

2016-04-28

Dynamic Simulation of Oxygen Reduction Reaction in Pt/C Electrode for Proton Exchange Membrane Fuel Cells

LI Shang

ZHOU Fen

CHEN Lei

PAN Mu

State Key Laboratory of Advanced Technology for Materials Synthesis and Progressing, Hubei Fuel Cell Key Laboratory, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070,China; panmu@whut.edu.cn

Recommended Citation

LI Shang, ZHOU Fen, CHEN Lei, PAN Mu. Dynamic Simulation of Oxygen Reduction Reaction in Pt/C Electrode for Proton Exchange Membrane Fuel Cells[J]. *Journal of Electrochemistry*, 2016 , 22(2): 129-134.

DOI: 10.13208/j.electrochem.151150

Available at: <https://jelectrochem.xmu.edu.cn/journal/vol22/iss2/5>

This Article is brought to you for free and open access by Journal of Electrochemistry. It has been accepted for inclusion in Journal of Electrochemistry by an authorized editor of Journal of Electrochemistry.

DOI: 10.13208/j.electrochem.1511150

Artical ID:1006-3471(2016)02-0129-06

Cite this: *J. Electrochem.* 2016, 22(2): 129-134

Http://electrochem.xmu.edu.cn

质子交换膜燃料电池 Pt/C 阴极氧还原动力学模拟

李赏,周芬,陈磊,潘牧*

(武汉理工大学材料复合新技术国家重点实验室, 燃料电池湖北省重点实验室, 湖北武汉 430070)

摘要: 质子交换膜燃料电池的商业化应用迫切要求降低其 Pt 载量. 本文通过 Pt/C 氧还原电极的动力学模型计算, 研究了 Pt/C 电极中的氧分布、生成电流以及满足实际应用的最小 Pt 载量. 结果表明, 燃料电池 Pt/C 电极, 阴极产生严重浓差极化的催化层厚度为 40 μm ; 功率密度达到 $1.4 \text{ W}\cdot\text{cm}^{-2}$ ($2.1 \text{ A}\cdot\text{cm}^{-2}@0.67 \text{ V}$) 的电池性能需要 3 μm 左右的 Pt/C 阴极催化层, 阴极 Pt 载量为 $0.122 \text{ mg}\cdot\text{cm}^{-2}$, 即可使膜电极的阴极铂用量低于 $0.087 \text{ g}\cdot\text{kW}^{-1}$.

关键词: Pt/C 电极; 氧还原; 传质; Pt 载量; 燃料电池

中图分类号: O646; TM911.4

文献标识码: A

质子交换膜燃料电池因能量密度高、零排放、应用领域广等优点成为化石能源的理想替代能源^[1]. 目前, 商业质子交换膜燃料电池的催化剂仍然以贵金属 Pt 为主, 高 Pt 用量以及有限的 Pt 资源导致的高成本是燃料电池产业化的主要瓶颈^[2]. 因此, 降低电极中的 Pt 载量是燃料电池研究领域的热点之一.

1992 年, Wilson 等^[3-4]采用 CCM(Catalyst Coated Membrane)技术代替 GDE(Gas Diffusion Electrode)技术, 将催化剂直接涂敷在质子交换膜的两侧制得 CCM, 并将其与扩散层热压在一起形成膜电极, 使催化层的涂敷厚度从几十个 μm 降到了 10 μm 左右, 改善了催化层的传质过程. 此技术还大大降低了 Pt 催化剂向气体扩散层的渗透, 所制备膜电极的扩散层与催化层、催化层与质子交换层间的结合强度均得到提高, 接触电阻降低. 在保证燃料电池性能不变的基础上, 将 Pt 载量降低了 1 个数量级. 目前, CCM 结构的 Pt/C 多孔电极中, 由于 Pt 对氢氧化反应的催化活性高, 阳极 Pt 载量可以降低到 $0.05 \text{ mg}\cdot\text{cm}^{-2}$ ^[5-6]. 然而, Pt 对氧还原反应的催化活性相对较低, 限制了阴极 Pt 载量的降低, 传统的 CCM 阴极 Pt 载量仍为 $0.4 \text{ mg}\cdot\text{cm}^{-2}$ ^[7]. 现在国家科技部“十三五”重点研发计划研究目标要求膜电极铂用量 $0.125 \text{ g}\cdot\text{kW}^{-1}$, 放电功率密度为 $1.4 \text{ W}\cdot\text{cm}^{-2}$ ^[8].

