

**HİDROJEN YAKITLI KATI OKSİT YAKIT HÜCRELERİNDE KATOT
VE ANOT YÜZEYLERİNE UYGULANAN KATKI VE İNCE FİLM
KAPLAMALARIN ÇOKLU FİZİK TABANLI İNCELENMESİ**

Yüksek Lisans Tezi

Ramazan Burak ÖTGÜN

ESKİŞEHİR 2025

**HİDROJEN YAKITLI KATI OKSİT YAKIT HÜCRELERİNDE KATOT VE
ANOT YÜZEYLERİNE UYGULANAN KATKI VE İNCE FİLM
KAPLAMALARIN ÇOKLU FİZİK TABANLI İNCELENMESİ**

Ramazan Burak ÖTGÜN

Yüksek Lisans Tezi

İleri Teknolojiler Anabilim Dalı

Enerji Kaynakları Yönetimi

Danışman: Prof. Dr. Özlem ONAY

Eskişehir

Eskişehir Teknik Üniversitesi

Lisansüstü Eğitim Enstitüsü

Nisan 2025

JÜRİ VE ENSTİTÜ ONAYI

Ramazan Burak ÖTGÜN'ün HİDROJEN YAKITLI KATI OKSİT YAKIT HÜCRELERİNDE KATOT VE ANOT YÜZEYLERİNE UYGULANAN KATKI VE İNCE FİLM KAPLAMALARIN ÇOKLU FİZİK TABANLI İNCELENMESİ başlıklı çalışması 15/04/2025 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından değerlendirilerek "Eskişehir Teknik Üniversitesi Lisansüstü Eğitim-Öğretim ve Sınav Yönetmeliği"nin ilgili maddeleri uyarınca, İleri Teknolojiler Anabilim dalında Yüksek Lisans Tezi olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri

Unvan Adı Soyadı

İmza

Üye

: Prof. Dr. Özlem ONAY

Üye

: Prof. Dr. Ümran TEZCAN ÜN

Üye

: Prof. Dr. Ayşegül AŞKIN

Prof. Dr. Harun BÖCÜK

Lisansüstü Eğitim Enstitüsü Müdürü

15/04/2025

DANIřMAN ONAYI

Daniřmanlıđını yrttđm Yksek Lisans đrencisi Ramazan Burak TGN, HİDROJEN YAKITLI KATI OKSİT YAKIT HCRELERİNDE KATOT VE ANOT YZEYLERİNE UYGULANAN KATKI VE İNCE FİLM KAPLAMALARIN OKLU FİZİK TABANLI İNCELENMESİ bařlıklı tez alıřmasını tamamlamıřtır. Hazırlamıř olduđu tez tarafımda incelenmiř ve đrencinin tez savunma sınavına alınması bilimsel ve etik aıdan uygun grlmřtr.

Tez Daniřmanı
Prof. Dr. zlem ONAY

ÖZET

HİDROJEN YAKITLI KATI OKSİT YAKIT HÜCRELERİNDE KATOT VE ANOT YÜZEYLERİNE UYGULANAN KATKI VE İNCE FİLM KAPLAMALARIN ÇOKLU FİZİK TABANLI İNCELENMESİ

Ramazan Burak ÖTGÜN

İleri Teknolojiler Anabilim Dalı

Enerji Kaynakları Yönetimi Programı

Eskişehir Teknik Üniversitesi, Lisansüstü Eğitim Enstitüsü, Nisan 2025

Danışman: Prof. Dr. Özlem ONAY

Bu tez çalışmasında, hidrojen yakıtlı katı oksit yakıt pilleri (KOYP), COMSOL Multiphysics yazılımı kullanılarak çoklu fiziksel modelleme yaklaşımıyla analiz edilmiştir. COMSOL Multiphysics, elektrokimyasal reaksiyonlar, ısı transferi, mekanik gerilmeler ve akışkan hareketleri gibi çoklu fiziksel süreçleri eşzamanlı simüle ederek sistem analizinde tercih edilmiştir. Literatür taraması sonucunda, anot için Ni-YSZ, katot için LSM, elektrolit için 8YSZ ve akış kanalları için Inconel 625 seçilmiştir. Çalışmanın ilk aşamasında 800 °C, 900 °C ve 1000 °C sıcaklıklarında yapılan analizlerle optimum sıcaklık belirlenmiş, 900 °C'nin en dengeli performansı sunduğu bulunmuştur. Bu sıcaklıkta, yaklaşık 0 V'da 22.623 A/m² maksimum akım yoğunluğu, 0,5 V'da ise 5536 W/m² maksimum güç yoğunluğu elde edilmiştir. İkinci aşamada, platinyum (Pt) ve paladyum (Pd) ince film kaplamalarının sistem performansı üzerindeki etkileri incelenmiştir. İnce film kaplamalar mekanik, termal ve elektriksel performansı artırmış; Pt kaplama, Pd'ye göre daha yüksek enerji verimliliği sunmuştur. Son aşamada, Pt kaplamalı yapılara molibden (Mo) ve tungsten (W) dopingleri uygulanmış ve karşılaştırmalı analizler yapılmıştır. Mo dopingi, dengeli enerji dağılımı ve düşük kayıp sağlarken; W dopingi, yüksek akım yoğunluğu ve etkili reaksiyon yönetimi avantajı sunmuştur. Genel olarak, Mo-dopingi uygulanmış Pt kaplamalı KOYP yapısı en yüksek verimlilik, düşük enerji kaybı ve dengeli mekanik dayanım sunarak en uygun sistem konfigürasyonu olarak belirlenmiştir.

Anahtar Sözcükler: KOYP, Platinyum, Paladyum, Molibden, Tungsten, Comsol

ABSTRACT

MULTIPLE PHYSICS-BASED INVESTIGATION OF ADDITIVES AND THIN FILM COATINGS APPLIED TO CATHODE AND ANODE SURFACES IN HYDROGEN-FUELLED SOLID OXIDE FUEL CELLS

Ramazan Burak ÖTGÜN

Department of Advanced Technologies

Programme in Energy Resources and Management

Eskişehir Technical University, Institute of Graduate Programs, April 2025

Supervisor: Prof. Dr. Özlem ONAY

In this thesis, hydrogen-fueled solid oxide fuel cells (SOFCs) were analyzed using a multiphysics modeling approach with the COMSOL Multiphysics software. COMSOL Multiphysics was chosen for the system analysis due to its ability to simultaneously simulate multiple physical phenomena, including electrochemical reactions, heat transfer, mechanical stresses, and fluid dynamics. Based on a literature review, Ni-YSZ was selected as the anode material, LSM as the cathode, 8YSZ as the electrolyte, and Inconel 625 for the flow channels. In the first phase of the study, analyses were conducted at 800 °C, 900 °C, and 1000 °C to determine the optimum operating temperature. It was found that 900 °C provided the most balanced performance. At this temperature, a maximum current density of approximately 22,623 A/m² at 0 V and a maximum power density of 5536 W/m² at 0.5 V were achieved. In the second phase, the effects of platinum (Pt) and palladium (Pd) thin film coatings on system performance were investigated. The thin film coatings significantly improved mechanical, thermal, and electrical performance, with Pt coatings offering higher energy efficiency compared to Pd. In the final phase, molybdenum (Mo) and tungsten (W) dopings were applied to the Pt-coated structures, and comparative performance analyses were carried out. Mo doping provided balanced energy distribution and reduced losses, whereas W doping enhanced current density and reaction management efficiency. Overall, the Pt-coated SOFC structure with Mo doping demonstrated the highest efficiency, minimized energy loss, and achieved balanced mechanical stability, making it the most suitable system configuration.

Keywords: SOFC, Platinum, Palladium, Molybdenum, Tungsten, Comsol

TEŞEKKÜR

Öncelikle, yüksek lisans ve tez sürecim boyunca bana değerli deneyimler kazandıran, yol gösterici vizyonu ile rehberlik eden ve katkılarını hiçbir zaman esirgemeyen danışman hocam Sayın Prof. Dr. Özlem ONAY’a en içten teşekkürlerimi sunarım.

Bu süreçte beni daima motive eden, zor zamanlarımda anlayış ve sabırla yanımda olan sevgili anneme, babama, yeğenime, abime, yengeme ve nişanlım Büşra’ya teşekkür ederim.

Her zaman yanımda olan yakın zaman önce kaybettiğimiz kıymetli aile büyüğümüz Sefer Öncel Eniştemin mekânının cennet olmasını temenni ediyorum.

Ayrıca, ilköğretimden yüksek lisansa kadar geçen eğitim hayatım boyunca akademik ve kişisel gelişimime katkı sağlayan tüm değerli öğretmenlerime, eğitimcilerime ve yolumu paylaşan arkadaşlarıma teşekkürü borç bilirim.

Ramazan Burak ÖTGÜN

ETİK İLKE VE KURALLARA UYGUNLUK BEYANNAMESİ

Bu tezin bana ait, özgün bir çalışma olduğunu; çalışmamın hazırlık, veri toplama, analiz ve bilgilerin sunumu olmak üzere tüm aşamalarında bilimsel etik ve kurallara uygun davrandığımı; bu çalışma kapsamında elde edilen tüm veri ve bilgiler için kaynak gösterdiğimi ve bu kaynaklara kaynakçada yer verdiğimi; bu çalışmanın Eskişehir Teknik Üniversitesi tarafından kullanılan “bilimsel intihal tespit programı”yla tarandığını ve hiçbir şekilde “intihal içermediğini” beyan ederim. Herhangi bir zamanda, çalışmamla ilgili yaptığım bu beyana aykırı bir durumun saptanması durumunda, ortaya çıkacak tüm ahlaki ve hukuki sonuçları kabul ettiğimi bildiririm.

Ramazan Burak ÖTGÜN

İÇİNDEKİLER

Sayfa

BAŞLIK SAYFASI	I
JÜRİ VE ENSTİTÜ ONAYI.....	II
DANIŞMAN ONAYI	III
ÖZET	IV
ABSTRACT.....	V
TEŞEKKÜR	VI
ETİK İLKE VE KURALLARA UYGUNLUK BEYANNAMESİ.....	VII
İÇİNDEKİLER	VIII
TABLolar DİZİNİ.....	XI
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	XIII
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	XVII
1. GİRİŞ	1
1.1. Yakıt Pillerinin Sınıflandırılması	3
1.2. Yakıt Pillerinin Hücre Modülü ve Çalışma Prensipleri	9
2. KATI OKSİT YAKIT HÜCRELERİ (KOYP).....	11
2.1. Katı Oksit Yakıt Türleri.....	13
2.2. Katı Oksit Yakıt Pili Bileşenleri	16
2.2.1. Anot, katot, elektrolit	16
2.2.2. Akış kanalları, sızdırmazlık malzemeleri ve ara bağlantılar	17
2.3. Katı Oksit Yakıt Pillerinin Genel Terimleri ve Polarizasyon Türleri.....	20
2.3.1. Isıtma gerilimi.....	20
2.3.2. Gibbs serbest enerjisi	21
2.3.3. Termodinamik voltaj	22
2.3.4. Nernst gerilimi	23
2.3.5. Aktivasyon polarizasyonu.....	24
2.3.6. Ohmik polarizasyon	25
2.3.7. Konsantrasyon polarizasyonu	25
2.4. KOYP Verimlilik Analizi ve Yakıt- Oksidan Kullanımı	27
2.5. Yakıt Pilleri İçin Yakıt Seçimi	31
2.6. Neden Hidrojen Yakıtlı Katı Oksit Yakıt Pili ?	32

2.7. KOYP’nde Malzeme, Destek Elemanı ve Tür Seçimi.....	33
2.8. Comsol Multiphysics’de Kullanılan Denklemler ve Kabuller	37
2.8.1 Hidrojen yakıt modülü.....	37
2.8.2 Brinkman eşitlikleri ile serbest ve gözenekli akış modeli (anot- katot).....	40
2.8.3 Katı mekaniği modülü.....	43
2.8.4. Isı transferi temel denklemi (enerji korunumu).....	45
2.8.5. Elektrik akımları modülü	45
2.8.6. Reaksiyon akış modülü	46
2.8.7. Termal genleşme modülü.....	48
3. LİTERATÜR TARAMASI.....	49
3.1. Katot ve Anot İnce Film Kaplamaları ve Uygulama Yöntemleri.....	51
3.2. İnce Film Kaplamalarının ve Dopingerin Hücre Performansına Etkileri.....	51
3.3. KOYP Malzeme Seçimi, Doping ve Kaplama Stratejileri.....	52
4. ÇALIŞMADA KULLANILAN MALZEME ÖZELLİKLERİ	54
4.1. Malzeme Özellikleri	54
4.2. Malzemelerin Fiziksel ve Kimyasal Uyumları.....	55
4.3. Molibden (%10) ve Tungsten (%10) Dopingi Uygulanması ile Oluşan Değerler	56
4.4. Platinyum ve Paladyum İnce Film Kaplamaları.....	62
5. COMSOL PARAMETRELERİ, DEĞİŞKENLERİ VE ARAYÜZLERİ.....	65
5.1. Hidrojen Yakıtlı KOYP’de Kullanılan Parametreler ve Açıklamaları	66
5.2. Yakıt Hücresi Değişkenleri ve Anlamları	69
5.3. Seçimler	70
5.4. Hücre Akım Yoğunluğu.....	72
5.5 Geometri ve Malzeme Atamaları.....	72
5.6. Fiziksel Özelliklerin Comsol’da Tanımlanması	74
6. BULGULAR VE TARTIŞMA.....	78
6.1. Optimal Sıcaklığın Belirlenmesi	78
6.1.1. Elektrot potansiyeli / elektrolit potansiyeli	79

6.1.2. H ₂ mol fraksiyonu.....	82
6.1.3. O ₂ mol fraksiyonu.....	83
6.1.4. Katotta hız büyüklüğü ve basınç.....	85
6.1.5. Anotta hız büyüklüğü ve basınç.....	88
6.1.6. Polarizasyon eğrisi.....	90
6.1.7. Akım yoğunluğu / güç grafiği.....	92
6.1.8. Elektrolit akım yoğunluğu.....	93
6.1.9. Aşırı gerilim karşılaştırması.....	95
6.2. Platinyum ve Paladyum İnce Kaplamaların Uygulanması ve Karşılaştırılması.....	97
6.3. Molibden ve Tungsten Dopinglerinin Uygulanması	109
6.4. Elde Edilen Sonuçların Karşılaştırmalı Yöntemle Değerlendirilmesi	132
7. SONUÇ VE ÖNERİLER.....	147
KAYNAKÇA.....	151
ÖZGEÇMİŞ	

TABLÖLAR DİZİNİ

Sayfa

Tablo 1.1. Yakıt pillerinin tarihsel gelişimi	1
Tablo 1.2. Yakıt pillerindeki elektro kimyasal reaksiyonlar	4
Tablo 1.3. Yakıt hücrelerinin özellikleri ve performansı	4
Tablo 1.4. Yakıt pillerinin elde edilen güce ve kullanım alanlarına göre sınıflandırılması	5
Tablo 2.1. Akış kanalları, sızdırmazlık malzemeleri ve ara bağlantılar.....	17
Tablo 2.2. Akış Kanalı Malzemeleri Karşılaştırması.....	20
Tablo 2.3. Yakıt türleri ve ısıtma değeri yakıt miktarı.....	21
Tablo 2.4. Standart koşullarda farklı yakıtlar için ideal gerilim değerleri	23
Tablo 2.5. Yakıt pilleri için yakıt türleri ve özellikleri tablosu.....	32
Tablo 2.6. Katot ve anot malzemelerin karşılaştırılması.....	35
Tablo 2.7. Hidrojen yakıt pili model parametreleri.....	39
Tablo 2.8. Serbest ve gözenekli akış model parametreleri.....	42
Tablo 4.1. Elektrolit: 8YSZ, akış kanalları: Inconel 625, katot: LSM ve anot: Ni-YSZ değerleri,.....	55
Tablo 4.2. Molibden Dopingi Uygulanmış Malzeme Özellikleri	58
Tablo 4.3. Tungsten Dopingi Uygulanmış Malzeme Özellikleri	60
Tablo 4.4. Platin (Pt) ve Paladyum (Pt) Özellikleri	62
Tablo 5.1. Kullanılan Parametreler ve Değerleri	68
Tablo 5.2. Değişkenlerin Anlamları ve Birimleri	69
Tablo 5.3. Saf hidrojen ve reformasyon karışım için ihmal edilebilirlik durumu.....	74
Tablo 6.1. 800°C, 900°C ve 1000°C'deki Elektrot ve Akım Yoğunluğu Analizi.....	80
Tablo 6.2. Minimum, Maksimum Basınç ve Basınç Farkı	88
Tablo 6.3. 800, 900 ve 1000 °C genel değerlendirme kriterleri.....	97
Tablo 6.4. Elektrik Alan Aralığı Dağılımlarının Karşılaştırılması	106
Tablo 6.5. Enerji Dengesi Karşılaştırılması	108
Tablo 6.6. Doping Enerji dengesi karşılaştırılması	126
Tablo 6.7. Değerlendirme kriterlerine göre dopinglerin kıyaslanması	132
Tablo 6.8. Kaplamasız, Pt kaplamalı ve Mo dopingi uygulanmış Pt kaplamalı enerji dengesi karşılaştırılması.....	144

Tablo 6.9. Kaplamasız, Pt kaplamalı ve Mo dopingi uygulanmış Pt kaplamalı değerlendirme kriterleri	145
--	-----



ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa

Şekil 1.1. Yakıt pillerinin genel gösterimi.....	2
Şekil 1.2. Yakıt (hücre) pili ve carnot çevriminin verim karşılaştırması	3
Şekil 1.3. Geleneksel teknoloji ve yakıt pillerinde enerji dönüşümü	3
Şekil 1.4. Polimer elektrolit membranlı yakıt pilinin yapısı.....	5
Şekil 1.5. Alkali yakıt pilinin yapısı ve uzay araçlarındaki uygulaması	6
Şekil 1.6. Fosforik asit yakıt pilinin yapısı	7
Şekil 1.7. Erimiş karbonatlı yakıt pilinin yapısı	8
Şekil 1.8. Erimiş karbonatlı yakıt pilinin çalışma şekli	8
Şekil 1.9. Doğrudan metanol yakıt pilinin yapısı ve cep telefonuna uygulanması	9
Şekil 2.1. Katı oksitli yakıt pili yapısı	13
Şekil 2.2. Katı oksit yakıt pilinin farklı konfigürasyonları.....	14
Şekil 2.3. Katı oksit yakıt pillerinin anot, elektrolit ve katot destekli yapılandırması.....	16
Şekil 2.4. Pem yakıt hücresinin polarizasyon eğrisi.....	27
Şekil 2.5. Bir yakıt hücresinin polarizasyon eğrisinin şematik diyagramı	28
Şekil 5.1. Alan ve yüzeylerin Belirtilmesi.....	70
Şekil 5.2. Anot akış alanları ve katot akış alanları	71
Şekil 5.3. Anot ve katot giriş ve çıkış.....	72
Şekil 5.4. Çalışma düzlemi ve düzlem geometrisi.....	73
Şekil 5.5. Malzemelere genel bakış	74
Şekil 5.6. Hidrojen yakıt pili tanımlanması.....	75
Şekil 5.7. Hidrojen yakıt pili elektrot reaksiyon ayarları	76
Şekil 5.8. Serbest ve gözenekli ortam akışı (katot- anot)	76
Şekil 5.9. Ağ yapısı genel görünüm ve boyutu ayarlanması	77
Şekil 5.10. Ağ yapısında kenar, eşlenme ve süpürülme ayarları.....	77
Şekil 6.1. 0.5 voltaj ve 900 °C'deki elektrot potansiyeli	80
Şekil 6.2. 0.5 voltaj ve 900 °C'deki elektrolit potansiyeli.....	81
Şekil 6.3. 0.5 voltaj ve 900 °C'deki h ₂ akış çizgileri	82
Şekil 6.4. 0.5 voltaj ve 900 °C'deki h ₂ mol fraksiyonu.....	83
Şekil 6.5. 0.5 voltaj ve 900 °C'deki o ₂ akış çizgileri	84
Şekil 6.6. 0.5 voltaj ve 900 °C'deki h ₂ mol fraksiyonu.....	85

Şekil 6.7. 0.5 voltaj ve 900 °C'deki katot hız büyüklüğü	86
Şekil 6.8. 0.5 voltaj ve 900 °C'deki katot basınç	87
Şekil 6.9. 800, 900 ve 1000 °C'de hız büyüklüğü karşılaştırması	88
Şekil 6.10. 0.5 voltaj ve 900 °C'deki anot hız büyüklüğü	89
Şekil 6.11. 0.5 voltaj ve 900 °C'deki anot basıncı	90
Şekil 6.12. 800, 900 ve 1000 °C'de hücre voltajı ile ortalama hücre yoğunluğu grafığı	91
Şekil 6.13. 800, 900 ve 1000 °C'de aktivasyon, ohmik ve konsantrasyon kayıpları grafığı	92
Şekil 6.14. 800, 900 ve 1000 °C'de ortalama hücre akım yoğunluğu ve ortalama hücre gücü	93
Şekil 6.15. 0.5 voltaj ve 800 °C'deki elektrolit akım yoğunluğu	94
Şekil 6.16. 0.5 voltaj ve 900 °C'deki elektrolit akım yoğunluğu	94
Şekil 6.17. 0.5 voltaj ve 1000 °C'deki elektrolit akım yoğunluğu	94
Şekil 6.18. 800, 900 ve 1000 °C'deki elektrolit ve elektron taşıma grafığı	96
Şekil 6.19. 800, 900 ve 1000 °C'deki hidrojen oksidasyonu ve oksijen redüksiyonu	96
Şekil 6.20. İnce film uygulanacak sınırların belirlenmesi (katot, anot ve elektroliz)	98
Şekil 6.21. İnce film kaplamasız von mises gerilmesi detay görünümü	101
Şekil 6.22. Platinyum kaplamalı von mises gerilmesi detay görünümü	101
Şekil 6.23. Paladyum kaplamalı von mises gerilmesi detay görünümü	101
Şekil 6.24. İnce film kaplamasız yer değiştirme büyüklüğü	102
Şekil 6.25. Platinyum kaplamalı yüzeyde yer değiştirme büyüklüğü	103
Şekil 6.26. Paladyum kaplamalı yüzeyde yer değiştirme büyüklüğü	103
Şekil 6.27. Y-z düzleminde ince film kaplamasız yüzeyde sıcaklık dağılımı	104
Şekil 6.28. Y-z düzleminde platinyum kaplamalı yüzeyde sıcaklık dağılımı	104
Şekil 6.29. Y-z düzleminde paladyum kaplamalı yüzeyde sıcaklık dağılımı	104
Şekil 6.30. Dopingsiz ve kaplamasız yüzeyde elektrik alan normu	105
Şekil 6.31. Platinyum kaplamalı yüzeyde elektrik alan normu	105
Şekil 6.32. Paladyum kaplamalı yüzeyde elektrik alan normu	106
Şekil 6.33. Platinyum kaplamalı yüzeyde hacimsel yoğunluk kaybı	107
Şekil 6.34. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış elektrot potansiyeli	109

Şekil 6.35. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış elektrot potansiyeli	110
Şekil 6.36. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış elektrolit potansiyeli	111
Şekil 6.37. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış elektrolit potansiyeli	111
Şekil 6.38. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış H ₂ akış çizgisi	112
Şekil 6.39. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış H ₂ akış çizgisi	112
Şekil 6.40. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış O ₂ mol fraksiyonu	113
Şekil 6.41. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış O ₂ mol fraksiyonu	113
Şekil 6.42. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış H ₂ O akış çizgileri	114
Şekil 6.43. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış H ₂ O akış çizgileri	115
Şekil 6.44. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış N ₂ mol fraksiyonu	116
Şekil 6.45. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış N ₂ mol fraksiyonu	116
Şekil 6.46. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış N ₂ mol fraksiyonu	117
Şekil 6.47. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış hız büyüklüğü (katot)	117
Şekil 6.48. 900 °C'deki molibden dopingi uygulanmış basınç (katot)	118
Şekil 6.49. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış hız büyüklüğü (anot)	119
Şekil 6.50. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış basınç (anot)	119
Şekil 6.51. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış von Mises gerilmesi	120
Şekil 6.52. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış von Mises gerilmesi	121
Şekil 6.53. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış yer değiştirme büyüklüğü	122
Şekil 6.54. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış yer değiştirme büyüklüğü	122
Şekil 6.55. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış izoyüzey sıcaklık değeri	123
Şekil 6.56. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış izoyüzey sıcaklık değeri	123
Şekil 6.57. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış elektrik alan normu	124
Şekil 6.58. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış hacimsel yoğunluk kaybı	125
Şekil 6.59. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış hacimsel yoğunluk kaybı	125
Şekil 6.60. 900 °C'deki molibden ve tungsten dopingi uygulanmış polarizasyon eğrisi	127
Şekil 6.61. 900 °C'deki molibden ve tungsten dopingi uygulanmış güç-yoğunluk eğrisi	127
Şekil 6.62. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış elektrolit akım yoğunluğu	128
Şekil 6.63. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış elektrolit akım yoğunluğu	128
Şekil 6.64. 900 °C'deki Molibden ve Tungsten dopingi uygulanmış elektrolit ve elektron taşınımı	129

Şekil 6.65. 900 °C'deki molibden ve tungsten dopingi uygulanmış hidrojen oksidasyonu aktivasyonu ve oksijen redüksiyonu	130
Şekil 6.66. Dopingsiz ve kaplamasız ana malzemeler atanmış hali	133
Şekil 6.67. Dopingsiz platinyum kaplanmış hali	133
Şekil 6.68. Molibden dopingi uygulanmış platinyum kaplanmış hali	134
Şekil 6.69. Dopingsiz ve kaplamasız ana malzemeler atanmış hız büyüklüğü	135
Şekil 6.70. Dopingsiz platinyum kaplamalı hız büyüklüğü.....	135
Şekil 6.71. Molibden dopingi uygulanmış platinyum kaplamalı hız büyüklüğü.....	135
Şekil 6.72. Kaplamasız, platinyum kaplamalı, molibden dopingi uygulanmış platinyum kapmalı yüzey ortalama akım yoğunluğu / hücre voltajı grafiği	136
Şekil 6.73. Kaplamasız, platinyum kaplamalı, molibden dopingi uygulanmış platinyum kapmalı yüzey ortalama akım yoğunluğu / ortalama hücre gücü.....	137
Şekil 6.74. Doping uygulanmamış ve kaplamasız von mises gerilmesi.....	138
Şekil 6.75. Doping uygulanmamış ve platinyum kaplamalı von mises gerilmesi.....	139
Şekil 6.76. Molibden dopingi uygulanmış ve kaplamasız von mises gerilmesi.....	139
Şekil 6.77. Doping uygulanmamış ve kaplamasız yer değiştirme büyüklüğü	140
Şekil 6.78. Doping uygulanmamış ve platinyum kaplamalı yer değiştirme büyüklüğü	140
Şekil 6.79. Molibden dopingi uygulanmış ve platinyum kaplamalı yer değiştirme büyüklüğü	141
Şekil 6.80. Doping uygulanmamış ve kaplamasız izoyüzey termal haritası	142
Şekil 6.81. Doping uygulanmamış ve platinyum kaplamalı izoyüzey termal haritası.....	142
Şekil 6.82. Molibden doping uygulanmış ve platinyum kaplamalı izoyüzey termal haritası.....	142
Şekil 6.83. Doping uygulanmamış ve kaplamasız elektrik alan normu	143
Şekil 6.84. Doping uygulanmamış ve platinyum kaplamalı elektrik alan normu	144
Şekil 6.85. Molibden dopingi uygulanmış ve platinyum kaplamalı elektrik alan normu	144

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

8YSZ	: %8 Mol Yttria-Stabilize Zirkonya ($Y_2O_3-ZrO_2$)
Inconel 625	: Nikel bazlı süper alaşım
LSM	: Lantan Stronsiyum Manganat ($La_{1-x}Sr_xMnO_{3-\delta}$)
Ni-YSZ	: Nikel - İtiryumla Stabilize Zirkonya Seramiği
LSCF	: Lantan Stronsiyum Kobalt Ferrit
SDC	: Samaryum Katkılı Seryum
GDC	: Gadolinyum Katkılı Seryum
$LaCrO_3$	: Lantan Kromit
CeO_2	: Seryum Dioksit (Ceria)
ZrO_2	: Zirkonyum Dioksit
Bi_2O_3	: Bizmut Oksit
Al_2O_3	: Alüminyum Oksit
Sr	: Stronsiyum
Pt	: Platin
Pd	: Palladyum
Ag	: Gümüş
Mo	: Molibden (Doping Elementi)
W	: Tungsten (Doping Elementi)
Pt-Mo	: Molibden Dopingi Uygulanmış Platinyum Kaplama
H_2	: Hidrojen
O_2	: Oksijen
NH_3	: Amonyak
CO_2	: Karbondioksit
CO	: Karbonmonoksit
CH_4	: Metan
H_2O	: Su
PEMFC	: Proton Değişim Membranlı Yakıt Pili
SOFC	: Katı Oksit Yakıt Pili
AYP	: Alkalın Yakıt Pili
FAYP	: Fosforik Asit Yakıt Pili
EKYP	: Eritilmiş Karbonat Yakıt Pili
DMYP	: Doğrudan Metanol Yakıt Pili

V_{cell}	: Hücre Voltajı (V)
E	: Hücresinin Gerçek Voltajı (V)
η_{max}	: Maksimum Verimlilik
$\sigma_{l,eff}$	: Elektrolit Etkin İletkenliği (S/m)
σ_s	: Elektronik İletkenlik (S/m)
η_{phil}	: Elektrolit Transport Aşırı Potansiyeli (V)
η_{phis}	: Elektron Taşıma Aşırı Potansiyeli (V)
$\eta_{act_H_2}$	: Hidrojen Oksidasyon Aktivasyon Aşırı Potansiyeli (V)
$\eta_{act_O_2}$	: Oksijen İndirgenme Aktivasyon Aşırı Potansiyeli (V)
η_{act_Mo}	: Molibden Dopingli Anot Aktivasyon Aşırı Potansiyeli (V)
η_{act_W}	: Tungsten Dopingli Anot Aktivasyon Aşırı Potansiyeli (V)
η_{red_W}	: Tungsten Dopingli Oksijen Redüksiyon Aşırı Potansiyeli (V)
η_{red_Mo}	: Molibden Dopingli Oksijen Redüksiyon Aşırı Potansiyeli (V)
P_{Mo}	: Molibden Dopingli Sistemin Güç Yoğunluğu (W/m ²)
P_W	: Tungsten Dopingli Sistemin Güç Yoğunluğu (W/m ²)
J_{max_Mo}	: Molibden Dopingli Elektrot için Maksimum Akım Yoğunluğu (A/m ²)
J_{max_W}	: Tungsten Dopingli Elektrot için Maksimum Akım Yoğunluğu (A/m ²)
$\phi_{H_2_Mo}$	: Molibden Dopingli Yüzey için Hidrojen Mol Fraksiyonu
$\phi_{H_2_W}$	: Tungsten Dopingli Yüzey için Hidrojen Mol Fraksiyonu
$\phi_{O_2_Mo}$	: Molibden Dopingli Yüzey için Oksijen Mol Fraksiyonu
$\phi_{O_2_W}$	: Tungsten Dopingli Yüzey için Oksijen Mol Fraksiyonu
$u_{H_2_Mo}$	: Molibden Dopingli Yüzeyde Hidrojen Hız Büyüklüğü (m/s)
$u_{H_2_W}$	: Tungsten Dopingli Yüzeyde Hidrojen Hız Büyüklüğü (m/s)
$P_{H_2_Mo}$	: Molibden Dopingli Yüzeyde Hidrojen Basıncı (Pa)
$P_{H_2_W}$	: Tungsten Dopingli Yüzeyde Hidrojen Basıncı (Pa)
σ_{vm_Pt}	: Platinyum Kaplamalı Yüzeyde Von Mises Gerilmesi (N/m ²)
σ_{vm_PtMo}	: Molibden Dopingi Uygulanmış Platinyum Kaplamalı Yüzeyde Von Mises Gerilmesi (N/m ²)
ϵ_{Pt}	: Platinyum Kaplamalı Yüzeyde Gerinim
ϵ_{PtMo}	: Molibden Dopingli Platinyum Kaplamalı Yüzeyde Gerinim
u_{max_PtMo}	: Molibden Dopingli Platinyum Kaplamalı Yüzeyde Maksimum Yer Değiştirme (m)
T_{Pt}	: Platinyum Kaplamalı Yüzeyin Sıcaklığı (K)

T_{PtMo}	: Molibden Dopingli Platinyum Kaplamalı Yüzeyin Sıcaklığı (K)
λ_{PtMo}	: Molibden Dopingli Platinyum Kaplamalı Yüzeyin Termal İletkenliği (W/m·K)
E_{norm_Pt}	: Platinyum Kaplamalı Yüzeyin Elektrik Alan Normu (V/m)
E_{norm_PtMo}	: Molibden Dopingli Platinyum Kaplamalı Yüzeyin Elektrik Alan Normu (V/m)
ρ_{elec_PtMo}	: Molibden Dopingli Platinyum Kaplamalı Yüzeyin Elektriksel Direnç ($\Omega \cdot m$)
H_2	: Hidrojen gazı
H^+	: Hidrojen iyonu
e^-	: Elektron
O_2	: Oksijen
H_2O	: Su
T	: Sıcaklık
$^{\circ}$	: Derece
C	: Santigrat derece
$\%$	: Yüzde oranı
kW	: Kilowatt
F	: Faraday sabiti (96485 C/mol)
n	: Elektrokimyasal reaksiyon başına katılan elektronların sayısı
G	: Gibbs enerjisi
ΔG	: Gibbs serbest enerjisi değişimi (J/mol)
E_{ernst}	: Hücre gerilimi (V)
ΔH	: Reaksiyonun entalpi değişimi (J/mol)
T	: Mutlak sıcaklık (K)
ΔS	: Entropi değişimi (J/mol·K)
E_0	: Termodinamik voltaj
E	: Hücrenin gerçek voltajı (V)
R	: Evrensel gaz sabiti (8.314 J/mol·K)
I	: Akım
V	: Gerilim
S	: Siemens
S/cm	: Elektrotun iyonik iletkenliği
T_g	: Cam geçiş sıcaklığı
U_H	: Isıtma gerilimi

HHV	: Yüksek ısı değeri
LHV	: Düşük ısı değeri
P	: Girenlerin ve ürünlerin kısmi basınçları (atm)
η_a	: Aktivasyon polarizasyonu (V)
α	: Elektron transfer katsayısı
i	: Uygulanan akım yoğunluğu (A/cm ²)
i_o	: Değişim akımı yoğunluğu (A/cm ²)
η_o	: Ohmik polarizasyon kaybı (V)
R	: Toplam iç direnç ($\Omega \cdot \text{cm}^2$)
η_a	: Konsantrasyon polarizasyonu kaybı (V)
i_l	: Sınır akım yoğunluğu (A/cm ²)
Wele	: Elektriksel iş çıkışı
LHV _{H2}	: Hidrojenin alt ısı değeri
m'_{H2}	: Kütle akım miktarı
ΔP	: Üretilen elektrik gücü
ΔH_{fuel}	: Yakıtın entalpi oluşumu veya termal enerji talebi
Uf	: Hidrojenin yakıt olarak kullanımı

1. GİRİŞ

Enerji, sürdürülebilir ekonomik kalkınmayı sağlamak ve toplumların yaşam kalitesini artırmak için en önemli koşullardan biridir [1]. Teknolojik ve endüstriyel gelişmeler dünya genelinde hızla artış göstererek temiz, güvenli, uygun maliyetli ve sürdürülebilir enerji kaynaklarının kullanımını kaçınılmaz hale getirmiştir [2, 3]. Ayrıca, fosil yakıtların iklim değişikliği üzerindeki olumsuz etkileri araştırmacıları temiz, uygun maliyetli, yüksek verimli, güvenli ve sürdürülebilir enerji kaynakları bulmaya yönelik çalışmalara yönlendirmiştir [4-6].

Bu bağlamda, yakıt pilleri, doğrudan kimyasal enerjiyi elektrik enerjisine dönüştürebilen sistemler olarak dikkat çekmektedir. Yüksek verimlilikleri, sessiz çalışma özellikleri ve zararlı gaz salınımını minimize eden yapıları sayesinde hem taşınabilir sistemlerde hem de sabit enerji üretim ünitelerinde kullanım potansiyeline sahiptir. Özellikle hidrojen gibi çevre dostu yakıtlarla çalışabilmeleri, bu teknolojileri fosil yakıtlara kıyasla daha temiz bir alternatif haline getirmektedir.

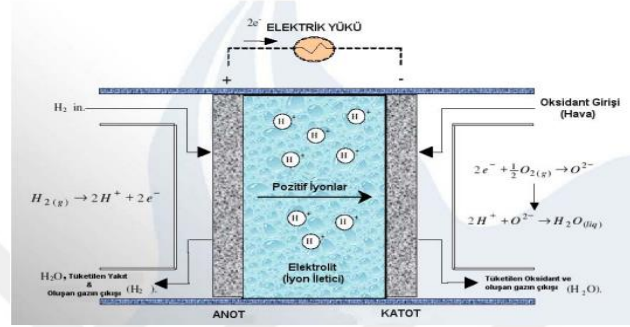
Yakıt pili teknolojisi, 19. yüzyıldan günümüze kadar birçok dönüşüm ve gelişim göstermiştir. Tablo 1.1’de detaylı olarak bu teknolojinin tarihsel gelişimi verilmiştir [7].

Tablo 1.1. Yakıt pillerinin tarihsel gelişimi

Yıl	Olay/Gelişme
1839	Sir William R.Grove, ilk yakıt pili fikrini geliştirerek yakıt pili teknolojisini keşfetti.
1889	Ludwig Mond ve Charles Lander, "yakıt pili" terimini ilk kez kullandı.
1920'ler	Gaz-difüzyon elektrotlarının düşük sıcaklıklı işlemler için önemli olduğu anlaşıldı.
1932	Francis Bacon, gözenekli metal elektrotlu alkali yakıt pili sistemini icat etti.
1960'lar	NASA, Apollo ve Space Shuttle projelerinde yakıt pillerini kullanmaya başladı.
1968	Francis Bacon'un geliştirdiği hücre sistemi, NASA'nın Ay'a iniş misyonunda kullanıldı.
1970	K.Kordesch, hidrojen yakıt hücresiyle çalışan hibrit bir otomobil üretti.
1970'ler	Fosforik asitli yakıt pili sistemleri geliştirildi, hidrokarbonlar üzerinde çalışmalar hızlandı.
1990'lar	Membranlı yakıt hücresi sistemleri geliştirildi; katalizör araştırmaları ile yüksek güç yoğunluğuna ulaşıldı.

Kimyasal enerjiyi doğrudan elektrik enerjisine dönüştüren yakıt pillerinde temel olarak anot, katot ve iyon iletkenliği sağlayan bir elektrolit bulunmaktadır. Şekil 1.1’de genel gösterimi verilmiştir. Yakıt pillerinin türüne bağlı olarak, örneğin Proton Değişim Membranlı Yakıt Pili (PDMYP) sistemlerinde, anot tarafında hidrojen gazı (H_2) elektrokimyasal reaksiyona girerek protonlara (H^+) ve elektronlara (e^-) ayrışmaktadır.

Açığa çıkan elektronlar, dış devre üzerinden hareket ederek elektrik yükü oluşturur ve bir elektrik akımı üretir. Aynı zamanda, protonlar elektrolit aracılığıyla katoda taşınır. Katot tarafında ise, oksijen molekülleri (O_2) indirgenerek protonlarla birleşir ve su (H_2O) oluşumu sağlanır. Bu süreç, sürekli bir yakıt beslemesi ile sürdürülebilir enerji üretimi sağlar. Yakıt pilleri, bu doğrudan dönüşüm sayesinde Carnot çevrimi sınırlarına tabi olmadan yüksek verimlilikle çalışabilmektedir [8, 9].



Şekil 1.1. Yakıt pillerinin genel gösterimi [218]

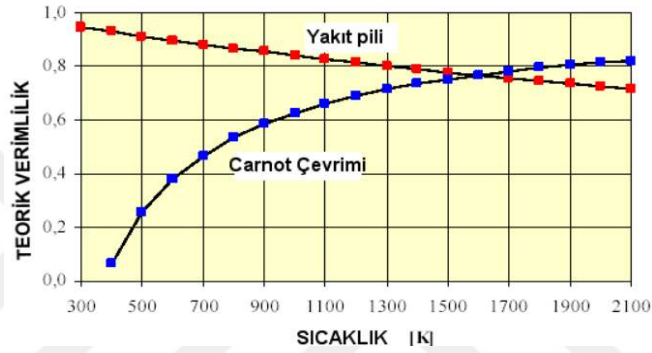
Yakıt hücreleri, hidrojen ve metanol gibi farklı yakıtlarla çalışabildiğinden yakıt esnekliği sunar ve yan ürün olarak üretilen atık ısıya geri kazanımı ile enerji verimliliğini artırır. Katı atık problemi yaratmamaları, çevresel etkilerini minimize ederken, hızlı yük takibi ve ani yük değişimlerine hızlı yanıt verme özellikleri ile modern enerji taleplerini karşılar. Modüler ve taşınabilir yapıları, sistemlerin kolay taşınmasına ve genişletilmesine imkan tanır. Yakıt hücreleri, hareketli parça içermemesi nedeniyle bakım gereksinimlerini azaltır, uzun ömürlüdür ve güvenilir bir çözüm sunar [8].

Yakıt pilleri, Carnot çevrimindeki sınırlamalara tabi olmadan yakıtları doğrudan elektrik enerjisine dönüştürebilen sistemlerdir. Geleneksel enerji üretim yöntemlerinde, yakıtların kimyasal enerjisi önce yanma reaksiyonlarıyla ısıya çevrilir, ardından bu ısı Rankine çevrimi gibi termodinamik süreçler aracılığıyla mekanik enerjiye dönüştürülür (Şekil 1.2). Ancak bu süreçte, Carnot çevriminin belirlediği verimlilik sınırları aşılmaz ve mekanik enerjinin jeneratörler aracılığıyla elektriğe dönüştürülmesi sırasında ek kayıplar meydana gelir. Şekil 1.3'te gösterilen grafikte, yakıt pilleri ile Carnot çevrimine dayalı sistemler arasındaki verim farkı açıkça görülmektedir. Yakıt pilleri ise bu ara adımları ortadan kaldırarak kimyasal enerjiyi doğrudan elektrik enerjisine çevirdiği için çok daha yüksek verimlilik sunar ve termodinamik kayıpları önemli ölçüde azaltır [9, 10]. Geleneksel enerji üretim sistemleri; enerji dönüşüm aşamalarındaki verim kayıpları, büyük ölçekli ve karmaşık makine sistemleri gereksinimi ve çevresel etkileriyle öne

çıkarken, yakıt hücreleri bu olumsuzlukları en aza indirerek daha verimli ve çevre dostu bir alternatif sunarlar. Bu özellikleri sayesinde yakıt pilleri, gelecekte sürdürülebilir enerji sistemlerinde önemli bir rol oynamaya adaydır [9, 10].



Şekil 1.2. Geleneksel teknoloji ve yakıt pillerinde enerji dönüşümü [219]



Şekil 1.3. Yakıt pili ve Carnot çevriminin verim karşılaştırması [220]

Yakıt pilleri üretim ve araştırma maliyetlerinin yüksek olması, bu teknolojinin geliştirilmesini zorlaştırmaktadır [11]. Yakıt hücreleri, enerji üretim endüstrisi için henüz yeni bir teknoloji olduğundan sektörde yaygın olarak kullanılmamaktadır [9]. Hidrojen ve metanol gibi yakıtların dağıtım altyapısındaki eksiklikler kullanımını kısıtlamaktadır [10]. Ayrıca, teknolojik yeniliklerin geliştirilmesi için yüksek teknoloji yatırımları gerekmekte ve kullanılan malzemelere bağlı olarak ömür süresi belirsizlikleri ortaya çıkmaktadır. Seri üretim süreçlerinin yetersizliği, yakıt hücrelerinin geniş çaplı uygulanmasını sınırlandırmaktadır [11]. Tüm bu zorluklara rağmen, yakıt hücreleri, gelecekte sürdürülebilir enerji üretimi için önemli bir potansiyele sahiptir.

1.1. Yakıt Pillerinin Sınıflandırılması

Yakıt pilleri, elektrolit türü ve kullanılan yakıtı bağlı olarak farklı kategorilere ayrılmaktadır. Genel olarak, altı ana yakıt pili türü bulunmaktadır [12]:

- Proton Değişim Membranlı Yakıt Pili (PDMYP)
- Katı Oksit Yakıt Pili (KOYP)
- Fosforik Asit Yakıt Pili (FAYP)

- Eritilmiş Karbonat Yakıt Pili (EKYP)
- Alkalın Yakıt Pili (AYP)
- Doğrudan Metanol Yakıt Pili (DMYP)

Her bir yakıt pili türü, çalışma sıcaklığı, elektrolit malzemesi, verimlilik ve uygulama alanlarına göre farklılık göstermektedir [12].

Yakıt pili türlerine göre anot ve katot reaksiyonları Tablo 1.2’de; elektrolit türü, yük taşıyıcısı, katalizör türü, çalışma sıcaklığı, yakıt türleri, ana hücre bileşenleri, reformasyon ve verimi Tablo 1.3’te verilmiştir. Yakıt pillerinde elde edilen güce ve kullanım alanlarına göre sınıflandırılması Tablo 1.4’te verilmiştir.

Tablo 1.2. Yakıt pillerindeki elektrokimyasal reaksiyonlar [226]

Yakıt Pili	Anot Reaksiyonu	Katot Reaksiyonu
Proton Değişim Membranlı ve Fosforik Asitli (PDMYP, FAYP)	$H_2 \rightarrow 2H^+ + 2e^-$	$\frac{1}{2} O_2 + 2H^+ + 2e^- \rightarrow H_2O$
Alkalın Yakıt Pili (AYP)	$H_2 + 2(OH)^- \rightarrow 2H_2O + 2e^-$	$\frac{1}{2} O_2 + H_2O + 2e^- \rightarrow 2(OH)^-$
Eritilmiş Karbonat (MCFC)	$H_2 + CO_3^{2-} \rightarrow H_2O + CO_2 + 2e^-$ $CO + CO_3^{2-} \rightarrow 2CO_2 + 2e^-$	$\frac{1}{2} O_2 + CO_2 + 2e^- \rightarrow CO_3^{2-}$
Katı Oksit Yakıt Pili (KOYP)	$H_2 + O^{2-} \rightarrow H_2O + 2e^-$ $CO + O^{2-} \rightarrow CO_2 + 2e^-$ $CH_4 + 4O^{2-} \rightarrow 2H_2O + CO_2 + 8e^-$	$\frac{1}{2} O_2 + 2e^- \rightarrow O^{2-}$
Doğrudan Metanol Yakıt Pili (DMYP)	$CH_3OH + H_2O \rightarrow CO_2 + 6H^+ + 6e^-$	$\frac{3}{2} O_2 + 6H^+ + 6e^- \rightarrow 3H_2O$
CO - karbon monoksit, e^- - elektron, CO_2 - karbon dioksit, H^+ - hidrojen iyonu, CO_3^{2-} karbonat iyonu, H_2O – su, O_2 - oksijen, OH^- - hidroksil iyonu		

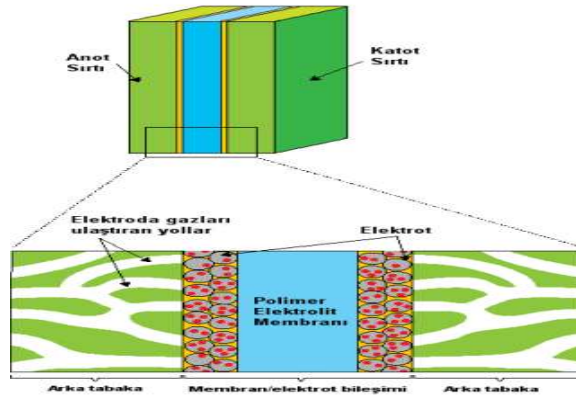
Tablo 1.3. Yakıt pillerinin özellikleri ve performansı

Yakıt Pili	Elektrolit	Yük Taşıyıcı	Katalizör	Çalışma Sıcaklığı (°C)	Yakıt Türleri	Ana Hücre Bileşen	Reformasyon	Verim
PDMYP	Polimerik membran	H^+	Platin	40-80	Saf H_2 , CO bağımsız	Karbon bazlı	Evet	%35-45
AYP	Potasyum hidroksit	OH^-	Platin	65-220	Saf H_2 , CO bağımsız	Grafit bazlı	Evet	%40
FAYP	Fosforik asit	H^+	Platin	150-205	Yaklaşık saf H_2	Grafit bazlı	Evet	%40
EKYP	Erimiş karbonat	CO_3^{2-}	Ni/ Elektrot malzemesi	650	Esneklik	Paslanmaz Çelik	Hayır	>%50
KOYP	Seramik	O^{2-}/H^+	Perovskitler/Elektrot malzemesi	600-1000	Esneklik	Seramik	Hayır	>%65

Tablo 1.4. Yakıt pillerinde elde edilen güce ve kullanım alanlarına göre sınıflandırılması

Yakıt Pili Türü	Elde Edilen Güç Aralığı	Kullanım Alanları
Proton Değişim Membranlı Yakıt Pili (PDMYP)	1 kW - 100 kW	Taşıtlar, taşınabilir cihazlar, küçük ölçekli enerji sistemleri [12, 13]
Katı Oksit Yakıt Pili (KOYP)	1 kW - 2 MW	Elektrik santralleri, ev tipi kojenerasyon, büyük ölçekli endüstriyel uygulamalar [14, 15]
Alkali Yakıt Pili (AYP)	10 kW - 100 kW	Uzay uygulamaları, askeri ekipmanlar, taşınabilir enerji sistemleri [12, 15]
Eritilmiş Karbonat Yakıt Pili (EKYP)	100 kW - 3 MW	Elektrik santralleri, kojenerasyon sistemleri, büyük ölçekli ticari uygulamalar [13, 16]
Fosforik Asit Yakıt Pili (FAYP)	50 kW - 1 MW	Orta ölçekli ticari enerji üretimi, endüstriyel kojenerasyon sistemleri [12, 13]
Doğrudan Metanol Yakıt Pili (DMYP)	1 W - 1 kW	Taşınabilir elektronik cihazlar, dizüstü bilgisayarlar, şarj cihazları [14, 15]

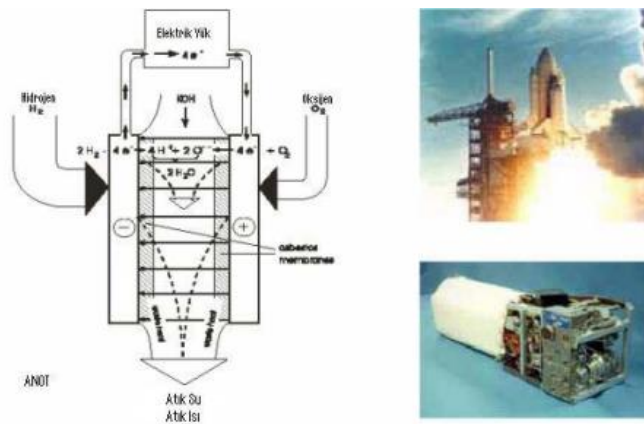
Proton değişim membranlı yakıt pilleri (PEMYP), elektrolit olarak proton geçirgen polimer membran kullanılan düşük sıcaklıkta (40-80 °C) çalışan ve özellikle taşınabilir uygulamalarda tercih edilen yakıt pili türüdür . Yük taşıyıcı olarak H^+ iyonları kullanılır ve elektrotlarda platin katalizör bulunur. Hidrojen yakıtı ile çalışan bu sistem, karbon bazlı hücre bileşenleri içerir ve reformasyon sürecine ihtiyaç duyar. Verimi %35-45 arasında değişmektedir. Genellikle taşıtlar, taşınabilir cihazlar ve küçük ölçekli enerji sistemlerinde kullanılmaktadır. Anot reaksiyonu, hidrojenin protonlara ve elektronlara ayrışmasıyla başlarken, katotta oksijen iyonlarının suya dönüşmesiyle enerji üretimi sağlanmaktadır [12]. PDMYP'nin avantajları arasında hızlı başlayabilme özelliği, düşük çalışma sıcaklığı ve yüksek güç yoğunluğu yer alırken, platin gibi pahalı katalizörlere ihtiyaç duyması ve yakıt saflığı gereksinimi en büyük dezavantajlarındandır (Şekil 1.4) [17].



Şekil 1.4. Polimer elektrolit membranlı yakıt pilinin yapısı [221]

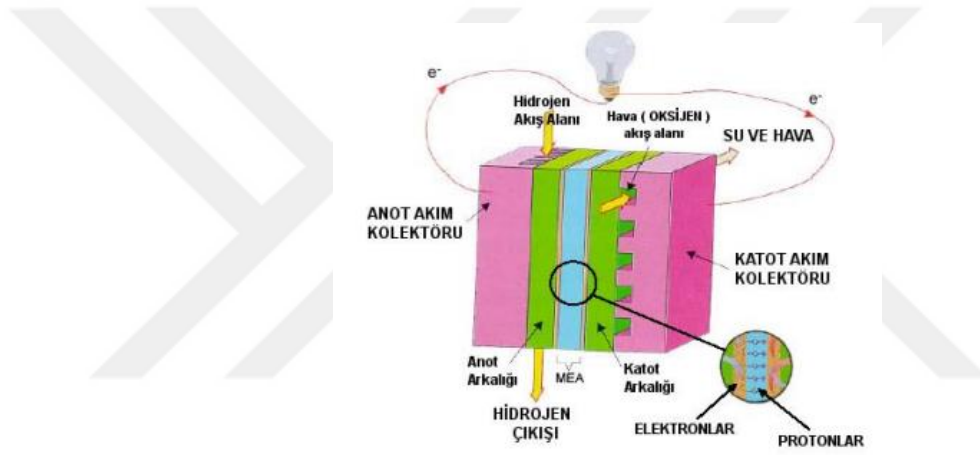
Katı oksit yakıt pilleri (KOYP), seramik bazlı elektrolitler (perovskitler) kullanarak 600-1000 °C gibi yüksek sıcaklıklarda çalışan bir yakıt pili türüdür [13]. KOYP’de yük taşıyıcı olarak O^{2-} iyonları kullanılır ve elektrot malzemesi olarak perovskitler tercih edilir [14]. Hidrojen, karbon monoksit ve hidrokarbonlar gibi farklı yakıt türleriyle çalışabilen KOYP’leri, esnek yakıt kullanımına sahiptir ve genellikle elektrik santralleri, ev tipi kojenerasyon ve büyük ölçekli endüstriyel uygulamalarda kullanılır. Yüksek sıcaklık sayesinde pahalı katalizör ihtiyacını ortadan kaldırırken, aynı zamanda yüksek verimlilik ($> \%65$) sağlar [15]. Anot tarafında hidrojenin oksit iyonları ile reaksiyona girerek su ve elektron üretmesi, katotta ise oksijen moleküllerinin oksit iyonlarına indirgenmesi temel elektrokimyasal reaksiyonları oluşturur [12]. KOYP’nin en büyük avantajları yüksek verimlilik ve yakıt esnekliği iken, yüksek çalışma sıcaklığı nedeniyle uzun ısınma süresi ve malzeme dayanıklılığı gibi zorluklar içermektedir [17].

Alkalın yakıt pilleri (AYP), elektrolit olarak potasyum hidroksit (KOH) çözeltisi kullanan ve 65-220 °C arasında çalışabilen bir yakıt pili türüdür [18]. AYP’de yük taşıyıcı olarak OH^- iyonları bulunur ve platin katalizör kullanılır. Yakıt olarak hidrojen ve oksijen ile çalıştığında yüksek verimlilik ($\%40$) sağlar. Anot tarafında hidrojen, hidroksit iyonları ile reaksiyona girerek su ve elektron üretirken, katotta oksijen, su ve elektronlar ile reaksiyona girerek hidroksit iyonlarını oluşturur. AYP, özellikle uzay uygulamaları, askeri ekipmanlar ve taşınabilir enerji sistemlerinde kullanılmaktadır [12]. En büyük dezavantajlarından biri, elektrolitin karbon dioksit ile reaksiyona girerek karbonat oluşturması ve sistemin verimliliğini düşürmesi nedeniyle yüksek yakıt saflığı gerektirmesidir (Şekil 1.5) [19].



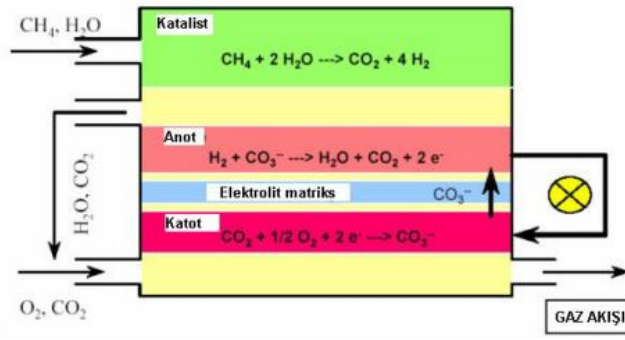
Şekil 1.5. Alkali yakıt pilinin yapısı ve uzay araçlarındaki uygulaması [222]

Fosforik asit yakıt pilleri (FAYP), elektrolit olarak sıvı fosforik asit kullanan ve 150-205 °C sıcaklık aralığında çalışan bir yakıt pili türüdür [20]. Yük taşıyıcı olarak H^+ iyonları kullanılır ve elektrotlarda platin katalizör bulunur [12]. Yaklaşık saf hidrojen ile çalışan bu sistemin verimi %40 civarındadır [17]. FAYP'nin anot reaksiyonu, hidrojenin protonlara ve elektronlara ayrışması, katotta ise oksijen ile birleşerek su oluşturması ile gerçekleşir. Uzun ömürlü olması ve ticari ölçekte enerji üretimi için uygun olması nedeniyle orta ölçekli ticari enerji üretimi ve endüstriyel kojenerasyon sistemlerinde kullanılmaktadır [12]. Ancak, platin katalizör gereksinimi nedeniyle maliyetleri yüksektir ve düşük güç yoğunluğu, taşıtlar gibi yüksek güç gereksinimi olan sistemler için uygun değildir [21] (Şekil 1.6).

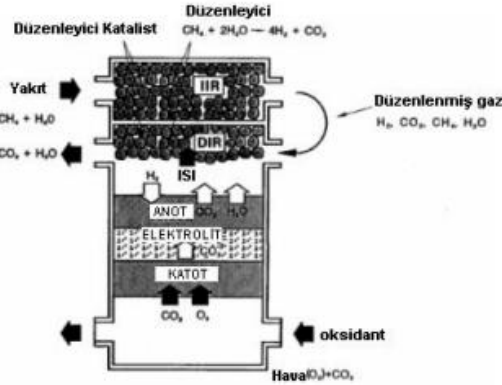


Şekil 1.6. Fosforik asit yakıt pilinin yapısı [223]

Eritilmiş karbonat yakıt pilleri (EKYP), elektrolit olarak erimiş karbonat tuzlarını kullanarak 600-700 °C sıcaklıklarda çalışır . Yük taşıyıcı olarak CO_3^{2-} iyonları kullanılır ve elektrot malzemesi olarak nikel bazlı bileşenler tercih edilir. EKYP, doğrudan hidrokarbon yakıtları kullanabilmesi sayesinde yakıt esnekliği sağlarken, yüksek sıcaklıklarda çalışması nedeniyle pahalı katalizör ihtiyacını ortadan kaldırır [22]. Hidrojen veya karbon monoksit gibi yakıtlar kullanılarak gerçekleştirilen anot reaksiyonu sonucunda su ve karbon dioksit oluşur, katotta ise oksijen iyonları ile karbon dioksit indirgenerek karbonat iyonları oluşturulur [12]. Verimi %50'den fazladır ve elektrik santralleri, kojenerasyon sistemleri ve büyük ölçekli ticari uygulamalarda kullanılmaktadır [27]. Ancak yüksek çalışma sıcaklığı, hücre bileşenlerinin korozyon riskini artırır ve uzun ömürlü kullanım için gelişmiş malzemeler gerektirir (Şekil 1.7 ve 1.8) [23].



Şekil 1.7. Erimiş karbonatlı yakıt pilinin yapısı [223]



Şekil 1.8. Erimiş karbonatlı yakıt pilinin çalışma şekli [224]

Doğrudan metanol yakıt pili (DMYP), metanolün doğrudan anotta oksitlenerek elektrik enerjisine dönüştürüldüğü bir yakıt pili türüdür. Geleneksel hidrojen bazlı yakıt pillerinden farklı olarak, DMYP'lerinde yakıt olarak metanol (CH_3OH) kullanılır ve hidrojen gazı üretme ihtiyacı ortadan kalkar. Bu sistemlerde, metanol ve su karışımı doğrudan anot elektroduna beslenir, burada elektrokimyasal reaksiyon gerçekleşerek karbon dioksit (CO_2), protonlar (H^+) ve elektronlar (e^-) üretilir [24]. Bu reaksiyonlar sonucunda elektrik akımı üretilir ve sistemde su ve karbon dioksit yan ürün olarak ortaya çıkar.

DMYP'ler genellikle Proton Değişim Membranı (PEM) bazlı sistemlerdir, ancak daha düşük sıcaklıklarda ($50\text{-}120\text{ }^\circ\text{C}$) çalışabilmesi, doğrudan sıvı yakıt kullanımı ve kompakt yapıya sahip olması nedeniyle taşınabilir enerji uygulamalarında yaygın olarak tercih edilmektedir [12]. DMYP'lerin avantajlarında yakıtın sıvı halde olması nedeniyle taşınmasının ve depolanmasının kolay olması, hidrojen gazı kullanımı gerektirmemesi ve daha düşük sıcaklıklarda çalışabilmesidir [12].

Ancak, bu sistemlerin karbon dioksit emisyonu üretmesi, metanolün anot üzerindeki yavaş oksidasyonu nedeniyle düşük güç yoğunluğuna sahip olması ve metanol

[illegible]

Yakıt Pillerinin Hücre Modülü ve Çalışma Prensipleri

Yakıt pili hücresinin temel bileşenleri arasında, reaksiyon gazlarını elektrot yüzeyine homojen olarak dağıtan ve aynı zamanda hücreye mekanik dayanım kazandıran bir plaka bulunmaktadır [12]. Ayrıca, sıvı elektrolit kullanan yakıt pillerinde, elektrolitin zamanla kaybolması veya tükenmesi durumunda yenilenmesini sağlayan bir elektrolit deposu da önemli bir bileşen olarak yer almaktadır [29]. Bunun yanı sıra, akım kolektörleri, elektrotlar ile ara bağlantılar arasındaki elektrik akımının verimli bir şekilde iletilmesini sağlamak amacıyla tasarlanmıştır [12]. Bu bileşenlerin her biri, yakıt pili hücresinin elektrokimyasal performansını artırmada ve uzun ömürlü bir çalışma sağlayabilmesinde kritik öneme sahiptir [18].

9

tüketilmektedir [12]. Elektrotlarda meydana gelen elektrokimyasal reaksiyonlar, pillerde olduğu gibi elektrik akımının oluşmasını sağlar [30]. Yakıt pilleri, konvansiyonel piller gibi çalışsa da aralarındaki temel fark, birincil pillerin içlerindeki kimyasal bittiğinde işlevlerini yitirmesi ve atılması, ikincil pillerin ise yeniden şarj edilebilir olmasıdır [20]. Ancak, şarj edilebilir piller zamanla verimliliklerini kaybederken, yakıt pilleri sürekli olarak yakıt beslenmesiyle enerji üretmeye devam edebilirler [17]. Bir yakıt pilinde gaz yakıt anoda (negatif elektrot), oksitleyici (oksijen/hava) ise katoda (pozitif elektrot) sürekli olarak beslenmektedir [31]. Yakıt pillerinde, yakıt ile oksijen arasındaki indirgenme/yükseltgenme reaksiyonları sonucu elektrik akımı (doğru akım) ve ısı oluşmaktadır [13]. Katotta protonlar oksijenle birleşerek, kullanılan yakıtın türüne bağlı olarak yalnızca su buharı ve CO₂ üretmektedir [32].

2. KATI OKSİT YAKIT HÜCRELERİ (KOYP)

Katı oksit yakıt hücreleri (KOYP), yüksek sıcaklıklarda (600-1000 °C) çalışan ve dünya çapında geliştirilen en verimli yakıt hücreleri arasında kabul edilen seramik tabanlı yakıt hücreleridir [13]. KOYP'lerinde katı elektrolit, anot ve katot adı verilen iki gözenekli elektrot arasına yerleştirilmiştir. Yakıt (H₂) anot tarafından sağlanırken, oksijen (hava) katot tarafından hücreye alınır. KOYP'nin çalışma prensibi, yakıtın oksidasyonu ve oksijenin indirgenmesi üzerine kuruludur. Bu reaksiyonlar sırasıyla anot ve katot elektrotlarında gerçekleşir [27].

Özellikle, oksijen gazı katot/elektrolit arayüzüne girdiğinde, oksijen atomları katottaki serbest elektronlarla reaksiyona girerek yüklü oksijen iyonları oluşturur. Bu oksijen iyonları elektrolit boyunca anoda doğru hareket eder ve burada oksitlenmiş yakıtla reaksiyona girer [28]. Bu reaksiyon sonucunda elektronlar serbest kalır ve yan ürün olarak saf su üretilir (Şekil 2.1). Elektronların dış devreden geçişi elektrik enerjisi üretirken, su ise çıkıştan uzaklaştırılır. Hücrede kullanılan malzemelerin arayüzleri kimyasal ve mekanik olarak uyumlu ve dayanıklı olmalıdır [17]. Ayrıca, KOYP'nin yüksek çalışma sıcaklığı nedeniyle malzemelerin uzun süreli çalışmada yüksek sıcaklık direncine sahip olması gereklidir [16].

Anot ve katot malzemeleri, aynı zamanda yüzey kimyasal reaksiyonlarını artırarak ve redoks reaksiyonları sırasında serbest kalan elektrik yüklerini toplamak için iletken bir yol oluşturmalıdır [30]. Bu amaçla, sıcaklık dayanımlı metalik ızgaralar genellikle elektrot olarak kullanılarak yüklerin anottan katoda seçilen yük üzerinden aktarımı sağlanır [31]. Bununla birlikte, tek bir KOYP sınırlı miktarda elektrik enerjisi üretebilir. Daha fazla enerji üretmek için birden fazla KOYP, seri veya paralel bağlantılarla birleştirilir. Bu bağlantılar, hücreler arasında elektriksel bağlantı sağlamak ve yapıya mekanik stabilite kazandırmak amacıyla gerçekleştirilir [32].

KOYP'leri, anoda çeşitli yakıtların (hidrojen, hidrokarbonlar, biyogaz ve hatta amonyak) enjeksiyonu ile çalıştırılabilir. Ayrıca bu cihazlar ters modda çalışarak, elektrik enerjisini kimyasal enerjiye dönüştürme (örneğin elektroliz modu) yeteneğine sahiptir [33]. Bu çok yönlülük, KOYP'leri diğer yakıt hücrelerine kıyasla daha umut verici bir teknoloji haline getirmektedir [34]. KOYP sistemlerinde gerçekleşen temel elektrokimyasal reaksiyon Denklem (2.1)'de verilmiştir:



Denklem 2.1’de verilen reaksiyon, elektrik yük transferini vurgulamak için iki yarı reaksiyona ayrılabilir. Katotta, moleküler oksijen iyonlaşarak O^{2-} iyonlarını indirgenir (Denklem 2.2):



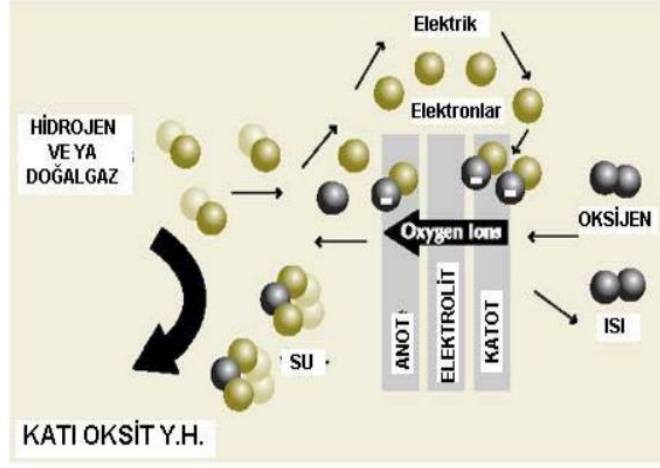
Oluşan oksijen iyonları katot tarafından toplanır ve seramik elektrolit malzemesi aracılığıyla anoda taşınır. Anotta, bir hidrojen molekülü bir oksijen iyonu ile reaksiyona girerek su molekülü oluşturur ve bir çift elektron serbest bırakır (Denklem 2.3):



Hidrojen, yalnızca suyun yan ürün olduğu için emisyonları neredeyse sıfıra indiren en verimli yakıttır. Ancak, saf hidrojenin üretimi, depolanması ve taşınmasındaki zorluklar nedeniyle yaygın olarak kullanılmamaktadır. Saf hidrojenin üretimi için basit yöntemlerinden biri, suyun elektrolizidir ve bu işlem KOYP’nin ters modunda da gerçekleştirilebilir [35]. Ancak, saf hidrojenin depolanması hem tehlikeli hem de maliyetlidir [36].

