

**تحصيلات تکميلي**

**رساله دكتري در مهندسی شیمی**

**عنوان:**

**مدل­سازی ریاضی و ساخت توده پیل سوختی متانولی مستقیم به همراه مدیریت آب**

اساتيد راهنما:

**دكتر رهبر رحیمی**

**دكتر داود محبی کلهری**

استاد مشاور:

**دكتر کن ازگور چولپان**

تحقيق و نگارش:

**شیما شریفی**

**(اين رساله از حمايت مالي معاونت پژوهشي دانشگاه سيستان و بلوچستان بهره مند شده است)**

**مهر 1398**

**چكيده**

پیل سوختی متانولی مستقیم یک دستگاه تبدیل انرژی الکتروشیمیایی است که انرژی شیمیایی را مستقیماً به انرژی الکتریکی تبدیل می‌کند. به دلیل سادگی و چگالی انرژی بالا، این گونه پیل‌ها جایگزین مناسبی برای تأمین انرژی دستگاه‌های قابل حمل الکترونیکی هستند که بطور معمول توسط باتری‌ها شارژ می‌شوند. همچنین متانول یک سوخت مایع با هزینه پایین و در دسترس بوده و مسمومیت محدود دارد. مدیریت آب در پیل‌های متانولی مستقیم بسیار حیاتی و پیچیده است، زیرا تعداد زیادی فعل و انفعالات فیزیکی و شیمیایی در آن وجود دارد. معمولاً آب در یک پیل سوختی متانولی از سه روش تولید می­گردد: محلول متانول آبداری که به کانال آند خورانده می‌شود، هوای مرطوبی که به کاتد وارد می‌شود و انجام واکنش الکتروشیمیایی. *روش­های بررسی مدیریت آب به صورت تجربی اغلب با هزینه بالا و مشکلات ناشی از خرید* مجموعه الکترود - غشاء *روبرو هستند.* از این رو، شناخت و پیش­بینی رفتار پیل سوختی متانولی مستقیم کمک فراوانی به طراحی و بهره­برداری از سیستم­های پیل سوختی می­کند، بطوریکه مدل­سازی ریاضی این شناخت را امکان­پذیر می­سازد. در این رساله شبیه­سازی جریان سیال و واکنش­های شیمیایی در یک پیل سوختی متانولی مورد بررسی قرار گرفته است. مدل­سازی دوبعدی، سه بعدی و توده پیل سوختی در حالت پایا و غیرهمدما صورت گرفته و معادلات حاکم آنها با نرم افزار کامسول حل و مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته است. واکنش­های شیمیایی به صورت تک فاز فرض شده و برای محدوده غلظت معینی حل شده است، بطوریکه این فرض در آن محدوده غلظت، فرضی منطقی است و نتایج آن سازگاری خوبی با نتایج آزمایشگاهی دارد که صحت این ساده­سازی را تأیید می­کند. تأثیر پارامترهایی مانند دما، غلظت و متانول عبوری بر روی عملکرد پیل سوختی متانولی و نمودار قطبیت بررسی شده است و نمودار­های توزیع غلظت آب، متانول و اکسیژن در طول لایه­های پیل گزارش شده است. نتایج بدست آمده درک روشنی از چگونگی و میزان تأثیر این پارامترها بر منحنی عملکرد نشان می­دهد که می­تواند به عنوان نتایج قابل استنادی در بهینه­سازی این نوع پیل سوختی مورد توجه قرار گیرد. افزون بر آن نتایج نشان داد که غلظت متانول در طول همه لایه­ها کاهش یافته و در فصل مشترک غشاء و لایه کاتالیستی به صفر می­رسد. افزایش چگالی جریان باعث افزایش عبور متانول در اثر درگ الکترواسمزی شده اما از آنجاییکه غلظت متانول در سطح غشاء بخاطر مصرف متانول کاهش پیدا کرده است، عبور متانول در اثر نفوذ کاهش می­یابد. در بخش تجربی، علاوه بر ساخت تک سل *با توجه به اینکه مدیریت آب با افزایش تعداد سل اهمیت بیشتری پیدا می­کند، برای اولین بار یک توده پیل سوختی متانولی (شامل سه سل)* با سطح فعال 25 سانتی­متر مربع و *كانال جريان­های مارپيچی- موازی با خم دایره­ای ساخته شده و مورد تست و ارزیابی قرار گرفته است. این نوع کانال­ها دارای کمترین افت فشار می­باشند و باعث توزیع یکنواخت واکنش دهنده­ها شده که منجر به افزایش جریان الکتریکی و چگالی توان پیل سوختی می­شود. همچنین شرایط عملیاتی مختلفی مانند دما، غلظت متانول، دبی متانول ورودی به آند، دبی اکسیژن ورودی به کاتد با استفاده از طراحی آزمایش به روش سطح پاسخ و با استفاده از نرم افزار آماری تجاری، بر پیل اعمال شد تا شرایط عملیاتی بهینه که پیل در آن دارای بالاترین چگالی توان است، مشخص گردد. در نهایت مشخص شد که افزایش دما باعث کارکرد بهتر پیل می‌گردد ولی افزایش غلظت متانول منجر به افزایش پدیده متانول عبوری از غشاء و در نتیجه کاهش توان خروجی از پیل می‌شود. همچنین نتایج حاصل از آزمایشات با نتایج* مدل­سازی ریاضی *مقایسه و برخی از پارامترهای حل عددی برای صحت نتایج اصلاح شد. یافته­های حاصل از تحقیق در این رساله می­تواند در بهبود عملکرد پیل­های سوختی متانولی نقش مؤثری ایفاء نماید.*

**كلمات كليدي:** پیل سوختی متانولی مستقیم - توده پیل سوختی - عملکرد پیل - مدیریت آب - مدل­سازی - نرم افزار کامسول - روش سطح پاسخ