DOI: 10.30511/jmms.2026.2096544.1072 - ISSN: 3060-8384 - Vol 2(3), 2026

MECHANICS OF SMART STRUCTURES

Available Online at: http://jmss.qut.ac.ir/

QOM UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

Integrated Review of Gas Diffusion Layer Compression and Catalyst Layer Morphology in PEM Fuel Cell Cathodes: A Lattice Boltzmann Method Perspective

ARTICLE INFO

Article Type
Review Article

Authors
Mehran Nazemian[1,*], Mehrdad Nazemian[2]

[1] Faculty Member, Department of Mechanical Engineering, Vahdat institute of Higher Education, Torbat-e Jam, mehran_nazemian@yahoo.com
[2] Department of Mechanical Engineering, Sahand University of Technology, Tabriz, Iran , en.mehrdad_nazemian@yahoo.com

**** Correspondence***
Address: Department of Mechanical Engineering, Vahdat institute of Higher Education, Torbat-e Jam. Postal Code: 9317166932.
Phone: +989360485054
Fax: -
mehran_nazemian@yahoo.com

Article History
Received: August 3, 2026
Accepted: October 24, 2026
ePublished: October 26, 2026

ABSTRACT

Polymer electrolyte membrane fuel cells (PEMFCs) are promising energy conversion systems for transportation and stationary applications. Cathode performance depends on the interaction of mass transport and electrochemical reactions within the gas diffusion layer (GDL), microporous layer (MPL), and catalyst layer (CL). This review provides an integrated assessment of the effects of GDL compression and CL morphology on cathode performance, with particular emphasis on the Lattice Boltzmann Method (LBM). The effects of GDL compression on porosity, pore connectivity, permeability, oxygen transport, water management, and current-density distribution, as well as the roles of CL morphology, including pore structure, catalyst distribution, agglomerate characteristics, and electrochemically active surface area, are examined. The reviewed studies indicate that GDL compression does not necessarily cause a monotonic deterioration in performance, as its effects depend on microstructural characteristics, fiber diameter, and compression level. Likewise, CL performance is governed by a balance between accessible electrochemical surface area and mass-transport resistance. Overall, the findings highlight the need for integrated optimization of the GDL–MPL–CL architecture to improve oxygen transport, water management, and electrochemical utilization. Future research should focus on three-dimensional, multiphase, and reactive LBM models based on reconstructed microstructures and systematic experimental validation.

Keywords: Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell; Catalyst Layer; GDL Compression; Catalyst Layer Morphology; Lattice Boltzmann Method

مروری یکپارچه بر اثر فشرده‌سازی لایه انتشار گاز و ریخت شناسی لایه کاتالیست بر عملکرد کاتد پیل‌های سوختی پلیمری با رویکرد روش شبکه بولتزمن

مهران ناظمیان *
عضو هیئت علمی گروه مکانیک موسسه آموزش عالی وحدت تربت جام. ایران
مهرداد ناظمیان
دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی سهند تبریز، تبریز، ایران

چکیده
پیل‌های سوختی پلیمری از سامانه‌های نویدبخش تبدیل انرژی برای کاربردهای حمل‌ونقل و نیروگاهی به شمار می‌روند. عملکرد کاتد به برهم‌کنش فرایندهای انتقال جرم و واکنش‌های الکتروشیمیایی در لایه انتشار گاز ، لایه ریز متخلخل و لایه کاتالیست وابسته است. در این مقاله، اثر فشرده‌سازی لایه انتشار گاز و ریخت‌شناسی لایه کاتالیست بر عملکرد کاتد با تأکید بر روش شبکه بولتزمن به‌صورت یکپارچه بررسی شده است. اثر فشرده‌سازی لایه انتشار گاز بر تخلخل، اتصال‌پذیری منافذ، نفوذپذیری، انتقال اکسیژن، مدیریت آب و توزیع چگالی جریان و همچنین نقش ریخت‌شناسی لایه کاتالیست شامل ساختار منافذ، توزیع کاتالیست، ویژگی توده‌های تجمعی و سطح فعال الکتروشیمیایی مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج مطالعات نشان می‌دهند که اثر فشرده‌سازی لایه انشار گاز الزاماً یکنواخت یا کاهشی نیست و به ویژگی‌های ریزساختاری، قطر الیاف و میزان فشردگی وابسته است. همچنین، عملکرد لایه کاتالیست تابع تعادل میان سطح فعال قابل دسترسی و مقاومت انتقال جرم است. در مجموع، یافته‌ها بر ضرورت بهینه سازی یکپارچه معماری لایه انتشار گاز – لایه کاتالست – لایه ریز متخلخل برای بهبود انتقال اکسیژن، مدیریت آب و بهره برداری الکتروشیمیایی تأکید دارند. توسعه مدل‌های سه بعدی، چند فازی و واکنشی َشبکه بولتزمن مبتنی بر ریزساختارهای بازسازی شده و اعتبارسنجی تجربی، از مهم‌ترین مسیرهای آینده پژوهش است.

کلید واژه‌ها
پیل سوختی غشای تبادل پروتون؛ لایه کاتالیست؛ فشرده‌سازی لایه انتشار گاز؛ ریخت شناسی لایه کاتالیست؛ روش شبکه-بولتزمن.

تاریخ دریافت: ۱۴۰۵/۰۵/۱۲
تاریخ پذیرش: ۱۴۰۵/۰۸/۰۲
* نویسنده مسئول: mehran_nazemian@yahoo.com

۱ مقدمه

افزایش تقاضا برای فناوری‌های پایدار تبدیل انرژی، تحقیقات گسترده‌ای را در زمینه پیل‌های سوختی به‌عنوان یکی از جایگزین‌های مناسب برای سامانه‌های متداول تولید انرژی به دنبال داشته است. در میان فناوری‌های مختلف پیل سوختی، پیل سوختی پلیمری به دلیل چگالی توان بالا، دمای کاری نسبتاً پایین، قابلیت راه‌اندازی سریع و امکان استفاده در کاربردهای حمل‌ونقل و تولید توان ثابت، توجه قابل‌توجهی را به خود جلب کرده‌اند [۱-۴].

پیل سوختی پلیمری انرژی شیمیایی هیدروژن و اکسیژن را مستقیماً از طریق واکنش‌های الکتروشیمیایی به انرژی الکتریکی تبدیل می‌کند. اگرچه اصل عملکرد این پیل نسبتاً ساده است،

عملکرد واقعی آن تحت تأثیر برهم‌کنش پیچیده‌ای میان واکنش‌های الکتروشیمیایی، انتقال چندفازی، انتقال حرارت، مدیریت آب و ویژگی‌های ساختاری الکترودهای متخلخل قرار دارد.

کاتد از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است، زیرا واکنش کاهش اکسیژن در مقایسه با واکنش اکسایش هیدروژن دارای سینتیک کندتری است. در نتیجه، بخش قابل‌توجهی از افت عملکرد پیل می‌تواند از کاتد ناشی شود؛ به‌ویژه در چگالی‌های جریان بالا که محدودیت‌های انتقال اکسیژن و مدیریت آب اهمیت بیشتری پیدا می‌کنند [۲-۴].

الکترود کاتد عمدتاً از لایه انتشار گاز، لایه کاتالیست و، بسته به معماری الکترود، لایه ریز متخلخل (MPL) تشکیل شده است. هر یک از این اجزا وظایف متفاوت اما به‌شدت مرتبطی دارند. لایه انتشار گاز وظیفه توزیع واکنش‌دهنده‌های گازی، تسهیل حذف آب تولیدشده، هدایت الکترون‌ها و ایجاد پشتیبانی مکانیکی را بر عهده دارد .لایه کاتالیست حاوی محل‌های فعال الکتروشیمیایی است و مسیرهایی برای انتقال اکسیژن، پروتون و الکترون به نواحی واکنش فراهم می‌کند.

ازاین‌رو، ویژگی‌های ساختاری لایه انتشار گاز نقش مهمی در عملکرد پیل های سوختی پلیمری دارند. لایه های انتشار گاز عموماً مواد متخلخل کربنی هستند که ویژگی‌های انتقالی آنها به عواملی نظیر تخلخل، توزیع اندازه منافذ، جهت‌گیری الیاف، ضخامت، ترشوندگی و پیوستگی منافذ وابسته است [۱, ۵-۷]. در هنگام مونتاژ سلول، لایه انتشار گاز بین اجزای مجاور تحت فشار قرار گرفته و فشرده می‌شود. این فشرده‌سازی موجب تغییر ساختار منافذ و در نتیجه تغییر ویژگی‌های انتقالی می‌شود.

اثر فشرده‌سازی ساده و یک‌جهته نیست. افزایش فشرده‌سازی معمولاً موجب کاهش حجم منافذ و افزایش مقاومت انتقال می‌شود؛ بااین‌حال، می‌تواند تماس الکتریکی و حرارتی را نیز بهبود دهد و مسیرهای انتقال آب را تغییر دهد. بنابراین، عملکرد نهایی به تعادل میان این اثرات متقابل وابسته است [۷-۹]. لایه کاتالیست نیز نقشی اساسی اما متفاوت دارد. ریخت شناسی لایه کاتالیست نحوه توزیع فضایی کاتالیست، پایه کربنی، یونومر و منافذ را تعیین می‌کند. پارامترهای مهم ریخت شناسی شامل توزیع کاتالیست، اندازه و اتصال منافذ، شکل توده های تجمعی ، توزیع یونومر، بارگذاری کاتالیست و سطح فعال مؤثر هستند [۱۰-۱۴].

افزایش تخلخل یا اندازه منافذ می‌تواند انتقال اکسیژن را تسهیل کند، اما تخلخل بیش از حد ممکن است حجم در دسترس کاتالیست یا سطح فعال را کاهش دهد. از سوی دیگر، افزایش سطح کاتالیست ممکن است سینتیک واکنش را بهبود دهد، اما اگر ریخت شناسی موجب ایجاد مسیرهای انتقالی با اتصال ضعیف یا پیچش زیاد شود، می‌تواند مقاومت انتقال جرم را افزایش دهد. بنابراین، بهینه‌سازی ریخت شناسی لایه کاتالیست مستلزم ایجاد تعادل میان فعالیت الکتروشیمیایی و کارایی انتقال جرم است.

از آنجا که لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست محیط‌هایی متخلخل، ناهمگن و پیچیده هستند، مدل‌های پیوسته متداول ممکن است نتوانند تمام سازوکارهای انتقال مرتبط با ریزساختار آنها را به‌طور کامل ثبت کنند. در نتیجه، روش شبکه بولتزمن به‌عنوان یک روش مناسب برای مدل‌سازی در مقیاس حفره در الکترودهای پیل سوختی مورد توجه قرار گرفته است. روش شبکه بولتزمن قابلیت مناسبی برای برخورد با مرزهای پیچیده جامد-سیال، انتقال چندفازی در محیط‌های متخلخل و محاسبات موازی دارد [۳].

مطالعات پیشین به‌صورت جداگانه اثر فشرده‌سازی لایه انتشار گاز و ریخت شناسی لایه کاتالیست را بررسی کرده‌اند. به‌طور خاص، مولائی منش و ناظمیان اثر فشرده‌سازی لایه انتشار گاز را با استفاده از روش شبکه بولتزمن بررسی کرده و نشان دادند که اثر فشرده‌سازی به قطر الیاف کربنی و میزان فشرده‌سازی وابسته است [۱۵]. در مطالعه‌ای دیگر، مولائی منش و همکاران پنج ریخت شناسی بازسازی‌شده مختلف برای لایه کاتالیست را با استفاده از یک مدل سه‌بعدی توده های تجمعی مبتنی بر روش شبکه بولتزمن بررسی کردند و نشان دادند که ریخت شناسی لایه کاتالیست بر

توزیع اکسیژن و آب و همچنین چگالی جریان تأثیر قابل‌توجهی دارد [۱۶].

اگرچه این مطالعات اطلاعات ارزشمندی ارائه می‌کنند، بررسی مستقل لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست تصویر کاملی از رفتار کاتد ارائه نمی‌دهد. اکسیژن ابتدا باید از لایه انتشار گاز عبور کرده و سپس وارد لایه کاتالیست شود، در حالی که آب تولیدشده در لایه کاتالیست باید از طریق ساختار متخلخل الکترود به سمت لایه انتشار گاز منتقل شود. بنابراین، ویژگی‌های ساختاری این دو لایه از نظر فیزیکی به یکدیگر وابسته‌اند.

هدف این مقاله مروری، ارائه یک ارزیابی یکپارچه از اثر فشرده‌سازی لایه انتشار گاز و ریخت شناسی لایه کاتالیست بر عملکرد کاتد پیل سوختی پلیمری است. تأکید اصلی بر مطالعات مبتنی بر روش شبکه بولتزمن، راهبردهای مدل‌سازی، یافته‌های اصلی، محدودیت‌ها و خلأهای پژوهشی موجود است. هدف اصلی آن است که مشخص شود ویژگی‌های ساختاری لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست چگونه بر یکدیگر اثر می‌گذارند و مدل‌های آینده چگونه می‌توانند به سمت بهینه‌سازی یکپارچه کاتد حرکت کنند.

۲ ساختار و اصول عملکرد کاتد پیل های سوختی پلیمری

۲-۱ ساختار کلی پیل سوختی پلیمری

پیل سوختی پلیمری از چندین لایه عملکردی شامل آند، غشای تبادل پروتون، کاتد، لایه‌های کاتالیست، لایه‌های نفوذ گاز و صفحات کانال جریان تشکیل شده است.

در آند، هیدروژن اکسید می‌شود:

$$H_2 \rightarrow 2H^+ + 2e^- \quad (۱)$$

پروتون‌های تولیدشده از طریق غشای الکترولیت منتقل می‌شوند، در حالی که الکترون‌ها از طریق مدار خارجی حرکت می‌کنند.

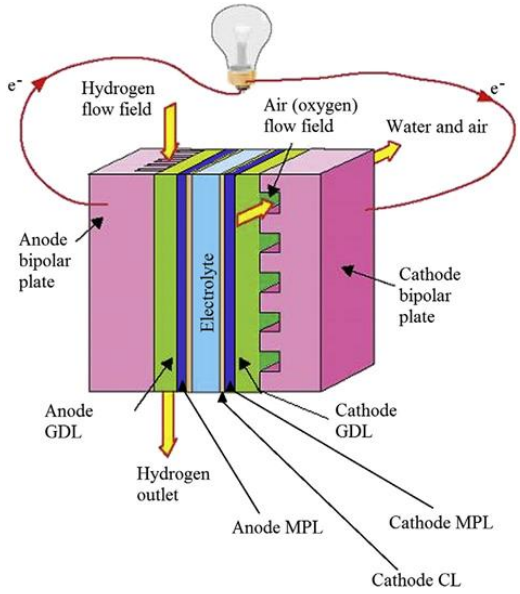
در کاتد، اکسیژن با پروتون‌ها و الکترون‌ها واکنش داده و آب تولید می‌کند:

$$O_2 + 4H^+ + 4e^- \rightarrow 2H_2O \quad (۲)$$

در نتیجه، واکنش کلی پیل را می‌توان به صورت زیر بیان کرد:

$$2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O + \text{گرما} + \text{انرژی الکتریکی} \quad (۳)$$

واکنش کاتدی نیازمند حضور هم‌زمان اکسیژن، پروتون و الکترون است. بنابراین، ساختار کاتد باید دارای شبکه‌ای پیوسته باشد که بتواند اکسیژن را به محل‌های فعال واکنش منتقل کرده و امکان حذف آب را فراهم کند.



