

文章编号:2095-6134(2017)02-0244-07

气态进料直接甲醇燃料电池的二维数值模拟^{*}

谢旭,邓豪,焦魁[†]

(天津大学内燃机国家重点实验室,天津 300072)
(2016 年 4 月 19 日收稿;2016 年 7 月 31 日收修改稿)

Xie X, Deng H, Jiao K. Numerical simulation of vapor-feed direct methanol fuel cell[J]. Journal of University of Chinese Academy of Sciences, 2017,34(2):244-250.

摘 要 基于多相流理论,建立被动式气态甲醇进料碱性阴离子交换膜直接甲醇燃料电池的二维两相非等温模型,研究电池内部的质量传输和电化学现象。在模型中,液态甲醇蒸发形成蒸汽,通过由 Nafion 膜与疏水的多孔介质复合而成的材料进入电池。模型考虑气体传输层(VTL)和微孔层(MPL),在 VTL 的两侧对称地开两个微孔,便于 CO₂ 的外排。讨论不同 CO₂ 开口大小对电池性能的影响和 MPL 的疏水性对电池内部水分布以及性能的影响。
关键词 CO₂ 开口;阴离子交换膜;被动式;疏水性
中图分类号:TK9 **文献标志码**:A **doi**:10. 7523/j. issn. 2095-6134. 2017. 02. 019

Numerical simulation of vapor-feed direct methanol fuel cell

XIE Xu, DENG Hao, JIAO Kui[†]

(State Key Laboratory of Engines, Tianjin University, Tianjin 300072, China)

Abstract A two-dimensional, two-phase, and non-isothermal model is developed for a vapor-feed direct methanol fuel cell (DMFC) based on alkaline anion exchange membrane system by using the multi-fluid approach. The model will lead to better understanding of the mass-transfer and electrochemical phenomenon in the cell. In the model, the vapor generated from the liquid methanol in the tank goes through a composite material made of Nafion membrane and hydrophobic porous layer into the cell. In the study, the vapor transport layer (VTL) and micro porous layer (MPL) are taken into account, and two symmetrical exits in the VTL are set for the CO₂ removal. With this model, effects of the CO₂ exit length and the hydrophobic MPL on performance and inner water distribution of DMFC are investigated.
Keywords CO₂ exit; alkaline anion exchange membrane; passive; hydrophobicity

随着全球能源需求日益增加,研究具有更高效率、环境更友好、与高科技具有更高兼容性的新能源是十分迫切的。从这个角度讲,燃料电池比传统的电力设备(汽轮机、内燃机等)应用前景更为光明。直接甲醇燃料电池就是通过甲醇与氧气分别在电池阴阳极发生电化学反应将化学能转化为电能的装置。作为为便携式手持电子设备充电使得设备拥有更长的放电时间的潜在能源装置,

^{*} 国家自然科学基金面上项目(51276121)资助
[†] 通信作者,E-mail:kjiao@tju.edu.cn

直接甲醇电池在过去的二十多年里受到越来越广泛的关注^[1-4]。它具有易储存、高能量密度、低工作温度和结构紧凑的优点,但是直接甲醇燃料电池(DMFC, direct methanol fuel cell)的商业化仍然面临巨大的挑战。甲醇的渗透、质量传输以及水管理都是目前困扰 DMFC 应用的重大难题^[5-7]。尤其是甲醇的渗透,甲醇从阳极直接透过膜进入阴极与氧气发生反应而未产生电能,浪费了燃料;而且由于甲醇渗透跟阳极催化层甲醇浓度正相关,所以也制约了 DMFC 使用更高浓度的甲醇。最近,一些实验已经证明气态甲醇进料直接甲醇燃料电池在使用高浓度甲醇时,甲醇渗透水平维持在传统的直接甲醇燃料电池水平,甚至表现更好^[8-10]。

因此人们逐渐把目光集中到可以在室温下使用高浓度甲醇的被动式气态甲醇进料 DMFC^[11-12]。液态甲醇通过一个被动式的汽化装置变成气态甲醇。由于在常压下甲醇的沸点是 64.5℃,因此它在室温下非常容易蒸发。目前有几种不同的材料可以用来做被动式汽化装置,例如 Nafion 膜、多孔碳、硅胶膜、多孔蒸发垫和 PDMS 渗透蒸发膜,本文使用的是 nafion 膜与多孔层的复合材料。