KOYP enerji jeneratörlerinde tipik olarak kullanılan yakıtlar arasında hidrojen (H_2), metan (CH_4), karbondioksit (CO_2) ve su buharı (H_2O) karışımları bulunur. Bu karışımların bileşimlerine bağlı olarak bazı yakıtlar biyohidrojen, biyogaz ve biyobütan olarak adlandırılır ve bunlar genellikle gıda ve diğer organik atıkların anaerobik sindirimi ile elde edilir [37, 38].

Elektriksel açıdan bakıldığında, ideal bir KOYP sonsuz miktarda elektrik akımı sağlayabilecek sabit bir gerilim kaynağı olarak modellenebilir. Ancak, gerçek bir KOYP’nin akım - gerilim karakteristiği bu ideal durumdan önemli ölçüde farklıdır. Tek bir hücrenin açık devre potansiyeli genellikle 1–1,2 V arasında olup, bir dış yük bağlandığında kolayca düşer. Gerilim düşüşü, hücreyi oluşturan çeşitli bileşenlerden kaynaklanan iç dirençlere bağlıdır ve "Ohmik Polarizasyon Bölgesi" olarak adlandırılan doğrusal bir bağımlılık gösterir. Ayrıca, düşük ve çok yüksek akım değerlerinde, kimyasal reaksiyonların etkinliği ve gaz değişim verimliliği sırasıyla sınırlandırıcı faktörlerdir. Bu kayıplar, KOYP'nin genel elektriksel verimliliğini etkiler ve hücrenin uygun bir yük ile optimum bir rejimde çalıştırılması gereklidir [13].



Şekil 2.1. Katı oksitli yakıt pili yapısı [226]

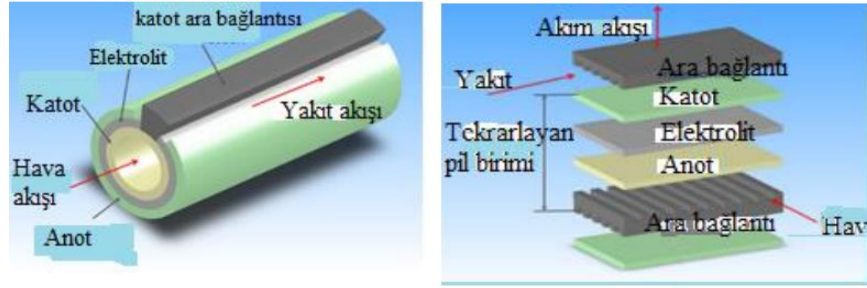
2.1. Katı Oksit Yakıt Türleri

Katı Oksit Yakıt Pilleri (KOYP) yüksek sıcaklıkta çalışan ve elektrolit olarak katı seramik oksit malzemeler içeren elektrokimyasal enerji dönüştürücüleridir [13]. KOYP'leri; tasarım yapılarına, çalışma sıcaklıklarına, yakıt besleme yöntemlerine ve destek türlerine bağlı olarak farklı kategorilere ayrılmaktadır.

KOYP'leri yapısal olarak düzlemsel ve tübüler KOYP olmak üzere sınıflandırılır (Şekil 2.2).

Düzlemsel KOYP'leri, elektrot ve elektrolitlerin düz plakalar halinde istiflenmesiyle oluşturulan bir tasarıma sahiptir [39]. Hücreler, seramik veya metal ara bağlantılar ile birbirine bağlanarak istenen voltaj seviyelerine ulaşır. Yüksek güç yoğunluğu ve verimli elektrik üretimi sağlarlar ancak, ısı yönetimi zorlukları ve termal genleşme nedeniyle mekanik dayanıklılık sorunları oluşturabilir [40].

Tübüler KOYP'lerinde, elektrotlar ve elektrolitler silindirik veya boru şeklinde düzenlenmiştir. Bu tasarım, gaz akışkanlığı ve ısı yönetimi açısından avantaj sağlarken, üretim süreci daha karmaşık ve maliyetlidir [41]. Tübüler sistemlerde, yakıt ve oksitleyici gazlar hücrenin iç ve dış yüzeylerinde kontrollü olarak yönlendirilerek reaksiyon gerçekleştirilir. Uzun ömürlü ve kararlı çalışma koşulları sağlarken, hacim olarak daha fazla yer kaplaması dezavantaj oluşturmaktadır [42].



Şekil 2.2. Katı oksit yakıt pilinin farklı konfigürasyonları [227]

KOYP'leri çalışma sıcaklığına bağlı olarak üç ana kategoriye ayrılmaktadır: Yüksek, orta ve düşük sıcaklıklı KOYP'lerdir.

Yüksek sıcaklıklı KOYP'leri, 800–1000 °C gibi yüksek sıcaklıklarda çalışarak yakıt dönüşüm verimini artırır ve pahalı platin katalizör gereksinimini ortadan kaldırır [40]. Yüksek sıcaklık, hidrokarbon yakıtların doğrudan reformasyona uğramasına izin verir ancak, malzeme dayanıklılığı ve uzun ısıl süresi gibi mühendislik zorlukları oluşturur [22].

Orta sıcaklıklı KOYP'leri, 500–800 °C aralığında çalışarak termal gerilmeleri azaltır ve dayanıklılığı artırır [41]. Bu sistemlerde, perovskit ve zirkonya bazlı elektrolitler kullanılarak daha düşük sıcaklıkta yüksek iyon iletkenliği sağlanmaya çalışılmaktadır. Yüksek sıcaklıklı versiyonlara kıyasla daha uzun ömürlü ve ticari uygulamalara daha uygun hale gelmektedir [37].

Düşük sıcaklıklı KOYP'leri, gelişen malzeme teknolojileri sayesinde, 400–500 °C aralığında çalışabilen KOYP'ler geliştirilmiştir. Düşük sıcaklıklı KOYP'ler, kompakt tasarımlara ve hızlı başlatma özelliklerine sahip olmalarıyla özellikle taşınabilir uygulamalar ve küçük ölçekli enerji üretim sistemleri için uygundur [28]. Ancak, iyon iletkenliği düşük olduğu için genel performansı sınırlıdır ve bu alandaki araştırmalar devam etmektedir.

KOYP'ler kullanılan yakıt türüne ve çalışma prensibine göre doğrudan yakıt ve hibrid sistemli olmak üzere iki kategoriye ayrılır.

Doğrudan yakıtlı KOYP'leri, hidrojen, doğalgaz, biyogaz ve hidrokarbon bazlı yakıtları doğrudan kullanabilir ve reformasyon gerektirmeden çalışır [42]. Düşük maliyetli ve çevre dostu enerji sistemleri için önemli bir alternatiftir.

Hibrid sistemli KOYP'leri, yakıt hücreleri gaz türbinleri veya diğer enerji sistemleriyle kombine edilerek daha yüksek verimlilik sağlanır [43]. Bu sistemler, atık ısı geri kazanımıyla toplam verimi %80'in üzerine çıkarabilir.

Literatürde, Katı Oksit Yakıt Pilleri (KOYP) destek türlerine göre dört farklı hücre konfigürasyonuna ayrılmaktadır. Bu sınıflandırma, hücre yapısında anot, elektrolit, katot veya metal desteğinin temel taşıyıcı bileşen olarak kullanılıp kullanılmadığına dayanmaktadır [31].

Anot destekli KOYP’lerinde, anodun kalın yapısıyla hem elektrot görevi görür hem de mekanik taşıyıcı rolü üstlenir. İnce elektrolit katmanı ise yüksek iyon iletkenliği sayesinde yakıtın elektrokimyasal tepkimeye daha hızlı katılmasını sağlar [32]. Bu yapı düşük iç direnç ve hızlı reaksiyon kinetiği sunarak orta sıcaklıkta çalışan KOYP’ler için uygun bir seçenektir [37].

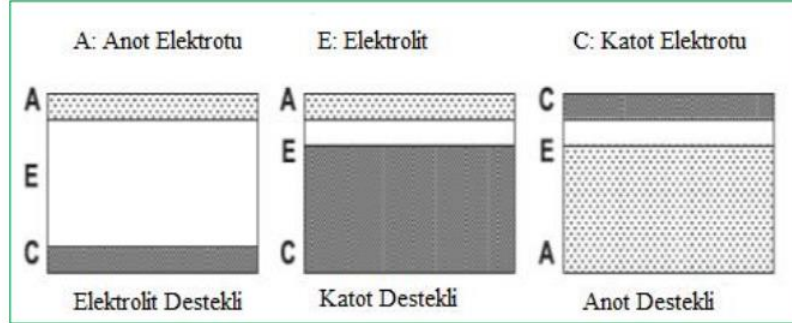
Elektrolit destekli KOYP’lerinde, kalın bir elektrolit tabakası mekanik taşıyıcı görevi görmektedir. Yüksek sıcaklıklarda (900–1000 °C) daha kararlı bir çalışma sunar, ancak elektrolitin kalın olması nedeniyle iyon iletkenliği düşük ve iç direnç daha yüksektir [13]. Yüksek sıcaklık gereksinimi, sistemin daha uzun ömürlü olmasını sağlar. Malzeme seçiminde yüksek sıcaklıklara dayanıklı seramikler kullanılmasını zorunlu kılar [14].

Katot destekli KOYP’lerinde, kalın katot yapısı mekanik destek sağlarken, elektrolit ve anot oldukça ince tutulur. Katot destekli yapılar, yüksek oksijen iletkenliği ve düşük polarizasyon kaybı sunmaları nedeniyle oksijen indirgeme reaksiyonlarının hızlandırılması gereken uygulamalarda tercih edilmektedir [44]. Buna karşın, katot destekli sistemlerin ticari uygulamaları sınırlıdır ve genellikle deneysel çalışmalarda kullanılmaktadır [45].

Metal destekli KOYP’lerinde, hücrenin taşıyıcı yapısı seramik yerine metal tabanlı malzemelerden oluşmaktadır. Bu konfigürasyon, mekanik dayanıklılığı artırırken düşük sıcaklıklarda (400–600°C) çalışma potansiyeli sunar [49]. Metal destekli yapılar, hızlı başlatma süreleri ve termal dayanım avantajları nedeniyle taşınabilir ve otomotiv yakıt hücreleri için uygun bir alternatif olarak değerlendirilmektedir [47]. Ancak, metallerin oksitlenme ve korozyon riski, sistemin uzun ömürlü kullanımı için bazı mühendislik zorlukları oluşturmaktadır [48].

Katı oksit yakıt hücrelerinde (KOYP) farklı yapı destekleme türlerini Şekil 2.3’te gösterilmektedir. Elektrolit Destekli Yapı: Bu tasarımda elektrolit tabakası ana destekleyici yapı olarak bulunur. Anot (A) ve katot (C) elektrotları, elektrolit (E) tabakasının iki tarafına yerleştirilmiştir. Katot Destekli Yapı: Katot (C) ana destekleyici yapıdır ve elektrolit (E) ile anot (A) üzerine yerleştirilmiştir. Anot Destekli Yapı: Anot

(A) destekleyici yapı olarak kullanılır, üzerine elektrolit (E) ve katot (C) tabakaları eklenmiştir.



Şekil 2.3. Katı oksit yakıt pillerinin anot, elektrolit ve katot destekli yapılandırması [228]

2.2. Katı Oksit Yakıt Pili Bileşenleri

2.2.1. Anot, katot, elektrolit

Yakıtın oksidasyonu veya yanması anot tarafında gerçekleşir. Anot, yakıtın oksidasyonu için yüksek elektrokatalitik aktiviteye ve hidrokarbon reformasyonu için yeterli katalitik aktiviteye sahip olmalıdır [49, 18]. Katı oksit yakıt pilinde anot negatif terminal olarak kullanılır. Hidrojen içeren yakıttan serbest kalan elektronları iletir ve yakıtı tüm yapısına eşit şekilde dağıtır. Anot yapısındaki gözeneklilik reaksiyon bölgelerine yakıt taşınması sayesinde bir diğer önemli faktördür. Bu amaçla, anot genellikle gaz akışını kolaylaştırmak için %20 – %40 arasında gözenekli olacak şekilde sentezlenir [49, 50].

Oksijen iyonlarını üreten oksijen gazının indirgenmesi işlemi katotta gerçekleşir. Katot, oksijen gazının indirgenmesi için yüksek katalitik aktiviteye sahip olmalıdır [50-52]. Anotta olduğu gibi katot da oksijen gazı akışını kolaylaştırmak için yeterli gözenekliliğe ve diğer yakıt pili bileşenleriyle mükemmel kimyasal uyumluluğa sahip olmalıdır. KOYP'de katot olarak perovskit bazlı malzemeler, özellikle stronsiyum katkılı lantanyum manganit (LSM), yaygın bir şekilde kullanılmaktadır. LSM, yüksek iletkenlik ve YSZ elektroliti ile uyumlu bir termal genleşme katsayısı sunar [49]. Shen ve Zhang'ın yaptığı bir çalışmada, KOYP'nin katot temas katmanıyla ilgili ilerlemeler ve zorluklar ayrıntılı bir şekilde tartışılmıştır [53].

Elektrolit, yakıt pilinin en önemli bileşenidir ve yakıt pillerinin sınıflandırılmasında kullanılan bir unsurdur [49]. KOYP'deki katı elektrolitin kritik işlevi, yakıt ve oksitleyici arasında bir ayırıcı olarak işlev görerek elektronların elektrolit içinde yayılmasını önlemektir [50, 52, 54]. Elektronların elektrolit içinde yayılması, ohmik kayıpları artırır

ve KOYP'nin verimliliğini düşürür. Ayrıca, oksit iyonları (veya protonlar) elektrolit boyunca yakıtla redoks reaksiyonu gerçekleştirmek için hareket ettiğinden, elektrolitin yaklaşık 0,01–0,1 S/cm arasında yüksek iyonik iletkenliğe sahip olması gereklidir [49]. Elektrolitin bir diğer önemli özelliği, hem elektrotlarla kimyasal uyumluluğa sahip olması hem de redoks reaksiyonlarına karşı kimyasal olarak pasif kalmasıdır [24].

2.2.2. Akış kanalları, sızdırmazlık malzemeleri ve ara bağlantılar

Akış kanalları, gaz dağıtımını sağlamak için kullanılır ve yüksek sıcaklıklarda mekanik dayanım ile gaz geçirimsizliği gerektirir [55]. Sızdırmazlık malzemeleri, bileşenler arasında gaz sızıntısını önlemek için özel olarak seçilir [56]. Ara bağlantılar, elektrik akımını iletirken gaz bariyeri işlevi görür ve yüksek sıcaklıklarda elektriksel iletkenlik ile termal stabilite sağlar [57]. Akış kanalları, sızdırmazlık malzemeleri ve ara bağlantılarının özellikleri Tablo 2.1'de verilmiştir.

Tablo 2.1. Akış kanalları, sızdırmazlık malzemeleri ve ara bağlantılar

Özellikler	Akış Kanalları	Sızdırmazlık Malzemeleri	Ara Bağlantılar
Görev	Gaz akışını yönlendirme	Gaz sızıntısını önleme	Elektrik akımı iletme ve gaz bariyeri sağlama
Malzeme Türleri	Ferritik çelikler, seramikler	Cam seramikler, mika, metal contalar	Ferritik çelikler, nikel alaşımları, seramikler
Önemli Özellikler	Mekanik dayanım, gaz geçirimsizliği	Kimyasal uyum, termal stabilite	Elektriksel iletkenlik, korozyon direnci
Çalışma Sıcaklığı	~800–1000 °C	~800–1000 °C	~800–1000 °C

Katı Oksit Yakıt Hücresi (KOYP) akış kanalları için, yüksek sıcaklık dayanımı, oksidasyon ve korozyon direnci, termal genleşme uyumluluğu ve mekanik mukavemet gibi üstün özelliklere sahip olduğundan Inconel 625 tercih edilen bir malzemedir. KOYP'lerin akış kanalları, yakıt (H₂) ve oksijen (O₂) taşınımı için kritik bir role sahiptir ve yüksek sıcaklık, oksitleyici ortamlar ve mekanik yükler altında çalışır. Bu zorlu çalışma koşulları, malzemelerin performansını ve uzun ömürlülüğünü doğrudan etkiler [58].

Inconel 625'in nikel bazlı yapısı, malzemeye yüksek termal ve kimyasal stabilite kazandırır. Krom ve molibden gibi alaşım elementleri, oksidasyon ve korozyon direncini artırarak, malzemenin yüksek sıcaklıklarda ve oksitleyici atmosferlerde kararlı bir şekilde

çalışmasını sağlar. Ayrıca, bu malzeme düşük gaz geçirgenliğine sahiptir; bu özellik, KOYP'de istenmeyen yan reaksiyonları önler ve sistemin genel verimliliğini artırır. Inconel 625'in termal genleşme katsayısı, KOYP'nin diğer bileşenleriyle uyumluluğunu sağlayarak termal stres kaynaklı çatlama ve deformasyon riskini azaltır. Yüksek mekanik mukavemeti ise malzemenin yapısal dayanıklılığını ve uzun ömürlü kullanımını destekler. Tüm bu özellikler, Inconel 625'i KOYP akış kanalları için ideal bir malzeme haline getirmiştir. Hem kimyasal hem de mekanik performansı ile bu alaşım, yakıt hücresi teknolojilerinde güvenilir bir çözüm sunmaktadır [59].

Ara bağlantı, bir KOYP yığınının önemli bileşenlerinden biridir. KOYP içindeki ara bağlantının iki ana fonksiyonu; pil yığını içindeki birim pilleri ve gaz separasyonu arasındaki elektrik iletimini sağlamaktır. Ara bağlantının oksidize edici ve indirgeyici ortamlar altında diğer pil bileşenleri ile uyumlu olması için kimyasal stabiliteye ve diğer KOYP bileşenleri ile ısı genleşme katsayısı eşleşmesine sahip olması gerekir. Önemli özelliklerinden biri ise ara bağlantının, çalışma koşulu altında yüksek elektrik iletkenliğine sahip olmasının gerekliliği ve ara bağlantının gücünün bozulmayı önlemek için yeterince yüksek olmasının gerekliliğidir [16, 60]. İki ara bağlantı türü yani seramik ve metalik malzemeler şu anda KOYP ara bağlantılar olarak kullanılmaktadır. Lantanum kromit (LaCrO_3) geçmişte en yaygın olarak kullanılmış seramik ara bağlantısıdır [13]. Ara sıcaklık aralığında çalışan KOYP için krom bazlı alaşımlar ve ferritli çelikler gibi bazı metalik malzemeler ara bağlantı seçenekleri olabilir. Metalik ara bağlantıları kullanmanın çok sayıda avantajı bulunmaktadır. Metalik bir ara bağlantı, bir seramik ara bağlantıdan daha yüksek bir elektrik iletkenliğine sahiptir ve hiçbir gazlı permeasyon meydana gelmesi beklenmez [60]. Permeasyon, bir gazın veya sıvının bir malzemenin içinden difüzyon yoluyla geçme sürecidir. Metalik ve seramik ara bağlantılar bağlamında permeasyon, bir gazın (örneğin oksijen veya hidrojen) ara bağlantı malzemesi boyunca difüze olup olmamasıyla ilgilidir [62].

Metaller seramiklerden daha yüksek ısı iletkenliğe sahip olduğu için metalik ara bağlantı içindeki sıcaklık daha eşit dağılır ve KOYP yığnında daha düşük ısı stresler meydana gelir. Ancak, metalik ara bağlantıların kullanımında diğer seramik bileşenlerle ısı genleşme katsayısının yanlış eşleşmesi, yüksek sıcaklıklı oksidasyon ve katodun kromla zehirlenmesi sebebiyle katodun özelliklerini kaybetmesi gibi problemlerle karşılaşılabilir. Bazı problemler ortaya çıkabilmesine rağmen, metalik ara bağlantıların

kullanımı seramik ara bağlantılarla karşılaştırıldığında etkili bir maliyet tasarrufu sağlamaktadır [46].

Sızdırmazlık maddeleri, diğer pil bileşenleri ile kimyasal olarak uygun olmalı ve uzun süreli ısı döngünün ardından hiçbir yakıt ya da oksidan gaz sızıntısı olmamalıdır [65]. KOYP için sızdırmazlık yaklaşımları rijit sızdırmazlık maddeleri ve kompresif sızdırmazlık maddeleri olarak ikiye ayrılır [64]. KOYP için en yaygın sızdırmazlık maddeleri rijit sızdırmazlık maddelerine ait olan cam ve cam seramik malzemelerdir. Uygun bir cam ya da cam-seramik sızdırmazlık maddesinin seçimi için en önemli iki özellik, ısı genleşme katsayısı ve cam geçiş sıcaklığıdır (T_g). Bu özellikler farklı miktarlarda cam ilave edilmesiyle ayarlanabilir. Çalışma sıcaklığı T_g 'den daha yüksek olduğu zaman, camlar ve cam-seramikler viskoz hale gelir. Yüksek sıcaklık altındaki bu viskoz özellik, uygun sızdırmazlık maddelerini belirlemek ve çalışma koşullarında yeterli yapısal bütünlüğü muhafaza etmek için camların ve cam seramiklerin uygun bir şekilde akmasını sağlaması açısından oldukça önemlidir [65].

La_2O_3 , ZrO_2 veya NiO ilavesiyle geliştirilen $\text{BaO-Al}_2\text{O}_3\text{-B}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ ve $\text{SrO-La}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-B}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ sistemleri gibi bazı cam ve cam seramik sızdırmazlık maddeleri KOYP uygulamaları için uygundur. Cam ve cam seramik sızdırmazlık maddelerine ek olarak, mika bazlı malzemeler KOYP sızdırmazlık maddeleri için alternatif bir tercihtir [55].

Bu tez çalışmasında, odak noktası katı oksit yakıt hücrelerinde (KOYP) anot ve katot yüzeylerine uygulanan katkı ve ince film kaplamaların elektrokimyasal, mekanik ve termal performansa etkilerinin detaylı olarak incelenmesi olmuştur. Bu kapsamda, yakıt hücresinin elektrot, elektrolit ve gaz akış kanalı gibi temel aktif bileşenlerine yönelik çoklu fizik tabanlı bir analiz gerçekleştirilmiştir.

Ancak, sistemin bütüncül çalışmasına katkı sağlayan bazı pasif yapısal bileşenler, örneğin seramik veya cam bazlı sızdırmazlık malzemeleri ile metalik ara bağlantılar, model kapsamı dışında bırakılmıştır. Bu bileşenler; genel sistem bütünlüğü, hücrelerin dizilimi ve uzun vadeli çevrim ömrü açısından önemli olmakta birlikte bu çalışmanın odak noktası olan malzeme-temelli yüzey modifikasyonlarının lokal performans etkilerini anlamak açısından birincil öncelikte değildir. Bu bileşenlerin sayısal modellere dahil edilmesi durumunda simülasyon karmaşıklığını artıracığından dolayı doğrudan analiz hedefleriyle örtüşmeyeceğinden dolayı ihmal edilmiştir. Gelecek çalışmalarda, sızdırmazlık malzemelerinin kimyasal kararlılığı, termal genleşme uyumu ve ara

bağlantıların elektriksel iletkenliği gibi parametreler daha geniş kapsamlı entegre sistem modelleri ile değerlendirilebilir.

Akış kanalları malzemelere göre avantajları ve dezavantajları Tablo 2.2’de verilmiştir.

Tablo 2.2. Akış kanalı malzemeleri karşılaştırması

Malzeme Türü	Örnek Malzemeler	Avantajlar	Dezavantajlar
<i>Feritik Çelikler</i>	Crofer 22 APU, SS441	Düşük maliyet, iyi termal uyuma sahiptir.	Oksit tabaka oluşumu gözlemlenir.
<i>Seramik Malzemeler</i>	SiC, Al ₂ O ₃	Kimyasal stabilite, düşük gaz geçirgenliğine sahiptir.	Kırılganlığı yüksek ve yüksek maliyete sahiptirler.
<i>Metal-Seramik Kompozit</i>	FeCrAlY - YSZ kaplama	Termal uyuma ve mekanik dayanımı yüksektir.	Üretim zorluğudur.
<i>Nikel Alaşımları</i>	Inconel 625, Haynes 230	Yüksek sıcaklık dayanımı, termal şok direncidir.	Yüksek maliyet ve yoğunluktur.

2.3. Katı Oksit Yakıt Pillerinin Genel Terimleri ve Polarizasyon Türleri

2.3.1. Isıtma gerilimi

Isıtma gerilimi (UH), bir yakıt hücresinin işletme sıcaklığına ulaşması için gerekli olan minimum enerji miktarını ifade eder. Katı Oksit Yakıt Pilleri, yüksek sıcaklıklarda (500–1000 °C) çalışmaları için başlangıçta belirli bir dış enerji kaynağına ihtiyaç duyarlar [9]. Bu ısıtma süreci, yakıt hücresinin seramik elektrolit malzemesinin iyon iletkenliği kazanmasını sağlamak ve elektrot reaksiyonlarının verimli bir şekilde başlaması için gereklidir.

Isıtma gerilimi, KOYP’nin termal kütlesi, elektrot ve elektrolit malzemesinin termal iletkenliği ve başlangıç ortam sıcaklığına bağlıdır. Daha düşük başlangıç sıcaklığı, hücrenin işletme sıcaklığına ulaşması için daha fazla ısıtma gerilimi gerektirir. Bununla birlikte, yüksek başlangıç sıcaklığı daha düşük ısıtma gerilimi ihtiyacı anlamına gelir, ancak KOYP’nin uzun ömürlü çalışmasını sağlamak için kontrollü ısıtma gereklidir [13].

Yakıt hücrelerinin ısıtma süreci, genellikle harici ısıtıcılar veya başlangıç elektrik enerjisi sağlayan sistemler aracılığıyla gerçekleştirilir. Bu sistemler, hücrenin hasar görmeden ve malzeme gerilmeleri oluşmadan ısınmasını sağlar. Isıtma geriliminin optimize edilmesi, yakıt hücresinin başlangıç süresini ve verimliliğini artırarak ticari

kullanımını iyileştirmeye yardımcı olabilir [39]. Isıtma gerilimi denklemi, Denklem (2.4)'te verilmiştir.

$$UH = -\Delta H \frac{n}{F} \quad (2.4)$$

Burada ΔH , yakıtların üst ısı değeri (HHV) veya alt ısı değeri (LHV) olarak tanımlanır [J/mol]. F, Faraday'in sabitidir (96.485 C/mol) ve n ise elektrokimyasal reaksiyon başına katılan elektronların sayısıdır. Tablo 2.3'te farklı yakıt türlerine ait ısıtma gerilimi hesaplamaları verilmiştir [69].

Tablo 2.3. Yakıt türleri ve ısıtma değeri yakıt miktarı [230]

Yakıt	Isıl Değeri Yakıt Miktarı [KJ/mol]	Değer	Katılan Elektron Sayısı (n)	U (V)
Hidrojen	HHV	286,06	2	1,48
Hidrojen	LHV	241,54	2	1,25
Metan	HHV	888	8	1,14
Metan	LHV	600 ton	8	1,04
Amonyak	HHV	382,6	3	1,32
Metanol	HHV	726	6	1,25
Metanol	LHV	631,5	6	1,09
Etanol	HIV	1367	12	1,18
Etanol	LHV	1230,1	12	1,03

2.3.2. Gibbs serbest enerjisi

Gibbs serbest enerjisi (G), bir sistemin sabit sıcaklık ve basınç altında gerçekleştirebileceği maksimum faydalı iş miktarını ifade eden termodinamik bir büyüklüktür. KOYP için Gibbs serbest enerjisi, yakıtın elektrokimyasal reaksiyonu sırasında üretilen elektrik enerjisinin teorik sınırını belirlemekte kullanılır [9].

Bir yakıt hücresinde gerçekleşen reaksiyonlarda, girenlerin Gibbs serbest enerjisindeki değişim (ΔG), reaksiyonun ne kadar enerji üretebileceğini belirler. Bu enerji, Nernst voltajı (E_n) ile ilişkilendirilerek Denklem (2.5)'teki gibi ifade edilir:

$$\Delta G = -n * F * E_{nernst} \quad (2.5)$$

Burada ΔG , Gibbs serbest enerjisi değişimi (J/mol); n, reaksiyona katılan elektron sayısı; F, Faraday sabiti (96.485 C/mol); E_{nernst} ise hücre gerilimi (V) olarak ifade edilir.

Gibbs serbest enerjisi negatif olduğunda, reaksiyon kendiliğinden gerçekleşebilir. Eğer ΔG sıfıra yaklaşırsa, hücrede tepkimenin ileriye doğru ilerlemesi zorlaşır ve verim düşer [67].

KOYP'lerde Gibbs serbest enerjisi çalışma sıcaklığı ile değişir. Yüksek sıcaklıklarda, Gibbs serbest enerjisi azalırken, entropi (S) artar, bu da hücre verimini etkileyen önemli bir faktördür. Gibbs serbest enerjisi ile entalpi (H) arasındaki ilişki Denklem (2.6)'da olduğu gibi verilir:

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

Burada ΔH , Reaksiyonun entalpi değişimi (J/mol); T, Mutlak sıcaklık (K); ΔS , Entropi değişimi (J/mol·K)'dir.

Denklem 2.6'da görüldüğü gibi sıcaklık arttıkça Gibbs serbest enerjisinin düştüğünü ve yüksek sıcaklıklarda hücre veriminin azaldığını gösterir. Optimum verim sağlamak için, Gibbs serbest enerjisinin yüksek tutulması ve sıcaklığın uygun bir aralıkta yönetilmesi gerekmektedir [68].

2.3.3. Termodinamik voltaj

Termodinamik voltaj (E_0), bir yakıt hücresinde kimyasal enerjinin elektrik enerjisine dönüştürülebilirliğini belirleyen teorik gerilim değeridir. Bu voltaj, Nernst denklemi ile ifade edilen denge gerilimi olup reaksiyon koşullarına, sıcaklığa ve basınca bağlı olarak değişir [68].

Bir yakıt hücresinin termodinamik voltajı, Gibbs serbest enerjisi (ΔG) ile Faraday sabiti (F) ve tepkimeye katılan elektron sayısı (n) arasındaki ilişkiye göre Denklem (2.7) ile hesaplanır:

$$E_0 = \frac{-\Delta G}{n * F * E_0} \quad (2.7)$$

Burada E_0 , Termodinamik voltaj (V); ΔG , Gibbs serbest enerjisi değişimi (J/mol); n, reaksiyona katılan elektron sayısı; F: Faraday sabitidir.

Termodinamik voltaj, teorik olarak bir yakıt hücresinden elde edilebilecek maksimum potansiyel farkını gösterir. Ancak, gerçek sistemlerde polarizasyon kayıpları nedeniyle bu voltaj hiçbir zaman tam olarak elde edilemez [9]. Termodinamik voltaj, Nernst denklemi kullanılarak sıcaklık (T) ve reaksiyon ürünlerinin kısmi basınçları dikkate alınarak güncellenebilir:

$$E = (E_0) + \left(\frac{RT}{nF}\right) * \frac{\ln P_{girenler}}{P_{ürünler}} \quad (2.8)$$

Burada E, hücrenin gerçek voltajı (V); R, evrensel gaz sabiti (8,314 J/mol·K); T, Mutlak sıcaklık (K); P, girenler ve ürünlerin kısmi basınçlarıdır (atm).

Sıcaklık 800K ile 1500K arasında olduğunda Denklem (2.9) ile hesaplanabilir.

$$E_0 = 1.274 - 2.79 \cdot 10^{-4} \cdot T \quad (2.9)$$

Denklem (2.9), yakıtın kısmi basıncının ve sıcaklığın artırılmasının hücre gerilimini nasıl etkileyebileceğini göstermektedir. Pratik uygulamalarda, KOYP'lerinde girenler gazların saflaştırılması ve sıcaklık yönetimi, termodinamik voltajın korunmasına yardımcı olur [67]. Tablo 2.4, hidrojen, amonyak, metanol, etanol ve metan için ideal gerilimlerin standart koşullarda (25°C, 1 atm) hesaplanan değerini gösterir.

Tablo 2.4. Standart koşullarda farklı yakıtlar için ideal gerilim değerleri

Yakıt	Yakıtın Isıl Değeri (KJ/mol)	Değer	Gibbs Serbest Enerji Değişimi (KJ/mol)	Katılan Elektronlar (n)	E ₀ (V)
Hidrojen	HHV	286,06	237,34	2	1,23
Hidrojen	LHV	241,54	192,32	2	0,997
Metan	HIV	890,0	817,6	8	1,06
Metan	LHV	802,75	730,35	8	1,04
Amonyak	HHV	382,6	338,2	3	1,168
Amonyak	LHV	317,56	237,3	3	0,939
Metanol	HHV	726,0	584,69	6	1,01
Metanol	LHV	631,5	486,28	6	0,84
Etanol	HIV	1367,0	1076,77	12	0,93
Etanol	LHV	1230,1	903,09	12	0,78

2.3.4. Nernst gerilimi

Nernst gerilimi, bir yakıt hücresinin teorik denge voltajını ifade eder ve Nernst denklemi kullanılarak hesaplanır. Bu gerilim, girenlerin (hidrojen, oksijen vb.) kısmi basınçları ve hücrenin çalışma sıcaklığına bağlı olarak değişmektedir. KOYP'lerde yakıtın elektrokimyasal reaksiyon verimliliğini belirleyen önemli bir parametre olarak kabul edilir [68]. Nernst denklemi, Denklem (2.10) ve (2.11) ile ifade edilir:

$$E_{ernst} = (E^0) + \left(\frac{RT}{nF}\right) * \ln\left(\frac{P_{girenler}}{P_{ürünler}}\right) \quad (2.10)$$

$$E_{ernst} = (E^0) + \left(\frac{RT}{nF}\right) * \ln\left[\frac{\left(\left(\frac{PH_2}{p0}\right) * \left(\frac{PO_2}{p0}\right)^{0.5}\right)}{\frac{PH_2O}{p0}}\right] \quad (2.11)$$

Diğer taraftan, Nernst gerilimi, anot elektronik potansiyelinin sıfır olduğu varsayıldığında, hava elektrotundaki denge gerilimine eşittir ve [68]'e göre de hesaplanabilir.

$$E_{\text{Nernst}} = 1.253 - (T/4079) + (RT/nF) * \ln((p_{H_2}(p_{O_2})^{0.5})/p_{H_2O}) \quad (2.12)$$

Burada E, Nernst gerilimi (V); E₀, standart termodinamik voltaj (V); R, evrensel gaz sabiti (8,314 J/mol·K); T, mutlak sıcaklık (K); n, reaksiyona katılan elektron sayısı; F, Faraday sabiti (96.485 C/mol); P, Giren ve ürün gazlarının kısmi basınçları (atm)'dır.

Hücre sıcaklığı arttıkça iyon iletkenliği iyileşir, ancak Gibbs serbest enerjisi azalır. Bu durum Nernst gerilimini etkiler. Hidrojen gibi yakıtların kısmi basıncı arttıkça hücre voltajı yükselir, oksijen eksikliği durumunda ise gerilim düşer. KOYP'deki anot ve katot reaksiyonları, Nernst geriliminin belirlenmesinde kritik rol oynar.

Gerçek sistemlerde polarizasyon kayıpları (aktivasyon, ohmik ve konsantrasyon kayıpları) nedeniyle Nernst gerilimi teorik değerden daha düşük gerçekleşir [39]. KOYP'lerinin verimli çalışması için yakıt ve oksitleyici gazların saflığı, sıcaklık kontrolü ve elektrot malzemelerinin iyileştirilmesi gerekmektedir.

2.3.5. Aktivasyon polarizasyonu

Aktivasyon polarizasyonu, yakıt hücresinde elektrokimyasal reaksiyonların başlaması için aşılması gereken enerji bariyerinden kaynaklanan voltaj kaybıdır. Bu kayıp, özellikle düşük akım yoğunluklarında belirgin hale gelir ve elektrot reaksiyonlarının yavaş gerçekleşmesi nedeniyle oluşur [67].

KOYP'lerinde aktivasyon polarizasyonu, hidrojenin anotta oksitlenmesi ve oksijenin katotta indirgenmesi gibi elektrot reaksiyonlarının hızına bağlıdır. Bu reaksiyonların gerçekleşmesi için belirli bir aktivasyon enerjisi gerektiğinden, hücre voltajı düşer. Aktivasyon polarizasyonu Denklem (2.13) ile ifade edilir:

$$\eta_a = \left(\frac{RT}{\alpha nF} \right) \ln \left(\frac{i}{i_0} \right) \quad (2.13)$$

Burada; η_a , aktivasyon polarizasyonu (V); R, evrensel gaz sabiti (8,314 J/mol·K); T, mutlak sıcaklık (K); α , elektron transfer katsayısı; n, reaksiyona katılan elektron sayısı; F, Faraday sabiti (96.485 C/mol); i, uygulanan akım yoğunluğu (A/cm²); i₀, değişim akımı yoğunluğu (A/cm²); yani denge durumundaki akım yoğunluğudur.

Yüksek katalitik aktiviteye sahip elektrotlar (örneğin, perovskit bazlı katotlar) aktivasyon enerjisini düşürerek polarizasyon kaybını azaltır. Yüksek sıcaklıklar reaksiyon kinetiğini hızlandırır, böylece aktivasyon polarizasyonu azalır. Giren gazların

elektrot yüzeyine etkin bir şekilde ulaşması, aktivasyon kayıplarını minimize eder. Aktivasyon polarizasyonu, yakıt hücresinin verimliliğini düşüren en önemli polarizasyon türlerinden biri olduğundan, KOYP'lerin performansını artırmak için daha etkili katalizörler, optimize edilmiş elektrot yapıları ve iyileştirilmiş gaz akışkanlığı kullanılmalıdır [68].

2.3.6. Ohmik polarizasyon

Ohmik polarizasyonu, elektronların ve iyonların elektrotlar ve elektrolit içerisindeki taşınımı sırasında karşılaştıkları direnç nedeniyle meydana gelen voltaj kaybıdır. Bu kayıp, hücre içindeki elektriksel iletkenliğe ve iyon iletkenliğine bağlıdır ve genellikle orta akım yoğunluklarında belirgin hale gelir [67].

KOYP'lerde iyonlar elektrolit boyunca hareket ederken, elektronlar elektrotlardan ve ara bağlantılardan geçer. Bu süreçte direnç kaynaklı kayıplar meydana gelir ve hücre voltajında düşüş gözlemlenir. Ohmik polarizasyon, Ohm Kanunu kullanılarak Denklem (2.14)'teki denklemle ifade edilir:

$$\eta_o = i * R \quad (2.14)$$

Burada: η_o : Ohmik polarizasyon kaybı (V), i : Akım yoğunluğu (A/cm²), R : Toplam iç direnç ($\Omega \cdot \text{cm}^2$), elektrot, elektrolit ve ara bağlantılar dahildir.

Elektrolitin iyonik iletkenliği yüksek olmalıdır. Elektrolit tabakası ne kadar ince olursa, iyonların geçiş direnci o kadar düşük olur ve ohmik kayıplar azalır. Yüksek sıcaklıklar, iyon hareketliliğini artırarak iç direnci azaltır ve ohmik kayıpları düşürür. KOYP'lerin genellikle yüksek sıcaklıkta (800-1000 °C) çalışmasının nedenlerinden biri budur.

Ara bağlantılar ve elektrotların elektriksel direnci düşük olmalıdır. Paslanmaz çelik ve perovskit bazlı malzemeler, iyi elektriksel iletkenlik sağlayarak kayıpları minimize eder [39].

Ohmik polarizasyon, KOYP'lerin toplam performansını doğrudan etkileyen önemli bir faktördür. Daha ince elektrolitler, yüksek sıcaklıkta çalışan iyon iletkenliği yüksek malzemeler ve optimize edilmiş elektrot-elektrolit ara yüzeyleri, ohmik kayıpları en aza indirerek hücre verimliliğini artırabilir [16].

2.3.7. Konsantrasyon polarizasyonu

Konsantrasyon polarizasyonu, yakıt veya oksitleyici gazların elektrotlara ulaşamaması veya tepkime ürünlerinin uzaklaştırılamaması nedeniyle oluşan voltaj

kayıdır. Bu kayıp, yüksek akım yoğunluklarında belirgin hale gelir ve genellikle gaz difüzyon süreçlerindeki kütle taşınımı sınırlamalarından kaynaklanır [67].

Yakıt hücresinde yakıt ve oksijenin elektrot yüzeyine yeterli miktarda ulaşması gerekmektedir. Eğer girenler yeterince hızlı taşınmazsa, elektrokimyasal reaksiyonlar yavaşlar ve hücre voltajı düşer. Konsantrasyon polarizasyonu, 2.15'teki denklem ile ifade edilir:

$$\eta_c = \left(-\frac{RT}{nF} \right) * \left(\ln \left(1 - \left(\frac{i}{i_L} \right) \right) \right) \quad (2.15)$$

Burada η_c , konsantrasyon polarizasyonu kaybı (V); R, evrensel gaz sabiti (8,314 J/mol·K); T, mutlak sıcaklık (K); n, reaksiyona katılan elektron sayısı; F, Faraday sabiti (96.485 C/mol); i, uygulanan akım yoğunluğu (A/cm²); i_L , sınır akım yoğunluğu (A/cm²) yani maksimum taşınabilen akım yoğunluğudur.

Gözenekli elektrotlar ve iyi tasarlanmış gaz dağıtım katmanları, gazların daha hızlı taşınmasını sağlayarak polarizasyon kayıplarını azaltır. Girenler gazlarının saflığı ve basıncı arttıkça, gaz taşınımı daha hızlı gerçekleşir ve konsantrasyon kaybı azalır.

Yüksek yüzey alanına sahip elektrotlar (nano yapılandırılmış elektrotlar gibi) daha fazla aktif bölge sağlayarak gaz difüzyonunu iyileştirir. Yüksek sıcaklıklar gaz difüzyonunu hızlandırarak kütle taşınımı sınırlamalarını azaltır [68].

Konsantrasyon polarizasyonu, yakıt hücresinin yüksek akım yoğunluklarında verimliliğini düşüren bir faktör olduğu için, optimum gaz akışı ve elektrot tasarımı ile minimize edilmelidir. Gaz dağıtım kanallarının optimize edilmesi, elektrotların gözenekliliğinin iyileştirilmesi ve gaz basıncının artırılması, bu kayıpları en aza indirerek KOYP performansını artırabilir [38]. Denklem (2.16) ve (2.17), hücre geriliminin teorik değerinden çeşitli kayıpların çıkarılmasıyla elde edildiğini göstermektedir.

$$V_{hücre} = E_{Nernst} - V_{kayıp} \quad (2.16)$$

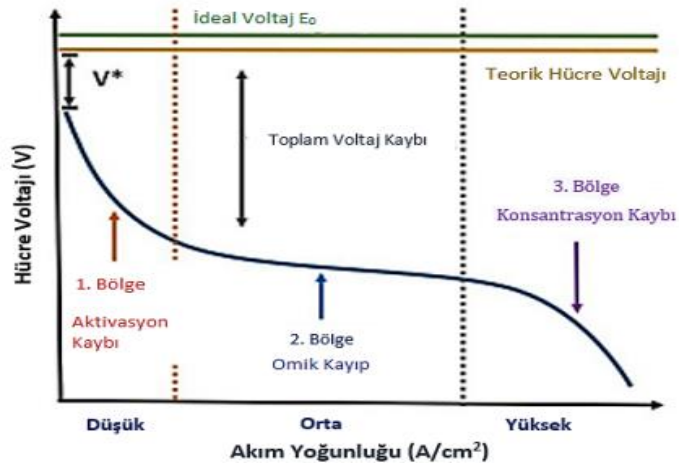
$$V_{kayıp} = \eta_{ohmik} + \eta_{aktivasyon} + \eta_{konsantrasyon} \quad (2.17)$$

Denklem (2.17)'deki $\eta_{aktivasyon} + \eta_{ohmik} + \eta_{konsantrasyon}$ sırasıyla anot ve katot elektrotlarında aktivasyon, ohmik ve konsantrasyon polarizasyonudur.

Yakıt pili performansını anlamak için kullanılan polarizasyon eğrisi, sistemin farklı kayıplara bağlı olarak voltaj düşüşünü gösteren kritik bir grafiktir. Şekil 2.4'te görüldüğü gibi, yatay eksen akım yoğunluğu (A/cm²), dikey eksen ise hücre voltajı (V) yer almaktadır. Teorik olarak, yakıt pili ideal voltajı (E_0) seviyesine ulaşabilse de gerçek sistemlerde çeşitli kayıplar nedeniyle bu mümkün olmamaktadır. Teorik hücre voltajı,

termodinamik olarak belirlenen değer olup, gerçek hücre voltajı (V) ise sistemdeki iç direnç ve kinetik engeller nedeniyle daha düşük seviyede gerçekleşmektedir [68].

Şekil 2.4'te üç temel kayıp bölgesi tanımlanmıştır. Birinci bölge (aktivasyon kaybı), elektrokimyasal reaksiyonların başlaması için gereken enerji engeli nedeniyle oluşan voltaj düşüşünü ifade etmektedir. Bu kayıp, elektrokatalizörlerin aktivitesi, elektrot-membran arayüzünde meydana gelen reaksiyon kinetiği ve yüzey reaksiyonlarının hızı ile doğrudan ilişkilidir. İkinci bölge (ohmik kayıp), hücre içindeki iyonik ve elektronik iletkenlikten kaynaklanan iç direnç kaybıdır. Membran ve elektrot malzemelerinin iletkenliği, hücre içindeki temas dirençleri bu kaybın büyüklüğünü belirleyen temel faktörlerdir. Üçüncü bölge (konsantrasyon kaybı) ise girenlerin elektrot yüzeyine ulaşma hızındaki sınırlamalar nedeniyle meydana gelmektedir [67]. Gaz difüzyon katmanlarının optimize edilmesi, yakıt ve oksijenin elektrot yüzeyine etkin bir şekilde taşınmasını sağlayarak bu kayıpları azaltmaktadır [66].



Şekil 2.4. PEM yakıt hücresinin polarizasyon eğrisi [229]

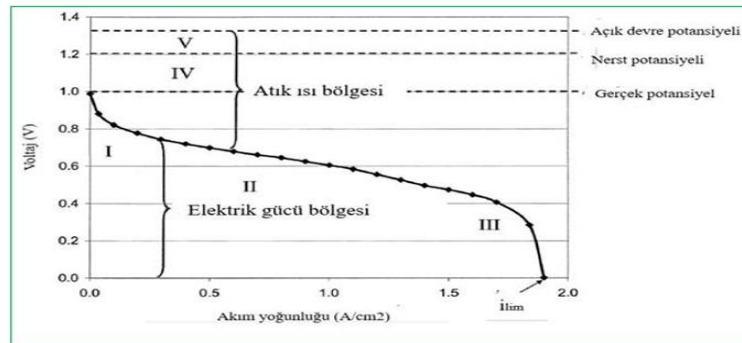
2.4. KOYP Verimlilik Analizi ve Yakıt- Oksidan Kullanımı

Termodinamik prensipler ve yasalar, bir yakıt pilinin performansını incelemek için büyük öneme sahiptir. Hidrojen yakıtlı katı oksit yakıt pilleri (KOYP), yüksek sıcaklıkta çalışmaları ve elektrokimyasal reaksiyon mekanizmaları nedeniyle oldukça verimli enerji dönüşümü sağlayabilen sistemlerdir. Hidrojenin doğrudan anot yüzeyinde elektrokimyasal oksidasyonu, KOYP teknolojisinin temel reaksiyon mekanizmasını oluşturur. Bu süreçte, hidrojen molekülleri anotta ayrışarak protonlara ve elektronlara dönüşür; protonlar elektrolit aracılığıyla katoda taşınırken, elektronlar harici bir devre üzerinden katoda ulaşarak enerji üretir [39].

Hidrojen yakıtlı KOYP'lerin verimliliği; termodinamik verimlilik, voltaj verimliliği ve akım verimliliği olmak üzere üç temel ana başlık altında incelenebilir. Bunlar arasında termodinamik verimlilik, hücrenin Nernst voltajına bağlı olarak belirlenen en önemli parametrelerden biridir. Nernst voltajı, sıcaklık ve gazın kısmi basınçlarına bağlı olarak değişir ve yüksek sıcaklıklarda daha stabil hale gelir. Bununla birlikte, daha yüksek sıcaklıklarda iyonik iletkenliğin artması ve ohmik kayıpların azalması, genel termodinamik verimliliğin artmasına katkı sağlamaktadır [68].

Voltaj verimliliği, hücrenin iç kayıplarının bir fonksiyonudur ve polarizasyon eğrisinde aktivasyon, ohmik ve konsantrasyon kayıpları olarak ayrıştırılabilir. Voltaj kayıpları; aktivasyon aşamasında elektrokimyasal reaksiyonun kinetiği, ohmik aşamada elektrot-elektrolit arasındaki dirençler ve konsantrasyon aşamasında gaz difüzyon sınırlamaları Şekil 2.4'te gösterilmiştir. Hidrojen yakıtlı KOYP'lerde, yüksek sıcaklık koşulları bu kayıpları azaltarak voltaj verimliliğini artırmaktadır [67].

Yakıt pili performansını değerlendirmek için kullanılan polarizasyon eğrisi, sistemdeki voltaj düşüşlerini ve bu düşüşlerin kaynağını anlamak için kritik bir araçtır. Şekil 2.5'te görüldüğü gibi, yatay ekseninde akım yoğunluğu (A/cm^2), dikey ekseninde ise hücre voltajı (V) yer almaktadır. İdeal olarak, yakıt pili açık devre potansiyeline ulaşabilirken gerçek çalışma koşullarında aktivasyon, ohmik ve konsantrasyon kayıpları nedeniyle voltaj düşüşü gözlemlenir.



Şekil 2.5. Bir yakıt hücresinin polarizasyon eğrisinin şematik diyagramı [230]

Akım verimliliği, hidrojenin anot tarafında istenmeyen yan reaksiyonlara girmesiyle düşebilir. Hidrojen yakıtlı KOYP'lerde, hidrojenin eksik oksidasyonu veya elektrot yüzeyinde adsorpsiyon/difüzyon kaynaklı kayıplar, hücrenin akım çıkışını olumsuz etkileyebilir. Ancak yüksek sıcaklıkta çalışan KOYP sistemleri, gazların reaktivitesini artırarak elektrokimyasal reaksiyonları daha verimli hale getirir. Bu

nedenle, yüksek sıcaklık operasyonu, akım verimliliğinin artırılmasına önemli katkı sağlamaktadır [66].

Genel olarak hidrojen yakıtlı KOYP'nin toplam verimliliği; termodinamik verimlilik, voltaj verimliliği ve akım verimliliğinin toplamına bağlıdır. Bu üç faktörün optimize edilmesi, yakıt hücresinin enerji dönüşüm oranını maksimize etmek için kritik öneme sahiptir. Özellikle hidrojenin saf ve yeterli miktarda beslenmesi, polarizasyon kayıplarının azaltılması ve elektrot-elektrolit ara yüzeyinin iyileştirilmesi, hücrenin uzun vadeli verimliliğini artırmak için temel tasarım kriterleri arasında yer almaktadır [39, 67-69].

Hidrojen yakıtlı katı oksit yakıt pilleri (KOYP) için termodinamik verimlilik, elektriksel iş çıkışı (W_{ele}) ve hidrojenin alt ısı değeri ($LHV(H_2)$) ile kütle akım miktarının ($m \cdot H_2$) bir fonksiyonu olarak Denklem (2.18)'deki gibi hesaplanabilir:

$$\eta_{therm} = \frac{W_{ele}}{m_{H_2} * LHV_{H_2}} \quad (2.18)$$

Katı oksit yakıt pillerinde diğer yakıtlarla benzer şekilde hidrojen yakıt beslemeli KOYP'nin verimliliği üretilen (ΔP) elektrik gücünün ve yakıtların (η_{th}) termal verimliliğinin bir oranı olarak belirlenir. Bir yakıt pilinin termal verimliliği Denklem (2.19)'da verildiği şekilde hesaplanır:

$$\eta_{th} = \left(\frac{\Delta P}{\Delta H_{yakıt}} \right) \times 100\% \quad (2.19)$$

Burada, $\Delta H_{yakıt}$ yakıtın entalpi oluşumu veya termal enerji talebidir. Hidrojen için bu değer hidrojenin yanma entalpisi kullanılarak hesaplanır.

Elektrokimyasal pilin verimi, çalışma pili voltajının (V_{cell}) ve Nernst voltajının (E_{Nernst}) bir fonksiyonu olarak da tanımlanabilir. Nernst voltajı, anot ve katot arasındaki standart potansiyel farkına bağlı olarak Denklem (2.20)'deki gibi hesaplanır:

$$\eta_{cell} = (V_{cell} * E_{Nernst}) \times 100\% \quad (2.20)$$

Yakıt pilinin verimliliği ayrıca yakıt kullanım miktarından da etkilenir. Teorik olarak, yakıt kullanımı maksimum verimlilikle %100'e kadar çıkarılabilse de pratik çalışmalar genellikle %85 ila %90 arasında değişen verimlilik değerleri sunmaktadır [67]. Bu bağlamda, literatürde yaygın olarak kabul gören yaklaşıma göre yakıt kullanım faktörü (U_f) dikkate alındığında, hidrojen yakıtlı katı oksit yakıt pilleri için verimlilik Denklem (2.21)'ifade edilebilir:

$$\eta_{cell} = U_f \times [V_{cell} * E_0] \times 100\% \quad (2.21)$$

Burada, termonötral potansiyel (E_0), yakıtın mevcut tüm enerjisinin herhangi bir tersinmezlik olmaksızın elektrik enerjisine dönüştürülmesiyle elde edilecek maksimum pil voltajıdır. Termonötral potansiyel değeri hidrojen yakıtı için 1.48 V olarak belirlenmiştir. Matematiksel olarak bu değer Denklem (2.22)'deki gibi ifade edilir:

$$E_0 = \frac{\Delta H_{HHV}}{nF} \quad (2.22)$$

Yakıt-oksidan kullanımı, tüketilen giren miktarının sağlanan girenler miktarına oranı olarak ifade edilebilir. Hidrojenin yakıt olarak kullanımı (U_f), hidrojenin elektrokimyasal reaksiyona katılım oranı dikkate alınarak belirlenir. Dolayısıyla, hidrojen yakıtlı KOYP'de hidrojen kullanımı, elektrokimyasal reaksiyona katkıda bulunan hidrojen miktarının, hücreye beslenen toplam hidrojen miktarına oranı olarak tanımlanır. Bu nedenle, yakıt hücresine verilen hidrojenin ne kadarının elektrokimyasal reaksiyona dahil olduğu bu parametre ile belirlenmektedir. Yine de polarizasyonu en aza indirmek için stokiometrik hidrojen miktarından daha fazlası sağlanır. Böylece, elektrokimyasal reaksiyonun yan ürünü olarak hidrojen tüketimi ve su üretimi oranı kullanılarak yakıt kullanımı (U_f) Denklem (2.23)'teki gibi tanımlanır:

$$U_f = \left(\frac{r \cdot H_2}{N_{H_2, in}} \right) = \frac{i \cdot A}{(nF) \cdot (N_{H_2, in})} = \frac{I}{(nF \cdot N_{H_2, in})} \quad (2.23)$$

Eşdeğer bir tanım, Saf oksijen için Denklem (2.24)'te verilebilir:

$$U_{ox} = (r \cdot O_2 \cdot N_{O_2, in}) = \frac{(i \cdot A)}{(nF) \cdot (N_{O_2, in})} = \left(\frac{I}{nF} \right) \cdot (N_{O_2, in}) \quad (2.24)$$

Hava kullanımı için Denklem (2.25) kullanılır:

$$\begin{aligned} U_{ox} &= ((r \cdot O_2 / (0.21 \cdot N_{O_2, in})) = (i \cdot A / nF) \cdot (0.21 \cdot N_{O_2, in}) \\ &= (I / nF) \cdot (0.21 \cdot N_{O_2, in}) \end{aligned} \quad (2.25)$$

Burada, U_f ve U_{ox} parametreleri, hidrojen ve oksijenin reaksiyona girme oranlarını ifade etmektedir. Hidrojen kullanım oranı, hücre verimliliği açısından kritik bir parametre olup, yüksek verimlilik hedefleyen sistemlerde yakıt fazlalığı sağlanarak polarizasyon kayıpları minimize edilmeye çalışılır. Benzer şekilde, oksijen kullanımı da elektrokimyasal reaksiyonun etkinliği açısından optimize edilmelidir. Özellikle hava beslemeli sistemlerde, oksijenin düşük kısmi basıncı nedeniyle daha yüksek debili hava beslemesi gereklidir.

2.5. Yakıt Pilleri İçin Yakıt Seçimi

Yakıt pilleri için farklı yakıt türlerinin ısı değeri, Gibbs serbest enerjisi, verimlilik ve kullanım alanları gibi temel özelliklerini Tablo 2.5'te karşılaştırmaktadır. Alt ısı değeri (LHV) yakıtın enerji yoğunluğunu, Gibbs serbest enerjisi ise reaksiyon sırasında açığa çıkan kullanılabilir enerji miktarını, verimlilik yüzdesi ise ilgili yakıtın enerji dönüşüm oranını ifade etmektedir [39, 67-69].

Tablo 2.5'te verilen yakıt türleri arasında kıyaslama yapıldığında, hidrojenin yüksek verimlilik (60-80%), düşük Gibbs serbest enerjisi (-228,6 kJ/mol) ve çevre dostu olması gibi avantajları öne çıkmaktadır. Doğal gaz (CH_4) yüksek bir ısıtma değerine (802,3 kJ/mol) sahip olmasına rağmen, karbon bazlı bir yakıt olduğu için emisyon dezavantajı taşımaktadır ve verimliliği (%50-60) hidrojen kadar yüksek değildir. Metanol (CH_3OH) ise %40-50 verimlilikle çalışmakta olup taşınabilir cihazlar için uygundur ancak düşük verimi nedeniyle büyük ölçekli enerji üretimi için dezavantajlıdır. Amonyak (NH_3) ise hidrojen gibi sıfır karbon içerir ve daha düşük enerji yoğunluğuna ve sınırlı verimliliğe (%60-70) sahiptir. Biyogaz ve kömür gazı ise değişken bileşenleri nedeniyle tutarsız enerji verimliliği ve yüksek karbon emisyonu gibi sorunlar barındırmaktadır.

Hidrojen yakıtı, en yüksek verimlilik oranına sahip olması (%60-80), yanma sonucu çevreye zararlı emisyon bırakmaması ve yüksek enerji yoğunluğu nedeniyle yakıt pilleri için en ideal seçeneklerden biri olarak öne çıkmaktadır. Düşük Gibbs serbest enerjisi (-228,6 kJ/mol), reaksiyonun kontrollü ve verimli bir şekilde gerçekleşmesini sağlar. Böylece, yakıt pillerinde daha kararlı bir enerji üretimi anlamına gelir. Uzay araçları ve taşıtlar gibi mobil ve yüksek performans gerektiren uygulamalarda kullanılması, hidrojenin hafifliği ve yüksek enerji yoğunluğu ile birleşerek kritik bir avantaj sağlamaktadır.

Tablo 2.5. Yakıt pilleri için yakıt türleri ve özellikleri tablosu

Yakıt Türü	Alt Isıl Değeri (kJ/mol)	Gibbs Serbest Enerjisi (kJ/mol)	Verimlilik (%)	Kullanım Alanları
Hidrojen (H ₂)	241,8	-228,6	60-80	Taşıtlar, uzay araçları
Doğal Gaz (CH ₄)	802,3	-817,0	50-60	Ev tipi ve ticari enerji üretimi
Metanol (CH ₃ OH)	726,0	-702,0	40-50	Taşınabilir cihazlar
Amonyak (NH ₃)	316,8	-245,0	60-70	Endüstriyel uygulamalar
Biyogaz	Değişken	Değişken	Değişken	Yenilenebilir enerji üretimi
Kömür Gazı	Değişken	Değişken	Değişken	Endüstriyel enerji üretimi

2.6. Neden Hidrojen Yakıtlı Katı Oksit Yakıt Pili ?

Katı oksit yakıt pilleri (KOYP), enerji dönüşüm sistemleri arasında yüksek verimlilikleri ve geniş yakıt çeşitliliğini kabul etme kapasiteleriyle dikkat çekmektedir. %50–60 termodinamik verimlilik ve 40.000–80.000 saat çalışma ömrü sunan KOYP sistemleri, yüksek sıcaklıkta çalışabilmeleri nedeniyle %80'in üzerinde toplam sistem verimliliği sağlayabilirler. Seramik tabanlı malzemelerle üretilebilmeleri, yüksek sıcaklık dayanımı, yakıt esnekliği ve çevresel sürdürülebilirlik gibi avantajlarıyla öne çıkarlar [16, 65, 66]. Ancak bu sistemlerin performansını optimize etmek ve uzun ömürlülüğünü artırmak için hem anot hem de katot yüzeylerinde fonksiyonel ince film uygulamaları gibi yenilikçi çözümler gereklidir [63].

Hidrojen bazlı KOYP, yakıt olarak hidrojen kullanıldığında karbon emisyonu üretmediği için çevresel açıdan dost, yüksek enerji yoğunluğu ve reaksiyon kararlılığı gibi birçok avantaj sunar. Bununla birlikte, üretim maliyetleri, depolama zorlukları ve güvenlik riskleri bu teknolojinin yaygınlaşmasının önünde engel teşkil etmektedir [68, 70].

Hidrojen, 600–1000 °C arasındaki sıcaklıklarda hızlı reaksiyon kinetiği göstererek enerji dönüşüm verimliliğini artırır [68]. Hidrojenin saf olarak kullanımı, karbon tortusu veya yan ürün oluşumunu önler. Bu durum, KOYP'nin uzun ömürlü ve kararlı bir şekilde çalışmasını sağlar [66].

Hidrojen üretimi, genellikle enerji yoğun yöntemlerle yapılır ve yüksek maliyetlidir. Ayrıca, hidrojenin depolanması yüksek basınçlı tanklar veya kriyojenik sistemler gerektirir, bu da maliyet ve güvenlik sorunlarını artırır [70]. Saf hidrojenin

temini ve saflaştırılması, fosil yakıtlara kıyasla daha maliyetlidir. Bu durum, ticari uygulamalarda KOYP kullanımını kısıtlamaktadır. Hidrojen, düşük tutuşma enerjisi nedeniyle yanıcı ve patlayıcıdır. Yanlış depolama ve taşıma yöntemleri ciddi güvenlik riskleri oluşturabilir. Ayrıca, hidrojenin üretimi, depolanması ve dağıtımı için gereken altyapı hala gelişim aşamasındadır. Bu durum, mevcut doğal gaz veya petrol altyapısı ile entegrasyonunu sınırlamaktadır [71].

Katı Oksit Yakıt Pillerinde anot ve katot yüzeylerinde uygulanan fonksiyonel ince film kaplamalar, yüzeylerin kimyasal ve fiziksel özelliklerini optimize ederek elektrot reaksiyonlarını hızlandırabilir ve hücre kararlılığını artırabilir [72]. Bu kaplamalar; elektrot–elektrolit arayüzündeki elektron transferini kolaylaştırabilir, reaksiyon yüzey alanını artırabilir ve yüksek sıcaklıkta kararlılığı destekleyebilir.

Bu bağlamda, bilgisayar tabanlı simülasyon araçları, özellikle COMSOL Multiphysics gibi çok alanlı analiz yazılımları, KOYP sistemlerinin performans analizinde etkili bir biçimde kullanılabilir [73]. COMSOL ile gerçekleştirilen modellemelerde, farklı malzeme kombinasyonları, sıcaklık dağılımları, gaz akışı, iyon taşınımı ve elektrokimyasal reaksiyonlar eşzamanlı olarak değerlendirilebilir. Simülasyon sürecinde ağ yapısı oluşturma yöntemiyle, çözüm alanı yüksek doğrulukta bölgelere ayrılır ve deneysel ölçüm yapılmaksızın yaklaşık sonuçlar elde edilebilir. Böylece fiziksel prototip oluşturmadan önce tasarım doğrulaması ve optimizasyon yapılabilir [74].

Bu tür analizler, fonksiyonel ince film kaplama kalınlığı, malzeme bileşimi, iyonik ve elektronik iletkenlik gibi parametrelerin etkisini görselleştirerek, tasarımcıya yol gösterici olabilir [75]. Ayrıca parametre tarama ve karşılaştırma imkânı sunarak, deneysel çalışmaları destekler ve zaman/maliyet tasarrufu sağlar [76].

2.7. KOYP’nde Malzeme, Destek Elemanı ve Tür Seçimi

Katı oksit yakıt pilleri (KOYP) için kullanılan katot ve anot malzemeleri, hücrenin elektrokimyasal performansını, uzun ömürlülüğünü ve yüksek sıcaklık dayanıklılığını doğrudan etkiler. Katot ve anot seçiminde malzemenin iyon iletkenliği, kimyasal kararlılığı, mekanik dayanıklılığı ve katalitik aktivitesi dikkate alınır. Katot malzemeleri, oksijen redüksiyon reaksiyonunu (ORR) katalize eden özellikleriyle ön plana çıkar.

Lantan stronsiyum manganit (LSM), yüksek sıcaklıklarda (>800 °C) yüksek mekanik dayanıklılık ve termal kararlılık sunar. Ancak düşük sıcaklıklarda (<800 °C)

elektrokimyasal aktivitesi sınırlıdır ve iyon iletkenliği düşüktür. Bu özellikleri nedeniyle yüksek sıcaklık uygulamaları için uygundur [78].

Lantanyum stronsiyum kobalt ferrit (LSCF), düşük sıcaklıklarda (600–800 °C) dahi yüksek elektrokimyasal aktivite ve oksijen iyon iletkenliği sağlar. Ancak, yüksek sıcaklıklarda termal genleşme uyumsuzluğu oluşabilir ve karbon birikimi gibi sorunlar gözlemlenebilir [78].

Samaryum katkılı seryum (SDC), yüksek iyon iletkenliği ve LSCF gibi malzemelerle kombinasyon halinde düşük sıcaklıklarda performansı artırmasıyla dikkat çeker. Ancak, yüksek sıcaklıklarda kimyasal kararlılık sınırlamaları vardır [79].

Anot malzemeleri, hidrojen oksidasyon reaksiyonunu (HOR) katalize eden özellikleriyle önem taşır.

Nikel-İttriya stabilize zirkonyum (Ni-YSZ), yüksek elektriksel iletkenlik ve hidrojen yakıtında yüksek katalitik aktivite sunar. Ancak, karbon birikimi ve kükürt zehirlenmesine karşı duyarlıdır. Yüksek sıcaklıklarda sinterleme ve yüzey bozulması riski taşır [79].

Samaryum katkılı seryum (SDC), hidrokarbon bazlı yakıtlarda karbon birikimine karşı dayanıklılığı ve düşük sıcaklıklarda performans sağlamasıyla ön plana çıkar. Bununla birlikte, yüksek sıcaklıklarda kimyasal kararlılığı sınırlıdır [78].

Lantan kromit (LaCrO₃), karbon birikimine karşı dayanıklıdır ve hidrokarbon yakıtlarla kullanılabilir. Ancak, elektriksel iletkenliği Ni-YSZ'ye kıyasla düşüktür [81].

Gadolinyum katkılı seryum (GDC), yüksek iyon iletkenliği sağlar ve karbon birikimini önler. Ancak sıcaklık arttığında kararlılık kaybı görülebilir. Bu nedenle, düşük sıcaklık uygulamaları için uygun bir seçenektir [82].

KOYP'lerinde kullanılan katot ve anot malzemeleri, hücre performansını artırmak ve uzun süreli kararlılık sağlamak için optimize edilmiştir. Tablo 2.6'da katot ve anot malzemeler karşılaştırmalı olarak verilmiştir.

