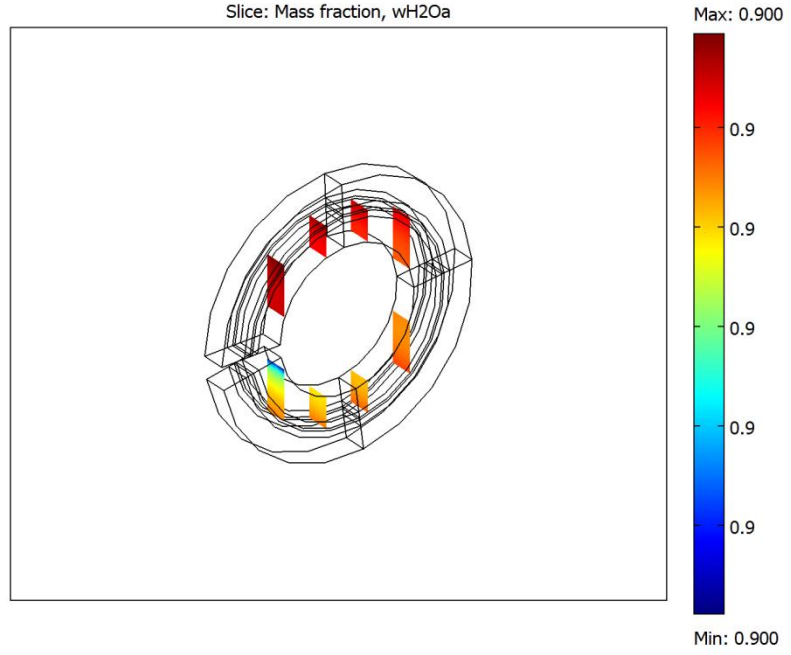
(b)

Şekil 4.37. Üç boyutlu silindirik model için 80 °C’de farklı gerilim değerlerindeki oksijen kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V

Şekil 4.35 ve Şekil 4.36’da üç boyutlu silindirik modelde 25 °C’de ve 80 °C’de iki farklı gerilim değeri için katot akış kanalındaki oksijen kütle dağılımı gösterilmektedir. Oksijen dağılımı sonuçları da diğer modellerden elde edilen sonuçlarla benzerlik göstermektedir. Şekil 4.35 ve Şekil 4.36’ya göre; sıcaklık arttıkça daha çok oksijenin difüze olması ve daha çok reaksiyonun gerçekleşmesi sağlanmıştır. Dolayısıyla, yüksek sıcaklıkta daha düşük oksijen kütle dağılımı elde edilir. Ayrıca, düşük hücre potansiyeli değerlerinde de daha düşük oksijen kütle dağılımı değerleri görülmektedir. Buna göre düşük hücre çalışma potansiyellerinde, tükenen oksijenin daha fazla olduğu söylenebilir.

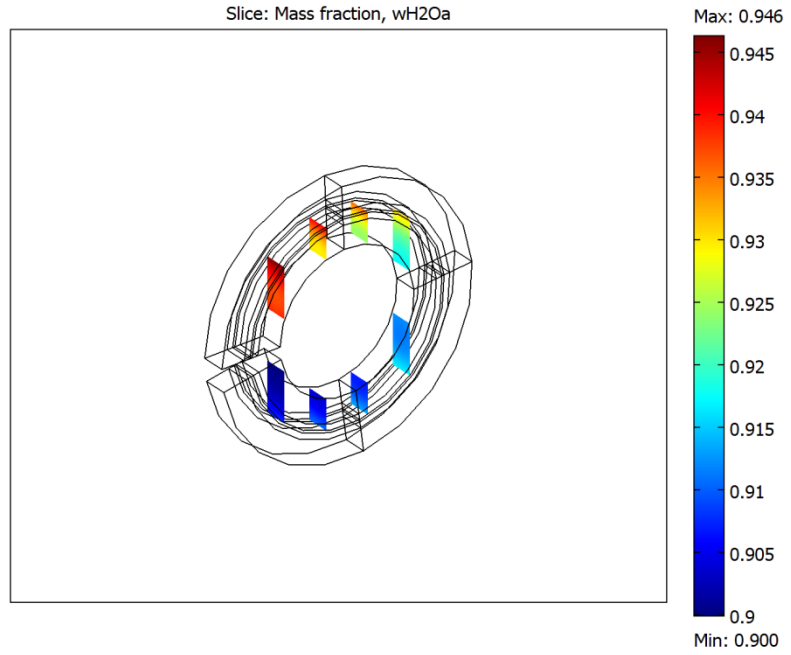


(a)

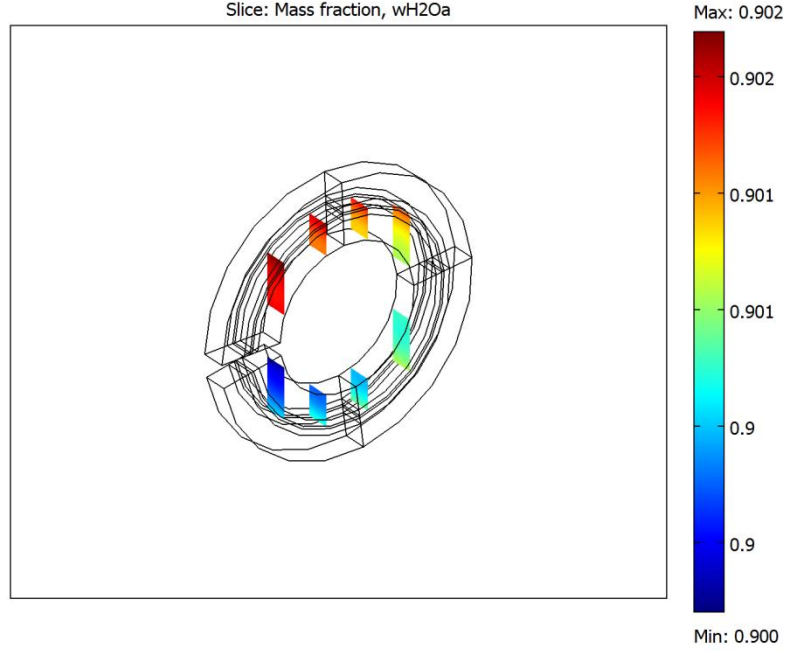


(b)