شکل ۱ نمای شماتیک پیل سوختی پلیمری و اجزای اصلی آن، شامل لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست [۵].

۲-۲ نقش لایه‌های متخلخل کاتد

لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست کاتد یک مسیر انتقال پیوسته ایجاد می‌کنند:

کانال جریان → لایه انتشار گاز →لایه کاتالیست → محل‌های فعال الکتروشیمیایی

هم‌زمان، آب تولیدشده باید در مسیر مخالف حرکت کند:

محل‌های فعال الکتروشیمیایی → لایه نفوذ گاز/ لایه ریز متخلخل → لایه کاتالیست →کانال جریان

بنابراین، عملکرد کلی کاتد تحت تأثیر مقاومت انتقال مرتبط با هر دو مسیر قرار دارد.

این موضوع، مبنای اصلی ادغام مطالعات لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست در مقاله حاضر است.

۳-۲ نقش لایه ریزمتخلخل در اتصال لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست

لایه ریزمتخلخل (MPL) به‌عنوان ناحیه واسط میان لایه انتشار گاز (GDL) و لایه کاتالیست (CL)، نقش مهمی در تنظیم همزمان انتقال گاز، انتقال آب و شرایط انتقالی حاکم بر لایه کاتالیست دارد. این لایه با ایجاد یک ناحیه انتقالی میان ساختار نسبتاً درشت‌منفذ GDL و ساختار ریزمقیاس CL، می‌تواند بر توزیع واکنش‌دهنده‌ها و محصولات واکنش در فصل مشترک تأثیر بگذارد. همچنین، ویژگی‌هایی نظیر اندازه منافذ، تخلخل، ضخامت، ترشوندگی و ریخت‌شناسی MPL از عوامل مؤثر بر انتقال آب و عملکرد کاتد محسوب می‌شوند [۱۷].

از دیدگاه انتقال جرم، MPL می‌تواند مسیر و مقاومت انتقال اکسیژن از GDL به CL را تغییر دهد. کاهش اندازه منافذ در این لایه، از یک سو می‌تواند شرایط انتقالی در مجاورت CL را یکنواخت‌تر کند، اما از سوی دیگر، افزایش بیش از حد ضخامت یا کاهش تخلخل می‌تواند مقاومت انتقال جرم را افزایش دهد. بنابراین، طراحی MPL مستلزم ایجاد تعادل میان ایجاد یک فصل مشترک مناسب و محدود نکردن انتقال اکسیژن به سمت لایه کاتالیست است [۱۷].

نقش MPL در مدیریت آب نیز از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. آب تولیدشده در لایه کاتالیست باید از طریق MPL و GDL به سمت کانال جریان منتقل شود و ساختار MPL می‌تواند مسیر و میزان این انتقال را کنترل کند. مطالعات در مقیاس منفذ نشان داده‌اند که ترک‌های موجود در MPL می‌توانند مسیرهای اصلی انتقال آب مایع از CL به GDL باشند و تغییر ضخامت، عرض ترک و زاویه تماس MPL می‌تواند اشباع آب مایع در GDL را تحت تأثیر قرار دهد [۱۸]. همچنین، شبیه‌سازی‌های چندفازی مبتنی بر روش شبکه بولتزمن نشان داده‌اند که ضخامت و ترشوندگی MPL از پارامترهای مؤثر بر رفتار انتقال آب در ساختار GDL/MPL هستند [۱۹].

از دیدگاه یکپارچه، فشرده‌سازی GDL نیز می‌تواند عملکرد MPL و فصل مشترک GDL/MPL را تحت تأثیر قرار دهد. فشرده‌سازی مکانیکی می‌تواند موجب تغییر شکل موضعی ریزساختار، کاهش تخلخل و اندازه منافذ و در نتیجه تغییر خواص انتقالی در فصل مشترک شود. یک مطالعه اخیر مبتنی بر بازسازی سه‌بعدی ساختار، تحلیل اجزای محدود و روش شبکه بولتزمن نشان داده است که افزایش فشردگی در فصل مشترک GDL/MPL موجب تغییر قابل‌توجه خواص انتقالی ناهمسانگرد می‌شود؛ به‌طوری‌که در فشردگی ۴۰ درصد، نفوذپذیری گاز و آب مایع در هر دو راستای درون‌صفحه‌ای و عمود بر صفحه کاهش قابل‌توجهی داشته است [۲۰]. این یافته نشان می‌دهد که اثر فشردگی GDL را نمی‌توان بدون درنظرگرفتن ساختار MPL و رفتار فصل مشترک آن‌ها به‌طور کامل ارزیابی کرد.

بنابراین، MPL را می‌توان یک مؤلفه کلیدی در چارچوب یکپارچه GDL–MPL–CL دانست. بهینه‌سازی مستقل GDL و CL، بدون درنظرگرفتن نقش واسط MPL، ممکن است به پیش‌بینی نادرست انتقال اکسیژن، دفع آب و در نهایت عملکرد کاتد منجر شود. از این منظر، بررسی همزمان فشردگی GDL، ویژگی‌های ساختاری MPL و مورفولوژی CL می‌تواند چارچوب مناسب‌تری برای تحلیل و طراحی ریزساختار کاتد فراهم کند.

۳ لایه انتشار گاز: ساختار و وظایف

۳-۱ ساختار لایه انتشار گاز

لایه های انتشار گاز معمولاً از مواد کربنی متخلخل مانند الیاف کربنی، کاغذ کربنی، پارچه کربنی و ساختارهای گرافیتی تولید می‌شوند. برای اصلاح خواص مکانیکی، الکتریکی و ترشوندگی ممکن است از مواد اتصال‌دهنده پلیمری و عملیات آب‌گریزکننده استفاده شود [۱, ۴].

مهم‌ترین پارامترهای ساختاری لایه انتشار گاز عبارت‌اند از:

- تخلخل؛
- توزیع اندازه منافذ؛
- قطر الیاف؛
- جهت‌گیری الیاف؛
- ضخامت؛
- نفوذپذیری؛
- ترشوندگی؛
- هدایت الکتریکی؛
- سختی مکانیکی.

این پارامترها به‌شدت به یکدیگر وابسته‌اند. برای مثال، افزایش تخلخل معمولاً انتقال گاز را تسهیل می‌کند، اما ممکن است استحکام مکانیکی را کاهش دهد. همچنین، اتصال منافذ هم بر نفوذپذیری گاز و هم بر مسیرهای انتقال آب مایع تأثیر می‌گذارد.

۳-۲ وظایف لایه انتشار گاز

۳-۲-۱ انتقال واکنش‌دهنده‌ها

لایه انتشار گاز گازهای واکنش‌دهنده را از کانال جریان به سمت لایه کاتالیست منتقل می‌کند. در کاتد، اکسیژن باید از لایه انتشار گاز عبور کرده و سپس وارد لایه کاتالیست شود.

۳-۲-۲مدیریت آب

آب تولیدشده در اثر واکنش کاهش اکسیژن باید از کاتد خارج شود. حذف ناکافی آب می‌تواند موجب آب‌گرفتگی شود، در حالی که حذف بیش از حد آب می‌تواند به خشک‌شدن غشا منجر شود.

۳-۲-۳ هدایت الکتریکی

ساختار کربنی لایه انتشار گاز مسیر هدایت الکترون بین لایه کاتالیست و جمع‌کننده جریان را فراهم می‌کند.

۳-۲-۴پشتیبانی مکانیکی

لایه انتشار گاز از لایه کاتالیست پشتیبانی کرده و در پایداری مکانیکی مجموعه الکترود-غشا نقش دارد.

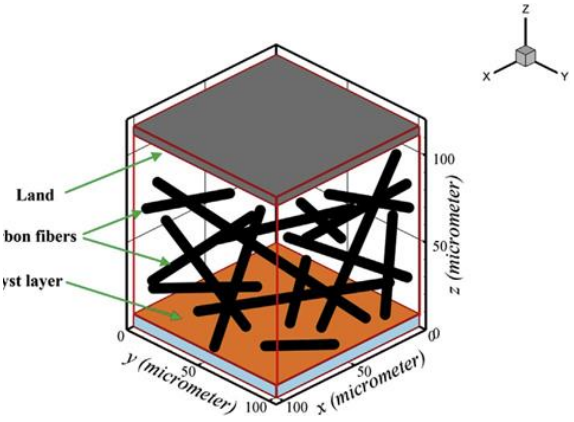
این وظایف ممکن است با یکدیگر در تضاد باشند. ازاین‌رو، لایه انتشار گاز بهینه باید هم‌زمان مقاومت انتقال پایین، توانایی مناسب برای حذف آب، هدایت الکتریکی مطلوب و استحکام مکانیکی کافی داشته باشد.

۴ فشرده‌سازی لایه انتشار گاز: سازوکارها و اثرات

۴-۱ منشأ فشرده‌سازی لایه انتشار گاز

فشرده‌سازی لایه انتشار گاز عمدتاً در اثر مونتاژ مجموعه الکترود-غشا و اعمال فشار ناشی از صفحات کانال جریان ایجاد می‌شود. فشرده‌سازی برای کاهش مقاومت تماس و جلوگیری از نشت ضروری است، اما موجب تغییر شکل ساختار متخلخل لایه انتشار گاز نیز می‌شود.

این تغییر شکل، هندسه و اتصال شبکه منافذ را تغییر داده و در نتیجه بر انتقال گاز، انتقال آب مایع و هدایت الکتریکی و حرارتی تأثیر می‌گذارد [۶, ۸, ۹].



شکل ۲ نمای شماتیک از دامنه محاسباتی پیل سوختی پلیمری [۱۵]

۴-۲ اثر بر تخلخل

افزایش فشرده‌سازی معمولاً باعث کاهش تخلخل لایه انتشار گاز می‌شود. این کاهش به دلیل حرکت الیاف جامد به داخل فضای منافذ و کاهش حجم فضای خالی رخ می‌دهد.

به‌صورت ساده می‌توان این فرآیند را چنین بیان کرد:

فشرده‌سازی ⟶ تغییر شکل منافذ ⟶ کاهش حجم فضای خالی ⟶ تغییر مسیرهای انتقال

شدت این اثر به ریزساختار اولیه و ویژگی‌های مکانیکی لایه انتشار گاز وابسته است.

۴-۳ اثر بر نفوذپذیری و انتقال گاز

شبکه منافذ لایه انتشار گاز مسیر اصلی انتقال اکسیژن به سمت لایه کاتالیست را تشکیل می‌دهد. فشرده‌سازی می‌تواند سطح مقطع و پیوستگی این مسیرها را کاهش داده و در نتیجه نفوذپذیری و ضریب نفوذ مؤثر را کاهش دهد.

Bao و همکاران اثر فشرده‌سازی بر خواص انتقالی لایه انتشار گاز را بررسی کرده و کاهش نفوذپذیری و نفوذپذیری مؤثر اکسیژن را با افزایش فشرده‌سازی گزارش کردند، در حالی که هدایت الکتریکی و حرارتی می‌تواند در اثر افزایش تماس میان فاز جامد بهبود یابد [۶].

این نتیجه نشان می‌دهد که فشرده‌سازی اثرات متقابل و رقابتی ایجاد می‌کند و نمی‌توان آن را صرفاً یک عامل منفی در نظر گرفت.

۴-۴ اثر بر مدیریت آب

مدیریت آب یکی دیگر از پیامدهای مهم فشرده‌سازی لایه انتشار گاز است.

فشرده‌سازی اندازه منافذ و اتصال آنها را تغییر داده و در نتیجه نیروهای موئینگی و مسیرهای انتقال آب مایع را تحت تأثیر قرار می‌دهد. فشرده‌سازی بیش از حد می‌تواند احتباس آب را افزایش داده و حذف آن را دشوار کند و در نتیجه احتمال آب‌گرفتگی در نزدیکی لایه کاتالیست را افزایش دهد.

مطالعات چندفازی مبتنی بر روش شبکه بولتزمن نشان داده‌اند که انتقال آب مایع به‌شدت تحت تأثیر ریزساختار محیط متخلخل قرار دارد و منافذ بزرگ می‌توانند به‌عنوان مسیرهای ترجیحی انتقال آب عمل کنند [۲۰-۲۲].

بنابراین، فشرده‌سازی باید نه‌تنها از دیدگاه انتقال گاز، بلکه از منظر انتقال آب مایع نیز ارزیابی شود.

۵ تحلیل فشرده‌سازی لایه انتشار گاز با استفاده از روش شبکه-بولتزمن

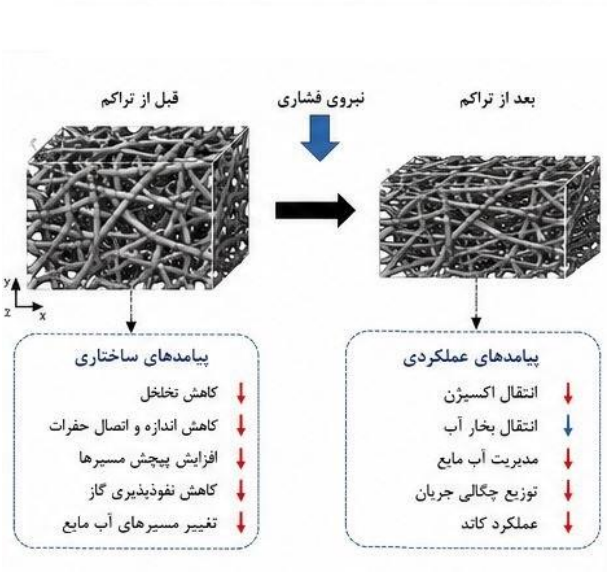
۵-۱ روش شبکه بولتزمن به‌عنوان یک روش مدل‌سازی در مقیاس حفره

روش شبکه-بولتزمن بر پایه تکامل توابع توزیع ذرات سیال بر روی یک شبکه گسسته است. برخلاف روش‌های پیوسته متداول که مستقیماً معادلات حاکم ماکروسکوپی را حل می‌کنند، روش شبکه بولتزمن از یک نمایش جنبشی استفاده می‌کند که از آن متغیرهای ماکروسکوپی مانند چگالی و تکانه قابل استخراج هستند.

مهم‌ترین مزایای روش شبکه بولتزمن برای مدل‌سازی الکترودهای پیل سوختی پلیمری عبارت‌اند از:

۱. امکان برخورد مستقیم با هندسه‌های پیچیده محیط‌های متخلخل؛
۲. قابلیت مدل‌سازی در مقیاس حفره؛
۳. امکان شبیه‌سازی انتقال چندفازی؛
۴. اعمال نسبتاً ساده شرایط مرزی جامد-سیال پیچیده؛
۵. قابلیت مناسب برای محاسبات موازی.