为进一步有效地提高电极的氧还原催化活性、降低 Pt 载量, 以 3M 公司开发的纳米结构薄膜载 Pt 催化剂为代表的高度有序化纳米阵列电极被视为最有可能提高 Pt 的面积比活性并降低电极 Pt 载量^[9-11]. 这种电极将 Pt 纳米颗粒沉积在平行于氧传输方向的有序化阵列载体上, 阴极 Pt 载量仅用 $0.15 \text{ mg}\cdot\text{cm}^{-2}$ 就可达到与阴极 Pt 载量为 $0.40 \text{ mg}\cdot\text{cm}^{-2}$ 的传统 Pt/C 电极相似的性能^[12]. 为研究有序化电极能够在低 Pt 载量的情况下获得高性能的原因、阴极 Pt 载量的极限值以及电极结构对传质和电化学性能的影响等问题, 武汉理工大学燃料电池课题组的孙爽等^[13]基于氧传输的动力学模型, 通过理论计算研究了有序 Pt 电极的氧分布、发电电流以及最低 Pt 载量. 结果表明, 对于有序化电极, 电极厚度 100 μm 以内不存在浓差极化. 对于 60 nm 直径的纳米棒, 极限电流密度可达到 $110.2 \text{ A}\cdot\text{cm}^{-2}$. 假设催化剂纳米棒表面的 Pt 层厚度为 1 nm, 有序膜电极制备的燃料电池性能要达到 $1.5 \text{ A}\cdot\text{cm}^{-2}@0.67 \text{ V}$, 阴极最低 Pt 载量为 $0.029 \text{ mg}\cdot\text{cm}^{-2}$. 如此低的载量, 远远低于我国科技部目标和美国 DOE 目标^[8, 14].

那么, 理论上传统的纳米 Pt/C 电极是否也可以达到 DOE 超低 Pt 载量的指标? 传统的纳米 Pt/C 电极中的氧分布、极限电流密度及其电池性能与

收稿日期: 2016-02-13, 修订日期: 2016-03-07 * 通讯作者, Tel: (86-27)878844481, E-mail: panmu@whut.edu.cn

国家自然科学基金项目(No. 21476178)和博士点基金优先发展领域项目(No. 20130143130001)资助

阴极最低 Pt 载量的关系如何呢? 本文采用同样的方法研究了传统 Pt/C 电极的氧分布和电化学性能,并计算出了阴极 Pt 载量的最小值.

1 理论框架

1.1 基本假设

为分析多孔 Pt/C 电极中的氧扩散和氧还原反应动力学,将膜电极作以下假设:

- 1)膜电极中各部分的温度是相同的;
- 2)催化层中的电子传导足够快,并且不考虑质子传导电阻,催化层中的欧姆电压降忽略不计;
- 3)反应生成的水以气相形式存在,并且从催化层扩散出去的足够快.