Şekil 4.38. Üç boyutlu silindirik model için 25 °C’de farklı gerilim değerlerinde anottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V



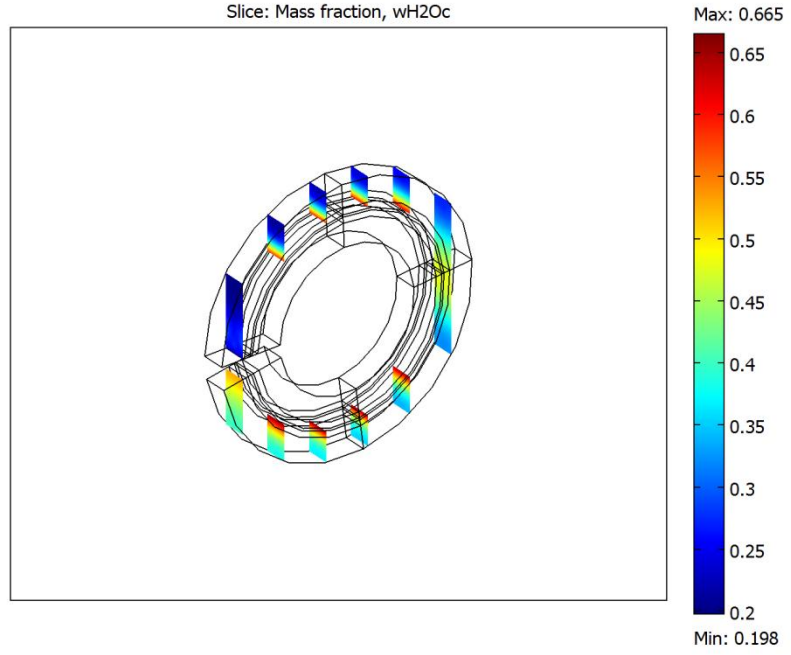
(a)



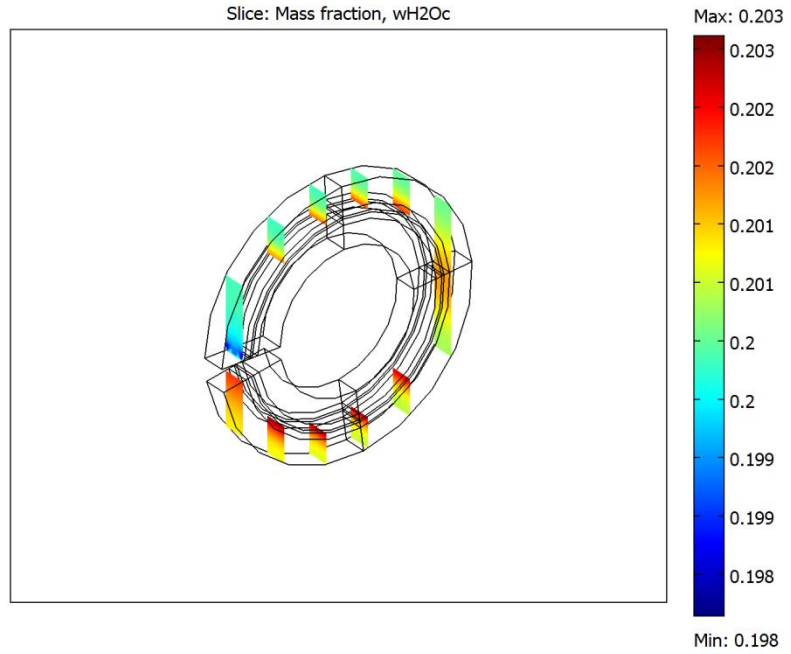
(b)

Şekil 4.39. Üç boyutlu silindirik model için 80 °C’de farklı gerilim değerlerinde anottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V

Şekil 4.37 ve Şekil 4.38’de üç boyutlu silindirik modelde 25 °C’de ve 80 °C’de iki farklı gerilim değeri için anot akış kanalındaki suyun kütle dağılımı gösterilmektedir. Bu sonuçlara göre, kanal girişinden çıkışına kadar hidrojen aktif tabakaya difüze olup reaksiyona girmekte ve tükenmektedir. Hidrojen miktarı azaldığından dolayı, suyun kütle dağılımı çıkışa doğru artmaktadır. Ayrıca, sıcaklık arttıkça tepkimeye giren hidrojen miktarı arttığından, suyun kütle dağılımı sıcaklık arttıkça daha fazla artmaktadır. Düşük hücre potansiyeli değerlerinde, yüksek hücre potansiyeli değerlerine göre daha fazla hidrojen tükendiğinden dolayı, düşük çalışma potansiyellerinde daha yüksek su kütle dağılımı değerleri elde edilmiştir.