یک مطالعه مروری اختصاصی درباره کاربرد روش شبکه بولتزمن در پیل سوختی پلیمری، مطالعات پیشین را در سه گروه اصلی شامل شبیه‌سازی خواص انتقالی، رفتار قطرات و جریان واکنشی تقسیم‌بندی کرده و انتقال در لایه کاتالیست و لایه ریز متخلخل و جریان واکنشی چندفازی را از جمله چالش‌های مهم آینده معرفی کرده است [۳, ۲۳].



شکل ۳ مکانیسم اثر تراکم لایه انتشار گاز بر تخلخل، انتقال O_2 و آب

۵-۲ بازسازی ساختار لایه انتشار گاز فشرده‌شده

یکی از الزامات اصلی شبیه‌سازی در مقیاس حفره، ایجاد یک ریزساختار واقع‌گرایانه از الکترود است.

در مطالعه مولائی منش و ناظمیان، از یک روش بازسازی تصادفی ریزساختار برای نمایش لایه های انتشار گاز با قطرهای مختلف الیاف کربنی و سطوح مختلف فشرده‌سازی استفاده شد [۱۵].

در این مطالعه، ده حالت مختلف کاتد با استفاده از پنج سطح فشرده‌سازی و دو قطر الیاف بررسی شدند. سپس توزیع اکسیژن، بخار آب و چگالی جریان مورد ارزیابی قرار گرفت.

اهمیت این روش در آن است که فشرده‌سازی صرفاً به‌عنوان تغییر یک ضریب انتقال ماکروسکوپی در نظر گرفته نشده، بلکه تغییر شکل واقعی ساختار متخلخل مورد توجه قرار گرفته است.

۶ فشرده‌سازی لایه انتشار گاز و عملکرد کاتد: یافته‌های کلیدی

مطالعه روش شبکه بولتزمن انجام‌شده توسط مولائی منش و ناظمیان اطلاعات مهمی درباره ماهیت غیر یکنواخت اثر فشرده‌سازی ارائه می‌کند [۱۵].

برای قطر الیاف کربنی ۹ میکرومتر، افزایش فشرده‌سازی موجب کاهش چگالی جریان متوسط شد. در مقابل، برای قطر الیاف ۷ میکرومتر، اثر فشرده‌سازی غیر یکنواخت بوده و یک میزان بهینه فشرده‌سازی مشاهده شد.

این نتیجه اهمیت زیادی دارد، زیرا نشان می‌دهد فشرده‌سازی را نمی‌توان با یک قانون عمومی مانند «افزایش فشرده‌سازی همیشه موجب کاهش عملکرد می‌شود» توصیف کرد.

در عوض، اثر فشرده‌سازی به ریزساختار اولیه لایه انتشار گاز وابسته است.

این مطالعه همچنین نشان داد که فشرده‌سازی برای هر دو قطر الیاف باعث کاهش یکنواختی توزیع چگالی جریان می‌شود.

این یافته از دیدگاه عملی اهمیت دارد. حتی در شرایطی که عملکرد متوسط کاهش چشمگیری نداشته باشد، تغییرات ساختاری ناشی از فشرده‌سازی ممکن است ناهمگونی چگالی جریان را افزایش داده و موجب ایجاد نواحی موضعی با فعالیت واکنشی بالا یا پایین شود.

چنین ناهمگونی‌هایی می‌توانند بر دوام بلندمدت پیل نیز تأثیر بگذارند.

۷ لایه کاتالیست: ساختار و ریخت شناسی

۷-۱ نقش لایه کاتالیست

لایه کاتالیست ناحیه اصلی واکنش الکتروشیمیایی در پیل سوختی پلیمری است. این لایه شامل ذرات کاتالیست، پایه کربنی، یونومر و منافذ است.

ساختار لایه کاتالیست باید دسترسی هم‌زمان به موارد زیر را فراهم کند:

- اکسیژن؛
- پروتون؛
- الکترون؛
- محل‌های فعال کاتالیستی.

ازاین‌رو، لایه کاتالیست ذاتاً یک ساختار متخلخل چندجزئی و چندفازی است.

۷-۲ پارامترهای ریخت شناسی

۷-۲-۱ ساختار منافذ

اندازه، شکل و اتصال منافذ مسیرهای موجود برای انتقال اکسیژن و آب را تعیین می‌کنند.

۷-۲-۲ توزیع کاتالیست

توزیع فضایی ذرات کاتالیست، میزان دسترسی به محل‌های فعال را تعیین می‌کند.

۷-۲-۳ ساختار توده های تجمعی

ذرات کاتالیست و کربن معمولاً ساختارهای توده های تجمعی ایجاد می‌کنند. اندازه و شکل این توده های تجمعی هم سطح فعال و هم مقاومت انتقالی را تحت تأثیر قرار می‌دهد.

۷-۲-۴توزیع یونومر

یونومر مسیرهای هدایت پروتون را فراهم می‌کند و هم‌زمان بر انتقال اکسیژن به سطح کاتالیست نیز تأثیر می‌گذارد.

۷-۲-۵سطح فعال مؤثر

سطح فعال الکتروشیمیایی در دسترس، تعداد محل‌های فعال واکنش را که در شرایط کاری قابل استفاده هستند، تعیین می‌کند.

۸ اثر ریخت شناسی لایه کاتالیست بر عملکرد کاتد

۸-۱ ساختار منافذ

شبکه منافذ پیوسته و مناسب، انتقال اکسیژن و حذف آب را تسهیل می‌کند.

بااین‌حال، افزایش صرف تخلخل لزوماً موجب افزایش عملکرد نمی‌شود. تخلخل بیش از حد می‌تواند مقدار کاتالیست و سطح فعال را کاهش دهد.

بنابراین، لایه کاتالیست بهینه باید میان دو عامل زیر تعادل برقرار کند:

دسترسی مناسب برای انتقال جرم و سطح فعال الکتروشیمیایی کافی

۸-۲ توزیع کاتالیست

توزیع یکنواخت و قابل‌دسترسی کاتالیست می‌تواند محدودیت‌های انتقال موضعی را کاهش داده و بهره‌برداری از کاتالیست را افزایش دهد.

در مقابل، توزیع غیریکنواخت ممکن است موجب ایجاد نواحی با دسترسی ناکافی به واکنش‌دهنده یا محل‌های فعال غیرقابل‌دسترسی شود.

مطالعات مرورشده در مقاله اولیه لایه کاتالیست بر اهمیت توزیع کاتالیست در رفتار واکنش موضعی تأکید دارند [۱۰-۱۴, ۲۴].

۸-۳ ریخت شناسی توده های تجمعی

ریخت شناسی توده های تجمعی اهمیت ویژه‌ای دارد، زیرا اکسیژن باید از شبکه منافذ و فیلم یونومر عبور کرده و به محل‌های فعال برسد.

بنابراین، تغییر شکل توده های تجمعی می‌تواند سهم نسبی فرآیندهای زیر را تغییر دهد:

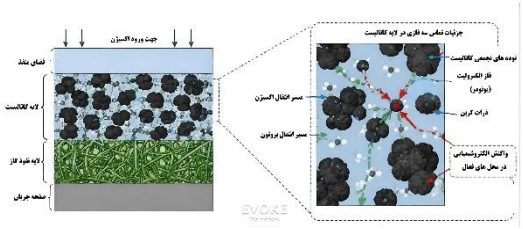
- انتقال اکسیژن در خارج از توده های تجمعی؛
- نفوذ اکسیژن در یونومر؛
- انتقال پروتون؛
- واکنش الکتروشیمیایی؛
- تولید و حذف آب.

۸-۴ انتقال اکسیژن

مقاومت انتقال اکسیژن در لایه کاتالیست زمانی افزایش می‌یابد که مسیرهای حفره‌ای پیچش زیادی داشته یا اتصال مناسبی نداشته باشند.

بنابراین، افزایش سطح کاتالیست لزوماً موجب بهبود عملکرد نمی‌شود، اگر سطح ایجادشده به دلیل محدودیت‌های انتقالی در دسترس نباشد.

این موضوع یکی از مهم‌ترین موازنه‌های موجود در طراحی لایه کاتالیست است.



شکل ۴ ارتباط یکپارچه کاتد- لایه کاتالیست – لایه انتشار گاز

۹ مدل‌سازی ریخت شناسی لایه کاتالیست با روش شبکه بولتزمن

۹-۱ مدل‌سازی توده های تجمعی با روش شبکه بولتزمن

مولائی منش و اکبری یک مدل توده های تجمعی دوبعدی مبتنی بر روش شبکه بولتزمن برای لایه کاتالیست کاتد توسعه دادند که انتقال اکسیژن و انحلال آن، نفوذ اکسیژن، انتقال پروتون، واکنش الکتروشیمیایی و انتقال آب را در نظر می‌گرفت [۲۵].

در ادامه، این مدل برای نمایش آرایش‌های واقع‌گرایانه‌تر توده های تجمعی توسعه داده شد.

این مطالعات قابلیت روش شبکه بولتزمن را در نمایش ساختارهای غیریکنواخت لایه کاتالیست و ارزیابی توزیع موضعی گونه‌ها و چگالی جریان نشان دادند.

۹-۲ لایه‌های کاتالیست سه‌بعدی بازسازی‌شده

مولائی منش و ناظمیان پنج ریخت شناسی متفاوت لایه کاتالیست را با استفاده از بازسازی تصادفی و یک مدل توده های تجمعی سه بعدی مبتنی بر روش شبکه بولتزمن بررسی کردند [۲۵].

توده های تجمعی به صورت ساختارهای بیضوی با میزان کشیدگی متفاوت در نظر گرفته شدند. با تغییر پارامتر کشیدگی، ریخت شناسی‌های مختلف لایه کاتالیست ایجاد شدند.

مدل شامل موارد زیر بود:

- انتقال اکسیژن در ناحیه حفره‌ای؛
- انحلال اکسیژن در فصل مشترک حفره/الکترولیت؛
- نفوذ اکسیژن از داخل فیلم الکترولیت؛
- انتقال پروتون؛
- واکنش الکتروشیمیایی؛
- تولید آب؛
- انتقال و تبخیر آب.

نتایج نشان دادند که توزیع اکسیژن و بخار آب در لایه کاتالیست غیریکنواخت بوده و تغییر میزان کشیدگی توده‌های تجمعی می‌تواند الگوی این توزیع‌ها را تغییر دهد.

مهم‌تر از همه، در میان ساختارهای بازسازی‌شده مورد بررسی، ساختاری که دارای بیشترین پارامتر کشیدگی توده‌های تجمعی بود، بالاترین چگالی جریان متوسط را نشان داد. این یافته نشان می‌دهد که در محدوده ساختارها و شرایط بررسی‌شده، افزایش کشیدگی توده‌های تجمعی می‌تواند با بهبود انتقال اکسیژن و افزایش بهره‌برداری الکتروشیمیایی همراه باشد؛ بااین‌حال، این نتیجه را نمی‌توان به‌عنوان یک رابطه عمومی یا قانون کلی برای تمامی ساختارهای لایه کاتالیست در نظر گرفت، زیرا عملکرد لایه کاتالیست به مجموعه‌ای از عوامل هندسی، انتقالی و واکنشی وابسته است [۱۶].

این نتیجه نشان می‌دهد که ریخت شناسی لایه کاتالیست می‌تواند تعادل میان سطح فعال الکتروشیمیایی و مقاومت انتقال جرم را به‌طور مستقیم تحت تأثیر قرار دهد.

۱۰ مقایسه فشرده‌سازی لایه انتشار گاز و ریخت شناسی لایه کاتالیست

دو موضوع مورد بررسی از یکدیگر متمایزند، اما هر دو از مسیرهای متفاوت بر عملکرد کاتد تأثیر می‌گذارند.

فشرده‌سازی لایه انتشار گاز عمدتاً محیط انتقال را تغییر می‌دهد، در حالی که ریخت شناسی لایه کاتالیست هم محیط انتقال و هم محیط واکنش را تغییر می‌دهد.

جدول ۱ مقایسه اثرات اصلی فشرده‌سازی لایه انتشار گاز و ریخت شناسی لایه کاتالیست

ریخت شناسی لایه کاتالیست	فشرده‌سازی لایه انتشار گاز	پارامتر
واکنش الکتروشیمیایی و انتقال موضعی	انتقال واکنش‌دهنده‌ها، حذف آب و پشتیبانی مکانیکی	نقش اصلی
اندازه منافذ، شکل توده های تجمعی، توزیع کاتالیست و یونومر	تخلخل، قطر الیاف، جهت‌گیری الیاف، اتصال منافذ	پارامترهای ساختاری اصلی
تغییر انتقال اکسیژن و حذف آب در نزدیکی محل‌های فعال	تغییر انتقال اکسیژن و آب در لایه انتشار گاز	اثر اصلی انتقالی
مستقیم و از طریق دسترسی به محل‌های فعال	غیرمستقیم و از طریق دسترسی به واکنش‌دهنده	اثر الکتروشیمیایی
سطح فعال در برابر مقاومت انتقال	تماس مکانیکی در برابر مقاومت انتقال	موازنه اصلی طراحی
لایه کاتالیست بازسازی‌شده با ریخت شناسی مختلف	لایه انتشار گاز الیافی فشرده‌شده	کاربرد مهم روش شبکه بولتزمن
چگالی جریان و توزیع واکنش موضعی	چگالی جریان متوسط و موضعی	شاخص اصلی عملکرد
بسیار مهم	بسیار مهم	نقش در مدیریت آب
بسیار زیاد	زیاد	حساسیت به ریزساختار
بسیار زیاد	زیاد	نیاز به بازسازی تجربی

۱۱ سازوکار یکپارچه انتقال در لایه کاتالیست – لایه انتشار گاز

مهم‌ترین نتیجه حاصل از ادغام این دو حوزه آن است که لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست نباید ساختارهایی مستقل از یکدیگر در نظر گرفته شوند.

اکسیژن باید از طریق لایه انتشار گاز عبور کرده و سپس وارد لایه کاتالیست شود:

کانال جریان ⟶ لایه کاتالیست → لایه انتشار گاز ⟶ محل‌های فعال کاتالیستی

هم‌زمان، آب تولیدشده در محل‌های فعال در جهت مخالف حرکت می‌کند:

محل‌های فعال ⟶ لایه انتشار گاز / لایه ریز متخلل → کاتالیست ⟶ کانال جریان

در نتیجه، مقاومت انتقالی لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست به‌صورت متوالی بر عملکرد کاتد اثر می‌گذارند.

اگر فشرده‌سازی لایه انتشار گاز ضریب نفوذ مؤثر اکسیژن را کاهش دهد، غلظت اکسیژن ورودی به لایه کاتالیست نیز کاهش خواهد یافت. این امر می‌تواند بهره‌برداری از کاتالیست را کاهش دهد، حتی اگر ریخت شناسی لایه کاتالیست بهینه باشد.

از سوی دیگر، یک لایه انتشار گاز بهینه نمی‌تواند محدودیت انتقال ناشی از یک لایه کاتالیست با پیچش زیاد و دسترسی ضعیف به محل‌های فعال را به‌طور کامل جبران کند.

