

BuB-Übung 1: Brennstoffzellen Grundlagen

Sebastian Dierickx

*Institut für Angewandte Materialien
Werkstoffe der Elektrotechnik (IAM-WET)*



Aufgabe 1

Theoretische Zellspannung U_{th}

1. Es gibt mehrere Möglichkeiten, die theoretische Zellspannung U_{th} zu berechnen:
 - a. Wie berechnet man die theoretische Zellspannung U_{th} einer BSZ abhängig von der Reaktionsenthalpie?
 - b. Wie berechnet man die theoretische Zellspannung U_{th} einer BSZ abhängig von den Sauerstoffpartialdrücken p_{O_2} an Kathode und Anode?
 - c. Leiten Sie aus der obigen Gleichung die Abhängigkeit von U_{th} von den Wasserdampf- und Wasserstoff-Partialdrücken auf der Anodenseite für den Fall einer SOFC her.
 - d. Berechnen Sie die theoretische Zellspannung einer Brennstoffzelle für den Fall $T = 298 \text{ K}$, $p_{O_2}^K = 0.21 \text{ atm}$, $p_{H_2}^A = 0.97 \text{ atm}$, $p_{H_2O}^A = 0.03 \text{ atm}$.

Aufgabe 1 a)

Theoretische Zellspannung U_{th}

1. Es gibt mehrere Möglichkeiten, die theoretische Zellspannung U_{th} zu berechnen:
 - a. Wie berechnet man die theoretische Zellspannung U_{th} einer BSZ abhängig von der Reaktionsenthalpie?

Enthalpie H

- Wärmeinhalt
- Maß für Energie im thermodynamischen System

Entropie S

- „Unordnung“ in einem System
- Maß für Wahrscheinlichkeit eines thermodynamischen Energiezustands

Freie Reaktionsenthalpie

$$\Delta_R G = \Delta_R H - T \Delta_R S$$

$$\Delta_R H = \sum H_{\text{Produkte}} - \sum H_{\text{Edukte}}$$

$$\Delta_R S = \sum S_{\text{Produkte}} - \sum S_{\text{Edukte}}$$

Reaktionseenthalpie $\Delta_R H$

- Energieumsatz der Reaktion
- $\Delta_R H < 0$ exotherme Reaktion
- $\Delta_R H > 0$ endotherme Reaktion

Freie Reaktionsenthalpie, Gibbs'sche Energie $\Delta_R G$

- Stoffumsatz der Reaktion
- $\Delta_R G < 0$ exergone Reaktion, Reaktion läuft ab
- $\Delta_R G = 0$ Produkte & Edukte im GG, keine Reaktion
- $\Delta_R G > 0$ endergone Reaktion, Energiezufuhr notwendig

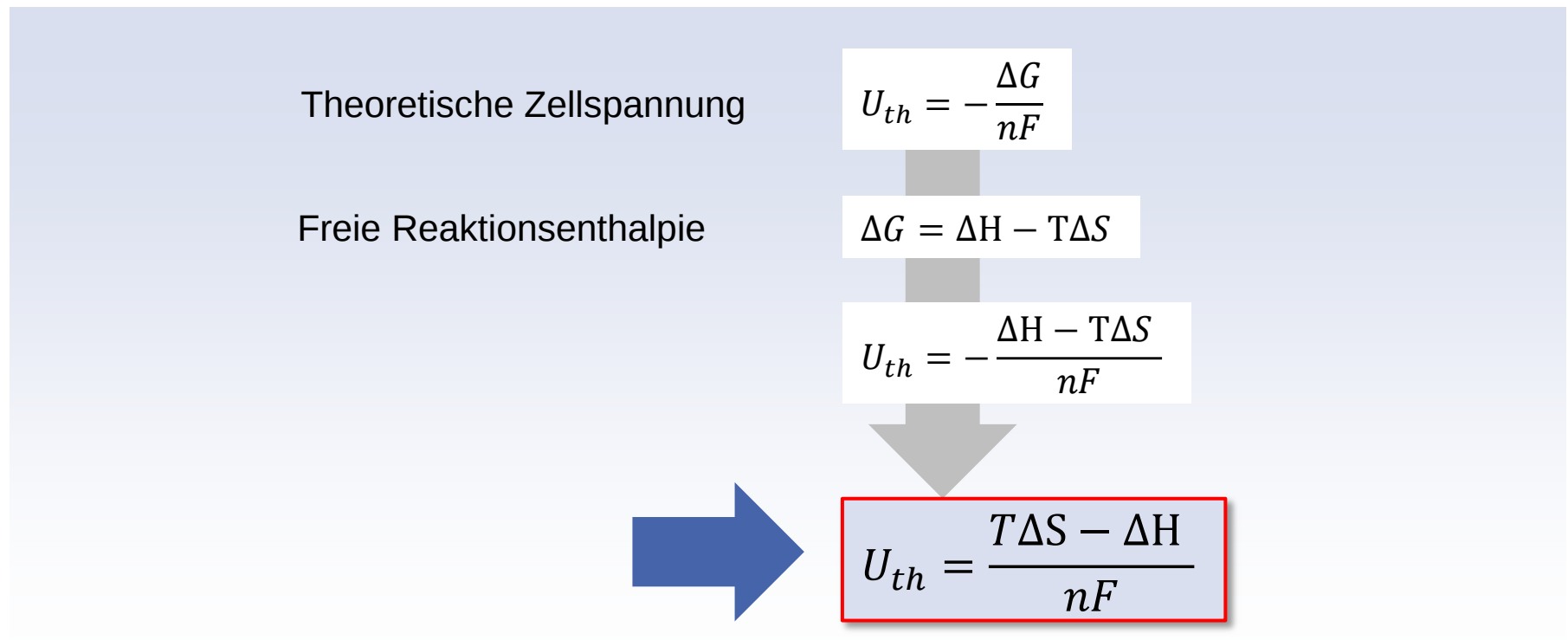
Theoretische Zellspannung

$$U_{th} = - \frac{\Delta_R G}{nF}$$

Aufgabe 1 a)

Theoretische Zellspannung U_{th}

1. Es gibt mehrere Möglichkeiten, die theoretische Zellspannung U_{th} zu berechnen:
 - a. Wie berechnet man die theoretische Zellspannung U_{th} einer BSZ abhängig von der Reaktionsenthalpie?



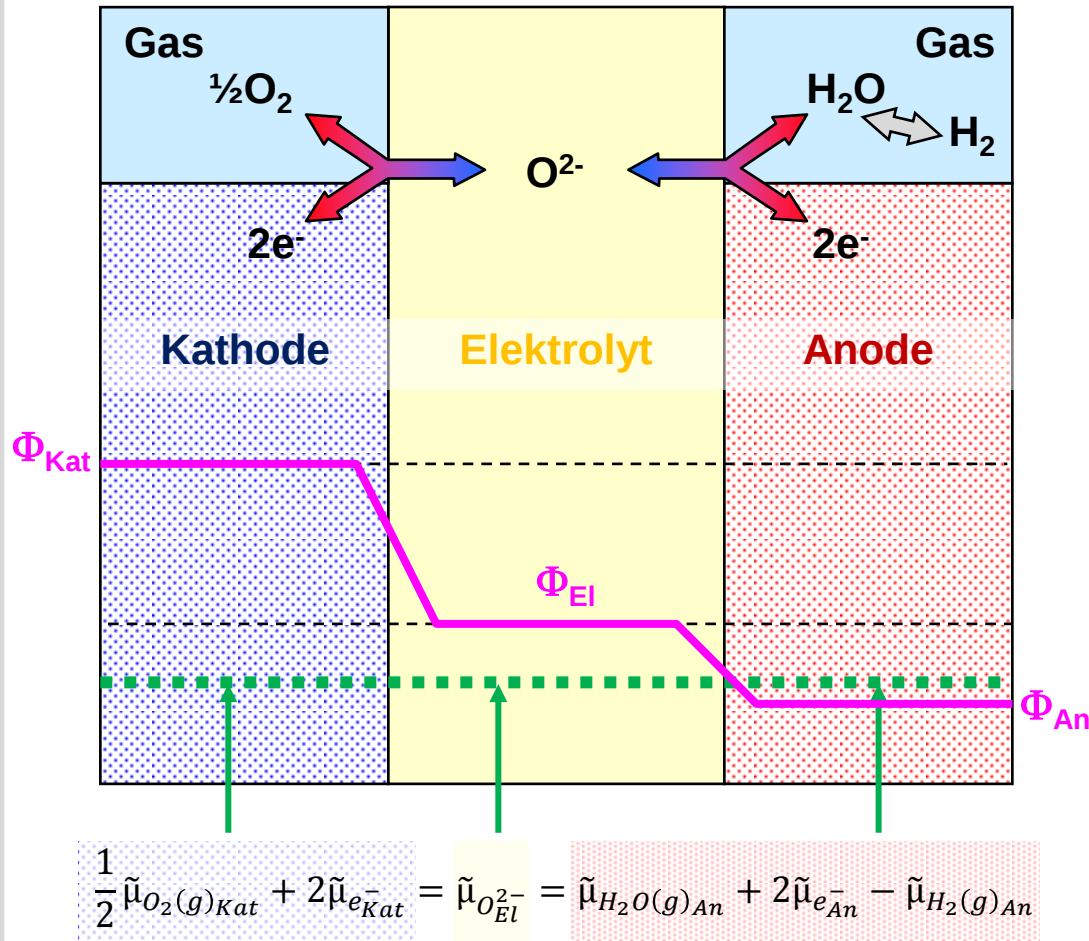
Aufgabe 1 b)

Theoretische Zellspannung U_{th}

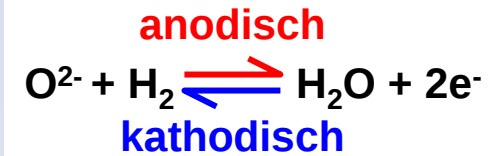
1. Es gibt mehrere Möglichkeiten, die theoretische Zellspannung U_{th} zu berechnen:
 - b. Wie berechnet man die theoretische Zellspannung U_{th} einer BSZ abhängig von den Sauerstoffpartialdrücken pO_2 an Kathode und Anode?