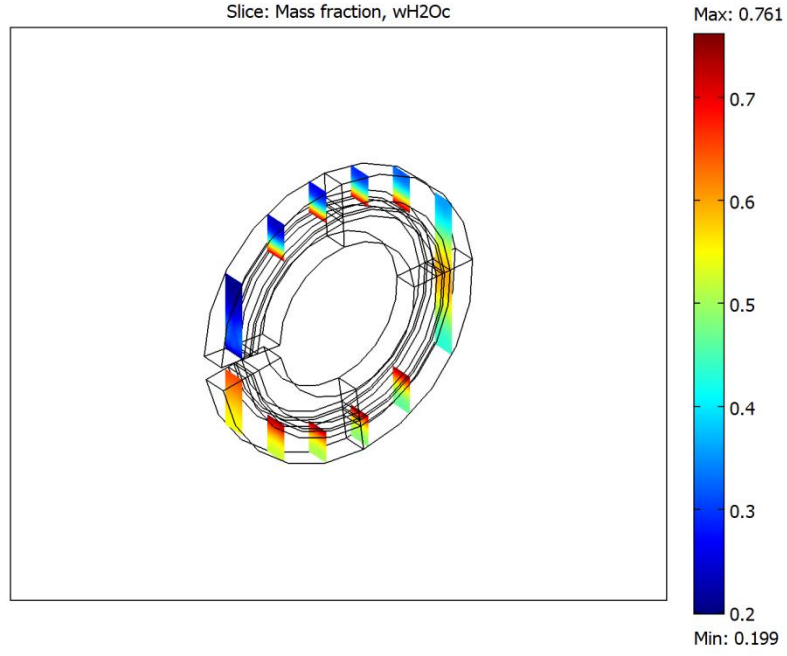


(a)

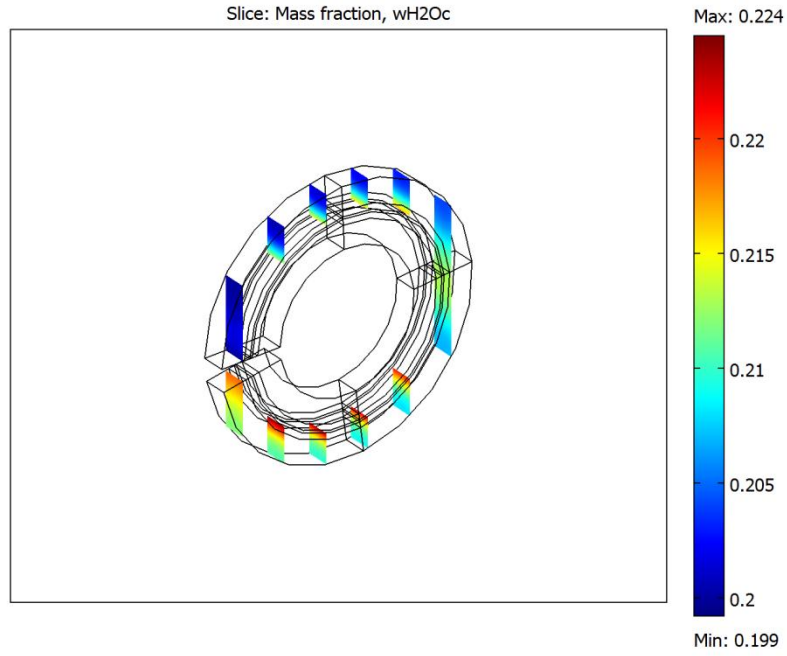


(b)

Şekil 4.40. Üç boyutlu silindirik model için 25 °C’de farklı gerilim değerlerinde katottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V



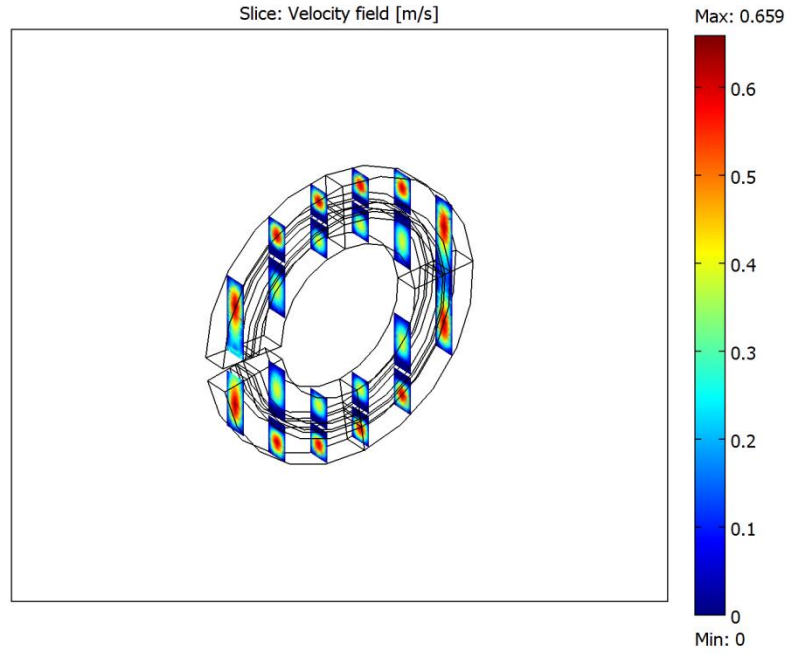
(a)