بنابراین، عملکرد کلی کاتد را می‌توان به‌صورت مفهومی به شکل زیر بیان کرد:

عملکرد کاتد (ساختار لایه انتشار گاز ، فشرده‌سازی، ریخت شناسی لایه کاتالیست ، انتقال اکسیژن، مدیریت آب، سینتیک واکنش)

این ارتباط کوپل‌شده، مبنای علمی ادغام دو مقاله قبلی شما در یک مقاله مروری جامع را تشکیل می‌دهد.

۱۲ مرور جامع مطالعات منتخب

به‌منظور جمع‌بندی و مقایسه نظام‌مند مطالعات منتخب، پژوهش‌های مرتبط با مدل‌سازی ریزساختار الکترودهای کاتد و کاربرد روش شبکه بولتزمن در جدول ۲ دسته‌بندی شده‌اند. مطالعات مورد بررسی بر اساس جزء مورد مطالعه، موضوع اصلی، روش یا رویکرد مدل‌سازی، مهم‌ترین یافته و پیامد آن برای طراحی کاتد مقایسه شده‌اند. این دسته‌بندی امکان مقایسه مستقیم نقش فشرده‌سازی و ویژگی‌های ساختاری لایه انتشار گاز، ویژگی‌های ریزساختاری و ریخت‌شناسی لایه کاتالیست، و همچنین پدیده‌های انتقال آب و اکسیژن را فراهم می‌کند. همان‌طور که در جدول ۲ مشاهده می‌شود، اگرچه هر یک از مطالعات بر یک یا چند پارامتر مشخص تمرکز داشته‌اند، مجموعه نتایج بر اهمیت درنظرگرفتن همزمان ساختار، خواص انتقالی و فرایندهای واکنشی در طراحی کاتد تأکید دارد. این مقایسه همچنین نشان می‌دهد که فشرده‌سازی لایه انتشار گاز و ریخت‌شناسی لایه کاتالیست را نمی‌توان به‌صورت کاملاً مستقل از یکدیگر ارزیابی کرد و بررسی برهم‌کنش میان این نواحی، زمینه مناسبی برای چارچوب یکپارچه مورد بحث در این مقاله فراهم می‌کند.

جدول ۲ مقایسه جامع مطالعات منتخب مبتنی بر روش شبکه بولتزمن و مدل‌سازی ریزساختار الکترود

پیامد طراحی	یافته اصلی	روش/رویکرد	موضوع اصلی	جزء مورد مطالعه	مرجع
ریزساختار باید در طراحی لحاظ شود	ساختار لایه انتشار گاز بر نفوذ و عملکرد اثر قابل‌توجه دارد	مطالعه مروری	ویژگی‌های ساختاری	لایه انتشار گاز	مورگان و داتا [۱]
کیفیت بازسازی بر نتایج اثر دارد	بازسازی واقع‌گرایانه برای مدل‌سازی در مقیاس حفره مهم است	مطالعه مروری	بازسازی ریزساختار	لایه انتشار گاز/ لایه کاتالیست	شجاعی فر و همکاران [۵]
یک میزان بهینه عمومی وجود ندارد	اثر فشرده‌سازی به قطر الیاف و میزان فشرده‌سازی وابسته است	روش شبکه بولتزمن و بازسازی تصادفی	فشرده‌سازی	لایه انتشار گاز	مولائی منش و ناظمیان [۱۵]
فشرده‌سازی مقاومت انتقال را تغییر می‌دهد	فشرده‌سازی نفوذپذیری و نفوذ اکسیژن را کاهش می‌دهد	بازسازی و مدل‌سازی انتقال	خواص انتقالی تحت فشرده‌سازی	لایه انتشار گاز	بائو و همکاران [۶]
تغییر شکل ساختاری باید لحاظ شود	فشرده‌سازی خواص مؤثر لایه انتشار گاز را تغییر می‌دهد	بازسازی عددی	خواص مؤثر	لایه انتشار گاز	لی و همکاران [۸]
اعتبارسنجی تجربی ضروری است	فشرده‌سازی بر عملکرد کلی پیل سوختی پلیمری اثر دارد	بررسی تجربی و مروری	فشرده‌سازی مکانیکی	لایه انتشار گاز/ پیل سوختی پلیمری	بوزیان و همکاران [۹]
خواص مکانیکی متغیر طراحی هستند	تنش مکانیکی رفتار لایه انتشار گاز را تغییر می‌دهد	مطالعه مروری	تنش فشاری	لایه انتشار گاز	شی و همکاران [۲۶]
مدیریت آب با فشرده‌سازی کوپل است	فشرده‌سازی رفتار آب مایع را تغییر می‌دهد	روش شبکه بولتزمن	آب مایع در لایه انتشار گاز فشرده	لایه انتشار گاز	یان و همکاران [۲۷]
آب‌گریزی باید لحاظ شود	فشرده‌سازی و ترشوندگی بر انتقال آب اثر مشترک دارند	مدل‌سازی عددی	ترشوندگی و فشرده‌سازی	لایه انتشار گاز/ لایه ریزمتخلخل	ایرا و همکاران [۲۸]
مدل‌سازی چندفازی ضروری است	فشرده‌سازی پدیده‌های آب مایع را تغییر می‌دهد	مدل‌سازی عددی	آب مایع	لایه انتشار گاز/ لایه ریزمتخلخل	جواهرده و همکاران [۲۹]

پیامد طراحی	یافته اصلی	روش/رویکرد	موضوع اصلی	جزء مورد مطالعه	مرجع
ناهمگنی لایه کاتالیست اهمیت دارد	آرایش غیریکنواخت توده های تجمعی توزیع گونه‌ها را تغییر می‌دهد	روش شبکه بولتزمن	مدل‌سازی توده های تجمعی	لایه کاتالیست	مولائی منش و اکبری [۲۵]
ریخت شناسی بر عملکرد کاتد اثرگذار است	کشیدگی توده های تجمعی بر اکسیژن، آب و چگالی جریان اثر دارد	روش شبکه بولتزمن سه‌بعدی	ریخت شناسی	لایه کاتالیست	مولائی منش و همکاران [۱۶]
روش شبکه بولتزمن برای لایه کاتالیست واکنشی مناسب است	انتقال و واکنش اکسیژن در مقیاس حفره قابل شبیه‌سازی است	روش شبکه بولتزمن	نفوذ اکسیژن و واکنش	لایه کاتالیست	دنگ و همکاران [۳۰]
مدل همگن ممکن است اثرات موضعی را از دست بدهد	ساختار لایه کاتالیست از سازمان‌دهی پیچیده چندفازی ناشی می‌شود	مدل‌سازی محاسباتی	ریزساختار	لایه کاتالیست	مالک و همکاران [۳۱]
ریخت شناسی باید در پارامترهای مؤثر لحاظ شود	خواص انتقالی مؤثر بر عملکرد لایه کاتالیست اثر زیادی دارند	مدل‌سازی پیل سوختی پلیمری	نفوذپذیری مؤثر	لایه کاتالیست	شون و همکاران [۳۲]
هزینه نیز باید در طراحی لحاظ شود	ضخامت لایه کاتالیست یک موازنه عملکرد/هزینه ایجاد می‌کند	بهینه‌سازی عددی	ضخامت	لایه کاتالیست	ژیا و همکاران [۳۳]
توزیع کاتالیست و یونومر باید کنترل شود	توزیع غیریکنواخت بر عملکرد موضعی اثر دارد	مدل‌سازی عددی	توزیع Pt/یونومر	لایه کاتالیست	یانگ و همکاران [۱۲]
ساختار سه‌بعدی واقعی دقت را افزایش می‌دهد	ریزساختار واقعی لایه کاتالیست قابل بازسازی و تحلیل است	Nano-CT و مدل چندفیزیکی	بازسازی ریزساختار	لایه کاتالیست	ژان و همکاران [۳۴]
توزیع اندازه منافذ بر حذف آب اثر دارد	آب مایع از منافذ بزرگ‌تر به‌عنوان مسیر ترجیحی استفاده می‌کند	روش شبکه بولتزمن سه‌بعدی	آب مایع	لایه متخلخل	هان و همکاران [۲۱]
مدل‌سازی در مقیاس حفره مفید است	روش شبکه بولتزمن قادر به حل جریان در ساختارهای پیچیده است	روش شبکه بولتزمن	جریان در مقیاس میکرو	الکترود متخلخل	پارک و همکاران [۳۵]
مدیریت آب یک مسئله سیستمی است	انتقال آب بر رفتار پیل سوختی پلیمری اثر مهمی دارد	مدل‌سازی محاسباتی	انتقال آب	پیل سوختی پلیمری	آم و وانگ [۳۶]
مدل‌سازی چندمقیاسی آینده‌دار است	مقیاس‌های مختلف قابل اتصال هستند	کوپل روش حجم محدود– روش شبکه بولتزمن	مدل‌سازی چندمقیاسی	پیل سوختی پلیمری	چن و همکاران [۳۷]

۱۳ تحلیل مقایسه‌ای مطالعات مرورشده

۱۳-۱ مطالعات فشرده‌سازی لایه انتشار گاز

مطالعات بررسی‌شده درباره لایه انتشار گاز به‌طور کلی نشان می‌دهند که فشرده‌سازی ساختار متخلخل را تغییر می‌دهد.

بااین‌حال، پیامد این تغییرات برای عملکرد کلی در همه لایه های انتشار گاز یکسان نیست.

مهم‌ترین شواهد از مطالعه روش شبکه بولتزمن انجام‌شده توسط مولائی منش و ناظمیان [۱۵] به دست آمده است که در آن پاسخ لایه های انتشار گاز دارای قطرهای مختلف الیاف نسبت به فشرده‌سازی متفاوت بود.

برای قطر الیاف ۹ میکرومتر، فشرده‌سازی موجب کاهش چگالی جریان متوسط شد. برای قطر الیاف ۷ میکرومتر، پاسخ غیر یکنواخت بود و یک میزان بهینه فشرده‌سازی مشاهده شد.

بنابراین، نسبت فشرده‌سازی به‌تنهایی برای توصیف عملکرد لایه انتشار گاز کافی نیست و باید ریزساختار اولیه نیز در نظر گرفته شود.

این نتیجه با تحلیل خواص انتقالی بائو و همکاران [۶] نیز سازگار است که نشان دادند فشرده‌سازی باعث تغییر تخلخل، نفوذپذیری اکسیژن و سایر ویژگی‌های انتقالی می‌شود.

۱۳-۲ مطالعات ریخت شناسی لایه کاتالیست

مطالعات بررسی‌شده درباره لایه کاتالیست نشان می‌دهند که ریخت شناسی عمدتاً از طریق دو سازوکار مرتبط بر عملکرد تأثیر می‌گذارد:

۱. تغییر سطح فعال الکتروشیمیایی قابل‌دسترسی؛
۲. تغییر مقاومت انتقال جرم.

مطالعه روش شبکه بولتزمن توسط مولائی منش و همکاران [۱۶] اهمیت ویژه‌ای دارد، زیرا چندین ریخت شناسی سه‌بعدی را بازسازی کرده و توزیع اکسیژن، آب و چگالی جریان را بررسی کرده است.

ریخت شناسی دارای بیشترین پارامتر کشیدگی توده های تجمعی، بیشترین چگالی جریان متوسط را در میان حالت‌های مورد بررسی ایجاد کرد.

بااین‌حال، این نتیجه نباید به این معنا تفسیر شود که افزایش کشیدگی توده های تجمعی همیشه عملکرد پیل سوختی پلیمری را افزایش می‌دهد. بلکه نشان می‌دهد ریخت شناسی بهینه به تعادل میان سطح فعال و مقاومت انتقال بستگی دارد [۳۸].

۱۳-۳ نتیجه مشترک

مطالعات لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست در مجموع به یک اصل اساسی اشاره دارند:

ساختار متخلخل بهینه الزاماً ساختاری با بیشترین تخلخل یا بیشترین سطح فعال نیست، بلکه ساختاری است که بهترین تعادل میان انتقال جرم و فعالیت الکتروشیمیایی را فراهم کند.

این اصل باید مبنای طراحی و بهینه‌سازی آینده کاتد پیل سوختی پلیمری قرار گیرد.

۱۴ نقاط قوت و محدودیت‌های روش شبکه بولتزمن

۱۴-۱ نقاط قوت

روش شبکه بولتزمن مزایای مهمی برای مدل‌سازی الکترودهای پیل سوختی پلیمری دارد.

- **هندسه‌های پیچیده**

این روش برای ساختارهای حفره‌ای نامنظم و ریزساختارهای بازسازی‌شده الکترود بسیار مناسب است.

- **انتقال چندفازی**

روش شبکه بولتزمن می‌تواند برای سامانه‌های گاز-مایع مورد استفاده قرار گیرد و از این رو پتانسیل قابل‌توجهی برای مطالعات مدیریت آب دارد [۲۱, ۲۷]

- **تفکیک در مقیاس حفره**

روش شبکه بولتزمن امکان محاسبه توزیع موضعی اکسیژن، آب و چگالی جریان را فراهم می‌کند.

- **محاسبات موازی**

ساختار محلی این روش برای پیاده‌سازی موازی و حل مسائل با حجم محاسباتی بالا مناسب است.

۱۴-۲ محدودیت‌ها

با وجود مزایای فوق، محدودیت‌هایی نیز وجود دارد.

- **هزینه محاسباتی**

شبیه‌سازی‌های سه‌بعدی واکنشی و چندفازی می‌توانند از نظر محاسباتی بسیار پرهزینه باشند.

- **وابستگی به ریزساختار**

نتایج شبیه‌سازی به کیفیت هندسه بازسازی‌شده الکترود وابستگی زیادی دارند.

- **کوپل چندفیزیکی**

حل هم‌زمان تغییر شکل مکانیکی، انتقال چندفازی، انتقال حرارت، انتقال پروتون و واکنش الکتروشیمیایی همچنان چالش‌برانگیز است.

- **محدودیت مقیاس**

مدل در مقیاس حفره ممکن است تنها حجم کوچکی از الکترود را پوشش دهد و برای پیش‌بینی عملکرد کل سلول به کوپل با مدل‌های مقیاس پیوسته نیاز داشته باشد.

۱۵ اعتبارسنجی تجربی

اعتبارسنجی تجربی برای تعیین قابلیت اعتماد مدل‌های مقیاس حفره ضروری است.

برای لایه انتشار گاز، اندازه‌گیری‌های زیر می‌توانند برای اعتبارسنجی مورد استفاده قرار گیرند:

- تخلخل؛
- ضخامت؛
- نفوذپذیری؛
- ضریب نفوذ مؤثر؛
- هدایت الکتریکی؛
- هدایت حرارتی؛
- ترشوندگی؛
- رفتار تحت فشرده‌سازی.

برای لایه کاتالیست نیز اندازه‌گیری پارامترهای زیر اهمیت دارد:

- بارگذاری کاتالیست؛
- توزیع کاتالیست؛
- توزیع اندازه منافذ؛
- ضخامت لایه؛
- سطح فعال الکتروشیمیایی؛
- توزیع یونومر؛
- رفتار قطبش.