Tablo 2.6. Katot ve anot malzemelerin karşılaştırılması

Elektrot	Malzeme	Avantajlar	Dezavantajlar
Katot	LSM	Termal kararlılık, mekanik dayanıklılık	Düşük sıcaklıkta düşük aktivite
Katot	LSCF	Yüksek iyon iletkenliği, düşük sıcaklıkta aktivite	Termal uyumsuzluk, karbon birikimi
Katot	SDC	Yüksek iyon iletkenliği, hibrit kombinasyon	Kimyasal kararlılık sorunları
Anot	Ni-YSZ	Yüksek iletkenlik, mekanik dayanıklılık	Karbon birikimi, sinterleme
Anot	SDC	Karbon birikimine dayanıklı, düşük sıcaklık performansı	Yüksek sıcaklıkta kararlılık eksikliği
Anot	LaCrO ₃	Karbon birikimine dayanıklılık, hidrokarbon uyumu	Düşük iletkenlik
Anot	GDC	Yüksek iyon iletkenliği, karbon birikimini önleme	Yüksek sıcaklıkta stabilite eksikliği

Sonuç olarak, KOYP'lerinde katot ve anot malzemelerinin seçimi, uygulamanın sıcaklık aralığı, yakıt türü ve performans gereksinimlerine bağlıdır. Katot için LSM gibi termal kararlılık, mekanik dayanıklılığa sahip malzeme tercih edilirken, anot için Ni-YSZ yaygın olarak kullanılmaktadır. Ancak, karbon birikimi ve kükürt zehirlenmesi gibi sorunlara çözüm getiren perovskit yapıdaki malzemeler veya doping stratejileri daha düşük sıcaklıklarda ve hidrokarbon yakıtlarla yüksek performans sağlamaktadır [83].

Katı oksit yakıt pilleri için kullanılan elektrolit malzemeleri, yakıt hücresinin iyon iletkenliği, termal dayanıklılığı ve genel performansı açısından kritik öneme sahiptir. İdeal bir elektrolit, yüksek iyon iletkenliğine sahip olmalı, elektron iletkenliği göstermemeli, kimyasal olarak kararlı olmalı ve katot ile anot arasında uyum sağlamalıdır. Bu bağlamda, KOYP'lerinde kullanılan en uygun elektrolit malzemeleri ve bu malzemelerin avantajları ile dezavantajları aşağıda açıklanmıştır [13, 14].

İtriy stabilize zirkonyum (YSZ), zirkonyum dioksit (ZrO₂) yapısına itriyum oksit (Y₂O₃) katkılanarak stabilize edilen YSZ, yüksek sıcaklıklarda (~1000 °C) yüksek iyon iletkenliği sağlar. Aynı zamanda termal dayanıklılığı yüksek olup mekanik olarak kararlıdır. Ancak düşük sıcaklıklarda (<700 °C) iyon iletkenliği azalır ve üretim maliyeti yüksektir [84].

Samaryum Katkılı Seryum (SDC), seryum dioksit (CeO₂) yapısına samaryum (Sm³⁺) katkılanarak elde edilen SDC, düşük sıcaklıklarda (~600–800 °C) dahi yüksek iyon

iletkenliđi ve karbon birikimine karřı dayanıklılık sunar. Bununla birlikte, yüksek sıcaklıklarda indirgenme sorunu yařayabilir ve anotla reaksiyona girme riski tařır [85].

Gadolinium Katkılı Seryum (GDC), seryum dioksit (CeO_2) yapısına gadolinium (Gd^{3+}) katkılanarak elde edilen GDC, düşük sıcaklıklarda yüksek iyon iletkenliđi sađlar ve kimyasal dayanıklılıđı SDC'ye gre daha iyidir. Ancak yüksek sıcaklıklarda indirgenme ve anotla kimyasal uyumsuzluk riski mevcuttur [86].

Lantan Gallat (LSGM), lantan galyum oksit (LaGaO_3) yapısına stronsiyum (Sr^{2+}) ve magnezyum (Mg^{2+}) katkılanarak elde edilen LSGM, orta sıcaklıklarda ($\sim 600\text{--}800\text{ }^\circ\text{C}$) yüksek iyon iletkenliđi ve düşük aktivasyon enerjisi ile yüksek verimlilik sađlar. Ancak katot ve anot malzemeleriyle kimyasal reaksiyon riski tařır ve retim maliyeti yksektir [87].

Bizmut Oksit Bazlı Seramikler, YSZ'ye gre daha yksek iyon iletkenliđi sunar ve düşük sıcaklıklarda ($>500\text{ }^\circ\text{C}$) alıřabilir. Ancak yksek sıcaklıklarda termal kararlılıđı dřktr ve faz dnřmleri meydana gelebilir [88].

Proton İletken Elektrolitler, hidrojen iyonlarını tařıma yeteneđine sahiptir. rneđin, BaCeO_3 ve BaZrO_3 , düşük sıcaklıklarda ($\sim 400\text{--}600\text{ }^\circ\text{C}$) yksek verimlilik sađlar. Karbon birikimini ve korozyonu azaltma avantajına sahip olsa da sulu ortamda kimyasal kararlılıđı dřktr ve retim sreleri karmařıktır [89].

Yapılan alıřmada, KOYP'leri elektrolitlerinde ana malzeme olarak yksek iyonik iletkenliđi gz nnde bulundurularak 8YSZ elektrolit malzemesi olarak seilmiřtir.

KOYP'lerinde kullanılan dzlemsel geometride yakıt ve oksitleyici gazlar, hcrenin yzeylerine paralel uzanan kanallar boyunca dađılırken, tbler hcrelerde gazlar silindirik tbn iinde veya dıřından kanal yapısına gerek duyulmadan akıřa sađlarlar. Dzlemsel tasarımlar genellikle dikdrtgen veya kare bir aktif alan tanımlar ve hcreler yassı plakalar halinde istiflenir. Ayrıca literatrde dzlemsel tasarımın, hcre ve yıđın imalatının grece kolay olması, hcrelerin sık istiflenebilmesi ve yksek hacimsel g yođunluđu sađlaması nedeniyle en yaygın tercih edilen geometri olduđu bilinmektedir [13, 39].

Dzlemsel hcre tasarımında, hangi katmanın tařıyıcı (destek) grevini stlendiđi genellikle tabakaların kalınlıkları incelenerek belirlenir. Hcrede elektrolit ve elektrot kalınlıkları karřılařtırıldıđında, hcrenin anot destekli bir yapı olduđu grlmektedir. Modern dzlemsel KOYP'lerde en yaygın tasarım, gzenekli bir nikel-YSZ anottan oluřan kalın bir destek tabakası zerine ince bir elektrolit kaplanmasıdır [17]. Endstride,

anot destekli düzlemsel hücrelerde YSZ elektrolit kalınlığı genellikle $\sim 10\text{--}20\ \mu\text{m}$ gibi çok ince tutulurken, gözenekli anot tabakası yüzlerce mikron (örneğin $500\text{--}700\ \mu\text{m}$) kalınlığa ulaşabilir [79]. Bu sayede ince elektrolitin iyon iletimi iyileşir, iç direnç azalır ve hücre mekanik desteğini kalın anottan alır. Hücrede elektrolitin elektrotlara kıyasla çok ince olması, bu yapının anot destekli olduğunu göstermektedir.

Düzlemsel hücre tasarımının bir diğer avantajı, hücrelerin düz yığınlar halinde yakın paketlenebilmesi sayesinde yüksek güç yoğunluğu elde edilmesidir [90]. İnce elektrolitli anot destekli yapı iç dirençleri düşürdüğü için aynı güç çıkışını daha düşük çalışma sıcaklığında alabilmeye imkan tanır [81]. Bu durum termal açıdan bir avantajdır; zira çalışma sıcaklığının düşmesi malzeme streslerini ve hücreler arası ısı farklarını azaltabilir. Anot destekli tasarımda anot ve elektrolit malzemelerinin (Ni-YSZ ve YSZ) termal genleşme katsayıları birbirine oldukça uyumludur, bu da sıcaklık değişimlerinde tabakalar arasında mekanik gerilme oluşmasını minimize eder. Yapılan çalışmada yukarıda belirtilen sebepler doğrultusunda KOYP için hücre geometrisi düzlemsel ve anot destekli olarak seçilmiştir.

Ancak düzlemsel geometri, genel olarak mekanik zorlanmalara karşı tübüler geometri kadar toleranslı değildir [91]. Düz plakaların ısınma–soğuma döngülerinde eşit olmayan genleşmesi çatlaklara yol açabilir; hücre boyutları büyüdükçe merkez ve kenar kısımlarında sıcaklık gradyanları oluşabilir. Ayrıca düzlemsel yığınlarda gaz sızdırmazlığını sağlamak için hücrelerin kenarlarında seramik veya cam contalar kullanılır. Bu contalar, mekanik gerilmeler ve termal döngüler sırasında hasar görebilir. Bu yapının seçimi, yüksek güç çıktısı hedeflendiğinde mantıklıdır; ancak tasarımcıların termal yönetim, montaj ve sızdırmazlık detaylarına özen göstermesi gereklidir.

2.8. Comsol Multiphysics’de Kullanılan Denklemler ve Kabuller

2.8.1 Hidrojen yakıt modülü

Bu katı modelde, katı oksit yakıt pili (KOYP) içerisindeki elektrik akımı dağılımı, iyon taşınımı ve gaz fazı difüzyonunu simüle etmek için kullanılır. Modelde elektrot reaksiyonları ve yakıt difüzyon mekanizmaları dikkate alınır. Elektrik Alan Denklemleri: Toplam akım korunumu Denklem (2.26)’da verilmiştir:

$$\nabla \cdot i_j = i_{v,\text{total}} \quad (2.26)$$

Burada toplam akımın korunumu sağlanmaktadır. i_j elektrolit akım yoğunluğu, $i_{v,\text{total}}$ ise hacimsel akım kaynağıdır.

Elektrolit akım yoğunluğu Denklem (2.27)'de verilmiştir:

$$i_j = -\sigma_l, \text{eff} \nabla \phi_l \quad (2.27)$$

Elektrolit içindeki akım yoğunluğu, etkin iyonik iletkenlik ($-\sigma_l, \text{eff}$) ve elektrolit potansiyeli (ϕ_l) üzerinden belirlenir.

Elektronik iletken akım yoğunluğu Denklem (2.28)'de verilmiştir:

$$\nabla \cdot i_s = -i_{v, \text{total}} \quad (2.28)$$

Elektronik iletken (anot veya katotta bulunan metal iletken) için akım yoğunluğu korunur ve toplam akım kaynağına karşılık gelir. Elektronik iletkenlik Denklem (2.29)'da verilmiştir:

$$i_s = -\sigma_s \nabla \phi_s \quad (2.29)$$

Elektronik iletken (örneğin, anot veya katot malzemesi) içindeki akım yoğunluğu, malzemenin iletkenliği (σ_s) ve elektrik potansiyeli (ϕ_s) üzerinden belirlenir.

Kütle Taşınımı Denklemleri:

Gaz fazı difüzyonu ile kütle korunumu Denklem (2.30)'da verilmiştir:

$$\nabla \cdot j_j + \rho (u \cdot \nabla) \omega_j = R_{i, \text{total}} \quad (2.30)$$

Burada j_j , türün kütleli akı; ω_j , tür kütle kesri; u , hız vektörü ve $R_{i, \text{total}}$ ise toplam kaynak terimini ifade eder.

Fick'in difüzyon kanunu Denklem (2.31)'de verilmiştir:

$$j_j = -\rho \omega_j \sum D_{ik, \text{eff}} \nabla \phi_k \quad (2.31)$$

Kütleli akı, etkin difüzyon katsayıları ($D_{ik, \text{eff}}$) ve derişim gradyanları üzerinden belirlenir. Moleküler difüzyon tanımı Denklem (2.32)'de ifade edilmiştir:

$$d_k = \nabla x_k + \left(\frac{1}{p_A} \right) [(x_k - \omega_k) \nabla p_A], x_k = \left(\frac{\omega_k}{M_k} \right) M_n \quad (2.32)$$

Bu denklem, moleküler difüzyonun tür konsantrasyonu (x_k) ve basınç (p_A) üzerinden tanımlandığını gösterir.

Gaz karışımı modeli: Seçilen türler, H_2O (Su Buharı) ve N_2 (Azot)'dur. Bunlar, KOYP'deki anot tarafındaki gaz bileşimini temsil eder.

Yoğunluk Denklem (2.33) ile ifade edilir:

$$\rho = \frac{(p_A M_n)}{(RT)} \quad (2.33)$$

Burada p_A , toplam basınç; M_n , karışımın ortalama mol kütlesi; R gaz sabiti ve T sıcaklıktır.

Elektrot reaksiyonları: KOYP'nin elektroliti İttriyumla Stabilize Edilmiş Zirkonya (YSZ) gibi iyonik iletkenlik sağlayan bir seramiktir. İyon Taşıyıcısı Entropisi: $S_{ion} = 14.5$ J/(mol·K) olarak belirlenmiştir. Bu, iyonik iletimde entropik değişimleri temsil eder. Referans Hidrojen Elektrot Sıcaklığı: $T_{RHE} = 1173.2$ K (900 °C için). KOYP anot tarafındaki hidrojen reaksiyonları için referans sıcaklık değeridir.

Hidrojen yakıt pili modelinde kullanılan temel parametreler; elektriksel, kütle taşınımı, akışkan dinamiği ve termal özellikler açısından belirlenmiştir. Elektriksel parametreler arasında elektrolit ve elektrik potansiyellerinin lineer olarak kabul edilmesi, elektrotlar arasındaki iyon hareketi ve gerilim farkının doğrusal bir şekilde değiştiğini göstermektedir.

Akışkan dinamiği açısından, modelde dinamik viskozite için COMSOL'ün yerleşik fonksiyonları kullanılmış ve türbülansın ihmal edildiği belirtilmiştir. Bu, sistemin düşük hızlarda ve laminer akış koşullarında çalıştığını gösterir. Termal parametreler içinde referans sıcaklık değeri 1173.2 K (900 °C) olarak belirlenmiş olup, bu sıcaklık katı oksit yakıt pillerinde (KOYP) yaygın olarak kullanılan bir değerdir. Belirtilen bu parametreler, COMSOL'de fiziksel modellerin uygulanması açısından önemli olup, modelin doğruluğu açısından uygun sınır koşulları ile desteklenmelidir (Tablo 2.7).

Tablo 2.7. Hidrojen yakıt pili model parametreleri

Parametre	Değer / Ayar
Elektrolit Potansiyeli	Lineer
Elektrik Potansiyeli	Lineer
Kütle Oranı (Mass Fraction)	Lineer
Dinamik Viskozite	Dahili
Gaz Yoğunluk Modeli	İdeal Gaz
Türbülans	Kullanılmıyor
Referans Sıcaklık	1173,2 K

Sınır koşulları (O_2 ve H_2 gaz fazları için modelleme, gaz akış kanalları): İdeal Gaz Modeli kullanılarak gaz hareketi modellenmiştir. Difüzyon mekanizması, ikili difüzyon katsayıları dahili modelden alınmıştır. Membran modeli, membran bölgesi elektrokimyasal reaksiyonları yönetir ve iyon taşınımını sağlar.

Anot ve Katot Gaz Akış Kanalları modellenmiştir. Gaz karışımı, H_2 ve N_2 'dir. Taşıma mekanizması, konveksiyon ve difüzyondur. Gaz karışımı, O_2 ve N_2 'dir. Difüzyon mekanizması, knudsen difüzyonu ve gözenekli duvar etkileşimleridir.

Elektrot difüzyon modelleri (H_2 gaz difüzyon elektrotu, O_2 gaz difüzyon elektrotu): Hidrojen gazı elektrotunda toplam hacimsel akım yoğunluğu, $i_{v,total}$, matris ve çift katman difüzyonu terimlerinin toplamı olarak Denklem (2.34)'te ifade edilmiştir:

$$i_{v,total} = \sum i_{v,m} + i_{v,dl} \quad (2.34)$$

Burada $i_{v,m}$, matris içindeki akım yoğunluğunu, $i_{v,dl}$ ise çift katman akımını temsil etmektedir.

Toplam reaksiyon oranı, $R_{i,total}$, bireysel reaksiyon hızlarının toplamı ve gaz fazındaki bileşenlerin etkisiyle Denklem (2.35)'te belirlenmektedir:

$$R_{i,total} = \sum R_{i,m} - \omega_j Q_m \quad (2.35)$$

Burada ω_j gaz fazındaki bileşen kesirini, Q_m ise toplam reaksiyon hızını ifade etmektedir. Denklem (2.36)'da verilmiştir:

$$Q_m = \sum \sum R_{i,m} \quad (2.36)$$

Hidrojen elektrotu için etkin iletkenlikler şu şekilde tanımlanmıştır: Elektriksel ve elektrolitik iletkenlik olarak Denklem (2.37)'de ifade edilmiştir:

$$\sigma_l, eff = f_l \sigma_l, Dik, eff = f_g D_{ik} \quad (2.37)$$

Burada f_l ve f_g malzemenin gözeneklilik faktörleri, σ_l elektrolitin iyonik iletkenliği, D_{ik} ise difüzyon katsayısıdır.

Gözenek içi difüzyon modeli, Knudsen difüzyon mekanizmasını içermektedir. Knudsen ve gözenek-duvar (pore-wall) difüzyonu Denklem (2.38) ile ifade edilmiştir:

$$D_{W,i,eff} = f_g \left(\frac{d_{pore}}{3} \right) \sqrt{\left(\frac{8RT}{M_i} \right)} \quad (2.38)$$

Elektriksel iletkenlik Denklem (2.39) ile ifade edilir.

$$\sigma_s, eff = f_l \sigma_s \quad (2.39)$$

Difüzyon modeli denklem (2.40) ile ifade edilir:

$$D_{W,i,eff} = f_g \left(\frac{d_{pore}}{3} \right) \sqrt{\left(\frac{8RT}{M_i} \right)} \quad (2.40)$$

Burada d_{pore} , gözenek çapı; R, gaz sabiti; T, sıcaklık ve M_i türün mol kütlesidir.

2.8.2 Brinkman eşitlikleri ile serbest ve gözenekli akış modeli (anot- katot)

Bu model, katot gaz difüzyon elektrotu içindeki akışkan hareketini ve gözenekli ortam etkilerini ele alır. Brinkman denklemi, gözenekli ve serbest akış bölgeleri arasındaki geçişi tanımlamak için kullanılır.

Momentum Korunumu (Brinkman Denklem Formu): Brinkman denklemi, gözenekli ortam içinde akışkan hareketini Navier-Stokes ve Darcy kanunlarıyla birleştirir ve Denklem (2.41) ile ifade edilir:

$$\frac{1}{\epsilon_p} * \rho (uc \cdot \nabla) uc * \frac{1}{\epsilon_p} = \nabla \cdot [-p_c I + K] - \left(\frac{\mu \kappa (-1) +}{\beta_f \rho |uc|} \right) uc + \frac{Q_m}{\epsilon_p 2} \quad (2.41)$$

Burada ϵ_p , gözeneklilik; ρ , Yoğunluk; uc , hız alanı; p_c , basınç; K , gerilme tensörü; μ , Dinamik viskozite; κ , geçirgenlik katsayısı; β_f , kayıp katsayısı; Q_m , kütle kaynağıdır.

Kütle korunumu Denklem (2.42) ile ifade edilir:

$$\nabla \cdot (\rho uc) = Q_m \quad (2.42)$$

Burada kütle üretim ya da tüketim terimini ifade eder.

Gerilme tensörü Denklem (2.43) ile ifade edilir:

$$K = \mu \left(\frac{1}{\epsilon_p} \right) (\nabla uc + (\nabla uc)T) - \left(\frac{2}{3} \right) \mu \left(\frac{1}{\epsilon_p} \right) (\nabla \cdot uc)I \quad (2.43)$$

Bu denklemler, COMSOL'de Gözenekli Ortam Akışı (Porous Media Flow) fizik modülü kullanılarak çözülebilir. Brinkman denklemi, serbest akış (Navier-Stokes) ile gözenekli akış (Darcy) arasındaki geçişi sağlamak için uygundur ve KOYP katot elektrotunda gaz difüzyon katmanındaki akışkan hareketini modellemek için kritik öneme sahiptir.

Gözeneklilik (ϵ_p), model girişine bağlı olarak belirlenmektedir. Bu, elektrot ve gaz difüzyon katmanı (GDL) gibi gözenekli bölgelerin fiziksel özelliklerine göre değişebileceğini gösterir. Geçirgenlik katsayısı (κ) değeri ise literatürden alınan GDL verilerine dayanmaktadır. Gözenekli ortamların gaz difüzyon özelliklerini doğru modellemek için bu tür literatür verilerine dayanılması önemlidir.

Modelde sıkıştırılabilirlik, düşük Mach sayısı ($Ma < 0.3$) kabul edilerek modellenmiştir. Bu durum akışın sıkıştırılmaz veya düşük sıkıştırılabilir olduğu anlamına gelir ve gaz akışkanının hızının ses hızına kıyasla oldukça düşük olduğunu gösterir. Basınç referans seviyesi (P_{ref}), atmosfer basıncı (p_{atm}) olarak kabul edilmiştir.

Modelin termal parametreleri arasında referans sıcaklık (T_{ref}) yer almakta olup, 1173,2 K (900°C) olarak belirlenmiştir. Bu sıcaklık, katı oksit yakıt pilleri (KOYP) gibi yüksek sıcaklık gerektiren uygulamalar için tipiktir. Türbülans modeli kullanılmamaktadır, yani akış tamamen laminar olarak ele alınmıştır. Bu, gaz difüzyon katmanı ve elektrot içindeki akış için mantıklı bir yaklaşımdır.

Son olarak, modelin sayısal çözüm yöntemi olarak P1+P1 ayırıklaştırma şeması kullanılmıştır. Bu hem basınç hem de hız için birinci derece elemanlar kullanıldığını gösterir. COMSOL'de bu parametreler Gözenekli Ortam Akışı (Porous Media Flow) ve Brinkman Eşitlikleri ile modellenenabilir. (Tablo 2.8)

Tablo 2.8. Serbest ve gözenekli akış model parametreleri

Parametre	Değer / Ayar
Gözeneklilik (ϵ_p)	Model girişine bağlı
Geçirgenlik (κ)	Literatürden alınan GDL verileri
Sıkıştırılabilirlik	$Ma < 0.3$ (Düşük Mach sayısı)
Basınç Referans Seviyesi (Pref)	p_{atm}
Referans Sıcaklık (Tref)	1173,2 K
Türbülans	Türbülans modeli kullanılmaz
Ayrıklaştırma	P1+P1

Sınır Koşulları (Giriş, Çıkış ve Duvar Koşulu)

Giriş koşulu Denklem (2.44) ile ifade edilir:

$$-\int \Omega \rho (uc \cdot n) dS = m \quad (2.44)$$

Burada m kütle akışını temsil eder ve iki bileşenli giriş olarak tanımlanmıştır ve $m = m_{O_2} + m_{N_2}$ olarak ifade edilir.

Çıkış basıncı Denklem (2.45) ile ifade edilir:

$$n \cdot [-pc \, I + K]n = -\hat{p}_0 \quad (2.45)$$

Çıkış geri akışın engellenmesi Denklem (2.46) ile ifade edilir:

$$\hat{p}_0 \leq p_0, uc \cdot t = 0 \quad (2.46)$$

Burada p_0 , ortam basıncını; t, çıkış yönündeki akış hızını temsil eder. Çıkış bölgesinde geri akışın önlenmesi için basınç sınırlandırılmıştır.

Hareket olmayan duvar Denklem (2.47) ile ifade edilir:

$$uc = 0 \quad (2.47)$$

Bu, serbest veya gözenekli akışkanın duvar boyunca sıfır hızla hareket ettiğini, yani yapışkan (viskoz) olduğu kabul edildiğini gösterir.

Gözenekli alanlarda duvar koşulu Denklem (2.48) ile ifade edilir:

$$uc|_{\delta ps = 0} = utr, \delta ps \left(\frac{h1}{2}, c\beta \right) \quad (2.48)$$

Burada utr , geçiş hızını; δ_{ps} ise gözenekli ortamın karakteristik uzunluğunu temsil eder.

İlk değerler için başlangıç hızı: $u_x = 0$, $u_y = 0$, $u_z = 0$ (Tüm bileşenler sıfır), tüm hız bileşenleri başlangıçta sıfır olarak tanımlanmıştır. Yani sistemde başlangıçta hareket yoktur. Başlangıç Basıncı: $p = 0$ Pa, modelde başlangıç basıncı sıfır olarak alınmıştır.

Bu sınır koşulları, COMSOL'deki Brinkman Akışı, Navier-Stokes ve Gaz Difüzyon Modelleri ile uyumlu bir şekilde kullanılabilir. Giriş koşulu, belirli bir kütle akışı sağlayarak gaz bileşenlerinin taşınımını ve difüzyonunu kontrol eder. Çıkış koşulu, geri akışı önleyerek sistemin stabilitesini artırır. Duvar koşulları, gözenekli ve serbest akış bölgelerinde farklı hız sınırlarını tanımlayarak fiziksel tutarlılığı sağlar. Başlangıç değerleri, sistemin statik başlangıç durumunu ifade eder.

2.8.3 Katı mekaniği modülü

Katı mekaniği modelinde Newton'un ikinci yasası, denge denklemi, gerilme-gerinim ilişkileri ve malzeme özellikleri kullanılarak hesaplamalar yapılmaktadır. Katı mekaniğin temelini oluşturan bu denklemler, mekanik yapıların içindeki gerilme ve vücut kuvvetlerinin nasıl dağıldığını belirlemek için kullanılır.

Denge denklemi (momentum korunumu) Denklem (2.49) ile ifade edilir:

$$0 = \nabla \cdot S + F_v \quad (2.49)$$

Burada S , gerilme tensörü olup malzemenin iç gerilmelerini temsil eder. F_v : Vücut kuvvetleri (Body forces), dış kuvvetler veya hacimsel kuvvetlerdir.

Gerilme ilişkisi, gerilme S toplam olarak Denklem (2.50) ile tanımlanır:

$$S = S_{inel} + S_{el} \quad (2.50)$$

Burada S_{inel} , in-elastik gerilme, plastik deformasyon veya viskoelastik etkilerden kaynaklanan gerilmeleri temsil eder. S_{el} ise elastik gerilme, malzemenin elastik tepkisinden doğan gerilmelerdir.

Elastik gerilme için Hooke kanunu kullanılarak Denklem (2.51) ile ifade edilir:

$$S_{el} = \frac{C}{\epsilon_{el}} \quad (2.51)$$

Burada C , malzeme rijitlik tensörü malzemenin mekanik özelliklerini belirleyen katsayıdır. ϵ_{el} ise elastik şekil değiştirme yani elastik deformasyon miktarını gösterir.

Bu denklemler, malzemenin elastik-plastik davranışını belirlemek için kullanılan temel ilişkilerden biridir.

Gerilme ve gerinim arasındaki ilişki Denklem (2.52) ile ifade edilir:

$$\epsilon = \frac{1}{2(\nabla u + (\nabla u)^T)} \quad (2.52)$$

Burada u , yer deęiřtirme vektörü olarak bir noktanın deformasyon sonucu nasıl hareket ettięini tanımlar. ϵ ise gerinim tensörü, malzemenin birim uzunluktaki deęiřimini temsil eder.

Bu ifade, doęrusal elastisite teorisinde kullanılan Cauchy gerinim tensörü olarak bilinir. Malzeme modeli doęrusal elastik olduęu sürece geçerlidir. Ancak plastik deformasyon veya viskoelastik malzeme davranıřı gibi ek mekanizmalar tanımlandıęında, genişletilmiş gerinim tanımları kullanılır.

Bu denklemler, katı mekanięi analizlerinde malzeme davranıřını anlamak için temel fiziksel prensipleri içerir. Elastik ve plastik deformasyonun ayrıřtırılması, malzeme analizlerinde kritik öneme sahiptir. Hooke kanunu, malzeme rijitlik matrisini kullanarak elastik deformasyonu tanımlar. Gerinim tensörü, malzeme deformasyonunu matematiksel olarak ifade etmek için kullanılır.

Malzeme modelleri, katı mekanięi modülünde kullanılan lineer elastik malzeme için malzeme özellikleri Denklem (2.53) ile tanımlanmıřtır:

$$C = C(E, \nu) \quad (2.53)$$

Burada E , Young Modülü; malzemenin rijitlięini ve elastik deformasyona karřı direncini belirler, ν ise Poisson oranıdır, malzemenin enine ve boyuna deformasyon oranını ifade eder.

Malzeme modeli izotropik olarak seęildięi için rijitlik tensörü sabit kabul edilmiřtir. Bu, malzemenin tüm yönlerde aynı mekanik özelliklere sahip olduęu anlamına gelir. Anizotropik malzemeler için ise rijitlik tensörü yön baęımlı olarak deęiřir.

Yapısal modelleme detayları, yarı statik (Quasi-static) model kullanılmaktadır. Bu model zaman baęımsız olarak çözülmektedir. Model zamandan baęımsız olarak çözülmektedir. Bu, düşük hızda gerçekleřen yüklemelerde veya dinamik etkilerin ihmal edilebileceęi durumlarda kullanılır.

Baęıl Hız Alanı: u_x, u_y, u_z eksenlerinde yer deęiřtirme bileřenleri tanımlanmıřtır. Eksenlerinde yer deęiřtirme bileřenleri tanımlanmıřtır. Bu, modelde mekanik deformasyonun üç boyutta incelendięini gösterir.

Baęıl Hız Alanı Türevleri: $\partial u / \partial t$ olarak tanımlanmıřtır. olarak tanımlanmıřtır. Bu, deformasyonun zaman içindeki deęiřimini ifade eder ve viskoelastik veya zamana baęlı deformasyon analizlerinde önemlidir.

2.8.4. Isı transferi temel denklemi (enerji korunumu)

Bu bölüm, ısı transferi temel denklemlerini, özellikle enerji korunumu ve Fourier ısı iletimi denklemlerini içermektedir. Enerji korunumu denklemi, Denklem (2.54) ile ifade edilir:

$$\rho C_p u \cdot \nabla T + \nabla \cdot q = Q + Q_{ted} \quad (2.54)$$

Bu denklem, katı bir cisim içinde ısı taşınımını ve yayılımını açıklamaktadır. Burada ρ , yoğunluk; C_p , özgül ısı kapasitesi ($J/(kg \cdot K)$); u , hız vektörü (m/s); ∇ , operatör (Gradient); T , sıcaklık (K); q , ısı akısı (W/m^2); Q , ısı üretimi (W/m^3); Q_{ted} , termoelektrik ısı üretimidir (W/m^3). Bu denklem hem iletim hem konveksiyon hem de iç ısı üretimi etkilerini içermektedir.

Katılarda ısı iletimi Fourier yasasına göre Denklem (2.55) ile tanımlanır:

$$q = -k \nabla T \quad (2.55)$$

Burada k , ısı iletkenlik katsayısı ($W/(m \cdot K)$); ∇T , sıcaklık gradyanıdır (K/m). Bu denklem, ısı akısının her zaman sıcaklık gradyanı yönüne ters olduğunu gösterir.

2.8.5. Elektrik akımları modülü

Akım korunumu denklemi, elektrik yükü korunumu yasasına dayanan Denklem (2.56) ile ifade edilir:

$$\nabla \cdot J = Q_{j,v} \quad (2.56)$$

Bu denklem, elektrik yükü korunumu yasasına dayalıdır. Burada J , akım yoğunluğu (A/m^2), elektrik akımının birim alan başına dağılımını temsil eder. $Q_{j,v}$ ise hacimsel akım kaynağıdır (A/m^3). Sistem içinde oluşan veya tüketilen elektrik akımını ifade eder. ∇ , Diverjans operatörü, akım yoğunluğunun değişimini tanımlar.

Bu denklem, elektrik yükünün korunumu ilkesine dayanmaktadır. Elektrik akımı sabit bir ortamda değişmeden akıyorsa, $Q_{j,v}=0$ olur ve akım korunumu şu hale gelir:

$\nabla \cdot J=0$ bu ifade, elektrik alanın kaynak veya batarya gibi bir iç elektriksel üretim veya tüketim olmadığına korunduğunu gösterir.

Elektrik akımı denklemi, elektrik akımı malzeme içinde Ohm Kanunu ile Denklem (2.57) ile tanımlanır:

$$J = \sigma E + J_e \quad (2.57)$$

Burada σ , elektrik iletkenliği (S/m) malzemenin elektrik akımını iletme kapasitesini tanımlar. E ise elektrik alanı (V/m) potansiyel farkından türetilir. J_e , harici akım yoğunluğudur (A/m^2) ve sistemde dış akım kaynaklarının varlığını ifade eder.

Elektrik alanı, elektrik potansiyelinden türetilir ve Denklem (2.58) ile ifade edilir:

$$E = -\nabla V \quad (2.58)$$

Burada V, elektrik potansiyeli (V) olarak gösterilir. Negatif işaret, elektrik alanının yüksek potansiyelden düşük potansiyele doğru yönlendiğini gösterir.

Elektrik yalıtımı şartı, elektrik yalıtımına sahip sınırlar için Denklem (2.59) ile ifade edilir:

$$n \cdot J = 0 \quad (2.59)$$

Denklem (2.59), yüzey boyunca net akımın sıfır olduğunu belirtir. Bu tip sınır koşulları izole edilmiş yüzeyler (elektiriksel olarak yalıtılmış malzemeler veya dışarıdan bağlantısı olmayan bölgeler) için kullanılır.

Dielektrik model (D-E Bağıntısı), elektrik akı yoğunluğu, dielektrik özelliklere sahip malzemeler için malzeme dielektrik özelliklerine sahipse Denklem (2.60) ile ifade edilir:

$$D = \epsilon_0 \epsilon_r E \quad (2.60)$$

Burada D, elektrik akı yoğunluğu (C/m²); ϵ_0 , serbest uzay dielektrik katsayısı (F/m); ϵ_r , bağıl dielektrik katsayısı malzemenin elektrik alanı altındaki kutuplaşma kapasitesini gösterir. Bu bağıntı, dielektrik malzemelerin elektrik alan altındaki tepkisini modellemek için kullanılır. Yalıtkan ve yüklü ortamların elektromanyetik analizleri için temel bir bağıntıdır.

Yapısal modelleme detayları, Zref= 50Ω olarak tanımlanmıştır. Empedans (Z), alternatif akım (AC) sistemlerinde direnç, endüktans ve kapasitansın birleşik etkisini temsil eder. 50Ω referans empedans değeri, tipik olarak elektronik devrelerde ve RF (radyo frekansı) sistemlerinde kullanılan standart bir değerdir.

İkinci dereceden şekil fonksiyonu (Quadratic) yaklaşımı ile çözülmüştür. potansiyel dağılımının doğrusal olmayan bir şekilde değiştiği durumlar için daha doğru çözümler sağlar. Bu yaklaşım, yüksek doğrulukta ve düzgün bir potansiyel dağılımı elde etmek için kullanılır.

V=1V olarak verilmiştir. Bu, modelin başlangıçtaki elektriksel durumunu belirler. Statik veya zaman bağımlı analizlerde başlangıç koşulu olarak kullanılır.

2.8.6. Reaksiyon akış modülü

Gaz fazında kimyasal reaksiyonlar nedeniyle farklı türlerin kütle transferi gerçekleşir. Reaksiyon ürünleri ve girenler arasındaki toplam kütle transferi Denklem (2.61) ile ifade edilir:

$$Q_m = \sum R_i Q_m \quad (2.61)$$

Burada Q_m , fazlar arası toplam kütle transferi ($\text{kg/m}^3 \cdot \text{s}$) girenlerin ürüne dönüşümü sırasında madde taşınımını ifade eder. R_i ise her bir tür için kütleli reaksiyon oranını ($\text{kg/m}^3 \cdot \text{s}$) belirli bir bileşenin kimyasal reaksiyonlardaki dönüşüm hızını gösterir.

Stefan hızı, reaksiyonlar nedeniyle gaz fazındaki türlerin toplam hızı Stefan akışı ile Denklem (2.62) ile ifade edilir:

$$\rho_{us} = n \cdot \sum (j_i + \rho \cdot u_s \cdot \omega_i \cdot n) \quad (2.62)$$

Burada ρ , yoğunluk (kg/m^3); u_s , Stefan hızı (m/s) ise kütle transferi nedeniyle gaz fazında türlerin ortalama hızını tanımlar. n ; yüzey normal vektörü, türlerin taşınma yönünü belirler. j_i , türlerin difüzyon akısı ($\text{kg/m}^2 \cdot \text{s}$); ω_i , türlerin kütle kesri belirli bir türün toplam karışımındaki oranını gösterir.

Stefan akışı, gaz fazları arasındaki kütle taşınımını belirler ve konvektif-difüzyf taşınım mekanizmalarının bir kombinasyonu olarak çalışır. Özellikle hidrojen ve oksijen difüzyon süreçlerinde önemli bir parametredir.

Yapısal modelleme detayları, modellemede kullanılan yapısal düzenleme, hidrojen ve oksijenin gözenekli anot ve katot bölgelerindeki taşınımını ve reaksiyon süreçlerini ayrıntılı şekilde temsil edecek şekilde yapılandırılmıştır. Bu doğrultuda, hidrojen (H_2) gaz fazı için iki ana fiziksel arayüz kullanılmıştır. İlk olarak, akış modeli olarak Serbest ve Gözenekli Ortam Akışı - Anot (fp2) arayüzü uygulanmıştır. Bu model, hidrojenin anot tarafındaki gözenekli yapılarda serbest ve poroz ortam içerisindeki akışını temsil eder. İkinci olarak, tür taşınımı modeli olarak Hidrojen Yakıt Pili (fc) arayüzü entegre edilmiştir. Bu model, hidrojenin anot bölgesindeki tür taşınımını ve elektrokimyasal reaksiyonlarını simüle eder.

Benzer şekilde, oksijen (O_2) gaz fazı için de iki ayrı fiziksel modelleme arayüzü kullanılmıştır. Katot tarafındaki gaz akışı, Serbest ve Gözenekli Ortam Akışı - Katot (fp) arayüzü ile modellenmiştir. Bu sayede oksijenin gözenekli katot yapısındaki hareketi doğru biçimde hesaplanmaktadır. Oksijenin katot bölgesindeki tür taşınımı ve reaksiyon süreçleri ise yine Hidrojen Yakıt Pili arayüzü ile modellenmiştir. Her iki gaz fazına yönelik bu bağlantılı arayüzler, sistemdeki gaz taşınımı, difüzyon ve reaksiyon mekanizmalarının birlikte ele alınmasını sağlayarak daha gerçekçi bir fiziksel analiz imkânı sunar.

2.8.7. Termal genleşme modülü

Bir malzemenin sıcaklık değişimi nedeniyle maruz kaldığı şekil değişimi termal genleşme Denklem (2.63) ile tanımlanır:

$$\epsilon_{th} = \alpha(T)(T - T_{ref}) \quad (2.63)$$

Burada ϵ_{th} , termal genleşme gerinimi olup sıcaklık değişimi nedeniyle malzemenin genleşme veya büzülme miktarını ifade eder. $\alpha(T)$, sıcaklığa bağlı termal genleşme katsayısı (1/K) ve malzemenin sıcaklığa bağlı olarak nasıl genişlediğini veya daraldığını tanımlar. T, sıcaklık (K); T_{ref} , referans sıcaklığıdır (K). Bu denklem, ısı değişimi sonucu malzemenin genleşmesini veya büzülmesini gösterir.

Bu modelde kullanılan yapısal modelleme, ısı transferi ve mekanik yapı arayüzlerinin birlikte çalıştığı bir sistem olarak yapısal modelleme detayları ile yapılandırılmıştır. Bağlantılı arayüzler hem sıcaklık dağılımını hem de buna bağlı olarak oluşan mekanik tepkileri incelemek amacıyla entegre edilmiştir. Modelin girdilerinden biri olan referans sıcaklık, tüm yapısal ve termal analizler için genel bir başlangıç koşulu olarak tanımlanmıştır.

Malzemelerin sıcaklığa bağlı davranışlarını daha doğru şekilde yansıtmak için kesintili ısı genleşme katsayısı tercih edilmiştir. Bu yaklaşım, farklı sıcaklık aralıklarında değişen genleşme katsayılarının kullanılmasına olanak tanır ve böylece daha hassas bir termal genleşme modeli elde edilir.

Ayrıca, sistemde termo-mekanik etkiler de dikkate alınmıştır. Özellikle mekanik kayıplar ve termoelastik sönümler gibi faktörler modele entegre edilmiştir. Termoelastik sönümler, malzeme içerisinde sıcaklık değişimlerinden kaynaklanan genleşme ve mekanik yüklerin oluşturduğu iç gerilmelerin zamanla azalmasını ifade eder. Bu etkilerin göz önünde bulundurulması, modelin yapısal davranışları daha doğru öngörebilmesine olanak sağlar.

3. LİTERATÜR TARAMASI

Steele ve Heinzl (2001), YSZ'nin KOYP'lerinde kimyasal ve termal kararlılığına dair temel bilgiler vermiş ve LSM ile Ni-YSZ kombinasyonunun uyumluluğunu vurgulamıştır. Bu çalışma, bu tezde seçilen malzemelerin doğruluğunu desteklerken, yüksek sıcaklık dayanıklılığına yönelik teorik altyapı sağlamaktadır [88].

Gorte ve Vohs (2003) ise yaptıkları çalışmada, platin ve paladyum kaplamaların katalitik aktiviteyi artırarak karbon birikimini önlediğini göstermiştir. Bu durum, çalışmadaki ince film kaplama stratejilerini doğrudan desteklemektedir [92].

YSZ'nin iyon iletkenliği üzerindeki etkileri ve düşük sıcaklık uygulamaları için gerekli optimizasyonlar, elektrolit kalınlıklarının inceltilmesi gerektiğini vurgulayan çalışmalar, simülasyon odaklı yaklaşımı desteklemektedir [93].

Choi ve arkadaşları (2016), Mo dopinginin Ni-YSZ anotlarının termal kararlılığını artırdığı ve karbon birikimine karşı dayanıklılık sağladığını rapor etmiştir. Bu çalışma, Mo ve W doping stratejilerinin geçerliliğini desteklemektedir [94].

Sun ve ark. (2017), platin ve paladyum ince film kaplamalarının yüzey katalitik aktivitesini artırdığını ve elektrokimyasal performansı yükselttiğini deneysel olarak kanıtlamıştır. Kaplama kombinasyonlarının önemini vurgulayan bu çalışma, simülasyon sonuçlarının güvenilirliğini artırmaktadır [94].

Zhang ve ark. (2022), Pd kaplamaların karbon birikimini önleyerek hidrokarbon yakıtlarla çalışan KOYP'lerde yüksek dayanıklılık sağladığını göstermiştir. Bu, hidrojen yakıtlı sistemlerde kaplama uygulamalarını desteklemektedir [96].

Díaz-Aburto ve Colet-Lagrille (2023), Mo katkılı seriyum oksit ile KOYP performansının artırılabilirliğini ve farklı yakıt türlerinin elektrokimyasal süreçlere etkilerini incelemiştir [97].

Platin (Pt), üstün fiziksel ve kimyasal özellikleri ile enerji, elektronik, biyomedikal ve katalizör teknolojilerinde kritik bir malzeme olarak öne çıkmaktadır. Yüksek kimyasal stabilitesi sayesinde aşırı koşullarda dahi kararlılığını koruyan Pt, 9.43×10^6 S/m elektriksel iletkenliği ile en yüksek iletkenliğe sahip metallerden biridir [68].

Pt'nin mekanik dayanıklılığı ve yüzey gerilimini azaltan özellikleri, ince film kaplama teknolojilerinde kullanımını destekler. Ayrıca, hidrojen oksidasyonu ve oksijen indirgenme reaksiyonlarındaki (ORR) katalitik aktivitesi ile elektrot malzemesi olarak öne çıkmaktadır [98].

Optik yansımaya kabiliyeti ve yüksek yüzey enerjisi sayesinde optik cihazlarda ve homojen kaplama ihtiyaçlarında da kullanımı yaygındır. PEMYP'lerinde yüksek katalitik aktivite ve korozyon direnciyle kullanılmasının yanı sıra, elektrokimyasal reaksiyonlarda da enerji dönüşüm süreçlerinde avantaj sağlar [99].

Elektronik uygulamalarda ince ve hassas iletken katmanlar oluşturmak için, biyomedikal cihazlarda ise biyouyumluluğu ve korozyon direnci sağlamak amacıyla kullanılır [100]. Pt kaplamalar aynı zamanda sensör teknolojilerinde gaz ve biyosensör performansını artırmakta etkilidir [101].

Pt kaplamaların performansı kaplama kalınlığına ve yüzey pürüzlülüğüne bağlıdır. Genellikle 10–500 nm aralığında seçilen kaplama kalınlıkları uygulama türüne göre optimize edilir. Yüzey düzgünlüğü, elektrokimyasal reaksiyonlardaki etkinliği artırır. Çalışma ortamı sıcaklığı ve basıncı da performansı doğrudan etkiler [95]. Pt'nin yüksek maliyeti uygulamalarını sınırlasa da alaşım ve nanoyapı teknikleri bu etkiyi azaltmaya yöneliktir [99, 103]. Yüzey kontaminasyonu gibi sorunlara karşı yüzey modifikasyonu üzerine araştırmalar sürmektedir [100]. Gelecekte düşük maliyetli üretim yöntemleri ve nano yapılandırılmış Pt filmleri, bu alandaki performansın optimize edilmesinde belirleyici olacaktır [101].

Paladyum (Pd), yüksek katalitik ve kimyasal kararlılık özellikleriyle yakıt hücreleri, elektrotlar ve ince film kaplamalarda önemli rol oynar. 9.5×10^6 S/m elektriksel iletkenliği ve $71.8 \text{ W/m} \cdot \text{K}$ termal iletkenliği ile hem iletim hem de ısı dağılımı açısından üstündür [104].

Pd'nin hidrojen atomlarını geçirgenliği, gaz ayırma membranlarında önemli avantaj sağlar. Aynı zamanda 121 GPa elastisite modülü ve $11.8 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ termal genleşme katsayısıyla farklı malzemelerle uyum gösterir [105, 106].

Pd kaplamalar, özellikle proton değişim membranlı yakıt hücrelerinde yaygındır. Elektrokimyasal sensörlerde ve biyosensörlerde yüksek elektriksel iletkenlik ve katalitik aktivite sunar. Ayrıca hidrojen depolama sistemlerinde katalizör olarak görev yaparak hidrojen moleküllerini atomik hale ayırır ve reaksiyonları kolaylaştırır [107].

Pd kaplamalarda genellikle 50–200 nm arası kalınlık tercih edilir. Kalınlık ve yüzey morfolojisi, katalitik ve mekanik özellikleri doğrudan etkiler. Yüksek sıcaklıklarda ($\sim 800\text{--}1000 \text{ }^\circ\text{C}$) termal kararlılığı sürdürülebilir [104, 106]. Pd'nin hidrojen geçirgenliği ve karbon çökmesini önleme özellikleri, çalışmadaki dayanıklılık hedefleri ile doğrudan ilişkilidir [107].

3.1. Katot ve Anot İnce Film Kaplamaları ve Uygulama Yöntemleri

Lantan Stronsiyum Manganat (LSM - $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_{3-\delta}$), perovskit yapısında olup, KOYP'lerin yüksek sıcaklık katodu olarak yaygın şekilde kullanılmaktadır [16]. Katot malzemesinin elektrokimyasal stabilitesini artırmak amacıyla serigrafi, püskürtme kaplama, daldırma kaplama, spin kaplama ve fiziksel buhar biriktirme gibi yöntemler kullanılmaktadır [109].

LSM kaplamaları, nano-gözenekli ve katalitik olarak aktif bir yüzey oluşturmayı hedefler. Sol-jel tabanlı spin kaplama ile YSZ elektrolit üzerine homojen LSM katmanları başarıyla uygulanmıştır [110]. Ayrıca, inkjet baskı yöntemiyle LSM nano-partikül bazlı mürekkeplerin uygulanması, katot mikro yapısının hassas şekilde kontrol edilmesine olanak tanımaktadır [111].

Katot ve elektrolit arasına bariyer tabakası kaplanarak LSM ve YSZ arasındaki zararlı reaksiyonlar engellenebilir. Özellikle Samaryum Katkılı Serya (SDC) veya Gadolinyum Katkılı Serya (GDC) ince filmi, LSM'nin doğrudan YSZ ile temasını önleyerek istenmeyen Stronsiyum Zirkonat (SrZrO_3) oluşumunu engeller ve böylece polarizasyon direncini azaltır [112]. Bu bariyer katmanları tipik olarak sprey kaplama veya daldırma kaplama yöntemleriyle birkaç mikron kalınlığında uygulanmaktadır [116].

Nikel-İtiryumla Stabilize Edilmiş Zirkonya (Ni-YSZ) sermet malzemesi, KOYP'lerde yaygın olarak kullanılan anot malzemesidir. Ekran baskı, bant döküm veya plazma püskürtme yöntemleriyle elektrolit üzerine uygulanmaktadır [13].

Darbeli lazer biriktirme ve püskürtme gibi ince film kaplama yöntemleri sayesinde, daha düşük sıcaklıklarda ve kontrollü mikro yapıya sahip anotlar üretilebilmektedir [114]. Ayrıca, Ni-YSZ anot kaplamalarına GDC infiltrasyonu yapılması, katalitik aktiviteyi artırmakta ve karbon birikimi ile kükürt zehirlenmesine karşı dayanıklılığı artırmaktadır [115].

3.2. İnce Film Kaplamalarının ve Dopingerin Hücre Performansına Etkileri

LSM kaplamalarına yapılan infiltrasyonlar, oksijen indirgeme reaksiyonunu hızlandırarak hücre performansını iyileştirmektedir [116]. LSM+YSZ kompozit katot yapısı, üç faz sınır bölgesini genişleterek elektrokimyasal aktiviteyi artırmaktadır [117].

Platin (Pt), Paladyum (Pd) ve Gümüş (Ag) gibi metal nanopartiküllerle yapılan fonksiyonel kaplamalar, ORR reaksiyonlarını hızlandırarak hücre verimliliğini yükseltmektedir [118]. Ni-YSZ anotlara yapılan nano-yapılandırılmış modifikasyonlar, yakıt elektrot reaksiyonlarını hızlandırarak hücre verimini artırmaktadır [119].

CeO₂ kaplaması, hidrojen oksidasyon kinetiğini artırmakta ve düşük sıcaklıkta performansı iyileştirmektedir. Aynı zamanda kükürt kirleticilerine karşı direnç sağlamaktadır [120]. Katot performansını artırmak için LSM'nin Mn (B) sitesine Kobalt (Co) dopingi yapılmış, bu da ORR hızını ve elektrokimyasal aktiviteyi artırmıştır [121].

Demir (Fe) ve Alüminyum (Al) dopingleri, LSM'nin kristal yapısını stabilize ederek yüksek sıcaklık dayanımını geliştirmiştir [122]. Ni fazına Kobalt (Co) alaşımlaması (Ni-Co/YSZ), hidrojenin oksidasyon hızını artırarak elektrokimyasal performansı geliştirmiştir [123].

Gadolinyum Katkılı Serya (GDC) infiltrasyonu, anot içinde ek iyonik iletken faz sağlayarak reaksiyonları hızlandırmıştır [124]. Molibden (Mo) ve Paladyum (Pd) dopingleri, Ni'nin karbon birikimi ve kükürt zehirlenmesine karşı direncini artırmaktadır [125].

Katot yüzeyinde Sr segregasyonu ve tane büyümesi gibi uzun vadeli bozulmaların önlenmesi için CeO₂ infiltrasyonu önerilmektedir [126]. Anot tarafında Ni sinterleşmesi ve aglomerasyonu gibi olumsuzlukların engellenmesi amacıyla Al₂O₃ dopingi kullanılmıştır [127]. Ayrıca, Ni-YSZ anotların redoks döngüleriyle mikro yapısı optimize edilerek mekanik dayanımı artırılmıştır [128].

3.3. KOYP Malzeme Seçimi, Doping ve Kaplama Stratejileri

Bu tez çalışmasında, katot malzemesi olarak Lantan Stronsiyum Manganat (LSM) seçilmiştir. LSM, yüksek sıcaklık dayanıklılığı, oksijen redüksiyon reaksiyonu (ORR) için uygun yapısı ve kimyasal kararlılığı sayesinde tercih edilmiştir.

Anot olarak Nikel-İtiryumla Stabilize Edilmiş Zirkonya (Ni-YSZ) cermeti tercih edilmiştir. Ni-YSZ, yüksek elektriksel iletkenliği, mekanik dayanıklılığı ve hidrojen yakıtıyla sağladığı yüksek katalitik aktivite nedeniyle çalışma için uygun bir seçenektir.

Elektrolit olarak ise İtiryumla Stabilize Edilmiş Zirkonya (YSZ) kullanılmıştır. YSZ, yaklaşık 1000 °C'de yüksek iyon iletkenliği, kimyasal ve termal kararlılığı ile dikkat çeken bir malzeme olup yaygın şekilde kullanılmaktadır [129].

Seçilen malzemelerin birbirleriyle termal ve kimyasal uyumluluğu, KOYP'nin genel performansı ve uzun ömürlülüğü açısından büyük önem taşımaktadır. LSM, YSZ ile termal genleşme katsayısı açısından uyumludur, bu da termal döngüler sırasında malzemeler arasında oluşabilecek gerilmeleri minimize etmektedir [16]. Ayrıca, Ni-YSZ anot, YSZ elektrolit ile yüksek düzeyde kimyasal ve mekanik uyumluluk göstermekte, böylece iyonik iletkenlik artmakta ve karbon birikimi riski azalmaktadır [17].

Malzemelerin elektrokimyasal performansını artırmak amacıyla bu çalışmada molibden (Mo) ve tungsten (W) gibi geçiş metalleriyle doping yapılması hedeflenmiştir. Mo dopingi, oksijen iyon iletkenliğini artırarak aynı zamanda termal dayanıklılığı geliştirmektedir [130]. W dopingi ise termal genleşme uyumunu iyileştirerek elektrot malzemelerini kükürt zehirlenmesine karşı daha dayanıklı hale getirmektedir [16]. Doping stratejileri, elektrotların elektriksel ve iyonik iletkenliğini artırmak, yüzey kimyasal reaksiyon hızını iyileştirmek, karbon birikimi ve korozyonu azaltmak gibi hedeflere yöneliktir [130]. Ayrıca, ince film kaplamaları için platin (Pt) ve paladyum (Pd) kullanılacaktır. Bu metaller, elektrot yüzeyinde katalitik aktiviteyi artırmakta, karbon birikimini önlemekte ve sinterleme etkisini azaltarak elektrotların uzun ömürlü olmasına katkı sağlamaktadır [106].

Simülasyon çalışmaları, COMSOL Multiphysics yazılımı kullanılarak gerçekleştirilecektir. Bulgular ve tartışma bölümünde bu yazılım detaylı olarak açıklanacaktır. COMSOL aracılığıyla, serbest ve gözenekli ortamda gaz akışı, sıcaklık etkileri, elektrokimyasal reaksiyon kinetikleri dikkate alınarak yapılan doping ve kaplama kombinasyonlarının performansı modellenmektedir. Bu çok boyutlu ve parametrik simülasyon yaklaşımı, KOYP sistemlerinde verimliliğin artırılması ve dayanıklı hücre tasarımı için bilimsel temel sağlayacaktır [131, 132].

4. ÇALIŞMADA KULLANILAN MALZEME ÖZELLİKLERİ

4.1. Malzeme Özellikleri

Yapılan çalışmada 8YSZ, KOYP'leri elektrolitlerinde ana malzeme olarak kullanılmıştır. 8YSZ, yüksek iyonik iletkenliği sayesinde oksijen iyonlarını anot ve katot arasında taşıyarak yakıt hücresinin çalışmasını sağlar. 8YSZ elektroliti için kullanılan kimyasal bileşimi $(\text{ZrO}_2)_{0.92}-(\text{Y}_2\text{O}_3)_{0.08}$ olarak ifade edilir. Bu bileşim, %8 mol Y_2O_3 içeren zirkonya (ZrO_2) yapısını temsil eder. 8YSZ, katı oksit yakıt pillerinde en yaygın kullanılan elektrolit malzemelerinden biridir.

Inconel 625; yüksek sıcaklık dayanımı, oksidasyon ve korozyon direnci, termal genleşme uyumluluğu ve mekanik mukavemet gibi üstün özelliklere sahip olduğundan tercih edilen bir akış kanalı malzemesidir (Tablo 2.2). Kimyasal formülü tek bir bileşik olmadığı için Inconel 625 belirli bir kimyasal gösterime sahip değildir, ancak elementlerin genel dağılımı Nikel (Ni): % ~58,0 (Ana bileşen), Krom (Cr): %20 - 23, Molibden (Mo): %8 - 10, Niobyum (Nb) + Tantal (Ta): % 3,15 – 4,15, Demir (Fe): ≤ % 5,0, Kobalt (Co): ≤ %1,0, Mangan (Mn): ≤% 0,5, Silisyum (Si): ≤ %0,5, Alüminyum (Al): ≤%0,4, Titanyum (Ti): ≤% 0,4, Karbon (C): ≤ %0,10, Fosfor (P): ≤ %0,015, Kükürt (S): ≤%0,015 şeklindedir.

LSM, yüksek sıcaklıklarda yüksek mekanik dayanıklılık ve termal kararlılık sunduğundan dolayı tercih edilmiştir. Katotta Lantan-Stronsiyum Mangan Oksit (LSM) malzemesinin kimyasal gösterimi genellikle $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ La olarak yazılır. La: Lantan, Sr: Stronsiyum, Mn: Mangan, O_3 : Oksijen. Stronsiyum miktarı x ile ifade edilir ve genellikle $x \approx 0,1 - 0,3$ aralığında seçilir. En yaygın kullanılan kompozisyonlardan biri $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3$ 'dür. Tablo 4.1'te LSM'nin özellikleri ve değerleri verilmiştir.

Yüksek elektriksel iletkenlik ve hidrojen yakıtında yüksek katalitik aktivite, karbon birikimi ve kükürt zehirlenmesine karşı duyarlılığından dolayı Ni-YSZ seçilmiştir.

Nikel (Ni) ile itriyumla stabilize edilmiş zirkonya (YSZ) bileşimi, katı oksit yakıt pillerinde yaygın olarak kullanılan bir sermet (metal-seramik) anot malzemesidir. Bu bileşimde, Nikel (Ni) genellikle %40–60 ağırlık oranında bulunur. 8YSZ ifadesi ise %8 mol oranında itriyum oksit (Y_2O_3) katkılanmış zirkonya (ZrO_2) anlamına gelir. Bu yapı, kimyasal olarak şu şekilde tanımlanır: $(\text{ZrO}_2)_{0.92}-(\text{Y}_2\text{O}_3)_{0.08}$, yani %92 oranında zirkonya ve %8 oranında itriyum oksitten oluşur. Bu yapı sayesinde YSZ, yüksek sıcaklıklarda iyon iletkenliği sağlarken, nikel fazı elektron iletkenliğini destekler ve yakıtla reaksiyona girerek yüksek elektrokimyasal performans sunar.

Elektrolit, akış kanalları, katot ve anot malzemelerinin sistemde kullanılan yoğunluk, termal iletkenlik, ısı kapasitesi, termal genleşme katsayısı ve elektriksel iletkenlik değerleri Tablo 4.1’de verilmiştir.

Tablo 4.1. Elektrolit: 8 YSZ, Akış Kanalları: Inconel 625, Katot: LSM ve Anot: Ni-YSZ değerleri

Malzeme	Özellik	Değer
YSZ	Yoğunluk	6050 kg/m ³ [133]
YSZ	Termal İletkenlik	2,0 W/m·K [133]
YSZ	Isı Kapasitesi	500 J/kg·K [134]
YSZ	Termal Genleşme Katsayısı	10,5 × 10 ⁻⁶ 1/K [135]
YSZ	Elektriksel İletkenlik	0,1 S/cm (100 S/m) [136]
Inconel 625	Yoğunluk	8400 kg/m ³ [136]
Inconel 625	Termal İletkenlik	20 W/m·K [137]
Inconel 625	Isı Kapasitesi	460 J/kg·K [138]
Inconel 625	Termal Genleşme Katsayısı	12,8 × 10 ⁻⁶ 1/K [139]
Inconel 625	Elektriksel İletkenlik	1,25 × 10 ⁶ S/m [136]
LSM	Yoğunluk	6500 kg/m ³ [140]
LSM	Termal İletkenlik	2,7 W/m·K [141]
LSM	Isı Kapasitesi	470 J/kg·K [142]
LSM	Termal Genleşme Katsayısı	12 × 10 ⁻⁶ 1/K [143]
LSM	Elektriksel İletkenlik	10000 S/m [144]
Ni-YSZ	Yoğunluk	7200 kg/m ³ [145]
Ni-YSZ	Termal İletkenlik	2,0 W/m·K [146]
Ni-YSZ	Isı Kapasitesi	500 J/kg·K [147]
Ni-YSZ	Termal Genleşme Katsayısı	12,5 × 10 ⁻⁶ 1/K [148]
Ni-YSZ	Elektriksel İletkenlik	100000 S/m [149]

4.2. Malzemelerin Fiziksel ve Kimyasal Uyumluları

Katı oksit yakıt hücrelerinde (KOYP), seçilen malzemelerin uyumu, sistem performansını doğrudan etkiler. Ana malzemeler arasındaki fiziksel ve kimyasal uyum değerlendirilmiştir.

Katot (LSM) ve Elektrolit (8YSZ): Fiziksel uyum açısından, termal genleşme katsayısı LSM'nin ($\sim 10,5 \times 10^{-6}$ /K) ve 8YSZ'nin ($\sim 10,5 \times 10^{-6}$ /K) termal genleşme katsayılarının uyumlu olması, termal stres oluşumunu minimuma indirir ve çatlama önler. Kimyasal uyum açısından ise, 800–1000 °C aralığında LSM ve 8YSZ kimyasal

olarak stabil bir ara yüzey oluşturur. LSM, oksijen indirgeme reaksiyonu için yüksek elektrokatalitik aktiviteye sahiptir [150, 151].

Anot (Ni–YSZ) ve Elektrolit (8YSZ): Ni–YSZ'nin termal genleşme katsayısı ($\sim 12,5 \times 10^{-6} /K$), 8YSZ'ye oldukça yakındır ($\sim 10,5 \times 10^{-6} /K$), bu da uzun süreli çalışmalarda termal streslerin azaltılmasını sağlar. Kimyasal uyum açısından, indirgenmiş anot ortamında Ni–YSZ ve 8YSZ arasında uyumsuzluk gözlenmez ve 8YSZ'nin iyonik iletkenliği desteklenir [13, 165].

Akış Kanalları (Inconel 625) ve Elektrotlar (LSM ve Ni–YSZ): Inconel 625'in termal genleşme katsayısı ($\sim 12,8 \times 10^{-6} /K$), LSM ($\sim 10,5 \times 10^{-6}$) ve Ni–YSZ ($\sim 12,5 \times 10^{-6}$) ile uyum göstererek termal döngüler sırasında mekanik uyumu güçlendirir. Kimyasal olarak ise Inconel 625, yüksek sıcaklık oksidasyonuna dayanıklıdır, elektrotlarla reaktif değildir ve gaz geçişi açısından stabil bir bariyer görevi görür [152, 153].

Elektrolit (8YSZ) ve Akış Kanalları (Inconel 625): Bu ikili arasında mekanik dayanım uyumu söz konusudur. 8YSZ'nin yüksek sertliği, Inconel 625'in esnek yapısıyla dengelenir [151]. Kimyasal olarak Inconel 625, gaz sızdırmazlığı sağlayan bir yapı sunar, 8YSZ ile reaksiyona girmez ve elektrolitin iyon iletkenliğini etkilemez [13, 17, 152].

Sonuç olarak, bu malzeme kombinasyonları, KOYP uygulamaları için yüksek düzeyde fiziksel ve kimyasal uyum sağlamaktadır. Fiziksel uyumluluk, termal genleşme katsayılarının yakınlığı ve mekanik dayanım kombinasyonu ile uzun ömürlü sistemler oluşturur. Kimyasal uyumluluk ise malzemeler arasında reaktif olmayan ara yüzeyler oluşturarak, elektrot ve elektrolit performansını artırır.

4.3. Molibden (%10) ve Tungsten (%10) Dopingi Uygulanması ile Oluşan Değerler

Katot Malzemesi (LSM): LSM üzerine yapılan Mo ve W dopinglerinin oksijen indirgeme reaksiyonu (ORR) kinetiklerini hızlandırdığı, elektriksel iletkenliği artırdığı ve yüksek sıcaklık stabilitesini geliştirdiği gösterilmiştir. Bu etkiler, perovskit yapıdaki oksijen iyon iletkenliğini artırma özellikleriyle ilişkilidir [154]. Ayrıca, Pt ve Pd ince film kaplamaları, katot yüzeyindeki katalitik aktiviteyi artırarak ORR hızını yükseltmiş ve yüzey bozulmalarını önleyerek korozyon riskini azaltmıştır. Literatürde, bu kaplamaların katot polarizasyon direncini %30–50 oranında azalttığı belirtilmiştir [155].

Anot Malzemesi (Ni–YSZ): Ni–YSZ üzerine uygulanan Mo ve W dopingleri, mekanik dayanıklılığı artırmış, yüksek sıcaklıkta karbon birikimini azaltmış ve elektriksel iletkenliği iyileştirmiştir. Bu dopinglerin, hidrojen yakıtlı KOYP'lerde anotun termal

kararlılığını geliřtirdiđi görölmüřtür [156]. Ayrıca, Pt ve Pd ince film kaplamalarının, karbon birikimini ve anot yüzeyindeki korozyonu önleyerek yakıt oksidasyon reaksiyonlarını hızlandırdıđı ve hücre verimliliđini artırdıđı rapor edilmiřtir. Bu kaplamalar, yakıt–elektrot arayüzeyindeki reaksiyon hızını artırmada etkili olmaktadır [157].

Fonksiyonel ince film kaplamaları, KOYP sistemlerinde katot ve anot yüzeylerinin performansını ve ömrünü artırmak açısından kritik öneme sahiptir. Platin (Pt) ve Paladyum (Pd) kaplamaların yüzey katalitik aktivitesini artırarak ORR'yi hızlandırdıđı ve elektrokimyasal performansı iyileřtirdiđi bilinmektedir [164, 165]. Bu kaplamalar, elektrot-elektrolit arayüzeyinde iyon iletkenliđini artırarak hücre iç direncini azaltmakta ve genel performansa olumlu katkı sağlamaktadır [160].

Fonksiyonel kaplamalar yalnızca performans artırımı deđil, aynı zamanda yüzey oksidasyonu ve korozyona karřı dayanıklılıđı artırarak uzun vadeli stabilite sağlamaktadır. Elektrot yüzey dayanıklılıđını artıran bu kaplamalar, KOYP ömrünü uzatmakta ve özellikle hidrokarbon yakıt kullanımında karbon birikimini önlemekte etkili olmaktadır [161]. Ayrıca, bu kaplamalar termal genleřme farklarını minimize ederek mekanik dayanıklılıđı artırır ve termal döngüler sırasında gerilmeleri azaltarak sistemin güvenilirliđini yükseltir [162].

Sonuç olarak, LSM ve Ni–YSZ gibi malzemeler üzerinde Mo ve W dopingleri ile Pt, Pd ince film kaplamalarının uygulanabilirliđi literatürde güçlü řekilde desteklenmektedir. Bu stratejiler yalnızca elektrokimyasal performans artışı deđil, aynı zamanda yüzey dayanıklılıđı ve termal kararlılık açısından da avantaj sağlamaktadır. Ancak bu kombinasyonların spesifik performans etkilerinin belirlenmesi, ileri düzey deneysel çalıřmalar ve simölasyon yöntemleri gerektirmektedir.

Bu çalıřmada yalnızca katot (LSM) ve anot (Ni–YSZ) yüzeylerine Mo ve W dopingleri uygulanacaktır. Çünkü literatürde bu dopinglerin özellikle elektrot yüzeylerinde oksijen indirgeme ve yakıt oksidasyon reaksiyonlarını hızlandırdıđı, elektriksel iletkenliđi artırdıđı ve termal kararlılıđı iyileřtirdiđi gösterilmiřtir. Elektrotların aktif bölgelerinde bu katkıların doğrudan performans artırıcı etkileri bulunduđu için, doping iřlemi elektrolit gibi pasif katmanlara deđil, yalnızca elektrot yüzeylerine odaklanacaktır. Böylece hem verim artışı sağlanacak hem de malzeme uyumu korunacaktır.