关于被动式直接甲醇燃料电池已经有很多研究团队做了详细的分析^[3, 10, 13]。Shaffe 和 Wang^[14]建立一个一维两相流模型对阳极微孔层(MPL, micro porous layer)对 DMFC 中水以及甲醇运输的影响进行研究,发现 MPL 越厚,疏水性越高,渗透系数越低,对甲醇渗透和水的传输影响越大。同样的结论在 Liu 和 Wang^[15]的研究中也被证实,他们建立一个二维模型,研究 AMPL 对阳极侧水分布和阳极液态水饱和度的影响。碱性阴离子膜作为一种新型的交换膜,相对于传统的质子交换膜具有反应速率高、对贵金属的依赖低、成本低的优势,国内对此做了一些初步的研究^[5]。MPL 作为一层疏水介质,在减缓甲醇渗透和有效的水热管理方面也被国内外研究团队进行了详尽的探究^[16-17]。

如图 1 所示,碱性阴离子交换膜与传统的质子交换膜明显的不同在于膜中离子的传导不是质子而是 OH⁻ 离子,而且传输方向也与质子交换膜相反。传导到碱性阴离子的 OH⁻ 与甲醇进行反应生成 H₂O,而 H₂O 作为反应物在阴极被消耗,可以有效地减缓阴极水淹现象。最重要的优势在

于,碱性的电解质环境使得电化学反应更快,可以降低对重金属 Pt 的依赖,减少成本。

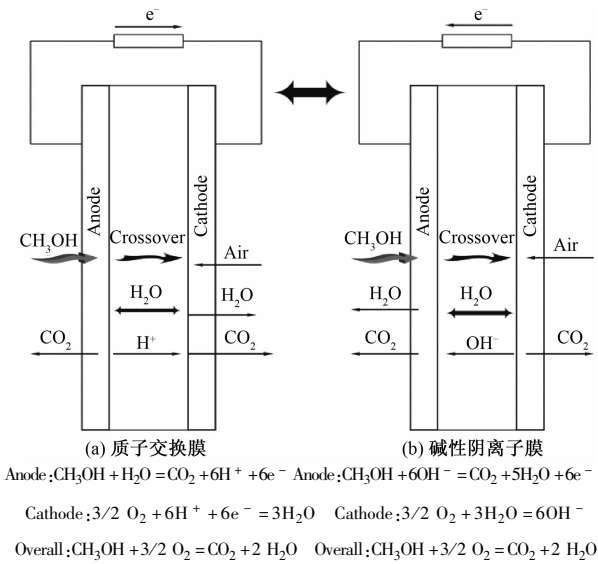


图 1 (a) 质子交换膜和 (b) 碱性阴离子膜的反应原理图
Fig. 1 Schematic diagrams of reactions of the proton exchange membrane (a) and the alkaline anion exchange membrane (b)

尽管碱性阴离子交换膜 DMFC 相比质子交换膜 DMFC 在减少甲醇渗透、降低成本和提高耐久性方面具有更大的潜力,但是到目前为止,文献中还没有关于碱性膜 DMFC 气态甲醇进料方面的研究。因此,本文基于多相流理论建立被动式气态甲醇进料的碱性阴离子交换膜 DMFC 的二维两相非等温模型,并基于模型,研究全电池的质量传输和电化学现象。同时在 VTL 与 GDL 交界处对称性地开设两个小孔,开孔直接与甲醇罐底端相连接回收甲醇避免浪费,同时也研究了开孔大小对电池内部参数的影响。

1 模型介绍

1.1 计算域

如图 2 所示,气态甲醇进料 DMFC 的计算域包括阳极气体传输层(VTL)、阳极气体扩散层(AGDL)、阳极微孔层(AMPL)、阳极催化层(ACL)、A201 膜、阴极催化层(CCL)、阴极微孔层(CMPL)和阴极扩散层(CGDL)。由于计算域结构上的对称性,为加快数值运算,只考虑了一半的脊和一半的流道。

1.2 假设

- 1) 所有气体是理想气体;
- 2) 水的反向传输(从 VTL 通过汽化装置进入甲醇罐)忽略不计;