روش‌های تصویربرداری پیشرفته مانند توموگرافی کامپیوتری با اشعه ایکس و نانوتوموگرافی می‌توانند امکان بازسازی ساختارهای سه‌بعدی واقعی الکترود را فراهم کنند.

مطالعه ژان و همکاران امکان بازسازی ریزساختار واقعی لایه کاتالیست با استفاده از Nano-CT و سپس اعمال مدل چندفیزیکی برای تحلیل انتقال حرارت و جرم و واکنش‌های الکتروشیمیایی را نشان داده است [۳۴].

این نوع یکپارچه‌سازی میان آزمایش و مدل‌سازی عددی، یکی از مهم‌ترین مسیرهای آینده در توسعه مدل‌های روش شبکه بولتزمن محسوب می‌شود.

۱۶ خلأهای پژوهشی

۱۶-۱ بررسی مستقل لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست

بیشتر مطالعات بر رفتار لایه انتشار گاز یا لایه کاتالیست تمرکز دارند. کوپل مستقیم میان فشرده‌سازی لایه انتشار گاز و ریخت شناسی لایه کاتالیست هنوز به‌اندازه کافی بررسی نشده است.

۱۶-۲ کمبود ریزساختارهای کوپل‌شده واقعی

بسیاری از شبیه‌سازی‌ها از ساختارهای بازسازی‌شده یا ایده‌آل‌شده برای هر لایه به‌صورت جداگانه استفاده می‌کنند. مدل‌های آینده باید لایه انتشار گاز، لایه ریز متخلخل و لایه کاتالیست را به‌صورت هم‌زمان و یکپارچه بازسازی کنند.

۱۶-۳ محدودیت شبیه‌سازی‌های واکنشی چندفازی

مدل‌سازی هم‌زمان اکسیژن، نیتروژن، بخار آب، آب مایع، انتقال پروتون و واکنش الکتروشیمیایی همچنان از نظر محاسباتی چالش‌برانگیز است.

۱۶-۴ محدودیت در کوپل مکانیکی-الکتروشیمیایی

فشرده‌سازی موجب تغییر ریخت شناسی لایه انتشار گاز می‌شود، اما اثرات بعدی آن بر انتقال در لایه کاتالیست و واکنش الکتروشیمیایی به‌ندرت در یک چارچوب یکپارچه لحاظ شده‌اند.

۱۶-۵ محدودیت مطالعات بلندمدت

بیشتر شبیه‌سازی‌های مقیاس حفره عملکرد پایا یا بازه‌های زمانی کوتاه را بررسی می‌کنند. مدل‌سازی تخریب بلندمدت و تغییرات برگشت‌ناپذیر ریزساختار به مطالعات بیشتری نیاز دارد.

۱۷ ملاحظات عملی و صنعتی در طراحی و بهینه‌سازی کاتد پیل‌های سوختی پلیمری

اگرچه مطالعات ریزمقیاس و شبیه‌سازی‌های مبتنی بر روش شبکه بولتزمن امکان بررسی دقیق ارتباط میان ریزساختار، انتقال جرم، مدیریت آب و واکنش‌های الکتروشیمیایی در کاتد پیل‌های سوختی پلیمری را فراهم می‌کنند، انتقال نتایج حاصل از این مطالعات به یک ساختار قابل تولید و پایدار در مقیاس صنعتی با چالش‌های متعددی همراه است. در کاربرد عملی، انتخاب ساختار لایه انتشار گاز، لایه ریزمتخلخل و لایه کاتالیست نمی‌تواند صرفاً بر اساس بیشینه‌سازی چگالی جریان یا کاهش مقاومت انتقال جرم انجام شود؛ بلکه هزینه مواد، قابلیت فرآیندپذیری، تکرارپذیری تولید، استحکام مکانیکی، دوام شیمیایی و مکانیکی و پایداری عملکرد در شرایط کاری متغیر نیز باید به‌صورت همزمان مورد توجه قرار گیرند. از این منظر، یک ساختار ریزمقیاس زمانی از دیدگاه صنعتی مطلوب است که علاوه بر ارائه عملکرد

الکتروشیمیایی مناسب، قابلیت تولید انبوه و حفظ عملکرد در طول عمر عملیاتی را نیز داشته باشد.

۱۷-۱ هزینه مواد و بهره‌برداری از کاتالیست

یکی از مهم‌ترین ملاحظات اقتصادی در توسعه کاتدهای پیل سوختی پلیمری، هزینه مواد فعال و به‌ویژه کاتالیست‌های پایه پلاتین است. پلاتین علاوه بر هزینه بالا، در طول کارکرد پیل مستعد تخریب، انحلال، رشد ذرات، مهاجرت و تجمع مجدد است که می‌تواند موجب کاهش سطح فعال الکتروشیمیایی و افت عملکرد شود [۳۹, ۴۰]. ازاین‌رو، افزایش مقدار کاتالیست لزوماً راهکار مناسبی برای افزایش عملکرد نیست. رویکرد مطلوب، افزایش بهره‌برداری از مقدار محدود پلاتین از طریق کنترل اندازه و توزیع ذرات، ساختار منافذ، ضخامت لایه کاتالیست، توزیع یونومر و دسترسی واکنش‌دهنده‌ها به محل‌های فعال است [۴۱].

از سوی دیگر، افزایش پیچیدگی ساختاری لایه انتشار گاز یا لایه کاتالیست ممکن است عملکرد انتقالی را بهبود دهد، اما هزینه ساخت و کنترل کیفیت را افزایش دهد. بنابراین، طراحی صنعتی باید به‌جای جست‌وجوی یک ساختار کاملاً ایده‌آل، محدوده‌ای از ساختارهای قابل تولید را شناسایی کند که در آن نسبت عملکرد به هزینه مطلوب باشد. به بیان دیگر، ساختاری که تنها در مقیاس شبیه‌سازی بهترین عملکرد را دارد، لزوماً بهترین گزینه برای تولید صنعتی نیست.

۱۷-۲ فرآیندپذیری و قابلیت تولید انبوه

یکی از تفاوت‌های اساسی میان شبیه‌سازی ریزمقیاس و ساخت واقعی، میزان کنترل‌پذیری پارامترهای ساختاری است. در مدل‌سازی به روش شبکه بولتزمن می‌توان پارامترهایی مانند قطر الیاف، تخلخل، اندازه منافذ، ضخامت لایه و آرایش اجزای لایه کاتالیست را به‌صورت مستقل تغییر داد؛ در حالی که در فرآیند واقعی ساخت، این پارامترها به یکدیگر وابسته‌اند. برای مثال، تغییر میزان یونومر یا بارگذاری کاتالیست می‌تواند همزمان ضخامت لایه کاتالیست، تخلخل، مسیرهای انتقال اکسیژن و انتقال پروتون را تغییر دهد.

در مورد لایه انتشار گاز نیز پارامترهایی مانند قطر و توزیع الیاف، تخلخل، مقدار ماده آب‌گریز، ضخامت و ساختار لایه ریزمتخلخل باید در محدوده‌ای کنترل شوند که امکان تولید یکنواخت و تکرارپذیر آن‌ها وجود داشته باشد. مطالعات جدید نشان داده‌اند که حتی تفاوت‌های ناشی از فرآیند ساخت می‌تواند ریزساختار و خواص انتقالی لایه انتشار گاز را تغییر دهد. بنابراین، ساختاری که در شبیه‌سازی دارای عملکرد بهینه است، تنها زمانی برای تولید صنعتی مناسب خواهد بود که بتوان آن را با تلرانس مشخص و در تعداد زیادی از سلول‌ها بازتولید کرد [۲۰].

۱۷-۳فشرده‌سازی لایه انتشار گاز در شرایط واقعی مونتاژ

فشرده‌سازی لایه انتشار گاز نمونه مهمی از تفاوت میان شرایط ایده‌آل مدل‌سازی و شرایط واقعی عملکرد پیل است. در مدل‌های عددی، میزان فشردگی معمولاً به‌صورت یک پارامتر کنترل‌شده اعمال می‌شود، در حالی که در سامانه واقعی، فشردگی تحت تأثیر نیروی مونتاژ، طراحی صفحات دوقطبی، هندسه کانال‌های جریان، ضخامت اجزای مجموعه الکترود غشایی و توزیع فشار قرار دارد. در نتیجه، میزان فشردگی در تمام نواحی لایه انتشار گاز الزاماً یکنواخت نیست. مطالعات جدید نیز نشان داده‌اند که فشردگی ناشی از هندسه کانال و ناحیه زیر دنده می‌تواند موجب تغییرات موضعی ریزساختار و خواص انتقالی شود.

فشرده‌سازی می‌تواند از یک سو تماس مکانیکی میان اجزای مجموعه الکترود غشایی را بهبود داده و مقاومت تماس را کاهش دهد، اما از سوی دیگر با کاهش تخلخل و تغییر ساختار منافذ، نفوذپذیری و انتقال اکسیژن و آب را محدود کند. مطالعه

چندمقیاسی چن و همکارانش نشان داد که افزایش فشردگی موجب افزایش مقاومت انتقال جرم در لایه انتشار گاز می‌شود، در حالی که همزمان می‌تواند رسانایی الکتریکی را افزایش دهد؛ بنابراین، میان مقاومت انتقال جرم و مقاومت اهمی یک موازنه وجود دارد [۲۲].

ازاین‌رو، مقدار بهینه فشردگی را نمی‌توان به‌عنوان یک مقدار عمومی برای تمام انواع لایه انتشار گاز در نظر گرفت. این مقدار به ریزساختار، قطر الیاف، خواص مکانیکی، وجود لایه ریزمتخلخل و شرایط عملیاتی وابسته است. این نتیجه با هدف اصلی مقاله حاضر نیز همخوانی دارد که نشان می‌دهد اثر فشرده‌سازی باید در ارتباط با ویژگی‌های ریزساختاری لایه انتشار گاز ارزیابی شود.

۱۷-۴ نقش رابط لایه انتشار گاز و لایه ریزمتخلخل

در شرایط واقعی، لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست دو محیط کاملاً مستقل نیستند و لایه ریزمتخلخل نقش یک ناحیه واسط مهم را ایفا می‌کند. این لایه می‌تواند مسیر انتقال اکسیژن و آب را تغییر داده و شرایط انتقالی مؤثر در مجاورت لایه کاتالیست را تعیین کند. در واقع، نفوذ لایه ریزمتخلخل در ساختار لایه انتشار گاز و تغییرات ناشی از فشرده‌سازی می‌تواند خواص انتقالی ناحیه واسط را تغییر دهد. مطالعه ژانک و همکارانش با استفاده از بازسازی سه‌بعدی ساختار و روش شبکه بولتزمن نشان داد که فشرده‌سازی ناحیه واسط لایه انتشار گاز و لایه ریزمتخلخل موجب کاهش تخلخل و اندازه منافذ و در نتیجه کاهش نفوذ گاز و نفوذپذیری آب می‌شود [۲۰].

این یافته از دیدگاه صنعتی اهمیت زیادی دارد؛ زیرا نشان می‌دهد طراحی لایه انتشار گاز، لایه ریزمتخلخل و لایه کاتالیست نباید به‌صورت کاملاً مستقل انجام شود. بنابراین، بهینه‌سازی هر لایه به‌صورت جداگانه ممکن است به ساختاری منجر شود که در شرایط واقعی مونتاژ و بهره‌برداری عملکرد مورد انتظار را نداشته باشد.

۱۷-۵ مدیریت آب و پایداری عملکرد

در کاربرد صنعتی، عملکرد کاتد باید در محدوده گسترده‌ای از چگالی جریان، دما، فشار و رطوبت نسبی حفظ شود. ساختاری که در یک نقطه کاری بیشترین چگالی جریان را ایجاد می‌کند، الزاماً در شرایط دیگر بهترین عملکرد را ندارد. به‌ویژه در چگالی‌های جریان بالا، تولید آب افزایش یافته و احتمال تجمع آب و انسداد مسیرهای انتقال اکسیژن بیشتر می‌شود. ازاین‌رو، ویژگی‌های تخلخل، اندازه منافذ، ترشوندگی و اتصال‌پذیری منافذ باید به‌گونه‌ای انتخاب شوند که میان انتقال گاز و تخلیه آب تعادل برقرار شود.

مطالعات مبتنی بر روش شبکه بولتزمن چندفازی نیز نشان داده‌اند که پارامترهایی مانند تخلخل، قطر الیاف، زاویه تماس و هندسه لایه انتشار گاز می‌توانند رفتار انتقال و تخلیه آب را به‌طور قابل‌توجهی تغییر دهند [۴۲]. همچنین مطالعات جدید درباره طراحی ساختار لایه انتشار گاز نشان می‌دهند که مهندسی هندسه و توزیع منافذ می‌تواند مسیرهای انتقال آب را تغییر دهد. بنابراین، هدف طراحی صنعتی نباید صرفاً بیشینه‌سازی نفوذپذیری گاز باشد، بلکه باید انتقال همزمان گاز و آب و پایداری عملکرد در شرایط بارگذاری مختلف را در نظر بگیرد.

۱۷-۶ دوام مکانیکی و شیمیایی

دوام یکی از مهم‌ترین عوامل تعیین‌کننده قابلیت تجاری‌سازی پیل‌های سوختی پلیمری است. لایه انتشار گاز در طول عمر پیل تحت بار مکانیکی مونتاژ، تغییرات فشار، چرخه‌های دما و رطوبت و تنش‌های ناشی از عملکرد قرار دارد. این عوامل می‌توانند موجب تغییر شکل ساختار، تغییر اتصال منافذ و تغییر خواص انتقالی شوند. نتایج جدید حاصل از مشخصه‌یابی لایه‌های انتشار گاز تحت بار فشاری نشان می‌دهد که خواص مکانیکی و انتقالی این لایه‌ها به میزان فشردگی وابسته‌اند و این وابستگی باید در طراحی و شبیه‌سازی سامانه لحاظ شود [۴۳].

در لایه کاتالیست نیز تخریب پلاتین، خوردگی پایه کربنی، رشد و تجمع ذرات و تخریب یونومر می‌تواند ساختار اولیه را در طول زمان تغییر دهد. این تغییرات موجب کاهش سطح فعال الکتروشیمیایی، افزایش مقاومت انتقال جرم و در نهایت افت عملکرد می‌شوند [۳۹, ۴۰]. ازاین‌رو، ساختاری که صرفاً در ابتدای عمر پیل بهینه باشد، لزوماً ساختار بهینه برای کل دوره بهره‌برداری نیست. در طراحی آینده، مفهوم «بهینه‌سازی برای دوام» باید در کنار «بهینه‌سازی برای عملکرد اولیه» مورد توجه قرار گیرد.

۱۷-۷ تکرارپذیری و کنترل کیفیت

در تولید صنعتی، دستیابی به یک نمونه با عملکرد بالا کافی نیست؛ بلکه ساختار مطلوب باید در تعداد زیادی از سلول‌ها با تغییرات محدود قابل تکرار باشد. تغییرات کوچک در ضخامت لایه کاتالیست، بارگذاری پلاتین، مقدار یونومر، تخلخل لایه انتشار گاز یا میزان فشردگی می‌تواند به تغییرات محسوس عملکرد منجر شود. بنابراین، توسعه روش‌های دقیق مشخصه‌یابی و کنترل کیفیت برای ارتباط دادن ساختار واقعی با ساختار هدف ضروری است.