Ek olarak, platin (Pt) ve paladyum (Pd) kaplamalar yalnızca katot, anot ve elektrolit yüzeylerine uygulanacaktır. Literatürde, bu ince film kaplamaların özellikle elektrot yüzeylerinde katalitik aktiviteyi artırarak oksijen indirgeme ve yakıt oksidasyon reaksiyonlarını hızlandırdığı, ayrıca elektrot-elektrolit arayüzeyindeki iyon iletimini iyileştirerek hücre iç direncini düşürdüğü gösterilmiştir [158, 159]. Bunun yanı sıra, Pt ve Pd kaplamaların YSZ elektrolit üzerinde iyon iletkenliğini artırdığı ve yüksek sıcaklık koşullarında dayanıklılığı güçlendirdiği de rapor edilmiştir [160]. Bu nedenle, kaplama işlemi yalnızca elektrokimyasal reaksiyonların gerçekleştiği ve yüzey etkileşimlerinin kritik olduğu bu üç bölgeyle sınırlandırılmıştır. Böylece, sistem performansında artış sağlanırken, gereksiz maliyet ve işlem yükü de önlenmiş olacaktır. Kaplamalar aynı zamanda korozyon ve karbon birikimini azaltarak hücre ömrünü uzatmaya katkı sağlayacaktır.

%10 Mo dopingli LSM ve %10 Mo dopingli Ni-YSZ gibi katot ve anot malzemelerine ilişkin teorik özellik hesaplamaları, Tablo 4.2’de ayrıntılı olarak sunulmuştur. Her bir hesaplama, malzemenin fiziksel özelliklerine Mo dopingi etkisini açıklayan bilimsel yaklaşımlara dayanmaktadır.

Tablo 4.2. Molibden dopingi uygulanmış malzeme özellikleri

Malzeme	Parametre	Hesaplama Yöntemi	Sonuç
LSM	Yoğunluk	$6500 + 0.1 \times (10200 - 6500)$	6900 kg/m^3
LSM	Termal İletkenlik	$2,7 \times 0,9$	$2,43 \text{ W/m} \cdot \text{K}$
LSM	Isı Kapasitesi	$470 \times 1,05$	$493,5 \text{ J/kg} \cdot \text{K}$
LSM	Termal Genleşme Katsayısı	$12 \times 10^{-6} \times 0,95$	$11,4 \times 10^{-6} / \text{K}$
LSM	Elektriksel İletkenlik	$1,0 \times 10^4 \times 1,2$	$1,2 \times 10^4 \text{ S/m}$
Ni-YSZ	Yoğunluk	$7200 + 0,1 \times (10200 - 7200)$	7580 kg/m^3
Ni-YSZ	Termal İletkenlik	$2,0 \times 0,9$	$1,8 \text{ W/m} \cdot \text{K}$
Ni-YSZ	Isı Kapasitesi	$500 \times 1,05$	$525 \text{ J/kg} \cdot \text{K}$
Ni-YSZ	Termal Genleşme Katsayısı	$12,5 \times 10^{-6} \times 0,95$	$11,88 \times 10^{-6} / \text{K}$
Ni-YSZ	Elektriksel İletkenlik	$1,0 \times 10^5 \times 1,2$	$1,2 \times 10^5 \text{ S/m}$

Yoğunluk hesaplamasında, 0.1 ile çarpma, Mo’nun toplam malzeme içindeki katkı yüzdesini ifade eder. Burada %10 Mo dopingi uygulandığı için, malzemenin yeni

yoğunluğu, orijinal malzeme yoğunluğunun yanı sıra Mo katkısının yoğunluğunun etkisini içerecek şekilde ağırlıklı ortalama yöntemiyle hesaplanmıştır. Bu formülde Mo'nun yoğunluğu (10.200 kg/m^3) ve baz malzemenin yoğunluğu (örneğin LSM için 6.500 kg/m^3) dikkate alınarak, katkı oranına bağlı lineer ağırlıklandırma yapılır. Bu yöntem, farklı yoğunluklara sahip iki malzemenin karıştırılması durumunda bileşimin toplam yoğunluğunun belirlenmesine dayanır [163].

Termal iletkenlik hesaplamasında, 0,9 ile çarpma Mo dopingin termal direnç artırıcı etkisini yansıtır. Mo katkısı, malzemenin kristal yapısını değiştirerek fonon saçılımını artırır ve böylece ısı taşıma kapasitesini düşürür. Seramik bazlı malzemelerde metal dopingleri genellikle termal iletkenliği azaltır, çünkü kristal yapı içinde yeni engeller oluşturarak fonon hareketini sınırlandırır. Deneysel çalışmalarda %10 Mo dopinginin termal iletkenliği yaklaşık %10 oranında azalttığı rapor edilmiştir [164].

Isı kapasitesi hesaplamasında, 1,05 ile çarpma Mo'nun eklenmesiyle malzemenin toplam spesifik ısı kapasitesinin artacağını ifade eder. Mo'nun spesifik ısı kapasitesi ($26 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$) baz malzemeninkinden daha yüksek olduğu için, bu katkı ısıyı depolama kapasitesini artırır. Deneysel çalışmalar, %10 Mo dopinginin toplam ısı kapasitesini yaklaşık %5 artırdığını göstermektedir [165].

Termal genleşme katsayısının hesaplanmasında, 0,95 ile çarpma Mo'nun malzeme içinde termal genleşmeyi stabilize edici etkisini gösterir. Mo, seramik yapıdaki kristal boşlukları doldurarak malzemenin yüksek sıcaklıkta daha stabil kalmasını sağlar ve termal genleşme katsayısını düşürür. Deneysel veriler, %10 Mo dopinginin bu katsayayı yaklaşık %5 azalttığını göstermektedir [166].

Elektriksel iletkenlik hesaplamasında, 1,2 ile çarpma, Mo katkısının elektriksel iletkenliği artırıcı etkisini yansıtır. Mo, seramik yapı içerisinde elektron donör gibi davranarak ekstra serbest elektronlar sağlar, bu da elektronik iletkenliği artırır. Geçiş metali özelliği sayesinde bu etkisi belirgindir. Deneysel çalışmalar, %10 Mo dopinginin elektriksel iletkenliği yaklaşık %20 artırdığını göstermektedir [167]. Tungsten dopingi hesaplamaları, Tablo 4.3'te ayrı olarak verilmiştir.

Tablo 4.3. Tungsten dopingi uygulanmış malzeme özellikleri

Malzeme	Parametre	Hesaplama Yöntemi	Sonuç
LSM	Yoğunluk	$6500 + 0.1 \times (19250 - 6500)$	7775 kg/m^3
LSM	Termal İletkenlik	$2,7 \times 0,9$	$2,43 \text{ W/m}\cdot\text{K}$
LSM	Isı Kapasitesi	$470 \times 1,05$	$493,5 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$
LSM	Termal Genleşme Katsayısı	$12 \times 10^{-6} \times 0,95$	$11,4 \times 10^{-6} / \text{K}$
LSM	Elektriksel İletkenlik	$1,0 \times 10^4 \times 1,2$	$1,2 \times 10^4 \text{ S/m}$
Ni-YSZ	Yoğunluk	$7200 + 0,1 \times (19250 - 7200)$	8405 kg/m^3
Ni-YSZ	Termal İletkenlik	$2,0 \times 0,9$	$1,8 \text{ W/m}\cdot\text{K}$
Ni-YSZ	Isı Kapasitesi	$500 \times 1,05$	$525 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$
Ni-YSZ	Termal Genleşme Katsayısı	$12,5 \times 10^{-6} \times 0,95$	$11,88 \times 10^{-6} / \text{K}$
Ni-YSZ	Elektriksel İletkenlik	$1,0 \times 10^5 \times 1,2$	$1,2 \times 10^5 \text{ S/m}$

Yoğunluk hesaplamalarında, karışım kuralı prensibi kullanılır [168]. Dopingin atomik ağırlığının malzemenin hacimsel özellikleriyle birleşmesi sonucu malzeme yoğunluğu artar [169]. Tungsten gibi yüksek atomik ağırlıklı elementler, malzeme matrisine dahil edildiğinde yoğunluk artışına neden olur [170].

Termal iletkenlik hesabında, literatürde W dopinginin %5–10 arasında bir termal iletkenlik düşüşüne neden olduğu gösterilmiştir [171]. Bu hesaplamada kullanılan 0.9 çarpanı, yaklaşık %10'luk bir düşüşü temsil eder. Doping işlemi, kristal yapıda fonon saçılımına yol açarak kristalin düzenini bozar ve ısı taşıma kapasitesini sınırlandırır [172]. Bu bozulma, özellikle fonon tabanlı ısı iletimi olan seramiklerde termal iletkenliğin düşmesine yol açar [173].

Isı kapasitesi hesabında, çeşitli çalışmalarda W katkısının seramik ve oksit bazlı malzemelerde ısı kapasitesini %3–5 oranında artırdığı gözlemlenmiştir [174]. Buradaki 1,05 çarpanı, %5'lik bir artışı ifade eder. Tungsten'in yüksek spesifik ısı kapasitesi, dopant olarak eklendiğinde malzemenin ısı depolama kapasitesine katkı sağlar [175].

Termal genleşme katsayısı hesabında, yüksek sıcaklıklarda faz dengesi korunarak genleşme katsayısında azalma gözlemlenmiştir [176]. Burada kullanılan 0,95 katsayısı, yaklaşık %5'lik bir azalmayı temsil eder. W doping, kristal yapıdaki boşlukları doldurarak yapısal stabiliteyi artırır ve aşırı genleşmeyi önler, bu da özellikle yakıt hücresi uygulamalarında termomekanik kararlılık sağlar [177].

Elektriksel iletkenlik hesabı: Tungsten iyonları, seramik malzemelerin hem elektronik hem de iyonik iletkenliğini artırma eğilimindedir [178]. Doping işlemi, malzeme içerisindeki serbest taşıyıcı sayısını artırarak elektriksel iletkenliği yükseltir. Deneysel çalışmalarda, W katkısının iletkenlikte %15–20 arasında bir artış sağladığı rapor edilmiştir [179]. Bu nedenle 1.2 çarpanı, %20’lik bir artışı temsil eder.

Doping miktarının belirlenmesi, elektrokimyasal performans, mekanik stabilite ve termal kararlılık gibi faktörlerin optimize edilmesi açısından kritik öneme sahiptir. Bu bağlamda, %10 Mo ve W doping oranı belirlenirken aşağıdaki bilimsel gerekçeler göz önünde bulundurulmuştur:

Katot (LSM): Mo ve W dopingleri, oksijen indirgeme reaksiyonlarının (ORR) kinetiklerini hızlandırarak elektrot yüzeyinde katalitik aktiviteyi artırmaktadır. Literatürde, %10 seviyesindeki doping miktarının katot polarizasyon direncini %30–50 oranında azalttığı gösterilmiştir [178].

Anot (Ni-YSZ): Mo ve W dopingleri, hidrojen oksidasyon reaksiyonlarını iyileştirerek yakıt hücresinin güç çıkışını artırmaktadır. Aynı zamanda karbon birikimini önleyerek anot yüzeyinin daha uzun süreli çalışmasını sağlamaktadır [179]. Ancak doping oranı artırıldığında, malzemenin kristal yapısı bozulabilir ve iyonik iletkenlik düşebilir. Bu yüzden %10 doping oranı, reaksiyon hızını artırırken iyonik iletkenliği koruyacak optimal bir seviye olarak belirlenmiştir.

Termal Genleşme Katsayısı: Mo ve W dopingleri, elektrot ve elektrolit bileşenleri arasındaki termal uyumu artırarak mekanik gerilmeleri azaltmaktadır. %10 doping oranının termal genleşme katsayısını %5 oranında düşürdüğü rapor edilmiştir. Bu, malzemelerin yüksek sıcaklık döngülerine karşı çatlak oluşumuna dirençli hale gelmesini sağlar [180]. Özellikle Ni-YSZ anot malzemesinde, %10 Mo ve W dopinginin yüksek sıcaklıkta karbon birikimini azalttığı ve anot yüzeyinde stabilite sağladığı literatürde gösterilmiştir [181].

%10 doping seviyesi, malzeme içinde kristal yapı bütünlüğünü koruyarak çatlama riskini azaltır. Mo ve W katkıları, mekanik dayanımı artırarak elektrotların uzun süreli kullanımını desteklemektedir. Özellikle Ni-YSZ malzemesi üzerinde yapılan çalışmalarda, %10 Mo dopinginin çatlak oluşumunu %15 azalttığı gözlemlenmiştir [182].

Mo ve W dopingleri, elektriksel iletkenliği artırarak hücre verimliliğini yükseltmektedir. %10 Mo ve W dopingi, LSM ve Ni-YSZ elektrotlarının iletkenliğini

%20 artırmıştır. Bu artış, Mo ve W iyonlarının serbest elektron sağlayarak taşıma mekanizmasını iyileştirmesiyle elde edilmektedir [183].

Ayrıca, Mo ve W dopingleri, Pt ve Pd ince film kaplamalarının katalitik etkisini desteklemektedir. %10 doping oranının, bu kaplamaların oksidasyon ve korozyon önleyici etkisini artırdığı rapor edilmiştir [184].

Sonuç olarak, %10 Mo ve W doping seviyesi, elektrokimyasal performans, mekanik dayanıklılık ve termal kararlılık arasında ideal dengeyi sağlar. Daha düşük oranlar etkisiz kalabilirken, daha yüksek oranlar kristal yapıyı bozarak performansı düşürebilir. Literatürde yapılan çalışmalar, %10 doping oranının KOYP sistemleri için en uygun katkı seviyesi olduğunu kanıtlamaktadır [185].

4.4. Platinyum ve Paladyum İnce Film Kaplamaları

Platinyum ve paladyum tek katman seçeneği seçilerek 100 nm kalınlığında ince film olarak tanımlanmıştır ve Comsol kütüphanesinden malzeme bilgileri Tablo 4.3'te değerler verilmiştir.

Tablo 4.4. *Platin (pt) özellikleri ve Paladyum (Pt) Özellikleri*

Özellik	Değişken	Platin (Pt) Değer	Paladyum (Pd) Değer	Birim	Özellik Grubu
Elektriksel iletkenlik	sigma_iso	96e6	10.0e ⁶	S/m	Temel
Isıl genleşme katsayısı	alpha_iso	8,80e-6	11,8e-6	1/K	Temel
Sabit basınçta ısı kapasitesi	Cp	133	244	J/(kg*K)	Temel
Yoğunluk	rho	21450	12020	kg/m ³	Temel
Isıl iletkenlik	k_iso	71,6	71,8	W/(m*K)	Temel
Young Modülü	E	168e9	73e9	Pa	Young Modülü ve Poisson Oranı
Poisson Oranı	nu	0,38	0,44	-	Young Modülü ve Poisson Oranı

Platin, 21.450 kg/m³ yoğunluğu ile Paladyum'un 12.020 kg/m³ yoğunluğundan oldukça yüksektir [186]. Bu, Platin'in daha yüksek bir kütle yoğunluğuna sahip olduğunu ve daha ağır uygulamalar için tercih edildiğini gösterir. Elektriksel iletkenlik açısından, Paladyum'un 10,0 × 10⁶ S/m değeri, Platin'in 8,96 × 10⁶ S/m değerinden biraz daha yüksektir [187]. Bu da Paladyum'un elektriksel iletkenlikte üstün olduğunu ve elektronik uygulamalarda daha uygun olabileceğini işaret eder.

Isıl iletkenlik açısından değerlendirildiğinde, her iki malzemenin de 71,8 W/(m·K) ile eşit değerlere sahip olduğu görülmektedir [187]. Bu, Platin ve Paladyum'un sıcaklık dağılımını eşit düzeyde sağlayabildiğini, dolayısıyla yüksek sıcaklıklarda çalışan sistemlerde birbirine yakın performans gösterebileceğini belirtir. Ancak termal genleşme

katsayısında farklılık gözlemlenir. Paladyum'un termal genleşme katsayısı $11,8 \times 10^{-6}$ 1/K iken, Platin'in değeri $8,8 \times 10^{-6}$ 1/K'dir [188]. Bu, Paladyum'un termal genleşme eğiliminin daha yüksek olduğunu ve farklı sıcaklık değişimlerine karşı daha dikkatli tasarlanması gerektiğini ortaya koyar.

Isı kapasitesi açısından Paladyum (244 J/(kg·K)), Platin'e (133 J/(kg·K)) kıyasla yaklaşık iki kat daha yüksek bir kapasiteye sahiptir [189]. Bu, Paladyum'un daha fazla ısı enerjisi depolayabileceğini ve termal uygulamalarda avantaj sağlayabileceğini gösterir. Ancak mekanik dayanıklılık açısından, Platin'in elastik modülü (168 GPa), Paladyum'un elastik modülünden (73 GPa) çok daha yüksektir [190]. Bu durum, Platin'in mekanik stabilite ve dayanım açısından üstün olduğunu, zorlu mekanik koşullar altında tercih edilebileceğini ifade eder.

Son olarak, Poisson oranı açısından değerlendirildiğinde, Paladyum (0,44), Platin'den (0,38) daha yüksek bir değere sahiptir [191]. Bu durum, Paladyum'un elastik deformasyona daha yatkın olduğunu ve esneklik gerektiren uygulamalarda avantaj sağlayabileceğini göstermektedir.

Paladyum (Pd), yüksek katalitik aktivitesi, kimyasal dayanıklılığı ve elektrokimyasal performans özellikleriyle %10 Mo ve W dopingli LSM (Katot) ve Ni-YSZ (Anot) üzerine uygulanan ince film kaplamalar için etkili bir seçenek olarak öne çıkmaktadır. Pd kaplamalar, oksijen indirgeme reaksiyonu (ORR) için katotta yüksek katalitik aktivite sunarak, oksijen moleküllerinin iyonik indirgenmesini hızlandırır ve elektrokimyasal verimi artırır [191]. Bunun yanı sıra, hidrojen oksidasyonu reaksiyonunda (HOR) anotta etkili bir katalizör olarak görev yaparak hidrojenin hızlı iyonizasyonunu sağlar ve karbon birikimini azaltarak redoks stabilitesini iyileştirir [192]. Elektriksel iletkenlik açısından, Pd kaplamalar hem LSM'nin hem de Ni-YSZ'nin iletkenliğini artırarak yüzeyde elektron ve iyon taşınmasını optimize eder [193]. Termal genleşme katsayısı ($11,8 \times 10^{-6}$ 1/K) ile LSM ve Ni-YSZ'ye uyum sağlayarak termal stresleri azaltır [194]. Kimyasal dayanıklılık bağlamında, Pd kaplamalar yüksek sıcaklıklarda korozyona ve oksidasyona karşı direnç sağlayarak yakıt hücrelerinin uzun vadeli stabilitesini artırır [195]. Önerilen kaplama kalınlıkları, katot için 50–100 nm ve anot için 100–200 nm'dir. COMSOL simülasyonlarında Pd kaplamaların, katalitik aktivite ve iletkenlik üzerindeki etkilerinin incelenmesi, performans artırıcı stratejilerin geliştirilmesine katkı sağlayabilir [196].

Platinyum (Pt), üstün katalitik aktivitesi ve kimyasal dayanıklılığı ile katot ve anot yüzeylerinde elektrokimyasal performansı artıran bir malzemedir. Pt kaplama, oksijen indirgeme reaksiyonu (ORR) için LSM katotunda yüksek katalitik aktivite sağlar ve oksijen moleküllerinin iyonik indirgenmesini hızlandırarak enerji kaybını azaltır [197]. Ayrıca, hidrojen oksidasyonu reaksiyonunda (HOR) Ni-YSZ anotunda etkin bir katalizör olarak görev yaparak hızlı iyon taşınımını destekler ve karbon birikimini önler [198]. Pt kaplama, elektriksel iletkenlik açısından LSM ve Ni-YSZ'nin performansını artırarak elektrot yüzeylerinde elektron taşınımını optimize eder [199]. Termal genleşme katsayısı ($8,80 \times 10^{-6} \text{ 1/K}$) ile LSM ve Ni-YSZ'ye uyum sağlayarak termal streslerin azaltılmasına katkıda bulunur. Bunun yanı sıra, yüksek korozyon direnci ve oksidasyon dayanıklılığı ile Pt kaplamalar, yakıt hücrelerinde uzun vadeli kararlılık sağlar [200]. Pt kaplama için önerilen kalınlık aralıkları, katot yüzeyinde 50–100 nm, anot yüzeyinde ise 100–200 nm'dir. COMSOL simülasyonlarıyla Pt kaplamanın katalitik aktivite ve elektriksel iletkenlik üzerindeki etkilerinin modellenmesi, malzeme performansını optimize etmek için önemli bir fırsat sunmaktadır [201]. Platin kaplama, özellikle yüksek sıcaklıklarda çalışan yakıt hücrelerinde düşük aşırı potansiyel, yüksek stabilite ve uzun ömür sunarak bizim çalışmamız için daha uygun görülmektedir.

5. COMSOL PARAMETRELERİ, DEĞİŞKENLERİ VE ARAYÜZLERİ

COMSOL Multiphysics, çoklu fizik etkileşimlerini içeren karmaşık mühendislik ve bilimsel problemlerin modellenmesi ve simülasyonu için kullanılan güçlü bir sonlu elemanlar yazılımıdır [202]. Bu yazılım, farklı fiziksel alanlardaki değişkenleri aynı anda çözümleyerek gerçekçi ve doğru simülasyon sonuçları sağlar [203]. Elektrokimyasal reaksiyonlar, ısı transferi, mekanik deformasyon, elektromanyetik alanlar ve akışkan dinamiği gibi birçok farklı fiziksel modülü içeren sistemler için ideal bir platform sunmaktadır [204]. Özellikle yakıt hücreleri, ince film kaplamalar ve malzeme mühendisliği gibi disiplinlerarası alanlarda, bu çok yönlü yaklaşım büyük avantaj sağlamaktadır [18].

COMSOL Multiphysics, hidrojen yakıt hücreleri (KOYP) üzerindeki ince film kaplamaların elektrokimyasal, termal, mekanik ve akışkan etkilerini eşzamanlı olarak analiz edebilme yeteneği nedeniyle seçilmiştir [205]. Yakıt hücrelerinde gerçekleşen reaksiyonlar, iyonik ve elektronik iletkenlik süreçleri, akışkan hareketi ve ısı transferi ile doğrudan ilişkilidir [9]. COMSOL'un sağladığı modüler yapı sayesinde, bu farklı fiziksel süreçleri aynı anda modelleyerek sistemin bütünsel bir analizini yapmak mümkün olmaktadır [206]. Kullanılan fizik modülleri:

Hidrojen Yakıt Hücresi, hidrojen yakıt hücresinin temel bileşenlerini (elektrolit, elektron iletken fazı, hidrojen ve oksijen gaz fazları, zar ve gaz difüzyon elektrotları) modellemek için kullanılmıştır [207]. Bu modül, hücre içerisindeki elektrokimyasal reaksiyonları ve iyon taşınımını anlamak için kritik bir fiziksel modüldür.

Serbest ve Gözenekli Ortam Akışı (Katot ve Anot), katot ve anot bölgelerinde gaz akışı ve gözenekli ortamdan geçen akışın etkilerini analiz etmek için eklenmiştir [208]. Yakıt hücrelerinde gözenekli elektrotlar, giren gazların difüzyonunu ve reaksiyonların gerçekleşmesini etkileyen önemli bir parametredir. Gözenekli yapıların etkisini ve gaz akışının elektrokimyasal reaksiyonlara olan katkısını değerlendirmek için bu modüller gereklidir.

Katı Mekaniği, yakıt hücresinin ince film kaplamalarının mekanik davranışlarını, Von Mises gerilme dağılımını ve termal genleşme etkilerini analiz etmek için eklenmiştir [209]. Yakıt hücreleri çalışma sırasında termal genleşmeye maruz kaldığından, ince film kaplamaların mekanik dayanımı, uzun vadeli performansı belirleyen kritik bir faktördür.

Katılarda Isı Transferi, yakıt hücresindeki ısı dağılımını analiz etmek için eklenmiştir [210]. Yakıt hücreleri yüksek sıcaklıklarda çalıştığı için, kaplama malzemelerinin

sıcaklık değişimlerine karşı gösterdiği tepkiyi anlamak önemlidir. Ayrıca, "Thin Film" seçeneği, ince film kaplamaların yüzey üzerindeki termal etkilerini analiz etmek için dahil edilmiştir.

Elektrik Akımları, elektrokimyasal reaksiyonlar sonucunda oluşan elektrik akımlarını analiz etmek için eklenmiştir [211]. Yakıt hücresinin performansı, akım yoğunluğu dağılımına ve elektrik iletkenliği süreçlerine bağlıdır. Bu modül, kaplamaların elektrik iletkenliği üzerindeki etkisini incelemek için kullanılmaktadır.

COMSOL Multiphysics’de kullanılan çoklu fizik modülleri:

Tepkimeye Giren Akış (H₂ Gaz ve O₂ Gaz Fazı), hidrojen ve oksijenin reaksiyonlarını ve gaz fazındaki taşınım süreçlerini modellemek için kullanılmıştır [212].

Isıl Genleşme ve İnce Tabaka, sıcaklık değişimlerinin malzeme genleşmesine etkisini anlamak için kullanılmıştır [213]. Yakıt hücrelerinde termal stres önemli bir problemdir ve kaplamaların uzun süreli stabilitesini etkileyebilir.

Elektromanyetik Isıtma ve Elektrokimyasal Isıtma, elektromanyetik alanların oluşturduğu ısınma etkilerini modellemek için eklenmiştir [214]. Yakıt hücrelerindeki elektrokimyasal reaksiyonlar sırasında oluşan enerji kayıplarının belirlenmesi açısından önemlidir.

Bu fizik modüllerinin kombinasyonu sayesinde, yakıt hücresinde ince film kaplamaların mekanik, elektriksel ve termal etkileri bir arada incelenebilmiştir [215]. COMSOL Multiphysics, aynı anda birçok farklı fiziksel süreci birleştirme yeteneği sayesinde, yakıt hücrelerinde ince film kaplamaların elektrokimyasal ve mekanik performansını değerlendirmek için en uygun yazılımlardan biridir [216].

5.1. Hidrojen Yakıtlı KOYP’de Kullanılan Parametreler ve Açıklamaları

Hidrojen yakıtlı katı oksit yakıt pilleri (KOYP) için kullanılan temel parametreler ve değerleri Tablo 5.1’de açıklanmaktadır. Atmosfer basıncı (p_{atm}) 1 atm olarak kabul edilmiştir. Çalışma sıcaklıkları (T) 800°C, 900°C ve 1000°C olarak belirlenmiş olup, bu sıcaklık aralıkları KOYP’nin elektrokimyasal reaksiyonları için uygun koşulları sağlamaktadır. Anot geçirgenliği ($perm_a$) ve katot geçirgenliği ($perm_c$) her biri 1×10^{-14} m² olarak alınmıştır ve gözenekli elektrot malzemelerinin gaz difüzyon özelliklerini belirlemektedir. Hücre voltajı (V_{cell}) 1 V olarak kabul edilmiştir. Anot ve katotta değişim akım yoğunluğu ($i0_a$ ve $i0_c$) 1 A/m² olarak belirlenmiştir; bu, elektrot reaksiyonlarının başlangıç kinetiklerini ifade etmektedir.

Özgül yüzey alanı (Sa_a ve Sa_c), anot ve katot için 5×10^9 1/m olarak seçilmiş olup, bu parametre katalitik aktivitenin ve reaksiyon bölgelerinin büyüklüğünü belirlemektedir. Elektrolit iletkenlik düzeltme faktörü (fl_a ve fl_c) 0,2 olarak tanımlanmıştır. Katı etkin iletkenlik ($kseff_a$ ve $kseff_c$) her iki elektrot için 1000 S/m olarak belirlenmiş ve elektrot malzemelerinin elektriksel iletkenliğini tanımlamaktadır. Gözeneklilik (e_{por}) 0,4 olup, anot ve katot elektrotlarının porozitesini göstermektedir. Kullanılan gazların molar kütleleri, hidrojen (M_{H_2}) 2 g/mol, oksijen (M_{O_2}) 32 g/mol ve azot (M_{N_2}) 28 g/mol olarak verilmiştir.

Gaz akış kanalı genişliği ($W_{channel}$) ve rib genişliği (W_{rib}) $0,5 \times 10^{-3}$ m olarak belirlenmiştir. Gaz difüzyon elektrot kalınlığı (H_{gde}) ve elektrolit kalınlığı ($H_{electrolyte}$) 1×10^{-4} m olarak hesaplanmıştır. Gaz akış kanalı yüksekliği ($H_{channel}$) $0,5 \times 10^{-3}$ m olarak belirlenmiştir. Yakıt hücresinin aktif alanı (A_{cell}) akış kanalı uzunluğu (L) ve gaz akış genişliği ile hesaplanmaktadır. Hücre akım yoğunluğu (I_{max}), 1,5 A/cm² değeri ile hesaplanmıştır.

Yakıt hücresinde kullanılan stokiyometrik oranlar hidrojen (λ_{H_2}) ve oksijen (λ_{O_2}) için 2 olarak alınmıştır. Oksijen giriş mol fraksiyonu ($x_{O_2,in}$) 0,21 olup, havadaki oksijen oranını temsil etmektedir. Azot giriş mol fraksiyonu ($x_{N_2,in}$) ise $(1 - x_{O_2,in})$ olarak hesaplanmaktadır. Hidrojen giriş akış hızı (m_{H_2}), hidrojen stokiyometrisi ve hücre akım yoğunluğuna bağlı olarak belirlenmiştir. Oksijen giriş akış hızı (m_{O_2}) ve azot giriş akış hızı (m_{N_2}), giriş mol fraksiyonları dikkate alınarak hesaplanmaktadır. Gözenek çapı (d_{pore}) 500 nm olarak alınmıştır.

Oksijen (γ_{O_2}), hidrojen (γ_{H_2}) ve su (γ_{H_2O}) için kısmi basınç üsleri sırasıyla 0,25, 0,11 ve 0,67 olarak belirlenmiştir. Anot ve katot transfer katsayıları hidrojen oksidasyonu (α_{a,H_2} ve α_{c,H_2}) için sırasıyla 1 ve 0,1 olarak verilmiştir. Oksijen indirgenmesi için anodik ve katodik transfer katsayıları (α_{a,O_2} ve α_{c,O_2}) sırasıyla 0,1 ve 0,4 olarak belirlenmiştir. Son olarak, hücre aktif alanı (A_{cell}), akış kanalı uzunluğu ve genişliği kullanılarak hesaplanmaktadır. Bu parametreler, KOYP'nin elektrokimyasal, ısı transferi ve kütle taşınımı süreçlerini karakterize etmek için kritik öneme sahiptir (Tablo 5.1).

Tablo 5.1. Comsol'da kullanılan parametreler ve değerleri

Parametre	Değer	Açıklama
p_atm	1 [atm]	Atmosfer basıncı
T	800 [°C], 900 [°C], 1000 [°C]	Sıcaklık
perm_a	1e-14 [m^2]	Anot geçirgenliği
perm_c	1e-14 [m^2]	Katot geçirgenliği
V_cell	1 [V]	Hücre voltajı
i0_a	1 [A/m^2]	Değişim akım yoğunluğu, anot
i0_c	1 [A/m^2]	Değişim akım yoğunluğu, katot
Sa_a	5e9 [1/m]	Özgül yüzey alanı, anot
Sa_c	5e9 [1/m]	Özgül yüzey alanı, katot
fl_a	0.2	Elektrolit iletkenlik düzeltme faktörü, anot
fl_c	0.2	Elektrolit iletkenlik düzeltme faktörü, katot
kseff_a	1000 [S/m]	Katı etkin iletkenlik, anot
kseff_c	1000 [S/m]	Katı etkin iletkenlik, katot
e_por	0.4	Gözeneklilik
M _{H2}	2 [g/mol]	Hidrojen molar kütlesi
M _{O2}	32 [g/mol]	Oksijen molar kütlesi
M _{N2}	28 [g/mol]	Azot molar kütlesi
W_channel	0.5e-3 [m]	Gaz akış kanalı genişliği
W_rib	0.5e-3 [m]	Rib genişliği
H_gde	1e-4 [m]	Gaz difüzyon elektrot kalınlığı
H_electrolyte	1e-4 [m]	Elektrolit kalınlığı
H_channel	0.5e-3 [m]	Gaz akış kanalı yüksekliği
L	10e-3 [m]	Akış kanalı uzunluğu
I_max	1.5 [A/cm^2] * L * (W_rib + W_channel)	Hücre alanı
lambda_O2	2	Oksijen stokiyometrisi (akış oranı hesaplama için)
lambda_H2	2	Hidrojen stokiyometrisi (akış oranı hesaplama için)
xO2_in	0.21	Giriş oksijen mol fraksiyonu
xN2_in	1 - xO2_in	Giriş azot mol fraksiyonu
m_H2	lambda_H2 * I_max / (2 * F_const) * M _{H2}	Hidrojen giriş akış hızı
m_O2	lambda_O2 * I_max / (4 * F_const) * M _{O2}	Oksijen giriş akış hızı
m_N2	m_O2 * xN2_in * M _{N2} / (xO2_in * M _{O2})	Azot giriş akış hızı
d_pore	500 [nm]	Gözenek çapı
gamma_O2	0.25	Kısmi basınç üssü, oksijen
gamma_H2	0.11	Kısmi basınç üssü, hidrojen
gamma_H2O	0.67	Kısmi basınç üssü, su
alpha_a_H2	1	Anodik transfer katsayısı, hidrojen oksidasyonu
alpha_c_H2	0.1	Katodik transfer katsayısı, hidrojen oksidasyonu
alpha_a_O2	0.1	Anodik transfer katsayısı, oksijen indirgenmesi
alpha_c_O2	0.4	Katodik transfer katsayısı, oksijen indirgenmesi
A_cell	L * (W_rib + W_channel)	Hücre aktif alanı

5.2. Yakıt Hücresi Değişkenleri ve Anlamları

Hidrojen yakıtlı katı oksit yakıt pili (KOYP) sistemlerinde kullanılan temel değişkenler; elektrokimyasal reaksiyonlar, iyon ve elektron taşınımı, aktivasyon kayıpları ve enerji dönüşüm süreçlerini tanımlayan parametreler Tablo 5.2’de verilmiştir.

Tablo 5.2. Comsol’da kullanılan değişkenlerin anlamları ve birimleri

Parametre	İfade	Birim	Açıklama
I_tot	intop_cc(fc.nIs)	A	Toplam hücre akımı: Hücre boyunca üretilen toplam elektrik akımıdır. Bu parametre yakıt hücresinin performansını belirler.
P_phil	$-(d(fc.phil,x)*fc.Ilx + d(fc.phil,y)*fc.Ily + d(fc.phil,z)*fc.Ilz)$	W/m ³	Yerel iyon taşınımından kaynaklanan güç kaybı: Elektrolit içindeki iyonik taşınım sırasında kaybedilen gücü ifade eder.
P_phis	$-(d(fc.phis,x)*fc.Isx + d(fc.phis,y)*fc.Isy + d(fc.phis,z)*fc.Isz)$	W/m ³	Yerel elektron taşınımından kaynaklanan güç kaybı: Elektron taşınımı sırasında meydana gelen enerji kaybını ifade eder.
P_act_h2	fc.iv_h2gder1 * fc.eta_h2gder1	W/m ³	Hidrojen oksidasyon aktivasyon kaybı: Hidrojenin oksitlenmesi sırasında aktivasyon enerjisi nedeniyle oluşan güç kaybı.
P_act_o2	fc.iv_o2gder1 * fc.eta_o2gder1	W/m ³	Oksijen indirgenme aktivasyon kaybı: Oksijenin indirgenmesi sırasında oluşan aktivasyon enerjisi kaybıdır.
eta_phil	$(intop_h2_gde(P_phil) + intop_mem(P_phil) + intop_o2_gde(P_phil)) / I_tot$	V	Elektrolit transport aşırı potansiyeli: Elektrolit içindeki iyon taşınımı nedeniyle oluşan toplam gerilim düşüştür.
eta_phis	$(intop_h2_gde(P_phis) + intop_o2_gde(P_phis)) / I_tot$	V	Elektron taşınımı aşırı potansiyeli: Elektronların taşınımı sırasında oluşan toplam gerilim kaybıdır.
eta_act_h2	$intop_h2_gde(P_act_h2) / I_tot$	V	Hidrojen oksidasyon aktivasyon aşırı potansiyeli: Hidrojenin reaksiyona girmesi için gereken aktivasyon enerjisi gerilimi.
eta_act_o2	$intop_o2_gde(P_act_o2) / I_tot$	V	Oksijen indirgenme aktivasyon aşırı potansiyeli: Oksijen indirgenmesi için gereken aktivasyon enerjisi gerilimi.

Toplam hücre akımı (I_tot), hücre boyunca üretilen toplam elektrik akımını ifade eder ve sistemin performansını belirleyen temel bir büyüklüktür. Yerel iyon taşınımından kaynaklanan güç kaybı (P_phil, iyon), elektrolit içindeki iyonik taşınım sırasında meydana gelen enerji kaybını temsil ederken, yerel elektron taşınımından kaynaklanan güç kaybı (P_phis, e) ise elektron taşınımı sırasında oluşan enerji kaybını gösterir.

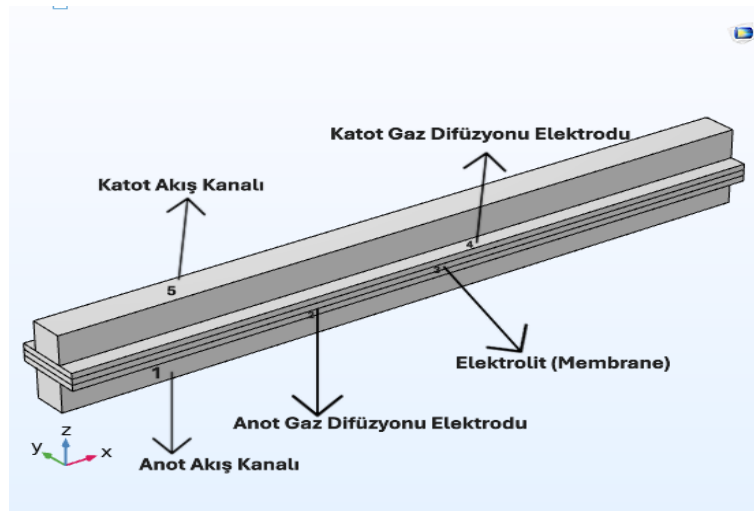
Hidrojen oksidasyon aktivasyon kaybı (P_act_h2), hidrojenin oksidasyon sürecinde aktivasyon enerjisi nedeniyle oluşan kayıpları ifade ederken, oksijen indirgeme aktivasyon kaybı (P_act_o2), oksijenin indirgenmesi sürecinde aktivasyon enerjisi

nedeniyle meydana gelen enerji kaybını açıklar. Elektrolit transport aşırı potansiyeli (η_{phil} , iyon), elektrolit içerisindeki iyon taşınımı nedeniyle meydana gelen toplam gerilim düşüşünü temsil ederken, elektron taşınım aşırı potansiyeli (η_{phis} , e), elektronların taşınımı sırasında oluşan toplam gerilim kaybını gösterir.

Hidrojen oksidasyon aktivasyon aşırı potansiyeli ($\eta_{\text{act_h2}}$), hidrojenin oksidasyonu sırasında reaksiyonun gerçekleşmesi için gerekli olan aktivasyon enerjisini ifade ederken, oksijen indirgeme aktivasyon aşırı potansiyeli ($\eta_{\text{act_o2}}$), oksijenin indirgenmesi için gereken aktivasyon enerjisini temsil etmektedir. Tüm bu parametreler, yakıt pilinin verimliliği ve performansı açısından kritik olup, elektrokimyasal süreçlerin ve enerji dönüşüm mekanizmalarının anlaşılmasında temel rol oynar.

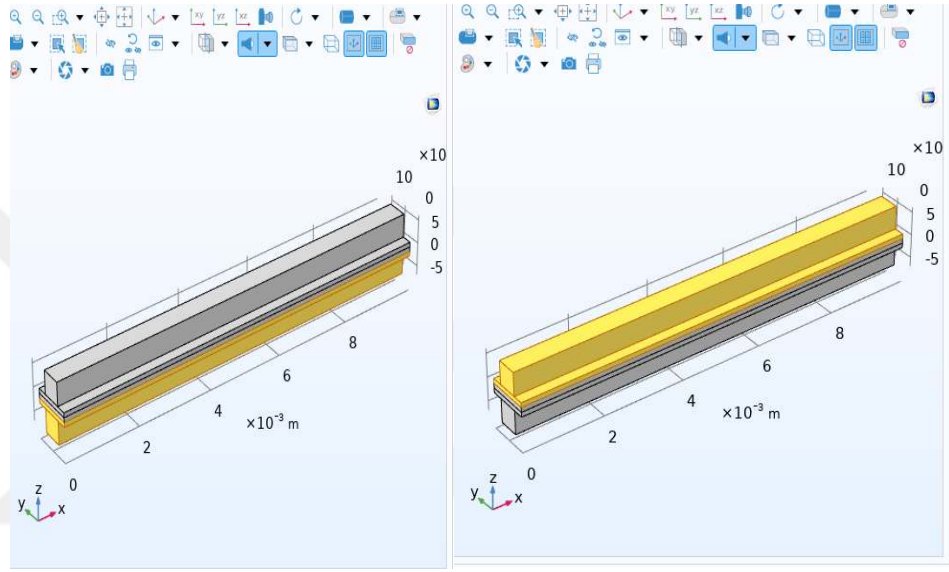
5.3. Seçimler

Yakıt hücresinin temel bileşenleri Şekil 5.1’de verilmiştir. Şekil 5.1’de gösterilen birleşik model, çok bileşenli yapıların etkileşimini göz önünde bulundurarak kapsamlı bir analiz yapılabilmesine olanak tanımaktadır. Anot akış kanalı (1) ve anot gaz difüzyon elektrodu (2), yakıtın (örneğin hidrojenin) homojen bir şekilde reaksiyon yüzeyine taşınmasını sağlarken, elektrolit (3) iyon iletimi için gerekli ortamı oluşturur. Katot tarafında ise, katot gaz difüzyon elektrodu (4) ve katot akış kanalı (5), oksijenin reaksiyon bölgesine etkin biçimde ulaşmasını sağlar. Bu yapıların her biri, yakıt hücresinin elektrokimyasal performansını doğrudan etkileyen fiziksel ve kimyasal süreçlere katkı sunar.



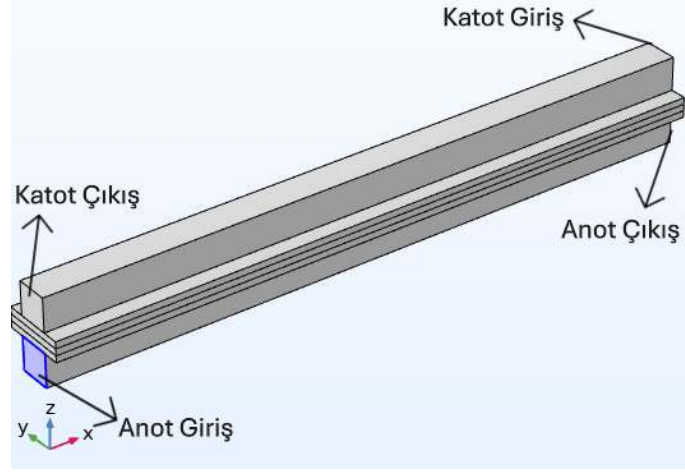
Şekil 5.1. Alan ve yüzeylerin belirtilmesi

Anot ve katot taraflarındaki akış alanları Şekil 5.2’de tanımlanmıştır. Sol panelde yer alan sarı renkle vurgulanan bölge, anot akış alanını temsil ederken; sağ panelde gösterilen alan ise katot akış alanını ifade etmektedir. Bu akış alanları, yakıt hücresi içerisindeki gazların (örneğin hidrojen ve oksijen) yönlendirilmesini ve difüzyon bölgelerine düzgün şekilde iletilmesini sağlamaktadır. Akış alanlarının doğru şekilde modellenmesi hem gazların yüzeye dağılımını hem de reaksiyon verimliliğini doğrudan etkilemektedir.



Şekil 5.2. Anot akış alanları ve katot akış alanları

Yakıt hücresinin giriş ve çıkış sınır koşullarının tanımlandığı bölgeler detaylı olarak Şekil 5.3’te gösterilmektedir. Görselde yer alan “Anot Giriş” ve “Anot Çıkış” bölgeleri, yakıt gazı (genellikle hidrojen) akışının anot tarafında hücreye giriş ve çıkış yaptığı yüzeyleri ifade ederken; “Katot Giriş” ve “Katot Çıkış” bölgeleri ise oksijen veya hava akışının katot tarafında hücreye giriş ve çıkış yaptığı alanları tanımlamaktadır. Bu sınır koşulları, hücre içindeki kütle taşınımı ve reaksiyonların doğru modellenebilmesi açısından kritik öneme sahiptir. Özellikle gazların yönlendirilmesi ve hücre içindeki konsantrasyon profillerinin belirlenmesi açısından giriş-çıkış yüzeylerinin doğru konumlandırılması ve tanımlanması gerekir.



Şekil 5.3. Anot ve katot giriş ve çıkış

5.4. Hücre Akım Yoğunluğu

Hücre akım yoğunluğu, COMSOL Multiphysics'te bir araçtır ve genellikle elektrokimyasal modellemelerde kullanılır. Bu araç, bir hücredeki (örneğin bir yakıt hücresinde veya bir bataryada) akım yoğunluğunu belirli bir noktada, sınırda veya tüm bir alanda ölçmek ve analiz etmek için kullanılır.

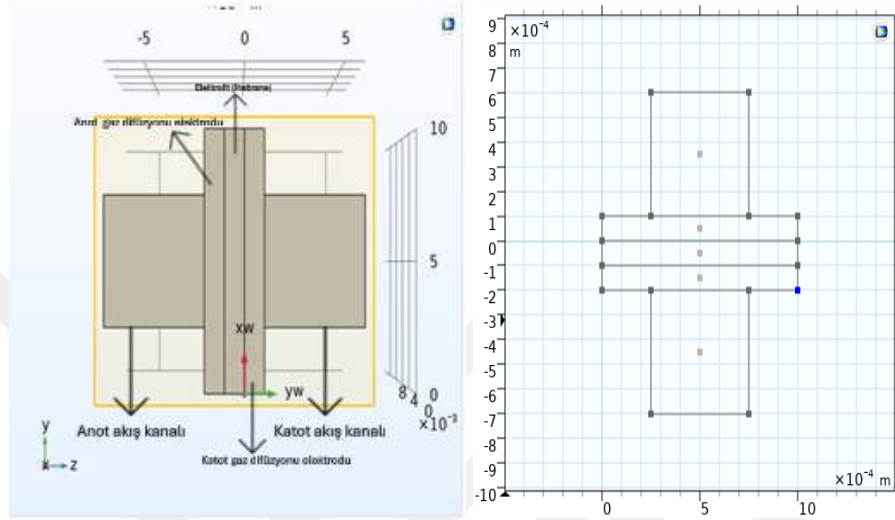
Akım yoğunluğu, elektrik akımının bir yüzey alanına göre dağılımını ifade eder (birimi genelde A/m^2 'dir). Elektrokimyasal hücrelerde (örneğin, yakıt hücreleri, elektrolizörler, bataryalar), akım yoğunluğu hücrenin verimliliği ve performansını anlamak için kritik bir parametredir. Hücrenin çalışma koşulları (örneğin, voltaj, sıcaklık, malzeme özellikleri) değiştirilerek akım yoğunluğundaki değişimler analiz edilebilir.

Hücrenin anodunda, katodunda veya membranında akım yoğunluğu fazlaysa bu bölgelerde sıcaklık artışı olabilir. Simülasyonu çalıştırdıktan sonra akım yoğunluğu değişen parametrelere göre ölçülür.

5.5 Geometri ve Malzeme Atamaları

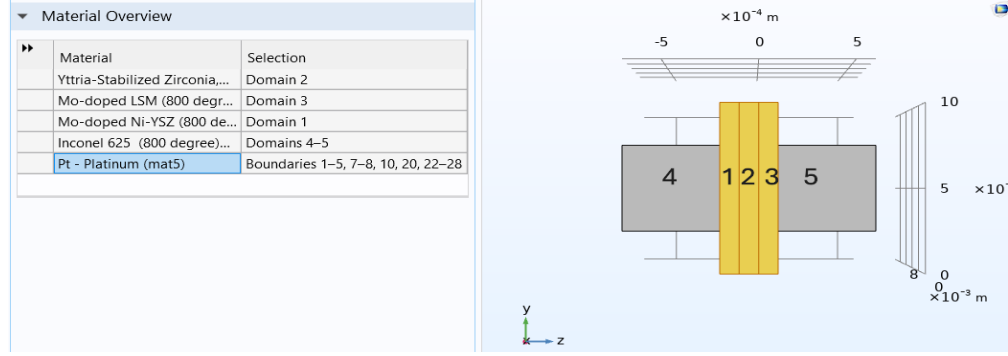
Bu çalışmada tasarlanan katı oksit yakıt hücresi; anot ve katot gaz difüzyon elektrotları, elektrolit tabakası ve gaz akış kanallarından oluşan dört temel bölgeden meydana gelmektedir. Yapının toplam yüksekliği yaklaşık $1,6 \times 10^{-3}$ m, yatay genişliği ise $1,1 \times 10^{-3}$ m olarak belirlenmiştir. Orta bölgede yer alan üç katmanlı aktif yapı, her biri yaklaşık 1×10^{-4} m kalınlığında olan anot gaz difüzyon elektrodu, katot gaz difüzyon elektrodu ve aralarında konumlanan elektrolit tabakasından oluşmakta ve toplamda 3×10^{-4} m genişliğindedir. Bu bölge, elektrokimyasal reaksiyonların gerçekleştiği temel yapıdır. Aktif bölgenin üst ve alt kısımlarında yer alan dikdörtgensel alanlar ise gaz akış kanallarını temsil etmekte olup, her birinin yüksekliği yaklaşık 7×10^{-4} m, genişliği ise 4

$\times 10^{-4}$ m'dir. Bu kanallar sırasıyla anot ve katot gazlarının (örneğin hidrojen ve hava/oksijen) elektrotlara taşınmasını ve reaksiyon ürünlerinin uzaklaştırılmasını sağlar. Yapının yönelimi x-y düzleminde belirlenmiş olup, z eksenini derinliği tanımlamaktadır; gazlar anot tarafında yukarıdan aşağıya, katot tarafında ise aşağıdan yukarıya hareket edecek şekilde karşı akışlı bir sistem kurulmuştur (Şekil 5.4).



Şekil 5.4. Çalışma düzlemi ve düzlem geometrisi

Modelde toplam beş adet alan tanımlanmış olup, her biri farklı malzemelerle temsil edilmektedir. Alan 1, anot gaz difüzyon elektrodu olarak tanımlanmış ve Molibden dopingi uygulanmış Ni-YSZ malzemesi ile modellenmiştir. Alan 2, iyon iletimini sağlayan İtiryumla Stabilize Edilmiş Zirkonya (YSZ) elektrolit bölgesine karşılık gelmektedir. Alan 3 ise katot tarafını oluşturan Molibden dopingi uygulanmış LSM malzemesi ile temsil edilmektedir. Bu üç orta bölge, modelin elektrokimyasal aktif bölgesini oluşturmaktadır. Yapının her iki tarafında yer alan Alan 4 ve 5, elektriksel iletkenliği sağlamak ve mekanik destek oluşturmak amacıyla Inconel 625 ile modellenmiştir. Ayrıca, aktif bölge (alan 1-3) yüzey alanlarını kaplayacak şekilde Platin (Pt) kaplama uygulanmıştır (Şekil 5.5).



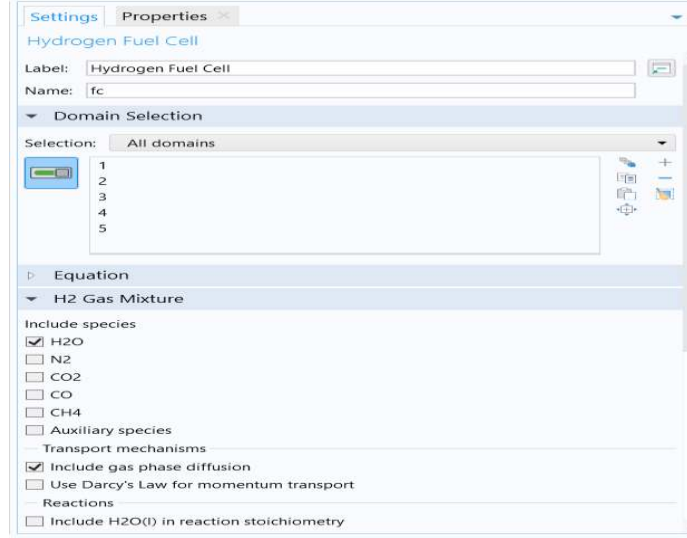
Şekil 5.5. Malzemelere genel bakış

5.6. Fiziksel Özelliklerin Comsol'da Tanımlanması

Programda öncelikle hidrojen yakıt pili tanımlanmış ve hidrojen gaz karışımı bileşenleri, taşınım mekanizmaları ve reaksiyon parametreleri belirlenmiştir (Şekil 5.6). Çalışmada yakıt olarak saf hidrojen seçilmiş, Tablo 5.3'te görüldüğü gibi saf hidrojen seçiminde su buharı reaksiyon sürecinde ihmal edilemeyeceğinden sisteme yakıt $H_2O + H_2$ olarak girilmiştir.

Tablo 5.3. Saf hidrojen ve reformasyon karışım için ihmal edilebilirlik durumu

Tür	Saf Hidrojen	Reformasyon karışım	İhmal Durumu
H ₂	✓	✓	Ana yakıt, ihmal edilemez.
H ₂ O	✓	✓	Reaksiyon ürünüdür. İhmal edilemez.
CO ₂	✗	✓	Reformasyon yan ürünü. Katotta ihmal edilebilirken, anotta ihmal edilemez.
CO	✗	✓	Reformasyon türüdür.
CH ₄	✗	İsteğe bağlı	Reformasyon yakıtıdır.
O ₂	✗	✓	Ana oksijen kaynağıdır.



Şekil 5.6. Hidrojen yakıt pili tanımlanması

Elektrot reaksiyonları için elektrolit türü katı oksit olarak belirlenmiştir. İyon taşıma mekanizması ve elektrokimyasal parametreler bu bölümde tanımlanmıştır. Hidrojen yakıt pilinde elektrot reaksiyonlarında kullanılan olan O_2 gazının bileşimi (H_2O , N_2), taşınım mekanizmaları ve reaksiyon koşulları Şekil 5.7’de tanımlanmıştır.

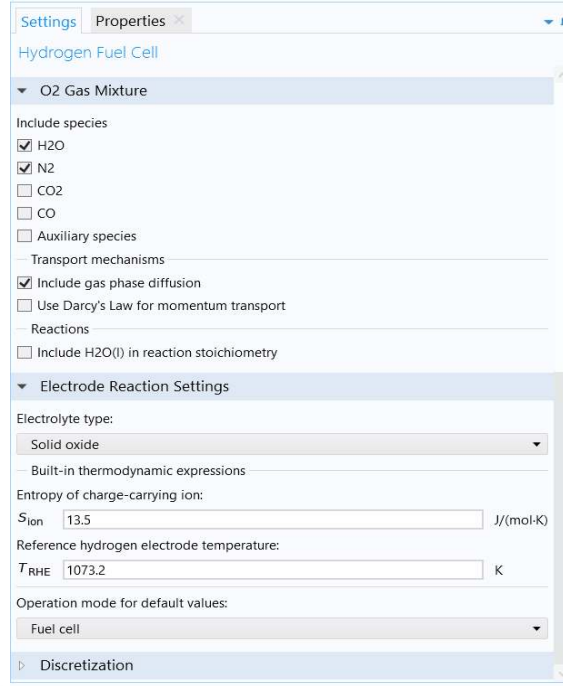
KOYP’nin sistemlerinde oksit iyonlarının (O_2^-) entropisi, sistemin termodinamik analizi ve performans verimliliği açısından önemli bir parametredir. Entropi, elektrolit malzemesi ve çalışma sıcaklığına bağlıdır ve KOYP'nin çalışma koşullarında iyon taşınımını etkiler. Sıcaklığa bağlı olarak oksit iyonunun entropi değerleri:

800°C (1073.15 K), yaklaşık 12–15 J/mol·K arasında ölçülür. Bu sıcaklık, elektrolitin optimum iyonik iletkenlik sağladığı aralıktır. Ortalaması olan 13,5 J/mol·K olarak çalışmada alınmıştır.

900°C (1173.15 K), artan sıcaklık, iyonik iletkenliği artırarak entropi değerini 13–16 J/mol·K seviyesine çıkarır. Ortalaması olan 14,5 J/mol·K olarak çalışmada alınmıştır.

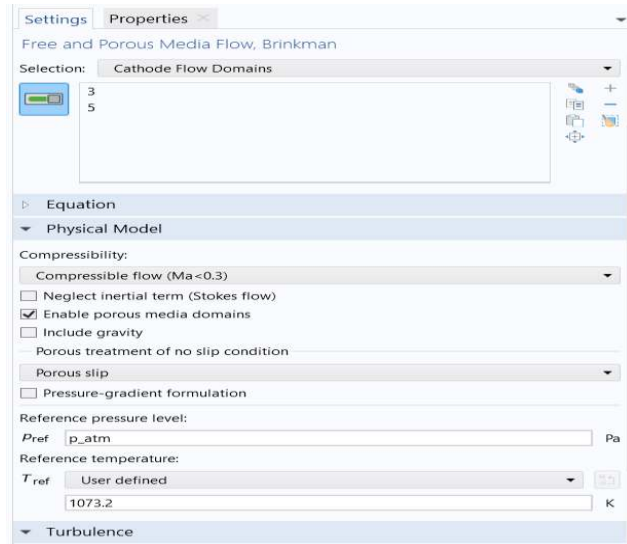
1000°C (1273.15 K), maksimum sıcaklıkta entropi 14–18 J/mol·K değerine ulaşır ve iyon taşınımı en yüksek düzeydedir. Ortalaması olan 16 J/mol·K olarak çalışmada alınmıştır.

Reaksiyon sıcaklıklarına bağlı olarak elektrot üzerindeki iyon taşıma özellikleri bu bilgiler doğrultusunda tanımlanmıştır.



Şekil 5.7. Hidrojen yakıt pili elektrot reaksiyon ayarları

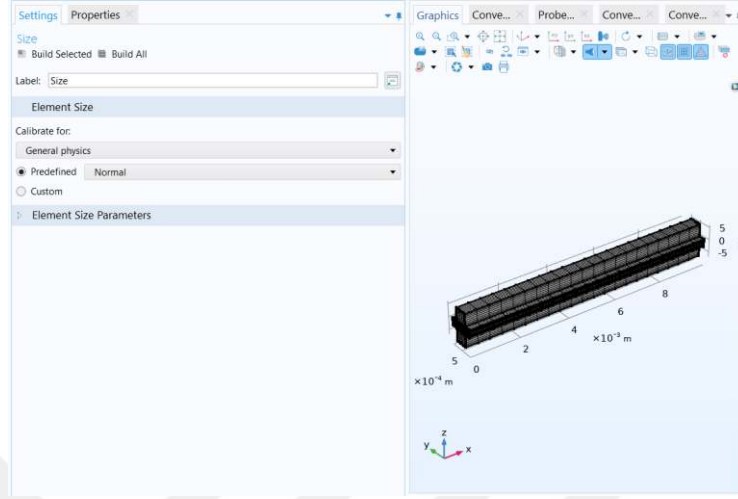
Hidrojen yakıt pili modelinde katot ve anot bölgesi için serbest ve gözenekli ortam akışı olarak seçilmiş ve programda "Free and Porous Media Flow, Brinkman" fiziksel modelinde kullanılarak katot ve anot akış bölgelerinin tanımlanmıştır. Bu aşamada, gözenekli ortam akışı ve serbest akış bölgeleri için uygun basınç ve hız sınır koşulları belirlenmiştir (Şekil 5.8).



Şekil 5.8. Serbest ve gözenekli ortam akışı (katot- anot)

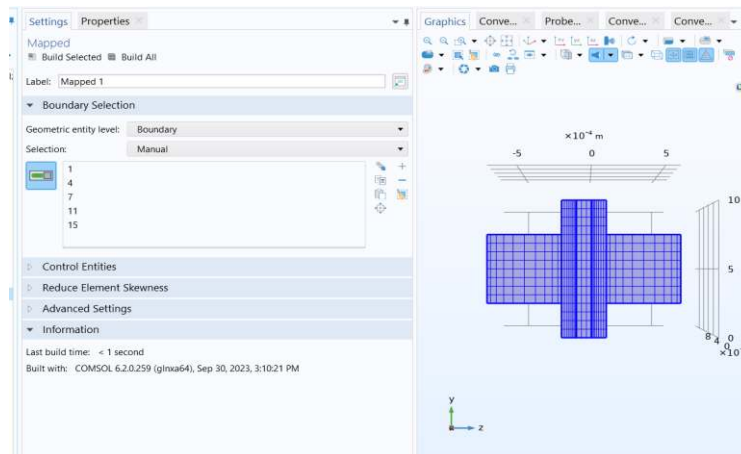
Uygulamadaki katı modelin ağ yapısının genel görünümünü ve boyutlandırması Şekil 5.9’da gösterilmektedir. Ağ yapısının normal hassasiyetle oluşturulmuştur. Sayısal

analizlerdeki hassasiyetin ve hesaplama verimliliğinin optimize edilmesinde ağ yapısı önemli adımı temsil etmektedir.



Şekil 5.9. Ağ yapısı genel görünüm ve boyutu ayarlanması

Modelde eşlenmiş ağ oluşturma yöntemi seçilmiş olup, ilgili sınırların belirlenerek manuel olarak tanımlandığı görülmektedir. Orta panelde, seçilen sınırların listelendiği ve şekil bozulmalarını azaltmak amacıyla kontrol parametrelerinin uygulandığı belirtilmiştir. Modelin genel ağ yapısı görselleştirilmiş olup, ağın düzgün ve optimize edilmiş bir şekilde dağıtıldığı gözlemlenmektedir. Bu aşama sayısal hesaplamalarda ağ kalitesinin ve çözüm doğruluğunun artırılması için önemli bir optimizasyon adımını temsil etmektedir (Şekil 5.10).



Şekil 5.10. Ağ yapısında kenar, eşlenme ve süpürülme ayarları

6. BULGULAR VE TARTIŞMA

6.1. Optimal Sıcaklığın Belirlenmesi

KOYP’de en uygun çalışma koşullarının belirlenmesinde çalışma sıcaklığı önemli bir kriterdir. Bu amaçla COMSOL Multiphysics programında optimum çalışma sıcaklığını belirlemek amacı ile 800, 900 ve 1000 °C’de simülasyon gerçekleştirilmiş ve bu sıcaklıkların sonuçlarına göre en uygun çalışma sıcaklığı belirlenmiştir. Yapılan bu simülasyon referans modeli niteliği taşımakta olup daha sonraki aşamalarda kaplama ve katkı malzemelerinin etkilerini değerlendirmek için önemli role sahiptir.

Çalışmada literatürde hem elektrokimyasal reaksiyon kinetiği hem de enerji dönüşüm verimliliği açısından optimum voltaj aralıklarından biri olarak 0,5 V çalışma voltajı referans alınmıştır [39, 217]. Ayrıca 0,5 V çalışma voltajı maksimum ortalama hücre güç yoğunluğuna ulaşmaktadır. Aşırı ohmik, aktivasyon ve konsantrasyon kayıplarının oluşmadığı bir denge noktası olması nedeniyle özellikle malzeme davranışlarının değerlendirilmesinde tercih edilmektedir [39, 217].

Comsol Multiphysics’te yapılan simülasyon sonucunda elde edilen verilerin değerlendirilmesi ve en uygun koşulların belirlenmesinde kullanılan program çıktıları ve etkileri:

Elektrot potansiyeli, hücre içindeki elektriksel kayıpları analizinde kullanılır. Elektrotların toprakla potansiyel farkı, hücre performansı için önemli bir göstergedir. Düşük potansiyel farkları, elektriksel verimliliğin daha yüksek olduğunu gösterir.

Elektrolit potansiyeli, iyon taşınım verimliliğini ölçümümüzde kriterdir. Elektrolit içinde düşük potansiyel farkları, iyonik taşınımın daha etkili olduğunu gösterir. Elektrot potansiyelleriyle birlikte analiz edilerek toplam hücre verimi değerlendirilir.

Gazların mol kesri, H₂, O₂, H₂O, N₂ mol kesri, akış hattı ve yüzeylerde gazların dağılımını belirler. H₂ ve O₂, yakıt ve oksidanın hücre içindeki etkili kullanımının ölçüsüdür. H₂O, ürün gazı birikimi ve taşınımın verimliliğini karşılık gelir. N₂, atıl gazların davranışı ve olası akış dengesizliklerini gösterir. Daha homojen gaz dağılımı, hücrenin yüksek verimli çalıştığını gösterir.

Akış ve basınç dağılımları, gazların taşınım davranışını ölçmede değerlendirme kriteridir. Yüksek hız gradyanlarda düzensiz taşınım ve düşük verimliliğe işaret eder. Basınç akışkan dinamiklerini analizinde kullanılır. Homojen basınç dağılımı, gazların dengeli taşındığını ve reaksiyonların etkili gerçekleştiğini gösterir.

Polarizasyon eğrisi, hücre voltajı ile akım yoğunluğu arasındaki ilişkisini gösterir. Daha yüksek voltajda elde edilen akım yoğunluğu, daha yüksek hücre verimliliğini ifade eder. Ohmik ve aktivasyon kayıplarını da bu eğri üzerinden gösterilebilir.

Güç – akım ilişkisi, hücre performansını belirlenmesinde önemli faktördür. Maksimum güç çıkışı ve buna karşılık gelen akım yoğunluğu, hücre tasarımının ve çalışma koşullarının verimliliğini gösterir.

Elektrolit akım yoğunluğu, elektrolit içindeki iyon taşınım verimliliğini gösterir. Düşük akım yoğunluğu gradyanları, homojen iyon taşınımını ve daha verimli bir sistem tasarımını gösterir.

Aşırı gerilimlerin karşılaştırması, aktivasyon, ohmik ve konsantrasyon kayıplarını kıyaslamasında kullanılır. Daha düşük aşırı gerilimler, sistemin enerji kaybının düşük olduğunu ve daha verimli çalıştığını gösterir. Özellikle oksijen indirgeme reaksiyonuna bağlı aktivasyon kayıpları, katalizör performansını optimize etmek için önemlidir.

Polarizasyon eğrisi, güç - akım ilişkisi, elektrolit akım yoğunluğu, aşırı gerilimler toplam hücre verimliliği üzerinde en büyük etkiye sahiptir. Gaz dağılımları, akış ve basınç profillerindeki homojenliği kontrol ederek, sistemin dengeli çalışıp çalışmadığını değerlendirilir.

KOYP’de Comsol Multiphysics simülasyon programında optimum çalışma sıcaklığını belirlemek amacı ile 800°C, 900°C ve 1000°C’de simülasyon gerçekleştirilmiş ve elde edilen parametreleri ayrı ayrı değerlendirilmiştir.

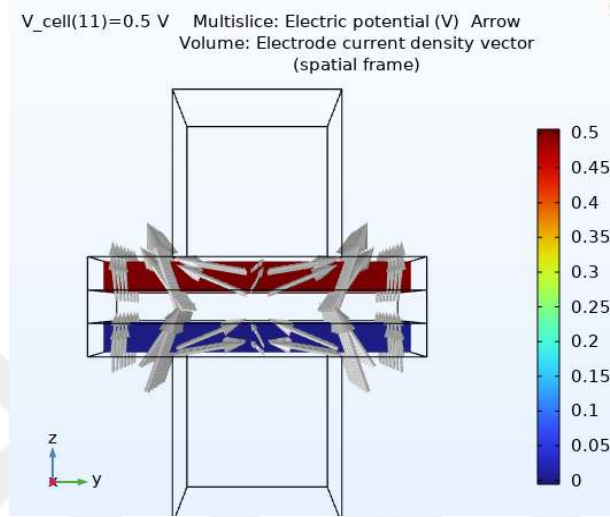
6.1.1. Elektrot potansiyeli / elektrolit potansiyeli

KOYP’de üç farklı çalışma sıcaklığında elektrot potansiyel dağılımını belirlemek için akım yoğunluğu, termal stabilite ve verimlilik düzeyi analiz edilmiş ve sonuçlar Tablo 6.1’de verilmiştir.

800°C’de malzeme stabilitesi daha yüksek olmasına rağmen, elektrokimyasal reaksiyonlar yavaş kalabilmektedir. Daha yüksek verimlilik ve hızlı kinetikler için 900°C uygun bir seçim olacaktır. Bu sıcaklık, malzeme stabilitesi ile elektrokimyasal performans arasında iyi bir denge sağladığı için 1000°C’de daha yüksek iyon taşınımı ve akım yoğunluğu sağlanırken, bu sıcaklık malzeme ömrü açısından uzun vadeli riskler taşıyabilir (Tablo 6.1). 900 °C’de elde edilen sonuçların diğer sıcaklıklarla sayısal anlamda benzerlik gösterdiği için yalnızca bu sıcaklıktaki elektrot potansiyel analizinin görseli verilmiştir (Şekil 6.1).