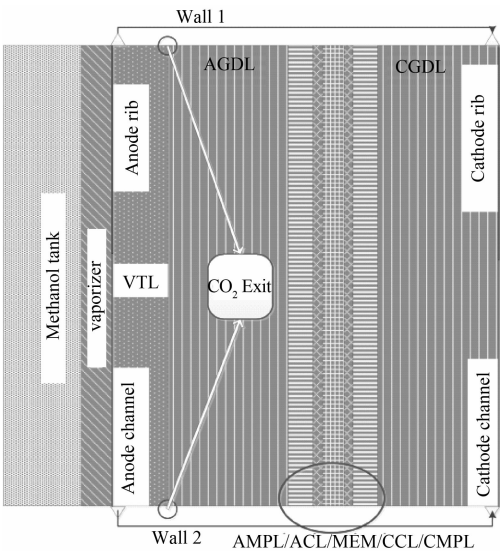


图 2 模型计算域及网格划分

Fig.2 Model calculation domain and meshing

3) 催化层、微孔层和气体扩散层、气体传输

层材料均为各向同性的多孔介质；

4) 水和甲醇蒸汽在阳极催化层处的电化学反应忽略不计。

1.3 守恒方程

本模型涉及的守恒方程共有 11 个以及对应的源项见表 1, 多孔介质中的流动被认为是两相毛细管压力驱动流, 液压与气压都是连续的, 因此毛细压力也是连续的。

本模型的一些结构参数如表 2, 模型参数如表 3。

1.4 边界条件

在阳极流道处, 根据甲醇罐内液态甲醇的浓度赋予对应的边界一个饱和浓度, 其余均认为无法通过该边界, 液态水饱和度为 0。同理, 在阴极流道处, 水蒸气浓度、氧气浓度、二氧化碳浓度与相对湿度为零且大气压力为 1 atm 的环境相同, 液态水饱和度为 0。

表 1 守恒方程

Table 1 Conservation equations

名称	守恒方程	源项
电子电势方程	$\nabla \cdot (\sigma_s^{\text{eff}} \nabla \varphi_s) + S_{V_s} = 0$	$S_{V_s} = \begin{cases} -j_a, (\text{ACL}) \\ -j_c - \frac{i_{\text{cross}}}{\delta_{\text{CL}}}, (\text{CCL}) \\ 0, (\text{others}) \end{cases}$
离子电势方程	$\nabla \cdot (\sigma_m^{\text{eff}} \nabla \varphi_m) + S_{V_m} = 0$	$S_{V_m} = \begin{cases} j_a, (\text{ACL}) \\ -j_c + \frac{i_{\text{cross}}}{\delta_{\text{CL}}}, (\text{CCL}) \\ 0, (\text{others}) \end{cases}$
液压方程	$\nabla \cdot (\rho_l \frac{Kk_l}{\mu_l} \nabla P_l) + \dot{m}_l = 0$	$\dot{m}_l = \begin{cases} M_{\text{me}} S_{\text{me}} - M_w S_{\text{wv}}, (\text{VTL, AGDL, AMPL}) \\ M_{\text{me}} S_{\text{me}} + M_w (-S_{\text{wv}} + \frac{5j_a}{6F} + \frac{\rho_m}{EW} (\lambda_{\text{mw}} - \lambda_{\text{ACL}})), (\text{ACL}) \\ M_w (-S_{\text{wv}} - \frac{j_c}{6F} + \frac{5i_{\text{cross}}}{6F\delta_{\text{CL}}} + \frac{\rho_m}{EW} (\lambda_{\text{mw}} - \lambda_{\text{CCL}})), (\text{CCL}) \\ -M_w S_{\text{wv}}, (\text{CMPL, CGDL}) \end{cases}$
气压方程	$\nabla \cdot (\rho_g \frac{Kk_g}{\mu_g} \nabla P_g) + \dot{m}_g = 0$	$\dot{m}_g = \begin{cases} M_w S_{\text{wv}} + M_{\text{me}} S_{\text{mv}}, (\text{VTL, AGDL, AMPL}) \\ M_w S_{\text{wv}} + M_{\text{CO}_2} S_{\text{CO}_2} + M_{\text{me}} S_{\text{mv}}, (\text{ACL}) \\ M_w S_{\text{wv}} + M_{\text{O}_2} S_{\text{O}_2} + M_{\text{CO}_2} S_{\text{CO}_2}, (\text{CCL}) \\ M_w S_{\text{wv}}, (\text{CMPL, CGDL}) \end{cases}$
液态甲醇质量方程	$-\nabla \cdot \left(\left(-\frac{Kk_l}{\mu_l} \nabla P_l \right) C_{\text{me}} - D_{\text{me}}^{\text{eff}} \nabla C_{\text{me}} \right) + S_{\text{me}} = 0$	$S_{\text{me}} = \begin{cases} -S_{\text{mv}}, (\text{VTL, AMPL, AGDL}) \\ -\frac{j_a}{6F} - S_{\text{mv}} + n_d^{\text{me}} \frac{j_a}{F} - D_{\text{me}}^{\text{me}} \frac{C_{\text{me}}^{\text{ACL}} - C_{\text{me}}^{\text{CCL}}}{\delta_{\text{m}} \delta_{\text{cl}}} \\ -\frac{K_m}{\mu_l} \frac{P_l^{\text{ACL}} - P_l^{\text{CCL}}}{\delta_{\text{m}} \delta_{\text{cl}}}, (\text{ACL}) \end{cases}$
气态甲醇质量方程	$-\nabla \cdot \left(\left(-\frac{Kk_g}{\mu_g} \nabla P_g \right) C_{\text{mv}} - D_{\text{mv}}^{\text{eff}} \nabla C_{\text{mv}} \right) + S_{\text{mv}} = 0$	$S_{\text{mv}} = A_{\text{lg}} h_{\text{lg}} s (1 - s) \frac{P_{\text{MV}}^{\text{sat}} - P_{\text{mv}}}{RT}, (\text{VTL, AMPL, AGDL, ACL})$