در این زمینه، تصویربرداری سه‌بعدی، توموگرافی پرتو ایکس، میکروسکوپی، اندازه‌گیری نفوذپذیری و مشخصه‌یابی مکانیکی می‌توانند برای بررسی ساختار واقعی و ارزیابی یکنواختی تولید مورد استفاده قرار گیرند. استفاده از چنین روش‌هایی همچنین امکان مقایسه مستقیم میان ساختارهای بازسازی‌شده در مدل‌های عددی و نمونه‌های واقعی را فراهم می‌کند.

۱۷-۸ محدودیت انتقال نتایج روش شبکه بولتزمن به کاربرد صنعتی

روش شبکه بولتزمن مزیت مهمی در بررسی انتقال جرم و جریان در مقیاس منفذ دارد، اما بسیاری از مدل‌های موجود با ساده‌سازی‌هایی در هندسه، خواص مواد، شرایط مرزی و واکنش‌های الکتروشیمیایی همراه هستند. بازنمایی دقیق ساختار سه‌بعدی واقعی لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست، توزیع یونومر، شکل توده‌های تجمعی، ناهمگنی خواص مکانیکی و تکامل ریزساختار در طول زمان، از جمله چالش‌های اصلی هستند.

یکی از مسیرهای مهم توسعه این روش، استفاده از ریزساختارهای واقعی بازسازی‌شده و کوپل کردن مدل‌های انتقالی با مدل‌های مکانیکی و واکنشی است. مطالعات جدید نیز به سمت استفاده همزمان از بازسازی سه‌بعدی، تحلیل تغییر شکل مکانیکی و شبیه‌سازی در مقیاس منفذ حرکت کرده‌اند. مرورهای جدید نیز بر توسعه مدل‌های پیشرفته‌تر برای بازنمایی بهتر انتقال گاز و آب در ساختار واقعی لایه انتشار گاز تأکید دارند [۲۳].

بنابراین، نتایج حاصل از روش شبکه بولتزمن باید بیشتر به‌عنوان ابزاری برای شناسایی روابط بنیادی میان ریزساختار و عملکرد و تعیین روندهای طراحی در نظر گرفته شوند، نه به‌عنوان جایگزینی کامل برای آزمون‌های تجربی و ارزیابی‌های صنعتی. افزایش قابلیت پیش‌بینی مدل‌ها مستلزم استفاده از ریزساختارهای واقعی، خواص وابسته به شرایط عملیاتی، مدل‌های چندفیزیکی و اعتبارسنجی با داده‌های تجربی در مقیاس‌های مختلف است [۲۴].

۱۷-۹ چشم‌انداز طراحی صنعتی

بر اساس مطالعات بررسی‌شده، مسیر انتقال یافته‌های ریزمقیاس به کاربرد صنعتی را می‌توان به‌صورت یک فرآیند چندمرحله‌ای تعریف کرد. ابتدا ساختارهای مطلوب لایه انتشار گاز، لایه ریزمتخلخل و لایه کاتالیست با استفاده از مدل‌سازی ریزمقیاس شناسایی می‌شوند؛ سپس پارامترهای حساس از نظر عملکرد، هزینه و دوام تعیین می‌گردند. در مرحله بعد، این پارامترها باید به متغیرهای قابل‌کنترل فرآیند تولید تبدیل شوند و در نهایت ساختار تولیدشده با استفاده از مشخصه‌یابی تجربی، آزمون عملکرد و آزمون‌های دوام اعتبارسنجی شود.

از این منظر، معیار نهایی طراحی کاتد نباید صرفاً بیشینه‌سازی چگالی جریان باشد، بلکه باید یک مسئله بهینه‌سازی چندمعیاره

شامل عملکرد الکتروشیمیایی، انتقال اکسیژن، مدیریت آب، مصرف کاتالیست، هزینه تولید، قابلیت ساخت، دوام مکانیکی و شیمیایی و پایداری بلندمدت در نظر گرفته شود. چنین رویکردی می‌تواند فاصله میان نتایج مدل‌سازی ریزمقیاس و نیازهای واقعی صنعت را کاهش داده و زمینه را برای توسعه کاتدهایی فراهم کند که علاوه بر عملکرد اولیه مناسب، قابلیت تولید انبوه، هزینه قابل‌قبول و عملکرد پایدار در طول عمر عملیاتی را نیز داشته باشند.

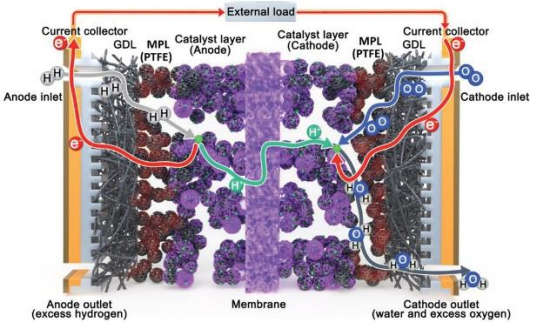
۱۸ مسیرهای آینده پژوهش

۱۸-۱ شبیه‌سازی کوپل‌شده لایه کاتالیست – لایه انتشار گاز با روش شبکه بولتزمن

نسل بعدی مدل‌ها باید لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست را در یک دامنه محاسباتی واحد در نظر بگیرند.

چنین مدلی باید امکان انتقال پیوسته اکسیژن از کانال جریان، از طریق لایه انتشار گاز و سپس داخل لایه کاتالیست را فراهم کند و هم‌زمان حذف آب را نیز دنبال نماید.

با توجه به نتایج مطالعات بررسی‌شده و به منظور تبیین ارتباط متقابل میان ساختار، فرایندهای انتقالی و واکنش الکتروشیمیایی، یک چارچوب یکپارچه برای طراحی و بهینه‌سازی کاتد پیل سوختی پلیمری پیشنهاد می‌شود. در این چارچوب، ویژگی‌های ریزساختاری لایه انتشار گاز، لایه ریزمتخلخل و لایه کاتالیست به‌صورت مجزا و مستقل در نظر گرفته نشده‌اند، بلکه اثر متقابل آن‌ها بر انتقال اکسیژن و آب، واکنش کاهش اکسیژن و در نهایت عملکرد کاتد مورد توجه قرار گرفته است. شکل ۵ نمایی مفهومی از این چارچوب و مسیر پیشنهادی از ریزساختار تا عملکرد و بهینه‌سازی ارائه می‌دهد.



شکل ۵ ارتباط یکپارچه چارچوب یکپارچه پیشنهادی برای طراحی و بهینه‌سازی کاتد پیل سوختی پلیمری بر اساس برهم‌کنش لایه انتشار گاز، لایه ریز متخلخل و لایه کاتالیست، فرایندهای انتقالی و واکنش الکتروشیمیایی [۴۴].

۱۸-۲ بازسازی سه‌بعدی واقعی

شبیه‌سازی‌های آینده باید تا حد امکان از ریزساختارهای سه‌بعدی بازسازی‌شده از داده‌های تجربی استفاده کنند.

این کار عدم‌قطعیت ناشی از هندسه‌های ایده‌آل‌شده منافذ را کاهش می‌دهد.

۱۸-۳ کوپل روش شبکه بولتزمن و تحلیل اجزای محدود

ترکیب روش شبکه بولتزمن با تحلیل اجزای محدود می‌تواند امکان بررسی هم‌زمان تغییر شکل مکانیکی و انتقال جرم را فراهم کند.

در این چارچوب، تحلیل اجزای محدود می‌تواند تغییر شکل لایه انتشار گاز تحت فشرده‌سازی را محاسبه کند و سپس روش شبکه بولتزمن خواص انتقال گاز و مایع را در ساختار تغییرشکل‌یافته ارزیابی نماید.

۱۸-۴ چندفازی و واکنشی

یک چارچوب جامع روش شبکه بولتزمن چندفازی و واکنشی باید به‌صورت هم‌زمان موارد زیر را شبیه‌سازی کند:

- انتقال اکسیژن؛
- انتقال بخار آب؛
- انتقال آب مایع؛
- انتقال پروتون؛
- واکنش الکتروشیمیایی.

چنین چارچوبی می‌تواند توصیف واقع‌گرایانه‌تری از رفتار کاتد در چگالی جریان بالا ارائه کند.

۱۸-۵ مدل‌سازی چندمقیاسی

مقیاس حفره و مقیاس سلول باید از طریق خواص انتقالی مؤثر یا روش‌های مستقیم کوپل مقیاسی به یکدیگر متصل شوند.

رویکردهای کوپل روش حجم محدود- روش شبکه بولتزمن که در مطالعات پیشین ارائه شده‌اند، مبنای مناسبی برای توسعه چنین مدل‌های چندمقیاسی محسوب می‌شوند [۳۷].

۱۸-۶ بهینه‌سازی با کمک یادگیری ماشین

یادگیری ماشین می‌تواند برای شناسایی روابط میان شاخص‌های ریزساختاری و عملکرد کاتد مورد استفاده قرار گیرد.

یک چارچوب آینده می‌تواند شامل مراحل زیر باشد:

ریزساختار سه‌بعدی ⟶ شبیه‌سازی روش شبکه بولتزمن ⟶ ایجاد پایگاه داده ⟶ یادگیری ماشین ⟶ بهینه‌سازی ساختار لایه کاتالیست-لایه انتشار گاز

این رویکرد می‌تواند هزینه محاسباتی ارزیابی هزاران ساختار احتمالی الکترود را به میزان قابل‌توجهی کاهش دهد.

۱۹ راهبرد پیشنهادی برای طراحی کاتدهای پیل سوختی پلیمری

بر اساس نتایج مطالعات مرورشده، طراحی منطقی کاتد باید مراحل زیر را در بر گیرد.

- **مرحله اول: بهینه‌سازی رفتار مکانیکی لایه انتشار گاز**

لایه انتشار گاز باید ضمن حفظ یکپارچگی ساختاری کافی در شرایط فشرده‌سازی، مسیرهای انتقال مناسب را نیز حفظ کند.

- **مرحله دوم: کنترل ساختار منافذ لایه انتشار گاز**

تخلخل و اتصال منافذ باید به‌گونه‌ای انتخاب شوند که میان نفوذ اکسیژن و حذف آب تعادل برقرار شود.

- **مرحله سوم: بهینه‌سازی فصل مشترک لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست**

ناحیه انتقال میان دو لایه نباید موجب ایجاد محدودیت ناگهانی در انتقال جرم شود.

- **مرحله چهارم: بهینه‌سازی ریخت شناسی لایه کاتالیست**

توزیع کاتالیست، ساختار منافذ، شکل توده های تجمعی و توزیع یونومر باید به‌گونه‌ای انتخاب شوند که سطح فعال در دسترس افزایش یافته و مقاومت انتقالی بیش از حد ایجاد نشود.

- **مرحله پنجم: ارزیابی عملکرد کوپل‌شده**

ساختار نهایی باید تحت شرایط انتقال هم‌زمان اکسیژن، تولید آب و واکنش الکتروشیمیایی ارزیابی شود.

این راهبرد یکپارچه از نظر فیزیکی منطقی‌تر از بهینه‌سازی مستقل لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست است.

۲۰ بحث و تحلیل انتقادی نتایج

اگرچه مطالعات مبتنی بر روش شبکه بولتزمن امکان بررسی مستقیم ارتباط میان ریزساختار و عملکرد کاتد پیل سوختی پلیمری را فراهم کرده‌اند، تفسیر نتایج این مطالعات نیازمند توجه همزمان به رفتار مکانیکی محیط متخلخل، تغییرات مسیرهای انتقال و محدودیت‌های مدل‌سازی است. در این بخش، دو مسئله مهم شامل پاسخ غیرمونوتونیک لایه انتشار گاز با قطر الیاف ۷ میکرومتر به فشرده‌سازی و قابلیت روش شبکه بولتزمن در شبیه‌سازی همزمان انتقال و واکنش به‌صورت انتقادی بررسی می‌شوند.

۲۰-۱ تفسیر فیزیکی پاسخ غیرمونوتونیک لایه انتشار گاز با قطر الیاف ۷ میکرومتر

یکی از یافته‌های قابل توجه در مطالعات بررسی‌شده، تفاوت پاسخ لایه انتشار گاز با قطر الیاف ۷ و ۹ میکرومتر به فشرده‌سازی است. در مطالعه مبتنی بر روش شبکه بولتزمن، پنج سطح فشردگی برای هر دو ساختار مورد بررسی قرار گرفت و مشخص شد که برای الیاف ۹ میکرومتر، افزایش فشردگی به کاهش چگالی جریان متوسط منجر می‌شود، در حالی که برای الیاف ۷ میکرومتر، اثر فشردگی غیرمونوتونیک بوده و یک میزان فشردگی بهینه مشاهده شده است [۱۵]. بنابراین، این رفتار را نمی‌توان صرفاً به «افزایش یا کاهش تخلخل» نسبت داد، بلکه باید آن را حاصل رقابت چند سازوکار همزمان دانست.

از دیدگاه مکانیکی، کاهش قطر الیاف باعث تغییر نسبت ابعاد و نحوه تماس الیاف در شبکه متخلخل می‌شود. در یک ساختار فیبری، اعمال فشار خارجی ابتدا می‌تواند موجب جابه‌جایی، چرخش و افزایش نقاط تماس میان الیاف شود و سپس با افزایش فشار، تغییر شکل موضعی و بسته‌شدن برخی منافذ رخ دهد. از آنجا که لایه انتشار گاز یک محیط کاملاً همگن نیست، این تغییر شکل در تمام نقاط به یک اندازه اتفاق نمی‌افتد و به آرایش اولیه الیاف، جهت‌گیری آن‌ها، تعداد نقاط تماس و اندازه منافذ وابسته است. مطالعات مکانیکی و عددی نیز نشان داده‌اند که در طول فشرده‌سازی، تعداد تماس‌های میان الیاف و ساختار فضای متخلخل تغییر می‌کند و این تغییرات مستقیماً با خواص انتقالی لایه انتشار گاز مرتبط هستند [۴۵, ۴۶].

برای ساختار دارای الیاف ۷ میکرومتر، تعداد بیشتر الیاف در یک حجم مشخص، در مقایسه با ساختاری دارای الیاف ضخیم‌تر و تخلخل مشابه، می‌تواند شبکه‌ای با تعداد بیشتر نقاط تماس و مسیرهای انتقالی ایجاد کند. در مراحل اولیه فشردگی، جابه‌جایی و بازآرایی برخی الیاف ممکن است ضمن کاهش ضخامت کلی ساختار، برخی مسیرهای انتقالی مؤثر را حفظ یا حتی بهبود دهد و در عین حال تماس الکتریکی میان الیاف را افزایش دهد. بنابراین، کاهش هندسی ضخامت لایه انتشار گاز الزاماً به معنی کاهش فوری عملکرد نیست. در این محدوده، افزایش هدایت الکتریکی و کاهش مقاومت تماس می‌تواند بخشی از افزایش مقاومت انتقال جرم را جبران کند.