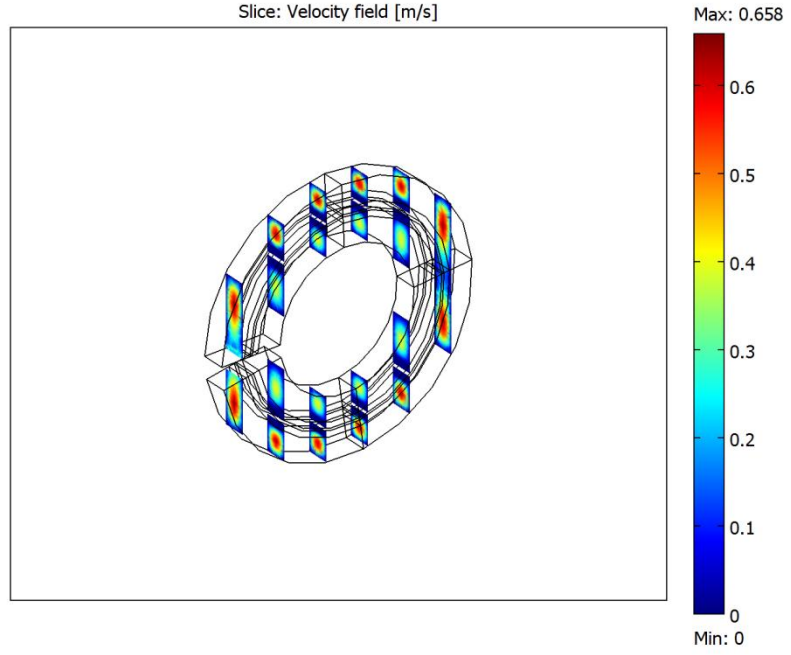
(b)

Şekil 4.41. Üç boyutlu silindirik model için 80 °C’de farklı gerilim değerlerinde katottaki suyun kütle dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V

Şekil 4.39 ve Şekil 4.40'ta üç boyutlu silindirik modelde 25 °C'de ve 80 °C'de iki farklı gerilim değeri için katot akış kanalındaki suyun kütle dağılımı gösterilmektedir. Katot akış kanalındaki oksijen kanal boyunca aktif tabakaya difüze olmakta ve burada anottan gelen proton ve elektronlarla reaksiyona girip su oluşturmaktadır. Katot akış kanalına su ve oksijen ile giren azot herhangi bir reaksiyona girmediğinden miktarı sabit kalır. Buna göre, suyun kütle dağılımının kanal çıkışına doğru artması beklenir. Şekil 4.39 ve Şekil 4.40'ta gösterilen sonuçlar beklentilerle uyum göstermektedir. Ayrıca yüksek sıcaklık değerlerinde ve düşük hücre çalışma potansiyellerinde, suyun kütle dağılımı daha çok artmıştır. Çünkü, düşük potansiyelde ve yüksek sıcaklıkta daha çok reaksiyon gerçekleşmesi sonucu daha çok oksijen tükenmekte ve daha çok su oluşmaktadır.

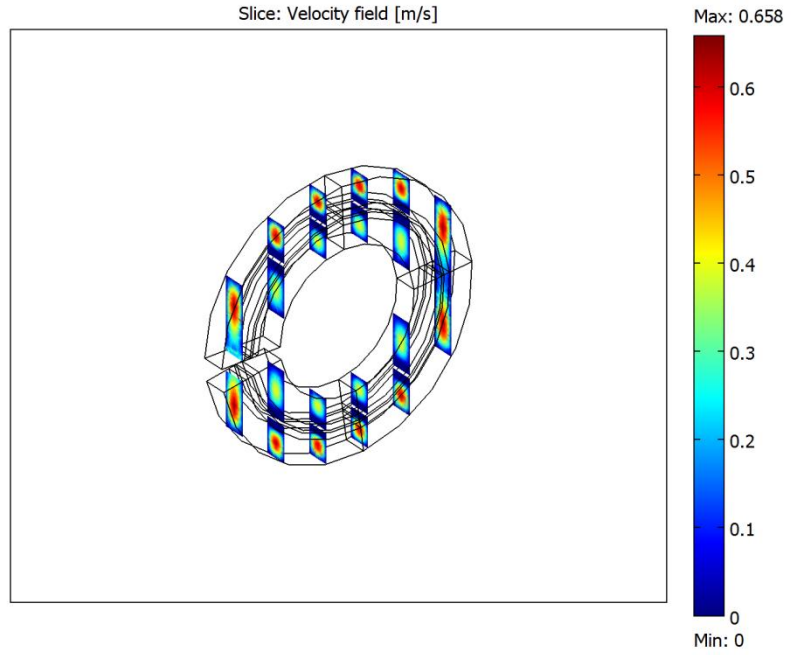


(a)