Elektroden und Elektrochemie

Theoretische Zellspannung



Reaktion:



Gleichgewicht:

$$\tilde{\mu}_{\text{O}_{\text{El}}}^{2-} + 2\tilde{\mu}_{\text{H}_2(g)_{\text{An}}} = \tilde{\mu}_{\text{H}_2\text{O}(g)_{\text{An}}} + 2\tilde{\mu}_{e_{\text{An}}}^-$$

$$\tilde{\mu}_{\text{H}_2(g)_{\text{An}}} = \mu_{\text{H}_2(g)_{\text{An}}}$$

$$\tilde{\mu}_{\text{H}_2\text{O}(g)_{\text{An}}} = \mu_{\text{H}_2\text{O}(g)_{\text{An}}}$$

$$\tilde{\mu}_{e_{\text{An}}}^- = \mu_{e_{\text{An}}}^- - F \cdot \Phi_{\text{An}}$$

$$\tilde{\mu}_{\text{O}_{\text{El}}}^{2-} = \mu_{\text{O}_{\text{El}}}^{2-} - 2F \cdot \Phi_{\text{El}}$$

Aufgabe 1 b)

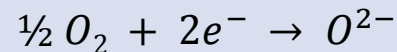
Theoretische Zellspannung U_{th}

1. Es gibt mehrere Möglichkeiten, die theoretische Zellspannung U_{th} zu berechnen:
 - b. Wie berechnet man die theoretische Zellspannung U_{th} einer BSZ abhängig von den Sauerstoffpartialdrücken pO_2 an Kathode und Anode?

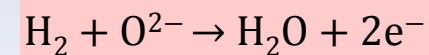
Elektrochemisches Potential: $\tilde{\mu} = \text{chemisches Potential} + \text{elektrisches Potential} = \mu + nF\phi$

Zellreaktion: $H_2 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow H_2O$

Halbzellenreaktion: **Kathode**



Anode



Elektrochemisches Potential: $\frac{1}{2}\tilde{\mu}_{O_2, Kat} + 2\tilde{\mu}_{e_{Kat}^-} = \tilde{\mu}_{O_{El}^{2-}}$

$\tilde{\mu}_{O_{El}^{2-}} + \tilde{\mu}_{H_2, An} = \tilde{\mu}_{H_2O_{An}} + 2\tilde{\mu}_{e_{An}^-}$

Temperatur:

Sauerstoffpartialdruck an Kathode: $p_{O_2}^K$

Sauerstoffpartialdruck an Anode: $p_{O_2}^A$

Universelle Gaskonstante: $R = 8.314 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$

Faradaykonstante: $F = 96485.3 \text{ As/mol}$

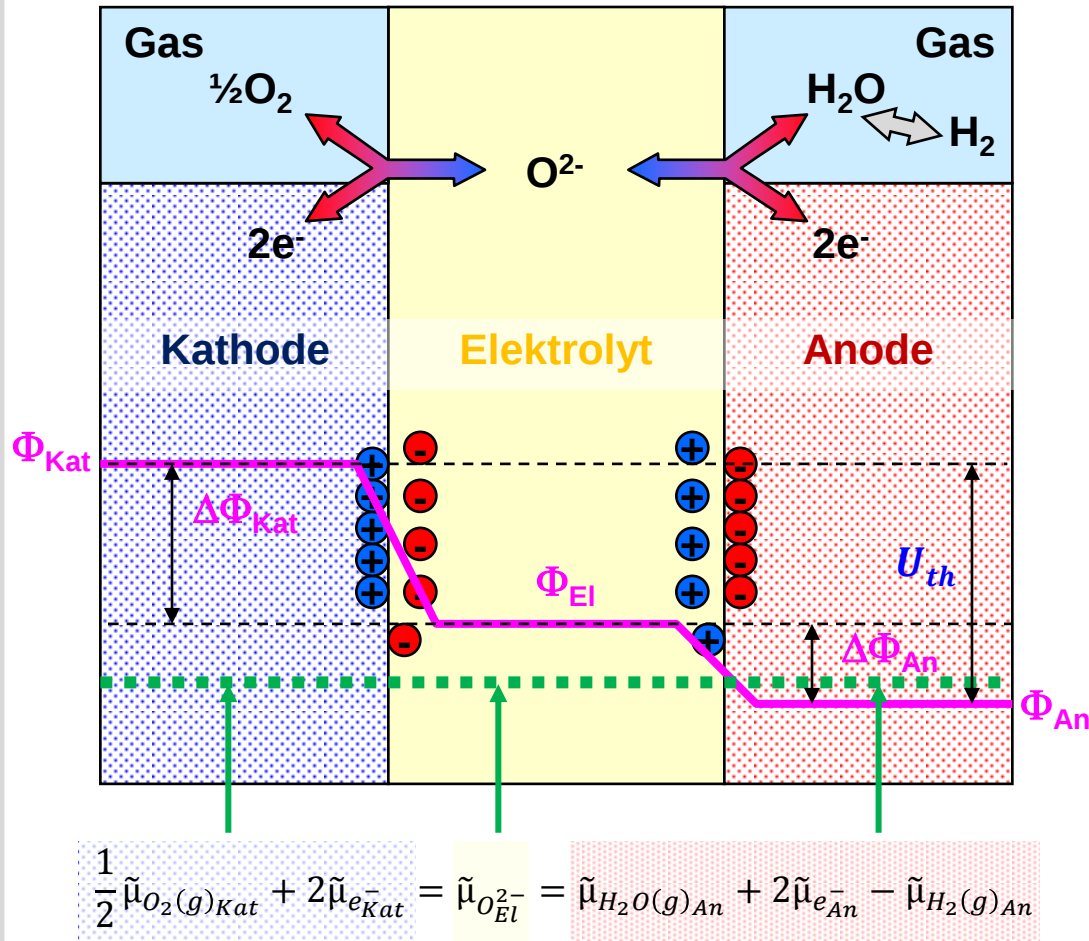
Ladungszahl der Elektronen: $n_{e^-} = 1$

Ladungszahl der Ionen: $n_{O^{2-}} = 2$

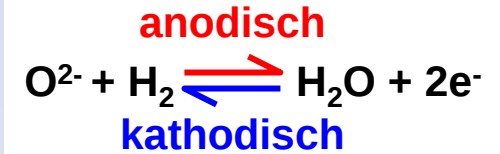


Elektroden und Elektrochemie

Theoretische Zellspannung



Reaktion:



Gleichgewicht:

$$\tilde{\mu}_{\text{O}_{\text{El}}^{2-}} + 2 \tilde{\mu}_{\text{H}_2(g)_{\text{An}}} = \tilde{\mu}_{\text{H}_2\text{O}(g)_{\text{An}}} + 2 \tilde{\mu}_{e_{\text{An}}^-}$$

$$\tilde{\mu}_{\text{H}_2(g)_{\text{An}}} = \mu_{\text{H}_2(g)_{\text{An}}}$$

$$\tilde{\mu}_{\text{H}_2\text{O}(g)_{\text{An}}} = \mu_{\text{H}_2\text{O}(g)_{\text{An}}}$$

$$\tilde{\mu}_{e_{\text{An}}^-} = \mu_{e_{\text{An}}^-} - F \cdot \Phi_{\text{An}}$$

$$\tilde{\mu}_{\text{O}_{\text{El}}^{2-}} = \mu_{\text{O}_{\text{El}}^{2-}} - 2F \cdot \Phi_{\text{El}}$$

Halbzellenpotential Anode:

$$\Delta\Phi_{\text{An}} = \Phi_{\text{An}} - \Phi_{\text{El}}$$

$$= \frac{1}{2F} (\mu_{\text{H}_2\text{O}(g)_{\text{An}}} - \mu_{\text{H}_2(g)_{\text{An}}} + 2\mu_{e_{\text{An}}^-} - \mu_{\text{O}_{\text{El}}^{2-}})$$

Theoretische Zellspannung:

$$U_{\text{th}} = \Delta\Phi_{\text{Kat}} - \Delta\Phi_{\text{An}} = \Phi_{\text{Kat}} - \Phi_{\text{An}}$$

Aufgabe 1 b)

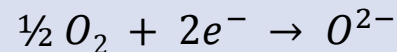
Theoretische Zellspannung U_{th}

1. Es gibt mehrere Möglichkeiten, die theoretische Zellspannung U_{th} zu berechnen:
 - b. Wie berechnet man die theoretische Zellspannung U_{th} einer BSZ abhängig von den Sauerstoffpartialdrücken p_{O_2} an Kathode und Anode?

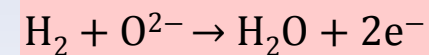
Elektrochemisches Potential: $\tilde{\mu} = \text{chemisches Potential} + \text{elektrisches Potential} = \mu + nF\phi$

Zellreaktion: $H_2 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow H_2O$

Halbzellenreaktion: **Kathode**

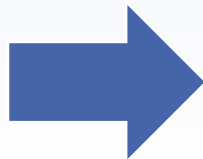


Anode



Elektrochemisches Potential: $\frac{1}{2}\tilde{\mu}_{O_2, Kat} + 2\tilde{\mu}_{e_{Kat}} = \tilde{\mu}_{O_{El}^{2-}}$

$\tilde{\mu}_{O_{El}^{2-}} + \tilde{\mu}_{H_2, An} = \tilde{\mu}_{H_2O, An} + 2\tilde{\mu}_{e_{An}}^-$



$$U_{th} = \frac{RT}{nF} \cdot \ln\left(\sqrt{\frac{p_{O_2}^K}{p_{O_2}^A}}\right)$$

Siehe BuB-Skript S.28-30

Temperatur:

Sauerstoffpartialdruck an Kathode:

Sauerstoffpartialdruck an Anode:

Universelle Gaskonstante:

Faradaykonstante:

Ladungszahl der Elektronen:

Ladungszahl der Ionen:

T

$p_{O_2}^K$

$p_{O_2}^A$

$R = 8.314 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$

$F = 96485.3 \text{ As/mol}$

$n_{e^-} = 1$

$n_{O^{2-}} = 2$

Aufgabe 1 c)

Theoretische Zellspannung U_{th}

1. Es gibt mehrere Möglichkeiten, die theoretische Zellspannung U_{th} zu berechnen:
 - c. Leiten Sie aus der obigen Gleichung die Abhängigkeit von U_{th} von den Wasserdampf- und Wasserstoff-Partialdrücken auf der Anodenseite für den Fall einer SOFC her.

Aus 1 b):

$$U_{th} = \frac{RT}{nF} \cdot \ln\left(\sqrt{\frac{p_{O_2}^K}{p_{O_2}^A}}\right)$$

Gesucht:

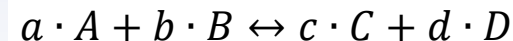
$$p_{O_2}^A = f(p_{H_2}^A, p_{H_2O}^A)$$

?



Berechnung über das *Massenwirkungsgesetz* der anodenseitigen Reaktionsgleichung

Reaktion:



Gleichgewichtskonstante:

$$K_{eq}(T) = \frac{p_C^c \cdot p_D^d}{p_A^a \cdot p_B^b} = \exp\left(-\frac{\Delta G_0(T)}{RT}\right)$$

Temperatur:

Universelle Gaskonstante:

Freie Standardreaktionsenthalpie

T

R = 8.314 J/mol·K

$\Delta G_0(T)$

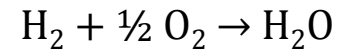


Aufgabe 1 c)

Theoretische Zellspannung U_{th}

1. Es gibt mehrere Möglichkeiten, die theoretische Zellspannung U_{th} zu berechnen:
 - c. Leiten Sie aus der obigen Gleichung die Abhängigkeit von U_{th} von den Wasserdampf- und Wasserstoff-Partialdrücken auf der Anodenseite für den Fall einer SOFC her.

Reaktion:



Gleichgewichtskonstante:

$$K_{eq}(T) = \frac{p_{\text{H}_2\text{O}}^A}{p_{\text{H}_2}^A \cdot \sqrt{p_{\text{O}_2}^A}} = \exp\left(\frac{-\Delta G_0(T)}{RT}\right)$$

Auflösen nach $\sqrt{p_{\text{O}_2}^A}$:

$$\frac{1}{\sqrt{p_{\text{O}_2}^A}} = \exp\left(\frac{-\Delta G_0(T)}{RT}\right) \cdot \frac{p_{\text{H}_2}^A}{p_{\text{H}_2\text{O}}^A}$$

Temperatur:

Universelle Gaskonstante:

Freie Standardreaktionsenthalpie

T

$R = 8.314 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$

$\Delta G_0(T)$

Aufgabe 1 c)

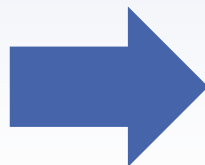
Theoretische Zellspannung U_{th}

1. Es gibt mehrere Möglichkeiten, die theoretische Zellspannung U_{th} zu berechnen:
 - c. Leiten Sie aus der obigen Gleichung die Abhängigkeit von U_{th} von den Wasserdampf- und Wasserstoff-Partialdrücken auf der Anodenseite für den Fall einer SOFC her.

Einsetzen von $\frac{1}{\sqrt{p_{O_2}^A}} = \exp\left(\frac{-\Delta G_0(T)}{RT}\right) \cdot \frac{p_{H_2}^A}{p_{H_2O}^A}$ in $U_{th} = \frac{RT}{nF} \cdot \ln\left(\sqrt{\frac{p_{O_2}^K}{p_{O_2}^A}}\right)$



$$U_{th} = \frac{RT}{nF} \cdot \ln\left(\sqrt{p_{O_2}^K} \cdot \frac{p_{H_2}^A}{p_{H_2O}^A} \cdot \exp\left(\frac{-\Delta G_0(T)}{RT}\right)\right)$$



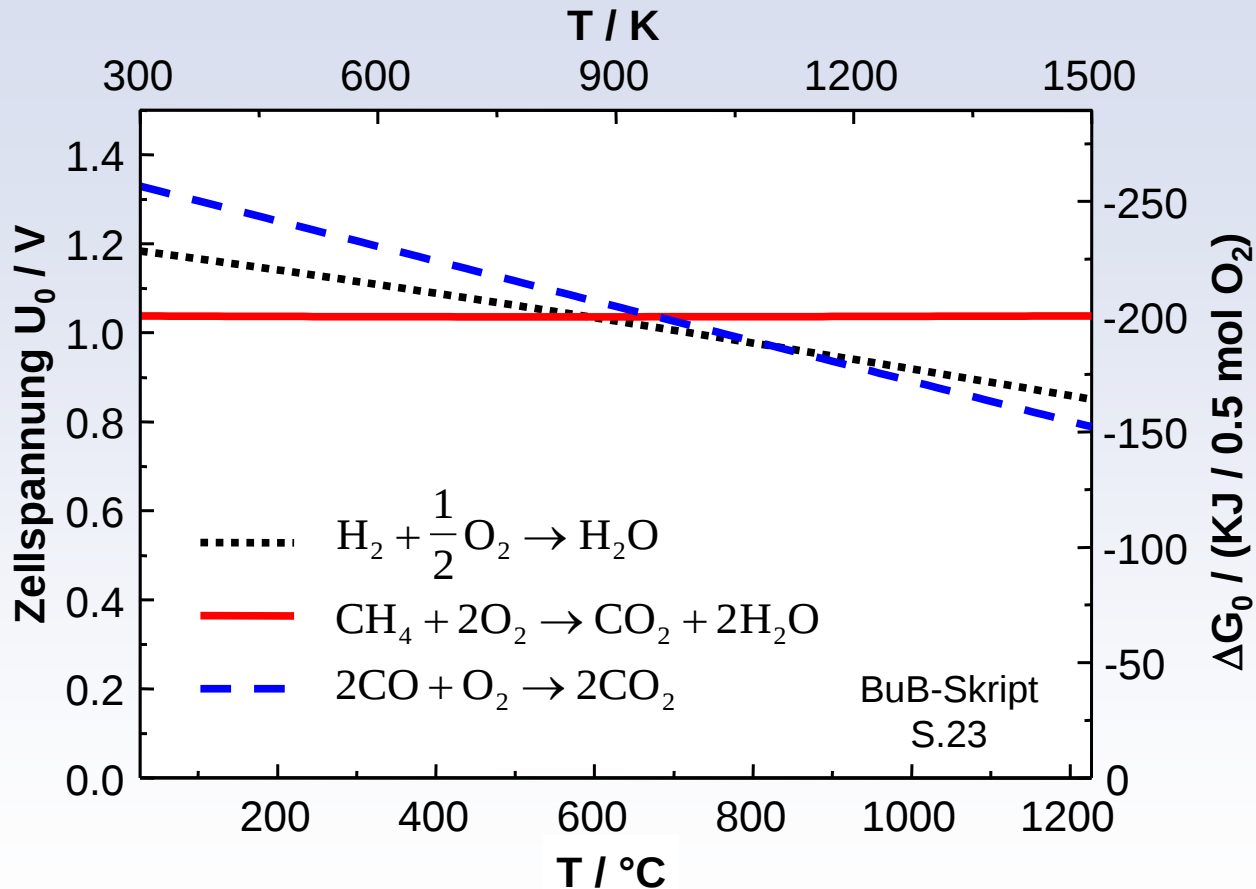
$$U_{th} = \underbrace{\frac{-\Delta G_0(T)}{nF}}_{U_0} + \frac{RT}{nF} \cdot \ln\left(\sqrt{p_{O_2}^K} \cdot \frac{p_{H_2}^A}{p_{H_2O}^A}\right)$$

Temperatur:
Universelle Gaskonstante:
Freie Standardreaktionsenthalpie

T
 $R = 8.314 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$
 $\Delta G_0(T)$

Theoretische Zellspannung

Temperaturabhängigkeit



$$U_0 = -\frac{\Delta G_0}{nF}$$

$$U_0 = \frac{T\Delta S_0 - \Delta H_0}{nF}$$

$$\Delta H = \sum \Delta H_{\text{Produkte}} - \sum \Delta H_{\text{Edukte}}$$

$$\Delta S = \sum \Delta S_{\text{Produkte}} - \sum \Delta S_{\text{Edukte}}$$

BG	ΔH_0 kJ/mol	ΔS_0 J/mol	n
H ₂	-242	-44.5	2
CH ₄	-803	-5	8
CO	-566	-173	4

Theoretische Zellspannung

Temperaturabhängigkeit

Nernstgleichung

$$U_{th} = \frac{RT}{nF} \cdot \ln\left(\sqrt{\frac{p_{O_2}^K}{p_{O_2}^A}}\right)$$

Thermodyn. Calc.

$p_{O_2}^A$ ist abhängig von:

- Temperatur
- Brenngaszusammensetzung

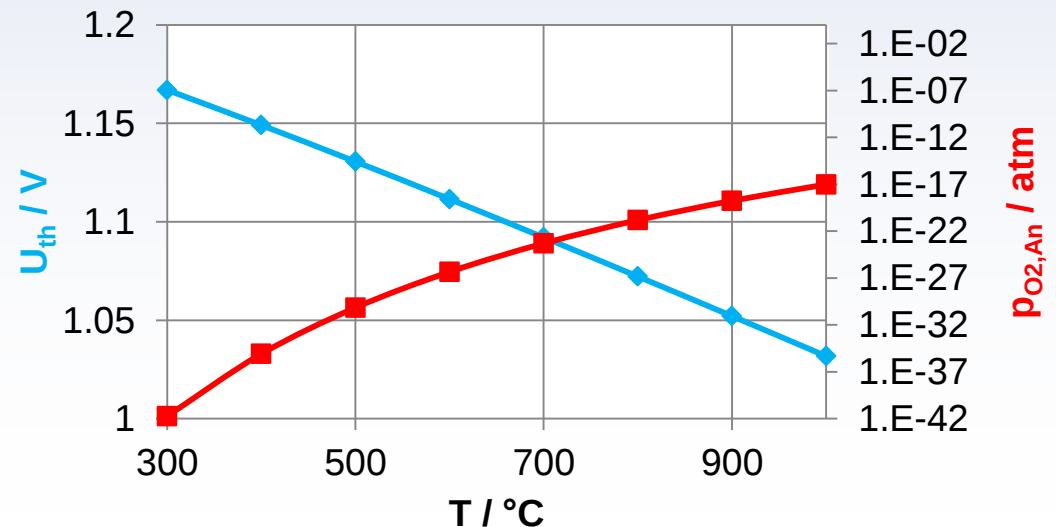


U_{th} sinkt mit steigender Temperatur!

T / °C	p_{O_2} / atm	U_{th} / V
300	1.88E-42	1.16695294
400	8.09E-36	1.14909845
500	6.95E-31	1.13058568
600	4.55E-27	1.11154047
700	5.00E-24	1.09205909
800	1.51E-21	1.07222631
900	1.75E-19	1.05211283
1000	9.64E-18	1.03177234

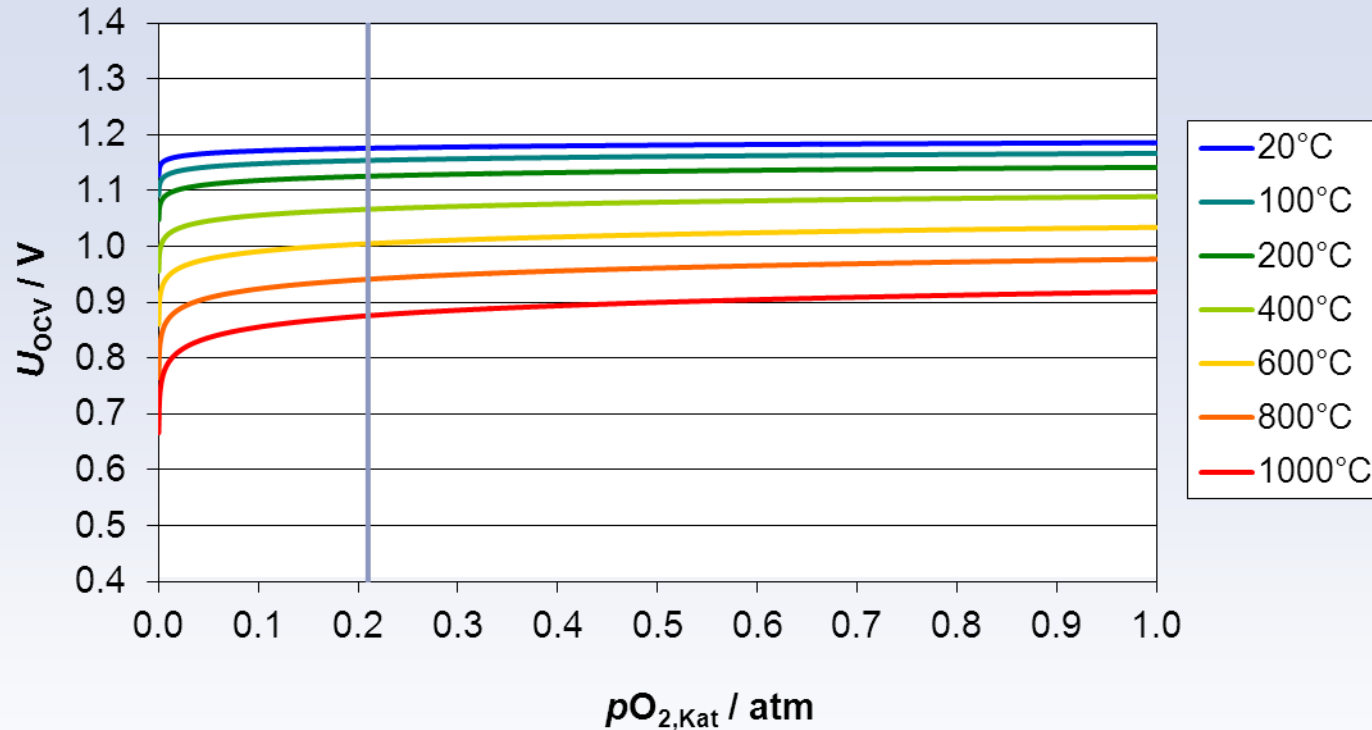
BG: 0.945 atm H₂, 0.055 atm H₂O

OM: Luft (0.21atm O₂)



Leerlaufspannung U_{OCV}

Abhängigkeit von $pO_{2,Kat}$ und T



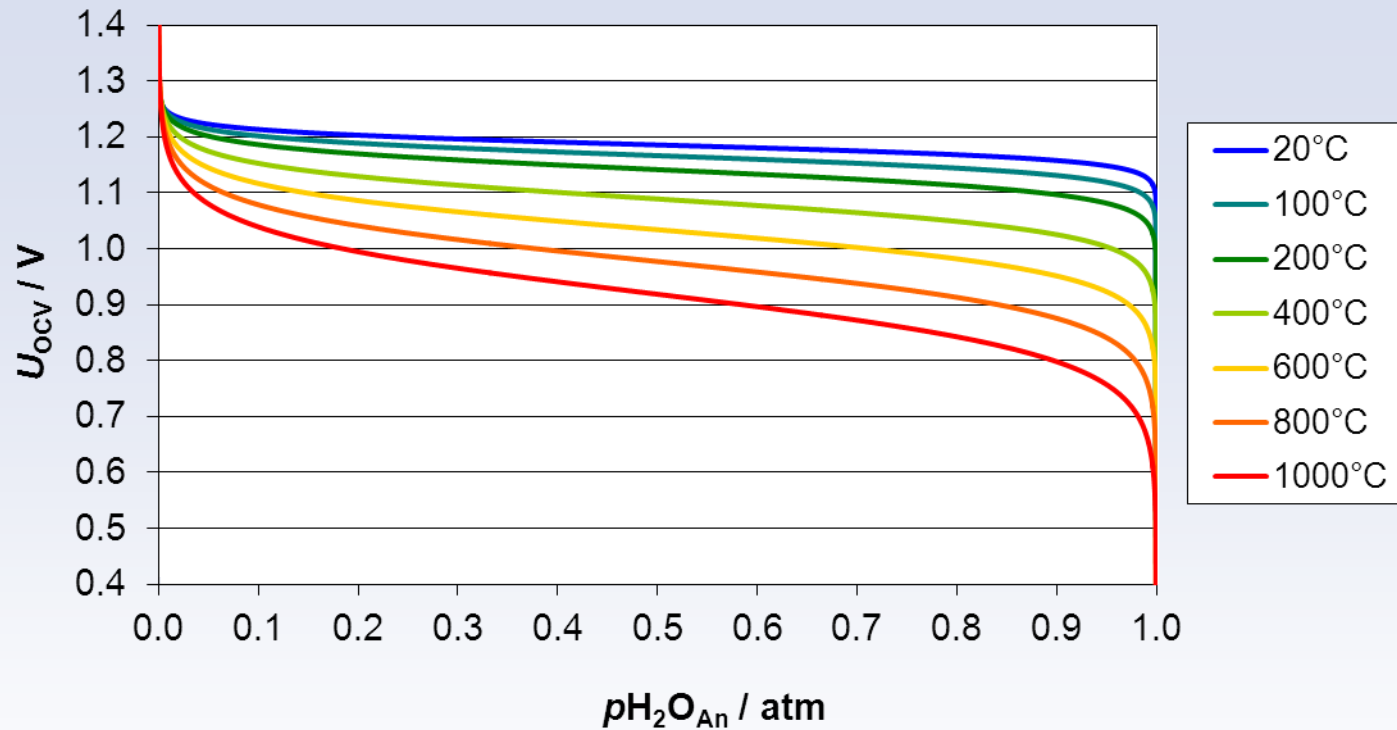
U_{OCV} sinkt mit steigender Temperatur!
 U_{OCV} steigt mit zunehmenden $pO_{2,Kat}$

$pH_{2,An} = 0.50$ atm

$pH_{2O,An} = 0.50$ atm

Leerlaufspannung U_{OCV}

Abhängigkeit von $p_{H_2O_{An}}$ und T



U_{OCV} sinkt mit steigender Temperatur!
 U_{OCV} fällt mit zunehmenden $p_{H_2O_{An}}$

$$p_{H_2,An} = 1 - p_{H_2O_{An}}$$

$$p_{O_{2,Kat}} = 1.00 \text{ atm}$$

Aufgabe 1 d)

Theoretische Zellspannung U_{th}

1. Es gibt mehrere Möglichkeiten, die theoretische Zellspannung U_{th} zu berechnen:

d. Berechnen Sie die theoretische Zellspannung einer Brennstoffzelle für den Fall $T = 298 \text{ K}$, $p_{O_2}^K = 0.21 \text{ atm}$, $p_{H_2}^A = 0.97 \text{ atm}$, $p_{H_2O}^A = 0.03 \text{ atm}$.

Berechnung des anodenseitigen Sauerstoffpartialdrucks über das Massenwirkungsgesetz aus 1 c) für vorgegebene Betriebsbedingungen und anschließend Einsetzen in die Lösung aus 1 b).

$$\frac{1}{\sqrt{p_{O_2}^A}} = \exp\left(\frac{-\Delta G_0(T)}{RT}\right) \cdot \frac{p_{H_2}^A}{p_{H_2O}^A} \quad \Rightarrow \quad p_{O_2}^A = \left[\exp\left(\frac{\Delta G_0(T)}{RT}\right) \cdot \frac{p_{H_2O}^A}{p_{H_2}^A} \right]^2$$

Temperatur:

Universelle Gaskonstante:

Freie Standardreaktionsenthalpie

T

$R = 8.314 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$

$\Delta G_0(T)$



Aufgabe 1 d)

Theoretische Zellspannung U_{th}

1. Es gibt mehrere Möglichkeiten, die theoretische Zellspannung U_{th} zu berechnen:

d. Berechnen Sie die theoretische Zellspannung einer Brennstoffzelle für den Fall $T = 298 \text{ K}$, $p_{O_2}^K = 0.21 \text{ atm}$, $p_{H_2}^A = 0.97 \text{ atm}$, $p_{H_2O}^A = 0.03 \text{ atm}$.

Freie Standardreaktionsenthalpie:

$$\Delta G_0(T) = \Delta H_0 - T\Delta S_0$$

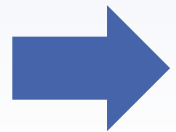
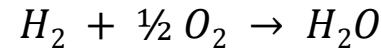
Standardreaktionsenthalpie:

$$\Delta H_0 = \sum \Delta H_{0,Produkte} - \sum \Delta H_{0,Edukte}$$

Standardreaktionsentropie:

$$\Delta S_0 = \sum \Delta S_{0,Produkte} - \sum \Delta S_{0,Edukte}$$

Zellreaktion:



$$\Delta G_0(298 \text{ K}) = \Delta H_0 - 298 \text{ K} \cdot \Delta S_0 = -228 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

chem. Verbindung	ΔH_B^0 [kJ/mol]	ΔG_B^0 [kJ/mol]	S^0 [J/molK]
H	+218.0	+203.3	114.7
F	+79.0	+61.9	158.8
Cl	+121.7	+105.7	165.2
O	+249.2	+231.8	161.1
N	+472.7	+455.9	153.3
C(f)(Graphit)	0	0	5.8
C(f)(Diamant)	+1.895	+2.9	2.4
H ₂	0	0	130.7
F ₂	0	0	202.8
N ₂	0	0	161.6
Cl ₂	0	0	223.1
O ₂	0	0	205.1
O ₃	+142.8	+163.3	239.0
H ₂ O(g)	-242.0	-228.7	188.8
H ₂ O(fl)	-286.0	-237.3	70.0
HF	-271.3	-273.4	173.8
HCl	-92.4	-95.4	186.9
NO	+90.3	-86.6	210.8
NH ₃	-46.1	-16.5	192.5
CO	-110.6	-137.2	197.7
CO ₂	-393.8	-394.6	213.8

BuB-Skript
S.26

Aufgabe 1 d)

Theoretische Zellspannung U_{th}

1. Es gibt mehrere Möglichkeiten, die theoretische Zellspannung U_{th} zu berechnen:

d. Berechnen Sie die theoretische Zellspannung einer Brennstoffzelle für den Fall $T = 298 \text{ K}$, $p_{O_2}^K = 0.21 \text{ atm}$, $p_{H_2}^A = 0.97 \text{ atm}$, $p_{H_2O}^A = 0.03 \text{ atm}$.

Berechnung des anodenseitigen Sauerstoffpartialdrucks über das Massenwirkungsgesetz aus 1 c) für vorgegebene Betriebsbedingungen und anschließend Einsetzen in die Lösung aus 1 b).

$$\frac{1}{\sqrt{p_{O_2}^A}} = \exp\left(\frac{-\Delta G_0(T)}{RT}\right) \cdot \frac{p_{H_2}^A}{p_{H_2O}^A} \quad \rightarrow \quad p_{O_2}^A = \left[\exp\left(\frac{\Delta G_0(T)}{RT}\right) \cdot \frac{p_{H_2O}^A}{p_{H_2}^A} \right]^2$$

$$\rightarrow \quad p_{O_2}^A = \left[\exp\left(\frac{-228 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}}{R \cdot 298 \text{ K}}\right) \cdot \frac{0.03 \text{ atm}}{0.97 \text{ atm}} \right]^2 = 1.12 \cdot 10^{-83} \text{ atm}$$

Universelle Gaskonstante: $R = 8.314 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$

Aufgabe 1 d)

Theoretische Zellspannung U_{th}

1. Es gibt mehrere Möglichkeiten, die theoretische Zellspannung U_{th} zu berechnen:

d. Berechnen Sie die theoretische Zellspannung einer Brennstoffzelle für den Fall $T = 298 \text{ K}$, $p_{O_2}^K = 0.21 \text{ atm}$, $p_{H_2}^A = 0.97 \text{ atm}$, $p_{H_2O}^A = 0.03 \text{ atm}$.

Werte für $p_{O_2}^A$ und $p_{O_2}^K$ eingesetzt in 1 b):

$$U_{th} = \frac{RT}{nF} \cdot \ln\left(\sqrt{\frac{p_{O_2}^K}{p_{O_2}^A}}\right)$$

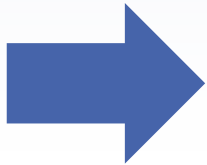
Alternativ:

Werte eingesetzt in 1 c):

$$U_{th} = \frac{-\Delta G_0(T)}{RT} + \frac{RT}{nF} \cdot \ln\left(\sqrt{p_{O_2}^K} \cdot \frac{p_{H_2}^A}{p_{H_2O}^A}\right)$$

$$U_{th} = \frac{R \cdot 298 \text{ K}}{nF} \cdot \ln\left(\sqrt{\frac{0.21 \text{ atm}}{1.12 \cdot 10^{-83} \text{ atm}}}\right)$$

$$U_{th} = \frac{-(-228 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}})}{R \cdot 298 \text{ K}} + \frac{R \cdot 298 \text{ K}}{nF} \cdot \ln(\sqrt{0.21 \text{ atm}} \cdot \frac{0.97 \text{ atm}}{0.03 \text{ atm}})$$



$$U_{th} = 1.22 \text{ V}$$

Universelle Gaskonstante: $R = 8.314 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$
Faradaykonstante: $F = 96485.3 \text{ As/mol}$
Ladungszahl der Ionen: $n_{O^{2-}} = 2$



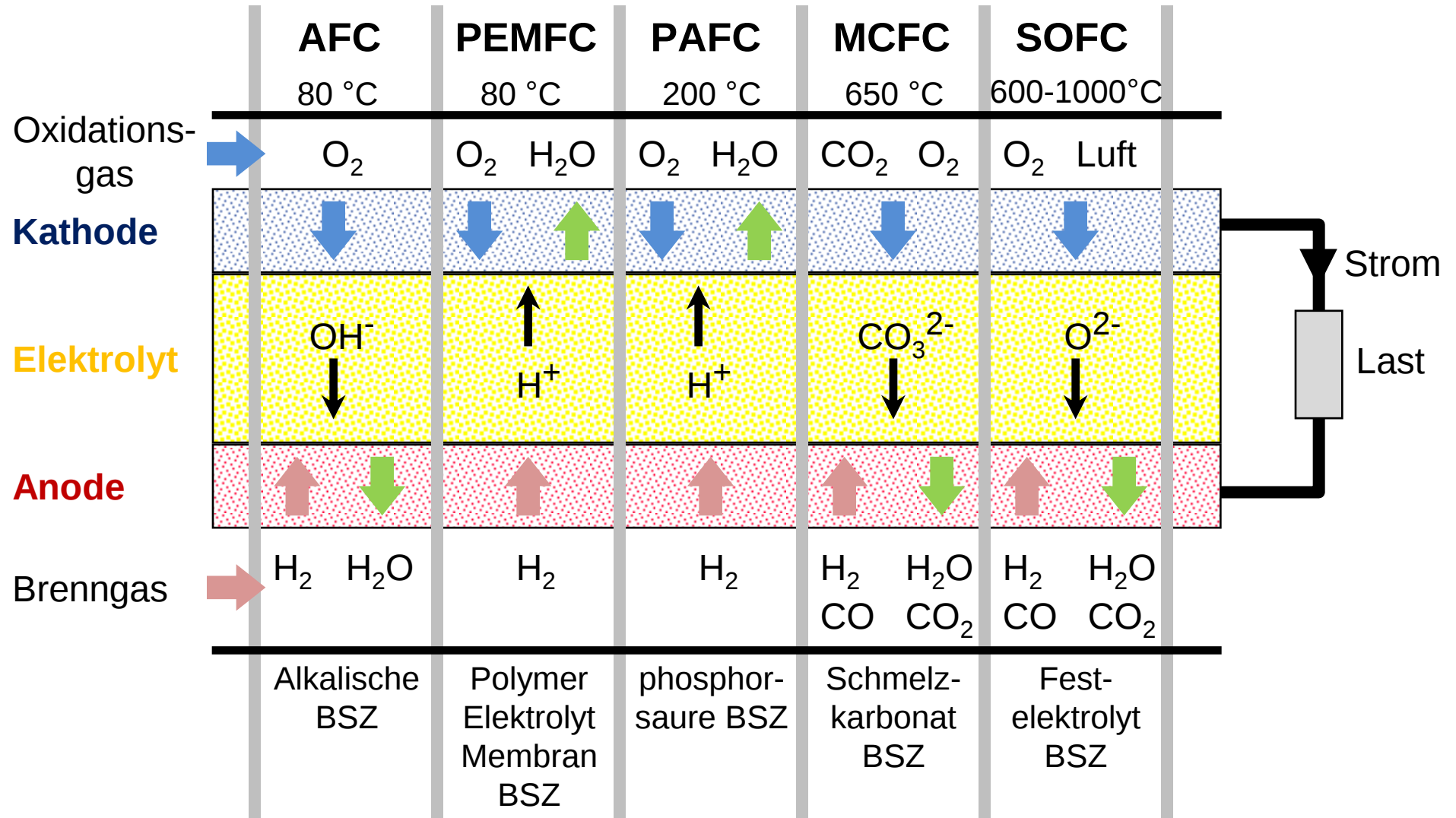
Aufgabe 2

Brennstoffzellentypen

2. Geben Sie die Halbzellenreaktionen der Anoden- und Kathodenseite der Ihnen bekannten Brennstoffzellentypen an.

Aufgabe 2

Brennstoffzellentypen



Aufgabe 2

Brennstoffzellentypen

2. Geben Sie die Halbzellenreaktionen der Anoden- und Kathodenseite der Ihnen bekannten Brennstoffzellentypen an.

Zelltyp	AFC	PEMF / PAFC	MCFC	SOFC
Oxidationsgas	O ₂	O ₂	O ₂ / CO ₂	O ₂ / Luft
Kathode Reaktion	$H_2O + \frac{1}{2} O_2 + 2e^- \rightarrow 2OH^-$	$\frac{1}{2} O_2 + 2H^+ + 2e^- \rightarrow H_2O$	$\frac{1}{2} O_2 + CO_2 + 2e^- \rightarrow CO_3^{2-}$	$\frac{1}{2} O_2 + 2e^- \rightarrow O^{2-}$
Ladungsträger	↓ OH ⁻	↑ H ⁺	↓ CO ₃ ²⁻	↓ O ²⁻
Anode Reaktion	$2OH^- + H_2 \rightarrow 2H_2O + 2e^-$	$H_2 \rightarrow 2H^+ + 2e^-$	$H_2 + CO_3^{2-} \rightarrow H_2O + CO_2 + 2e^-$	$H_2 + O^{2-} \rightarrow H_2O + 2e^-$ $CO + O^{2-} \rightarrow CO_2 + 2e^-$
Brenngas	H ₂	H ₂	H ₂ / CO	H ₂ / CO

Aufgabe 3

Brenngasausnutzung

3. Eine Brennstoffzelle (SOFC) mit 16 cm^2 aktiver Elektrodenfläche wird mit 1000 ml/min Brenngas (55 % H_2 , 45 % H_2O) in einem Arbeitspunkt bei $U_{\text{Zelle}} = 0.8 \text{ V}$ und 1.2 A/cm^2 betrieben. Berechnen Sie die Brenngasausnutzung!

Aufgabe 3

Brenngasausnutzung

3. Eine Brennstoffzelle (SOFC) mit 16 cm^2 aktiver Elektrodenfläche wird mit 1000 ml/min Brenngas (55 % H_2 , 45 % H_2O) in einem Arbeitspunkt bei $U_{\text{Zelle}} = 0.8 \text{ V}$ und 1.2 A/cm^2 betrieben. Berechnen Sie die Brenngasausnutzung!

Brenngasausnutzung:

$$\beta_f = \frac{\text{in der Zelle verbrauchter Brennstoff}}{\text{der Zelle zugeführter Brennstoff}}$$



Berechnung:

1. *Molenstrom* des zugeführten Brenngases
2. *Stromäquivalent* des zugeführten Brenngases
3. *Brenngasausnutzung*

3. Eine Brennstoffzelle (SOFC) mit 16 cm^2 aktiver Elektrodenfläche wird mit 1000 ml/min Brenngas (55 % H_2 , 45 % H_2O) in einem Arbeitspunkt bei $U_{\text{Zelle}} = 0.8 \text{ V}$ und 1.2 A/cm^2 betrieben. Berechnen Sie die Brenngasausnutzung!

1. Molenstrom des zugeführten Brenngases

Volumenstrom: $\dot{V}_{\text{H}_2} = 55 \% \cdot 1000 \text{ ml/min}$
 $= 550 \text{ ml/min} = 9.17 \text{ ml/s} = 0.00917 \text{ l/s}$

Molares Volumen eines ideales Gases: $V_{\text{m}} = 22.4 \text{ l/mol}$ (bei Normbedingungen)

Molenstrom: $\dot{n}_{\text{H}_2, \text{mol}} = \frac{\dot{V}_{\text{H}_2}}{V_{\text{m}}} = \frac{0.00917 \text{ l/s}}{22.4 \text{ l/mol}} = 4.09 \cdot 10^{-4} \text{ mol/s}$

3. Eine Brennstoffzelle (SOFC) mit 16 cm^2 aktiver Elektrodenfläche wird mit 1000 ml/min Brenngas ($55 \% \text{ H}_2$, $45 \% \text{ H}_2\text{O}$) in einem Arbeitspunkt bei $U_{\text{Zelle}} = 0.8 \text{ V}$ und 1.2 A/cm^2 betrieben. Berechnen Sie die Brenngasausnutzung!

2. *Stromäquivalent* des zugeführten Brenngases

Avogadro-Konstante: $N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ 1/mol}$ (Anzahl der Moleküle pro Mol)

Anzahl Moleküle pro s: $\dot{n}_{\text{H}_2} = \dot{n}_{\text{H}_2, \text{mol}} \cdot N_A = 2.46 \cdot 10^{20} \text{ 1/s}$

➤ Ein Molekül H_2 nimmt ein O^{2-} -Ion auf und reagiert zu H_2O , wobei **2** e^- frei werden!

Anzahl Elektronen pro s: $\dot{n}_{e^-} = \dot{n}_{\text{H}_2} \cdot 2 = 4.93 \cdot 10^{20} \text{ 1/s}$

Ladung eines Elektrons: $e = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

Stromäquivalent: $I_m = \dot{n}_{e^-} \cdot e = 78.9 \text{ C/s} = \boxed{78.9 \text{ A}}$

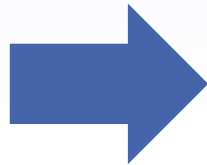
3. Eine Brennstoffzelle (SOFC) mit 16 cm^2 aktiver Elektrodenfläche wird mit 1000 ml/min Brenngas (55 % H_2 , 45 % H_2O) in einem Arbeitspunkt bei $U_{\text{Zelle}} = 0.8 \text{ V}$ und 1.2 A/cm^2 betrieben. Berechnen Sie die Brenngasausnutzung!

3. Brenngasausnutzung

$$\beta = \frac{I_{\text{Zelle}}}{I_{\text{M}}}$$

Von der BSZ produzierter Strom im Arbeitspunkt bei $U_{\text{Zelle}} = 0.8 \text{ V}$

$$\begin{aligned} I_{\text{Zelle}} &= j_{\text{Zelle}} \cdot A_{\text{Zelle}} \\ &= 1.2 \text{ A/cm}^2 \cdot 16 \text{ cm}^2 = 19.2 \text{ A} \end{aligned}$$



$$\beta = \frac{19.2 \text{ A}}{78.9 \text{ A}} = 24\%$$

Aufgabe 4

SOFC-System

4. Ein mit Erdgas betriebener SOFC-Stack wird in einem Einfamilienhaus zur Stromerzeugung eingesetzt. Das System soll dauerhaft 1 kW elektrische Leistung zur Verfügung stellen. Im Arbeitspunkt stellt sich eine Zellspannung von 0.7 V ein.
- a. Berechnen Sie, welcher Gasfluss (kg/min) dazu an der Anode (reines CH_4) nötig ist.
- Angaben: $\eta_{\text{elektrisch}} = 30\%$, freie Reaktionsenthalpie: $\Delta G \approx -800 \text{ kJ/mol}$,
Molare Masse: $M_{\text{CH}_4} = 16.04 \text{ g/mol}$.

Aufgabe 4

SOFC-System

4. Ein mit Erdgas betriebener SOFC-Stack wird in einem Einfamilienhaus zur Stromerzeugung eingesetzt. Das System soll dauerhaft 1 kW elektrische Leistung zur Verfügung stellen. Im Arbeitspunkt stellt sich eine Zellspannung von 0.7 V ein.
- a. Berechnen Sie, welcher Gasfluss (kg/min) dazu an der Anode (reines CH_4) nötig ist.
- Angaben: $\eta_{\text{elektrisch}} = 30\%$, freie Reaktionsenthalpie: $\Delta G \approx -800 \text{ kJ/mol}$, Molare Masse: $M_{\text{CH}_4} = 16.04 \text{ g/mol}$.

Dreisatz:

$$\eta_{\text{elektrisch}} = \frac{P_{\text{elektrisch}}}{P_{\text{th}}} \cdot 100 \%$$

P_{th} : Theoretische elektrische Leistung des zugeführten Gases



$$P_{\text{th}} = \frac{1 \text{ kW}}{30 \%} \cdot 100 \% = \frac{10}{3} \text{ kW} = \frac{10 \text{ kJ}}{3 \text{ s}} \cdot \frac{60 \text{ s}}{1 \text{ min}} = 200 \frac{\text{kJ}}{\text{min}}$$

Molenstrom:

$$\dot{n}_{\text{CH}_4, \text{mol}} = \frac{P_{\text{th}}}{-\Delta G} = \frac{200 \frac{\text{kJ}}{\text{min}}}{-(-800 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}})} = 0.25 \text{ mol/min} \quad (P_{\text{th}} = U_{\text{th}} \cdot I_m)$$

Massenstrom:

$$\dot{M}_{\text{CH}_4} = \dot{n}_{\text{CH}_4, \text{mol}} \cdot M_{\text{CH}_4} = 0.25 \frac{\text{mol}}{\text{min}} \cdot 16.04 \frac{\text{g}}{\text{mol}} = 4.01 \text{ g/min}$$

Aufgabe 4

SOFC-System

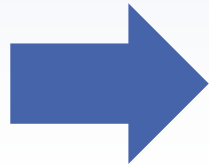
4. Ein mit Erdgas betriebener SOFC-Stack wird in einem Einfamilienhaus zur Stromerzeugung eingesetzt. Das System soll dauerhaft 1 kW elektrische Leistung zur Verfügung stellen. Im Arbeitspunkt stellt sich eine Zellspannung von 0.7 V ein.
- b. Zusätzlich wird die Abwärme der SOFC zur Erhitzung von Warmwasser genutzt. Welcher Gesamtwirkungsgrad ergibt sich bei einer nutzbaren Abwärmeleistung von 2 kW?

Gesamtwirkungsgrad:

$$\eta_{gesamt} = \eta_{elektrisch} + \eta_{thermisch}$$

$$\eta_{gesamt} = \frac{P_{elektrisch}}{P_{th}} + \frac{P_{thermisch}}{P_{th}}$$

$$\eta_{gesamt} = \frac{1 \text{ kW}}{\frac{10}{3} \text{ kW}} + \frac{2 \text{ kW}}{\frac{10}{3} \text{ kW}}$$



$$\eta_{gesamt} = 30\% + 60\% = 90\%$$

Aufgabe 5

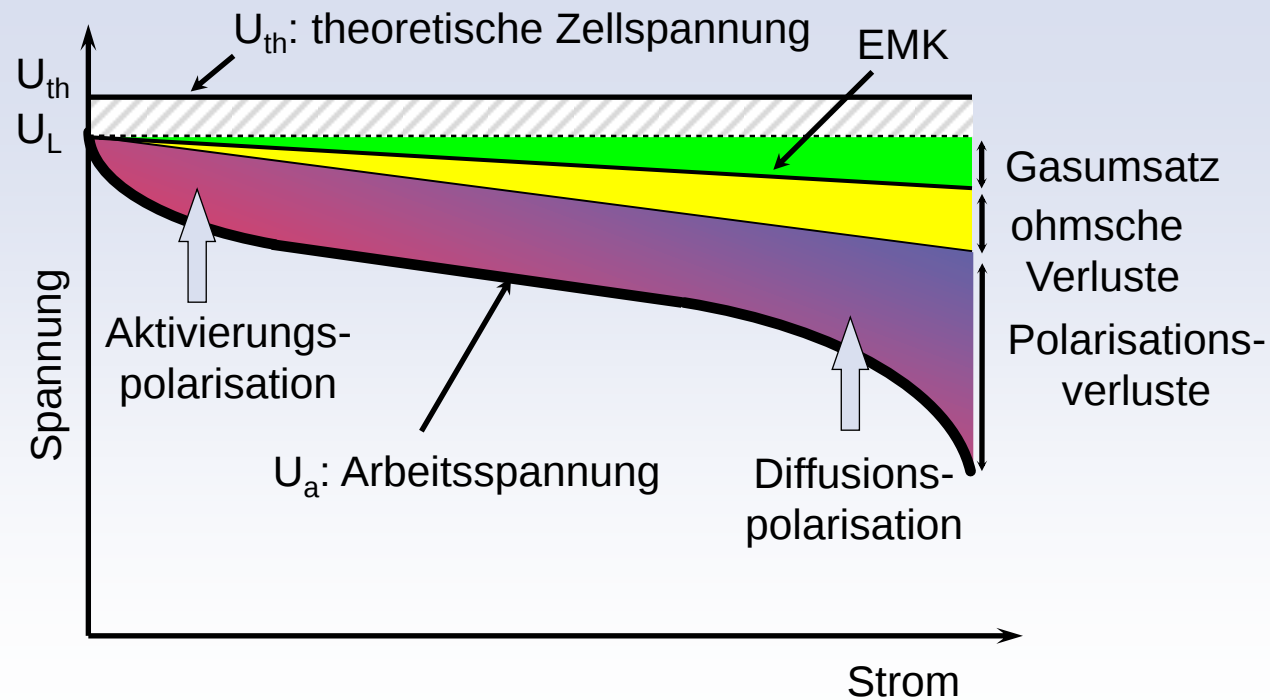
UI-Kennlinie

5. Die UI-Kennlinie einer Brennstoffzelle beschreibt die Arbeitsspannung der Zelle über den gelieferten Gleichstrom.
 - a. Skizzieren Sie die UI-Kennlinie einer BSZ.
 - b. Welche Verlustanteile gibt es in der BSZ und was sind deren Ursachen?
 - c. Wie verändert sich die UI-Kennlinie mit steigender Temperatur (Annahme: Wasserstoffbetrieb)?

Aufgabe 5

UI-Kennlinie

5. Die UI-Kennlinie einer Brennstoffzelle beschreibt die Arbeitsspannung der Zelle über den gelieferten Gleichstrom.
- Skizzieren Sie die UI-Kennlinie einer BSZ.
 - Welche Verlustanteile gibt es in der BSZ und was sind deren Ursachen?

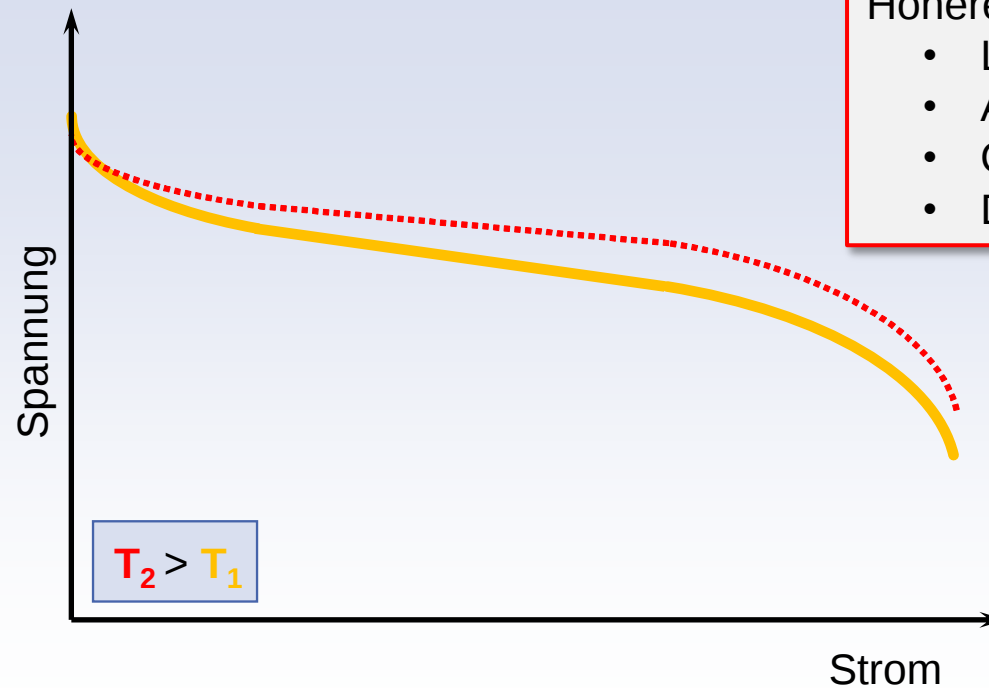


BuB-Skript
S.41

Aufgabe 5

UI-Kennlinie

5. Die UI-Kennlinie einer Brennstoffzelle beschreibt die Arbeitsspannung der Zelle über den gelieferten Gleichstrom.
- c. Wie verändert sich die UI-Kennlinie mit steigender Temperatur (Annahme: Wasserstoffbetrieb)?



Höhere Temperatur T_2 führt zu:

- Leerlaufspannung ↓
- Aktivierungsverluste ↓
- Ohmsche Verluste ↓
- Diffusionsverluste =

Aufgabe 6

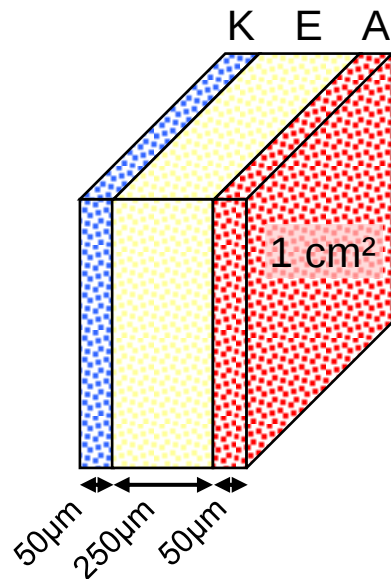
Ohmsche Verluste

6. Berechnen Sie die ohmschen Verluste der verschiedenen SOFC Brennstoffzellenkonzepte bei einer Temperatur von 950°C mit den folgenden Parametern:

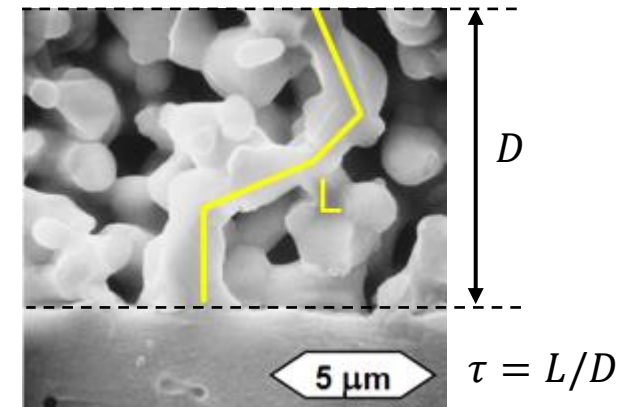
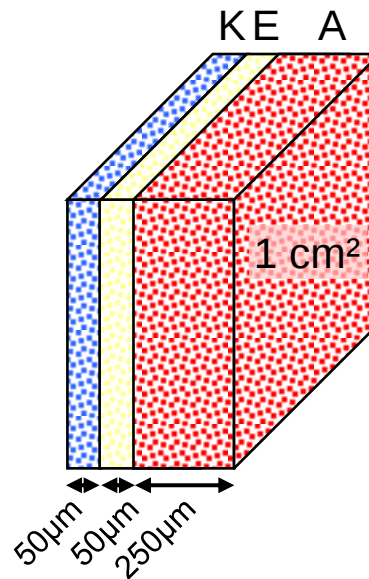
$$\sigma_{ion,YSZ} = 12 \text{ S/m}; \sigma_{electron,Ni} = 10^5 \text{ S/m}; \sigma_{electron,LSM} = 10^4 \text{ S/m}$$

$$\tau_{Anode} = 1.3; \varepsilon_{Anode} = 30\%; \tau_{Kathode} = 1.4; \varepsilon_{Kathode} = 40 \%$$

Elektrolytgestützten Zelle (ESC)



Anodengestützten Zelle (ASC)



Hinweis: Die effektive Leitfähigkeit eines Materials berechnet sich aus der Porosität des Materials und dem Umwegfaktor τ (Tortuosität) mit der Gleichung $\sigma_{eff} = \sigma \cdot (1 - \varepsilon_{pore}) / \tau_{Material}$.

Aufgabe 6

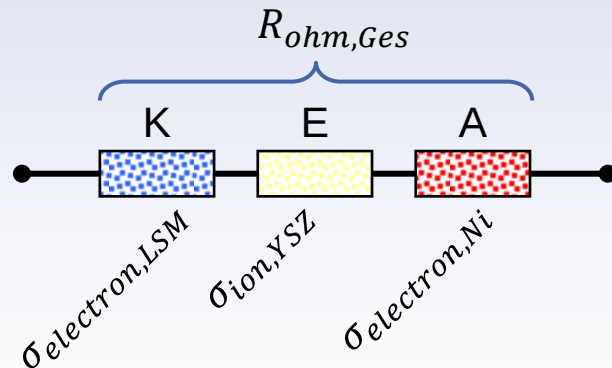
Ohmsche Verluste

6. Berechnen Sie die ohmschen Verluste der verschiedenen SOFC Brennstoffzellenkonzepte bei einer Temperatur von 950°C mit den folgenden Parametern:

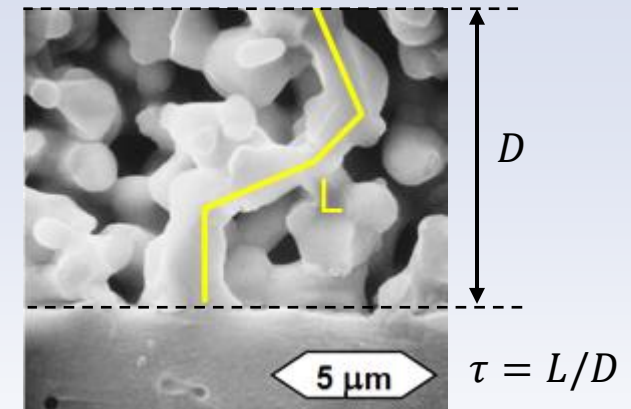
$$\sigma_{ion,YSZ} = 12 \text{ S/m}; \sigma_{electron,Ni} = 10^5 \text{ S/m}; \sigma_{electron,LSM} = 10^4 \text{ S/m}$$

$$\tau_{Anode} = 1.3; \varepsilon_{Anode} = 30\%; \tau_{Kathode} = 1.4; \varepsilon_{Kathode} = 40 \%$$

$$R = \frac{1}{\sigma_{eff}} \cdot \frac{l}{A} = \frac{1}{\sigma \cdot (1 - \varepsilon)/\tau} \cdot \frac{l}{A}$$



$$R_{ohm,Ges} = R_{ohm,K} + R_{ohm,E} + R_{ohm,A}$$



Hinweis: Die effektive Leitfähigkeit eines Materials berechnet sich aus der Porosität des Materials und dem Umwegfaktor τ (Tortuosität) mit der Gleichung $\sigma_{eff} = \sigma \cdot (1 - \varepsilon_{Pore})/\tau_{Material}$

Aufgabe 6

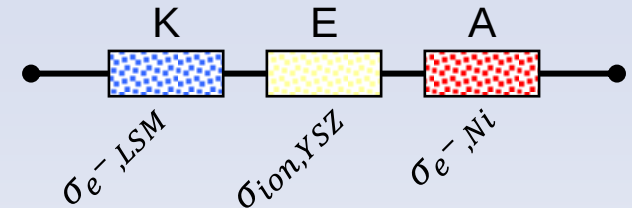
Ohmsche Verluste

6. Berechnen Sie die ohmschen Verluste der verschiedenen SOFC Brennstoffzellenkonzepte bei einer Temperatur von 950°C mit den folgenden Parametern:

$$\sigma_{ion,YSZ} = 12 \text{ S/m}; \sigma_{electron,Ni} = 10^5 \text{ S/m}; \sigma_{electron,LSM} = 10^4 \text{ S/m}$$
$$\tau_{Anode} = 1.3; \varepsilon_{Anode} = 30\%; \tau_{Kathode} = 1.4; \varepsilon_{Kathode} = 40 \%$$

$$\frac{R}{l} = \frac{1}{\sigma \cdot (1 - \varepsilon)/\tau} \cdot \frac{1}{A}$$

Unabhängig von der Schichtdicke



$$\frac{R_{ohm,K}}{l} = \frac{1}{\sigma_{electron,LSM} \cdot (1 - \varepsilon_{Kathode})/\tau_{Kathode}} \cdot \frac{1}{A} = \frac{1}{10^4 \text{ S/m} \cdot (1 - 0.4)/1.4} \cdot \frac{1}{10^{-4} \text{ m}^2} = 2.3\bar{3} \text{ } \Omega/\text{m}$$

$$\frac{R_{ohm,E}}{l} = \frac{1}{\sigma_{ion,YSZ}} \cdot \frac{1}{A} = \frac{1}{12 \text{ S/m}} \cdot \frac{1}{10^{-4} \text{ m}^2} = 833.3\bar{3} \text{ } \Omega/\text{m}$$

$$\frac{R_{ohm,A}}{l} = \frac{1}{\sigma_{electron,Ni} \cdot (1 - \varepsilon_{Anode})/\tau_{Anode}} \cdot \frac{1}{A} = \frac{1}{10^5 \text{ S/m} \cdot (1 - 0.3)/1.3} \cdot \frac{1}{10^{-4} \text{ m}^2} = 0.1857 \text{ } \Omega/\text{m}$$

Aufgabe 6

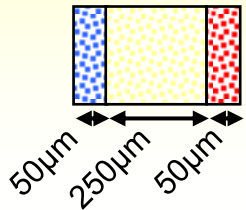
Ohmsche Verluste

6. Berechnen Sie die ohmschen Verluste der verschiedenen SOFC Brennstoffzellenkonzepte bei einer Temperatur von 950°C mit den folgenden Parametern:

$$R_{ohm,gesamt} = l_K \cdot \frac{R_{ohm,K}}{l} + l_E \cdot \frac{R_{ohm,E}}{l} + l_A \cdot \frac{R_{ohm,A}}{l}$$

Elektrolytgestützten Zelle (ESC)

K E A



$$R_{ohm,ESC} = 50 \cdot 10^{-6} m \cdot 2.33 \frac{\Omega}{m} + 250 \cdot 10^{-6} m \cdot 833.33 \frac{\Omega}{m} + 50 \cdot 10^{-6} m \cdot 0.1857 \frac{\Omega}{m}$$

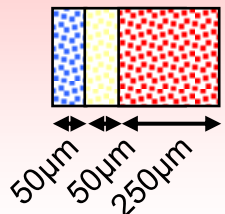
$$R_{ohm,ESC} = 116.6\bar{6} \mu\Omega + 208.33 m\Omega + 9.28 \mu\Omega$$

$R_{ohm,ESC} = 208.46 m\Omega \approx R_{ohm,E}$

➔
Elektrolyt dominiert ohmsche Verluste!

Anodengestützten Zelle (ASC)

K E A



$$R_{ohm,ASC} = 50 \cdot 10^{-6} m \cdot 2.33 \frac{\Omega}{m} + 50 \cdot 10^{-6} m \cdot 833.33 \frac{\Omega}{m} + 250 \cdot 10^{-6} m \cdot 0.1857 \frac{\Omega}{m}$$

$$R_{ohm,ASC} = 116.6\bar{6} \mu\Omega + 41.6\bar{6} m\Omega + 46.4 \mu\Omega$$

$R_{ohm,ASC} = 41.83 m\Omega \approx R_{ohm,E}$

➔
 $R_{ohm,ASC} < R_{ohm,ESC} !$