表1(续)

名称	守恒方程	源项
水蒸气 质量 方程	$-\nabla\cdot\left(\left(-\frac{Kk_g}{\mu_g}\nabla P_g\right)C_{wv}-D_{wv}^{\text{eff}}\nabla C_{wv}\right)+S_{wv}=0$	$S_{wv}=\begin{cases}-\gamma_{\text{con}}\varepsilon(1-s)\frac{P_{wv}^{\text{sat}}-P_{wv}}{RT},(P_{wv}^{\text{sat}}<P_{wv})\\-\gamma_{\text{con}}\varepsilon s\frac{P_{wv}-P_{wv}^{\text{sat}}}{RT},(P_{wv}^{\text{sat}}>P_{wv})\end{cases}$ <p>(VTL,GDL,MPL)</p>
氧气质量 方程	$-\nabla\cdot\left(\left(-\frac{Kk_g}{\mu_g}\nabla P_g\right)C_{O_2}-D_{O_2}^{\text{eff}}\nabla C_{O_2}\right)+S_{O_2}=0$	$S_{O_2}=\begin{cases}-\frac{j_c}{4F},(\text{CCL})\\0,(\text{CMPL,CGDL})\end{cases}$
二氧化碳 质量方程	$-\nabla\cdot\left(\left(-\frac{Kk_g}{\mu_g}\nabla P_g\right)C_{CO_2}-D_{CO_2}^{\text{eff}}\nabla C_{CO_2}\right)+S_{CO_2}=0$	$S_{CO_2}=\begin{cases}\frac{j_a}{6F(1+\kappa_{H,CO_2})\delta_{CL}},(\text{ACL})\\\frac{I_{\text{cross}}}{6F(1+\kappa_{H,CO_2})\delta_{CL}},(\text{CCL})\\0,(\text{others})\end{cases}$
膜态水方程	$\frac{\rho_m}{EW}\nabla\cdot(D_{mw}\nabla\lambda_{mw})+S_{mw}=0$	$S_{mw}=\begin{cases}\frac{\rho_{\text{MEM}}}{EW}(\lambda_{\text{ACL}}-\lambda_{\text{equil}})+n_d^w\frac{j_a}{F}\\-\frac{\rho_l K_m}{M_l\mu_l}\frac{P_l^{\text{ACL}}-P_l^{\text{CCL}}}{\delta_m\delta_{CL}},(\text{ACL})\\(n_{d,\text{ACL}}^w-n_{d,\text{CCL}}^w)\frac{j_a}{F},(\text{Membrane})\\\frac{\rho_{\text{MEM}}}{EW}(\lambda_{\text{CCL}}-\lambda_{\text{equil}})-n_d^w\frac{j_a}{F}+\\\frac{\rho_l K_m}{M_l\mu_l}\frac{P_l^{\text{ACL}}-P_l^{\text{CCL}}}{\delta_m\delta_{CL}},(\text{CCL})\end{cases}$
能量方程	$\nabla\cdot(k^{\text{eff}}\nabla T)+S_T=0$	$S_T=\begin{cases}-S_{wv}\Delta h_{wv}-S_{mv}\Delta h_{mv}+\frac{I^2}{\sigma_s^{\text{eff}}},(\text{VTL,AGDL,AMPL})\\-(S_{wv}-S_{mv})\Delta h_{wv}-S_{mv}\Delta h_{mv}+\frac{I^2}{\sigma_s^{\text{eff}}}+\\\frac{I^2}{\sigma_{\text{MEM}}^{\text{eff}}}+j_a(\eta_a-\Delta S_{\text{MOR}}\frac{T}{6F}),(\text{ACL})\\\frac{I^2}{\sigma_{\text{MEM}}^{\text{eff}}},(\text{MEM})\\-(S_{wv}-S_{mv})\Delta h_{wv}+\frac{I^2}{\sigma_s^{\text{eff}}}+\frac{I^2}{\sigma_{\text{MEM}}^{\text{eff}}}+\\j_c(\eta_c-\Delta S_{\text{MOR}}\frac{T}{4F})-\frac{I_{\text{cross}}}{\delta_{CL}}\frac{\Delta S_{\text{MOR}}T}{6F},(\text{CCL})\\-S_{mw}\Delta h_{wv}+\frac{I^2}{\sigma_s^{\text{eff}}},(\text{CGDL,CMPL})\end{cases}$