1.2 氧气扩散

如图 1, 氧气在 Pt/C 电极中沿氧气传输方向(x) 上在 dx 区域内的扩散和电化学反应可以通过 Fick's 方程和 Butler-Volmer 方程表示为:

$$\frac{dJ}{dx} = D_{O_2}^{eff} \left(\frac{d^2 c}{dx^2} \right) \quad (1)$$

$$\frac{dJ}{dx} = \frac{1}{L} \times \frac{c(x)}{c_{O_2}^0} r_f i^0 \exp\left(\frac{\alpha n F}{RT} \eta\right) \quad (2)$$

其中, $\frac{dJ}{dx}$ 是氧气扩散流量, $D_{O_2}^{eff}$ 是有效扩散系数, c 是氧气浓度, $\frac{dJ}{dx}$ 是 dx 区域内的电极电流密度, $c(x)$ 为 x 处的氧气浓度, $c_{O_2}^0$ 为 x = 0 处的氧气浓度, r_f 为电极的粗糙系数, 定义为实际表面积与几何表面积之比, i^0 为参考交换电流密度, α 为电荷转移系数, n 为参与电极反应的电子数, F 为法拉第常

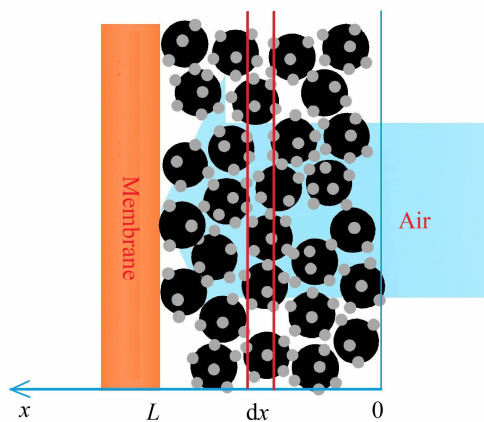


图 1 Pt/C 电极表面的电化学反应动力学模型
Fig. 1 Kinetic model of oxygen reduction reaction on Pt/C electrode

数, R 为通用气体常数, T 为绝对温度, η 为活化过电位.

稳态时, 氧气浓度分布恒定, 即 $dc/dt = 0$, 氧气在 dx 区域的扩散流量梯度 $\frac{dJ}{dx}$ 等于该区域内氧还原反应消耗的氧气量 $\frac{dJ}{dx}$, 可以得到如下方程:

$$\frac{dJ}{dx} = \frac{1}{nF} \times \frac{dJ}{dx} \quad (3)$$

因此:

$$D_{O_2}^{eff} \left(\frac{d^2 c}{dx^2} \right) = \frac{1}{nF} \times \frac{1}{L} \times \frac{c(x)}{c_{O_2}^0} r_f i^0 \exp\left(\frac{\alpha n F}{RT} \eta\right) \quad (4)$$

由于不同电流密度下 Pt/C 表面的氧还原反应速率不同, 在不同的氧还原反应速率下的氧气消耗量可能存在四种情况, 如图 2 所示. 第一种情况(曲线 1)没有浓差极化, 即电极每个部分的氧气浓度都相同. 其它三种情况存在浓差极化, 曲线 2、3、4 对应于氧气沿传输方向的消耗程度. 相应地, 四种情况的边界条件列于表 1 中.

众所周知, 电极中的氧气浓度紧密依赖于氧还原速率^[5], 氧还原速率越快浓差极化越严重, 但一般情况下可利用方程(5)中的边界条件计算电极中的氧气浓度.

$$c(x=0) = c_{O_2}^s \quad \left(\frac{dc}{dx} \right)_{x=L} = 0 \quad (5)$$

于是, 可以得到电极中的氧气浓度 $c(x)$ 、催化层的有效厚度 (L^*) 和扩散电流密度 (J) 为:

$$c(x) = c_{O_2}^s \frac{\cosh\left[(L-x) \sqrt{\frac{r_f i^0}{n F D_{O_2}^{eff} L c_{O_2}^s} \exp\left(\frac{\alpha n F}{RT} \eta\right)}\right]}{\cosh\left[\sqrt{\frac{r_f i^0 L}{n F D_{O_2}^{eff} c_{O_2}^s} \exp\left(\frac{\alpha n F}{RT} \eta\right)}\right]} \quad (6)$$