Tablo 6.1. 800°C, 900°C ve 1000°C'deki elektrot ve akım yoğunluğu analizi

Sıcaklık (°C)	Elektrot Potansiyeli Homojenliği	Akım Yoğunluğu Dağılımı (Elektron)	Termal Stabilité	Verimlilik Düzeyi
800	Orta	Düşük	Yüksek	Orta
900	İyi	Orta	Orta	Yüksek
1000	İyi	Yüksek	Düşük	Orta-Yüksek



Şekil 6.1. 0.5 voltaj ve 900 °C'deki elektrot potansiyeli

Potansiyel dağılımı 0 – 0,5 V aralığında renklendirilmiş olup, kırmızı bölgeler katot tarafında (yüksek potansiyel), mavi bölgeler ise anot tarafında (düşük potansiyel) yer almaktadır. Gradyan, iyon taşıyıcısı olan O^{2-} iyonlarının YSZ elektrolit içindeki difüzyonuna uygun bir ortam oluşturduğunu gösterir. Yüksek sıcaklık altında, 8YSZ'nin iyonik iletkenliği maksimum seviyededir; bu da potansiyel düşüşünün elektrolit boyunca kararlı ve düzgün bir şekilde gerçekleşmesine katkı sağlar. Elektrot-elektrolit arayüzlerinde potansiyelin daha hızlı değiştiği bölgeler, reaksiyon bölgeleri olarak öne çıkmaktadır.

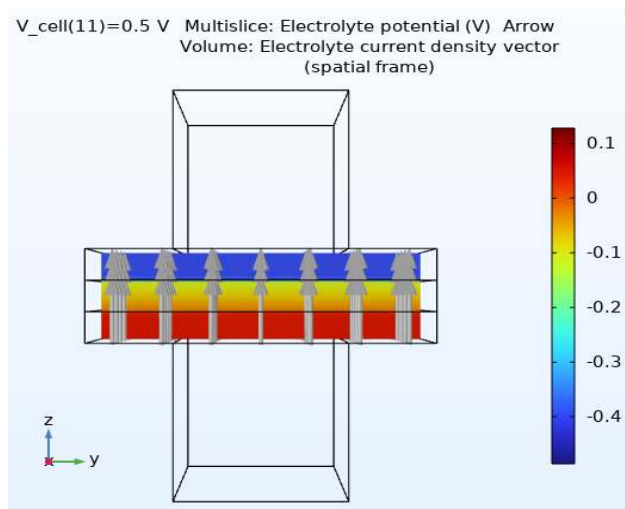
Vektör alanları, akım yoğunluğunun yönünü ve görelî büyüklüğünü göstermektedir. Akım vektörleri anot ve katot içinden simetrik olarak elektrot-elektrolit arayüzlerine yönelmiştir. Elektronların metalik fazdan elektrokimyasal reaksiyon bölgesine taşındığını gösterir. Vektörlerin daha uzun ve yoğun olduğu orta bölgeler, daha yüksek lokal akım yoğunluğunu göstermekte ve bu bölgelerin elektrokimyasal açıdan daha aktif olduğunu işaret etmektedir.

Elde edilen simülasyon sonuçları, elektrot-elektrolit arayüzlerinde belirgin ve düzgün bir elektrik potansiyel gradyanı oluştuğunu ve elektrot hacminde akım

yoğunluğunun simetrik bir şekilde dağıldığını göstermektedir. Bu durum sistemde reaksiyon bölgelerinin etkin çalıştığını ve elektro-kimyasal enerji dönüşüm veriminin yüksek olduğunu göstermektedir. Ayrıca, vektörlerin daha yoğunlaştığı merkezi bölgelerde reaksiyonun daha yoğun olduğu anlaşılmaktadır.

900 °C’de yapılan simülasyon sonucunda elde edilen elektrolit potansiyeli dağılımı, $V_{\text{hücre}}=0,5$ V altında elektrolit bölgesinde meydana gelen iyonik taşıma mekanizmasının düzgün ve kararlı olduğunu ortaya koymaktadır. Şekil 6.2’de potansiyel dağılımı renk skalasıyla ifade edilmiş olup, yaklaşık olarak -0.45 V ile $+0.15$ V arasında değişmektedir (Şekil 6.2). Bu geniş potansiyel farkı, elektrolit boyunca güçlü bir elektrik alan oluştuğunu ve iyonik iletimin etkin şekilde gerçekleştiğini göstermektedir. Özellikle potansiyelin anot ve katot taraflarında farklılık göstermesi, oksijen iyonlarının (O^{2-}) YSZ elektrolit içerisindeki taşınmasını desteklemektedir.

Elektrolit akım yoğunluğu vektörleri hacim boyunca yukarı yönlü ve düzgün bir şekilde hizalanmıştır. Vektörlerin simetrik, paralel ve eşit uzunlukta olması, iyonik akımın homojen dağıldığını ve sistemin içsel dirençlerinin minimize edildiğini göstermektedir. Bu sonuç, LSM/8YSZ/Ni-YSZ yapıdaki hücrenin 900 °C’de iyonik taşıma açısından stabil bir performans gösterdiğini doğrulamaktadır. Ayrıca, benzer eğilimlerin 800 °C ve 1000 °C sıcaklıklarında da tekrarlandığı gözlemlenmiş olup, bu durum sistemin termal olarak geniş bir sıcaklık aralığında kararlı çalıştığını ve malzeme seçiminin başarılı olduğunu ortaya koymaktadır.



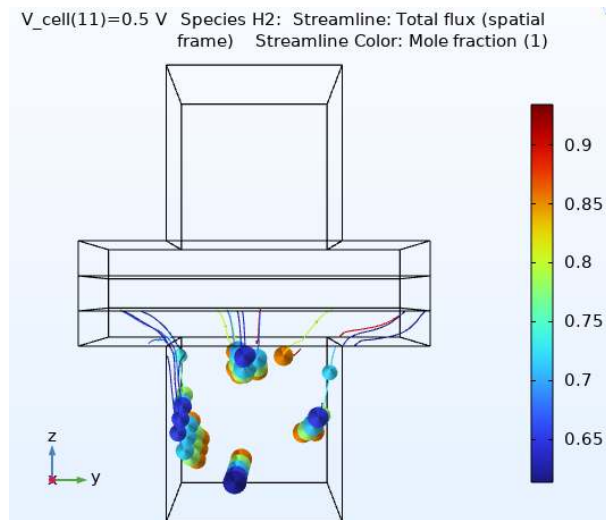
Şekil 6.2. 0.5 voltaj ve 900 °C’de elektrolit potansiyeli

6.1.2. H₂ mol fraksiyonu

KOYP’de üç farklı çalışma sıcaklığında akım çizgileri belirlenmiş ve farklı sıcaklıklarda yapılan karşılaştırmalı analizlerinde H₂ akı yolları ve mol fraksiyonu dağılımının benzer bir yapıda kaldığı gözlemlenmiştir. Bu durum, hücre tasarımının ve seçilen elektrot malzemelerinin (Ni-YSZ anodu) geniş sıcaklık aralığında termokimyasal stabiliteyi koruduğunu ve yakıt kullanım verimliliğinde önemli bir değişiklik yaratmadığını ortaya koymuştur.

KOYP’de üç farklı çalışma sıcaklığında belirgin bir değişim gözlenmediğinden 900°C sıcaklıkta gerçekleştirilen COMSOL simülasyonu, anot tarafındaki hidrojen türünün (H₂) akış çizgileri Şekil 6.3’te verilmiştir. H₂’nin toplam akısı akı çizgileri ile gösterilmiş ve bu çizgiler üzerindeki renkler H₂’nin mol fraksiyonunu ifade etmektedir ve mol fraksiyonu değerleri yaklaşık olarak 0,65 ile 0,95 arasında değişmektedir. Akı çizgilerinin anot-elektrolit arayüzünde yoğunlaşması, H₂’nin bu bölgelerde aktif bir şekilde tüketildiğini ve reaksiyona girdiğini göstermektedir.

Özellikle, 0,95’e yakın kırmızı bölgeler H₂’nin girişte yüksek saflıkta olduğunu, 0,65’e yaklaşan mavi tonlar ise reaksiyon sonrası artık miktarların azaldığını ve yakıtın etkin bir şekilde kullanıldığını ortaya koymaktadır (Şekil 6.3). Çizgilerin aşağıdan yukarıya kıvrımlı hareketi hem konvektif hem de difüzyon tabanlı taşınımın etkili olduğunu göstermektedir.

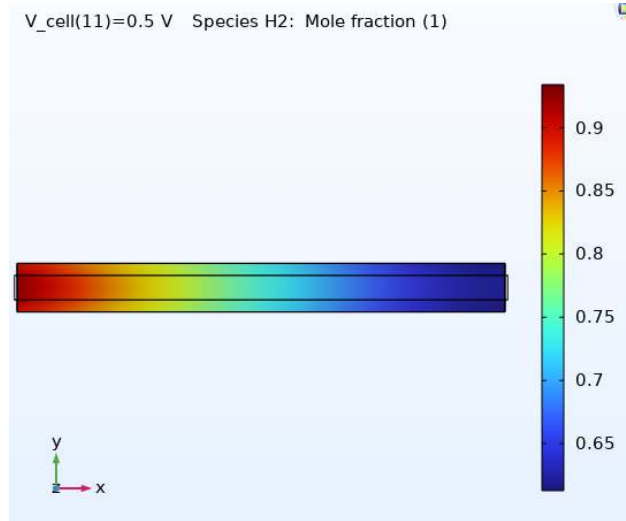


Şekil 6.3. 0.5 voltaj ve 900°C’deki H₂ akış çizgileri

900 °C sıcaklıkta, $V_{\text{hücre}}=0.5$ V, uygulanan çalışma koşullarında elde edilen bu simülasyon çıktısı, hidrojen (H_2) yakıtının anot kanalındaki mol fraksiyonunu göstermektedir. Anot kanalının x yönündeki akış ekseninde H_2 'nin girişten çıkışa doğru nasıl tüketildiğini net bir şekilde ortaya koymaktadır ve H_2 mol fraksiyonu girişte yaklaşık 0,94 seviyelerinde iken, çıkışa doğru bu değer 0,60 civarına kadar düşmektedir (Şekil 6.4). Bu durum, hidrojenin yüksek oranda tüketildiğini ve anot bölgesinde etkili bir reaksiyon mekanizmasının çalıştığını göstermektedir.

Mol fraksiyonu dağılımının x yönünde düzgün ve sürekli bir gradyan oluşturması hem difüzyon hem de reaktif taşınımın etkili bir şekilde gerçekleştiğini, ayrıca sistemde yakıt tüketiminin dengeli olduğunu gösterir. Bu, hücrenin iç akış tasarımının iyi optimize edildiğini ve yakıt hücresinin elektrokimyasal reaksiyon açısından verimli çalıştığını göstermektedir.

Aynı modelin 800 °C ve 1000 °C sıcaklıklarda elde edilen çıktıları da H_2 mol fraksiyonu gradyanı benzer şekilde olduğu, maksimum ve minimum mol fraksiyon değerlerinde $\pm 0,01$ 'lik küçük farklar dışında genel dağılım karakteristiğinin değişmemesi, sistemin geniş bir sıcaklık aralığında sıcaklıktan bağımsız olarak kararlı bir tür taşınımı ve yakıt tüketimi sergilediğini doğrulamaktadır.



Şekil 6.4. 0,5 voltaj ve 900°c'deki H_2 mol fraksiyonu

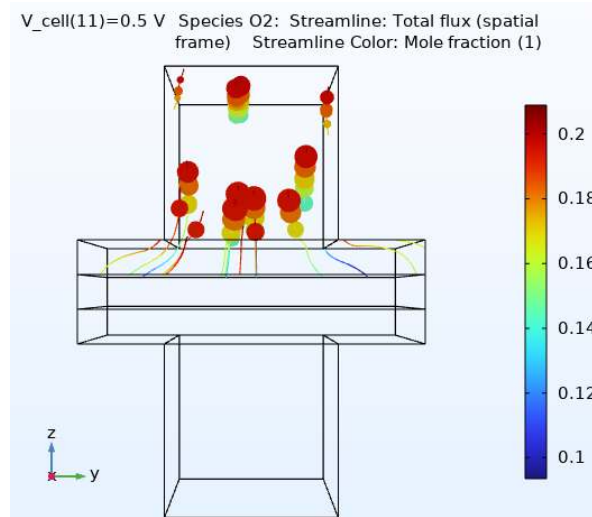
6.1.3. O_2 mol fraksiyonu

KOYP'de üç farklı çalışma sıcaklığında akım çizgileri belirlenmiş ve farklı sıcaklıklarda yapılan karşılaştırmalı analizlerinde O_2 akı yolları ve mol fraksiyonu dağılımının benzer bir yapıda kaldığı gözlemlenmiştir. 900 °C sıcaklıkta gerçekleştirilen

COMSOL simülasyonunda elde edilen ve katot bölgesindeki oksijen (O_2) moleküllerinin toplam akı yollarını ve mol fraksiyonunun dağılımı Şekil 6.5'te gösterilmektedir. O_2 akı çizgilerinin anot-elektrolit arayüzüne doğru yönelmesi, türün aktif bir şekilde tüketildiğini ve elektrokimyasal reaksiyonlarda rol aldığını göstermektedir. Şekil 6.5'te gözlemlendiği gibi mol fraksiyonu, girişte yaklaşık 0,21 (kırmızı alanlar) seviyesindeyken, elektrot-elektrolit arayüzüne yaklaştıkça bu değer 0,10'a kadar düşmesi O_2 tüketiminin verimli şekilde gerçekleştiğini ve reaksiyonun homojen dağıldığını göstermektedir.

Yukarıdan aşağıya doğru yönelmiş ve katot hacmine düzgün dağılmış olması, O_2 taşıyıcısının difüzyonla birlikte yoğun olarak kullanıldığını ve hücre boyunca dengeli bir oksijen tüketiminin sağlandığını kanıtlamaktadır. Bu durum aynı zamanda LSM ($La_{1-x}Sr_xMnO_3$) katot malzemesinin, yüksek sıcaklıkta ($900\text{ }^\circ\text{C}$) iyi iyonik ve elektronik iletkenlik sergileyerek reaksiyon kinetiğini desteklediğini göstermektedir.

$800\text{ }^\circ\text{C}$ ve $1000\text{ }^\circ\text{C}$ sıcaklıklarda yapılan simülasyonlarda da O_2 mol fraksiyonlarının benzer şekilde yaklaşık 0,21 – 0,10 aralığında değiştiği ve akı yönlerinin büyük ölçüde aynı kaldığı gözlemlenmiştir. Bu sonuçlar, sistemin $800\text{--}1000\text{ }^\circ\text{C}$ çalışma aralığında oksijen taşınımı açısından termokimyasal kararlılığını koruduğunu, yani tür tüketimi ve reaksiyon kinetiğinin sıcaklık değişiminden bağımsız olarak istikrarlı bir şekilde sürdüğünü ortaya koymaktadır.



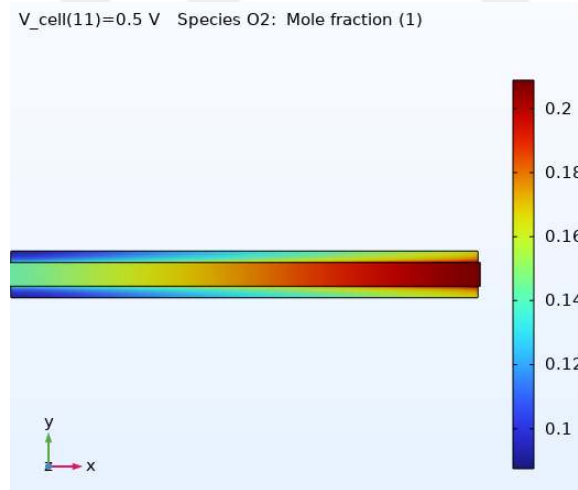
Şekil 6.5. 0.5 voltaj ve $900\text{ }^\circ\text{C}$ 'de O_2 akış çizgileri

$900\text{ }^\circ\text{C}$ sıcaklıkta ve $V_{\text{cell}}=0,5\text{ V}$ altında çalışan yakıt hücresi modelinde, katot kanalındaki O_2 mol fraksiyonunun boylamsal (x yönlü) dağılımını Şekil 6.6'da

gösterilmektedir ve O_2 mol fraksiyonu girişte yaklaşık 0,21 seviyesinde başlamakta, kanal boyunca kademeli olarak azalarak çıkışta 0,10 seviyesine inmektedir (Şekil 6.6). Bu dağılım, oksijenin kanal boyunca etkin şekilde tüketildiğini ve katot-elektrolit arayüzlerinde gerçekleşen redüksiyon reaksiyonlarının yaygın ve dengeli olduğunu göstermektedir.

Mol fraksiyonu dağılımının düzgün bir gradyan sergilemesi, konvektif-difüzyonel tür taşınımının başarılı bir şekilde çalıştığını ve O_2 tüketiminin sistem genelinde homojen olduğunu işaret eder. Bu durum, kullanılan LSM ($La_{1-x}Sr_xMnO_3$) katot malzemesinin yüksek sıcaklıkta yeterli gaz geçirgenliği ve reaksiyon kabiliyeti sunduğunu desteklemektedir.

Aynı model, 800 °C ve 1000 °C sıcaklık değerlerinde de çalıştırılmış olup, O_2 mol fraksiyonu dağılımının benzer şekilde 0,21 – 0,10 aralığında seyrettiği ve dağılım karakteristiğinde önemli bir değişiklik olmadığı gözlemlenmiştir. Bu bulgular, hücrenin 800–1000 °C sıcaklık aralığında oksijen tüketim davranışının sıcaklık bağımsız ve kararlı bir şekilde gerçekleştiğini ortaya koymaktadır. Bu da hücre tasarımının yüksek termal güvenilirlik ve istikrar sunduğunu göstermektedir.



Şekil 6.6. 0,5 voltaj ve 900 °C'de O_2 mol fraksiyonu

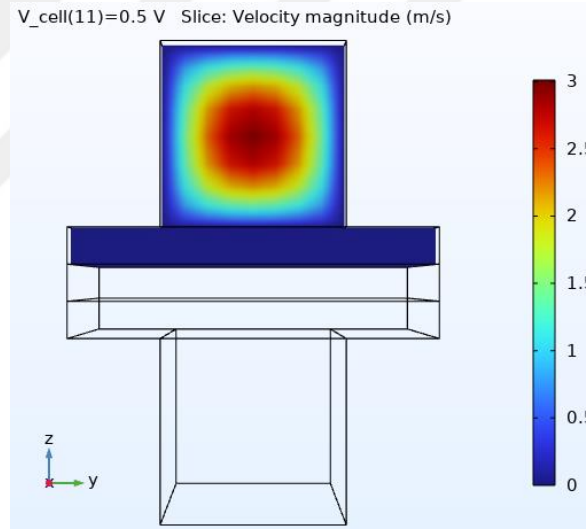
6.1.4. Katotta hız büyüklüğü ve basınç

KOYP'de üç farklı çalışma sıcaklığında hız büyüklüğü ve basınç belirlenmiştir. 900 °C sıcaklıkta yakıt hücresinin katot kanal bölgesinde gaz akış hızının büyüklüğünü Şekil 6.7'de verilmiştir. Dilimleme düzlemi üzerinden elde edilen sonuçlara göre, hız dağılımı merkezde maksimum olacak şekilde simetrik bir yapı sergilemektedir. Renk skalasına göre, kanal merkezinde hız yaklaşık olarak 3,0 m/s düzeyine ulaşmakta,

kenarlara doğru ise hız 0 m/s seviyelerine kadar düşmektedir. Bu durum klasik laminar akış profilini doğrulayan bir yapıdadır.

Bu homojen ve simetrik akış profili, oksijen gibi reaktif gazların elektrot yüzeylerine düzgün bir şekilde dağıldığını ve reaksiyon bölgelerinde tür yetersizliği yaşanmadığını göstermektedir. Ayrıca, sınır bölgelerde hızın düşmesi sıfır hız sınır koşulunun doğru uygulandığını ve modelin fiziksel gerçekliği başarıyla yansıttığını kanıtlar niteliktedir.

800 °C ve 1000 °C sıcaklıklarında yapılan karşılaştırmalı simülasyonlarda da akış profili ve maksimum hız değeri büyük ölçüde sabit kalmış; sadece viskoziteye bağlı küçük akış farklılıkları ($\sim \pm 0,05$ m/s) gözlemlenmiştir. Bu sonuç, hücrenin gaz taşıma sisteminin termal kararlılık gösterdiğini ve 800–1000 °C aralığında yakıt-hava dağılımının sıcaklıktan bağımsız olarak verimli sürdürülebildiğini ortaya koymaktadır.



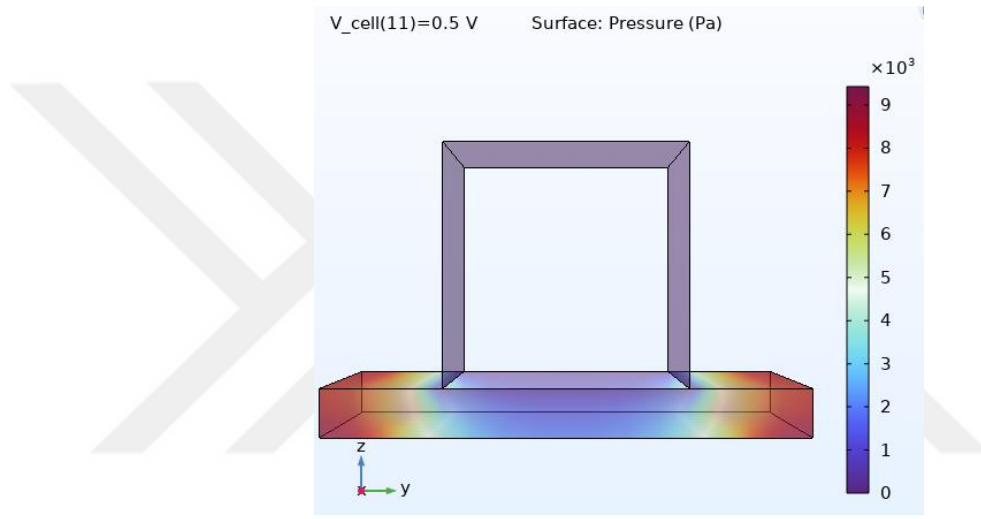
Şekil 6.7. 0.5 voltaj ve 900 °C’de katot hız büyüklüğü

900 °C’de elde edilen bu yüzey basınç dağılımı, yakıt hücresinin anot veya katot gaz kanalında oluşan hidrodinamik basıncı göstermektedir. Görselde renk skalası 0– 9×10^3 Pa değişmekte olup, kanal girişlerinde maksimum basınç yaklaşık 9000 Pa olarak gözlemlenirken, çıkış bölgelerine doğru bu değer 0 Pa seviyelerine kadar düşmektedir. Bu durum, kanal boyunca düzenli bir basınç gradyanı oluştuğunu ve laminar akışın fiziksel olarak doğru modellendiğini göstermektedir (Şekil 6.8).

Basınç dağılımının her iki yanda simetrik olması, sistemin geometrik ve sınır koşulu açısından dengeli olduğunu ve türlerin akışkan basıncı etkisiyle yönlendirildiğini doğrulamaktadır. Ayrıca, herhangi bir ani basınç sıçramasının gözlemlenmemesi,

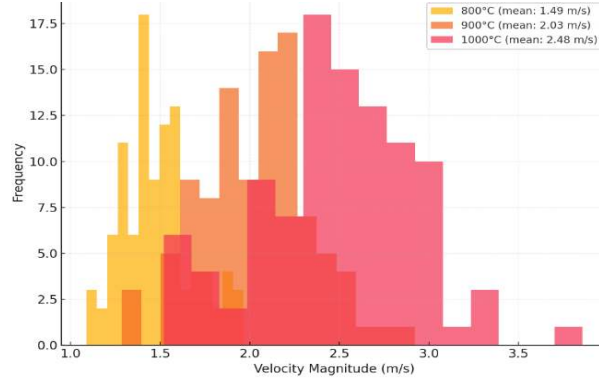
sistemde türbülans veya dengesiz yerel dirençler oluşmadığını ve akışkanın kanal boyunca rahatça ilerleyebildiğini göstermektedir.

Bu simülasyon 800 °C ve 1000 °C sıcaklıklarında tekrarlandığında benzer sonuçlar elde edilmiş, maksimum basınç değerlerinde sıcaklığa bağlı olarak sadece ± 200 Pa civarında küçük farklar gözlenmiştir. Bu durum, yakıt hücresi modelinde sıcaklık değişimlerinin akış dinamiği üzerindeki etkisinin ihmal edilebilir düzeyde olduğunu ve sistemin 800–1000 °C aralığında hidrodinamik açıdan kararlı bir yapı sergilediğini kanıtlamaktadır.



Şekil 6.8. 0.5 voltaj ve 900 °C’de katot basınç

800°C, 900°C ve 1000°C sıcaklıklarında bölgelerde görülen hız dağılımları sıklıkları sonucunda ortalama olarak sırasıyla 1,49 m/s, 2,03 m/s, 2,48 m/s’dir (Şekil 6.9). Sıcaklık arttıkça genel olarak hızın arttığı gözlenmiş ve düşük dar bir hız dağılıma sahipken, daha yüksek hızlarda geniş bir dağılım olduğu ve en yüksek ortalama hızla birlikte daha yaygın bir hız dağılımı gözlenmiştir.



Şekil 6.9. 800, 900 ve 1000 °C’de hız büyüklüğü karşılaştırması

Her bir sıcaklık için basınç (Pa) grafiğinden alınan yaklaşık maksimum ve minimum basınç değerleri Tablo 6.2’de verilmiştir.

Tablo 6.2. Minimum, maksimum basınç ve basınç farkı

Sıcaklık (°C)	Minimum Basınç (Pa)	Maksimum Basınç (Pa)	Basınç Farkı (Pa)
800	$\sim 1 \times 10^3$	$\sim 9 \times 10^3$	$\sim 8 \times 10^3$
900	$\sim 1 \times 10^3$	$\sim 8 \times 10^3$	$\sim 7 \times 10^3$
1000	$\sim 1 \times 10^3$	$\sim 7 \times 10^3$	$\sim 6 \times 10^3$

Sıcaklık arttıkça, basınç farkı (ΔP) azaldığı, 800°C’de $\sim 8 \times 10^3$ Pa olan basınç farkının, 1000°C’de $\sim 6 \times 10^3$ Pa seviyesine gözlenmektedir. Bu durum, sıcaklığın artmasıyla birlikte gaz akışının daha homojen hale geldiğini ve sistemdeki dirençlerin azaldığını göstermektedir.

Daha düşük sıcaklıklarda basınç farkının yüksek olması, gaz akışının daha düzensiz olduğunu ve dolayısıyla elektrokimyasal reaksiyon bölgelerinde daha fazla kayıp yaşandığını gösterir. 1000°C’de basınç farkının azalması, gaz transferinin daha etkili olduğunu ve elektrot yüzeylerine ulaşımın kolaylaştığını işaret eder.

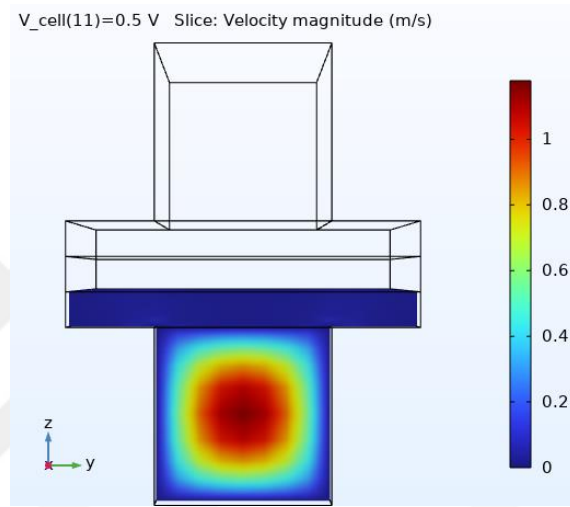
Yüksek sıcaklıklarda (1000°C), sistemdeki basınç farkının azalması reaksiyon verimliliğinin artabileceğini düşündürmektedir. Bu, yakıt hücresinin daha iyi bir performans gösterebileceği anlamına gelir. Bununla birlikte, sıcaklık artışıyla malzeme dayanıklılığı ve enerji tüketimi gibi faktörler göz önüne alınmalıdır.

Sıcaklığın 800°C’den 1000°C’ye çıkarılmasıyla basınç farkının azalması, gaz akışının ve reaksiyon kinetiklerinin daha verimli hale geldiğini göstermektedir.

6.1.5. Anotta hız büyüklüğü ve basınç

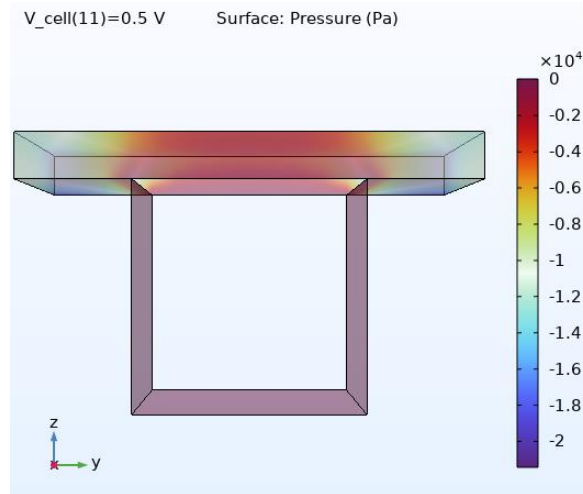
KOYP’de üç farklı çalışma sıcaklığında hız büyüklüğü ve basınç belirlenmiştir. 900 °C sıcaklık yakıt hücresi modelinde elde edilen anot bölgesi simülasyon sonuçları,

akışkan taşıma davranışının hem hız hem de basınç düzeyinde kararlı olduğunu göstermektedir. Anot kanalındaki akışkan hızı büyüklüğü boylamsal kesit şekil 6.10'da verilmiştir. Hız dağılımı merkezde maksimum olacak şekilde parabolik bir profil sergilemekte olup, hız değeri merkezde yaklaşık 1,1 m/s seviyelerine ulaşmakta, kenarlarda ise 0 m/s'ye kadar düşmektedir. Bu durum, klasik laminar akış rejiminin geçerli olduğunu ve akışın düzgün kanal geometrisinde kararlı biçimde ilerlediğini doğrular.



Şekil 6.10. 0,5 voltaj ve 900 °C'de anot hız büyüklüğü

Anot kanalındaki basınç dağılımı, yüzey boyunca ise şekil 6.11'de verilmiştir. Renk skalasına göre maksimum basınç 0 Pa iken, çıkış bölgelerinde basınç yaklaşık $-2,1 \times 10^4$ Pa değerine kadar düşmektedir. Bu doğrusal ve simetrik basınç gradyanı, akışın rejeneratif olarak kanal boyunca yönlendiğini ve herhangi bir geri basınç ya da türbülans etkisinin olmadığını göstermektedir. Kaymama koşulunun kenar bölgelerde geçerli olması, akışkan sınır koşullarının fiziksel gerçekliğe uygun şekilde modellendiğini ortaya koymaktadır (Şekil 6.11).



Şekil 6.11. 0,5 voltaj ve 900 °C’de anot basıncı

Yapılan kıyaslamalı analizler neticesinde, aynı modelin 800 °C ve 1000 °C sıcaklıklardaki simülasyonlarında da hız profilinde ve basınç gradyanında belirgin bir değişiklik gözlenmemiştir. Maksimum hız değerinde $\pm 0,05$ m/s, maksimum basınç farkında ise sadece ± 150 Pa düzeyinde sıcaklığa bağlı sapmalar tespit edilmiştir. Bu sonuçlar, anot gaz taşıma kanalının termohidrodinamik açıdan 800–1000 °C aralığında kararlı çalıştığını ve sıcaklık değişimlerinin akış performansı üzerinde belirgin bir etkiye sahip olmadığını ortaya koymaktadır.

6.1.6. Polarizasyon eğrisi

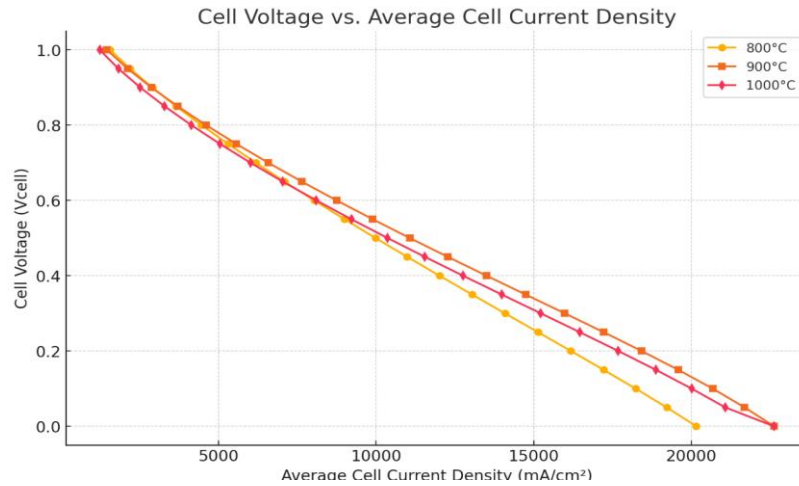
800, 900 ve 1000 °C sıcaklıklardaki hücre voltajı ile ortalama hücre yoğunluğu Şekil 6.12’de; aktivasyon, ohmik ve konsantrasyon kayıpları ise Şekil 6.13’te sunulmuştur. 800°C’de hücre voltajı yüksek akım yoğunluklarında hızla düşüş göstermektedir. Bu durum, ohmik kayıplar ve kütle transfer limitleri ile ilişkilendirilebilir. Maksimum ortalama akım yoğunluğu yaklaşık 20.160 A/m^2 olarak elde edilmiştir. 900°C’de orta akım yoğunluklarında daha stabil bir performans gösterir. Maksimum akım yoğunluğu 22.623 A/m^2 ile 800°C’ye göre biraz daha yüksektir. Bu artış, sıcaklık artışıyla iyonik iletkenliğin artması sonucu daha düşük ohmik kayıplara bağlanabilir. 1000°C’de hücre performansı, daha yüksek sıcaklıklarda en iyi sonucu verir. Maksimum akım yoğunluğu 22.068 A/m^2 ’ye ulaşmıştır. Bu, kütle transfer kayıplarının minimum seviyede olduğunu ve reaksiyon kinetiklerinin hızlandığını gösterir.

Düşük akım yoğunluklarında ($0\text{-}5.000 \text{ A/m}^2$), aktivasyon kayıplarının baskın olduğu görülür. Bu kayıplar, reaksiyon kinetiklerinin sıcaklıkla hızlanması nedeniyle 900°C ve 1000°C’de azalır. Orta akım yoğunluklarında ($5.000\text{-}15.000 \text{ A/m}^2$), ohmik

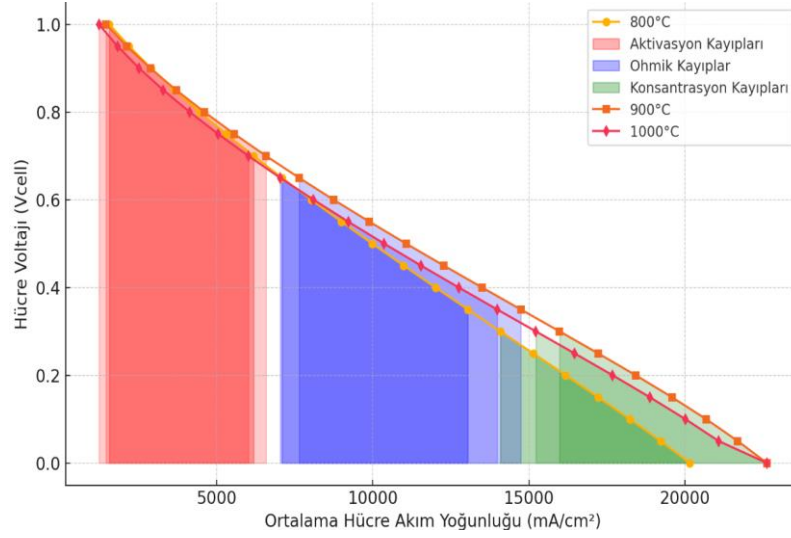
dirençten kaynaklanan kayıplar ön plana çıkar. Yüksek sıcaklıklarda (900°C ve 1000°C), bu kayıplar daha düşük iyonik direnç nedeniyle azalır. Yüksek akım yoğunluklarında (>15.000 A/m²), kütle transfer limitleri belirginleşir. 1000°C'de, bu kayıpların etkisi minimize edilmiştir.

Maksimum akım yoğunluğu değerleri, sıcaklık artışının hücre performansı üzerindeki belirgin etkisini ortaya koymaktadır. 900°C, maksimum akım yoğunluğunun en yüksek olduğu sıcaklık aralığı olup hem performans hem de malzeme kararlılığı açısından optimum bir denge noktası sunmaktadır. 1000°C ise daha stabil voltaj eğrisi ve düşük konsantrasyon kayıpları ile öne çıkar. 800°C ise düşük sıcaklığın getirdiği kinetik ve iletkenlik sınırlamaları nedeniyle daha düşük maksimum akım yoğunluğuna ulaşabilmiştir. Bu bağlamda, sıcaklık seçimi yalnızca performans değil, aynı zamanda malzeme dayanımı ve sistem ömrü açısından da optimize edilmelidir.

Aktivasyon, ohmik ve konsantrasyon kayıplarının sıcaklık ve akım yoğunluğu aralıklarına göre dağılımı, hücre performansının kapsamlı şekilde analiz edilmesini sağlar. 800°C'de hücre düşük sıcaklık sınırlamaları nedeniyle tüm kayıplardan daha fazla etkilenirken, 900°C'de kayıplar önemli ölçüde dengelenmiştir. 1000°C'de ise özellikle konsantrasyon kayıplarının minimize edilmesi açısından avantajlıdır.



Şekil 6.12. 800, 900 ve 1000 °C'de hücre voltajı ile ortalama hücre yoğunluğu grafiği



Şekil 6.13. 800, 900 ve 1000 °C'de aktivasyon, ohmik ve konsantrasyon kayıpları grafiği

6.1.7. Akım yoğunluğu / güç grafiği

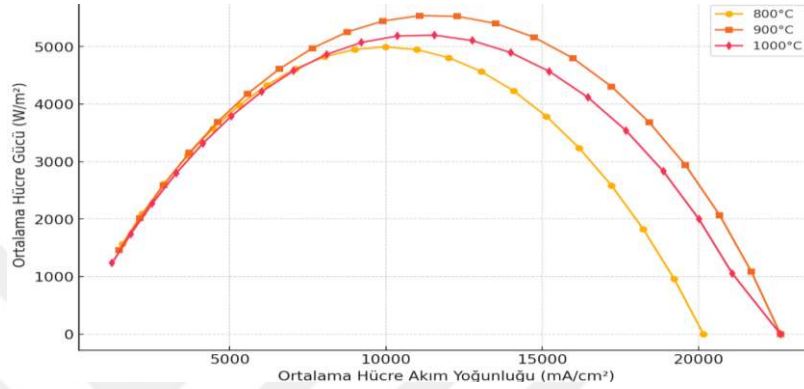
800, 900 ve 1000 °C'de ortalama hücre akım yoğunluğu ve ortalama hücre gücü Şekil 6.14'te verilmiştir. 800°C'de maksimum hücre gücü yaklaşık 4.993 W/m² seviyesinde gerçekleşmektedir. Ortalama akım yoğunluğu, maksimum gücün elde edildiği noktada yaklaşık 10.000 A/m²'dir. Yüksek direnç kayıplarının olduğu bölge (ohmik kayıplar), genellikle eğrinin başlangıç kısmında daha belirgindir.

900°C'de maksimum hücre gücü yaklaşık 5.536 W/m²'ye ulaşmaktadır. Maksimum gücün elde edildiği akım yoğunluğu biraz daha yüksektir (11.000 A/m² civarında). Bu sıcaklıkta, kinetik kayıplar azalmış gibi görünmekte, ancak difüzyon kayıpları grafiğin yüksek akım yoğunluğu bölgesinde artmaktadır.

1000°C'de ise maksimum hücre gücü yaklaşık 5.197 W/m² olarak ölçülmüştür. Güç yoğunluğu ve akım yoğunluğu açısından 900°C ile benzer değerler göstermektedir. Yüksek sıcaklık nedeniyle, ohmik kayıplar grafiğin genel eğrisini daha az etkiliyor olabilir, ancak difüzyon kayıpları hâlâ etkili bir sınırlayıcı faktör olarak karşımıza çıkmaktadır.

Farklı sıcaklıklarda elde edilen güç yoğunluğu değerleri, sıcaklığın yakıt hücresi performansı üzerindeki etkisini açıkça göstermektedir. 900°C hem yüksek güç çıktısı hem de düşük aktivasyon ve ohmik kayıplar ile optimum bir çalışma sıcaklığı sunmaktadır. 800°C, daha düşük enerji tüketimi sağlasa da performans açısından sınırlıdır. 1000°C, başlangıçta güçlü bir performans verse de uzun vadede malzeme stabilitesi ve difüzyon sınırlamaları nedeniyle dikkatli yönetilmesi gereken bir çalışma koşuludur. Elektrokimyasal hücrelerde yüksek akım yoğunluklarında gözlenen ani güç veya voltaj

düşüşleri, çoğu zaman difüzyon (kütle transferi) kayıplarının bir göstergesidir. Bu kayıplar, giren gazların elektrot yüzeylerine ulaşmasındaki sınırlamalardan kaynaklanır ve sıcaklıktan bağımsız olarak belirli bir eşik akım yoğunluğunun üzerindeki bölgelerde etkili olur. Grafik eğrilerindeki bu davranış, özellikle 1000°C'deki eğrinin hızlı düşüş göstermesiyle açıklanabilir.



Şekil 6.14. 800, 900 ve 1000 °C'de ortalama hücre akım yoğunluğu ve ortalama hücre gücü

6.1.8. Elektrolit akım yoğunluğu

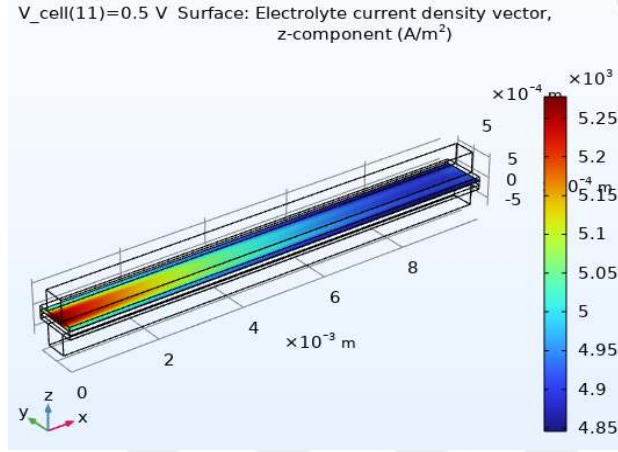
800, 900 ve 1000 °C'de elektrolit akım yoğunluğu Şekil 6.15, Şekil 6.16 ve Şekil 6.17'de verilmiştir. Elektrolit akım yoğunluğu en düşük değer aralığında gözlenmektedir yaklaşık $5,0 \times 10^3$ A/m² 800 °C'de ölçülmüştür. Bu sıcaklıkta, düşük iyon hareketliliği ve reaksiyon kinetiği nedeniyle iyon taşınımı sınırlıdır. Düşük sıcaklıklarda, elektrot-elektrolit ara yüzeyinde daha yüksek bir direnç gözlenir ve bu, hücrenin genel performansını olumsuz etkiler.

Elektrolit akım yoğunluğu artış göstermiştir yaklaşık $5,8 \times 10^3$ A/m² 900 °C'de gözlenmiştir. Bu sıcaklık, elektrokimyasal reaksiyonların daha etkili gerçekleştiği ve iyon taşınımının daha yüksek olduğu bir noktayı temsil eder. Reaksiyon kinetiği açısından optimal bir sıcaklık olarak değerlendirilebilir.

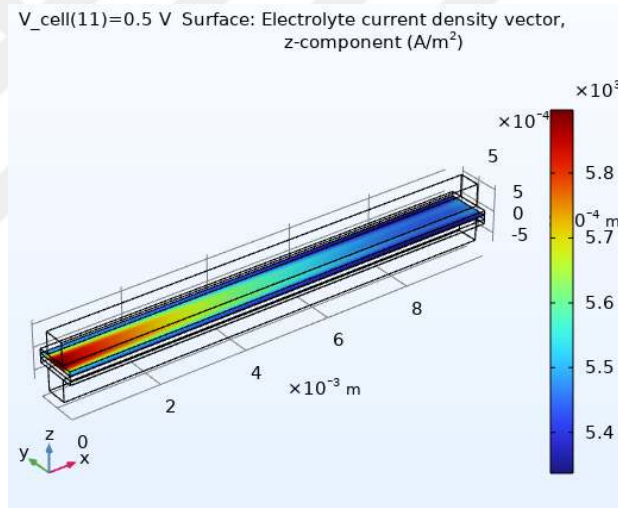
Elektrolit akım yoğunluğu 1000 °C'de maksimum seviyeye ulaşmaktadır yaklaşık $5,5 \times 10^3$ A/m² seviyelere ulaşmaktadır. Yüksek sıcaklıklar, iyon hareketliliğini artırarak elektrokimyasal reaksiyonları hızlandırır ve hücre performansını iyileştirir. Ancak, bu sıcaklıkta malzeme kararlılığı ve termal genleşme sorunları daha belirgin hale gelebilir.

Elektrolit akım yoğunluğu artan sıcaklık ile akım yoğunluğu artar. 900 °C hem yüksek akım yoğunluğu hem de malzeme dayanıklılığı açısından ideal bir denge sağlayabilir. Sonuç olarak, elektrolit akım yoğunluğu değerlendirmesi, sıcaklık değişiminin hücre performansı üzerindeki etkisini net bir şekilde ortaya koymaktadır. Bu

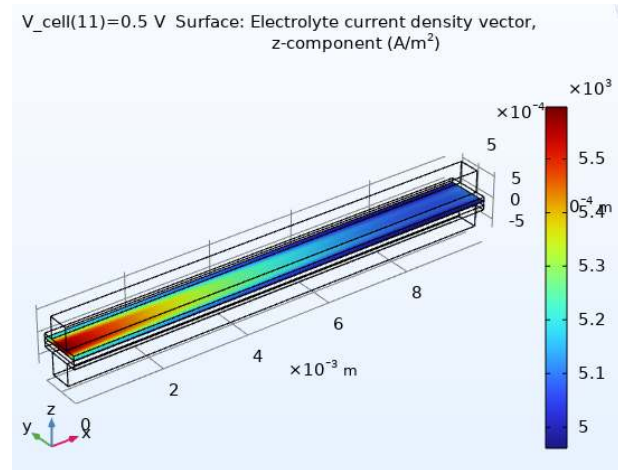
verilerden faydalanarak 900 °C sıcaklıkta daha verimli ve dengeli bir performans sağlanabileceği öngörülmektedir.



Şekil 6.15. 0,5 voltaj ve 800 °C'de elektrolit akım yoğunluğu



Şekil 6.16. 0,5 voltaj ve 900 °C'de elektrolit akım yoğunluğu



Şekil 6.17. 0,5 voltaj ve 1000 °C'de elektrolit akım yoğunluğu

6.1.9. Aşırı gerilim karşılaştırması

800, 900 ve 1000°C’de elektrolit ve elektron taşıma ve hidrojen oksidasyonu ve oksijen redüksiyonu Şekil 6.18 ve Şekil 6.19’da verilmiştir. Şekil 6.18’de elektrolit taşınımı ve elektron taşınımı için aşırı potansiyellerin akım yoğunluğu ile değişimi gösterilmektedir. Elektrolit taşınımına ait eğriler incelendiğinde, sıcaklık arttıkça aşırı potansiyelin de arttığı gözlemlenmektedir. 800°C’de elektrolit taşınımı için aşırı potansiyel maksimum 0,45V seviyelerinde iken, 900°C’de 0,50V ve 1000°C’de 0,55V seviyelerine ulaşmaktadır. Bu durum, sıcaklığın artmasıyla elektrolitin iyon iletkenliğinin artmasına rağmen, hücre içerisindeki dirençlerin belirgin hale gelerek toplam aşırı potansiyeli artırdığını göstermektedir. Elektron taşınımında ise ait aşırı potansiyeller çok düşük seviyelerde olup maksimum 0.05V seviyesini geçmemektedir. Elektron taşınımında sıcaklığa bağlı önemli bir değişim gözlemlenmemektedir. Bunun nedeni, elektron taşınımının büyük ölçüde elektrot malzemelerinin iletkenlik özelliklerine bağlı olmasıdır. Bu bağlamda, verimlilik açısından değerlendirildiğinde, sıcaklık arttıkça elektron taşınımındaki kayıpların ihmal edilebilir düzeyde olduğu, ancak elektrolit taşınımındaki kayıpların belirgin bir şekilde arttığı görülmektedir.

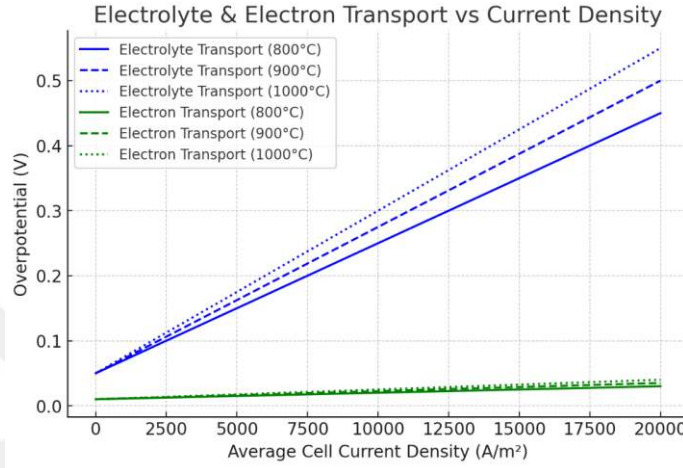
Sonuç olarak, 800°C’nin elektrolit taşınımı açısından en düşük kayıp verdiği ve dolayısıyla en verimli sıcaklık aralığı olduğu söylenebilir. 1000°C’de elektrolit kayıpları belirgin şekilde arttığından, yüksek sıcaklıklar hücre verimliliğini olumsuz etkileyebilir.

Şekil 6.19’da hidrojen oksidasyonu (kırmızı çizgiler) ve oksijen indirgenmesi (turkuaz çizgiler) aşırı potansiyelleri gösterilmektedir. Oksijen indirgenmesi, elektrot reaksiyonları içinde en büyük kayıplara neden olan süreçlerden biridir. Grafikten, oksijen indirgenmesi aşırı potansiyellerinin hidrojen oksidasyonu aşırı potansiyellerine kıyasla çok daha yüksek olduğu açıkça görülmektedir.

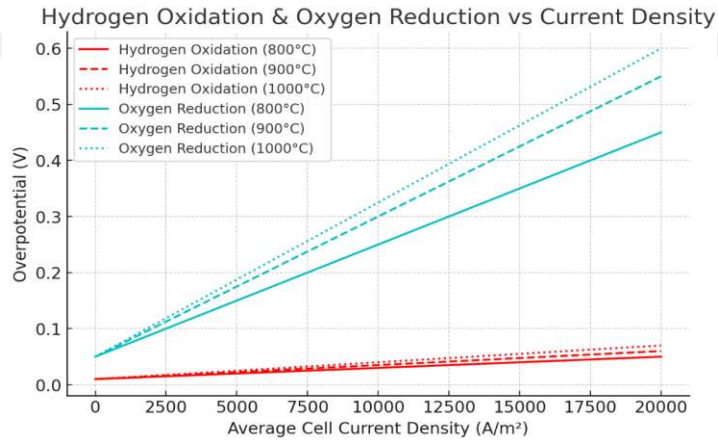
800 °C için oksijen indirgenmesi aşırı potansiyeli yaklaşık 0,4V seviyelerine ulaşırken, 900 °C’de 0,45V ve 1000 °C’de 0,55V seviyelerine kadar çıkmaktadır. Bu, yüksek sıcaklıklarda oksijen indirgenmesi reaksiyonlarının daha fazla enerji kaybına yol açtığını göstermektedir. Özellikle 1000 °C’de oksijen indirgenmesi kayıpları çok ciddi seviyelere ulaştığından, bu sıcaklığın yakıt hücresinin performansını önemli ölçüde olumsuz etkilediği söylenebilir.

Hidrojen oksidasyonu açısından ise aşırı potansiyeller çok düşük seviyelerde kalmaktadır (maksimum 0,08V civarı). Bu, hidrojen oksidasyonu kayıplarının oksijen indirgenmesi ile kıyaslandığında ihmal edilebilir düzeyde olduğunu göstermektedir.

Sonuç olarak, 800 °C’de yakıt hücresinin en düşük aşırı potansiyele sahip olduğu, dolayısıyla aşırı gerilim karşılaştırılmasında en verimli sıcaklık olduğu belirlenmiştir. 1000 °C seviyesinde aşırı potansiyeller önemli ölçüde artarak hücre içindeki reaksiyonları daha az verimli hale getirmektedir. Bu nedenle, verimliliği optimize etmek adına 800°C sıcaklığının tercih edilmesi önerilmektedir.



Şekil 6.18. 800 °C, 900 °C ve 100 °C’deki elektrolit ve elektron taşıma grafiği



Şekil 6.19. 800, 900 ve 1000 °C’de hidrojen oksidasyonu ve oksijen redüksiyonu

Yapılan kapsamlı analizler sonucunda, 900 °C sıcaklık seviyesi; iyon iletkenliği, gaz taşınımı, potansiyel homojenliği, akım yoğunluğu ve güç üretimi gibi temel performans kriterleri açısından en dengeli ve optimum koşulları sağlamaktadır. 800 °C, düşük verim ve sınırlı reaksiyon kinetiği nedeniyle yetersiz kalmakta; 1000 °C ise yüksek performansa rağmen termal stabilitenin zayıflaması nedeniyle uzun ömürlü sistemler açısından dezavantaj oluşturmaktadır. Bu nedenle, 900 °C hem laboratuvar düzeyinde

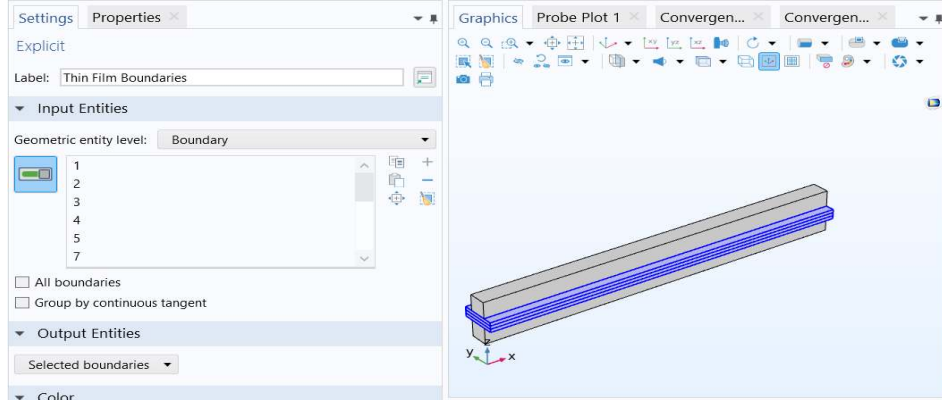
deneysel çalışmalarda hem de endüstriyel uygulamalarda tercih edilebilecek en uygun sıcaklık olarak değerlendirilmektedir (Tablo 6.3).

Tablo 6.3. 800, 900 ve 1000 °C’de genel değerlendirme kriterleri

Parametre	800°C	900°C	1000°C
<i>Elektrot Potansiyeli</i>	Orta	İyi	İyi
<i>Akım Yoğunluğu Dağılımı</i>	Düşük	Orta	Yüksek
<i>Sistem Kararlılığı</i>	Orta	Yüksek	Düşük
<i>Verimlilik</i>	Orta	Yüksek	Orta-Yüksek
<i>H₂ Mol Fraksiyonu (~)</i>	0,94 → 0,64	0,94 → 0,64	0,94 → 0,64
<i>O₂ Mol Fraksiyonu (~)</i>	0,21 → 0,10	0,21 → 0,10	0,21 → 0,10
<i>Katot Hız Büyüklüğü (m/s)</i>	1,49	2,03	2,48
<i>Basınç Farkı (Pa)</i>	8000	7.000	6.000
<i>Maksimum Akım Yoğunluğu (A/m²)</i>	20.160	22.623	22.068
<i>Maksimum Güç (W/m²)</i>	4.993	5.536	5.197
<i>Elektrolit Akım Yoğunluğu (A/m²)</i>	5000,0	5.800,0	5500,0
<i>Elektrolit Aşırı Potansiyeli (V)</i>	0,45	0,5	0,55
<i>Oksijen Redüksiyon Aşırı Potansiyeli (V)</i>	0,4	0.45	0.55

6.2. Platinyum ve Paladyum İnce Kaplamaların Uygulanması ve Karşılaştırılması

İnce film kaplamaların performans analizi, çok disiplinli bir yaklaşım gerektirir. Kaplamaların mekanik, termal ve elektriksel davranışlarının detaylı olarak incelenmesi, yakıt hücreleri, sensörler ve mikroelektronik cihazlar gibi uygulamalarda uzun ömürlü ve verimli bir çalışma sağlamak için kritik öneme sahiptir. Bu bağlamda, COMSOL Multiphysics’te katı mekaniği, ısı transferi ve elektrik akım modüllerinin sisteme eklenmesi, kaplamaların mekanik stabilite, termal yönetim ve elektriksel iletkenlik açısından kapsamlı bir şekilde analiz edilmesini sağlar. COMSOL programında çalışmalar 6.1’de optimum sıcaklık olarak belirlenen 900 °C’de yürütülmüştür ve kaplama uygulanacak sınırlar belirlenmiştir (Şekil 6.20).



Şekil 6.20. İnce film uygulanacak sınırların belirlenmesi (katot, anot ve elektroliz)

Katı mekaniği modülü, ince film kaplamalar üzerindeki mekanik streslerin, deformasyonların ve yapısal stabilitenin analiz edilmesini sağlar. Kaplamaların Von Mises gerilmesi, elastik deformasyonu ve termal genleşme etkileri bu modül aracılığıyla hesaplanır. Özellikle hidrojen yakıt hücrelerinde veya yüksek sıcaklık uygulamalarında, kaplamaların mekanik dayanımı oldukça kritiktir. Katı mekaniği modülü, kaplamaların aşırı mekanik stres altında nasıl davrandığını ve yüzeyde deformasyon veya çatlak oluşumunun olup olmadığını belirlemek için gereklidir.

İnce film kaplamalar modülü, ısı iletkenliği ve sıcaklık dağılımı açısından büyük farklılıklar gösterebilir. Isı transferi modülü, kaplamanın yüzeyinde ve alt katmanlarında sıcaklık dağılımını hesaplamak ve sıcaklık değişimlerinin mekanik ve elektriksel performansa etkisini belirlemek için kullanılır. Isı yönetiminin etkin olması, kaplamanın uzun ömürlü olması açısından kritik bir faktördür. Özellikle yakıt hücrelerinde yüksek sıcaklıkların neden olduğu termal streslerin değerlendirilmesi, termal genleşme ve ısı kayıplarının hesaplanması açısından bu modül gereklidir.

Elektriksel iletkenlik modülü, ince film kaplamalar için temel performans kriterlerinden biridir. Elektrik akım modülü, kaplamanın elektriksel iletkenliğini, yüzeydeki elektrik alan dağılımını ve kaplama boyunca akım yoğunluğunu analiz etmek için kullanılır. Elektrokimyasal reaksiyonların verimliliği doğrudan kaplamanın elektrik iletkenliği ile ilişkili olduğundan, bu modül aracılığıyla kaplama malzemesinin elektron transferi üzerindeki etkileri incelenebilir. Elektrik alan dağılımının homojenliği ve aşırı yüklenme bölgelerinin belirlenmesi açısından bu modülün kullanımı önemlidir.

İnce film kaplamaların mekanik, termal ve elektriksel performanslarını kapsamlı bir şekilde analiz etmek için katı mekaniği, ısı transferi ve elektrik akım modüllerinin birlikte kullanılması gereklidir. Bu üç fiziksel alanın bütünleşmiş bir şekilde

modellenmesi, kaplamaların güvenilirliğini artırmak, malzeme seçimini optimize etmek ve uygulamaya en uygun ince film kaplama malzemesini belirlemek açısından kritik bir rol oynamaktadır.

Von Mises gerilmesi, bir malzemenin plastik şekil değiştirmeye başlama eğilimini belirlemede kullanılan temel kriterdir. Gerilme dağılımı, yapının yük altında nasıl tepki verdiğini ve hangi bölgelerde kritik zorlanmalar oluştuğunu gösterir. Yüksek Von Mises gerilme değerleri, malzemenin sınır dayanımına yaklaşarak çatlama, yorulma veya kırılma riskini artırabilir. Özellikle gerilmenin lokal bölgelerde yoğunlaşması, yapının mukavemetini zayıflatır. Bu nedenle, gerilmenin sadece büyüklüğü değil, yüzey boyunca dağılım homojenliği de mekanik güvenilirlik açısından kritik öneme sahiptir.

Yer değiştirme büyüklüğü, malzemenin uygulanan dış yükler karşısında gösterdiği şekil değişimini ifade eder. Elastik ya da plastik deformasyonun büyüklüğü ve dağılımı, malzemenin rijitliği ve esneklik sınırları hakkında bilgi verir. Uç bölgelerde yoğunlaşan deformasyon, yapının dengesini bozabilirken, homojen bir deformasyon dağılımı daha stabil bir yük transferi sağlar. Maksimum yer değiştirme değerinin değişmemesi, yapının genel rijitliğinin sabit kaldığını gösterirken, deformasyonun dengeli dağılımı yüzey kaplamalarının mekanik stabiliteye katkı sağladığını ortaya koyar.

Sıcaklık dağılımı, bir malzeme ya da yapı içindeki termal iletim dengesini ortaya koyar. Homojen bir sıcaklık dağılımı, termal streslerin azaltılmasında ve malzeme ömrünün uzatılmasında kritik rol oynar. Düzensiz ısı dağılımı, lokal aşırı ısınmalara yol açarak malzemenin genleşme farklarından kaynaklı çatlama veya deformasyon yaşamasına sebep olabilir. Yüksek sıcaklık seviyeleri malzemenin çalışma aralığını zorlayabilirken, düzenli ve dengeli dağılım, termal iletkenliği artırarak yüzeylerin daha kontrollü ısınmasını sağlar.

Elektrik alan normu, bir yüzey ya da yapının elektriksel iletim performansını analiz etmede kullanılan temel parametrelerden biridir. Elektrik alanın büyüklüğü ve yüzey boyunca dağılımı, yük yoğunlaşması, potansiyel farkları ve elektriksel kararlılık gibi önemli unsurlar hakkında bilgi verir. Düzensiz elektrik alan dağılımı, yüzeyde yük birikimi oluşturarak elektriksel bozunumlara yol açabilir. Homojen bir elektrik alan, yüklerin yüzey boyunca dengeli dağılmasını sağlayarak malzemenin dielektrik dayanımını ve elektriksel performansını artırır.

Elektromanyetik kayıp yoğunluğu, malzeme içerisinde elektromanyetik dalgaların absorpsiyonuna bağlı enerji kaybını ifade eder. Yüksek kayıp yoğunluğu, malzemenin

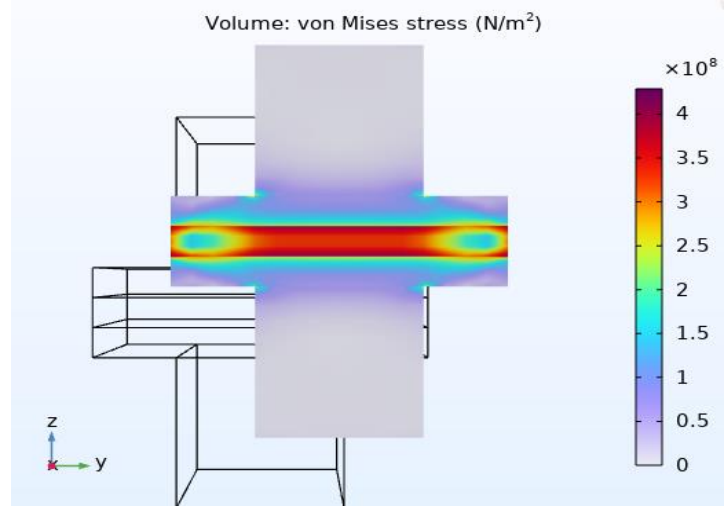
elektromanyetik enerjiyi etkin bir şekilde soğurduğunu ve dönüştürdüğünü gösterir; ancak bu kayıpların düzensiz ve yoğunlaştığı bölgelerde ısıl gerilmeler oluşabilir. Homojen bir kayıp dağılımı, elektromanyetik ekranlama ve yüzey güvenliği açısından avantaj sağlar. Yüzey kaplamalarının elektriksel iletkenliğini artırması, bu kayıpların dengeli yayılmasını sağlayarak sistemin verimliliğini korur.

Enerji dengesi, sistemin toplam enerji kazanımı ve kaybı arasındaki farkı ifade eder. Pozitif enerji dengesi, sistemin enerji topladığını; negatif enerji dengesi ise enerji kaybı yaşandığını gösterir. Toplam net enerji oranı ve ısı kaynağı gibi alt parametreler, sistemin enerji iletim kapasitesi hakkında bilgi verir. Yüzey kaplamaları, ısı transferini artırarak enerji dengesini daha verimli hale getirebilir. Bu bağlamda, enerji dengesi analizi, yüzeyin ısı verimliliğini ve sistemin genel enerji yönetimini değerlendirmede temel kriterdir.

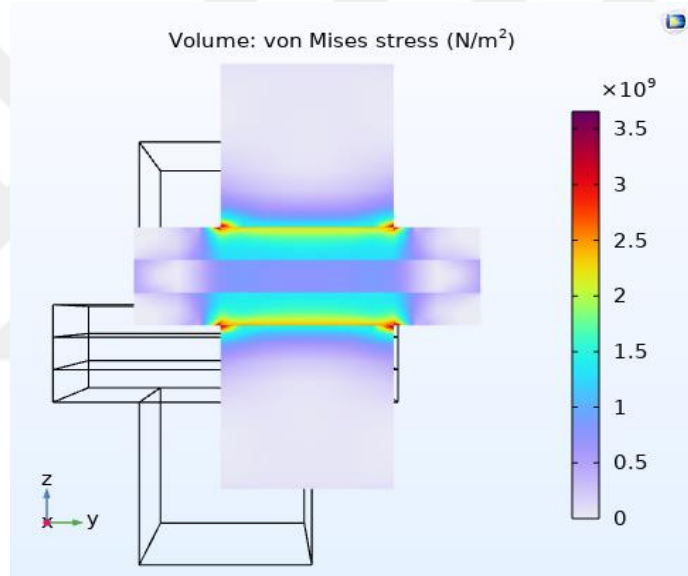
İnce film kaplamasız yüzeylerde, maksimum Von Mises gerilme değerleri yaklaşık 4×10^8 N/m² seviyesine ulaşmaktadır (Şekil 6.21). Gerilme dağılımı incelendiğinde, özellikle merkezi bölgelerde yüksek gerilme yoğunlaşmaları olduğu gözlemlenmektedir. Yüksek gerilme bölgeleri, yapının yük taşıma kapasitesini zorlayarak yorulma veya kırılma riskini artırabilir.

Platinyum ve paladyum kaplamaların uygulanması sonucunda, maksimum Von Mises gerilme değerinin her iki durumda da $3,5 \times 10^9$ N/m² seviyesine çıktığı görülmektedir (Şekil 6.22 ve 6.23). Bu değer, kaplamasız yüzeye kıyasla yaklaşık 10 katlık bir artışa işaret etmektedir. Gerilme dağılımı açısından her iki kaplama da benzer etkiler göstermiştir; platinyum kaplama, dağılımı daha homojen hale getirerek lokal gerilme yoğunluklarını azaltırken, paladyum kaplama ise gerilmelerin merkezi bölgelerde yoğunlaştığı ancak kaplamasız duruma göre daha dengeli bir dağılım sergilediği bir yapı ortaya koymuştur.