注:其中 s 为液态水体积分数, δ, σ 为对应区域的厚度以及电子(离子)传导系数, $\Delta h_{wv} = 44\,900\text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}$, $\Delta h_{mv} = 37\,700\text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}$, $h_{lg} = 0.001\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, $A_{lg} = 10^5\text{ m}^{-1}$, $\Delta S_{\text{MOR}} = 436.36\text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, $\Delta S_{\text{ORR}} = -345.04\text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 。

表2 结构参数

参数	符号	数值
VTL 厚度/m	δ_{VTL}	1.05×10^{-4}
GDL 厚度/m	δ_{GDL}	2×10^{-4}
MPL 厚度/m	δ_{MPL}	2×10^{-5}
CL 厚度/m	δ_{CL}	1×10^{-5}
膜厚度/m	δ_{mem}	2.8×10^{-5}
CO ₂ 出口孔径/m	W_{CO_2}	5×10^{-6}
流道宽/m	W_{channel}	5×10^{-4}
脊宽/m	W_{rib}	5×10^{-4}

电子电势在阴极极板处为0,一个电流流量给在阳极的极板上。Wall1 和 Wall2 除掉二氧化碳出口的边界均为无滑移、非渗透性壁面条件。所有内部界面均为 interior 边界条件。所有外界面的温度均与电池工作环境温度相同,为 40 ℃。二氧化碳出口边界设置与阴极流道处设置相同。

1.5 数值方法

本研究基于一个二维两相非等温模型的有限元分析。通过 UDF 编写对应的传热传质系数、边

表 3 模型参数
Table 3 Model parameters

参数	符号	数值
ACL 和 CCL 电解质体积分数	$\varepsilon_{ACL}^m, \varepsilon_{CCL}^m$	0.34, 0.3
水凝结速率常数/ s^{-1}	γ_{cond}	100
水蒸发速率常数/ s^{-1}	γ_{evap}	100
膜的等价质量/ $(kg \cdot mol^{-1})$	EW	0.588 2
干膜的密度/ $(kg \cdot m^{-3})$	ρ_m	1 092.7
参考甲醇浓度/ $(mol \cdot m^{-3})$	C_{Me}^{ref}	1 000
参考 O_2 浓度/ $(mol \cdot m^{-3})$	$C_{O_2}^{ref}$	8.04
参考水浓度/ $(mol \cdot m^{-3})$	$C_{H_2O}^{ref}$	55 555.6
参考电流密度/ $(A \cdot cm^{-2})$	i_{ref}	1
阳极、阴极参考交换电流密度/ $(A \cdot m^{-3})$	j_a^{ref}, j_c^{ref}	4 000 000
阳极反应传输系数	α_a	0.24
阴极反应传输系数	α_c	0.2

界条件以及源项。模型中一共求解了 11 个方程，分别是电子电势和离子电势方程、气压方程、液压方程、液态甲醇方程、气态甲醇方程、液态水方程、水蒸气方程、二氧化碳方程、膜态水方程以及能量方程。二阶迎风格式，残差标准达到 10^{-8} 方被判定为收敛。计算域一共 9 层， X 方向上网格层数