$$L^* = -\frac{c_{O_2}^s}{\left(\frac{dc_{O_2}}{dx}\right)} = \frac{1}{\sqrt{\frac{r_f i^0}{n F D_{O_2}^{eff} L c_{O_2}^s} \exp\left(\frac{\alpha n F}{RT} \eta\right)}} \cdot \frac{1}{\tanh\left[\sqrt{\frac{r_f i^0 L}{n F D_{O_2}^{eff} L c_{O_2}^s} \exp\left(\frac{\alpha n F}{RT} \eta\right)}\right]} \quad (7)$$

$$J = \int_0^L \frac{1}{L} \times \frac{c(x)}{c_{O_2}^0} r_f i^0 \exp\left(\frac{\alpha n F}{RT} \eta\right) dx$$

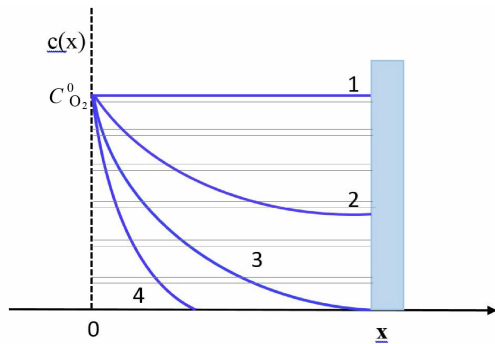


图 2 Pt/C 电极中氧气分布的不同情况
Fig. 2 Different situations of oxygen distribution in Pt/C electrode

表 1 图 2 中 Pt/C 电极氧分布曲线的边界条件
Tab. 1 Boundary conditions for the oxygen distribution curves in Pt/C electrode as shown in Fig 2

Curve	Boundary condition
Curve 1	$\begin{cases} c(x=0) = c_{O_2}^s \\ c(x=L) = c_{O_2}^s \end{cases}$
Curve 2	$\begin{cases} c(x=0) = c_{O_2}^s \\ c(x=L) = c_{O_2}^l \quad (0 < c_{O_2}^l < c_{O_2}^s) \end{cases}$
Curve 3	$\begin{cases} c(x=0) = c_{O_2}^s \\ c(x=L) = 0 \end{cases}$
Curve 4	$\begin{cases} c(x=0) = c_{O_2}^s \\ c(x=L_0) = 0 \quad (0 < L_0 < L) \end{cases}$

$$= c_{O_2}^s \left(\frac{nFD_{O_2}^{\text{eff}} r_f i_0^0}{Lc_{O_2}^0} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left(\frac{\alpha nF}{2RT} \eta \right) \tanh \left[L \left(\frac{r_f i_0^0}{nFD_{O_2}^{\text{eff}} Lc_{O_2}^0} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left(\frac{\alpha nF}{2RT} \eta \right) \right] \quad (8)$$

并采用 MATLAB 计算 $c(x)$ 、 L^* 和 I 的值。

1.3 参数的确定

为简化计算过程, 假设传统的 Pt/C 催化剂所有的 Pt 纳米颗粒为直径 3 nm 的圆球. 如无特殊规定, 温度 T 设定为 348.15 K.

1) 体积表面积

体积表面积(S^*)是指单位体积内的催化剂真实表面积, 用表面粗糙因子 r_f (m^2/m^2) 和电极厚度 L 的比值来表示, 电极的表面粗糙因子定义为电极的真实表面积 S_r 和电极的几何投影面积 S 之间的比值, 即:

$$S^* = \frac{r_f}{L} \quad (9)$$

对于 Pt/C 电极, Pt 纳米颗粒直径为 3 nm, Pt 载量为 $0.4 \text{ mg} \cdot \text{cm}^{-2}$, 催化层厚度为 $10 \text{ } \mu\text{m}$, 计算得 S^* 为 $3.73 \times 10^7 \text{ m}^2 \cdot \text{m}^{-3}$.