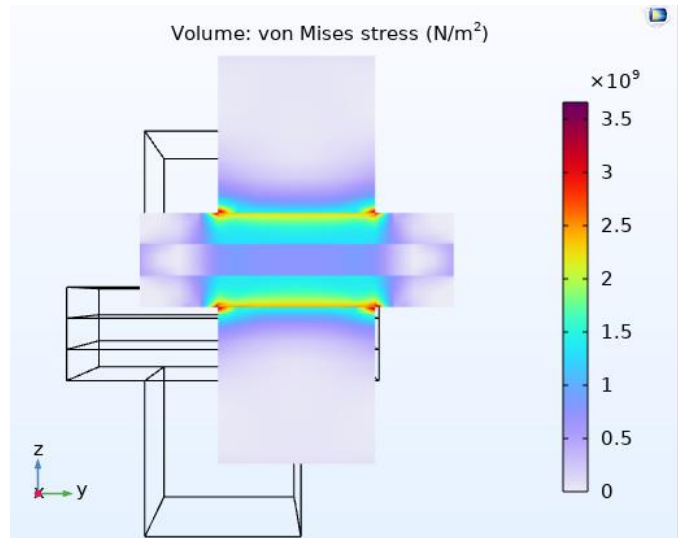
Kaplamasız yüzeyde, Von Mises gerilme değeri daha düşük olmakla birlikte, gerilme dağılımı düzensizdir ve bazı bölgelerde yoğunlaşmalar gözlemlenmektedir. Bu durum, malzemenin yorulma ömrünü olumsuz etkileyebilir. Platinyum ve paladyum kaplamalar, Von Mises gerilme değerini önemli ölçüde artırırken, gerilme dağılımını daha homojen hale getirmiştir. Bu kaplamalar, mekanik dayanımı artırma açısından avantaj sağlarken, aynı zamanda yüksek gerilmeler nedeniyle malzemenin kırılma riski de artırabilir. Platinyum ve paladyum kaplamalar arasında kayda değer bir fark bulunmamaktadır.



Şekil 6.21. İnce film kaplamasız von Mises gerilmesi



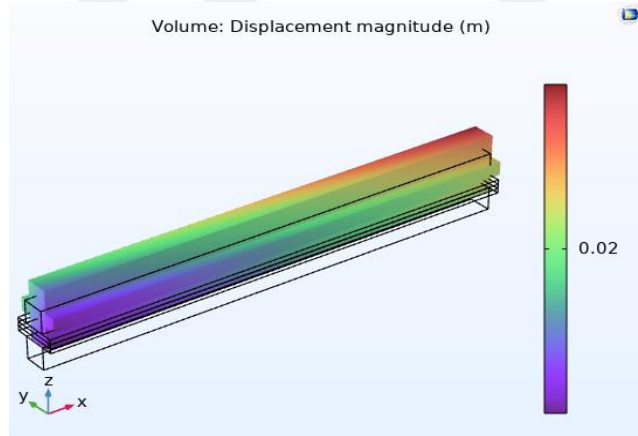
Şekil 6.22. Platinyum kaplamalı von Mises gerilmesi detay görünümü



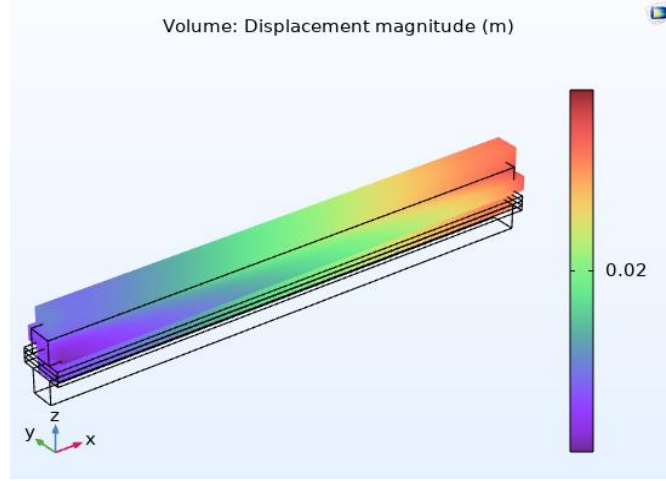
Şekil 6.23. Paladyum kaplamalı von Mises gerilmesi detay görünümü

İnce film kaplamasız, platinyum ve paladyum kaplamalı yüzeylerde maksimum yer değiştirme büyüklüğü yaklaşık 0,02 m seviyesinde kalmaktadır. Kaplamasız durumda deformasyon uç bölgelerde yoğunlaşırken, sabitlenmiş alanlarda minimum düzeyde kalmakta ve deformasyon doğrusal bir dağılım göstermektedir. Platinyum ve paladyum kaplamalı yüzeylerde ise deformasyonun dağılımı daha dengeli olup, özellikle platinyum kaplama yüzey sertliğini artırarak belirli bölgelerde yer değiştirmeyi azaltmış olabilir. Her iki kaplama, elastik davranışı etkileyerek deformasyon yönünü ve yayılımını değiştirmiştir ancak maksimum yer değiştirme açısından anlamlı bir fark oluşturmamaktadır (Şekil 6.24, 6.25 ve 6.26).

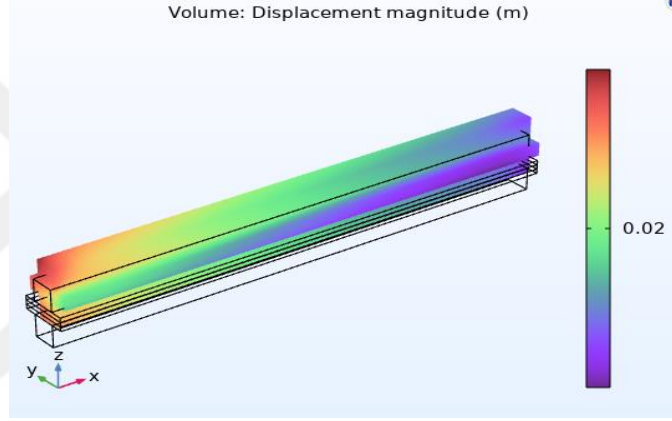
Kaplamasız yüzeyde deformasyon uç noktalarda yoğunlaşırken, platinyum ve paladyum kaplamalar deformasyonu daha dengeli bir şekilde dağıtarak yüzeyde mekanik dayanımı artırmaktadır. Ancak maksimum yer değiştirme miktarının değişmemesi, bu kaplamaların esasen yalnızca yüzey özelliklerini etkilediğini ve ana yapının genel mekanik davranışında belirgin bir değişiklik yaratmadığını göstermektedir. Sonuç olarak, kaplamalar deformasyon dağılımında avantaj sağlamasına rağmen yer değiştirme büyüklüğünde fark yaratmamaktadır.



Şekil 6.24. İnce film kaplamasız yer değiştirme büyüklüğü



Şekil 6.25. *Platinyum kaplamalı yüzeyde yer değiştirme büyüklüğü*



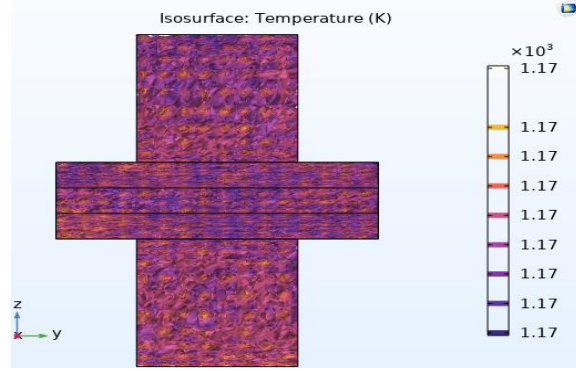
Şekil 6.26. *Paladyum kaplamalı yüzeyde yer değiştirme büyüklüğü*

Dopingsiz ve kaplamasız yüzeyde sıcaklık değeri yaklaşık $1,17 \times 10^3$ K seviyesindedir. Sıcaklık dağılımının oldukça düzensiz olduğu ve malzeme içinde sıcaklık farklılıklarının belirgin olduğu görülmektedir (Şekil 6.27). Bu düzensiz dağılım, ısı iletkenliğinin düşük olduğunu ve sıcaklığın malzeme içinde homojen dağılmadığını göstermektedir.

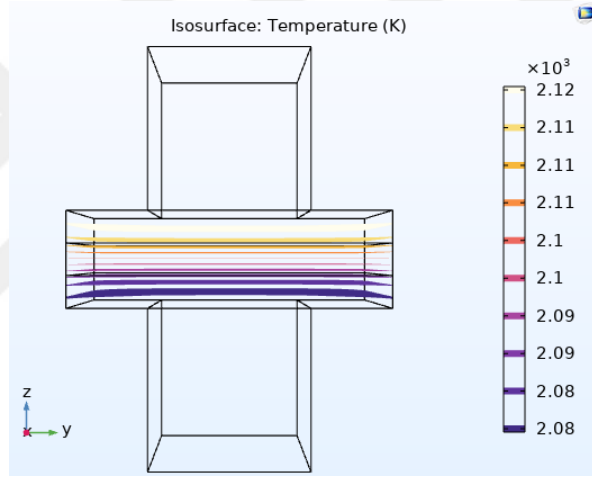
Platinyum ve paladyum kaplamalı yüzeylerde sıcaklık değerleri $2,08 \times 10^3$ K ile $2,12 \times 10^3$ K arasında değişmekte olup, kaplamasız yüzeye kıyasla daha yüksek seviyelerdedir. Her iki kaplama da sıcaklık dağılımını düzenleyerek termal iletkenliği artırmakta ve homojen bir ısı yayılımı sağlamaktadır. Bu sayede lokal aşırı ısınma bölgeleri azalmakta, dolayısıyla termal gerilmeler düşmekte ve malzemenin ömrü uzayabilmektedir. Platinyum ve paladyum kaplamaların benzer sonuçlar vermesi, her iki malzemenin yüzey termal yönetiminde etkili olduğunu göstermektedir (Şekil 6.28, 6.29).

Kaplamasız yüzey, düşük sıcaklıkta çalışsa da düzensiz ısı dağılımı nedeniyle termal streslere ve yapısal bozulmalara neden olabilir. Kaplamalı yüzeyler, termal

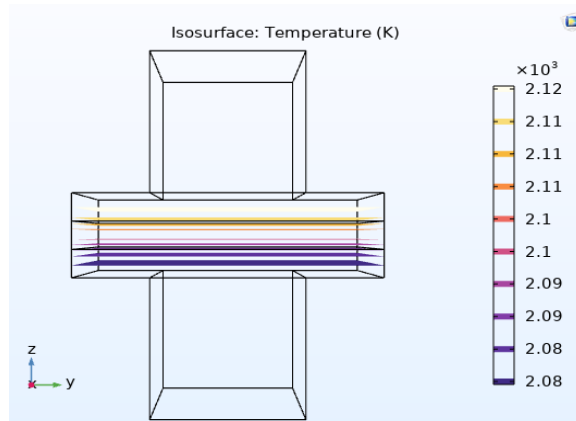
iletkenliđi artırarak sıcaklık dađılımlarını homojen hale getirmiřtir, bu da ısıl gerilmeleri azaltarak malzemenin mekanik stabilitesini artırabilir.



řekil 6.27. Y-z düzleminde ince film kaplamasız yüzeyde sıcaklık dađılımları



řekil 6.28. Y-z düzleminde platinyum kaplamalı yüzeyde sıcaklık dađılımları

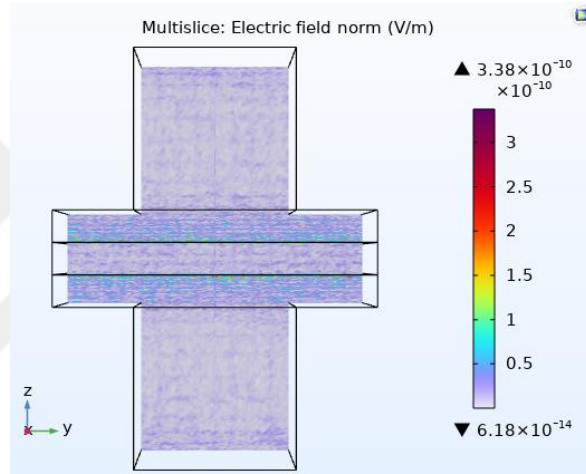


řekil 6.29. Y-z düzleminde paladyum kaplamalı yüzeyde sıcaklık dađılımları

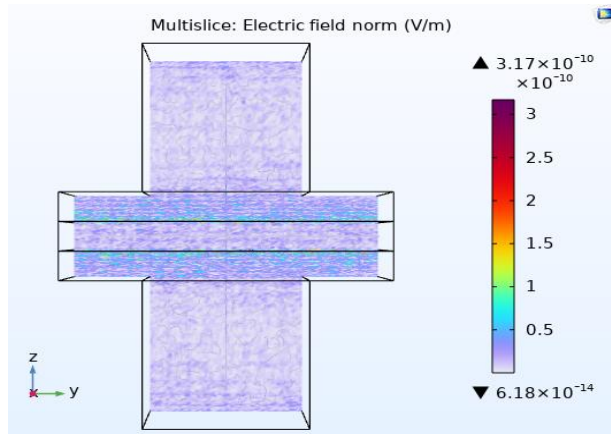
Kaplamasız yüzeyde elektrik alan normu $6,18 \times 10^{-14}$ V/m ile $3,38 \times 10^{-10}$ V/m arasında deđiřmektedir. řekil 6.30’da gözlemlendiđi gibi elektrik alanın düzensiz dađıldığı ve yüzey boyunca düşük yoğunlukta kaldığı görölmektedir. Elektrik alanın

belirli bölgelerde daha yoğun olması, malzeme yüzeyinde farklı elektriksel özelliklere sahip bölgelerin olduğunu ve bu durumun yük birikimine yol açabileceğini göstermektedir.

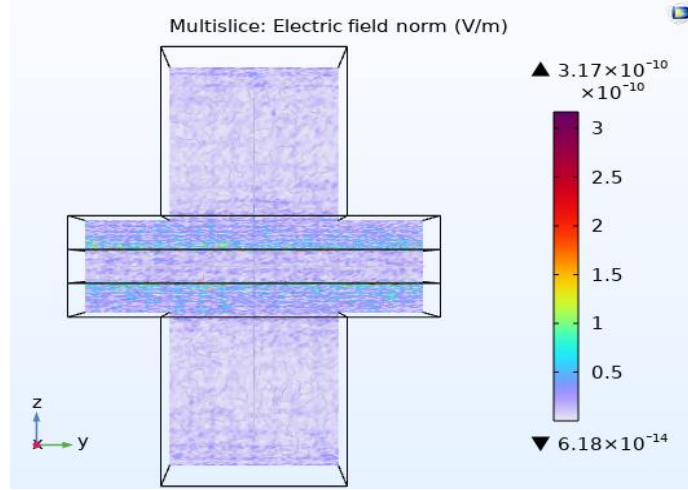
Platinyum ve paladyum kaplamalı yüzeylerde maksimum elektrik alan değeri $3,17 \times 10^{-10}$ V/m seviyesine düşmüş olup, her iki durumda da elektrik alan dağılımı kaplamasız yüzeye kıyasla daha homojen hale gelmiştir (Şekil 6.31, 6.32). Bu düzenli dağılım, kaplamaların yüksek elektriksel iletkenlikleri sayesinde yüzeydeki yük yoğunlaşmalarını azaltarak elektrik alanı dengelediğini ve iletkenlik açısından etkili olduklarını göstermektedir.



Şekil 6.30. Dopingsiz ve kaplamasız yüzeyde elektrik alan normu



Şekil 6.31. Platinyum kaplamalı yüzeyde elektrik alan normu



Şekil 6.32. *Paladyum kaplamalı yüzeyde elektrik alan normu*

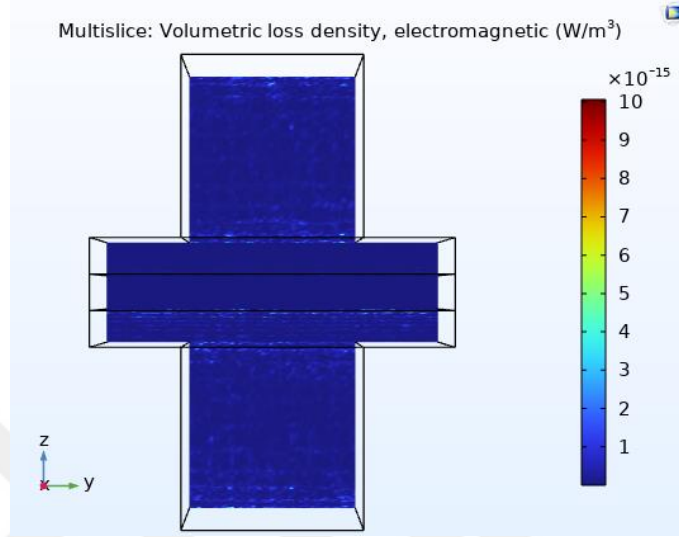
Kaplamasız yüzeyde, elektrik alanın düzensiz dağılımı yüzeyde yük birikimi ve bozulmalara neden olabilir, bu durum elektriksel güvenilirliği düşürebilir. Platinyum ve paladyum kaplamalar, elektrik alanı düzenleyerek yüzeyin elektriksel kararlılığını artırmıştır. Bunun sonucu olarak malzemenin daha iyi bir performans göstermesini sağlayabilir (Tablo 6.4).

Tablo 6.4. *Elektrik alan aralığı dağılımlarının karşılaştırılması*

Yüzey Türü	Elektrik Alan Aralığı (V/m)	Elektrik Alan Dağılımı	Elektriksel Performans
Kaplamasız Yüzey	$6,18 \times 10^{-14} - 3,38 \times 10^{-10}$	Düzensiz	Düşük
Platinyum Kaplamalı	$6,18 \times 10^{-14} - 3,17 \times 10^{-10}$	Daha homojen	Yüksek
Paladyum Kaplamalı	$6,18 \times 10^{-14} - 3,17 \times 10^{-10}$	Daha homojen	Yüksek

Kaplamasız, platinyum kaplamalı ve paladyum kaplamalı yüzeylerde elektromanyetik kayıp yoğunluğu $1 \times 10^{-15} \text{ W/m}^3$ ile $10 \times 10^{-15} \text{ W/m}^3$ arasında değişmektedir (Şekil 6.33). Kaplamasız yüzeyde elektromanyetik kayıpların belirli bölgelerde yoğunlaştığı ve yüzey boyunca homojen olmayan bir dağılım sergilediği görülmüştür. Bu durum, malzeme içindeki elektriksel iletkenlik farklılıkları veya zayıf elektromanyetik soğurma yeteneğinden kaynaklanabilir. Platinyum ve paladyum kaplamalı yüzeylerde maksimum kayıp yoğunluğu aynı seviyede kalmasına rağmen, dağılım daha homojen hale gelmiştir. Özellikle platinyumun yüksek elektriksel iletkenliği sayesinde elektromanyetik kayıplar daha kontrollü yayılmış, böylece daha iyi elektromanyetik ekranlama sağlanmıştır. Benzer şekilde, paladyum kaplama da yüzey boyunca eşit kayıp dağılımı ile elektromanyetik koruma performansını artırmıştır. Genel

olarak, platinyum ve paladyum kaplamalar, kaplamasız yüzeye göre elektromanyetik kayıpların daha dengeli dağılmasını sağlayarak enerji verimliliğini artırmakta ve potansiyel termal sorunları azaltmaktadır.



Şekil 6.33. Platinyum kaplamalı yüzeyde hacimsel yoğunluk kaybı

Kaplamasız yüzeyde enerji dengesi $2,9396 \times 10^{-12}$ W olarak hesaplanmıştır. Toplam net enerji oranı $2,8736 \times 10^{-12}$ W seviyesindedir ve toplam ısı kaynağı $-6,6001 \times 10^{-14}$ W olarak hesaplanmıştır. Bu durumda, enerji dengesi oldukça küçük bir değere sahiptir. Bunun sonucu olarak sistemin neredeyse kararlı bir enerji dağılımına sahip olduğunu gösterir. Isı kaynağı değeri negatif olduğu için sistemde çok düşük seviyede enerji kaybı söz konusudur. Kaplamasız yüzey, enerji kaybı açısından verimli olsa da düşük enerji transferi nedeniyle termal performansı zayıf olabilir.

Platinyum kaplamalı yüzeyde enerji dengesi $-0,18220$ W olarak hesaplanmıştır. Toplam net enerji oranı $0,042924$ W olup, toplam ısı kaynağı $0,22512$ W seviyesindedir. Bu durumda, enerji dengesi negatif bir değer gösterdiğinden dolayı sistemde enerji kaybı söz konusudur. Toplam ısı kaynağı artmıştır, bu durum sistemin daha fazla enerji iletimine sahip olduğunu gösterir. Platinyum kaplamanın yüzeydeki ısı transferini artırdığı ve bu nedenle enerji kayıplarının kontrollü bir şekilde dağıldığı görülmektedir.

Paladyum kaplamalı yüzeyde enerji dengesi $-0,18270$ W olarak hesaplanmıştır. Toplam net enerji oranı $0,040346$ W olup, toplam ısı kaynağı $0,22305$ W seviyesindedir. Bu durumda, enerji dengesi platinyum kaplamaya çok yakın bir seviyededir. Isı kaynağı miktarı platinyum kaplamaya oldukça benzerdir, ancak çok az bir farkla daha düşük

olduğu görülmektedir. Paladyum kaplama, enerji iletimi açısından platinyum kaplamaya benzer bir performans göstermiştir (Tablo 6.5).

Tablo 6.5. Enerji dengesi karşılaştırılması

Yüzey Tipi	Enerji Dengesi (W)	Toplam Biriken Enerji Oranı (W)	Toplam Net Enerji Oranı (W)	Toplam İş Kaynağı (W)	Toplam Isı Kaynağı (W)
Kaplamasız	$2,9396e^{-12}$	0.0	$2,8736e^{-12}$	0.0	$-6,6001e^{-14}$
Platinyum Kaplamalı	-0,1822	0.0	0,042924	0.0	0,22512
Paladyum Kaplamalı	-0,1827	0.0	0,040346	0.0	0,22305

Sonuç olarak, ince film kaplama kararını verirken bütün değerlendirme kriterleri göz önüne alınmıştır. Kaplamasız yüzey, mekanik, termal ve elektriksel performans açısından en düşük seviyede olduğundan özellikle gerilme dağılımındaki düzensizlik ve düşük ısı transferi nedeniyle yorulma ve kırılma riskini artırmaktadır. İnce film kaplamalar, Von Mises gerilmesini artırarak mekanik dayanımı yükseltirken, gerilme dağılımını daha homojen hale getirmiştir. Ancak, maksimum gerilme seviyesinin yükselmesinden dolayı malzemenin kırılabilirliğini artırabilir. Yer değiştirme büyüklüğü açısından kaplamaların belirgin bir etkisi olmamakla birlikte, deformasyonun daha homojen yayılması sayesinde mekanik stabilitenin arttığı gözlemlenmiştir.

Termal performans açısından, kaplamasız yüzeyin sıcaklık dağılımı düzensizdir. Lokal aşırı ısınma bölgeleri oluştururken, platinyum ve paladyum kaplamalar sıcaklık dağılımını homojen hale getirerek termal stresleri azaltmıştır. Bu durum, kaplamaların ısı transferini iyileştirdiğini ve malzemenin daha uzun ömürlü olmasına katkı sağladığını göstermektedir. Elektrik alan dağılımında da benzer şekilde, kaplamasız yüzeyde yük birikimi ve düzensizlikler gözlemlenir, kaplamalar yüzeyin elektriksel kararlılığını artırmış ve daha dengeli bir alan dağılımı sağlamıştır. Elektromanyetik kayıp yoğunluğu açısından, kaplamasız yüzeyde kayıpların belirli noktalarda yoğunlaştığı görülmüş, ancak platinyum ve paladyum kaplamalar bu kayıpların homojen yayılmasını sağlayarak elektromanyetik korumayı artırmıştır.

Enerji dengesi açısından değerlendirildiğinde, platinyum kaplamanın toplam ısı kaynağının 0,22512 W, net enerji oranının ise 0,042924 W seviyesinde olduğu, paladyum kaplamanın ise sırasıyla 0,22305 W ve 0,040346 W değerlerine sahip olduğu gözlemlenmiştir. Bu küçük farklar göz önüne alındığında, platinyum kaplamanın çok az bir farkla daha yüksek enerji transferi sağladığı ve net enerji oranının biraz daha yüksek olduğu görülmektedir. Bu nedenle, maksimum performans hedeflendiğinde platinyum

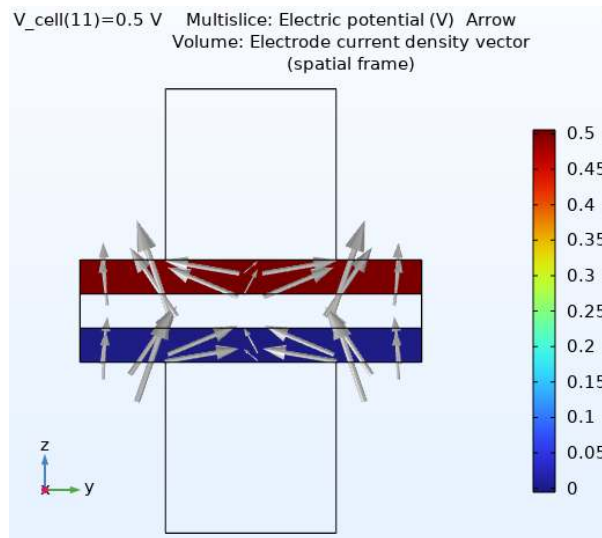
kaplama en ideal seçenek olarak öne çıkmaktadır. Sonuç olarak, maksimum verim ve performans için platinyum kaplama olacaktır.

6.3. Molibden ve Tungsten Dopinglerinin Uygulanması

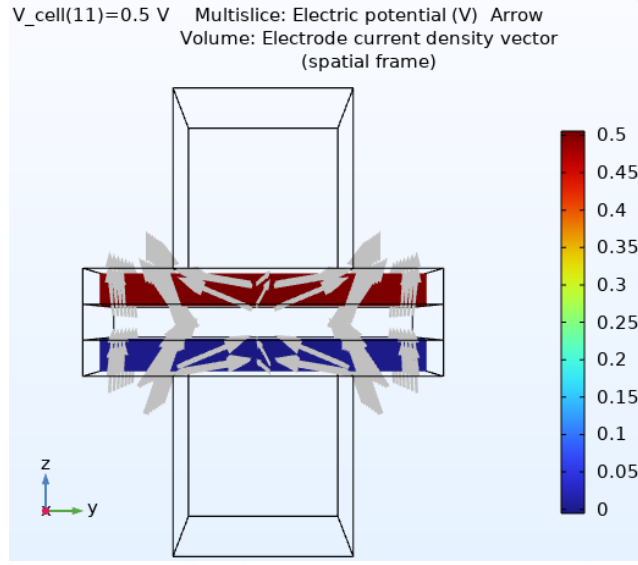
Bu bölümde 900 °C'deki ve platinyum kaplamada anot ve katot yüzeylerde verimliliği artırmak adına sırasıyla Molibden ve Tungsten dopingleri uygulanmıştır.

900 °C sıcaklıkta molibden (Mo) ve tungsten (W) ile doping uygulanmış elektrotların elektriksel potansiyel dağılımları ve elektrot akım yoğunluğu vektörleri, hücre gerilimi $V_{cell} = 0.5$ V sabitlenerek Şekil 6.34 ve 6.35'te verilmiştir. Her iki şekilde de potansiyel dağılımı renk skalasıyla, akım yoğunluğu vektörleri ise oklarla gösterilmektedir. Mo katkılı elektrotlarda üst katmanlar 0,35–0,5 V, alt katmanlar ise 0–0,15 V potansiyele sahiptir; bu belirgin fark, akım vektörlerinin merkezi bölgeye yönelmesine neden olmaktadır. W katkılı elektrotlarda ise benzer potansiyel aralığı görülmekle birlikte, renk geçişleri daha net ve vektörler merkezde daha yoğunlaşmış şekilde gözlemlenmiştir. Bu durum, W'un yüksek sıcaklıktaki elektro-kimyasal stabilitesi sayesinde daha etkin ve yönlendirilmiş bir akım iletimi sunduğunu göstermektedir. Ayrıca W dopinginde vektörlerin daha kısa ve belirgin oluşu, daha düşük dirençli bir iletkenlik yapısı sunduğunu işaret etmektedir.

Sonuç olarak hem Mo hem W katkıları elektrot performansını iyileştirirken, W katkısı daha homojen ve kontrollü bir elektriksel dağılım sağlayarak 900 °C'de daha stabil ve verimli bir performans sergilemektedir.



Şekil 6.34. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış elektrot potansiyeli

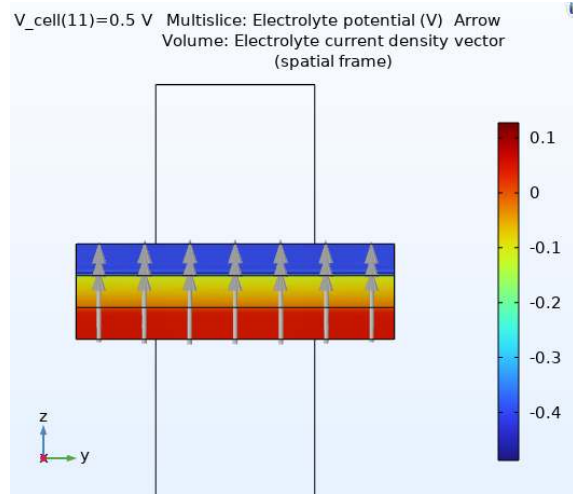


Şekil 6.35. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış elektrot potansiyeli

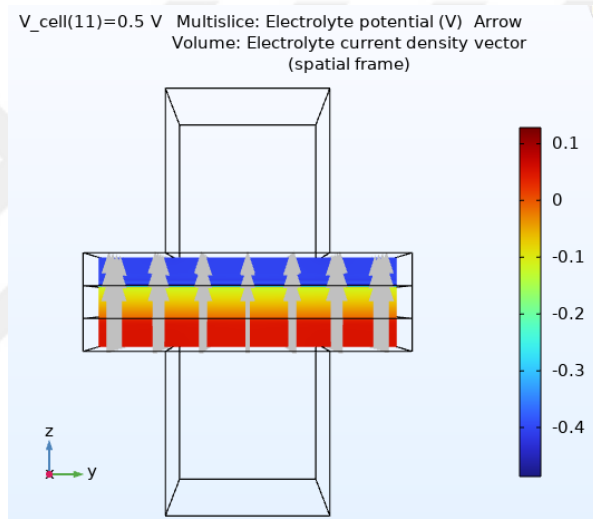
Şekil 6.36 ve 6.37'de 900 °C sıcaklıkta Mo ve W ile doping uygulanmış elektrolit bölgelerindeki potansiyel dağılım ve buna bağlı akım yoğunluğu vektörleri gösterilmektedir. Her iki durumda hücre gerilimi $V_{\text{cell}} = 0,5 \text{ V}$ sabit tutulmuştur. Renk skalası, potansiyelin -0,4 V (koyu mavi) ile +0,1 V (kırmızı) arasında değiştiğini ve vektörler potansiyel gradyanına bağlı iyon yönelimlerini yansıtmaktadır.

Mo katkılı elektrolitte, potansiyel -0,4 V'den başlayarak +0,1 V'ye kadar düzenli bir geçiş göstermektedir. Bu durum iyon hareketinin yukarı yönlü ve dengeli olduğunu, dolayısıyla homojen bir iletkenlik sağlandığını ortaya koymaktadır. W katkısında ise benzer potansiyel aralığı korunmakla birlikte renk geçişleri daha net, katmanlı yapı daha belirgindir. Bu durum, elektriksel potansiyelin daha kısa mesafelerde yoğunlaştığını ve iyon geçişinin daha hızlı gerçekleşebileceğini düşündürmektedir.

Her iki katkı da negatiften pozitif potansiyel geçişiyle iyonik iletimi desteklemektedir; ancak W katkısı, daha dik gradyan oluşturarak iyon hareketliliğini artırmakta ve elektrolit içi iletkenliği daha verimli hale getirmektedir. Sonuç olarak, 900 °C'de tungsten katkısı, daha yönlendirilmiş ve keskin potansiyel dağılımı ile elektrolit performansına olumlu katkı sağlamaktadır.



Şekil 6.36. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış elektrolit potansiyeli

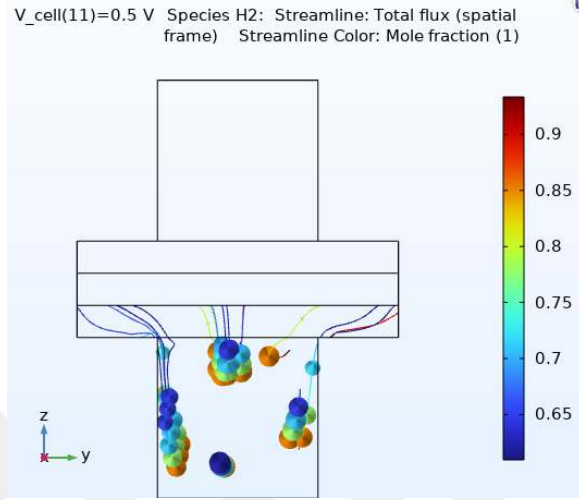


Şekil 6.37. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış elektrolit potansiyeli

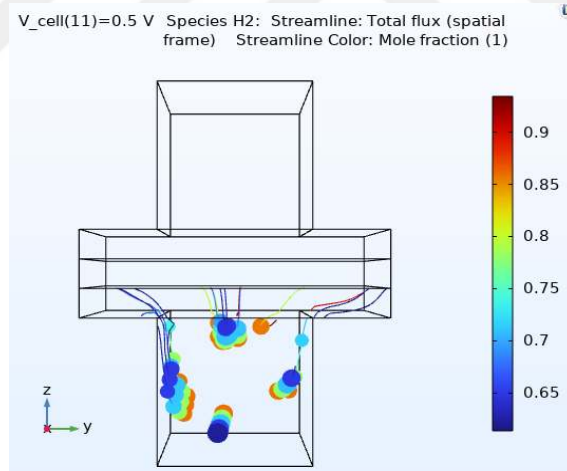
900 °C'de Mo ve W dopingi uygulanmış modellerde hidrojen (H_2) türünün toplam akış çizgileri ile mol fraksiyon dağılımları Şekil 6.38 ve 6.39'da verilmiştir. Her iki durumda da hücre gerilimi $V_{cell} = 0,5$ V sabitlenmiştir. H_2 mol fraksiyonu 0,65 (koyu mavi) ile 0,95 (kırmızı) aralığında gösterilmiştir.

Mo katkılı yapıda (Şekil 6.38), H_2 akışı düzensiz ve yer yer kümelenmiş olup, mol fraksiyonu 0,65–0,95 aralığında dağılmıştır. Bu durum, Mo'nun H_2 difüzyonuna sınırlı katkı sunduğunu, taşıyıcı akının bazı bölgelerde yoğunlaşarak yerel tıkanmalara yol açabileceğini göstermektedir. W katkılı modelde (Şekil 6.39) H_2 akış çizgileri düzenli ve yönlendirilmiş bir profile sahiptir, mol fraksiyonları daha yüksek değerlere yakın ve homojen şekilde yayılmıştır. Bu yapı, W katkısının yüksek sıcaklıkta gaz difüzyon yollarını stabilize ederek H_2 taşınımını daha verimli hale getirdiğini ortaya koymaktadır.

Sonuç olarak, 900 °C'de yapılan değerlendirmede tungsten katkılı yapı, H₂ geçişinde daha dengeli ve yönlü bir akış sunmakta; yüksek ve homojen mol fraksiyonlarıyla yakıt elektrodu tarafında elektrokimyasal reaksiyonları destekleyerek difüzyon açısından üstün performans sağlamaktadır.



Şekil 6.38. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış H₂ akış çizgisi



Şekil 6.39. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış H₂ akış çizgisi

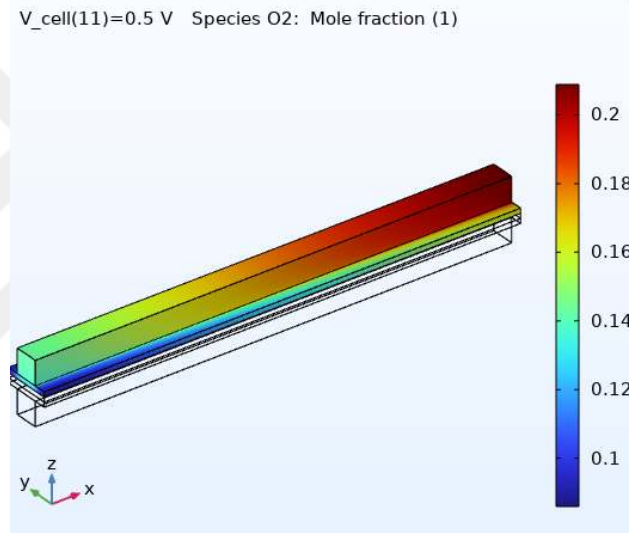
900 °C sıcaklıkta Mo ve W dopingi uygulanmış modellerde oksijen (O₂) mol fraksiyonunun mekânsal dağılımı Şekil 6.40 ve 6.41'de verilmiştir. Her iki durumda da hücre gerilimi sabit olup $V_{cell} = 0,5 \text{ V}$ 'tur ve O₂ mol fraksiyonunu 0,10 (koyu mavi) ile 0.20 (koyu kırmızı) arasında tanımlamaktadır.

Mo katkılı modelde (Şekil 6.40), O₂ mol fraksiyonu girişte 0,10–0,12 seviyelerinde başlamakta ve çıkışa doğru kademeli olarak 0,20'ye kadar artmaktadır. Bu homojen dağılım, Mo'nun oksijen taşınımını dengeli hale getirdiğini ve gaz difüzyonunun yüzey boyunca sürekli gerçekleştiğini göstermektedir. Renk geçişlerinin yatay düzlemde

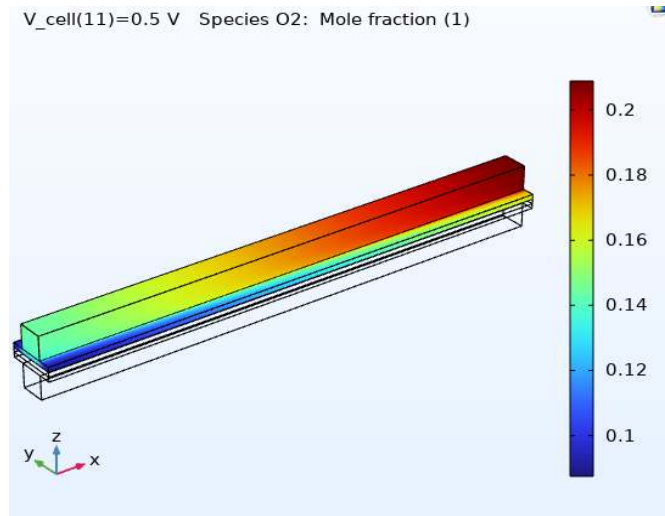
dengeli yayılması, oksijen tüketiminin daha yaygın ve kontrollü bir biçimde sürdüğüne işaret etmektedir.

W katkılı modelde (Şekil 6.41) benzer mol fraksiyon aralığı korunmakla birlikte, renk geçişleri daha keskin ve gradyan daha belirgindir. O_2 'nin orta bölgelerde hızlıca tüketildiği gözlenmiş, bu durum W'un oksijenle daha erken ve etkin reaksiyona girmesini sağladığını göstermektedir. Böylece oksijen, daha kısa mesafede daha yoğun şekilde kullanılmaktadır.

Sonuç olarak, her iki katkı da $900\text{ }^{\circ}\text{C}$ 'de oksijen taşınımını iyileştirse de Mo daha homojen ve kontrollü bir dağılım sunarken; W, daha agresif ve lokalize tüketimle elektrokimyasal aktiviteyi artırabilecek daha güçlü bir tüketim profili sağlamaktadır.



Şekil 6.40. $900\text{ }^{\circ}\text{C}$ 'deki Molibden dopingi uygulanmış O_2 mol fraksiyonu



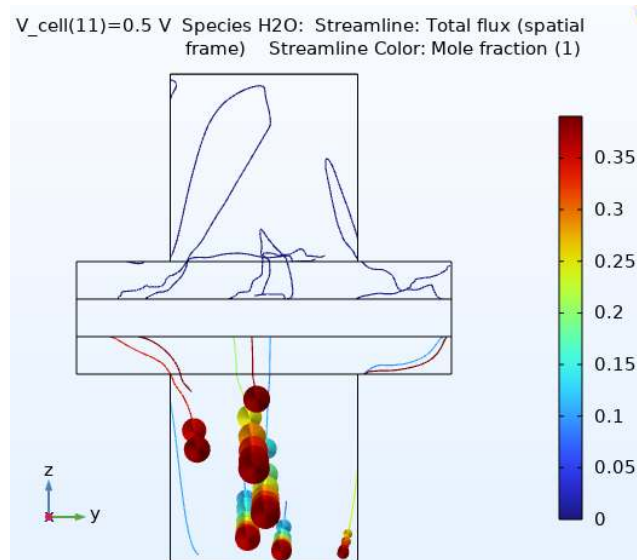
Şekil 6.41. $900\text{ }^{\circ}\text{C}$ 'deki Tungsten dopingi uygulanmış O_2 mol fraksiyonu

900 °C’de Mo ve W dopingi uygulanmış modellerde su buharı (H₂O) türünün toplam akış çizgileri ile mol fraksiyon dağılımı Şekil 6.42 ve 6.43’te verilmiştir. Her iki durumda da hücre gerilimi $V_{cell} = 0,5$ V sabit tutulmuş ve H₂O mol fraksiyonunu 0 (koyu mavi) ile 0,35 (koyu kırmızı) arasında tanımlamaktadır.

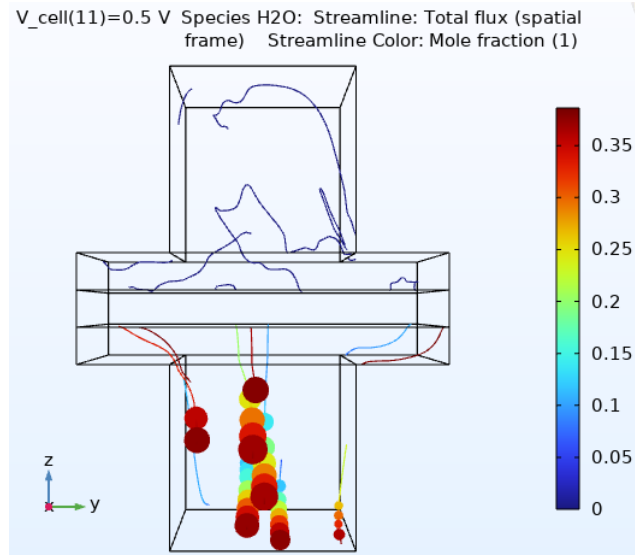
Mo katkılı modelde (Şekil 6.42), H₂O akış çizgileri farklı yönlerde dağılmış ve özellikle alt bölgelerde 0,30–0,35 seviyelerinde yüksek yoğunluk gözlenmiştir. Bu durum, Mo’nun su buharı oluşumunu artırdığı ya da çıkışını geciktirdiğini; üst bölgelerdeki dalgalı akış çizgilerinin ise difüzyon yollarının karmaşıklaştığını göstermektedir.

W katkılı modelde (Şekil 6.43), H₂O akış çizgileri daha doğrusal ve yönlendirilmiş olup, mol fraksiyonu yine 0,30–0,35 seviyelerine ulaşmakla birlikte daha düzenli bir dağılım göstermektedir. Bu durum, W katkısının reaksiyon ürünlerinin dışarıya daha hızlı ve etkili şekilde taşınmasını sağladığını, dolayısıyla difüzyon yolunun daha kısa ve verimli olduğunu ortaya koymaktadır.

Sonuç olarak, her iki katkı da benzer H₂O mol fraksiyon seviyelerine ulaşmakta; ancak tungsten katkısı, buhar taşınımında daha yönlü ve kontrol edilebilir bir yapı sunarak sistem verimliliğini artırmakta, gaz ürün çıkışını optimize ederek su buharının tahliyesini daha etkin hâle getirmektedir.



Şekil 6.42. 900 °C’deki Molibden dopingi uygulanmış H₂O akış çizgileri



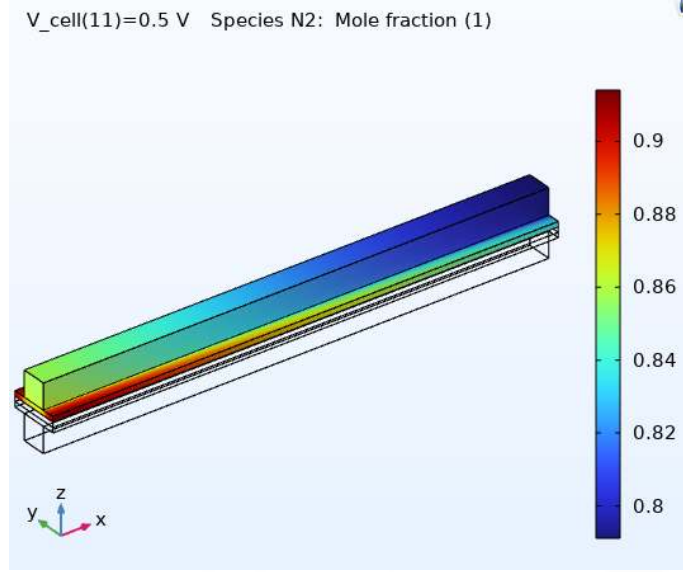
Şekil 6.43. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış H_2O akış çizgileri

900 °C'de Mo ve W dopingi uygulanmış modellerde azot (N_2) türünün mol fraksiyonu dağılımı Şekil 6.44 ve 6.45'te gösterilmiştir. Her iki modelde hücre gerilimi $V_{cell} = 0,5$ V olarak sabitlenmiştir. N_2 mol fraksiyonunu 0,80 (koyu mavi) ile 0,90 (koyu kırmızı) arasında temsil etmektedir. Bu analiz, özellikle hava elektrodu kanalındaki N_2 gazının taşınım karakteristiğini değerlendirmek açısından önemlidir.

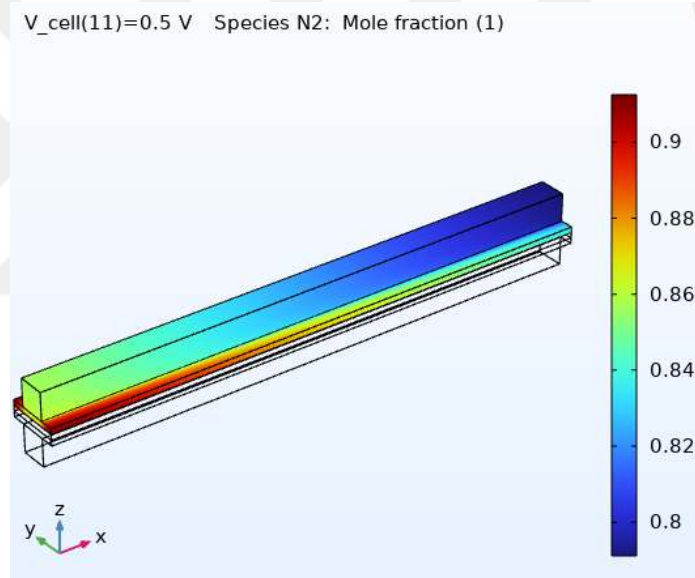
Mo katkılı yapıda (Şekil 6.44), N_2 mol fraksiyonu girişte yaklaşık 0,80–0,84 aralığında başlayıp çıkışa doğru kademeli artarak 0,90'a ulaşmakta; renk geçişleri (yeşil, sarı, kırmızı) dengeli bir yayılım göstermektedir. Bu, Mo'nun azotun hücre boyunca homojen dağılmasına katkı sunduğunu, ancak difüzyon hızının görece düşük olabileceğini düşündürmektedir.

W katkılı modelde (Şekil 6.45) ise benzer mol fraksiyon aralığı korunmakla birlikte (0,80–0,91), renk gradyanı daha belirgin ve geçişler daha keskindir. Bu durum, N_2 'nin daha kısa sürede daha yüksek konsantrasyonlara ulaştığını ve gazın hücre içinde daha yönlü ve hızlı yayıldığını göstermektedir. W katkısı, gaz geçirgenliği üzerinde daha etkili olup difüzyon yollarını hızlandırmaktadır.

Sonuç olarak, her iki katkı maddesi de benzer maksimum mol fraksiyon değerlerine ulaşırsa da tungsten dopingi, N_2 taşınımında daha hızlı ve yönlendirilmiş bir dağılım sağlayarak yüksek sıcaklıkta hava elektrodu tarafındaki gaz transfer verimliliğini artırmakta ve hücre performansını olumlu yönde etkilemektedir.



Şekil 6.44. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış N_2 mol fraksiyonu



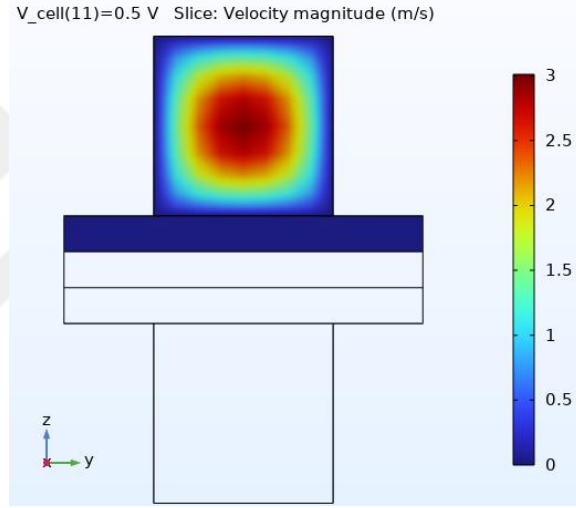
Şekil 6.45. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış N_2 mol fraksiyonu

900 °C'de Mo ve W dopingi uygulanmış modellerde katot bölgesindeki hız büyüklüğü dağılımı Şekil 6.46 ve 6.47'de verilmiştir; her iki modelde hücre gerilimi $V_{cell} = 0,5$ V sabit tutulmuş, hız değerleri ise 0 m/s (koyu mavi) ile 3 m/s (koyu kırmızı) arasında değişmektedir.

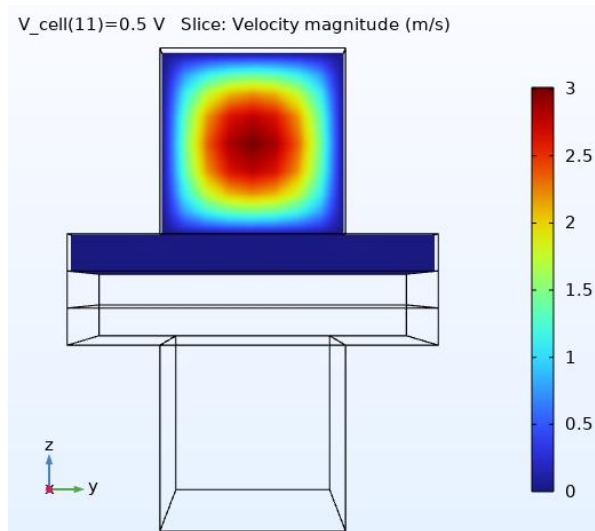
Mo katkılı modelde (Şekil 6.46), gaz akışı katot kanalının merkezinde simetrik olarak yoğunlaşmakta, yaklaşık 3 m/s'ye ulaşmakta ve dışa doğru dairesel, yumuşak geçişli bir hız gradyanı sergilemektedir; bu yapı, Mo'nun laminar ve dengeli bir akış oluşturarak türbülansı azalttığını ve gaz taşıma verimliliğini artırdığını göstermektedir.

W katkılı modelde (Şekil 6.47), merkezde 3 m/s'ye ulaşan benzer hız değerleri gözlenmekle birlikte, dağılım daha net sınırlanmış, yüzeye yakın ve yönlendirilmiş bir yapıda gerçekleşmektedir. Bu durum, W'un gaz akışını daha dar profilde yoğunlaştırarak kanal sınırlarıyla güçlü etkileşim sağladığını göstermektedir.

Sonuç olarak, her iki katkı maddesi de oksijen taşınımında etkili olurken; Mo katkısı daha yaygın ve homojen bir akış profili sunarak kararlı bir taşıma ortamı oluştururken, W katkısı daha yoğun ve yönlü bir akış ile sınır tabakalarda etkili olur. Ancak yüksek sıcaklıkta gazın tüm aktif yüzeylere dengeli ulaşması açısından Mo katkılı yapı, daha verimli ve uygun bir difüzyon ortamı sağlayarak sistem genelinde stabil performans açısından daha avantajlıdır.



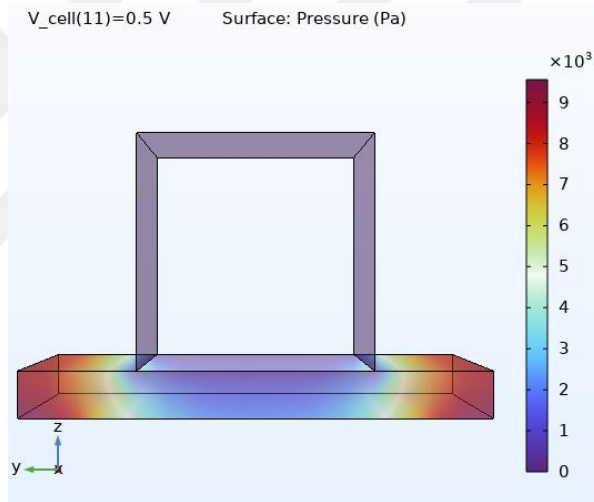
Şekil 6.46. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış hız büyüklüğü (katot)



Şekil 6.47. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış hız büyüklüğü (katot)

Molibden ve tungsten dopingleri modellerde maksimum basınç seviyeleri yaklaşık 9×10^3 Pa olup, bu değer her iki durumda da benzerlik göstermektedir. Mo katkılı yapıda basınç dağılımı homojen olmayan bir geçiş sergilemekte ve özellikle yakıt kanalına yakın bölgelerde yoğunlaşarak oksijen taşınımını artırmaktadır. Bu durum reaksiyon bölgesindeki gaz akışkanlığını etkileyerek verimliliği yükseltebileceğini göstermektedir. W katkılı modelde ise basınç dağılımı daha dengeli ve reaksiyon bölgesinde dalgalanma daha azdır, sistem stabilitesine olumlu katkı sunduğu görülmektedir (Şekil 6.48).

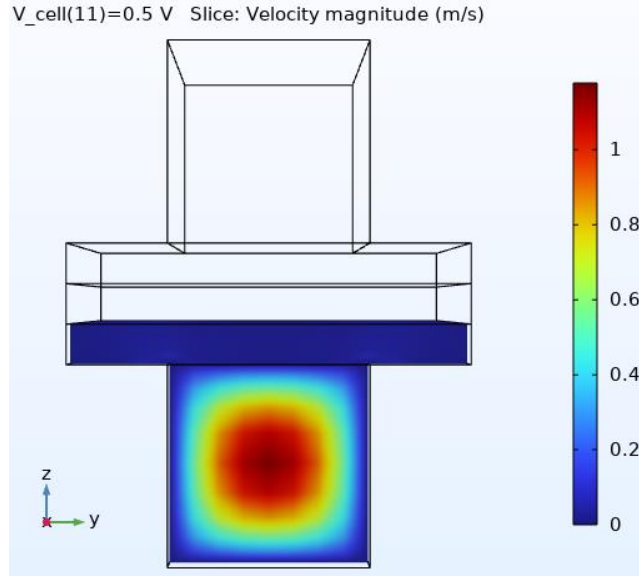
Sonuç olarak, Mo daha yüksek reaksiyon hızı ve taşınım için uygunken, W daha kararlı ve dengeli gaz yönetimi sağlayarak uzun vadeli stabilite açısından avantaj sunmakta; dolayısıyla optimal tasarımlarda bu iki katkının özellikleri uygulama ihtiyacına göre birlikte değerlendirilebilir.



Şekil 6.48. 900 °C'deki molibden dopingi uygulanmış basınç (katot)

Molibden ve tungsten dopingli anotlarda zirve hız büyüklüğü sırasıyla yaklaşık $1,0 \times 10^{-4}$ m/s ve $0,8 \times 10^{-4}$ m/s olup, bu değerler Mo'nun daha yüksek bir akış hızına sahip olduğunu Şekil 6.49'da gösterilmektedir. Mo katkılı modelde hız dağılımı akım çizgisi boyunca tutarlı, merkez bölgede gradyanlar minimal ve akış dengelidir; bu da daha iyi kütle taşınımı ve düşük akış direnci anlamına gelmektedir. W katkılı modelde ise hız değerleri daha düşük, dağılım düzensiz ve bazı bölgelerde sıvı akışına karşı yerel direnç gözlemlenmiştir.

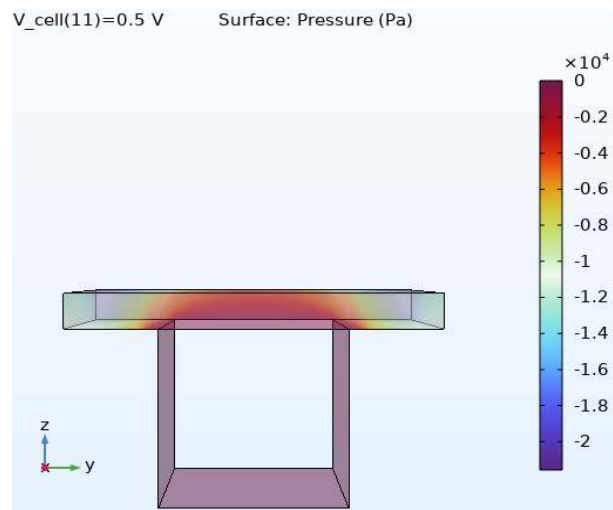
Sonuç olarak, Mo katkılı anot, homojen ve yüksek hızlı akış profili ile yakıt hücresinin verimli çalışması açısından daha uygun bir yapı sunmakta; bu nedenle akış dinamikleri bakımından W yerine Mo dopingi tercih edilmelidir.



Şekil 6.49. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış hız büyüklüğü (anot)

Molibden ve tungsten dopingli anot yüzeylerinde basınç dağılımı sırasıyla $-1,5 \times 10^4$ ile 0 Pa ve -2×10^4 ile 0 Pa arasında değişmekte olup, Mo katkısı daha dar aralıkta ve homojen bir dağılım sunarak daha stabil bir operasyonel ortam sağlamaktadır. Mo dopingli yapıda basınç daha dengeli yayılırken, bu homojenlik elektrot reaksiyonlarının etkinliğini artırmaktadır (Şekil 6.50). W dopinginde ise daha geniş basınç farkları oluşmakta ve bu durum, yerel dengesizlikler nedeniyle gaz akışı ve reaksiyon verimliliğini olumsuz etkileyebilmektedir.

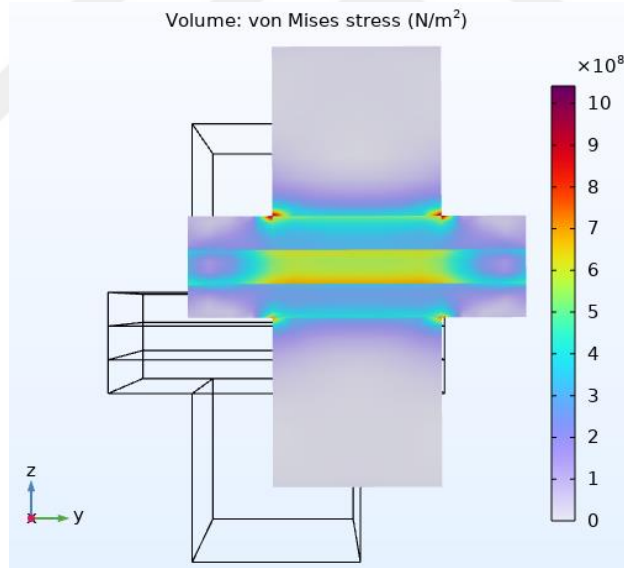
Sonuç olarak, düşük basınç değişimi ve kararlılık gerektiren uygulamalarda molibden daha avantajlı iken, tungsten'in sunduğu yüksek basınç farkları belirli ekstrem reaktif koşullar için tercih edilebilir.



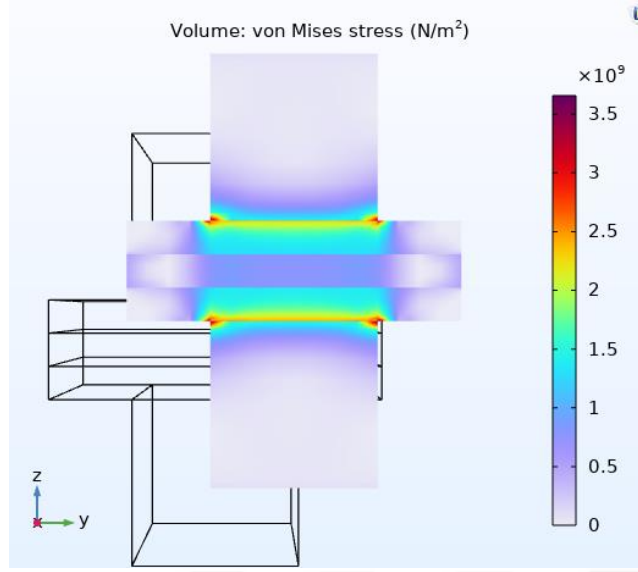
Şekil 6.50. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış basınç (anot)

900 °C sıcaklıkta Mo ve W dopingli modellerde hesaplanan Von Mises gerilmesi dağılımı Şekil 6.51 ve 6.52’de gösterilmiştir. Gerilme büyüklükleri Mo için $0-1,0 \times 10^9 \text{ N/m}^2$, W için ise $0-3,5 \times 10^9 \text{ N/m}^2$ aralığındadır. Mo katkılı yapıda maksimum gerilme $1,0 \times 10^9 \text{ N/m}^2$ seviyesindedir, stres özellikle elektrot-elektrolit geçiş bölgelerinde yoğunlaşmakla birlikte dengeli bir dağılım göstermektedir. Bu durum, yapıya termal koşullar altında esnek ama kontrollü bir dayanım kazandırmaktadır. W katkılı yapıda ise gerilme $3,5 \times 10^9 \text{ N/m}^2$ ’ye kadar çıkmakta, birleşim bölgelerinde yoğunlaşarak kırmızı tonlarla yüksek stres birikimini işaret etmektedir, böylece W’un yapıya daha sert bir karakter kazandırarak termal genleşmeye karşı daha az şekil değiştirmesi sonucu gerilmenin lokalize olmasına neden olduğunu göstermektedir.

Sonuç olarak, Mo dopingi daha yaygın ve düşük seviyeli bir gerilme profili sunarak uzun vadeli yapısal dayanım açısından daha dengeli bir yaklaşım sergilerken, W dopingi yüksek mukavemet gerektiren ancak dikkatli gerilme yönetimi isteyen uygulamalarda tercih edilmelidir.



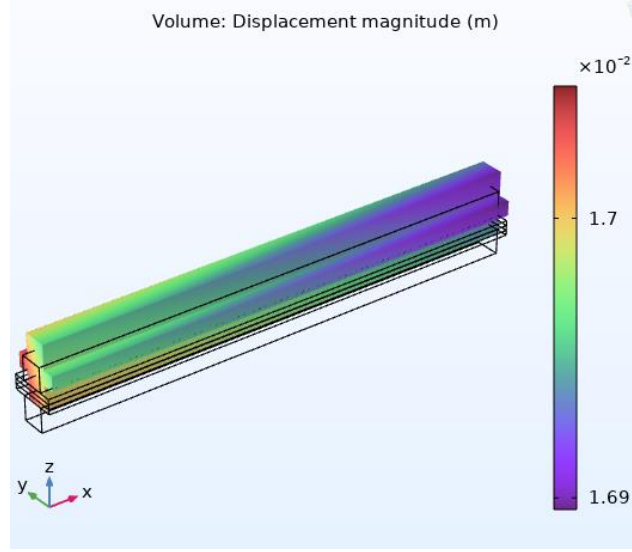
Şekil 6.51. 900 °C’deki Molibden dopingi uygulanmış von Mises gerilmesi



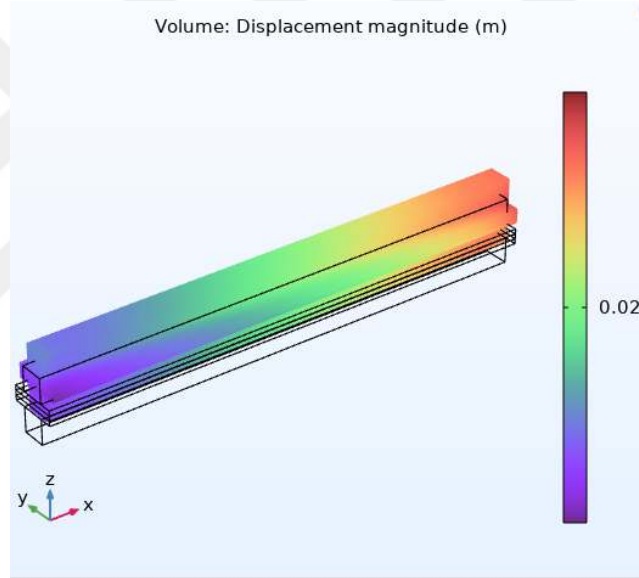
Şekil 6.52. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış von Mises gerilmesi

900 °C sıcaklıkta Mo ve W dopingi uygulanmış modellerdeki yer değiştirme büyüklüğü dağılımı Şekil 6.53 ve 6.54'te gösterilmiştir. Mo için maksimum yer değiştirme yaklaşık $1,69 \times 10^{-2}$ m, W için ise $2,0 \times 10^{-2}$ m seviyesine kadar çıkmaktadır. Mo katkılı yapıda yer değiştirme oldukça dar bir aralıkta ($1,69\text{--}1,70 \times 10^{-2}$ m) kalmakta ve geçişler düzgündür. Bu durum yapının termal genleşmeye karşı dengeli ve kararlı bir deformasyon tepkisi verdiğini göstermektedir. W katkılı modelde ise daha yüksek yer değiştirme değerleri ve geniş renk geçişleri gözlemlenmektedir, bu da yapının daha rijit olmasına rağmen yüksek sıcaklık altında daha fazla boyutsal değişime uğradığını ortaya koymaktadır.

Sonuç olarak, Mo dopingi düşük deformasyon ve daha kararlı bir termal davranış sağlarken; W dopingi yüksek rijitliğe karşın daha fazla termal genleşmeye neden olmaktadır. Bu fark katkı malzemesi seçimi yapılırken geometrik bütünlük ve uzun vadeli yapısal stabilite açısından dikkate alınmalıdır.



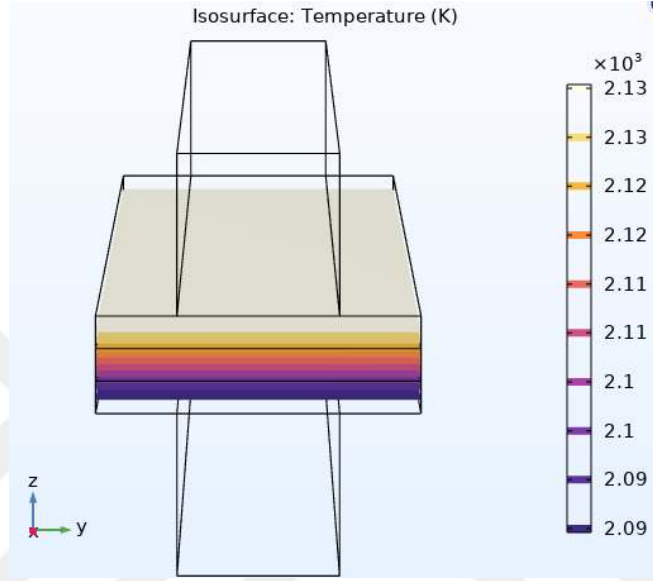
Şekil 6.53. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış yer değiştirme büyüklüğü



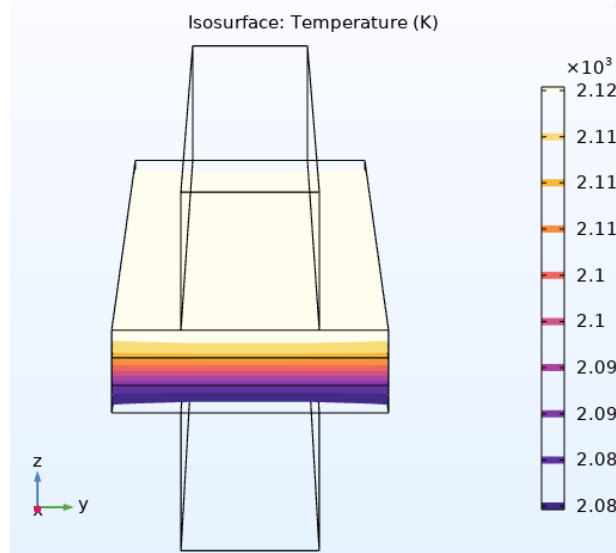
Şekil 6.54. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış yer değiştirme büyüklüğü

900 °C çalışma sıcaklığında Mo ve W dopingi uygulanmış modellerdeki izoyüzey sıcaklık dağılımı Şekil 6.55 ve 6.56'da gösterilmiştir. Sıcaklık değerleri Mo için 2090–2130 K, W için ise 2080–2120 K aralığındadır. Mo katkılı modelde (Şekil 6.55), maksimum sıcaklık ~2130 K'ye ulaşmaktadır ve renk geçişleri yumuşak gradyanla katmanlar arasında dengeli ilerlemektedir. Bu durum ısı akışının yapı içinde homojen gerçekleştiğini ve Mo'nun dengeli termal iletim sağladığını göstermektedir. W katkılı modelde (Şekil 6.56) ise daha dar sıcaklık aralığı ve keskin renk geçişleri gözlenmektedir. Böylece, W'un yüzeyde ısıyı etkin tutarken iç bölgelere daha sınırlı iletim sağladığını ve yapıda lokal ısı birikimi oluşturabileceğini ortaya koymaktadır.