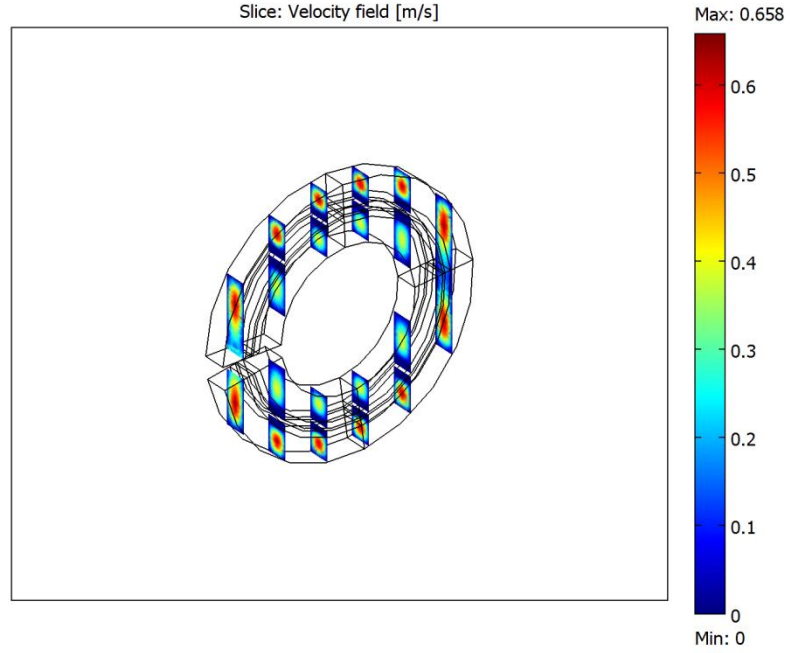


(b)

Şekil 4.42. Üç boyutlu silindirik model için 25 °C’de farklı gerilim değerlerinde hız dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V



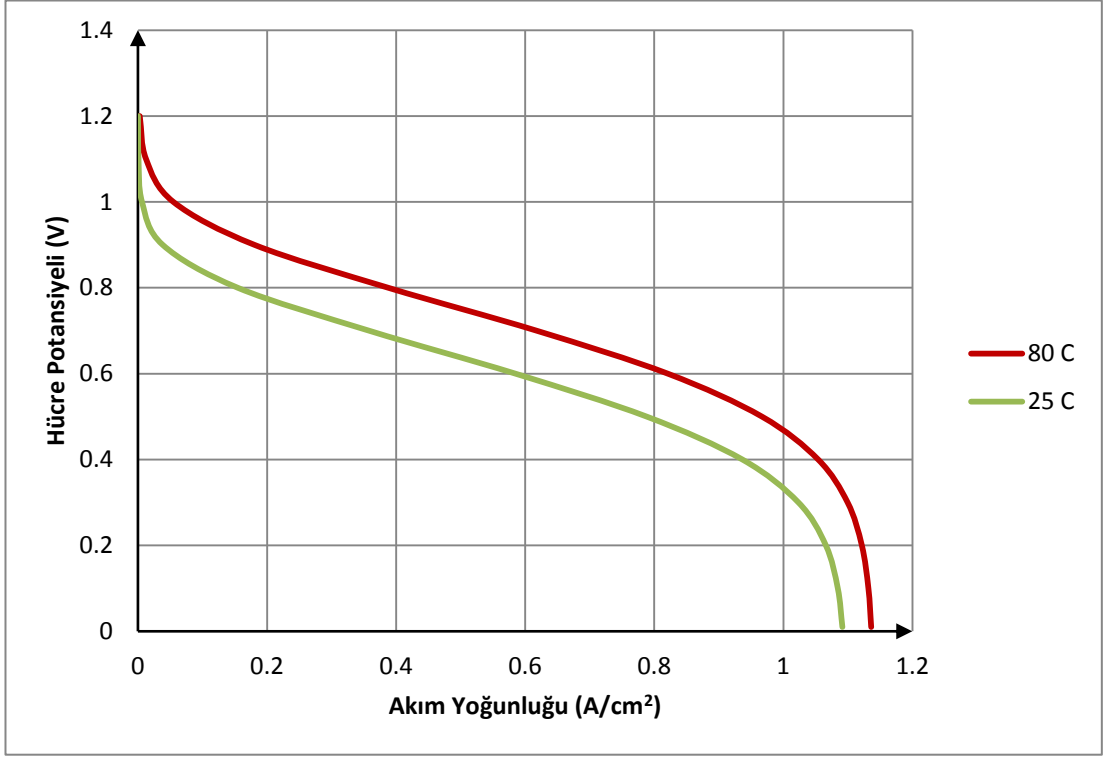
(a)



(b)

Şekil 4.43. Üç boyutlu silindirik model için 80 °C’de farklı gerilim değerlerinde hız dağılımı (a) 0,3 V (b) 1,0 V

Şekil 4.41 ve Şekil 4.42, farklı sıcaklık ve hücre çalışma potansiyeli değerlerindeki hız dağılımlarını göstermektedir. Şekillerden, hız dağılımının sıcaklık ve hücre çalışma potansiyeli ile değişiminin ihmal edilecek kadar az olduğu görülmektedir.



Şekil 4.44. Üç boyutlu silindirik model için performans eğrileri

Şekil 4.43’de farklı sıcaklıklarda elde edilen performans eğrileri gösterilmiştir. Sıcaklık arttıkça performansın iyileştiği gözlemlenmektedir. Bu durum gerçekte örtüşmektedir. Çünkü sıcaklık arttıkça yakıt pilinin kinetiği artmakta ve bunun da performansı iyileştirmesi beklenmektedir.

BÖLÜM 5

5. DEĞERLENDİRME

Bu çalışmada, tek fazlı, izotermal ve kararlı haldeki, tek hücreli PEM tipi yakıt pili modelleri COMSOL[®] ticari yazılımı kullanılarak oluşturulmuştur. Farklı boyutta ve geometrilere oluşturulan modellerin çözümü de bu program ile yapılmıştır. Modeller, 0.1V'tan 1.2 V'a kadar 0.1 V aralıklarla çözdürülmüş ve hücre çalışma potansiyeli değıştikçe, hidrojen, oksijen ve suyun kütle dağılımı ile akış kanallarındaki hız dağılımının nasıl etkilendiğı incelenmiştir. Ayrıca 0.01 V değerinde de çözüm yapılarak elde edilebilecek en yüksek akım yoğunluğu değeri hesaplanmıştır. Bütün modeller hem oda sıcaklığında (25 °C) hem de 80 °C'de çözülmüş ve sıcaklığın yakıt pili performansına olan etkisi araştırılmıştır. Üç boyutlu düz modelde ise sıcaklığın hangi parametreler nedeniyle performansı etkilediğı spesifik olarak incelenmiştir. Sıcaklığa bağı olan, değışim akım yoğunluğu, zarrın iyonik (proton) iletkenliğı ve difüzyon katsayıları için farklı değerler verilerek çözümler elde edilmiştir.