2) 交换电流密度

氧还原反应在和 Nafion 接触的 Pt/C 表面的参比交换电流密度(i^0)根据文献^[16]中提到的经验公式计算:

$$\lg i^0 = 3.507 - \frac{4001}{T} \quad (10)$$

348.15 K 时, 算得的 Pt/C 电极的参比交换电流密度为 $1.725 \times 10^{-5} \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$.

3) 活化过电势

根据文献^[17], 电池电压和活化过电位、接触电阻和质子传导引起的欧姆降、以及传质引起的电压降有很大关系. 假设燃料电池在 0.67 V 产生 $2.1 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 的电流, 对应于 $1.4 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$ 的功率密度. 根据文献^[17-19]中的数据计算氧还原的活化过电势(η)为 0.243 V . 计算用到的参数均列于表 2 中.

2 结果与讨论

2.1 催化层中氧气浓度分布

根据方程 6 计算出 $100 \text{ } \mu\text{m}$ 厚的 Pt/C 电极催化层中的氧气分布, 结果列于图 3 中. 可以清楚地看到, 氧气浓度随电极厚度的增加而降低. 当催化层厚度达到 $40 \text{ } \mu\text{m}$ 时, Pt/C 电极出现了严重的浓差极化. 然而, 对于有序化电极来说, 只要 Pt 纳米棒直径大于 40 nm , 氧气在 $100 \text{ } \mu\text{m}$ 的催化层中就

表 2 Pt/C 电极的计算参数
Tab. 2 Calculated parameters for Pt/C electrode

Sample	α	n	T/K	$c_{O_2}^0/(\text{mol} \cdot \text{m}^{-3})$	η/V	$i^0/(\text{A} \cdot \text{m}^{-2})$	$D_{O_2}^{\text{eff}}/(\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1})$	$S^*/(\text{m}^2 \cdot \text{m}^{-3})$
Pt/C	0.5	4	348.15	9.42	0.243	1.72×10^{-5}	8×10^{-7}	3.73×10^7

不存在浓差极化^[13].

有效催化层厚度(L^*)是指可以发生催化反应的催化层真实厚度. 当电极厚度远小于 L^* 时, 可以近似的认为电极中不存在浓差极化. 当电极厚度大于 $0.1L^*$ 小于 $2L^*$ 时, 电极中存在浓差极化, 但还有氧气, 电极反应还可发生. 当电极厚度超过 $3L^*$ 时, 可以认为电极中所有的氧分子都被消耗了, 此时将产生严重的浓差极化^[20]. 根据方程(7)可以计算出 Pt/C 电极的 L^* 为 $20.4 \mu\text{m}$, 当催化层厚度达到 $2L^*$, 即 $40.8 \mu\text{m}$ 时, 浓差极化就比较严重了, 这和作者前面的计算结果相一致.

燃料电池中的电化学反应能够产生多少电流是最受关注的问题. 根据方程(8)的计算结果, 图 4 列出了 Pt/C 电极的电流密度与电极厚度的关系. 从图 4 中可以看出, Pt/C 电极厚度小于 $40 \mu\text{m}$ 时, 电极的电流密度随电极厚度的增加而增加, 超过

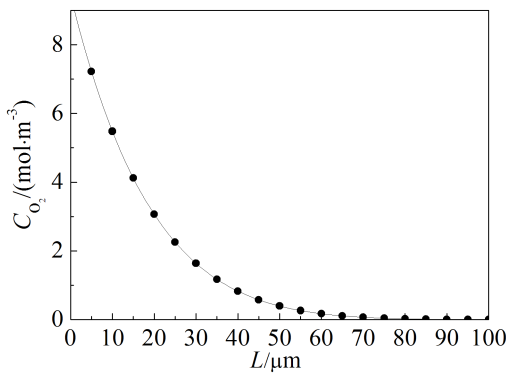


图 3 Pt/C 电极催化层中的氧气分布(电极厚度 $100 \mu\text{m}$)
Fig. 3 Oxygen distribution in Pt/C electrode within the catalyst layer thickness of $100 \mu\text{m}$