با افزایش بیشتر فشردگی، اما، تغییر شکل منافذ و کاهش اتصال‌پذیری آن‌ها غالب می‌شود. بسته‌شدن منافذ باریک، افزایش پیچ‌وخم مسیر انتقال و کاهش نفوذپذیری می‌تواند انتقال اکسیژن به سمت لایه کاتالیست را محدود کند. همزمان، کاهش فضای خالی می‌تواند مسیر خروج آب را نیز محدود کرده و احتمال تجمع آب را افزایش دهد. در نتیجه، پس از عبور از یک محدوده فشردگی مشخص، اثر منفی مقاومت انتقال جرم بر اثر مثبت کاهش مقاومت الکتریکی و افزایش تماس‌های فیبری غلبه می‌کند.

بنابراین، پاسخ غیرمونوتونیک ساختار ۷ میکرومتر را می‌توان به‌صورت یک موازنه بین اثرات مثبت مکانیکی–الکتریکی فشردگی و اثرات منفی انتقال جرمی آن تفسیر کرد. این تفسیر با مطالعات جدید چندمقیاسی نیز سازگار است که نشان داده‌اند فشردگی لایه انتشار گاز می‌تواند به‌صورت همزمان مقاومت انتقال جرم را افزایش

و رسانایی الکتریکی را بهبود دهد؛ در نتیجه، یک مقدار فشردگی می‌تواند در شرایط مشخصی عملکرد بهینه ایجاد کند [۲۲, ۴۶].
نکته مهم آن است که مشاهده رفتار غیرمونوتونیک برای قطر الیاف ۷ میکرومتر نباید به‌عنوان یک قانون عمومی برای تمام لایه های انتشار گاز تفسیر شود. قطر الیاف تنها یکی از پارامترهای تعیین‌کننده است و پارامترهایی مانند تخلخل اولیه، توزیع اندازه منافذ، جهت‌گیری الیاف، ضخامت لایه انتشار گاز، نوع ماده پیوند دهنده، مقدار ماده آب‌گریز و وجود لایه ریزمتخلخل نیز می‌توانند محل و حتی وجود نقطه بهینه فشردگی را تغییر دهند. بنابراین، نتیجه مطالعه مورد بحث بیشتر نشان‌دهنده اهمیت وابستگی پاسخ فشردگی به ریزساختاراست تا تعیین یک مقدار فشردگی عمومی برای لایه های نفوذ گاز دارای الیاف ۷ میکرومتر [۱۵, ۲۲].

۲-۲۰ محدودیت‌های روش شبکه بولتزمن در شبیه‌سازی همزمان انتقال و واکنش

مزیت اصلی روش شبکه بولتزمن در مطالعات کاتد، امکان حل مستقیم پدیده‌های انتقال در هندسه‌های پیچیده و نزدیک‌شدن به مقیاس منفذ است. با این حال، شبیه‌سازی همزمان انتقال اکسیژن، انتقال آب، انتقال پروتون و الکترون و واکنش الکتروشیمیایی در یک ساختار واقعی لایه کاتالیست، مسئله‌ای چندمقیاسی و چندفیزیکی است و در عمل نیازمند ساده‌سازی‌های متعددی است. یکی از محدودیت‌های مهم، مقیاس مکانی است. ساختار لایه کاتالیست از منافذ، ذرات کربن، ذرات پلاتین و فیلم یونومر تشکیل شده است که اندازه مشخصه آن‌ها می‌تواند از مقیاس نانومتر تا میکرومتر تغییر کند. در مقابل، برای کاهش هزینه محاسباتی، بسیاری از مدل‌های روش شبکه بولتزمن از بازسازی‌های آماری یا ساختارهای ساده‌شده استفاده می‌کنند. در نتیجه، ممکن است تمام جزئیات ریزساختار واقعی، به‌ویژه توزیع واقعی پلاتین و ضخامت موضعی فیلم یونومر، در مدل بازنمایی نشود [۳۰, ۴۷].

محدودیت دوم به مدل‌سازی واکنش الکتروشیمیایی مربوط است. در یک لایه کاتالیست واقعی، اکسیژن باید از فضای گازی عبور کرده، در یونومر حل شود، درون فیلم یونومر نفوذ کند و در محل‌هایی که همزمان دسترسی به اکسیژن، پروتون و الکترون وجود دارد، واکنش کاهش اکسیژن رخ دهد. برخی مدل‌های روش شبکه بولتزمن این فرایند را با شرایط واکنشی ساده‌شده یا روابط سینتیکی مؤثر نمایش می‌دهند. هرچه مدل واکنش از رفتار واقعی فاصله بیشتری داشته باشد، ارتباط میان یک پارامتر هندسی و نرخ واکنش می‌تواند تحت تأثیر قرار گیرد [۳۰, ۴۷].
محدودیت سوم، نحوه مدل‌سازی آب و اثر آن بر واکنش است. در شرایط واقعی، آب می‌تواند به‌صورت بخار یا مایع حضور داشته باشد و تشکیل آب مایع موجب انسداد بخشی از منافذ و کاهش دسترسی اکسیژن شود. مدل‌های تک‌فازی نمی‌توانند این پدیده را به‌طور کامل بازنمایی کنند و مدل‌های دوفازی نیز به پارامترهایی مانند زاویه تماس، تنش بین‌سطحی و مدل نیروی بین‌فازی وابسته‌اند. بنابراین، تفاوت در انتخاب مدل چندفازی می‌تواند بر پیش‌بینی انتقال اکسیژن و در نتیجه چگالی جریان تأثیر بگذارد [۴۸].
محدودیت دیگر، وابستگی نتایج به روش بازسازی ریزساختار است. دو ساختار عددی با تخلخل و اندازه متوسط منافذ یکسان می‌توانند از نظر اتصال‌پذیری منافذ، پیچ‌وخم مسیر انتقال و توزیع محل‌های فعال کاملاً متفاوت باشند. ازاین‌رو، اگر ساختار بازسازی‌شده از نظر آماری یا هندسی با نمونه واقعی اختلاف داشته باشد، بخشی از اثر مشاهده‌شده که به یک پارامتر ساختاری نسبت داده می‌شود، ممکن است در واقع ناشی از تفاوت روش بازسازی باشد. مطالعات جدید نیز به سمت استفاده از بازسازی سه‌بعدی و ریزساختارهای واقعی‌تر برای کاهش این محدودیت حرکت کرده‌اند [۲۴, ۳۰].

۲۰-۳ آیا محدودیت‌های روش شبکه بولتزمن می‌توانند بر نتیجه مربوط به کشیدگی توده‌های تجمعی اثر بگذارند؟

پاسخ به این پرسش مثبت است، اما به‌معنای بی‌اعتبار بودن نتیجه نیست. در مطالعه مربوط به اثر ریخت‌شناسی لایه کاتالیست، افزایش کشیدگی توده‌های تجمعی با افزایش چگالی جریان متوسط همراه بوده است [۱۶]. از دیدگاه فیزیکی، کشیده‌تر شدن توده‌های تجمعی می‌تواند فضای منافذ و مسیرهای انتقال اکسیژن را تغییر دهد و همزمان سطح قابل‌دسترسی برای واکنش را تحت تأثیر قرار دهد. بنابراین، مشاهده یک رابطه میان کشیدگی توده‌های تجمعی و عملکرد می‌تواند از نظر فیزیکی قابل توجیه باشد.

بااین‌حال، مقدار و حتی شدت این اثر می‌تواند به فرضیات مدل وابسته باشد. برای مثال، اگر توده‌های تجمعی به‌صورت هندسه‌های ایده‌آل‌شده و با توزیع تصادفی بازسازی شوند، در حالی که ساختار واقعی لایه کاتالیست دارای توزیع غیریکنواخت توده‌های تجمعی و منافذ است (ناهمگنی قابل توجه) در اندازه، شکل، توزیع یونومر و پوشش پلاتین باشد، اثر هندسی کشیدگی ممکن است بیش از یا کمتر از مقدار واقعی پیش‌بینی شود. همچنین، اگر واکنش الکتروشیمیایی با یک رابطه سینتیکی مؤثر نمایش داده شود، اثر تغییر سطح فعال یا دسترسی اکسیژن به محل‌های واکنش می‌تواند با رفتار واقعی تفاوت داشته باشد [۱۶, ۳۰].

از سوی دیگر، مطالعات مستقل مبتنی بر روش شبکه بولتزمن نیز نشان داده‌اند که تغییر اندازه و شکل اجزای ساختاری لایه کاتالیست می‌تواند موجب ایجاد موازنه میان انتقال اکسیژن و تعداد محل‌های فعال شود. برای نمونه، افزایش اندازه ذرات کربن می‌تواند انتقال اکسیژن در منافذ را تسهیل کند، اما همزمان نرخ واکنش کلی را کاهش دهد؛ بنابراین، یک پارامتر هندسی به‌تنهایی تعیین‌کننده عملکرد نیست [۴۹]. همچنین، مطالعات جدیدتر نشان داده‌اند که تغییر شکل و ریخت‌شناسی پایه کربنی می‌تواند اتصال منافذ، غلظت اکسیژن در فاز یونومر و چگالی جریان را به‌طور قابل توجهی تغییر دهد [۵۰].

بنابراین، نتیجه مربوط به افزایش چگالی جریان با افزایش کشیدگی توده‌های تجمعی باید به‌عنوان نتیجه‌ای وابسته به مجموعه شرایط و ساختارهای بررسی‌شده تفسیر شود و نه یک رابطه عمومی برای تمام لایه‌های کاتالیست. برای تأیید عمومی‌تر این نتیجه، لازم است اثر کشیدگی در کنار پارامترهایی مانند اندازه توده‌های تجمعی، تخلخل، ضخامت فیلم یونومر، بارگذاری پلاتین، توزیع یونومر و میزان اشباع آب بررسی شود.

۲۰-۴ جمع‌بندی انتقادی

در مجموع، تحلیل مطالعات نشان می‌دهد که پاسخ کاتد به تغییرات ساختاری حاصل از فشردگی یا تغییر ریخت‌شناسی، نتیجه یک سازوکار منفرد نیست، بلکه حاصل برهم‌کنش همزمان انتقال جرم، انتقال آب، هدایت الکتریکی و واکنش الکتروشیمیایی است. رفتار غیرمونوتونیک لایه انتشار گاز با قطر الیاف ۷ میکرومتر را می‌توان ناشی از رقابت میان بهبود تماس و هدایت الکتریکی در مراحل اولیه فشردگی و افزایش مقاومت انتقال جرم در فشردگی‌های بالاتر دانست. در مورد لایه کاتالیست نیز اثر کشیدگی توده‌های تجمعی باید در چارچوب موازنه میان سطح فعال قابل‌دسترسی و مقاومت انتقال اکسیژن تفسیر شود.

از این رو، روش شبکه بولتزمن ابزار قدرتمندی برای شناسایی سازوکارهای ریزمقیاس است، اما نتایج آن باید با توجه به ریزساختار بازسازی‌شده، مدل واکنش، نحوه مدل‌سازی آب، مقیاس مکانی و فرضیات انتقالی تفسیر شوند. استفاده از ریزساختارهای سه‌بعدی واقعی، مدل‌های چندفازی و چندفیزیکی و اعتبارسنجی در برابر داده‌های تجربی می‌تواند قابلیت تعمیم نتایج و اطمینان از روابط ساختار–عملکرد را افزایش دهد.

۲۱ نتیجه

در این مقاله مروری، دو موضوع پژوهشی مرتبط شامل فشرده‌سازی لایه انتشار گاز و ریخت‌شناسی لایه کاتالیست بر عملکرد کاتد پیل سوختی پلیمری، با تأکید بر روش شبکه بولتزمن، به‌صورت یکپارچه بررسی شدند. بر اساس مطالعات بررسی‌شده، مهم‌ترین نتایج این پژوهش به شرح زیر است:

۲۳-۱اثر فشرده‌سازی لایه انتشار گاز

لایه انتشار گاز یک ساختار متخلخل چندمنظوره است که وظایف انتقال واکنش‌دهنده‌ها، مدیریت آب، هدایت الکتریکی و پشتیبانی مکانیکی را بر عهده دارد. فشرده‌سازی این لایه موجب تغییر ساختار متخلخل شده و می‌تواند تخلخل، اتصال‌پذیری منافذ، نفوذپذیری، ضریب نفوذ، احتباس آب و توزیع چگالی جریان را تغییر دهد.

۲۳-۲وابستگی اثر فشرده‌سازی به ریزساختار لایه انتشار گاز

مطالعات مبتنی بر روش شبکه بولتزمن نشان می‌دهند که پاسخ لایه انتشار گاز به فشرده‌سازی به‌شدت به ریزساختار اولیه آن وابسته است. به‌ویژه، لایه‌های انتشار گاز با قطرهای مختلف الیاف کربنی می‌توانند تحت شرایط فشرده‌سازی یکسان، رفتارهای متفاوتی نشان دهند. بنابراین، تعیین یک میزان بهینه فشرده‌سازی بدون درنظرگرفتن ویژگی‌های ریزساختاری لایه انتشار گاز امکان‌پذیر نیست.

۲۳-۳ نقش ریخت‌شناسی لایه کاتالیست:

لایه کاتالیست ناحیه اصلی واکنش الکتروشیمیایی است و ریخت‌شناسی آن دسترسی به محل‌های فعال و مقاومت انتقال اکسیژن و آب را تعیین می‌کند. ساختار منافذ، توزیع کاتالیست، ریخت‌شناسی توده‌های تجمعی، توزیع یونومر و سطح فعال مؤثر از مهم‌ترین پارامترهای طراحی این لایه محسوب می‌شوند.

۲۳-۴اثر ساختار لایه کاتالیست بر انتقال و واکنش

مطالعات مبتنی بر روش شبکه بولتزمن نشان داده‌اند که ریخت‌شناسی بازسازی‌شده لایه کاتالیست می‌تواند توزیع اکسیژن و آب و همچنین چگالی جریان موضعی و متوسط را به‌طور قابل‌توجهی تحت تأثیر قرار دهد. به‌طور خاص، تغییر کشیدگی توده‌های تجمعی می‌تواند تعادل میان سطح فعال الکتروشیمیایی و مقاومت انتقال جرم را تغییر دهد. بااین‌حال، این نتیجه باید در محدوده ساختارهای بررسی‌شده تفسیر شود و نمی‌توان آن را به‌عنوان یک رابطه عمومی و مستقل از سایر پارامترهای ساختاری در نظر گرفت.

۲۳-۵ نقش لایه ریزمتخلخل به‌عنوان ناحیه واسط

لایه ریزمتخلخل به‌عنوان ناحیه واسط میان لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست، نقش مهمی در تنظیم انتقال اکسیژن و آب دارد. ویژگی‌های ساختاری این لایه می‌توانند شرایط انتقالی در فصل مشترک را تغییر دهند و بر عملکرد لایه کاتالیست اثرگذار باشند. ازاین‌رو، تحلیل مستقل لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست، بدون

درنظرگرفتن نقش لایه ریزمتخلخل، نمی‌تواند تمام پیچیدگی‌های انتقال در کاتد را نشان دهد.