Bütün modellerin farklı hücre çalışma potansiyeli değerlerinde çözümlenmesinden elde edilen sonuçlara göre; çalışma potansiyeli azaldıkça, hidrojen ve oksijenin kütlece oranı azalırken, suyun hem anotta hem de katottaki kütlece oranı artmaktadır. Bu duruma sebep olarak, düşük çalışma potansiyellerinde daha fazla reaksiyonun gerçekleştiğı gösterilebilir. Çünkü bu sayede hidrojen ve oksijen tükenmekte ve kütlece oranları azalmaktadır.

Bir diğere durumda ise, modeller farklı sıcaklıklarda çözülmüştür. Sıcaklığın oda sıcaklığından 80 °C'ye çıkarılması ile hidrojenin kütlece oranı çok az miktarda değışirken ve oksijenin kütlece oranı daha çok azalmakta ve hem anottaki hem de katottaki suyun kütlece oranı ise daha çok artmaktadır. Ayrıca, performans eğriler karşılaştırıldığında 80 °C sıcaklıktaki performansın daha iyi olduğu ortaya konulmaktadır. Buna göre, sıcaklığın artması ile daha çok reaksiyon gerçekleştiğı ve

bunun sonucunda da daha yüksek akım yoğunluğu değerlerinin elde edildiği değerlendirilmesi yapılabilir.

Üç boyutlu modelde sıcaklığın hangi parametreler nedeniyle performansı etkilediği ve bu parametrelerin hangi çalışma potansiyeli değerlerinde etkin olduğu araştırılmıştır. Değişim akım yoğunluğu, zarrın iyonik iletkenliği ve difüzyon katsayıları için üç farklı değerde çözümler yapılmıştır. Elde edilen sonuçlara göre sıcaklıkla artan bu parametreler yakıt pili performansını olumlu yönde etkilemektedir. Değişim akım yoğunluğu aktivasyon kayıplarının baskın olduğu yüksek çalışma potansiyeli değerlerinde, zarrın iyonik iletkenliği omik kayıpların baskın olduğu orta büyüklükteki çalışma potansiyellerinde ve difüzyon katsayıları ise konsantrasyon kayıplarının baskın olduğu düşük çalışma potansiyellerinde daha çok etki göstermektedir.

Son olarak üç boyutlu düz ve silindirik modellerin karşılaştırılması yapılabilir. Bu karşılaştırma için en doğru veri modellerden elde edilen performans eğrileridir. Bu iki farklı geometriden silindirik modelin daha iyi performans gösterdiği ortaya çıkmaktadır. Bunun nedeni gazlar silindirik modelde düz modele kıyasla aktif tabakaya daha iyi difüze olmaktadır. Aktif tabakaya daha iyi difüze olan gazlar daha çok reaksiyon vermekte ve elde edilen akım yoğunluğu da artmaktadır.

BÖLÜM 6

6. GELECEK ÇALIŞMALAR

- Oluşturulan bütün modellerde suyun buhar fazında olduğu kabul edilmiş ve sıvı mevcudiyeti ihmal edilmiştir. Bu nedenle yapılacak ilk çalışma modellerin iki fazlı olacak şekilde tekrardan oluşturulmasıdır ki böylelikle tamamen gerçekçi bir model elde edilir.
- Üç boyutlu silindirik model ile farklı tasarıma sahip bir yakıt pilinin modellenebileceği gösterilmiştir. Buna göre, silindirik tasarım dışında daha farklı geometrilere modeller oluşturulmalı ve bu modeller ile performansın nasıl etkilendiği incelenmelidir.
- Modellenen yeni geometrilere sahip yakıt pillerinin üretimi yapılmalı ve gerçekteki performansının nasıl olacağı test edilip, araştırılmalıdır.