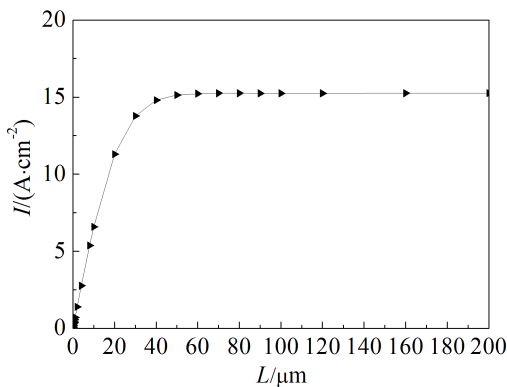


图 4 Pt/C 电极的电流密度与电极厚度的关系图
Fig. 4 Generated current density for Pt/C electrode as a function of electrode thickness

$40 \mu\text{m}$ 时趋向于一个最大值, 之后, 电流密度不再随电极厚度变化, 达到极限电流密度, 即传统 Pt/C 纳米催化剂的催化层厚度不应超过 $40 \mu\text{m}$.

虽然 Pt/C 电极的极限电流密度可以达到 $15 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$, 但国家科技部“十三五”重点研发计划研究目标要求膜电极铂用量 $0.125 \text{ g} \cdot \text{kW}^{-1}$, 放电功率密度为 $1.4 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2[9]}$, 即在 0.67 V 的电压下需要的电流密度为 $2.1 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$. 因此, 将图 4 中电流密度小于 $2.1 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 的部分放大列于图 5 中. 从图 5 中可以看出, 产生 $2.1 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}@0.67 \text{ V}$ 的电量输出(对应于 $1.4 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$ 的功率密度) 需要的最小电极厚度为 $3.05 \mu\text{m}$. 根据现在 $10 \mu\text{m}$ 厚的 CCM 阴极电极 Pt 载量为 $0.4 \text{ mg} \cdot \text{cm}^{-2}$ 计算, 阴极电极厚度降低至 $3.05 \mu\text{m}$ 后的 Pt 载量为 $0.122 \text{ mg} \cdot \text{cm}^{-2}$. 换句话说, 采用 $3.05 \mu\text{m}$ 厚度的阴极催化层就可以在 $0.122 \text{ mg} \cdot \text{cm}^{-2}$ 的 Pt 载量下可以产生 $2.1 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}@0.67 \text{ V}$ 的电量输出, 换算成每千瓦电的阴极 Pt 用量为 $0.087 \text{ g} \cdot \text{kW}^{-1}$. 目前, 阳极的 Pt 载量可降低至 $0.05 \text{ mg} \cdot \text{cm}^{-2}$, 加上阴极 $0.122 \text{ mg} \cdot \text{cm}^{-2}$ 的 Pt 载量, 膜电极总的 Pt 载量为 $0.172 \text{ mg} \cdot \text{cm}^{-2}$, 除以 $1.4 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$, 换算成每千瓦电的 Pt 用量为 $0.123 \text{ g} \cdot \text{kW}^{-1}$. 以上计算结果表明, 制备 $3 \mu\text{m}$ 左右的超薄型 Pt/C 膜电极可以实现国家科技部“十三五”重点研发计划研究目标: 膜电极功率密度 $1.4 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$ 、铂用量 $0.125 \text{ g} \cdot \text{kW}^{-1}$.