۲۳-۶ضرورت بهینه‌سازی یکپارچه معماری کاتد

مهم‌ترین نتیجه این بررسی آن است که فشرده‌سازی لایه انتشار گاز و ریخت‌شناسی لایه کاتالیست را نمی‌توان به‌عنوان پارامترهای کاملاً مستقل طراحی در نظر گرفت. اکسیژن باید به‌صورت متوالی از لایه انتشار گاز و لایه ریزمتخلخل عبور کرده و به محل‌های فعال در لایه کاتالیست برسد، در حالی که آب تولیدشده در لایه کاتالیست باید از مسیر محیط متخلخل الکترود خارج شود. بنابراین، بهینه‌سازی یکی از این لایه‌ها بدون درنظرگرفتن عملکرد لایه‌های مجاور ممکن است به معماری غیر بهینه برای کاتد منجر شود.

۲۳-۷ قابلیت و محدودیت‌های روش شبکه بولتزمن

روش شبکه بولتزمن به دلیل توانایی در حل هندسه‌های پیچیده متخلخل، بررسی انتقال در مقیاس منفذ، شبیه‌سازی پدیده‌های چندفازی و تحلیل فرآیندهای الکتروشیمیایی موضعی، ظرفیت بالایی برای مطالعه برهم‌کنش میان ساختار و عملکرد کاتد دارد. بااین‌حال، هزینه محاسباتی، بازسازی دقیق ریزساختار، کوپل چندفیزیکی و اعتبارسنجی تجربی همچنان از چالش‌های اصلی این روش محسوب می‌شوند. بنابراین، نتایج حاصل از مدل‌سازی باید در کنار داده‌های تجربی و با توجه به فرضیات و محدودیت‌های مدل تفسیر شوند.

۲۳-۸ مسیرهای پیشنهادی برای پژوهش‌های آینده

مطالعات آینده باید بر توسعه مدل‌های سه‌بعدی و چندفازی کوپل‌شده برای ساختار لایه کاتالیست–لایه ریزمتخلخل–لایه انتشار گاز با استفاده از ریزساختارهای واقعی بازسازی‌شده تمرکز کنند. ترکیب روش شبکه بولتزمن با مدل‌سازی مکانیکی، روش‌های مقیاس پیوسته، مشخصه‌یابی تجربی و روش‌های بهینه‌سازی مبتنی بر یادگیری ماشین می‌تواند چارچوب قدرتمندی برای طراحی نسل آینده کاتدهای پیل سوختی پلیمری فراهم کند.

در مجموع، شواهد موجود نشان می‌دهند که مسیر آینده طراحی کاتد باید از بهینه‌سازی مستقل خواص لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست به سمت بهینه‌سازی یکپارچه معماری کاتد حرکت کند؛ به‌گونه‌ای که فشرده‌سازی مکانیکی، ریخت‌شناسی منافذ، انتقال جرم، مدیریت آب و فعالیت الکتروشیمیایی به‌عنوان اجزای به‌هم‌پیوسته یک سامانه واحد در نظر گرفته شوند.

۲۲ فهرست علائم و اختصارات

معادل فارسی	عبارت انگلیسی	اختصار
پیل سوختی پلیمری	Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell	PEMFC
لایه انتشار گاز	Gas Diffusion Layer	GDL
لایه ریز متخلخل	Microporous Layer	MPL
لایه کاتالیست	Catalyst Layer	CL
روش شبکه بولتزمن	Lattice Boltzmann Method	LBM
روش حجم محدود	Finite Volume Method	FVM
تحلیل اجزای محدود	Finite Element Analysis	FEA

منابع

[1] Morgan JM, Datta R. Understanding the gas diffusion layer in proton exchange membrane fuel cells. I. How its structural characteristics affect diffusion and performance. Journal of Power Sources. 2014;251:269-78.

[2] Sui P-C, Zhu X, Djilali N. Modeling of PEM fuel cell catalyst layers: status and outlook. Electrochemical Energy Reviews. 2019;2(3):428-66.

[3] Molaeimanesh G, Googarchin HS, Moqaddam AQ. Lattice Boltzmann simulation of proton exchange membrane fuel cells–A review on opportunities and challenges. International Journal of Hydrogen Energy. 2016;41(47):22221-45.

[4] Um S, Wang CY, Chen K. Computational fluid dynamics modeling of proton exchange membrane fuel cells. Journal of the Electrochemical society. 2000;147(12):4485-93.

[5] Shojaeefard MH, Molaeimanesh G, Nazemian M, Moqaddari M. A review on microstructure reconstruction of PEM fuel cells porous electrodes for pore scale simulation. International Journal of Hydrogen Energy. 2016;41(44):20276-93.

[6] Bao Z, Li Y, Zhou X, Gao F, Du Q, Jiao K. Transport properties of gas diffusion layer of proton exchange membrane fuel cells: Effects of compression. International Journal of Heat and Mass Transfer. 2021;178:121608.

[7] Yang Y, Zhou X, Li B, Zhang C. Recent progress of the gas diffusion layer in proton exchange membrane fuel cells: Material and structure designs of microporous layer. International Journal of Hydrogen Energy. 2021;46(5):4259-82.

[8] Lee H, Choi C-W, Kang K-W, Jin J-W. A study on the evaluation of effective properties of randomly distributed gas diffusion layer (GDL) tissues with different compression ratios. Applied Sciences. 2020;10(21):7407.

[9] Bouziane K, Zamel N, Francois X, Meyer Y, Candusso D. Effects of mechanical compression on the performance of polymer electrolyte fuel cells and analysis through in-situ characterisation techniques-a review. Journal of Power Sources. 2019;424:8-26.

[10] Bevilacqua N, Asset T, Schmid M, Markötter H, Manke I, Atanassov P, et al. Impact of catalyst layer morphology on the operation of high temperature PEM fuel cells. Journal of Power Sources Advances. 2021;7:100042.

[11] Park J, Kwon O, Oh H-M, Jeong S, So Y, Park G, et al. Optimizing design of catalyst layer structure with carbon-supported platinum weight ratio mixing method for proton exchange membrane fuel cells. Energy. 2024;291:130363.

[12] Yang L, Fu K, Jin X, Wang S, Gan Q, Zhang Q, et al. Catalyst layer design with inhomogeneous distribution of platinum and ionomer optimal for proton exchange membrane fuel cell cold-start. Chemical Engineering Science. 2022;263:118132.

[13] Kotaka T, Tabuchi Y, Mukherjee PP. Microstructural analysis of mass transport phenomena in gas diffusion media for high current density operation in PEM fuel cells. Journal of Power Sources. 2015;280:231-9.

[14] Wan Y, Qiu D, Yi P, Peng L, Lai X. Design and optimization of gradient wettability pore structure of adaptive PEM fuel cell cathode catalyst layer. Applied Energy. 2022;312:118723.

[15] Molaeimanesh G, Nazemian M. Investigation of GDL compression effects on the performance of a PEM fuel cell cathode by lattice Boltzmann method. Journal of Power Sources. 2017;359:494-506.

[16] Molaeimanesh G, Bamdezh M, Nazemian M. Impact of catalyst layer morphology on the performance of PEM fuel cell cathode via lattice Boltzmann simulation. international journal of hydrogen energy. 2018;43(45):20959-75.

[17] Zhang J, Wang B, Jin J, Yang S, Li G. A review of the microporous layer in proton exchange membrane fuel cells: Materials and structural designs based on water transport mechanism. Renewable and Sustainable Energy Reviews. 2022;156:111998.

[18] Zhang N, Chen W, Zhou H, Deng Q, Chen B. Liquid water transport behavior in gas diffusion layer/microporous layer of proton exchange membrane fuel cells: A pore-scale investigation. Chemical Engineering Journal. 2025;516:164227.

[19] Kim KN, Kang JH, Lee SG, Nam JH, Kim C-J. Lattice Boltzmann simulation of liquid water transport in microporous and gas diffusion layers of polymer electrolyte membrane fuel cells. Journal of Power Sources. 2015;278:703-17.

[20] Zhang H, Zhu L, Sarker M, Wang M, Chang H, Kui D, et al. Pore-scale simulations investigating mechanical compression effects on transport properties at gas diffusion layer/micro-porous layer

computational approach. Electrocatalysis. 2011;2(2):141-57.
[32] Sohn Y-J, Yim S-D, Park G-G, Kim M, Cha S-W, Kim K. PEMFC modeling based on characterization of effective diffusivity in simulated cathode catalyst layer. International Journal of Hydrogen Energy. 2017;42(18):13226-33.
[33] Xia L, Ni M, Xu Q, Xu H, Zheng K. Optimization of catalyst layer thickness for achieving high performance and low cost of high temperature proton exchange membrane fuel cell. Applied Energy. 2021;294:117012.
[34] Zhan Z, Song H, Yang X, Jiang P, Chen R, Harandi HB, et al. Microstructure reconstruction and multiphysics dynamic distribution simulation of the catalyst layer in PEMFC. Membranes. 2022;12(10):1001.
[35] Park J, Matsubara M, Li X. Application of lattice Boltzmann method to a micro-scale flow simulation in the porous electrode of a PEM fuel cell. Journal of Power Sources. 2007;173(1):404-14.
[36] Um S, Wang C-Y. Computational study of water transport in proton exchange membrane fuel cells. Journal of Power Sources. 2006;156(2):211-23.
[37] Chen L, Feng Y-L, Song C-X, Chen L, He Y-L, Tao W-Q. Multi-scale modeling of proton exchange membrane fuel cell by coupling finite volume method and lattice Boltzmann method. International Journal of Heat and Mass Transfer. 2013;63:268-83.
[38] Ji S, Yang G, Wang H, Yang X. Lattice Boltzmann numerical study of reaction transport in catalyst layers for high temperature proton exchange membrane fuel cells. International Journal of Hydrogen Energy. 2026;257:156590.
[39] Okonkwo PC, Ige OO, Uzoma PC, Emori W, Benamor A, Abdullah AM. Platinum degradation mechanisms in proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) system: A review. International journal of hydrogen energy. 2021;46(29):15850-65.
[40] Hegde S, Wörner R, Shabani B. Automotive PEM fuel cell catalyst layer degradation mechanisms and characterisation techniques, Part II: Platinum degradation. International Journal of Hydrogen Energy. 2025;143:179-212.
[41] Yusro M, Hacker V. Advantages of ordered catalyst layers in PEMFCs: theoretical perspectives and future development. Sustainable Energy & Fuels. 2025;9(10):2625-50.
[42] Nourmohammadi A, Siavashi M, Pourrahmani H, Hesampour MM. Geometric design of gas diffusion interfaces in proton exchange membrane fuel cells. Journal of Power Sources. 2025;642:236962.
[21] Han B, Ni M, Meng H. Three-dimensional lattice Boltzmann simulation of liquid water transport in porous layer of PEMFC. Entropy. 2015;18(1):17.
[22] Chen J, Gao W, Ning T, Meng L, Yin Y, Ouyang H, et al. Effect of GDL compression on PEMFC performance: A comprehensive cross-scale study. Chemical Engineering Journal. 2025;503:158542.
[23] Yang S, Zhang H, Li Q. Lattice Boltzmann simulation application of gas diffusion layer in proton exchange membrane fuel cells: A review. Journal of Power Sources. 2026;678:240127.
[24] Zhang C, Kong R, Cao X, Mu Y, Wang Y, Liu P, et al. Pore-scale mass transfer analysis of Catalyst Layers of PEMFC based on structural evolution and the lattice Boltzmann method. Transformative Energy. 2026:100024.
[25] Molaeimanesh G, Akbari M. Agglomerate modeling of cathode catalyst layer of a PEM fuel cell by the lattice Boltzmann method. International Journal of Hydrogen Energy. 2015;40(15):5169-85.
[26] Shi Q, Feng C, Ming P, Tang F, Zhang C. Compressive stress and its impact on the gas diffusion layer: A review. International Journal of Hydrogen Energy. 2022;47(6):3994-4009.
[27] Yan S, Yang M, Sun C, Xu S. Liquid water characteristics in the compressed gradient porosity gas diffusion layer of proton exchange membrane fuel cells using the Lattice Boltzmann Method. Energies. 2023;16(16):6010.
[28] Ira Y, Bakhshan Y, Khorshidimalahmadi J. Effect of wettability heterogeneity and compression on liquid water transport in gas diffusion layer coated with microporous layer of PEMFC. International Journal of Hydrogen Energy. 2021;46(33):17397-413.
[29] Javaherdeh K, Moslemi M, Ashorynejad HR. Liquid water phenomena in compressed gas diffusion and micro-porous layers of Proton exchange membrane fuel cell. Heat and Mass Transfer. 2023;59(3):489-508.
[30] Deng H, Hou Y, Chen W, Pan F, Jiao K. Lattice Boltzmann simulation of oxygen diffusion and electrochemical reaction inside catalyst layer of PEM fuel cells. International journal of heat and mass transfer. 2019;143:118538.
[31] Malek K, Mashio T, Eikerling M. Microstructure of catalyst layers in PEM fuel cells redefined: a

layer of PEMFCs to improve water management using multiphase lattice Boltzmann method. Energy Conversion and Management: X. 2026:101564.

[43] Zhang N, Wang X, Chen W, Deng Q, Chen B. Numerical investigation of gas-liquid two-phase transport in PEMFC gas diffusion layers under clamping Force-Induced microstructural deformation. Fuel. 2026;412:138076.

[44] Suter TA, Smith K, Hack J, Rasha L, Rana Z, Angel GMA, et al. Engineering catalyst layers for next-generation polymer electrolyte fuel cells: a review of design, materials, and methods. Advanced Energy Materials. 2021;11(37):2101025.

[45] Afrasiab H, Gharehhajloo EE, Barzegari MM. Electrical and mechanical characterization of the gas diffusion layer during compression in PEM fuel cells. International Journal of Hydrogen Energy. 2023;48(82):31996-2010.

[46] Zhang H, Hu H, Shao X, Zhan Z, Chen B. A comparative numerical investigation of effect of mechanical compression on the transport properties of gas diffusion layer fabricated by wet and dry laid methods. International Journal of Heat and Mass Transfer. 2024;234:126064.

[47] Chen L, Kang Q, Tao W. Pore-scale study of reactive transport processes in catalyst layer agglomerates of proton exchange membrane fuel cells. Electrochimica acta. 2019;306:454-65.

[48] Zhang D, Cai Q, Gu S. Three-dimensional lattice-Boltzmann model for liquid water transport and oxygen diffusion in cathode of polymer electrolyte membrane fuel cell with electrochemical reaction. Electrochimica Acta. 2018;262:282-96.

[49] Wang Y, Qin S, Liao X, Jia Y, Xu H, Wang C, et al. Lattice Boltzmann study of the effect of catalyst layer structure on oxygen reduction reaction within a PEMFC. International Journal of Hydrogen Energy. 2024;52:1105-14.

[50] Zhang G, Ma F, Sun G, Chen Q, Zhang H, Wang Q, et al. Pore-Scale Investigation of Oxygen Transport in Proton Exchange Membrane Fuel Cell Catalyst Layers with Carbon Supports of Diverse Morphologies. Energy & Fuels. 2026;40(21):11551-68.