Sonuç olarak, Mo katkısı yüksek sıcaklık ve yayılmış, homojen termal dağılımla daha dengeli bir ısı yönetimi sunmuştur. W katkısı daha keskin ve sınırlı geçişlerle lokal ısı kontrolü gereken özel uygulamalar için avantaj sağlayabilir. Ancak genel sistem verimliliği, uzun vadeli termal denge ve yapısal kararlılık açısından değerlendirildiği zaman Mo dopingi daha verimli ve kullanışlı bir çözüm sunmaktadır.



Şekil 6.55. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış izoyüzey sıcaklık değeri

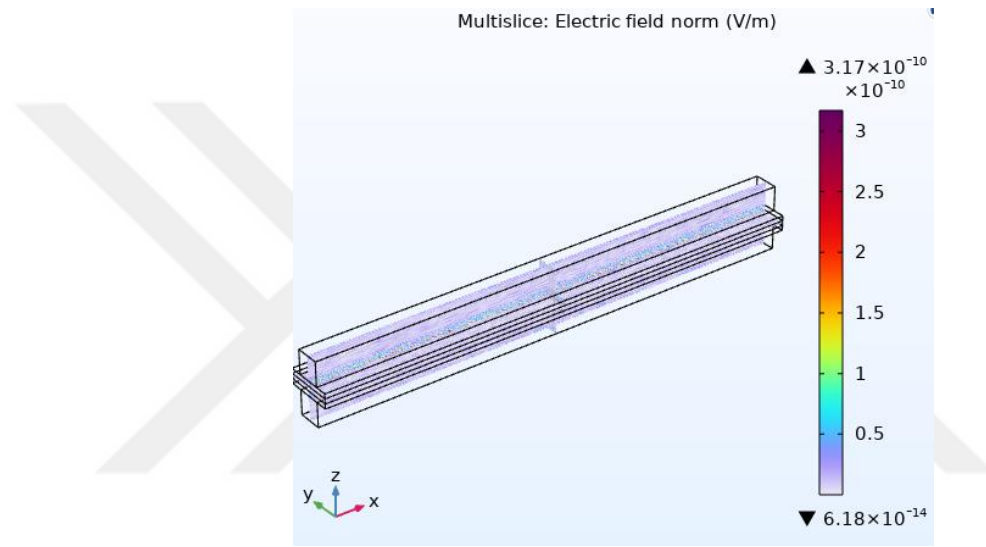


Şekil 6.56. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış izoyüzey sıcaklık değeri

900 °C çalışma sıcaklığında Mo dopingi uygulanmış modellerdeki elektrik alan normunun sonuçları (V/m) Şekil 6.57'de sunulmuştur; her iki dopingin elektrik alanı da yaklaşık $6,18 \times 10^{-14}$ ile $3,17 \times 10^{-10}$ V/m arasında değişmektedir. Mo katkılı modelde (Şekil 6.57), elektrik alan dağılımı daha geniş bir alana yayılmış, orta bölgede kırmızı ve

turuncu tonlarla 2×10^{-10} V/m seviyelerinde alan yoğunlaşması gözlenmiş ve bu durum, elektron veya iyon taşınım yollarının belirli düzlemlerde yoğunlaştığını göstermektedir.

Sonuç olarak, Mo katkısı elektrik alanın güçlü ve geniş alanlara yayılmasını sağlayarak yüksek iletimli bölgeler için avantaj sunarken; W katkısı daha kararlı ve sınırlı alan profiliyle elektrik alan yönetiminin kritik olduğu uygulamalarda tercih edilmelidir. Ancak genel performans, taşıyıcı hareketliliği ve reaktif yüzey etkinliği açısından değerlendirildiğinde, Mo dopingi daha yüksek elektriksel verimlilik sunduğundan daha kullanışlı ve işlevsel bir çözüm olarak öne çıkmaktadır.

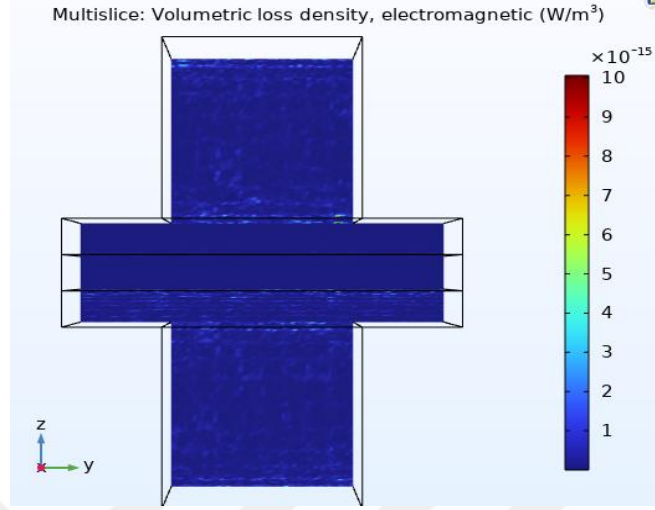


Şekil 6.57. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış elektrik alan normu

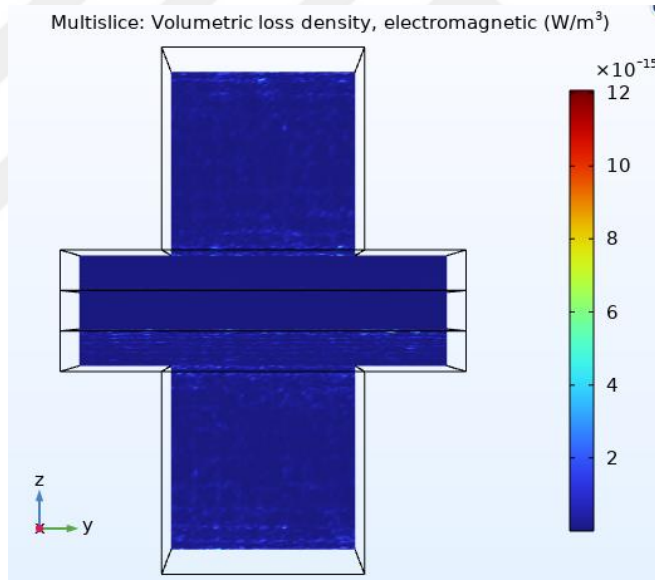
900 °C çalışma sıcaklığında Mo ve W dopingi uygulanmış modellerdeki elektromanyetik hacimsel kayıp yoğunluğu dağılımı Şekil 6.58 ve 6.59'da verilmiştir. Enerji kayıpları Mo için 1×10^{-15} – $1,0 \times 10^{-14}$ W/m³, W için ise 1×10^{-15} – $1,2 \times 10^{-14}$ W/m³ aralığındadır. Mo katkılı modelde (Şekil 6.58), kayıplar sınırlı ve lokalize alanlarda (özellikle kenar bölgelerde) yoğunlaşmaktadır, renk dağılımı ağırlıklı olarak koyu mavi tonlarda kalarak elektromanyetik kayıpların büyük ölçüde ihmal edilebilir düzeyde olduğunu göstermektedir. W katkılı modelde (Şekil 6.59) ise daha geniş aralıkta ve özellikle üst-alt akış bölgelerinde sarı-kırmızı tonlarla lokal kayıplar artmaktadır. Bu durum W'un elektriksel iletkenliği artırmasına rağmen bazı bölgelerde enerji birikimi veya direnç kaynaklı kayıplara yol açtığını göstermektedir.

Sonuç olarak, Mo dopingi daha düşük elektromanyetik kayıp ile yapının genelinde yüksek enerji verimliliği sağlamıştır. Bu nedenle, enerji kayıplarının minimum düzeyde

tutulmasının kritik olduđu uygulamalarda Mo dopingi daha verimli ve kullanışlı bir çözüm sunmaktadır.



Şekil 6.58. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış hacimsel yoğunluk kaybı



Şekil 6.59. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış hacimsel yoğunluk kaybı

900 °C'de Mo ve W dopingli modellerin enerji dengesi verileri Tablo 6.6'da karşılaştırılmıştır. Mo katkılı modelde enerji dengesi $5,44 \times 10^{-13}$ W, net enerji $-3,87 \times 10^{-14}$ W ve toplam ısı kaynağı $-5,83 \times 10^{-13}$ W olup; bu değerlerin tamamı sıfıra oldukça yakın ve birbirine uyumlu olduğundan dolayı sistemin enerji korunumu koşulunu başarıyla sağladığı ve termal olarak dengede çalıştığı görülmektedir. Buna karşılık, W katkılı modelde enerji dengesi $-0,18220$ W, net enerji $+0,042924$ W ve toplam ısı kaynağı $+0,22512$ W gibi daha büyük sapmalar görülmektedir. Bu durum sistemde belirgin enerji

kaybı yaşandığını, ısıl etkileşimlerin dengesiz olduğunu ve modelin daha fazla optimizasyona ihtiyaç duyduğunu göstermektedir.

Sonuç olarak, Mo katkısı enerji yönetimi açısından daha düşük sapma, yüksek stabilite ve kontrol edilebilirlik sunarken; W katkısı güçlü enerji geçişlerine izin verse de yüksek sapmalar nedeniyle dikkatli sınır koşulu ve parametre tanımı gerektirir. Bu nedenle, enerji verimliliği ve sistem dengesi açısından Mo katkısı daha verimli ve kullanışlı bir tercih olarak öne çıkmaktadır.

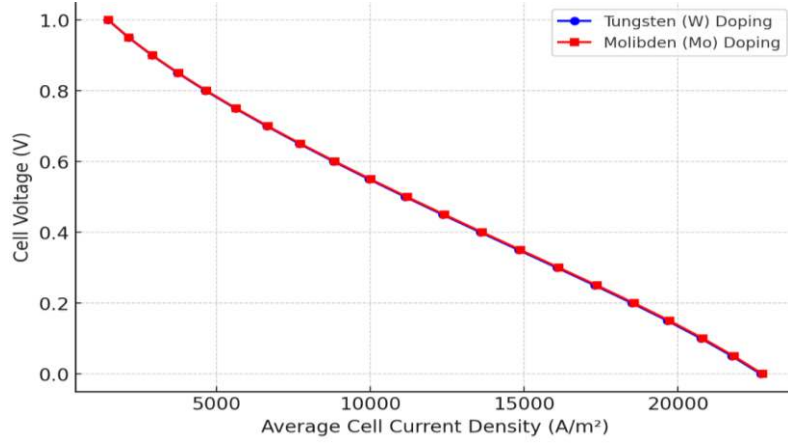
Tablo 6.6. Doping Enerji dengesi karşılaştırılması

Parametre	Mo Dopingli (900 °C)	W Dopingli (900 °C)
Enerji Dengesi (W)	5,4394E-13	-0,18220
Toplam Birikimli Enerji Oranı (W)	0.0000	0.0000
Toplam Net Enerji Oranı (W)	-3,8727E-14	0,042924
Toplam İş Kaynağı (W)	0.0000	0.0000
Toplam Isı Kaynağı (W)	-5,8267E-13	0,22512

900 °C sıcaklıkta Mo ve W dopingi uygulanmış modellerin hücre voltaj-akım yoğunluğu ilişkisi Şekil 6.60'ta verilmiştir. Mo katkılı yapıda voltaj, düşük akım yoğunluklarında ($\sim 5.000 \text{ A/m}^2$ 'ye kadar) daha stabil azalma gösterirken, ohmik kayıplar orta bölgede ($\sim 10.000 \text{ A/m}^2$) belirginleşmekte ve maksimum ortalama akım yoğunluğu yaklaşık 22.743 A/m^2 'ye ulaşmaktadır. $>15.000 \text{ A/m}^2$ seviyelerinde ise voltaj düşüşü hızlanmakta ve bu durum artan kütle transfer kayıplarına işaret etmektedir.

W katkılı modelde ise düşük akım yoğunluklarında voltaj düşüşü daha hızlı olmaktadır. Bu durum aktivasyon kayıplarının göreceli olarak daha yüksek olduğunu düşündürmektedir; ancak orta yoğunluk bölgesinde ($\sim 10.000\text{--}15.000 \text{ A/m}^2$) Mo ile benzer performans sergilemektedir. W katkısında maksimum ortalama akım yoğunluğu 22.685 A/m^2 olduğundan yüksek akım bölgelerinde voltaj düşüşü daha kontrollü seyretmekte ve kütle transfer kayıpları daha iyi yönetilmektedir.

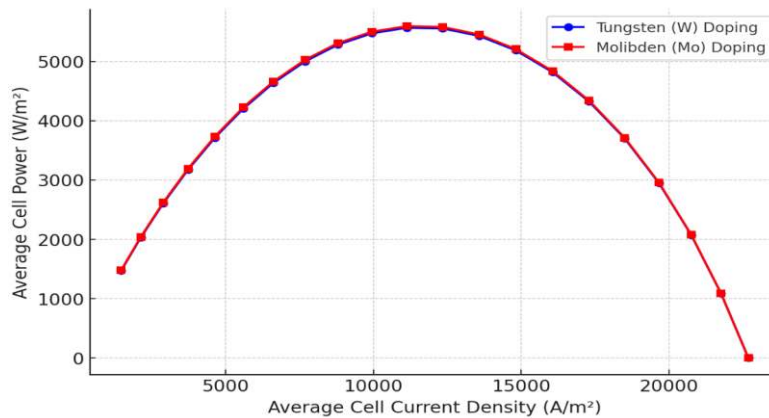
Sonuç olarak, Mo dopingi düşük akım yoğunluklarında başlangıç reaksiyonları ve kararlı performans için uygunken; W dopingi yüksek akım yoğunluğu ve hücre verimliliği açısından avantaj sağlamaktadır. Genel değerlendirmede, yüksek performanslı ve akım talepli uygulamalarda W dopingi bir miktar daha verimli ve kullanışlı bir çözüm olarak öne çıkmaktadır; ancak her iki malzeme de hedeflenen uygulamaya bağlı olarak optimize edilebilir performans sunmaktadır.



Şekil 6.60. 900 °C'deki molibden ve tungsten dopingi uygulanmış polarizasyon eğrisi

900 °C'de Mo ve W dopingli sistemlerin güç-yoğunluk eğrileri, hücre performansının karşılaştırılması açısından kritik önemdedir. Mo katkılı modelde maksimum güç yoğunluğu yaklaşık 5.596 W/m² olup, bu değer 11.193 A/m² ortalama akım yoğunluğunda elde edilmiştir. Güç eğrisindeki zirve sonrası hızlı düşüş, yüksek akım yoğunluklarında difüzyon sınırlamalarının devreye girdiğini göstermektedir. W katkılı modelde ise maksimum güç yoğunluğu yaklaşık 5.568 W/m² ve bu değer benzer şekilde 11.136 A/m²'de gözlemlenmiştir. Güç eğrisinde düşüş daha yumuşak olduğundan difüzyon kayıplarına karşı daha dirençli bir yapı sergilemektedir (Şekil 6.61).

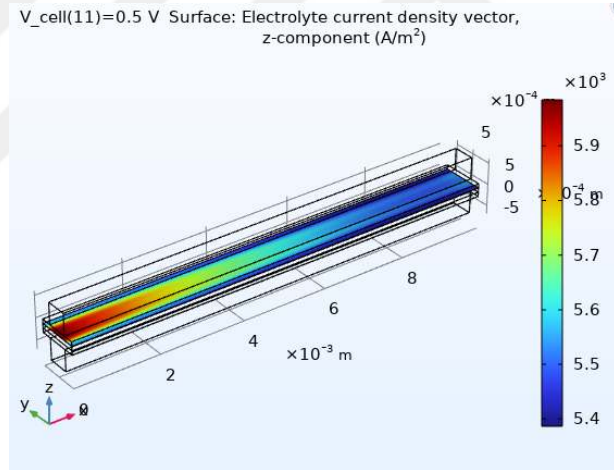
Her iki model de maksimum güç çıktısı açısından benzer sonuçlar vermektedir, W katkılı yapının difüzyon kaynaklı kayıpları daha iyi yönettiği ve daha stabil bir performans sunduğu görülmektedir. Sonuç olarak, hızlı tepki veren sistemler için Mo dopingi avantaj sağlayabilirken; uzun süreli stabilite, düşük performans düşüşü ve dengeli güç dağılımı gereken uygulamalarda ise W dopingi daha verimli ve kullanışlı bir seçenek olarak öne çıkmaktadır.



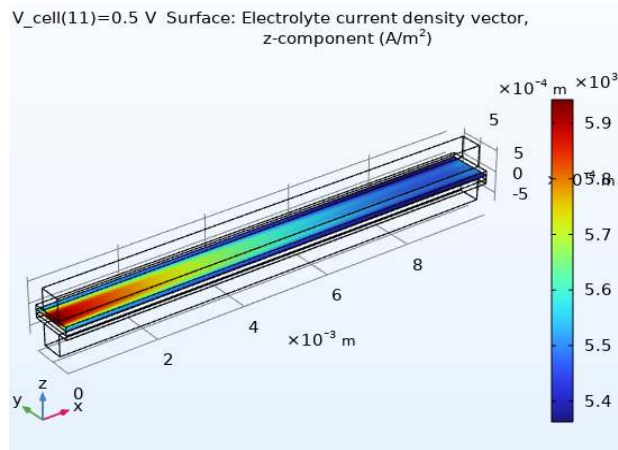
Şekil 6.61. 900 °C'deki molibden ve tungsten dopingi uygulanmış güç-yoğunluk eğrisi

Şekil 6.62 ve 6.63'teki verilere göre, 900 °C'de Mo ve W dopingli modellerde elektrolit akım yoğunluğunun z-komponenti genellikle $5,4 \times 10^3$ – $5,9 \times 10^3$ A/m² aralığında değişmektedir. Mo katkılı modelde bu değerler daha stabil ve homojen bir dağılım sergilemektedir. Bu durum elektrolit boyunca dengeli bir akım geçişi sağlayarak elektrolit stabilitesine katkıda bulunmaktadır ve enerji dönüşüm verimini artırmaktadır. W katkılı modelde ise aynı aralıkta olmakla birlikte, akım dağılımı daha değişken olup yüzey boyunca dalgalı bir profile sahiptir. Böylece elektrolit üzerinden geçen akımın Mo'ya göre daha düşük düzeyde desteklendiğini göstermektedir.

Sonuç olarak, Mo dopingi hem daha yüksek hem de daha dengeli bir akım yoğunluğu ile elektrolit performansını artırmakta ve uzun vadeli dayanıklılık sunmaktadır. W katkısı ise hafif performans kaybı ve dağılım dengesizliği ile nispeten daha düşük verim sağlamaktadır. Bu nedenle, yüksek performanslı ve stabil bir elektrot tasarımı için Mo dopingi daha verimli ve kullanışlı bir tercih olarak öne çıkmaktadır.



Şekil 6.62. 900 °C'deki Molibden dopingi uygulanmış elektrolit akım yoğunluğu

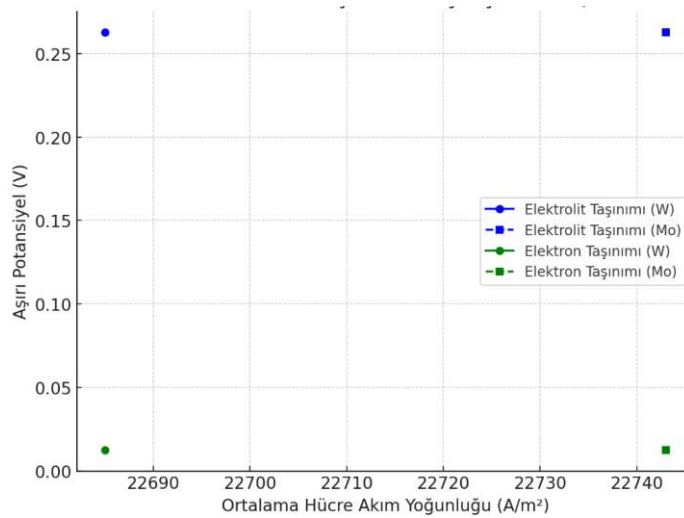


Şekil 6.63. 900 °C'deki Tungsten dopingi uygulanmış elektrolit akım yoğunluğu

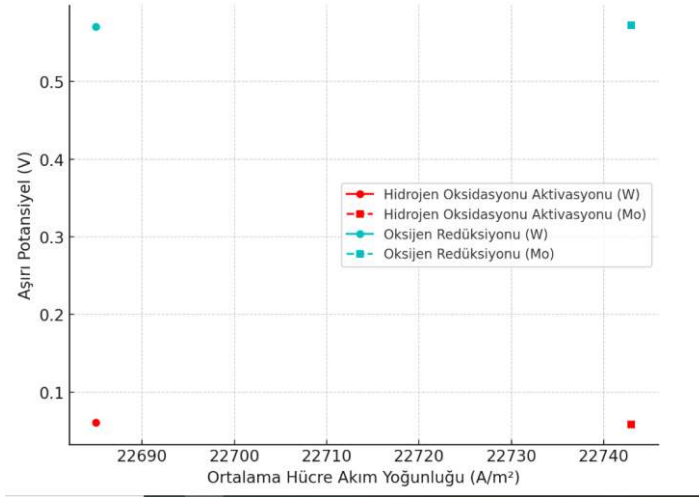
Şekil 6.64 ve 6.65'te Mo ve W katkılarının elektrolit ve elektron taşınımı, oksijen redüksiyonu ve hidrojen oksidasyonu üzerindeki etkileri sunulmuştur. Elektrolit taşınımı için aşırı potansiyel her iki katkıda da eşit olup 0,2629 V, elektron taşınımı için ise yine eşit bir değer olan 0,0125 V olarak hesaplanmıştır. Bu durum her iki katkının iyon ve elektron taşınımına doğrudan pozitif ya da negatif bir etkisi olmadığını göstermektedir. Ancak elektrolit taşınımındaki potansiyelin düşürülememesi, verimlilik açısından bir sınırlama oluşturabilir.

Oksijen redüksiyonu aşamasında W dopingi 0,5705 V ile Mo'nun 0,5725 V değerine göre 0,002 V daha düşük aşırı potansiyel göstermektedir. Bu durum, katot tarafında oksijen indirgenme sürecinde W'un daha az enerji kaybı ile çalıştığını göstermektedir. Hidrojen oksidasyonu için ise Mo dopingi 0,0585 V ile W'un 0,0608 V'lik değerine kıyasla 0,0023 V daha düşük potansiyel sunmakta ve anot tarafında reaksiyon verimliliğini artırmaktadır.

Sonuç olarak, Mo ve W katkıları elektrolit ve elektron taşınımında eşdeğer performans gösterir. W oksijen redüksiyonu için, Mo ise hidrojen oksidasyonu açısından daha etkilidir. Spesifik uygulama hedeflerine göre tercih yapılabilirken hem anot hem de katot reaksiyonlarında denge sağlanmak istenirse Mo ve W'nin birlikte kullanımı daha optimal sonuçlar verebilir. Yine de genel verimlilik ve uygulama çeşitliliği dikkate alındığında, Mo dopingi biraz daha dengeli ve kullanışlı bir seçenek olarak öne çıkmaktadır.



Şekil 6.64. 900 °C'deki Molibden ve Tungsten dopingi uygulanmış elektrolit ve elektron taşınımı



Şekil 6.65. 900 °C'deki molibden ve tungsten dopingi uygulanmış hidrojen oksidasyonu aktivasyonu ve oksijen redüksiyonu

Bütün kriterlere göre doping kıyaslaması yapılmıştır. Bunun sonucunda 900 °C çalışma sıcaklığında molibden (Mo) ve tungsten (W) dopingleri uygulanarak yapılan analizler, her iki malzemenin farklı parametreler üzerindeki etkileri ayrıntılı olarak Tablo 6.7'de değerlendirilmiştir. Elektrot potansiyel dağılımında Mo, daha simetrik ve merkez odaklı bir akım yoğunluğu sağlarken, W daha yönlü ve düşük dirençli bir iletim sunarak özellikle yüksek sıcaklıklarda daha stabil performans göstermiştir. Elektrolit potansiyeli açısından Mo, dengeli ve yukarı yönlü iyon hareketiyle homojen bir iletkenlik sağlarken, W daha dik gradyan ile iyon taşınımını hızlandırarak elektrolit içi verimliliği artırmıştır. H₂ taşınımında Mo katkılı modelde düzensiz ve kümelenmiş akış gözlemlenirken, W katkısı daha yönlü ve homojen bir dağılım sağlayarak difüzyon açısından üstün performans sergilemiştir. Benzer şekilde O₂ taşınımında Mo daha kontrollü ve homojen bir tüketim profili sunarken, W daha agresif ve lokal tüketimle katot reaksiyonlarını yoğunlaştırmıştır.

Su buharı (H₂O) akışında, Mo daha karmaşık ve yaygın bir dağılım gösterirken, W daha düzenli ve yönlü bir taşıma profili sağlayarak gaz ürün tahliyesinde daha etkilidir. N₂ taşınımında da W katkısı daha hızlı ve yönlü bir difüzyon sunarak gaz transfer verimliliğini artırmaktadır. Katot hız profiline bakıldığında Mo daha yaygın ve laminar bir akış sağlarken, W katkısı yüzeye yakın, dar profilli ve yönlü bir akışı desteklemektedir. Katot ve anot bölgelerindeki basınç dağılımında Mo daha dar ve homojen bir profil sunarken, W daha yüksek basınç farklarıyla lokal yoğunlaşmalara neden olmaktadır. Anot tarafında Mo daha yüksek hız büyüklüğü ve dengeli dağılım

sunarak daha düşük akış direnci sağlar; W ise daha düşük hız değerleri ve değişken profil nedeniyle akış direnci açısından dezavantajlıdır.

Mekanik analizlerde Mo dopingli modelde, $1.0 \times 10^9 \text{ N/m}^2$ seviyelerinde maksimum von Mises gerilme ile daha düşük stres ve yer değiştirme değerleri sunar. W katkısı ise $3.5 \times 10^9 \text{ N/m}^2$ 'ye kadar ulaşan lokal streslerle daha rijit ama daha az şekil değiştiren bir yapı oluşturur. Sıcaklık dağılımında Mo katkısı daha homojen ve yayılmış bir termal profil sunarken, W katkısı daha keskin geçişlerle lokal ısı birikimine neden olmaktadır. Elektrik alan dağılımında Mo geniş yüzeyli ve güçlü iletim yolları sunar, W daha kontrollü ancak sınırlı bölgelerde alan oluşumuna neden olmaktadır. Elektromanyetik kayıplarda Mo daha düşük enerji kaybıyla yüksek enerji verimliliği sunar, W katkılı modellerde ise lokal kayıplar artmaktadır.

Enerji dengesi bakımından Mo dopingli modelin enerji sapması $5.44 \times 10^{-13} \text{ W}$ gibi ihmal edilebilir düzeydeyken, W katkılı modelde ise bu sapma -0.18220 W gibi daha büyük değerler göstermektedir. Polarizasyon eğrisine göre Mo düşük akım yoğunluklarında daha stabil performans sağlarken, W yüksek akım yoğunluklarında voltaj düşüşünü daha iyi yönetmektedir. Güç-yoğunluk eğrisinde her iki doping de benzer maksimum güç seviyelerine ulaşsa da W katkısı daha stabil bir eğri sunar. Elektrolit akım yoğunluğu açısından Mo daha homojen ve yüksek değerler sunarken, W katkısı daha değişken bir dağılıma sahiptir. Elektrolit ve elektron taşınımı açısından her iki katkı da benzer performans gösterirken; oksijen redüksiyon sürecinde W, hidrojen oksidasyon sürecinde ise Mo daha düşük aşırı potansiyel sunarak reaksiyon verimliliğini artırmaktadır.

Tablo 6.7. Değerlendirme kriterlere göre dopinglerin kıyaslanması

Kriter	Mo Doping Avantajı	W Doping Avantajı
<i>Elektrot Potansiyel Dağılımı</i>	Dengeli, merkez yönlü akım	Yönlü ve düşük dirençli akım
<i>Elektrolit Potansiyeli</i>	Homojen iyon geçişi	Daha hızlı ve dik iyon gradyanı
<i>H₂ Taşınımı</i>	Kümelenmiş, sınırlı akış	Homojen ve yönlü H ₂ akışı
<i>O₂ Mol Fraksiyonu</i>	Kontrollü tüketim	Erken ve lokal tüketim
<i>H₂O Taşınımı</i>	Yaygın buhar dağılımı	Yönlü, hızlı tahliye
<i>N₂ Taşınımı</i>	Dengeli geçiş	Hızlı ve yönlü difüzyon
<i>Katot Hız Profili</i>	Laminer, yaygın akış	Sınır tabakalarda yönlü taşıma
<i>Katot ve Anot Basınç Profili</i>	Dar, homojen basınç	Daha dengeli genel basınç
<i>Anot Akış Hızı</i>	Yüksek hız, düşük direnç	Daha düşük ve düzensiz hız
<i>Gerilme ve Deformasyon</i>	Düşük gerilme ve yer değiştirme	Yüksek rijitlik, daha fazla stres
<i>İzoyüzey Sıcaklık Profili</i>	Yaygın ve homojen dağılım	Keskin geçiş, lokal ısı tutunumu
<i>Elektrik Alan Dağılımı</i>	Geniş alanlı, iletken bölgeler	Kontrollü ama sınırlı alan
<i>EM Hacimsel Kayıp</i>	Düşük kayıplar, yüksek verim	Lokal kayıplar
<i>Enerji Dengesi</i>	Kararlı ve sifıra yakın	Yüksek sapma
<i>Polarizasyon Performansı</i>	Düşük akımda stabil	Yüksek akımda daha kontrollü voltaj
<i>Güç Yoğunluğu</i>	Yüksek zirve, hızlı düşüş	Stabil güç eğrisi
<i>Elektrolit Akım Yoğunluğu</i>	Yüksek, homojen geçiş	Düşük ve değişken geçiş
<i>Elektrokimyasal Reaksiyon Verimi</i>	H ₂ oksidasyonu daha verimli	O ₂ redüksiyonu daha verimli

6.4. Elde Edilen Sonuçların Karşılaştırmalı Yöntemle Değerlendirilmesi

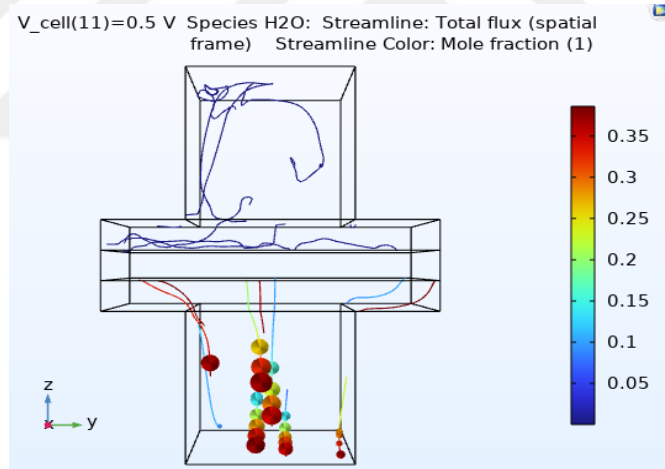
Bu bölümde 900 °C’de hidrojen yakıtlı KOYP, platinyum kaplamalı KOYP ve son olarak molibden dopingi uygulanmış platinyum kaplamalı KOYP verimlilikleri kıyaslanmıştır. H₂O akış çizgilerinin incelendiği bölümde Şekil 6.66, Şekil 6.67 ve Şekil 6.68 kullanılmıştır. Hız büyüklüğü dağılımının değerlendirildiği kısımda Şekil 6.69, Şekil 6.70 ve Şekil 6.71’de yer verilmiştir. Ortalama akım yoğunluğu ile hücre voltajı arasındaki ilişkinin analiz edildiği bölümde Şekil 6.72 kullanılmıştır. Ortalama akım yoğunluğu ile hücre gücü arasındaki değişimin incelendiği kısımda ise Şekil 6.73 sunulmuştur. Von Mises gerilmesi analizinde Şekil 6.74, Şekil 6.75 ve Şekil 6.76 değerlendirilmiştir. Yer değiştirme büyüklüğünün karşılaştırıldığı bölümde Şekil 6.77, Şekil 6.78 ve Şekil 6.79 kullanılmıştır. İzoyüzey termal haritalarının yorumlandığı kısımda Şekil 6.80, Şekil 6.81 ve Şekil 6.82’de yer verilmiştir. Elektrik alan normunun incelendiği bölümde Şekil 6.83, Şekil 6.84 ve Şekil 6.85 kullanılmıştır. Son olarak, enerji dengesi analizinin yapıldığı bölümde Şekil 6.86, Şekil 6.87 ve Şekil 6.88’de değerlendirilmiştir.

Kaplamasız yüzeyde 900 °C’de su buharı akışı oldukça düzensizdir. Akış çizgilerinde türbülans ve girdap oluşumları net şekilde gözlemlenmektedir, su molekülleri belirli alanlarda birikerek akış dengesizliğine ve dolayısıyla sistem verimliliğinde kayıplara yol açmaktadır. Dopingsiz platinyum kaplama uygulandığında bu düzensizlik

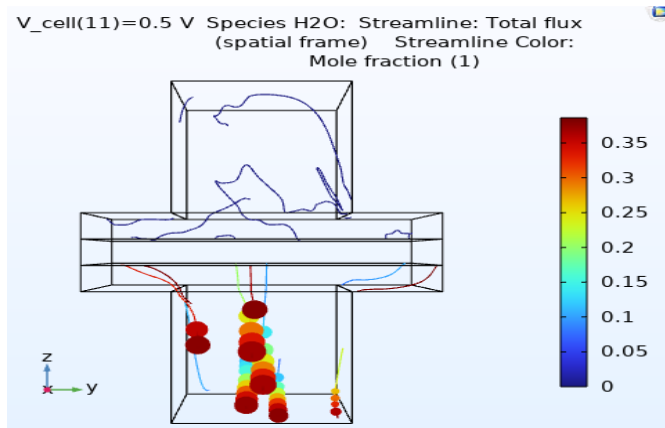
büyük ölçüde azalmıştır, akış çizgileri daha düzenli hale gelmiş ve türbülans etkisi bastırılmıştır. Ancak, alt bölgelerde yoğunluk artışı hâlâ devam etmekte, bu da sistemin tam anlamıyla optimize edilemediğini göstermektedir (Şekil 6.66 ve 6.67).

Molibden dopingi uygulanmış platinyum kaplamada ise akış çizgileri en homojen düzeye ulaşmış, girdaplar büyük ölçüde bastırılmış ve su buharı daha kontrollü şekilde yönlendirilmiştir. Bu yapı, akış verimliliğini artırarak sistemin su yönetimini dengelemiş ve genel performansı iyileştirmiştir. Moleküler fraksiyon açısından her üç durumda da 0,30–0,35 aralığında benzer değerler elde edilmesine rağmen, akış yapısının homojenliği ve yönlendirme kabiliyeti bakımından belirgin fark oluşmuştur (Şekil 6.68).

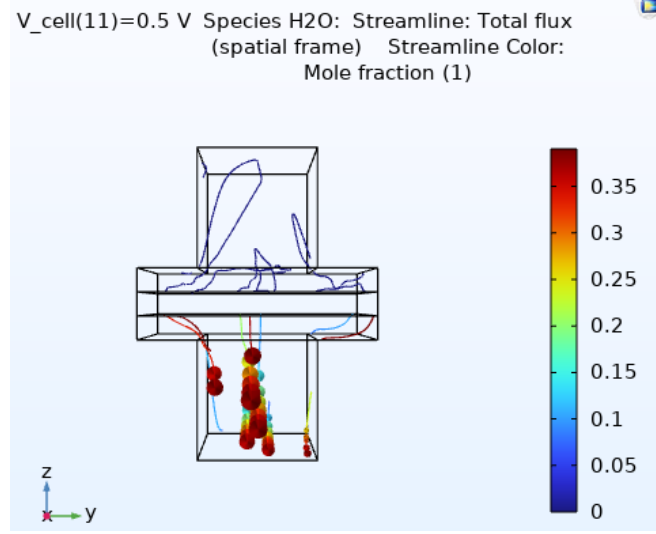
Sonuç olarak, kaplamasız yapı enerji kaybı ve dengesizliklerle en düşük verimi, dopingsiz Pt kaplama ise orta seviyede kontrol sağlayarak sınırlı katkı sunmaktadır. En yüksek verim ve akış düzeni, su buharının hücre içinde optimum şekilde yönetildiği dopingli platinyum kaplama ile elde edilmiştir. Bu nedenle, bu değerlendirme kriteri için en verimli ve kullanışlı yüzey çözümü dopingli Pt kaplamadır.



Şekil 6.66. Dopingsiz ve kaplamasız ana malzemeler atanmış hali H_2O akış çizgileri



Şekil 6.67. Dopingsiz platinyum kaplanmış hali H_2O akış çizgileri



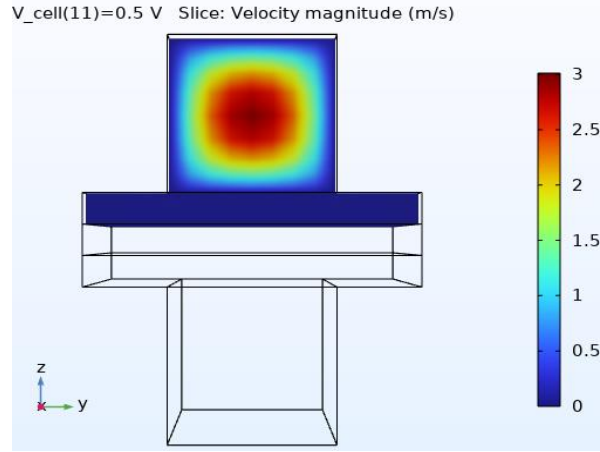
Şekil 6.68. Molibden dopingi uygulanmış platinyum kaplanmış hali H_2O akış çizgileri

Kaplamasız ve dopingsiz yüzeylerde hız büyüklüğü dağılımı incelendiğinde, maksimum hız değeri her iki durumda yaklaşık 3 m/s seviyesine ulaşmaktadır. Bu değer merkezde yoğunlaşmaktadır ve kenarlara doğru ise belirgin şekilde azalmaktadır (Şekil 6.69). Hız dağılımı genel olarak homojen görünse de kenar bölgelerdeki düşük hız değerleri, akışın tam olarak optimize edilmediğini ve yerel verimliliğin sınırlı kaldığını göstermektedir.

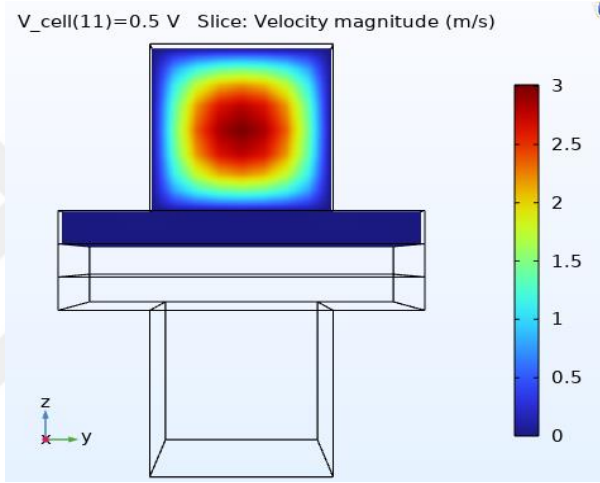
Dopingsiz platinyum kaplama uygulandığında (Şekil 6.70), maksimum hız değeri yine ~3 m/s olarak sabit kalmaktadır. Ancak yüzeyin değiştirilmesiyle birlikte kenar bölgelerdeki hız farkları azalmıştır ve akış daha düzenli hale gelmiştir. Bu yapı, platinyum kaplamanın yüzey akışını iyileştirerek daha homojen bir hız profili sunduğunu ve sınır bölgelerdeki kayıpları kısmen azaltabildiğini ortaya koymaktadır.

Molibden dopingi uygulanmış platinyum kaplamalı yüzeyde (Şekil 6.71), maksimum hız değeri önceki yapılarla aynı olmaktadır. Kenar bölgelerdeki hız değişimleri minimuma inmiş ve genel hız dağılımı dengelenmiştir. Bu durum, molibden dopinginin yüzey sertliğini artırarak akış çizgilerini optimize ettiğini ve akış direncini düşürerek taşıma verimliliğini yükselttiğini göstermektedir.

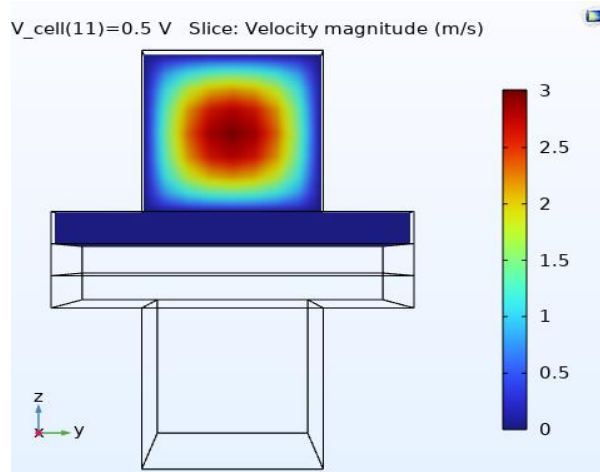
Sonuç olarak, kaplamasız ve dopingsiz yüzeylerde hız profilinde bölgesel dengesizlikler gözlemlenirken, dopingsiz platinyum kaplama bu dağılımı iyileştirse de sınırlı düzeyde katkı sunmaktadır. En homojen ve dengeli hız dağılımı ise molibden dopingi uygulanmış platinyum kaplamalı yüzeyde elde edilmiştir. Bu yapı, sistemin genel performansını artırarak en verimli ve kullanışlı çözüm olarak öne çıkmıştır.



Şekil 6.69. Dopingsiz ve kaplamasız ana malzemeler atanmış hız büyüklüğü



Şekil 6.70. Dopingsiz platinyum kaplamalı hız büyüklüğü



Şekil 6.71. Molibden dopingi uygulanmış platinyum kaplamalı hız büyüklüğü

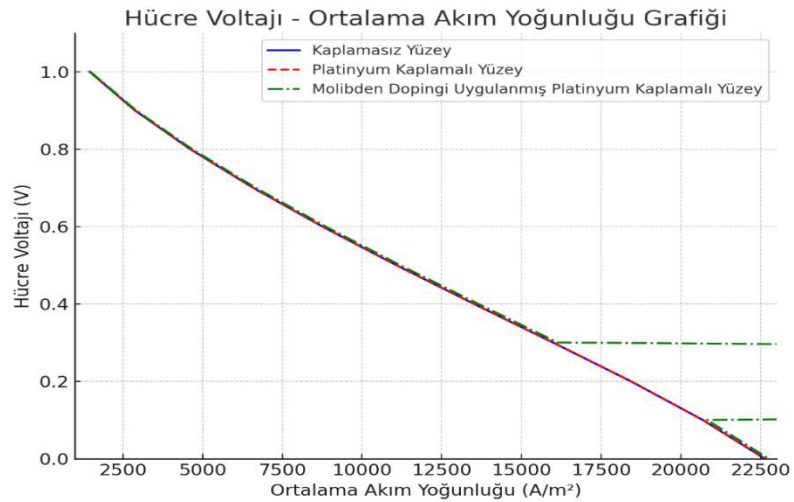
Kaplamasız, sadece platinyum kaplamalı ve molibden dopingi uygulanmış platinyum kaplamalı yüzeyler için hücre voltajı ile ortalama akım yoğunluğu arasındaki ilişki sayısal olarak Şekil 6.72’de karşılaştırılmıştır. Kaplamasız ve Pt kaplamalı yüzeyler,

düşük ve orta akım yoğunluğu aralıklarında benzer performans sergilemiştir. Her iki yapı için başlangıç voltajı 1 V iken, akım yoğunluğu yaklaşık 1460–1470 A/m² civarındadır. Voltaj 0,5 V olduğunda akım yoğunluğu 11.073 A/m², voltaj 0 V seviyesine indiğinde ise yaklaşık 22.623 A/m²'ye ulaşmıştır. Bu veriler, dopingsiz Pt kaplamanın, kaplamasız yüzeye kıyasla ciddi bir voltaj avantajı sağlamadığını göstermektedir (Şekil 6.72).

Mo dopingi uygulanmış Pt kaplamalı yüzeyde ise her voltaj seviyesinde daha yüksek akım yoğunluğu sunarak öne çıkmıştır. Başlangıçta 1 V – 1479.4 A/m², 0.5 V – 11.193 A/m² ve 0 V – 22.743 A/m² olarak ölçülen değerler, dopingsiz yapılarla neredeyse aynı aralıktadır, 0.2 V seviyesinde elde edilen 18.457,3 A/m² değeriyle büyük fark yaratmaktadır (kaplamasız ve Pt kaplamalı yüzeylerde bu değer sadece 18.424 A/m²'dir). Bu fark, Mo dopinginin elektrot yüzeyinde iletkenliği ve reaksiyon kinetiğini artırarak elektrokimyasal süreçleri daha verimli hale getirdiğini ortaya koymaktadır.

Özellikle 15.000 A/m²'den sonraki yüksek akım yoğunluğu bölgesinde, dopingsiz yüzeylerde voltaj hızlı şekilde düşerken Mo katkılı yüzey belirli bir voltaj seviyesini korumaktadır. Bu durum daha yüksek enerji verimliliği ve kararlı çalışma anlamına gelmektedir.

Sonuç olarak, kaplamasız ve dopingsiz yüzeyler düşük akım yoğunluğunda benzer performans gösterirken, en verimli ve kullanışlı çözüm ise yüksek akım yoğunluğu koşullarında dahi voltaj stabilitesini koruyan molibden dopingi uygulanmış platinyum kaplamalı yüzeydir. Bu yapı, uzun süreli ve yüksek güç gerektiren yakıt hücresi uygulamaları için optimum çözüm sunmaktadır.

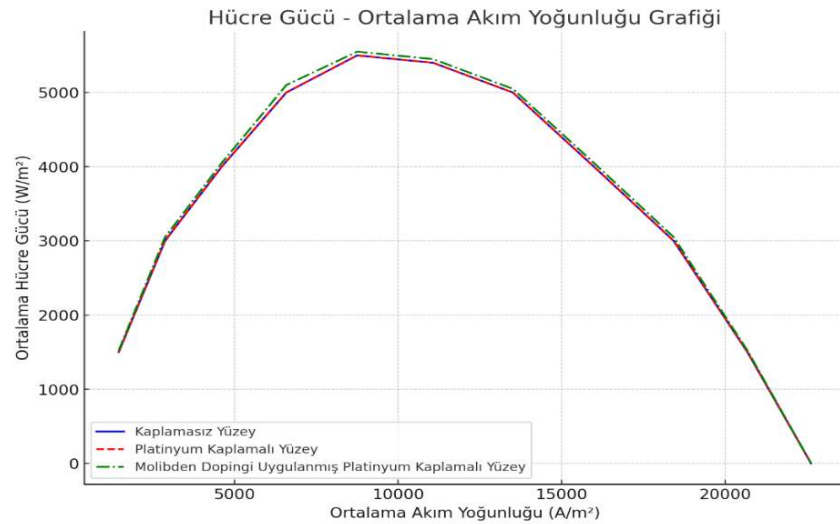


Şekil 6.72. Kaplamasız, platinyum kaplamalı, molibden dopingi uygulanmış platinyum kaplamalı yüzey ortalama akım yoğunluğu / hücre voltajı grafiği

Kaplamasız, sadece platinyum kaplamalı ve molibden dopingi uygulanmış platinyum kaplamalı yüzeylerin ortalama hücre gücü (W/m^2) ile ortalama akım yoğunluğu (A/m^2) ilişkisini Şekil 6.73'te göstermektedir. Tüm yüzeylerde güç eğrisi, önce artış sonra düşüş şeklinde tipik bir profil sergilemiştir. Kaplamasız ve Pt kaplamalı yüzeyler, $11.073 A/m^2$ akım yoğunluğunda aynı maksimum güç değeri olan $5536.6 W/m^2$ 'ye ulaşmış; bu durum, Pt kaplamanın güç çıktısını tek başına artırmadığını göstermektedir.

Buna karşılık, molibden dopingi uygulanmış Pt kaplamalı yüzey, benzer bir akım yoğunluğu olan $11.193 A/m^2$ 'de $5.596,6 W/m^2$ maksimum güç değerine ulaşmıştır. Yaklaşık $+60 W/m^2$ 'lik bu artış sistem genel performansı açısından anlamlıdır. Bu elde edilen güç çıktısındaki bu artış, aynı voltaj ve akım koşullarında daha fazla enerji üretimi anlamına gelir.

Sonuç olarak, Pt kaplama, kaplamasız yapıya kıyasla güç yoğunluğu bakımından doğrudan katkı sağlamamaktadır. Ancak Mo dopingi, Pt kaplamanın yüzey performansını geliştirerek maksimum güç çıktısını artırmaktadır ve akım-hücre gücü verimliliğini iyileştirmektedir. Bu nedenle, yüksek güç yoğunluğu hedeflenen sistemlerde en verimli ve kullanışlı çözüm, molibden dopingi uygulanmış platinyum kaplamalı yüzeydir.



Şekil 6.73. Kaplamasız, platinyum kaplamalı, molibden dopingi uygulanmış platinyum kaplamalı yüzey ortalama akım yoğunluğu / ortalama hücre gücü

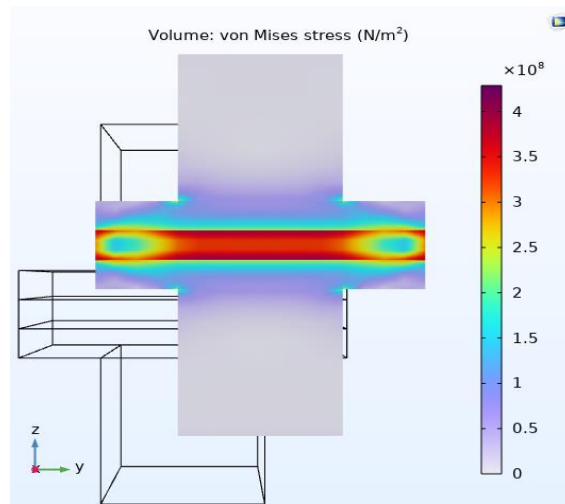
Von Mises gerilme analizinde kaplamasız, sadece platinyum kaplamalı ve molibden dopingi uygulanmış platinyum kaplamalı yüzeyler arasında belirgin farklar ortaya koymuştur. Kaplamasız yüzeyde maksimum gerilme değeri yaklaşık $4,0 \times 10^8 N/m^2$

olup, özellikle merkezi bölgelerde düzensiz yoğunlaşmalar görülmektedir (Şekil 6.74). Bu durum, yapının yorulma ve kırılma riski açısından zayıf olduğunu göstermektedir.

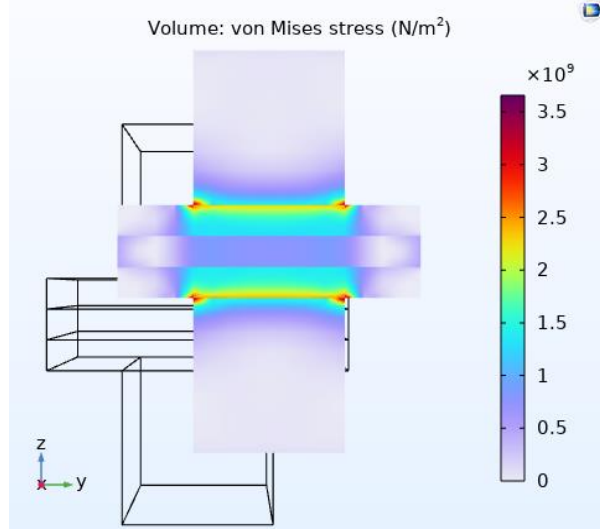
Platinyum kaplamalı yüzeyde ise maksimum von Mises gerilmesi yaklaşık $3,5 \times 10^9 \text{ N/m}^2$ seviyesine ulaşmıştır (Şekil 6.75). Bu, kaplamasız yapıya göre yaklaşık 8,75 kat artış anlamına gelmektedir. Yüksek gerilme değeri teorik olarak risk oluşturabilir, ancak gerilme dağılımı çok daha homojen hale gelmiş ve lokal stres birikimleri azaltılmıştır. Bu yapı, yüksek dayanım ancak dikkatli tasarım gerektiren bir yüzey profili sunmaktadır.

Molibden dopingi uygulanmış Pt kaplamalı yüzey (Şekil 6.76), yaklaşık $1,0 \times 10^9 \text{ N/m}^2$ maksimum gerilme değeriyle, sadece Pt kaplamaya göre daha düşüktür, kaplamasız yapıya göre ise daha yüksek bir değer göstermektedir. En önemlisi, bu yüzeyde gerilme dağılımı daha dengeli ve yönetilebilirdir, stres bölgeleri yüzeye yayılmış şekilde minimize edilmiştir. Bu durum, Mo dopinginin yüzey ile sinerji yaratarak mekanik kararlılığı artırdığını ortaya koymaktadır.

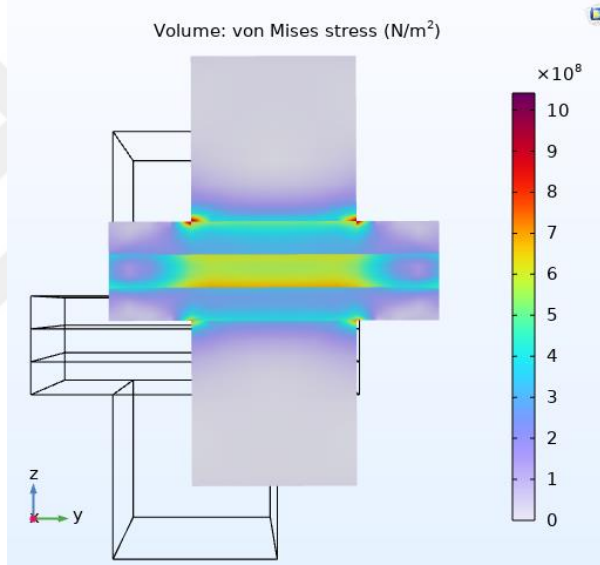
Sonuç olarak, kaplamasız yapı daha düşük gerilme değerine sahip olsa da düzensiz dağılımı nedeniyle yapısal risk taşımaktadır. Sadece Pt kaplama, dayanımı artırsa da yüksek gerilme nedeniyle kırılganlığı artırabilir. En dengeli ve dayanıklı sonuç, molibden dopingi uygulanmış Pt kaplamalı yüzeyde elde edilmiştir. Bu yapı hem yeterli mekanik mukavemet hem de homojen gerilme dağılımı sunarak, en verimli ve kullanışlı çözüm olarak öne çıkmaktadır.



Şekil 6.74. Doping uygulanmamış ve kaplamasız von Mises gerilmesi



Şekil 6.75. *Doping uygulanmamış ve platinyum kaplamalı von Mises gerilmesi*



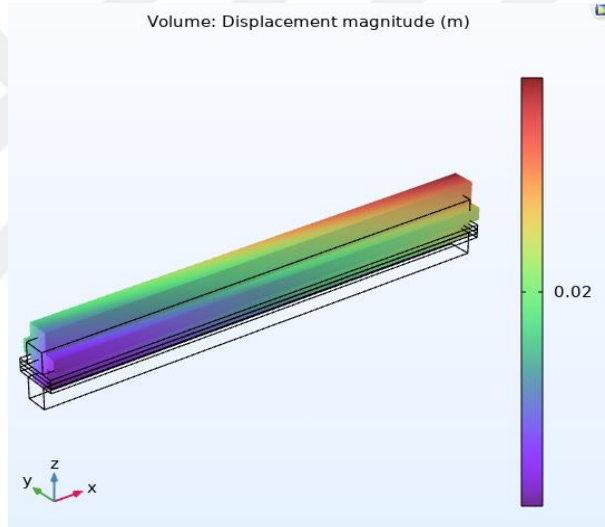
Şekil 6.76. *Molibden dopingi uygulanmış ve kaplamasız Von Mises gerilmesi*

Kaplamasız yüzeyde maksimum yer değiştirme büyüklüğü 0,02 m olarak hesaplanmıştır. Deformasyonun doğrusal dağılım gösterdiği, uç noktalarda daha fazla bükülme, sabitlenmiş bölgelerde ise minimum yer değiştirme gözlenmiştir (Şekil 6.77). Bu durum, yapının yorulma riski taşıdığını ve uzun vadeli kullanımlarda stabilite sorunu oluşturabileceğini göstermektedir.

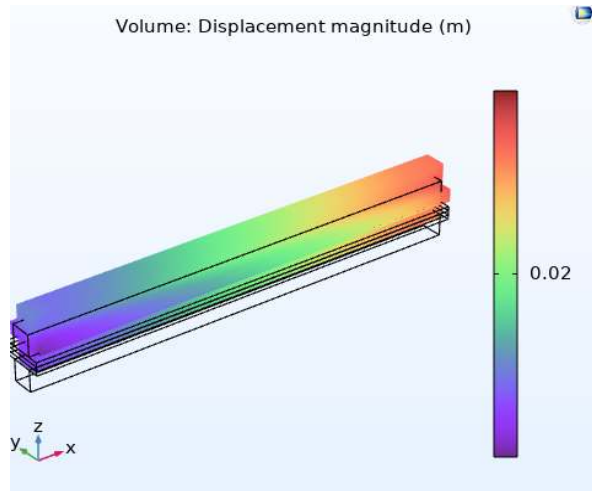
Platinyum kaplamalı yüzeyde, maksimum yer değiştirme değeri yine 0,02 m seviyesinde kalmaktadır (Şekil 6.78), deformasyon dağılımı daha dengeli hale gelmiştir. Yüzey kaplaması, yapının termomekanik yükler altında daha kontrollü şekilde tepkime vermesini sağlamıştır.

Molibden dopingi uygulanmış platinyum kaplamalı yüzeyde ise maksimum yer değiştirme $1,69 \times 10^{-2}$ m olarak ölçülmüştür. Bu sonuç dopingsiz yapılara kıyasla küçük fakat anlamlı bir azalma sunmuştur (Şekil 6.79). Ayrıca, deformasyonun daha düzgün yayılması yapısal bütünlüğü artırmış ve termal genişlemeye karşı dirençli bir yapı sağlamıştır.

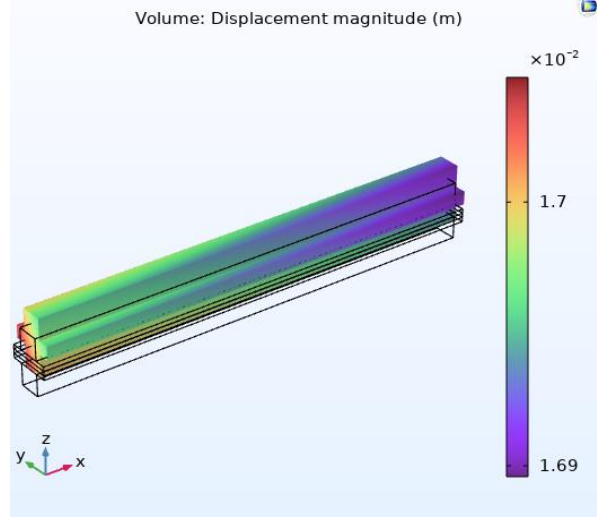
Sonuç olarak, kaplamasız yapı en fazla yer değiştirme ile yüksek yorulma riski taşımaktadır. Pt kaplama deformasyon dengesini iyileştirse de yer değiştirmeyi azaltmamaktadır. En düşük deformasyon ve en dengeli dağılım, molibden dopingi uygulanmış Pt kaplamalı yüzeyde elde edilmiştir. Bu nedenle, verimlilik ve uzun vadeli yapısal dayanıklılık açısından en uygun ve kullanışlı çözüm Mo dopingi uygulanmış Pt kaplamalı yüzeydir.



Şekil 6.77. Doping uygulanmamış ve kaplamasız yer değiştirme büyüklüğü



Şekil 6.78. Doping uygulanmamış ve platinyum kaplamalı yer değiştirme büyüklüğü



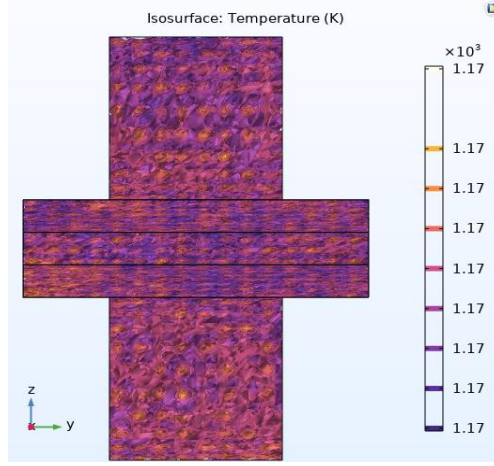
Şekil 6.79. Molibden dopingi uygulanmış ve platinyum kaplamalı yer değiştirme büyüklüğü

Kaplamasız yüzeyde sıcaklık değeri yaklaşık $1,17 \times 10^3$ K olarak ölçülmüş ve izoyüzeyler oldukça düzensiz, heterojen bir yapıda görülmüştür (Şekil 6.80). Bu yapı, düşük ısı iletkenlik ve lokal sıcaklık birikimlerine işaret etmektedir. Bu durum termal stres, çatlak ve yorulma riski yaratmaktadır.

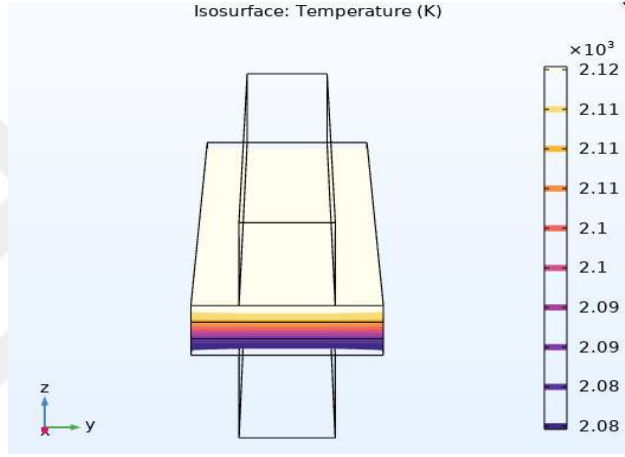
Platinyum kaplamalı yüzeyde (Şekil 6.81), sıcaklık $2,08$ – $2,12 \times 10^3$ K aralığında değişmektedir. İzoyüzeyler düzenli ve katmanlı bir formda yayılmakta, ısı daha homojen dağılmaktadır. Pt'nin yüksek termal iletkenliği sayesinde lokal aşırı ısınma bölgeleri baskılanmış ve daha kararlı bir ısı yapı elde edilmiştir.

Molibden dopingi uygulanmış Pt kaplamalı yüzeyde (Şekil 6.82), sıcaklık $2,09$ – $2,13 \times 10^3$ K aralığında ölçülmüştür. İzoyüzeyler net, paralel ve daha yoğun şekilde sıralanmıştır. Bu yapı, Mo'nun Pt ile sinerjik etkisiyle ısıyı daha dengeli yaydığını ve sıcaklık gradyanlarını etkin şekilde bastırdığını göstermektedir. Böylece termal gerilmeler azaltılmış ve termomekanik dayanım güçlendirilmiştir.

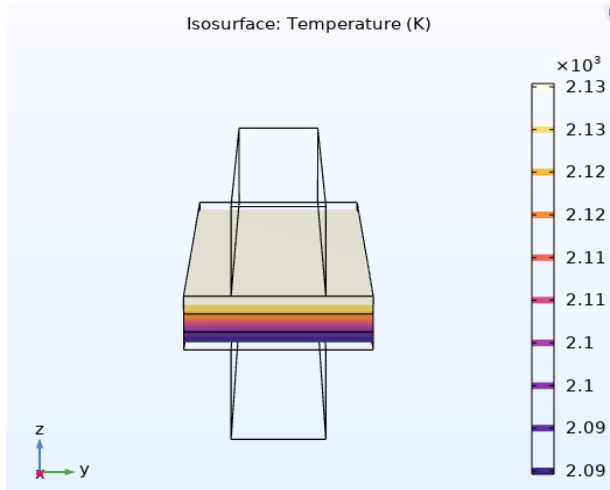
Sonuç olarak, kaplamasız yapı düşük sıcaklıkta çalışmasına rağmen düzensiz dağılım nedeniyle yüksek risklidir. Pt kaplama ise ısı transferini iyileştirmiştir. En iyi termal performans ise, yüksek sıcaklık seviyesi ve homojen ısı dağılımı sağlayan molibden dopingi uygulanmış platinyum kaplamalı yüzeyde elde edilmiştir. Bu yapı, ısı yönetimini optimize ederek yapısal kararlılığı artırmakta ve en verimli, en kullanışlı çözüm olarak öne çıkmaktadır.



Şekil 6.80. Doping uygulanmamış ve kaplamasız izoyüzey termal haritası



Şekil 6.81. Doping uygulanmamış ve platinyum kaplamalı izoyüzey termal haritası



Şekil 6.82. Molibden doping uygulanmış ve platinyum kaplamalı izoyüzey termal haritası

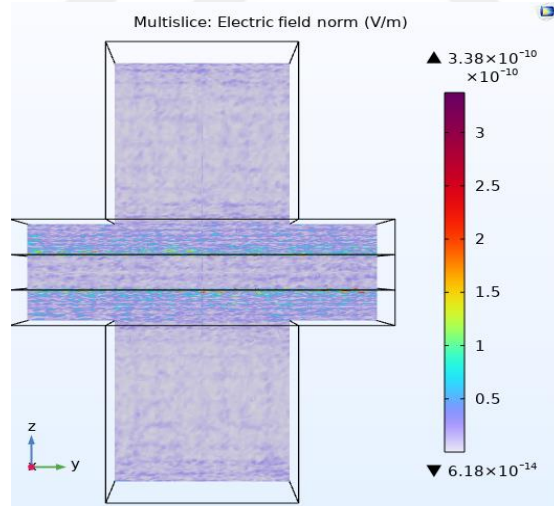
Kaplamasız yüzeyin elektrik alan normu $6,18 \times 10^{-14} - 3,38 \times 10^{-10}$ V/m aralığında değişmektedir, dağılımın düzensiz ve düşük yoğunlukta olduğu gözlemlenmiştir. Belirli

bölgelerde alanın yoğunlaşmasında dolayı yük birikimine ve elektriksel verimsizliğe neden olabilir. Bu durum yüzey performansını olumsuz etkiler (Şekil 6.83).

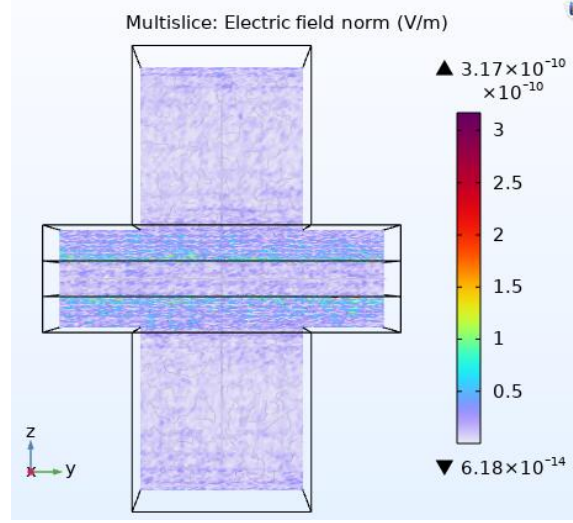
Platinyum kaplamalı yüzeyde, maksimum elektrik alan değeri $3,17 \times 10^{-10}$ V/m'ye düşmüştür. Dağılım daha homojen ve dengeli hale gelmiştir. Pt'nin yüksek iletkenliği sayesinde yüzeydeki yük yoğunlaşmaları azaltılmış, böylece elektriksel stabilite artmıştır. (Şekil 6.84).