本文的研究是基于假设催化层中的电子传导足够快, 且不考虑质子传导电阻, 催化层中的欧姆电压降忽略不计, 以及假设反应生成的水以气相形式存在, 并足够快地从催化层扩散出去. 但实际

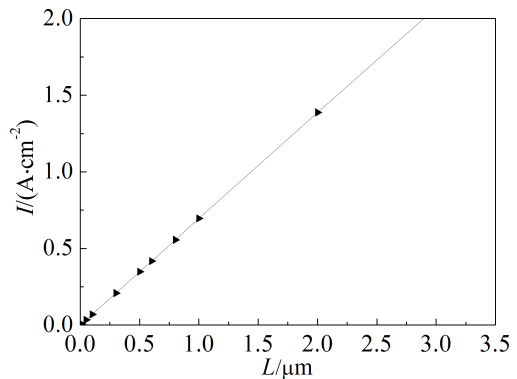


图 5 Pt/C 电极放电电流密度小于 $2.1 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 时与电极厚度关系图
Fig. 5 Generated current density below $2.1 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ for Pt/C electrode as a function of electrode thickness

情况是如果催化层比较厚,催化层中的欧姆电压降不可忽略,而且生成的水也不能迅速扩散出去,导致浓差极化.因此,实际的电输出性能会低于本文的理论预期.不过,如果催化层足够薄,欧姆电压降就可以忽略,生成水也能够足够快地扩散出去,电输出性能就会接近于计算结果,而低 Pt 载量时作者预计催化层只有 3 μm 厚,因此,此计算结果具有参考价值.

3 结 论

本文对 Pt/C 氧还原电极进行了动力学模型计算,结果表明,燃料电池 Pt/C 电极,阴极产生严重浓差极化的催化层厚度为 40 μm ; 达到功率密度 $1.4 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$ ($2.1 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ @ 0.67 V) 的电池性能需要的电极厚度为 3.05 μm , Pt 载量为 $0.122 \text{ mg} \cdot \text{cm}^{-2}$, 也就是 $0.087 \text{ g} \cdot \text{kW}^{-1}$. 因此,超薄型 Pt/C 膜电极理论上可以实现我国科技部的 Pt 用量目标.

参考文献 (References):