分别为 60, 10, 60, 30, 30, 30, 30, 30 和 60。 Y 方向上网格层数为 40, 共计 13 600 个网格, 并进行严格的网格独立性论证, 误差在 1% 以内。

2 结果与讨论

2.1 CO₂ 开口孔径

由于在目前所有实验中找不到基于碱性阴离子的气态被动式直接甲醇燃料电池的实验数据, 因此无法进行试验验证。以下数值模拟结果, 甲醇罐中使用的均为纯甲醇。如图 3(a) 所示, 从图中可以看出, 随着 CO_2 出口孔径变小, 阳极甲醇不断升高, 这是由于 CO_2 开口变小导致阳极甲醇以及液态水溢出量减少。而且也可以看出 MPL 对甲醇浓度的降低有着明显的阻隔作用, 甲醇在催化层的浓度大幅度降低, 从而使得使用高浓度的甲醇成为可能, 也证实了气态进料直接甲醇燃料电池的可行性。孔径的减小虽然降低了甲醇的溢出, 但是阳极甲醇浓度升高会增加甲醇的渗透, 降低开路电压, 从而降低甲醇的利用率。

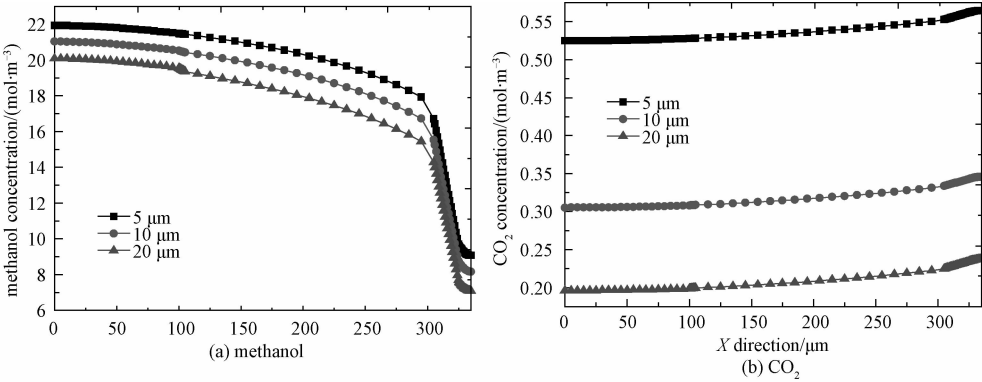


图 3 不同 CO₂ 开口大小对阳极甲醇和二氧化碳的影响

Fig. 3 Influence of the CO₂ exit length on the methanol and CO₂ distributions in the anode

我们也讨论了 CO_2 开口孔径对 CO_2 浓度的影响, 如图 3(b) 所示, 出口孔径的降低会降低 CO_2 的排出, 导致阳极 CO_2 浓度过大, CO_2 的积累一方面会腐蚀电极, 另一方面在碱性环境下易产生化学反应, 对膜以及催化层造成损害, 降低膜的电导率。而且随着 CO_2 出口孔径逐渐降低, CO_2 浓度上升程度也越来越快。因此, 我们可以得出虽然 CO_2 出口孔径的降低, 使得阳极甲醇浓度升高会提高电池的性能, 但是却是在损害电极以及浪费甲醇的前提下, 所以应尽量避免过小的 CO_2 出口孔径。

2.2 MPL 接触角

本模型中我们在阴阳极分别加入多孔层

(MPL), 因为多孔层的疏水性, 使得电池有一个更好的水管理^[5], 从图 3 可以看出 MPL 可有效降低阳极催化层甲醇的浓度, 降低渗透, 优化电池性能。因此我们对 MPL 疏水性对电池性能的影响进行了讨论。如图 4, 我们分析两种不同接触角 (130° 和 150°) 下的阳极甲醇分布以及液态水分布, 明显可以看到随着接触角的增大, 阳极催化层的甲醇浓度有效降低。这是由于 MPL 接触越大, 越不利于液态甲醇的运输, 因此甲醇浓度降低。从液态水分布可以看出阴阳极 MPL 均对电池的水分分布起到积极的作用, 可以阻止液态水向外扩散。与液态直接甲醇燃料电池不同, 在气态甲醇燃料电池中, 电池是极度缺水的而且在碱性阴离

