

Riassunto della Tesi di Laurea Magistrale

(Sessione luglio 2022)

Studio sull'aumento dell'efficienza di una cella a scambio protonico tramite un modello multiscala

Candidato: Elisa Revello

Relatore: prof. Alessandro Hugo Antonio Monteverde

Una delle tematiche di fondamentale importanza, a livello globale, riguarda il cambiamento climatico, dovuto principalmente ad un continuo aumento delle emissioni in atmosfera di gas serra. In un'ottica sostenibile le Fuel Cells (FC), dispositivi in grado di convertire l'energia chimica di un combustibile (solitamente idrogeno) e di un ossidante (in genere ossigeno) in energia elettrica ed acqua, risultano un'alternativa sicura e competitiva, grazie agli elevati rendimenti ottenibili e al basso impatto ambientale. Lo scopo del presente lavoro di Tesi riguarda l'analisi degli aspetti principali che influiscono sulle prestazioni di una FC costituita da una membrana polimerica a scambio protonico in Nafion. Nello specifico, si è studiata più nel dettaglio una PEMFC a base di un catalizzatore PtCo, candidato tra i materiali più promettenti per l'applicazione di tale tecnologia nel settore automotive. Per valutare aspetti quali: l'attività catalitica, la resistenza al trasporto di ossigeno nella membrana e la diffusione delle specie reagenti all'interno di questa si è adottato un approccio modellistico.

Per un'analisi preliminare è stato impiegato un modello semiempirico, tramite il quale, attraverso simulazioni MATLAB, sono stati ricavati alcuni parametri tipici di una cella a combustibile, come: l'area attiva del catodo, il coefficiente di trasferimento catodico, la densità di corrente al catodo, la pendenza di Tafel, il crossover di idrogeno e la resistenza ohmica nella cella. Da questa prima analisi è emerso come l'utilizzo di un catalizzatore PtCo implichi un miglioramento nell'attività intrinseca del materiale, che risulta circa 25 volte superiore al caso di un catalizzatore con il solo platino.

Successivamente, è stato applicato un modello 1D che risolve, tramite COMSOL, un sistema di equazioni differenziali parziali, le quali descrivono meccanismi di trasporto e di diffusione delle specie chimiche in gioco e fenomeni di conduzione del calore. Per il fitting dei dati sperimentali, riportato in **Figura 1**, si è indagata l'influenza di: porosità del GDL, area attiva del catodo e coefficiente di trasferimento catodico sulla curva di polarizzazione. Con una porosità del GDL (ϵ_{gdl}) pari al 50%, un'area attiva del catodo (A_c) di $4.0\text{E}8 \text{ [m}^2\text{]}$ e un coefficiente di trasferimento catodico (α_c) pari a 0.53 si nota come il tratto compreso tra 1 V e 0.75 V, a bassa densità di corrente, sia perfettamente approssimato, mentre al diminuire del voltaggio si osserva un allontanamento dalla curva sperimentale. L'attività catalitica calcolata è di 354 mA/cm^2 , per cui soddisfa il target per il 2025 fissato dal DOE di 300 mA/cm^2 .

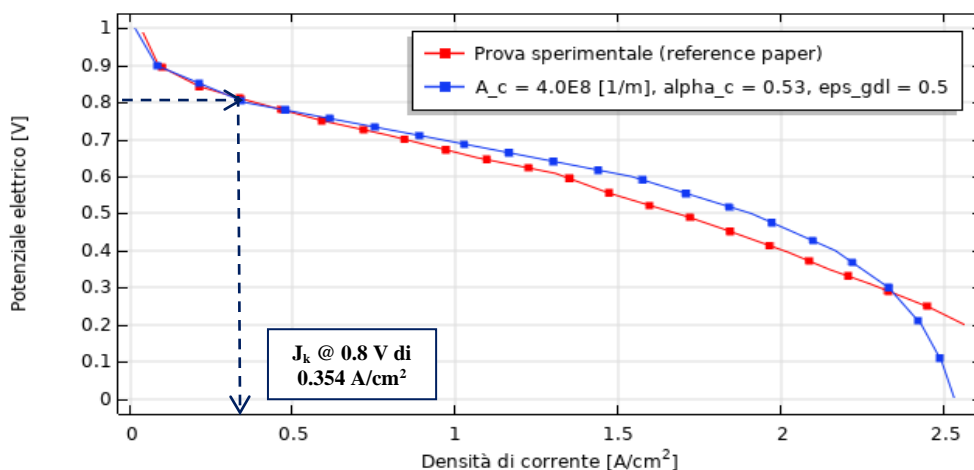


Figura 1 Confronto curve di polarizzazione: prova sperimentale (rosso) e modello proposto (blu).

In **Figura 2** si evidenzia, invece, la curva di potenza ottenuta tramite l'analisi modellistica a confronto con quella realizzata sperimentalmente. In particolare, si nota che il picco di potenza massima raggiunta è di 954 mW/cm^2 , valore prossimo al target DOE posto di 1000 mW/cm^2 . Per aumentare l'efficienza e raggiungere l'obiettivo del 65% occorrerebbe operare ad un voltaggio superiore, circa di 0.8 V ; ciò però comporterebbe una diminuzione della densità di potenza (circa 283 mW/cm^2) e una densità di corrente minore (354 mA/cm^2).