- [1] Haile S M, Boysen D A, Chisholm C R I, et al. Solid acids as fuel cell electrolytes[J]. *Nature*, 2001, 410(6831): 910-913.
- [2] Jaffray C, Hards G A. Precious metal supply requirements [M]// Vielstich W, Lamm A, Gasteiger H. Handbook of fuel cells-fundamentals, technology and applications. Chichester, UK: Wiley, 2003, Vol. 3, Chapter 41.
- [3] Wilson M S, Gottesfeld S. High performance catalyzed membranes of ultra-low Pt loadings for polymer electrolyte fuel cells[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 1992, 139(2): L28-L30.
- [4] Wilson M S, Gottesfeld S. Thin-film catalyst layers for polymer electrolyte fuel cell electrodes[J]. *Journal Applied Electrochemistry*, 1992, 22: 1-7.
- [5] Gasteiger H A, Panels J E, Yan S G. Dependence of PEM fuel cell performance on catalyst loading[J]. *Journal of Power Sources*, 2004, 127(1/2): 162-171.
- [6] Markovic N M. The hydrogen electrode reaction and the electrooxidation of CO and H₂/CO mixtures on well-characterized Pt and Pt bimetallic surfaces[M]// Vielstich W, Gasteiger H, Lamm A. Handbook of fuel cells-fundamentals, technology and applications. Chichester, UK: Wiley, 2003, Vol. 2, Chapter 26.
- [7] Gasteiger H A, Gu W, Makharia R, et al. Beginning-of-life MEA performance: Efficiency loss contributions[M]// Vielstich W, Lamm A and Gasteiger H A. Handbook of fuel cells-fundamentals, technology and applications. Chichester, UK: Wiley, 2003, Vol. 3, Chapter 46.
- [8] “新能源汽车”试点专项 2016 年度第一批项目申报指南 [EB/OL]. (2015-11-16) http://www.most.gov.cn/tztg/201511/t20151118_122421.htm
- [9] Debe M K. Electrocatalyst approaches and challenges for automotive fuel cells[J]. *Nature*, 2012, 486(7): 43-51.
- [10] Gong K P, Du F, Xia Z H, et al. Nitrogen-doped carbon nanotube arrays with high electrocatalytic activity for oxygen reduction[J]. *Science*, 2009, 323(5915): 760-764.
- [11] Tian Z Q, Lim S H, Poh C K, et al. A highly order-structured membrane electrode assembly with vertically aligned carbon nanotubes for ultra-low Pt loading PEM fuel cells[J]. *Advanced Energy Materials*, 2011, 1(6): 1205-1214.
- [12] Debe M K, Schmoekel A K, Vernstrom G D, et al. High voltage stability of nanostructured thin film catalysts for PEM fuel cells[J]. *Journal of Power Sources*, 2006, 161(2): 1002-1011.
- [13] Sun S, Zhang H, Pan M. Dynamic simulation of oxygen transport rates in highly ordered electrodes for proton exchange membrane fuel cells[J]. *Fuel Cell*, 2015, 15(3): 456-462.
- [14] The US Department of Energy. Energy efficiency and renewable energy [EB/OL]. http://www.eere.energy.gov/hydrogenandfuelcells/mypp/pdfs/fuel_cells.pdf, 2012.
- [15] Paulus U A, Schmidt T J, Gasteiger H A, et al. Oxygen reduction on a high-surface area Pt/Vulcan carbon catalyst: A thin-film rotating ring-disk electrode study [J]. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 2001, 495(2): 134-145.
- [16] Parthasarathy A, Srinivasan S, Appleby A J, et al. Temperature dependence of the electrode kinetics of oxygen reduction at the platinum/nafiion® interface-A microelectrode investigation[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 1992, 139(9): 2530-2537.
- [17] Gasteiger H A, Kocha S S, Sompalli B, et al. Activity benchmarks and requirements for Pt, Pt-alloy, and non-Pt oxygen reduction catalysts for PEMFCs[J]. *Applied Catalysis B: Environmental*, 2005, 56(1/2): 9-35.
- [18] Zhang J L, Tang Y H, Song C J, et al. PEM fuel cell open circuit voltage (OCV) in the temperature range of 23 °C to 120 °C [J]. *Journal of Power Sources*, 2006, 163(1): 532-537.
- [19] Song C J, Zhang J J. Electrocatalytic oxygen reduction reaction[M]// Zhang J J. PEM fuel cell electrocatalysts and catalyst layers-fundamentals and applications. Springer, 2008: 89-134.
- [20] Zha Q X(查全性). 电极过程动力学导论[M]. 北京: 科学出版社, 2002: 345-377.

Dynamic Simulation of Oxygen Reduction Reaction in Pt/C Electrode for Proton Exchange Membrane Fuel Cells

LI Shang, ZHOU Fen, CHEN Lei, PAN Mu*

(State Key Laboratory of Advanced Technology for Materials Synthesis and Progressing,
Hubei Fuel Cell Key Laboratory, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, China)

Abstract: It is an urgent need to reduce the Pt loading in electrode for practical fuel cell applications worldwide. Herein, we theoretically investigate the oxygen distribution, generated current, and minimum Pt loading of Pt/C electrode for practical applications based on kinetic model of oxygen reduction reaction. The results indicate that with increasing electrode effective thickness to 40 μm , serious concentration polarization is expected for Pt/C electrode. To generate a power density of $1.4 \text{ W}\cdot\text{cm}^{-2}$ ($2.1 \text{ A}\cdot\text{cm}^{-2}$ @ 0.67 V) for fuel cell, the cathode catalyst layer thickness in PEMFC should be as thin as 3 μm . The minimum Pt loading will reach $0.122 \text{ mg}\cdot\text{cm}^{-2}$, which can reduce the amount of Pt to $0.087 \text{ g}\cdot\text{kW}^{-1}$ in PEMFC cathode.

Key words: Pt/C electrode; oxygen reduction; mass transport; Pt loading; fuel cell