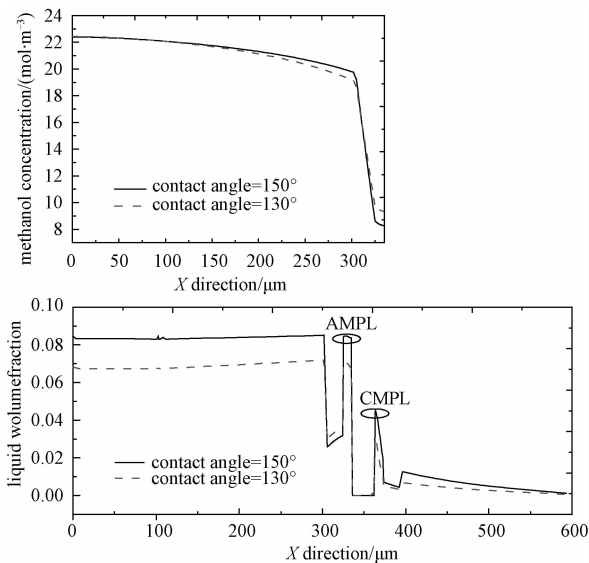


图 4 不同接触角 (130°和 150°) 下的阳极
甲醇分布与全电池内液态水分布
Fig.4 Methnol distributions in the anode and liquid
water distributions in the whole cell at
different contact angles of MPL

子交换膜电池中,水在阴极是作为反应物被消耗,因此水对电池性能的影响是十分大的。提高接触角虽然对液态水的提高有一定的效果,但是当接触角达到 150°时,MPL 已经极度疏水了,阴极的液态水依然很少。造成这个现象的原因主要是电池内部极度缺水,接触角的增大虽然有助于除水,但是效果却是有限的,因此单纯的提高接触角依然无法达到我们想要的效果。

2.3 渗透系数

我们对 MPL 的渗透性也进行了研究,图 5 所示为不同渗透系数下的电池性能表现。渗透系数变低,MPL 疏水性增强,在催化层处甲醇浓度降低,这是因为甲醇是溶解在水中以液态形式在电池内扩散,而 MPL 对液态水的阻碍作用,导致进入阳极催化层的甲醇也变少。阳极催化层浓度的降低减少了甲醇渗透,提高甲醇的利益效率。可以发现,当 MPL 的渗透系数从 2.5×10^{-13} 降低到 1×10^{-13} ,阳极催化层的甲醇浓度降低 25%,同时阴极液态水有明显提升,有利于膜的润湿和性能的提升。这个结果表明降低 MPL 的渗透性可以有效地控制水的排出,同时也减少甲醇的浪费,提高能量利用率,说明可以通过增加 MPL 疏水性优化电池内部水分布,提高电池性能。

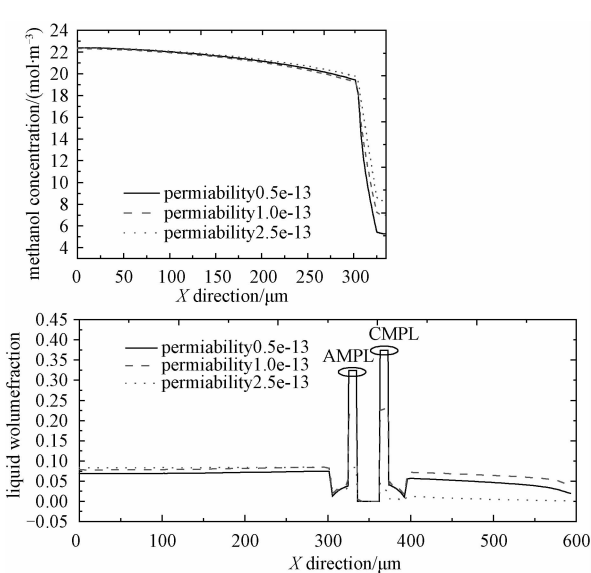


图 5 微孔层 (MPL) 不同渗透系数 ($0.5 \sim 2.5 \times 10^{-13} \text{ m}^2$)
下阳极甲醇和全电池液态水分布
Fig.5 Methanol distributions in the anode and liquid
water distributions in the whole cell at different
permeability coefficients of MPL