KAYNAKLAR

- [1] Dünya Enerji Görünümü, Teknik Rapor, Ulusal Enerji Ajansı(IEA), 2008.
- [2] “Fuel Cell&Hydrogen Energy Association” erişim adres: <http://www.fchea.org>, erişim tarihi : 7 Haziran 2012.
- [3] “Elektrik İşleri Etüd İdaresi” erişim adresi: <http://www.eie.com/>, erişim tarihi: 7 Haziran 2012.
- [4] Spiegel, C., Designing and Building Fuel Cells, *Mc Graw Hill*, 2007.
- [5] Barbir, F., PEM fuel cells: theory and practice, *Elsevier Academic Press*, 2005.
- [6] Mench, M.M., Fuel Cell Engines, *Wiley*, 2008
- [7] Iarminie, J., Dicks, A., Fuel Cell Systems Explained, *Wiley*, 2003.
- [8] EG&G Technical Service, Fuel cell handbook, Technical report, DOE National Energy Technology Laboratory, 2004.
- [9] King, J.,M., Kunz H., R., Handbook of Fuel Cells-Fundamentals, Technology and Applications, *Wiley*, 2003.
- [10] Service, R.,F., New Tigers in the Fuel Cell Tank, *Science*, 288, 1955–1957, 2000.
- [11] O’Hayre, R., Colella,W., Cha, S., Prinz, F., B., Fuel Cell Fundamentals,, *Wiley*, 2009.
- [12] Barbir, F., Yazici S., Status and Development of Pem Fuel Cell Technology, *International Journal of Energy Research*, 32, 369–378, 2008.
- [13] Sankır M., Proton Exchange Membrane Fuel Cell Systems Based On Aromatic Hydrocarbon And Partially Fluorinated Disulfonated Poly(Arylene Ether) Copolymers, *Doktora Tezi*, Virginia Tech, USA.
- [14] Mehta, V., Cooper, J., Review and Analysis of Pem Fuel Cell Design and Manufacturing, *Journal of Power Sources*, 114, 32–53, 2003.
- [15] Carrette, L., Friedrich, K.A., Stimming, U., Fuel Cells – Fundamentals and Applications, *Fuel Cells*, 1, 5–39, 2001.
- [16] Hoogers, G., Fuel Cell Technology Handbook, *CRC Press*, 2002.
- [17] Tsuchiya, H., Kobayashi, O., Mass Production Cost of Pem Fuel Cell by Learning Curve, *International Journal of Hydrogen Energy*, 29, 985–990, 2004.
- [18] Hermann, A., Chaudhuri, T., Spagnol, P., Bipolar Plates for Pem Fuel Cells: A Review, *International Journal of Hydrogen Energy*, 30, 1297–1302, 2005.
- [19] Tawfik, H., Hung, Y., Mahajan, D., Metal Bipolar Plates for Pem Fuel Cell—A Review, *Journal of Power Sources*, 163, 775–767, 2007.
- [20] Wind, J., Spah R., Kaiser W., Böhm, G., Metallic Bipolar Plates for Pem Fuel Cells, *Journal of Power Sources*, 105, 256–260, 2002.
- [21] Davies, D., Adcock, P., Turpin, M., Rowen, S., Bipolar Plate Materials for Solid Polymer Fuel Cells, *Journal of Applied Electrochemistry*, 30, 101–105, 2000.
- [22] Busick D., Wilson, M., Low-Cost Composite Materials for PEMFC Bipolar Plates, *FuelCells Bulletin*, 5, 6–8, 1999.
- [23] Hentall, P., Lakeman, J., Mepsted, G., New Materials for Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell Current Collectors, *Journal of Power Sources*, 80, 235–241, 1999.
- [24] Araştırma grubu tarafından üretilen tasarlanıp üretilen plakalar
- [25] Sankır, M., “Kimyasal Termodinamik” ders notları, TOBB-ETÜ, 2011-2012, Bahar Dönemi.

- [26] Bockris, J.O'M., Srinivasan, S., *Fuel Cells: Their Electrochemistry*, *Mc Graw-Hill*, New York, 1969.
- [27] Bard A. J., Faulkner, L.R., *Electrochemical Methods*, *Wiley*, New York, 1980.
- [28] Gasteiger, H.A., Gu, W., Makharia, R., Mathias, M.F., Tutorial: catalyst utilization and mass transfer limitations in the polymer electrolyte fuel cell, *Electrochemical Society Meeting*, 2003.
- [29] Kim, J., Lee, S.M., Srinivasan, S., Chamberlain, C.E., Modeling of Proton Exchange Fuel Cell Performance with an Empirical Equation, *Journal of Electrochemical Society*, 142(8), 2670–2674, 1995.
- [30] Sankır, M., “Yakıt Pilleri” ders notları, TOBB-ETÜ, 2010-2011, Güz Dönemi.
- [31] Bernardi, D.M., Verbrugge, M.W., Mathematical Model of a Gas Diffusion Electrode Bonded to a Polymer Electrolyte, *AIChE Journal*, 37(8), 1151–1163, 1991.
- [32] Springer, T.E., Zawodzinski, T.A., Gottesfeld, S., Polymer Electrolyte Fuel Cell Model, *Journal of the Electrochemical Society*, 138, 2334, 1991.
- [33] Bernardi, D.M., Verbrugge, M.W., A Mathematical Model of the Solid Polymer Electrolyte Fuel Cell, *Journal of the Electrochemical Society*, 139, 2477, 1992.
- [34] Springer, T.E., Wilson, M.S., Gottesfeld, S., Modeling and Experimental Diagnostics in Polymer Electrolyte Fuel Cells, *Journal of the Electrochemical Society*, 140, 3513, 1993.
- [35] Fuller, T.F., Newman, J., Water and Thermal Management in Solid Polymer Electrolyte Fuel Cells, *Journal of the Electrochemical Society*, 140, 1218–1225, 1993.
- [36] Nguyen T.V., White, R.E., A Water and Heat Management Model for Proton Exchange Membrane Fuel Cells, *Journal of the Electrochemical Society*, 140, 2178, 1993.
- [37] Nguyen, T., A Gas Distributor Design for Proton Exchange Membrane Fuel Cells, *Journal of the Electrochemical Society*, 143(5), 103–105, 1996.
- [38] Broka, K., Ekdunge, P., Modelling the PEM Fuel Cell Cathode, *Journal of Applied Electrochemistry*, 27(3), 281–289, 1997.
- [39] Gurau, V., Liu, H., Kakac, S., Two-dimensional Model for Proton Exchange Membrane Fuel Cells, *AIChE Journal*, 44(11), 2410–2422, 1998.
- [40] Um, S., Wang, C., Chen, K., Computational Fluid Dynamics Modeling of Proton Exchange Membrane Fuel Cells, *Journal of the Electrochemical Society*, 147(12), 4485–4493, 2000.
- [41] He, W., Yi, J.S., Nguyen, T.V., Two-Phase Flow Model of the Cathode of PEM Fuel Cells Using Interdigitated Flow Fields, *AIChE Journal*, 46, 2053–2064, 2000.
- [42] Siegel, N.P., Ellis, M.W., Nelson, D.J., Von Spakovsky, M.R., Single Domain PEMFC Model Based on Agglomerate Catalyst Geometry, *Journal of Power Sources*, 115(1), 81–89, 2003.
- [43] Hermann, A., Chaudhuri, T., Spagnol, P., *International Journal of Hydrogen Energy*, 30, 1297, 2005.
- [44] Shimpalee, S., Van Zee, J.W., Numerical Studies on Rib & Channel Dimension of Flow Field on PEMFC Performance, *International Journal of Hydrogen Energy*, 80–102, 2006.
- [45] Soo Kim, G., Sui, P.C., Shah, A.A., Djilali, N., Reduced-dimensional Models for Straight-channel Proton Exchange Membrane Fuel Cells, *Journal of Power Sources*, 195, 3240–3249, 2010.