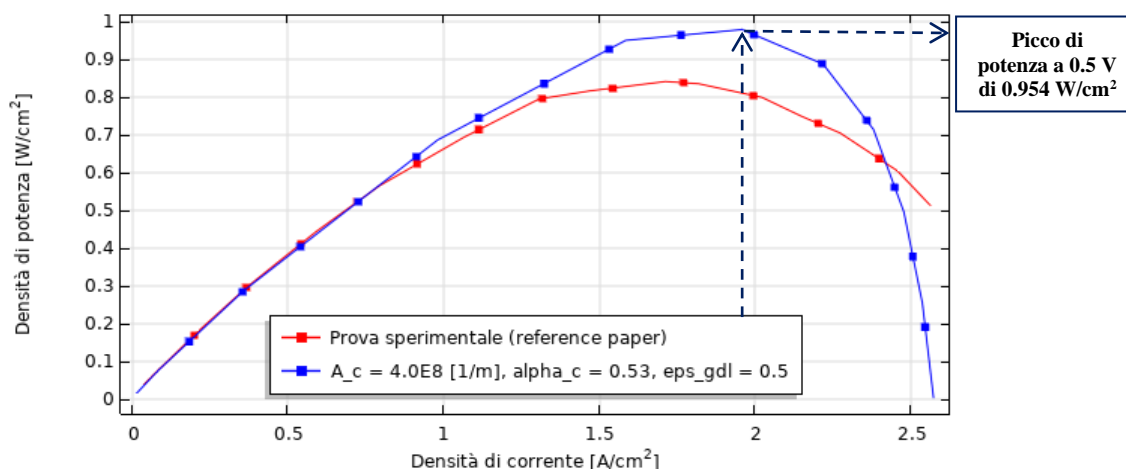


Figura 2 Confronto curve di potenza: prova sperimentale (rosso) e modello proposto (blu).

Osservando i risultati proposti in questo lavoro, è emerso come il tratto centrale della curva di polarizzazione, ovvero quello associato ai fenomeni di resistenza al trasporto di ossigeno, sia di maggior interesse per ulteriori approfondimenti. In particolare, dall'analisi dei flussi di ossigeno nel gas si desume che la variazione dell'area attiva e del coefficiente di trasferimento catodico influenzano in maniera rilevante il quantitativo di ossigeno trasportato attraverso la membrana. Inoltre, per comprendere meglio il comportamento della cella si è deciso di analizzare un ulteriore aspetto che può condizionare i fenomeni di trasporto: la conduttività protonica (σ_p). Si è apportata una modifica all'espressione calcolata da COMSOL introducendo un fattore correttivo generico e si è osservato come una riduzione del 40% di σ_p determini un concreto avvicinamento della curva di polarizzazione simulata a quella sperimentale, come evidenziato in **Figura 3**. In conclusione, sarebbero necessari studi futuri sulla fattibilità progettuale delle soluzioni proposte con un'analisi modellistica per raggiungere e superare i target di efficienza di una PEMFC.

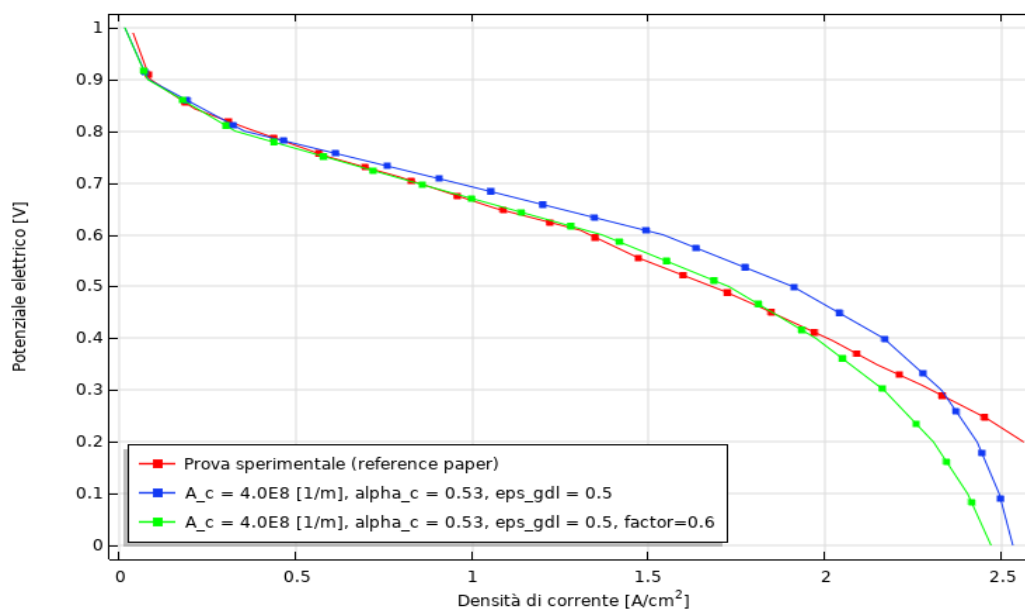


Figura 3 Confronto curve di polarizzazione. Curva in verde ottenuta con riduzione della conduttività protonica.