3 结论

本文基于多相流理论建立被动式气态甲醇进料的碱性阴离子交换膜直接甲醇燃料电池的二维两相非等温模型,研究其内部的质量传输和电化学现象。研究结果表明:CO₂ 开孔孔径越小,电池性能越好,但是阳极甲醇浓度提高,使得 CO₂ 浓度升高,降低膜的电导率,而且 CO₂ 浓度随着 CO₂ 开孔的减小急剧增加。因此要避免 CO₂ 开孔孔径过大。同时在减少 CO₂ 浓度和减少甲醇的渗透浪费之间必然存在一个最优值。微孔层疏水性越强,电池性能越好,但不论是增大接触角还是减小渗透系数,都可以看到甲醇浓度有效降低和液态水浓度的提升。同时液态水受 MPL 渗透系数影响较大,减少渗透系数可以有效地提高全电池的液态水,减少欧姆损失。增大接触角虽对液态水的提高有一定的效果,但从结果可以看出单纯的增大接触角效果并不明显,需要结合其他参数的调整达到更好的水管理。因此可以通过调节微孔层参数,增加 MPL 疏水性,优化电池的水管理,进而提高直接甲醇燃料电池的性能。

参考文献

[1] Halim F A , Hasran U A , Masdar M S , et al. Overview on vapor feed direct methanol fuel cell [J]. APCBEE Procedia ,

- 2012, 3:40-45.
- [2] Mallick R K , Thombre S B , Shrivastava N K. Vapor feed direct methanol fuel cells (DMFCs): a review [J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews , 2016, 56:51-74.
- [3] Xu C , Faghri A. Mass transport analysis of a passive vapor-feed direct methanol fuel cell [J]. Journal of Power Sources , 2010 , 20 (195) : 7 011-7 024.
- [4] Yuan W , Zhou B , Deng J , et al. Overview on the developments of vapor-feed direct methanol fuel cells [J]. International Journal of Hydrogen Energy , 2014, 12 (39) : 6 689-6 704.
- [5] Deng H , Jiao D K , Zu M , et al. Modeling of passive alkaline membrane direct methanol fuel cell [J]. Electrochimica Acta , 2015, 154 : 430-446.
- [6] Lee K , Fereh S , Jo A , et al. Effects of hybrid catalyst layer design on methanol and water transport in a direct methanol fuel cell [J]. Electrochimica Acta , 2015, 177: 209-216.
- [7] Yuan W , Zhang Z C , Hu J Y , et al. Passive vapor-feed direct methanol fuel cell using sintered porous metals to realize high-concentration operation [J]. Applied Energy , 2014 , 136 : 143-149.
- [8] Bahrami H , Faghri A. Start-up and steady-state operation of a passive vapor-feed direct methanol fuel cell fed with pure methanol [J]. International Journal of Hydrogen Energy , 2012 , 10 (37) : 8 641-8 658.
- [9] Xu C , Faghri A , Li X L. Improving the water management and cell performance for the passive vapor-feed DMFC fed with neat methanol [J]. International Journal of Hydrogen Energy , 2011, 14 (36) : 8 468-8 477.
- [10] Zhang Z C , Yuan W , Wang A , et al. Moisturized anode and water management in a passive vapor-feed direct methanol fuel cell operated with neat methanol [J]. Journal of Power Sources , 2015, 297 : 33-44.
- [11] Fukunaga H , Ishida T , Teranishi N , et al. Impedance of vapor feed direct methanol fuel cells: polarization dependence of elementary processes at the anode [J]. Electrochimica Acta , 2004, 13 (49) : 2 123-2 129.
- [12] Guo Z , Faghri A. Vapor feed direct methanol fuel cells with passive thermal-fluids management system [J]. Journal of Power Sources , 2007, 2 (167) : 378-390.
- [13] Yang W W , Zhao T S , Xu C. Three-dimensional two-phase mass transport model for direct methanol fuel cells [J]. Electrochimica Acta , 2007, 2 (53) : 853-862.
- [14] Shaffer C E. , Wang C Y. Role of hydrophobic anode MPL in controlling water crossover in DMFC [J]. Electrochimica Acta , 2009 , 24 (54) : 5 761-5 769.
- [15] Liu F Q , Wang C Y. Water and methanol crossover in direct methanol fuel cells: Effect of anode diffusion media [J]. Electrochimica Acta , 2008, 17 (53) : 5 517-5 522.
- [16] Wu H J , Yuan T , Huang Q H , et al. Polypyrrole nanowire networks as anodic micro-porous layer for passive direct methanol fuel cells [J]. Electrochimica Acta , 2014, 141 : 1-5.
- [17] Yuan T , Yang J , Wang Y L , et al. Anodic diffusion layer with graphene-carbon nanotubes composite material for passive direct methanol fuel cell [J]. Electrochimica Acta , 2014, 147: 265-270.