- [46] Ameri M., Oroojie P., Two Dimensional PEM Fuel Cell Modeling at Different Operation Voltages, World Renewable Energy Congress, 2011, İsveç.
- [47] Ađar, E., 2010, 2-D Modelling of Proton Exchange Membrane Fuel Cells, *Yüksek Lisans Tezi*, O.D.T.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
- [48] Ekiz, A., 2010, PEM Tipi Yakıt Pilleri için Çift Kutuplu Akış Plakalarının Modellenmesi, *Yüksek Lisans Tezi*, TOBB-ETÜ Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
- [49] Dutta S., Shimpalee S., Vanzee W.J., Three-dimensional Numerical Simulation of Straight Channel PEM Fuel Cells, *J. Applied Electrochemistry*, 30, 135-146,1999.
- [50] Berning, T., Lu, D.M., Djilali, N., Three-dimensional Computational Analysis of Transport Phenomena in PEM Fuel Cells, *Journal of Power Sources*, 106, 284, 2002.
- [51] Natarajan D., Van Nguyen, T., Three-dimensional Effects of Liquid Water Flooding in the Cathode of a PEM Fuel Cell. *Journal of Power Sources*, 115, 66–80, 2003.
- [52] Um S., Wang, C., Three-dimensional Analysis of Transport Electrochemical Reactions in Polymer Electrolyte Fuel Cells, *Journal of Power Sources*, 125, 40–51, 2004.
- [53] Guvelioglu, G.H., Stenger, H.G., Computational Fluid Dynamics Modeling of Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells, *Journal of Power Sources*, 147, 95–106, 2005.
- [54] Lobato, J., Canizares, P., Rodrigo, M.A., Pinar, J.F., Mena, E., Ubeda, D., Three-dimensional Model of a 50 cm² High Temperature PEM Fuel Cell, Study of the Flow Channel Geometry Influence, *International Journal of Hydrogen Energy*, xxx, i-ii, 2010.
- [55] Ramesh P., Dimble S.S., Duttagupta S.P., Study of the Effect of Channel Width and Rib Width on Micro Fuel Cell Performance using 3D Modelling, *International Journal on Electronics&Communication Technology*, 2, 51-54, 2011.
- [56] Siegel, C., Review of Computational Heat and Mass Transfer Modeling in Polymer-Electrolyte-Membrane (PEM) Fuel Cells, *Energy*, 33,1331–1352, 2008.
- [57] Khan M.A., Sunden B., Yuan J., Analysis of Multi-Phase Transport Phenomena with Catalyst Reactions in Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells – A Review, *Journal of Power Sources*, 196, 7899-7916, 2011.

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : TÜRKMEN, İbrahim
Uyruğu : T.C.
Doğum tarihi ve yeri : 10.09.1988 İstanbul
Medeni hali : Bekar
Telefon : 0 (532) 451 57 80
Faks :
e-mail : iturkmen@etu.edu.tr

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Lisans	TOBB ETÜ / Makine Müh.	2010

İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görev
2010-2012	TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi	Araştırma Görevlisi

Yabancı Dil

İngilizce

Yayınlar

1. Ekiz, A., Camcı, T., Türkmen, İ., Sankır, M., Uslu, S., Baker, D.K., Ağar, E., PEM Tipi Yakıt Pilleri İçin Çift Kutuplu Akış Plakalarının Modellenmesi, Gazi Üniversitesi Mühendislik-Mimarlık Fakültesi Dergisi, 26, 591-606, 2011.
2. Camcı, T., Türkmen, İ., Sankır, M., Ekiz, A., Uslu, S., Ağar E., ve Baker, D., Modeling of Gas Flow Channels For Proton Exchange Membrane Fuel Cells, 6thInternational Green Energy Conference, Eskişehir, Turkey, June 5-9 2011.
3. Sankır, M., Türkmen, İ., Camcı, T., Semiz, L., Sankır, N.D., Design And Characterization Of Obstacked Bipolar Plates, VIII Minsk International Seminar "Heat Pipes, Heat Pumps, Refrigerators, Power Sources", Minsk, Belarus, September 12–15, 2011
4. "Planar versus Cylindrical: A novel approach to PEM Fuel Cell" (Hazırlık Aşamasında)