Molibden dopingi uygulanmış Pt kaplamalı yüzeyde ise maksimum değer $3,03 \times 10^{-10}$ V/m'ye, minimum değer $2,78 \times 10^{-14}$ V/m'ye kadar düşmüştür. Bu yapı, platinyum kaplamaya benzer bir dağılım sunmaktadır. Daha düşük alan yoğunluklarıyla daha dengeli bir elektriksel yapı sağlamaktadır. Bu durum yük dağılımının daha verimli yönetildiğini ve elektriksel güvenilirliğin arttığını göstermektedir (Şekil 6.85).

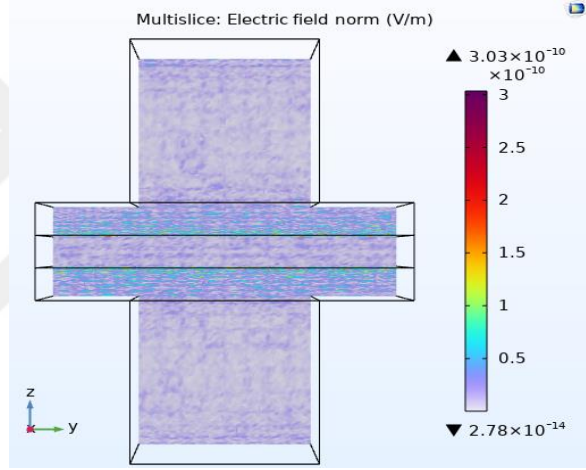
Sonuç olarak, kaplamasız yüzey yüksek düzensizlik ve yük birikimiyle risk taşır, Pt kaplama elektrik alanı dengeler. En düşük alan yoğunluğu ve en istikrarlı dağılım, molibden dopingi uygulanmış Pt kaplamalı yüzeyde elde edilmiştir. Bu yapı, yüksek iletkenlik ve düşük kayıp gerektiren uygulamalar için en verimli ve en kullanışlı çözümdür.



Şekil 6.83. Doping uygulanmamış ve kaplamasız elektrik alan normu



Şekil 6.84. Doping uygulanmamış ve platinyum kaplamalı elektrik alan normu



Şekil 6.85. Molibden dopingi uygulanmış ve platinyum kaplamalı elektrik alan normu

Enerji dengesi analizi Tablo 6.8’de yapılmıştır. Kaplamasız yüzeyde enerji dengesi $2,94 \times 10^{-12}$ W, net enerji oranı $2,87 \times 10^{-12}$ W ve toplam ısı kaynağı $-6,60 \times 10^{-14}$ W olarak ölçülmüştür. Bu değerler sistemin enerji açısından oldukça kararlı olduğunu gösterse de düşük ısı aktarımı nedeniyle termal performans zayıf kalmaktadır.

Tablo 6.8. Kaplamasız, Pt kaplamalı ve Mo dopingi uygulanmış Pt kaplamalı enerji dengesi karşılaştırılması

Durum	Enerji Dengesi (W)	Toplam Net Enerji (W)	Toplam İş Kaynağı (W)	Toplam Isı Kaynağı (W)
Kaplamasız ve Dopingsiz	2,939600E-12	2,873600E-12	0,000000E+00	-6,600100E-14
Platinyum Kaplamalı	-1,822000E-01	4,292400E-02	0,000000E+00	2,251200E-01
Mo Dopingli Pt Kaplama	5,438700E-13	-3,872700E-14	0,000000E+00	-5,826000E-13

Dopingsiz platinyum kaplamalı yüzeyde enerji dengesi $-0,18220$ W, net enerji oranı $0,04292$ W ve toplam ısı kaynağı $0,22512$ W olarak belirlenmiştir. Enerji dengesindeki negatiflik ve artan ısı kaynağı değeri, platinyum kaplamanın termal iletkenliği artırarak sistemi daha yüksek enerji geçişlerine açık hale getirdiğini göstermektedir. Bu durum, sistemin daha aktif ısı transferine sahip olduğunu ve yüksek sıcaklık uygulamaları için uygunluk sunduğunu işaret etmektedir.

Molibden dopingi uygulanmış platinyum kaplamalı yüzeyde ise enerji dengesi $5,44 \times 10^{-13}$ W, net enerji oranı $-3,87 \times 10^{-14}$ W ve toplam ısı kaynağı $-5,83 \times 10^{-13}$ W olarak gözlenmiştir. Bu yapı, enerji açısından en kararlı sonuçlardan birini verse de pozitif enerji üretimi beklenen sistemler için ısı verimliliği sınırlı kalabilir.

900 °C çalışma sıcaklığında hidrojen yakıtlı katı oksit yakıt hücrelerinde (KOYP) kaplamasız yüzey, dopingsiz platinyum kaplamalı yüzey ve molibden dopingi uygulanmış platinyum kaplamalı yüzey olmak üzere üç farklı yapı Tablo 6.9’da değerlendirilmiştir. Her biri, su buharı akışı, hız büyüklüğü, hücre voltajı, güç yoğunluğu, Von Mises gerilmesi, yer değiştirme, sıcaklık dağılımı, elektrik alan normu ve enerji dengesi gibi performans kriterlerine göre analiz edilmiştir.

Tablo 6.9. Kaplamasız, Pt kaplamalı ve Mo dopingi uygulanmış Pt kaplamalı değerlendirme kriterleri

Değerlendirme Kriteri	Kaplamasız ve Dopingsiz	Platinyum Kaplamalı	Mo Dopingli Pt Kaplama
<i>H₂O Akış Homojenliği</i>	Düzensiz, türbülanslı	Daha düzenli ama hâlâ yoğunluk farkı	En homojen, kontrollü yönlendirme
<i>Hız Dağılımı</i>	Merkezde yoğun, kenarlarda zayıf	Daha homojen	En dengeli ve homojen
<i>Akım Yoğunluğu (Yüksek Akımda)</i>	18.424 A/m ²	18424 A/m ²	$18.457,3$ A/m ²
<i>Hücre Gücü</i>	$5.536,6$ W/m ²	$5.536,6$ W/m ²	$5.596,6$ W/m ²
<i>Von Mises Gerilmesi</i>	$4,0 \times 10^8$ N/m ² , dengesiz	$3,5 \times 10^9$ N/m ² , homojen	$1,0 \times 10^9$ N/m ² , dengeli
<i>Yer Değiştirme</i>	$0,02$ m, düzensiz	$0,02$ m, daha dengeli	$1,69 \times 10^{-2}$ m, minimum
<i>Termal Dağılım</i>	$1,17 \times 10^3$ K, heterojen	$2,08-2,12 \times 10^3$ K, homojen	$2,09-2,13 \times 10^3$ K, optimum
<i>Elektrik Alan Dağılımı</i>	Düzensiz, yüksek yoğunluk farkı	Daha dengeli	En düşük yoğunluk ve dengeli
<i>Enerji Dengesi</i>	Kararlı ama düşük ısı aktarımı	Yüksek ısı aktarımı, aktif sistem	Kararlı, düşük ısı aktarımı

Kaplamasız ve dopingsiz yapı, akış düzensizliği, yüksek yer değiştirme ve düşük akım yoğunluğu ile en düşük verimi sunmuştur. Sadece platinyum kaplamalı yüzey, akış ve hız dağılımında iyileşme sağlamıştır, yüksek Von Mises gerilmesi ve sınırlı voltaj stabilitesi nedeniyle mekanik ve elektriksel açıdan sınırlı katkı sunmuştur. Buna karşılık, molibden dopingi uygulanmış platinyum kaplamalı yüzey, hem elektrokimyasal

performansta (yüksek akım yoğunluğu ve güç çıktısı), hem de mekanik ve termal dayanımda (düşük yer değiştirme, dengeli gerilme dağılımı ve homojen ısı transferi) üstün sonuçlar vermiştir. Ayrıca, elektrik alan ve enerji dengesi bakımından da en stabil ve verimli yapı olarak öne çıkmıştır. Bu bulgular doğrultusunda, Mo dopingi uygulanmış Pt kaplamalı yüzeylerin, yüksek sıcaklık ve uzun süreli dayanım gerektiren KOYP uygulamaları için en uygun ve etkin çözüm olduğu sonucuna varılmıştır.



7. SONUÇ VE ÖNERİLER

Günümüzde artan enerji ihtiyacı ve iklim değişikliği gibi çevresel tehditler, temiz, sürdürülebilir ve yüksek verimli enerji üretim teknolojilerine olan ilgiyi giderek artırmaktadır. Bu doğrultuda, fosil yakıtların neden olduğu çevresel tahribatı en aza indirirken, yüksek dönüşüm verimliliği sağlayan yakıt pilleri, geleceğin enerji sistemlerinde stratejik bir rol üstlenmektedir. Kimyasal enerjiyi doğrudan elektrik enerjisine dönüştürebilmeleri sayesinde, yakıt pilleri Carnot çevrimi sınırlamalarına tabi olmadan çalışarak termodinamik verim kayıplarını önemli ölçüde azaltmaktadır. Hidrojen yakıtı çevre dostu yakıtlarla çalışabilmeleri ve modüler yapılarıyla hem taşınabilir hem de sabit sistemlere kolay entegrasyon sağlamaları, bu teknolojileri enerji dönüşüm alanında ön plana çıkarmaktadır. Bununla birlikte, sistemin maliyet etkinliğini artırmak, dayanıklılığını ve verimliliğini geliştirmek amacıyla yürütülen yüzey mühendisliği temelli iyileştirme çalışmaları, yakıt pillerinin yaygınlaştırılmasında anahtar rol oynamaktadır. Bu çalışmada elektrot yüzeylerinin fonksiyonel ince film kaplamalar ve hedeflenmiş katkı elementleriyle optimize edilmesinin, katı oksit yakıt pillerinin performans ve ömür parametrelerine olan etkisini detaylı olarak ortaya koymaktadır.

Hidrojen yakıtlı katı oksit yakıt pillerinin anot ve katot yüzeylerine uygulanan fonksiyonel ince film kaplamalarının sistem performansı üzerindeki etkilerini çoklu fiziksel etkileşimleri dikkate alarak incelemiştir. Yüksek sıcaklıklarda çalışan KOYP sistemlerinde, ince film kaplamaların yüzey reaksiyon kinetiğini hızlandırarak hücre verimliliğini artırdığı; aynı zamanda elektrot-elektrolit arayüzünde iyon ve elektron taşınımını iyileştirerek hücre kararlılığına katkı sağladığı gözlemlenmiştir. COMSOL Multiphysics platformu kullanılarak gerçekleştirilen detaylı sayısal analizler, farklı kaplama kombinasyonlarının ve doping katkılarının; elektriksel iletkenlik, sıcaklık dağılımı, gerilme durumu ve enerji verimliliği gibi çok sayıda parametre üzerindeki etkisini ortaya koymuştur. Böylece hem malzeme davranışlarının anlaşılmasına katkı sağlanmış hem de elektrot yapılarının verimlilik, dayanıklılık ve uzun ömür gibi hedeflere uygun şekilde yeniden tasarlanması yönünde önemli bir bilgi altyapısı sunulmuştur.

Bu çalışmada, hidrojen yakıtlı katı oksit yakıt hücrelerinde (KOYP) anot, katot ve elektrolit yüzeylerine uygulanan %10 molibden (Mo) ve tungsten (W) katkıları ile platin (Pt) ve paladyum (Pd) ince film kaplamalarının çoklu fiziksel modüllerle kapsamlı bir şekilde analiz edildiği özgün bir yaklaşıma sahiptir. Literatürde genellikle tek yönlü

kaplama ya da doping uygulamaları üzerinden gidilirken, bu çalışmada farklı sıcaklık koşulları altında (800 °C, 900 °C, 1000 °C) elektrokimyasal, termal, mekanik ve akışkan modülleri eş zamanlı değerlendirilmiştir. Bu yönüyle sistemin çok boyutlu tepkisi bütüncül bir disiplinler arası yaklaşımla ele alınmıştır. Özellikle hem katot hem anot hem de elektrolit bölgelerine ayrı ayrı ve kombine şekilde yüzey modifikasyonları uygulanarak, bu bölgelerin birbirleriyle etkileşimi detaylı biçimde modellenmiş ve daha önce sınırlı biçimde değerlendirilen potansiyel dağılımı, gaz difüzyonu, akım yoğunluğu, sıcaklık profili, von Mises gerilmesi ve enerji dengesi gibi parametrelerin etkileri sayısal olarak ortaya konmuştur.

Bu çalışma kapsamında, hidrojen yakıtlı katı oksit yakıt pilleri (KOYP) için uygun malzeme seçimi, ince film kaplama türleri ve doping katkıları detaylı bir literatür taraması ile değerlendirilmiştir. Ardından çoklu fizik modelleme yöntemiyle performans analizi gerçekleştirilmiştir. Öncelikli olarak 800 °C, 900 °C ve 1000 °C sıcaklıklarında yapılan simülasyonlarda; elektrot ve elektrolit potansiyeli, hidrojen (H₂) ve oksijen (O₂) mol fraksiyonları, anot ve katot tarafındaki basınç ve hız profilleri, polarizasyon eğrileri, akım yoğunluğu-güç ilişkisi, elektrolit akım yoğunluğu ve aşırı gerilim değerleri karşılaştırılmıştır. Yapılan kapsamlı analizler sonucunda, 900 °C sıcaklık seviyesi; iyon iletkenliği, gaz taşınımı, potansiyel homojenliği, akım yoğunluğu ve güç üretimi gibi temel performans kriterleri açısından en dengeli ve optimum koşulları sağlamaktadır. Elde edilen bulgular, 900 °C sıcaklıkta yaklaşık 0 voltajda 22.623 A/m² maksimum akım yoğunluğuna, 0,5 voltajda ise 5536 W/m² maksimum güç yoğunluğu ile sistemin en verimli şekilde çalıştığını göstermiştir.

Bu temel üzerine, sistemde fonksiyonel yüzey kaplama analizlerine geçilerek platinyum ve paladyum ince film kaplamalarının mekanik, termal ve elektriksel davranışları değerlendirilmiştir. Katı mekaniği, ısı transferi ve elektrik akımı modülleri tanımlanarak gerçekleştirilen analizlerde; von Mises gerilme dağılımı, yer değiştirme büyüklükleri, sıcaklık gradyanı, elektrik alan normu, elektromanyetik hacimsel kayıp ve enerji dengesi gibi parametreler detaylı şekilde incelenmiştir. İnce film kaplamalar, kaplamasız yüzeylere kıyasla mekanik, termal ve elektriksel performansı belirgin şekilde iyileştirmiştir. Kaplamalar, gerilme ve sıcaklık dağılımını homojenleştirerek yapısal stabiliteyi artırmış, elektriksel kararlılığı sağlamış ve elektromanyetik kayıpları azaltmıştır. Enerji dengesi verilerine göre platinyum, paladyuma kıyasla daha yüksek net enerji oranı ve ısı transferi sunarak en verimli seçenek olarak öne çıkmıştır. Bu nedenle,

maksimum performans ve uzun ömür hedeflendiğinde platinyum kaplama en uygun tercih olarak değerlendirilmiştir.

Verimliliği artırmak ve performansı daha da optimize etmek adına, platin kaplamalı yapılara sırasıyla molibden (Mo) ve tungsten (W) doping katkıları uygulanmıştır. Bu kapsamda; elektrot-elektrolit potansiyel farkları, H₂ ve N₂ taşınımı, O₂ mol fraksiyonu, akış hızları, basınç dağılımları, izoyüzey sıcaklıkları, elektrik alan dağılımı, elektromanyetik kayıplar, enerji dengesi, elektrolit akım yoğunluğu ve elektrokimyasal reaksiyon verimi gibi kritik parametreler çok yönlü olarak karşılaştırılmıştır. 900 °C çalışma sıcaklığında yapılan karşılaştırmalı analizlere göre, molibden (Mo) ve tungsten (W) dopingleri farklı parametrelerde öne çıkmaktadır. Mo, elektrot ve elektrolit potansiyelinde daha homojen dağılım, düşük gerilme, düzenli ısı profili, geniş elektrik alan iletimi ve düşük enerji kaybı gibi avantajlar sunmuştur. W ise yönlü iyon ve gaz taşınımı, agresif reaksiyon yönetimi, yüksek sıcaklık stabilitesi ve yüksek akım yoğunluklarında voltaj kontrolüyle öne çıkmıştır. Enerji sapması, akım ve potansiyel dağılımları gibi temel parametreler ışığında, Mo daha dengeli ve verimli bir sistem sunarken, W daha yüksek performanslı ancak yerel yoğunlaşmalara neden olan bir yapı sağlamıştır. Tüm bu parametrelerin eş zamanlı olarak değerlendirilmesi sonucunda, 900 °C sıcaklıkta hem anot hem de katot yüzeylerine molibden dopingi uygulanmış platinyum kaplamalı KOYP sisteminin; yüksek güç yoğunluğu, düşük enerji kaybı, kararlı sıcaklık ve gerilme dağılımı ile en uygun yapı konfigürasyonu olduğu sonucuna varılmıştır.

Bu tez kapsamında gerçekleştirilen tüm analizler, COMSOL Multiphysics yazılımı kullanılarak çoklu fiziksel etkileşimleri temel alan sayısal modelleme yöntemiyle gerçekleştirilmiştir. Ancak elde edilen teorik bulguların deneysel olarak doğrulanması, sonuçların geçerliliğini pekiştirmek ve uygulama potansiyelini artırmak açısından büyük önem arz etmektedir. Uygun maddi ve teknik imkanların sağlanması halinde, mikro düzeyde yapısal ve yüzey karakterizasyonunun sağlanması amacıyla SEM, EDX, AFM ve XRD gibi ileri düzey analiz tekniklerinin kullanıldığı laboratuvar tabanlı deneysel çalışmalar önerilmektedir. Ayrıca, ince film kaplamaların üretimi için serigrafi baskı, püskürtme kaplama, daldırma kaplama, spin kaplama ve fiziksel buhar biriktirme gibi gelişmiş yöntemlerin kullanılması, kaplama homojenliğini artırarak yüzey mühendisliği süreçlerini optimize edecektir. Bu doğrultuda geliştirilen prototiplerin teknik ve ekonomik performanslarının değerlendirilmesi amacıyla kapsamlı bir maliyet analizi

gerçekleştirilerek endüstriyel düzeyde projelendirme yapılması önerilmektedir. Böylece, sayısal modelleme ile ulaşılan sonuçlar, fiziksel sistemlerle karşılaştırılarak çok boyutlu bir doğrulama sağlanabilir.

Buna ek olarak, bu çalışmada ayrı ayrı değerlendirilen molibden (Mo) ve tungsten (W) katkı elementlerinin birlikte uygulandığı hibrit doping yapılarına yönelik çalışmalar hem iyon taşınımı hem de mekanik kararlılık açısından potansiyel sinerjik etkilerin ortaya konması açısından önem arz etmektedir. Benzer şekilde, platinyum (Pt) ve paladyum (Pd) kaplamalarının birlikte uygulanmasıyla oluşturulabilecek çift katmanlı veya alaşım temelli ince film yapılarının, yüzey reaksiyon kinetiğini artırarak elektrot-elektrolit arayüzünde daha düşük direnç ve daha yüksek reaksiyon hızı sağlayabileceği düşünülmektedir. Bu tür çift metal kaplama stratejileri, KOYP sistemlerinin elektro-kimyasal performansını daha da optimize etmek amacıyla gelecekteki çalışmalarda dikkate alınması gereken yenilikçi bir yaklaşım olarak değerlendirilmektedir.

KAYNAKÇA

- [1] International Energy Agency (IEA). (2023). World Energy Outlook 2023. <https://www.iea.org/reports/world-energy-outlook-2023> (Eriřim tarihi: 20.09.2024)
- [2] British Petroleum. (2023). *Statistical Review of World Energy 2023*. BP p.l.c. https://www.bp.com/en/global/corporate/energy_economics/statistical-review-of-world-energy.html (Eriřim tarihi: 20.09.2024)
- [3] REN21. (2023). Renewables 2023 Global Status Report. Renewable Energy Policy Network for the 21st Century. <https://www.ren21.net/reports/global-status-report/> (Eriřim tarihi: 20.09.2024)
- [4] Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC). (2021). Climate Change 2021: The Physical Science Basis. <https://www.ipcc.ch/report/ar6/wg1/> (Eriřim tarihi: 21.09.2024)
- [5] United Nations. (2019). Transforming our world: The 2030 Agenda for Sustainable Development. <https://sdgs.un.org/2030agenda> (Eriřim tarihi: 21.09.2024)
- [6] ExxonMobil. (2022). Outlook for Energy: A View to 2050. <https://corporate.exxonmobil.com/Energy-and-innovation/Outlook-for-Energy> (Eriřim tarihi: 21.09.2024)
- [7] Akyüz, A. (2004). Yakıt pili teknolojisinin tarihçesi ve geliřimi. *Enerji Teknolojileri Dergisi*, 14(2), 45–52.
- [8] Appleby, A. J. (1993). *Fuel Cell Handbook*. New York: Van Nostrand Reinhold.
- [9] Larminie, J. ve Dicks, A. (2003). *Fuel Cell Systems Explained* (2. baskı). Chichester: John Wiley & Sons.
- [10] Barbir, F. (2005). *PEM Fuel Cells: Theory and Practice*. Burlington: Elsevier Academic Press.
- [11] Mench, M. M. (2008). *Fuel Cell Engines*. Hoboken: John Wiley & Sons.
- [12] U.S. Department of Energy, National Energy Technology Laboratory. (2004). *Fuel Cell Handbook* (6th ed.).
- [13] Minh, N. Q. (1993). Ceramic fuel cells. *Journal of the American Ceramic Society*, 76(3), 563–588.
- [14] Steele, B. C. H. (2000). Materials for IT-SOFC stacks: 30 years R&D—The inevitability of gradualness? *Solid State Ionics*, 134(1–2), 3–20.
- [15] Singhal, S. C. ve Kendall, K. (2003). *High-Temperature Solid Oxide Fuel Cells: Fundamentals, Design and Applications*. Amsterdam: Elsevier.

- [16] Fergus, J. W. (2006). Electrolytes for solid oxide fuel cells *Journal of Power Sources*, 162(1), 30–40.
- [17] Steele, B. C. H. ve Heinzl, A. (2001). Materials for fuel-cell technologies. *Nature*, 414(6861), 345–352.
- [18] Kordesch, K. ve Simader, G. (1996). *Fuel Cells and Their Applications*. New York: VCH Publishers.
- [19] Ormerod, R. M. (2003). Solid oxide fuel cells. *Chemical Society Reviews*, 32(1), 17–28.
- [20] Bauen, A. ve Hart, D. (2000). Assessment of the environmental benefits of transport and stationary fuel cells. *Journal of Power Sources*, **86(1–2), 482–494.
- [21] Selman, J. R. (1993). Fuel cells: Current status and future prospects *Chemical Engineering Progress*, 89(1), 62–71.
- [22] Elmer, T., Worall, M., Wu, S. ve Riffat, S. B. (2015). The design and operation of solid oxide fuel cells: Materials and challenges. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 47, 80–97.
- [23] Kurokawa, H., Hashimoto, S. ve Yamaguchi, T. (2004). High temperature oxidation behavior of Inconel alloys. *Corrosion Science*, 46(1), 77–89.
- [24] Jiang, S. P. (2003). A review of w impregnation—An alternative method for the fabrication of high performance and nano-structured electrodes of solid oxide fuel cells. *Materials Science and Engineering: A*, 361(1–2), 48–65. [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(03\)00572-1](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(03)00572-1)
- [25] Matsuzaki, Y. ve Yasuda, I. (2001). Electrochemical properties of a SOFC anode with catalyst layers. *Solid State Ionics*, 152–153, 463–468.
- [26] Bove, R. ve Ubertini, S. (2008). *Modeling Solid Oxide Fuel Cells*. New York: Nova Science Publishers.
- [27] Lehnert, W., Meusinger, J. ve Thom, F. (1999). Modelling of gas diffusion electrodes in phosphoric acid fuel cells. *Journal of Applied Electrochemistry*, 29(9), 993–1001.
- [28] Möbius, H. (2003). Materials for high-temperature fuel cells. *Advanced Engineering Materials*, 5(5), 323–330.

- [29] Riess, I. (1997). Solid electrolyte devices. In C. G. Vayenas (Ed.), *Solid State Electrochemistry* (ss. 76–83). Berlin: Springer.
- [30] Carrette, L., Friedrich, K. A. ve Stimming, U. (2001). Fuel cells—Fundamentals and applications. *Fuel Cells*, 1(1), 5–39.
- [31] Ivers-Tiffée, E. ve Weber, A. (2001). Materials and technologies for SOFC-components. *Journal of the European Ceramic Society*, 21(10–11), 1805–1811.
- [32] Zhan, Z. ve Barnett, S. A. (2005). Anode-supported tubular SOFCs fabricated by spray deposition. *Journal of Power Sources*, 143(1–2), 90–94.
- [33] Steele, B. C. H. (1996). Appraisal of $\text{Ce}_{1-\gamma}\text{Gd}_\gamma\text{O}_{2-\gamma/2}$ electrolytes for IT-SOFC operation at 500 °C. *Solid State Ionics*, 86–88, 1223–1234.
- [34] Liu, M. ve Vohs, J. M. (2002). Anodes for direct oxidation of hydrocarbons in solid oxide fuel cells. *Journal of Power Sources*, 105(2), 228–234.
- [35] Haanappel, V. A. C., de Haart, L. G. J., Ivers-Tiffée, E., Stöver, D. ve Sebold, D. (2005). Degradation phenomena in solid oxide fuel cells and their interconnects. *Journal of Power Sources*, 141(2), 216–226.
- [36] Kharton, V. V., Yaremchenko, A. A. ve Marques, F. M. B. (2001). Mixed ionic–electronic conducting perovskites for advanced energy systems. *Journal of Materials Science*, 36(5), 1105–1117.
- [37] Ni, M., Leung, D. Y. C. ve Leung, M. K. H. (2007). Parametric study of solid oxide fuel cell performance. *Energy Conversion and Management*, 48(5), 1525–1535.
- [38] Brett, D. J. L., Atkinson, A., Brandon, N. P. ve Skinner, S. J. (2008). Intermediate temperature solid oxide fuel cells. *Chemical Society Reviews*, 37(8), 1568–1578.
- [39] Singhal, S. C. (2000). Advances in solid oxide fuel cell technology. *Solid State Ionics*, 135(1–4), 305–313. [https://doi.org/10.1016/S0167-2738\(00\)00318-2](https://doi.org/10.1016/S0167-2738(00)00318-2)
- [40] Fergus, J. W. (2007). Electrode materials for solid oxide fuel cells. *Journal of Power Sources*, 162(1), 30–40. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2006.06.062>
- [41] Huang, Y. ve Goodenough, J. B. (2009). Superior perovskite oxide anodes for low-temperature SOFCs. *Journal of Solid State Chemistry*, 182(11), 3131–3136. <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2009.08.024>

- [42] Eguchi, K., Kojo, H., Arai, H., Sano, M. ve Takahashi, H. (1997). Development of direct hydrocarbon SOFCs. *Solid State Ionics*, 100(1–2), 71–77. [https://doi.org/10.1016/S0167-2738\(97\)00269-3](https://doi.org/10.1016/S0167-2738(97)00269-3)
- [43] Palsson, J., Selimovic, A. ve Sjunnesson, L. (2000). Combined SOFC and gas turbine systems for efficient power and heat generation. *Journal of Power Sources*, 86(1–2), 442–448. [https://doi.org/10.1016/S0378-7753\(99\)00416-8](https://doi.org/10.1016/S0378-7753(99)00416-8)
- [44] Shao, Z. ve Haile, S. M. (2004). A high-performance cathode for the next generation of solid-oxide fuel cells. *Nature*, 431(7005), 170–173. <https://doi.org/10.1038/nature02863>
- [45] Jiang, S. P. (2006). Development of lanthanum strontium cobalt ferrite perovskite electrodes of solid oxide fuel cells – A review. *International Journal of Hydrogen Energy*, 31(4), 371–385. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2005.04.034>
- [46] Fergus, J. W. (2005). Metallic interconnects for solid oxide fuel cells. *Materials Science and Engineering: A*, 397(1–2), 271–283. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2005.02.046>
- [47] Brandon, N. P. ve Skinner, S. J. (2002). Materials for intermediate temperature SOFCs. *Journal of Materials Chemistry*, 12(7), 2081–2090. <https://doi.org/10.1039/B201181N>
- [48] Blum, L. ve Kostler, H. (2007). Oxidation and corrosion of metals used in SOFC interconnects. *Fuel Cells*, 7(5), 333–346. <https://doi.org/10.1002/fuce.200600068>
- [49] Steele, B. C. H. (2001). Appraisal of $\text{Ce}_{1-y}\text{Gd}_y\text{O}_{2-y/2}$ electrolytes for IT-SOFC operation at 500 °C. *Solid State Ionics*, 86–88, 1223–1234. [https://doi.org/10.1016/S0167-2738\(96\)00506-4](https://doi.org/10.1016/S0167-2738(96)00506-4)
- [50] Iwata, M., Yashiro, K. ve Kawada, T. (2002). Effect of porosity on performance of anode-supported SOFC. *Journal of Power Sources*, 112(2), 583–588. [https://doi.org/10.1016/S0378-7753\(02\)00451-7](https://doi.org/10.1016/S0378-7753(02)00451-7)
- [51] Adler, S. B. (2004). Factors governing oxygen reduction in solid oxide fuel cell cathodes. *Chemical Reviews*, 104(10), 4791–4844. <https://doi.org/10.1021/cr020724o>
- [52] Takahashi, T. ve Iwahara, H. (1979). Perovskite-type oxide cathodes for high-temperature fuel cells. *Solid State Ionics*, 3–4, 265–270. [https://doi.org/10.1016/0167-2738\(79\)90045-2](https://doi.org/10.1016/0167-2738(79)90045-2)

- [53] Shen, S. ve Zhang, Y. (2012). Recent advances and challenges in cathode contact materials for solid oxide fuel cells. *Journal of Power Sources*, 213, 47–55. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2012.03.004>
- [54] Yamamoto, O. (2000). Solid oxide fuel cells: Fundamental aspects and prospects. *Electrochimica Acta*, 45(15–16), 2423–2435. [https://doi.org/10.1016/S0013-4686\(00\)00329-8](https://doi.org/10.1016/S0013-4686(00)00329-8)
- [55] Huang, K. ve Goodenough, J. B. (2009). *Solid Oxide Fuel Cell Technology: Principles, Performance and Operations*. Cambridge: Woodhead Publishing.
- [56] Fergus, J. W. (2005). Seal materials for solid oxide fuel cells. *Journal of Power Sources*, 147(1–2), 46–57. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2005.01.027>
- [57] Lee, J. H., Vohs, J. M., & Gorte, R. J. (2002). A novel method for preparing SOFC interconnects. *Journal of the Electrochemical Society*, 149(9), A1232–A1236. <https://doi.org/10.1149/1.1494432>
- [58] Kurokawa, H., Hashimoto, S., & Yamaguchi, T. (2004). High temperature oxidation behavior of Inconel 625 in air and wet atmosphere. *Corrosion Science*, 46(1), 77–89. [https://doi.org/10.1016/S0010-938X\(03\)00156-3](https://doi.org/10.1016/S0010-938X(03)00156-3)
- [59] Davis, J. R. (Ed.). (2000). *Nickel, Cobalt, and Their Alloys*. Materials Park, OH: ASM International. ISBN: 978-0871706850
- [60] Zhu, W. Z., & Deevi, S. C. (2003). Development of interconnect materials for solid oxide fuel cells. *Materials Science and Engineering: A*, 348(1–2), 227–243. [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(02\)00787-4](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(02)00787-4)
- [61] Elangovan, S., & Pal, U. B. (2004). Ferritic stainless steels as interconnect materials for solid oxide fuel cells. *Journal of Materials Science*, 39(16–17), 5625–5631. <https://doi.org/10.1023/B:JMSC.0000041683.37926.2a>
- [62] Jacobson, C. P., Visco, S. J., & De Jonghe, L. C. (2003). Permeation of hydrogen and oxygen through dense SOFC interconnect materials. *Journal of The Electrochemical Society*, 150(5), A706–A709. <https://doi.org/10.1149/1.1566964>
- [63] Yang, Z., Stevenson, J. W., & Singh, P. (2005). Seal development for solid oxide fuel cells: Materials and design strategies. *Journal of Power Sources*, 152, 122–129. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2005.05.068>
- [64] Marina, O. A., Pederson, L. R. ve Stevenson, J. W. (2003). Sintering behavior and mechanical properties of sealing glasses for SOFC. *Journal of the American*

Ceramic Society, 86(6), 998–1004. <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.2003.tb03416.x>

- [65] Chou, Y. S., & Stevenson, J. W. (2007). Effects of glass composition and thermal cycling on sealing performance. *International Journal of Hydrogen Energy*, 32(15), 3672–3680. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2006.02.017>
- [66] Singhal, S. C. ve Kendall, K. (2003). *High-Temperature Solid Oxide Fuel Cells: Fundamentals, Design and Applications*. Amsterdam: Elsevier.
- [67] Barbir, F. (2013). *PEM Fuel Cells: Theory and Practice* (2. baskı). Oxford: Academic Press.
- [68] O'Hayre, R., Cha, S.-W., Colella, W. ve Prinz, F. B. (2016). *Fuel Cell Fundamentals* (3. baskı). Hoboken: Wiley.
- [69] Bose, S., Bhattacharyya, D., & Basu, R. (2012). *Challenges and opportunities in materials development for SOFCs*. *Journal of Materials Science*, 47(19), 7273–7290. <https://doi.org/10.1007/s10853-012-6575-0>
- [70] Züttel, A. (2004). *Hydrogen storage methods*. *Naturwissenschaften*, 91(4), 157–172. <https://doi.org/10.1007/s00114-004-0516-x>
- [71] Melaina, M. W. ve Penev, M. (2013). *Hydrogen Infrastructure Market Readiness*. Golden, CO: National Renewable Energy Laboratory (NREL), Rapor No: TP-5400-55961.
- [72] Fergus, J. W. (2006). *Electrode materials for solid oxide fuel cells*. *Solid State Ionics*, 177(17–18), 1529–1541. <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2006.04.010>
- [73] COMSOL Inc. (2021). *COMSOL Multiphysics® Kullanıcı Kılavuzu*. Burlington, MA, USA.
- [74] Zeng, Y., Zhang, Y., Liu, J., & Chen, Y. (2019). *Modeling and simulation of SOFCs using COMSOL Multiphysics*. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(32), 17331–17342. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.05.151>
- [75] Choi, S., Sim, W., Kim, H., & Lim, T. H. (2017). *Design of multilayered cathodes with functional films for enhanced SOFC performance*. *Journal of Power Sources*, 342, 855–861. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2016.12.078>
- [76] Zhu, W. Z., & Deevi, S. C. (2003). *A review on the status of anode materials for SOFCs*. *Materials Science and Engineering: A*, 362(1–2), 228–239. [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(03\)00603-0](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(03)00603-0)

- [77] Jiang, S. P. (2008). *Development of lanthanum strontium manganite perovskite cathode materials of solid oxide fuel cells: A review*. *Journal of Materials Science*, 43(21), 6799–6833. <https://doi.org/10.1007/s10853-008-2894-5>
- [78] Jiang, S. P., & Hao, L. (2007). *Lanthana-strontium-cobalt-ferrite-based cathode materials for solid oxide fuel cells*. *Journal of Power Sources*, 169(1), 153–161. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2007.01.016>
- [79] Wang, S., Xie, K., Meng, G. ve Lu, Y. (2004). Samaria-doped ceria as electrolyte and electrode material for intermediate-temperature solid oxide fuel cells. *Journal of Power Sources*, 133(2), 240–244. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2004.02.040>
- [80] Fergus, J. W. (2006). *Electrode materials for solid oxide fuel cells*. *Solid State Ionics*, 177(17–18), 1529–1541. <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2006.04.010>
- [81] Huang, Y. H., Goodenough, J. B. ve Huang, C. L. (2001). LaCrO₃-based perovskites for SOFC anode with superior carbon tolerance. *Journal of The Electrochemical Society*, 148(7), A788–A794. <https://doi.org/10.1149/1.1377139>
- [82] Wang, W., et al. (2010). *Gadolinium-doped ceria as a functional material in intermediate-temperature solid oxide fuel cells*. *Journal of Power Sources*, 195(1), 145–150. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2009.08.017>
- [83] Jiang, S. P. (2006). *Development of lanthanum strontium manganite perovskite cathodes of solid oxide fuel cells – A review*. *International Journal of Hydrogen Energy*, 31(4), 377–389. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2005.07.021>
- [84] Steele, B. C. H., & Heinzel, A. (2001). *Materials for fuel-cell technologies*. *Nature*, 414(6861), 345–352. <https://doi.org/10.1038/35106634>
- [85] Huang, K. ve Goodenough, J. B. (2001). *Solid Oxide Fuel Cell Technology: Principles, Performance and Operations*. Oxford: Elsevier.
- [86] Park, S., Vohs, J. M. ve Gorte, R. J. (2000). Performance of GDC-based electrolytes for low-temperature SOFCs. *Journal of Power Sources*, 97–98, 56–60. [https://doi.org/10.1016/S0378-7753\(01\)00544-1](https://doi.org/10.1016/S0378-7753(01)00544-1)
- [87] Ishihara, T., Matsuda, H. ve Takita, Y. (1994). LaGaO₃-based oxide ion conductors for SOFCs. *Journal of the Electrochemical Society*, 141(11), 3069–3073. <https://doi.org/10.1149/1.2059255>

- [88] Sammes, N. M., et al. (1999). *Bismuth based oxide electrolytes – structure and properties*. *Solid State Ionics*, 126(1–2), 63–70. [https://doi.org/10.1016/S0167-2738\(99\)00253-4](https://doi.org/10.1016/S0167-2738(99)00253-4)
- [89] Iwahara, H. (1996). *Proton conducting ceramics and their applications*. *Solid State Ionics*, 86–88, 9–15. [https://doi.org/10.1016/0167-2738\(96\)00004-0](https://doi.org/10.1016/0167-2738(96)00004-0)
- [90] Jiang, S. P. (2008). *Development of lanthanum strontium manganite perovskite cathodes of solid oxide fuel cells – A review*. *International Journal of Hydrogen Energy*, 33(20), 5871–5880. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2008.07.067>
- [91] Virkar, A. V. (2000). *Mechanism of oxygen electrode delamination in solid oxide electrolyzer cells*. *International Journal of Hydrogen Energy*, 35(2), 952–964. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2009.11.086>
- [92] Gorte, R. J., & Vohs, J. M. (2003). Novel SOFC anodes for the direct oxidation of hydrocarbons. *Journal of Catalysis*, 216(1–2), 477–486. [https://doi.org/10.1016/S0021-9517\(02\)00074-6](https://doi.org/10.1016/S0021-9517(02)00074-6)
- [93] Minh, N. Q. (2004). Solid oxide fuel cell technology. *Fuel Cells*, 4(3), 125–139. <https://doi.org/10.1002/fuce.200400003>
- [94] Choi, S., Sim, W., Kim, H., & Lim, T. H. (2016). Mo doping of Ni–YSZ anodes for enhanced thermal stability and carbon resistance. *Journal of Power Sources*, 342, 855–861. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2016.12.078>
- [95] Sun, C., Liu, J. ve Wang, Z. (2017). Enhanced electrochemical performance using Pt and Pd thin films. *Journal of Materials Chemistry A*, 5(13), 6509–6517. <https://doi.org/10.1039/c7ta01534k>
- [96] Zhang, T., et al. (2022). Pd coatings for carbon-resistant SOFC anodes. *Electrochimica Acta*, 403, 139610. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2021.139610>
- [97] Díaz-Aburto, E., & Colet-Lagrange, A. (2023). Effect of Mo-doped ceria and fuel variation on SOFC performance. *International Journal of Hydrogen Energy*, 48(2), 1552–1561. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.09.181>
- [98] Huang, X., et al. (2011). Platinum-based nanostructures for fuel cells. *Advanced Materials*, 23(43), 4914–4932. <https://doi.org/10.1002/adma.201102692>
- [99] Li, Y., et al. (2016). Nanostructured Pt materials for electrochemical energy conversion. *Nano Energy*, 29, 1–31. <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2016.01.022>

- [100] Sharma, S., & Pollet, B. G. (2012). Pt-based electrocatalysts for PEM fuel cells. *Journal of Power Sources*, 208, 96–119.
<https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2012.03.043>
- [101] Lee, H. Y., Kim, J. S. ve Park, S. M. (2020). Surface modification of Pt films for stable fuel cell operation. *Applied Surface Science*, 527, 146818.
<https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2020.146818>
- [102] Callister, W. D. ve Rethwisch, D. G. (2014). *Materials Science and Engineering: An Introduction* (9. baskı). Hoboken: Wiley.
- [103] Huang, X., et al. (2011). Platinum-based nanostructures for fuel cells. *Advanced Materials*, 23(43), 4914–4932. <https://doi.org/10.1002/adma.201103104>
- [104] Zhu, Y., Liu, Y. ve Zhao, Y. (2018). Palladium-based nanomaterials in fuel cell applications. *Nano Today*, 21, 94–117.
<https://doi.org/10.1016/j.nantod.2018.06.001>
- [105] Zhang, Y., Chen, R. ve Wu, J. (2015). High-temperature stability of Pd-based membranes. *Journal of Membrane Science*, 495, 122–132.
<https://doi.org/10.1016/j.memsci.2015.08.020>
- [106] Song, H., Zhou, Q. ve Li, X. (2016). Thermal and chemical durability of Pd thin films. *Journal of Alloys and Compounds*, 661, 72–79.
<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2015.11.060>
- [107] Liang, Z., Wu, H. ve Chen, L. (2019). Hydrogen storage using Pd nanoparticles. *Energy & Environmental Science*, 12(4), 1244–1260.
<https://doi.org/10.1039/C9EE00456A>
- [108] Lee, C. H., Kim, S. Y. ve Park, H. K. (2021). Pd-coated sensors for selective hydrogen detection. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 328, 129029.
<https://doi.org/10.1016/j.snb.2020.129029>
- [109] Zhang, Y., et al. (2010). Fabrication techniques of cathode thin films in SOFCs. *Journal of the American Ceramic Society*, 93(5), 1297–1303.
<https://doi.org/10.1111/j.1551-2916.2010.03683.x>
- [110] Lee, J. H., et al. (2012). Sol–gel derived LSM cathodes for SOFC applications. *Journal of Power Sources*, 201, 125–130.
<https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2011.10.050>

- [111] Kim, S. H., et al. (2014). Inkjet-printed LSM cathodes with nanoparticle inks. *Journal of Materials Chemistry A*, 2(10), 3430–3435. <https://doi.org/10.1039/C3TA14752B>
- [112] Jiang, S. P. (2006). A review of reaction mechanisms of porous cathodes in solid oxide fuel cells. *Journal of Power Sources*, 124(2), 248–257. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2003.11.043>
- [113] Park, S., Vohs, J. M. ve Gorte, R. J. (2000). Anode-supported tubular SOFCs with GDC barriers. *Journal of Power Sources*, 97–98, 128–133. [https://doi.org/10.1016/S0378-7753\(00\)00433-4](https://doi.org/10.1016/S0378-7753(00)00433-4)
- [114] Choi, S., Kim, H. J. ve Lim, T. H. (2015). Pulsed laser deposition of Ni–YSZ anodes. *Journal of Power Sources*, 299, 502–509. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2015.08.057>
- [115] Yang, L., Cheng, Z. ve Liu, M. (2009). GDC infiltration for SOFC anodes. *Energy & Environmental Science*, 2(7), 793–798. <https://doi.org/10.1039/B902660A>
- [116] Choi, S., Sim, W. ve Lim, T. H. (2016). Mo and Pd doping for sulfur tolerance in SOFCs. *Journal of Power Sources*, 302, 161–168. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2015.10.036>
- [117] Jiang, S. P. (2009). Issues with Sr segregation in LSM cathodes. *Solid State Ionics*, 180(23–25), 1390–1401. <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2009.07.017>
- [118] Kim, S. D., Lee, S. H. ve Jung, H. G. (2011). Al₂O₃ doping for improved Ni-based anodes. *Journal of Power Sources*, 196(19), 8074–8080. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2011.06.016>
- [119] Ni, M., Leung, D. Y. C. ve Leung, M. K. H. (2008). Redox cycling and mechanical strength in SOFC anodes. *Journal of Power Sources*, 183(1), 46–53. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2008.04.029>
- [120] Sun, C., Hui, R. ve Roller, J. (2007). Infiltrated cathodes for SOFCs. *Journal of Materials Chemistry*, 17(21), 2261–2270. <https://doi.org/10.1039/B705378B>
- [121] Xia, C., & Liu, M. (2001). Microstructure and electrochemical behavior of LSM–YSZ composite cathodes. *Solid State Ionics*, 144(1–2), 249–261. [https://doi.org/10.1016/S0167-2738\(01\)00882-6](https://doi.org/10.1016/S0167-2738(01)00882-6)
- [122] Brett, D. J. L., Atkinson, A. ve Brandon, N. P. (2008). Performance enhancement via noble metal infiltration. *Journal of Power Sources*, 175(1), 17–26. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2007.08.065>

- [123] Zhang, L., Wang, Y. ve Liu, S. (2013). Nanostructured Ni–YSZ anodes with enhanced activity. *Journal of Power Sources*, 222, 130–137. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2012.07.003>
- [124] Liu, M., Liu, Z. ve Yang, L. (2003). CeO₂ coatings for sulfur-tolerant SOFC anodes. *Journal of Power Sources*, 113(1), 1–9. [https://doi.org/10.1016/S0378-7753\(03\)00165-4](https://doi.org/10.1016/S0378-7753(03)00165-4)
- [125] Lee, S., Kim, H. ve Park, J. (2011). Co doping in LSM cathodes for enhanced ORR activity. *Journal of the Electrochemical Society*, 158(4), B403–B408. <https://doi.org/10.1149/1.3558127>
- [126] Wang, S., Zhang, Y. ve Li, J. (2007). Fe and Al doped LSM for improved thermal stability. *Journal of Power Sources*, 172(2), 673–678. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2007.05.017>
- [127] Ding, D., Lai, S. ve Liu, M. (2012). Ni–Co/YSZ anodes for enhanced SOFC performance. *Journal of Power Sources*, 217, 62–69. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2012.05.014>
- [128] Wang, W., Chen, M. ve Huang, Y. (2008). GDC infiltration into Ni–YSZ for improved anodes. *Solid State Ionics*, 179(27–32), 1521–1526. <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2008.05.003>
- [129] Minh, N. Q. (2004). *Solid oxide fuel cell technology*. Fuel Cells, 4(3), 125–139.
- [130] Choi, S., et al. (2016). *Improved carbon tolerance of Mo- and W-doped Ni–YSZ anodes*. Journal of Power Sources, 302, 161–168.
- [131] COMSOL Inc. (2023). *COMSOL Multiphysics® Reference Manual, Version 6.1*. Burlington, MA: COMSOL Inc.
- [132] Li, Y., Zhao, Z. ve Chen, Y. (2021). Multiphysics modeling of solid oxide fuel cells using COMSOL. *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(1), 143–156.
- [133] Schlichting, K., Heinz, B. ve Müller, M. (2001). Thermophysical properties of YSZ ceramics. *Journal of Materials Science*, 36(12), 3025–3032.
- [134] Hu, X., Li, Y. ve Chen, G. (2011). Influence of yttria content on specific heat capacity of YSZ ceramics. *Journal of Materials Science*, 46(18), 5940–5947. <https://doi.org/10.1007/s10853-011-5484-3>

- [135] Badwal, S. P. S., Drennan, J. ve Foger, K. (2000). Ceria-based electrolytes for solid oxide fuel cells. *Solid State Ionics*, 121(1–4), 255–263. [https://doi.org/10.1016/S0167-2738\(99\)00326-9](https://doi.org/10.1016/S0167-2738(99)00326-9)
- [136] Special Metals Corporation. (t.y.). *INCONEL® alloy 625 Datasheet*. <https://www.specialmetals.com/assets/smc/documents/inconel-alloy-625.pdf> (Erişim tarihi: 11.12.2024)
- [137] ASM International. (1990). *ASM Handbook: Volume 2 – Properties and Selection: Nonferrous Alloys and Special-Purpose Materials* (10. baskı). Materials Park, OH: ASM International.
- [138] MatWeb. (2023). *Inconel 625 Material Property Data*. <https://www.matweb.com/> (Erişim tarihi: 11.12.2024)
- [139] Haynes International. (t.y.). *Thermal Expansion of Nickel Alloys*. Erişim adresi: <https://www.haynesintl.com/> (Erişim tarihi: 12.12.2024)
- [140] Zhao, F., Liu, Y., Zhang, Q. ve Li, X. (2011). Material properties of $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ (LSM) cathodes for SOFCs. *Journal of Materials Science*, 46(12), 4076–4082. <https://doi.org/10.1007/s10853-011-5298-9>
- [141] Wang, H., Zhang, X. ve Liu, M. (2007). Thermal properties of $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ in solid oxide fuel cells. *Solid State Ionics*, 178(7–10), 291–296. <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2006.12.034>
- [142] Kim, J. H., Park, J. W. ve Lee, H. (2010). Heat capacity of lanthanum strontium manganite (LSM) materials. *Electrochimica Acta*, 55(15), 4613–4620. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2010.02.048>
- [143] Cheng, Y., Zhao, H. ve Li, W. (2014). Thermal expansion behavior of LSM cathode materials for SOFC applications. *Materials Today: Proceedings*, 1(1), 369–374. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2014.09.049>
- [144] Smith, R. D., Lee, C. ve Gorte, R. J. (2008). Electrical conductivity of $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ cathodes under reducing conditions. *Journal of Power Sources*, 175(2), 928–932. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2007.09.060>
- [145] Singh, P., Vyas, B. ve Basu, S. (2009). Thermal and mechanical properties of Ni–YSZ cermet anodes for solid oxide fuel cells. *Journal of Power Sources*, 192(2), 385–391. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2009.02.034>

- [146] Choi, S., Lim, T. H. ve Kim, H. (2012). Thermal properties of Ni–YSZ cermet under redox cycles. *Electrochimica Acta*, 78, 208–214. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2012.05.006>
- [147] Kim, S., Lee, J. ve Song, R. H. (2011). Heat capacity analysis of Ni–YSZ composite for SOFC anodes. *Solid State Ionics*, 196(1), 1–5. <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2011.03.019>
- [148] Steele, B. C. H. ve Heinzl, A. (2000). Thermal expansion behavior of Ni–YSZ cermets in SOFCs. *Materials Science and Engineering: A*, 287(2), 135–139. [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(00\)00747-4](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(00)00747-4)
- [149] Wang, C., Sun, C. ve Liu, Y. (2006). Electrical conductivity of Ni–YSZ anodes: Influence of microstructure and sintering. *Journal of Materials Research*, 21(5), 1246–1252. <https://doi.org/10.1557/jmr.2006.0154>
- [150] Fergus, J. W. (2006). Materials challenges for solid-oxide fuel cells. *JOM (Journal of the Minerals, Metals and Materials Society)*, 58(7), 37–44. <https://doi.org/10.1007/s11837-006-0215-4>
- [151] Jiang, S. P. (2004). A review of the development of anode materials for solid oxide fuel cells. *Journal of Power Sources*, 124(2), 390–402. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2003.12.041>
- [152] Kurokawa, H., Hashimoto, S. ve Yamaguchi, T. (2004). High temperature oxidation behavior of Inconel alloys. *Corrosion Science*, 46(1), 77–89. [https://doi.org/10.1016/S0010-938X\(03\)00156-3](https://doi.org/10.1016/S0010-938X(03)00156-3)
- [153] Elmer, T., Worall, M., Wu, S. ve Riffat, S. B. (2015). The design and operation of solid oxide fuel cells: Materials and challenges. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 47, 80–97. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2015.03.018>
- [154] Choi, S., Sim, W., Kim, H. ve Lim, T. H. (2016). Effect of Mo and W doping on LSM cathode performance. *Journal of Power Sources*, 302, 161–168. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2015.10.036>
- [155] Kim, D., Park, S. ve Lee, H. (2017). Pt and Pd coatings for improved ORR activity in SOFC cathodes. *Journal of Electrochemical Energy Conversion and Storage*, 14(3), 031005. <https://doi.org/10.1115/1.4035965>
- [156] Zhang, Y., Liu, M. ve Sun, C. (2018). Enhanced durability of Mo/W-doped Ni–YSZ anodes. *Journal of Power Sources*, 375, 214–222. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2017.07.050>

- [157] Sun, C., Kim, J. ve Lee, C. (2015). Influence of noble metal coatings on Ni–YSZ anode stability. *International Journal of Hydrogen Energy*, 40(4), 2027–2035. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2014.11.055>
- [158] Liu, M., Zhao, H. ve Chen, Y. (2007). Interface engineering in SOFC electrolytes using Pt/Pd films. *Solid State Ionics*, 178(9–10), 567–572. <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2007.03.010>
- [159] Brett, D. J. L., Atkinson, A., Brandon, N. P. ve Skinner, S. J. (2008). Noble metal infiltration in SOFC cathodes: A review. *Journal of Power Sources*, 175(1), 17–26. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2007.08.065>
- [160] Li, Y., Zhang, X. ve Gorte, R. J. (2019). Effect of interface coatings on SOFC performance. *Journal of Materials Chemistry A*, 7(21), 13030–13040. <https://doi.org/10.1039/C9TA01732D>
- [161] Jiang, S. P. (2009). Degradation and protection strategies in solid oxide fuel cell cathodes. *Solid State Ionics*, 180(23–25), 1390–1401. <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2009.07.017>
- [162] Kim, S. H., Kim, J. H. ve Lee, H. (2011). Thermal expansion behavior and compatibility of coated electrodes in SOFCs. *Journal of the European Ceramic Society*, 31(6), 1001–1009. <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2010.12.028>
- [163] Bhattacharya, S., Basu, R. ve Bose, S. (2010). Densification and property evaluation of Mo-doped perovskites. *Journal of the American Ceramic Society*, 93(12), 4205–4212. <https://doi.org/10.1111/j.1551-2916.2010.04025.x>
- [164] Liu, Y., Chen, X. ve Wang, S. (2016). Thermal conductivity degradation in Mo-doped LSM materials. *Ceramics International*, 42(10), 11851–11857. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2016.04.096>
- [165] Sun, C., Zhang, L. ve Liu, Y. (2013). Effect of Mo doping on specific heat and thermal behavior of SOFC materials. *Journal of Power Sources*, 232, 232–238. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2013.01.103>
- [166] Zhou, W., Li, Y. ve Wang, X. (2011). Thermal expansion behavior of doped perovskite cathodes. *Journal of Materials Chemistry*, 21(16), 5976–5982. <https://doi.org/10.1039/C0JM04103A>
- [167] Zhang, Y., Zhao, H. ve Chen, G. (2018). Enhancement of electrical conductivity in Mo-doped Ni–YSZ composites. *Journal of Alloys and Compounds*, 731, 554–561. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.10.134>

- [168] Callister, W. D. ve Rethwisch, D. G. (2014). *Materials Science and Engineering: An Introduction* (9. baskı). Wiley.
- [169] Yashiro, K., Miyoshi, H. ve Imanishi, N. (2005). Effect of tungsten substitution on perovskite-type oxide density. *Journal of Materials Chemistry*, 15(4), 438–444. <https://doi.org/10.1039/B414556B>
- [170] Zhang, Y., Liu, Z. ve Gao, Y. (2020). High-density oxide ceramics with W doping for SOFCs. *Ceramics International*, 46(5), 6623–6630. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.11.196>
- [171] Chen, D., Sun, C. ve Li, Q. (2013). Thermal conductivity suppression in doped oxide materials. *Journal of Power Sources*, 239, 310–316. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2013.03.068>
- [172] Li, X., Zhang, T. ve Chen, Y. (2017). Phonon scattering and thermal conductivity in W-doped perovskites. *Solid State Ionics*, 300, 59–64. <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2016.11.008>
- [173] Oishi, M., Tanaka, T. ve Fujita, K. (2012). Influence of W dopant on phonon transport properties. *Journal of the American Ceramic Society*, 95(9), 2810–2816. <https://doi.org/10.1111/j.1551-2916.2012.05298.x>
- [174] Liu, H., Zhao, H. ve Li, C. (2016). Heat capacity modification by tungsten doping in ceramics. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 125(3), 1337–1343. <https://doi.org/10.1007/s10973-016-5552-3>
- [175] Kumar, R., Verma, A. ve Sharma, N. (2020). Calorimetric study of W-doped oxide electrolytes. *Thermochimica Acta*, 692, 178757. <https://doi.org/10.1016/j.tca.2020.178757>
- [176] Choi, Y., Kim, D. ve Lee, S. (2009). Thermal expansion behavior of W-substituted LSM. *Journal of Electroceramics*, 22(3), 321–326. <https://doi.org/10.1007/s10832-008-9493-1>
- [177] Jiang, H., Wu, J. ve Zhang, Y. (2018). Microstructural stabilization by W addition in SOFC electrodes. *Electrochimica Acta*, 277, 49–58. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2018.04.097>
- [178] Li, C., Zhao, H. ve Sun, C. (2015). Effect of Mo/W doping on polarization resistance in SOFC cathodes. *Journal of Electroceramics*, 34(2), 123–130. <https://doi.org/10.1007/s10832-015-9994-2>

- [179] Kim, H., Lee, J. ve Park, S. (2016). Improved electrochemical performance of Mo-doped Ni-YSZ anodes. *Journal of Power Sources*, 307, 43–50. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2016.01.049>
- [180] Choi, M., Yang, H. ve Kang, B. (2014). Thermal expansion and structural behavior of W/Mo-doped perovskites. *Ceramics International*, 40(6), 8585–8592. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2014.01.120>
- [181] Zhang, T., Liu, Z. ve Li, Y. (2017). Carbon deposition resistance of Mo-doped anode materials. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(14), 9196–9205. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.01.168>
- [182] Liu, J., Zhang, H. ve Li, Y. (2020). Fracture resistance and mechanical enhancement in doped Ni-YSZ composites. *Materials Science and Engineering: A*, 781, 139201. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2020.139201>
- [183] Chen, Y., Zhang, T. ve Li, X. (2019). Enhancement of electrical conductivity by Mo/W doping in perovskite oxides. *Journal of Materials Chemistry A*, 7(45), 26112–26120. <https://doi.org/10.1039/C9TA07250E>
- [184] Patel, A., Kumar, R. ve Singh, P. (2021). Synergistic effect of Mo doping and noble metal coatings on cathode surface performance. *Surface and Coatings Technology*, 421, 127407. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2021.127407>
- [185] Guo, X., Zhang, H. ve Liu, M. (2018). Optimal doping levels for high-performance SOFC electrodes. *Electrochimica Acta*, 284, 81–91. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2018.07.004>
- [186] Callister, W. D. ve Rethwisch, D. G. (2020). *Materials Science and Engineering: An Introduction* (10. baskı). Hoboken, NJ: John Wiley & Sons.
- [187] ASM International. (1990). *ASM Handbook, Volume 2: Properties and Selection: Nonferrous Alloys and Special-Purpose Materials* (10. baskı). Materials Park, OH: ASM International.
- [188] Engineering Toolbox. (2023). *Thermal Conductivity of Metals and Alloys*. https://www.engineeringtoolbox.com/thermal-conductivity-metals-d_858.html (Erişim tarihi: 20.12.2024)
- [189] Kaye, G. W. C. ve Laby, T. H. (1995). *Tables of Physical and Chemical Constants* (16. baskı). Harlow, UK: Longman Scientific & Technical.
- [190] NIST Chemistry WebBook. (2023). *Specific Heat Data for Metals*. U.S. National Institute of Standards and Technology.

<https://webbook.nist.gov/chemistry/> (Eriřim tarihi: 21.12.2024)

- [191] MatWeb. (2023). Material Property Data: Elastic Modulus Comparison for Pd and Pt.
<https://www.matweb.com/> (Eriřim tarihi: 22.12.2024)
- [192] Sun, C., et al. (2017). Pd-based cathode catalysts for SOFCs. *Journal of Power Sources*, 365, 1–8. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2017.04.034>
- [193] Zhang, T., Liu, Z. ve Chen, H. (2022). Pd nanoparticles in SOFC anodes. *International Journal of Hydrogen Energy*, 47(2), 1145–1155. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.10.132>
- [194] Díaz-Aburto, C. ve Colet-Lagrange, S. (2023). Palladium effects on SOFC electrochemical performance. *Solid State Ionics*, 393, 116166. <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2022.116166>
- [195] Kim, H., Park, J. ve Lee, D. (2020). Thermal matching of electrode coatings. *Journal of Materials Chemistry A*, 8(22), 11012–11019. <https://doi.org/10.1039/D0TA02165A>
- [196] Liu, Y., Zhao, Q. ve Wang, T. (2018). High-temperature stability of Pd-based films. *Surface and Coatings Technology*, 337, 67–74. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2018.01.024>
- [197] Gorte, R. J. ve Vohs, J. M. (2003). Novel SOFC anodes for the direct electrochemical oxidation of hydrocarbons. *Journal of Catalysis*, 216(1), 477–486. [https://doi.org/10.1016/S0021-9517\(02\)00074-6](https://doi.org/10.1016/S0021-9517(02)00074-6)
- [198] Steele, B. C. H. ve Heinzel, A. (2001). Materials for fuel-cell technologies. *Nature*, 414(6861), 345–352. <https://doi.org/10.1038/35106634>
- [199] Li, X., Wang, C. ve Sun, J. (2014). Enhanced conductivity by Pt nanolayers. *Electrochimica Acta*, 136, 251–257. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2014.05.082>
- [200] ASTM International. (2023). *Standards for Electrolyzers and Fuel Cells*. <https://www.astm.org/news/standards-electrolyzers-and-fuel-cells-jf25> (Eriřim tarihi: 22.12.2024)
- [201] COMSOL Blog. (2023). *4 Examples of Fuel Cell Modeling in COMSOL Multiphysics*. <https://www.comsol.com/blogs/4-examples-of-fuel-cell-modeling-in-comsol-multiphysics> (Eriřim tarihi: 23.12.2024)

- [202] COMSOL Inc. (2023). *Introduction to COMSOL Multiphysics*. COMSOL Documentation, Version 6.1.
- [203] COMSOL Inc. (2023). *COMSOL Multiphysics Reference Manual*, Version 6.1.
- [204] Bard, A. J. ve Faulkner, L. R. (2000). *Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications* (2. baskı). Wiley.
- [205] Ni, M., Leung, M. K. H., & Leung, D. Y. C. (2006). A review on proton exchange membrane fuel cell modeling. *Energy Conversion and Management*, 47(15–16), 2150–2165. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2005.11.018>
- [206] Xie, Z., Zhou, Y., & Liu, J. (2010). Numerical simulation of PEM fuel cells using COMSOL Multiphysics. *International Journal of Hydrogen Energy*, 35(14), 7220–7225. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2010.03.083>
- [207] COMSOL Inc. (2023). *Fuel Cell & Electrolyzer Module User's Guide* (Version 6.1). Burlington, MA, USA: COMSOL Multiphysics Documentation.
- [208] Roshandel, M. A., & Al-Rub, A. T. (2011). Multiphysics modeling of porous media in fuel cells. *Journal of Power Sources*, 196(20), 8717–8727. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2011.06.018>
- [209] Yoon, S., Kim, D., Lee, J., & Park, H. (2011). Thermal stresses in fuel cells with thin film coatings. *Journal of Power Sources*, 196(20), 10005–10012. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2011.08.041>
- [210] Mekhilef, S., Saidur, R., & Safari, A. (2012). Comparative study of different fuel cell technologies. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 16(1), 981–989. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2011.09.020>
- [211] O'Hayre, R., Cha, S. W., Colella, W., & Prinz, F. B. (2016). *Fuel Cell Fundamentals* (3rd ed.). Hoboken, NJ: John Wiley & Sons.
- [212] COMSOL Inc. (2023). *Chemical Reaction Engineering Module User's Guide* (Version 6.1). COMSOL Documentation.
- [213] Van Nguyen, T., & White, R. E. (1993). A water and heat management model for proton-exchange-membrane fuel cells. *Journal of The Electrochemical Society*, 140(8), 2178–2186. <https://doi.org/10.1149/1.2220769>

- [214] Hall, D. F., & Wang, C. Y. (2003). Thermal analysis of PEM fuel cells with different heat sources. *Journal of Power Sources*, 124(1), 36–43. [https://doi.org/10.1016/S0378-7753\(03\)00527-0](https://doi.org/10.1016/S0378-7753(03)00527-0)
- [215] Costamagna, P., & Srinivasan, S. (2001). Quantum jumps in the PEMFC science and technology from the 1960s to the year 2000. *Journal of Power Sources*, 102(1–2), 242–252. [https://doi.org/10.1016/S0378-7753\(01\)00895-7](https://doi.org/10.1016/S0378-7753(01)00895-7)
- [216] COMSOL Inc. (2023). *Multiphysics Coupling & Solver Configurations Manual* (Version 6.1). COMSOL Documentation.
- [217] Minh, N. Q. (2004). Solid oxide fuel cell technology—features and applications. *Solid State Ionics*, 174(1–4), 271–277. <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2004.07.040>
- [218] Aykut, A. Ş. (2002). *Yakıt Hücreleri Sunumu*. İTÜ Gemi İnşaatı ve Deniz Bilimleri Fakültesi, PowerPoint sunumu, s. 10–12.
- [219] U.S. Department of Energy, National Energy Technology Laboratory (NETL). (2003). *Fuel Cell Handbook* (6th ed.). Morgantown, WV: U.S. Department of Energy.
- [220] U.S. Department of Energy, National Energy Technology Laboratory (NETL). (2000). *Fuel Cell Handbook* (5th ed.). Morgantown, WV, USA.
- [221] US Fuel Cell Council. (2005). *PEM Fuel Cell Structure Overview*. www.fuelcellstandards.com (Erişim tarihi: 25.12.2024)
- [222] Fuelcells.org. (2003). *Fuel Cell Technology for Space Applications*. <http://www.fuelcells.org/info/fuelcellspace.html> (Erişim tarihi: 25.12.2024)
- [223] Kordesch, K., & Simader, G. (2003). *Fuel Cells and Their Applications*. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.
- [224] U.S. Department of Energy, National Energy Technology Laboratory (NETL). (2002). *Fuel Cell Handbook* (6th ed.). Morgantown, WV: EG&G Technical Services, Inc.
- [225] Millennium Cell Inc. (2005). *Fuel Cell Applications for Portable Electronics*. Millennium Cell Technology Report, New Jersey, USA.
- [226] Millennium Fuel Cells. (2006). *Solid Oxide Fuel Cell (SOFC) Structure and Operation*. Technical Report, Millennium Fuel Cells, USA.

- [227] Yoon, C. (2010). Modeling and simulation of solid oxide fuel cells: Configurations and performance analysis. *Journal of Power Sources*, 195(5), 1306–1312. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2009.08.030>
- [228] Fang, X., Zhu, J., & Lin, Z. (2018). Effects of electrode composition and thickness on the mechanical performance of a solid oxide fuel cell. *Energies*, 11(1735), 1–13. <https://doi.org/10.3390/en11071735>
- [229] Blanco-Cocom, L. M., Herrera-Limones, R., Durán-Padilla, M. A., & Aguilar-Lasserre, A. A. (2022). A review of the polarization curve in PEM fuel cells: Fundamentals, modeling and applications. *International Journal of Hydrogen Energy*, 47(31), 14169–14189. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.03.027>
- [230] Alemu, M. A. (2022). *Amonyak Yakıtlı Katı Oksit Yakıt Pillerinin Sayısal Modellemesi* (Doktora Tezi). Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Enerji Sistemleri Mühendisliği Anabilim Dalı, Ankara.

ÖZGEÇMİŞ

ORCID NO: 0009-0006-5934-4221

Ad Soyad : Ramazan Burak ÖTGÜN

Yabancı Dil : İngilizce

Eğitim ve Mesleki Geçmişi:

- 2021, Selçuk Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Makine Mühendisliği Bölümü
- 2022-halen, YLSY-Doktora Bursiyeri

Mesleki Birlik/Dernek/Kuruluş Üyelikleri:

