

Definitionen

Bezeichnungen ' : Eduktseite " : Produktseite

Edukt / Produkt

 Allgemeine Schreibweise $\sum_j \nu_j' \cdot M_j \rightleftharpoons \sum_j \nu_j'' \cdot M_j$

 Molmasse und Molmenge M_i bzw. n_i
 Komponente i

 Massenstrom bzw.
 Molenstrom \dot{m} bzw. \dot{n}

 Volumen(Mol-)anteil $X_i = \frac{n_i}{\sum_i n_i} = \frac{n_i}{n_{tot}}$

 Partialdruck $p_i = X_i \cdot p_{tot}$

 Massenanteil $Y_i = \frac{m_i}{m_{tot}}$, wobei $Y_i = X_i \cdot M_i \cdot \frac{\sum_j n_j}{\sum_j n_j \cdot M_j}$

 Molare Konzentration $C_i = \frac{n_i}{V_{tot}}$

 Luftüberschussfaktor $\lambda = \frac{\left(\frac{m_L}{m_B}\right)}{\left(\frac{m_L}{m_B}\right)_{st\ddot{o}chiometrisch}} = \frac{\left(\frac{\dot{m}_L}{\dot{m}_B}\right)}{\left(\frac{\dot{m}_L}{\dot{m}_B}\right)_{st\ddot{o}ch}} = \frac{\left(\frac{n_L}{n_B}\right)}{\left(\frac{n_L}{n_B}\right)_{st\ddot{o}ch}}$

 mit $\left(\frac{m_L}{m_B}\right)_{st\ddot{o}ch} = \left(x + \frac{y}{4}\right) \cdot \frac{M_{O_2} + 3.76 \cdot M_{N_2}}{x \cdot M_C + y \cdot M_H}$ gemäss der Stoffbilanz

Stoffbilanzen für die Oxidation von Kohlenwasserstoffen
 $\lambda \geq 1$ $C_x H_y + \lambda \cdot \left(x + \frac{y}{4}\right) \cdot [O_2 + 3.76 \cdot N_2] \rightarrow$
 $x \cdot CO_2 + \frac{y}{2} \cdot H_2O + (\lambda - 1) \left(x + \frac{y}{4}\right) \cdot O_2 + 3.76 \cdot \lambda \cdot \left(x + \frac{y}{4}\right) \cdot N_2$
 $\lambda < 1$ $C_x H_y + \lambda \cdot \left(x + \frac{y}{4}\right) \cdot [O_2 + 3.76 \cdot N_2] \rightarrow$
 $(1 - \lambda) \cdot C_x H_y + \lambda \cdot x \cdot CO_2 + \lambda \cdot \frac{y}{2} \cdot H_2O + 3.76 \cdot \lambda \cdot \left(x + \frac{y}{4}\right) \cdot N_2$

Energiebetrachtungen - Definitionen

Molare Enthalpie des
idealen Gases

$$h(T, p) = h_f^0(T_{ref}, p_{ref}) + [\bar{h}(T, p_{ref}) - \bar{h}(T_{ref}, p_{ref})]$$

$$h(T, p) = h_f^0(T_{ref}, p_{ref}) + \int_{T_{ref}}^T c_p(T) dT$$

$$h_f^0 \equiv H_{B_j} \quad \text{Standard Bildungsenthalpie}$$

$$\bar{h} \quad \text{Thermische Enthalpie gemäss Tabelle}$$

Reaktionsenthalpie bei
Standard Bedingungen
(T_{ref}, p_{ref})

$$(\Delta H_R)_{T_{ref}} = \sum_j (\nu_j'' - \nu_j') \cdot H_{B_j}$$

Reaktionsenthalpie bei
 $T_x \neq T_{ref}$

$$(\Delta H_R)_{T_x} = (\Delta H_R)_{T_{ref}} + \sum_j [(\nu_j'' - \nu_j') \cdot [\bar{h}_j(T_x, p_{ref}) - \bar{h}_j(T_{ref}, p_{ref})]]$$

(konstante Reaktionstemp)

$$(\Delta H_R)_{T_x} = (\Delta H_R)_{T_{ref}} + \sum_j \left[\int_{T_{ref}}^{T_x} (\nu_j'' - \nu_j') \cdot c_{p_j}(T) \cdot dT \right] \quad \text{für IG}$$

Reaktionswärme

$$\Delta Q_R = -\Delta H_R$$

Energiebetrachtungen – Praktisch

Energiebilanz eines offenen
Systems

$$\Delta H|_{E \rightarrow P} = \Delta Q - \Delta W$$

$$T_E = T_{Edukte}$$

$$T_P = T_{Produkte}$$

$$\text{mit } \Delta H|_{E \rightarrow P} = \sum_{\text{Produkte}} n_P \cdot h(T_P, p) - \sum_{\text{Edukte}} n_E \cdot h(T_E, p)$$

$$\Delta H|_{E \rightarrow P} = (\Delta H_R)_{T_{ref}} + \sum_{\text{Produkte}} \int_{T_{ref}}^{T_P} n_P \cdot c_{p_P}(T) dT - \sum_{\text{Edukte}} \int_{T_{ref}}^{T_E} n_E \cdot c_{p_E}(T) dT$$

Adiabate Flamm-
temperatur

$$T_E = T_{Edukte}$$

$$T_P = T_{Produkte}$$

$$\Delta H|_{E \rightarrow P} = 0$$

oder

$$(\Delta Q_R)_{T_E} = (-\Delta H_R)_{T_E} = \sum_j \int_{T_E}^{T_{f,ad}} \nu_j'' \cdot c_{p_j}(T) \cdot dT$$

Faustregel 1: $T_{f,ad} \max$ für $\lambda=0.8 - 0.9$ (mit Dissoziation)

Faustregel 2: $T_{f,ad} (p=\text{const.}) - T_{Edukte} \approx 2000 \text{ K}$

Entropiebetrachtungen

Molare Entropie eines
idealen Gases

$$s_i(T, p) = s_i^0(T, p_0) - R \ln \left(\frac{p_i}{p_0} \right) = c_{p_i}(T) \ln \left(\frac{T}{T_0} \right) - R \ln \left(\frac{p_i}{p_0} \right)$$

Chemisches Gleichgewicht

Freie Enthalpie

$$G_i(T, p) = H_i(T) - T \cdot S_i(T, p) = G_{0i}(T, p_0) + RT \ln \left(\frac{p_i}{p_0} \right)$$

Gleichgewichts“konstante“
für Partialdrücke

$$\ln K_p(T) = \ln \prod_k \left(\frac{p_k}{p_{ref}} \right)^{\nu_k'' - \nu_k'} \quad \left[= -\frac{\Delta G_0}{R \cdot T} = \frac{-\sum_j (\nu_j'' - \nu_j') \cdot G_{0j}}{R \cdot T} \right]$$

Gleichgewichts“konstante“
für Molkonzentrationen c_j

$$\ln K_c = \ln \prod_j (c_j)^{\nu_j'' - \nu_j'} \quad \text{mit } c_j = \frac{n_j}{V}$$

Exergie

Exergie des Zustandes
eines **geschlossenen**
Systems gegenüber
Umgebung

$$Ex = (U - U_0) + p_0(V - V_0) - T_0(S - S_0)$$

Exergie des Zustandes
eines **offenen** Systems
gegenüber Umgebung

$$Ex = (H - H_0) - T_0(S - S_0)$$

Arbeit bis zur Erreichung
des Gleichgewichts

$$W \nearrow = Ex_{\text{System vs. Umgebung}} - T_0 \Delta S_{\text{irrev.}}$$

Erforderliche Arbeitszufuhr
von aussen zum Erreichen
vom neuen Zustand \neq
Gleichgewicht

$$W \swarrow = Ex_{\text{System vs. Umgebung}} + T_0 \Delta S_{\text{irrev.}}$$

Exergiebilanz eines
Systems (stationär)

$$\sum \dot{m}_{in} e_{in} - \sum \dot{m}_{out} e_{out} + \left(1 - \frac{T_0}{T}\right) \dot{Q} - \dot{W} - \dot{Ex}_{\text{verl.}} = 0$$

Exergieverluste

$$\dot{Ex}_{\text{verl.}} = T_0 \dot{\sigma} = T_0 \Delta \dot{S}_{\text{irrev.}}$$

Exergiebilanz einer
Reaktion

$$W_{\text{rev}} \nearrow = - \left[\sum_j (\nu_j'' - \nu_j') \cdot E_{x_j} \right], W_{\text{rev}} \nearrow > 0 \text{ Arbeit gewonnen}$$

allg.

$$W \nearrow = - \left[\sum_j (\nu_j'' - \nu_j') \cdot H_{Bj} \right] + \left[\sum_j (\nu_j'' - \nu_j') \cdot S_j \right] T_U - T_U \Delta S_{\text{irrev}}$$

in einer idealen Brennstoffzelle (ohne Volumenarbeit)

$$-\Delta Ex_{\text{Reaktion}} = - \left[\sum_j (\nu_j'' - \nu_j') \cdot E_{x_{j,U}} \right]$$

$$= - \sum_j (\nu_j'' - \nu_j') \cdot H_{Bj,U} + \sum_j (\nu_j'' - \nu_j') \cdot S_{j,U} \cdot T_U$$

$$= -\Delta H_{R_U} + \Delta S_{R_U} \cdot T_U = -\Delta G_{R_U} = W_{\text{rev}} \nearrow$$

Exergetische Effizienz
eines Brenners

$$\varepsilon = \frac{Ex_{\text{produkte}}}{Ex_{\text{brennstoff}}} = 1 - \frac{Ex_{\text{verl.}}}{Ex_{\text{brennstoff}}}$$

Brennstoffzellen

nutzbare Energie	$\Delta G_R = \Delta H_R - T \Delta S_R$ i.a. $T \neq T_U$
bestmöglicher Umwandlungswirk.grad	$\eta_{Zelle, \max} = \frac{\Delta G_R}{\Delta H_R} = 1 - T \cdot \frac{\Delta S_R}{\Delta H_R}$
Entropieerzeugung	$\eta_{Zelle, \max} = \frac{\Delta G_R}{\Delta H_R} > 1$
Entropieabnahme	$\eta_{Zelle, \max} = \frac{\Delta G_R}{\Delta H_R} < 1$
Strom	$I = \dot{n}_e \cdot e \cdot N_A = \dot{n}_e \cdot F$ mit $F = 96485.3 \frac{A \cdot s}{mol}$ $I = \dot{n}_e \cdot F = N_E \cdot F \cdot \dot{n}_{Brennstoff}$, mit $N_e = \text{Anzahl Elektronen pro Molekül Brennstoff}$
abgegebene, elektrische Leistung	$P_{BZelle} = -U \cdot I$
$U_H(T)$, kalor. Spannung	$U_H(T) = \frac{H_U}{N_E F} = -\Delta H_R(T) \frac{1}{N_E F}$
$U_{rev}(T, p)$, rev. Spannung	$U_{rev}(T, p) := \frac{-\Delta G_R(T, p)}{N_E F} = \frac{-P_{BZ}^{rev}}{I}$
Energiebilanz einer Brennstoffzelle	$\dot{Q} + P_{BZ} = -\dot{n}_{Brennstoff} H_U(T)$
gemäss 2. Hauptsatz	$-P_{BZ} = -P_{BZ}^{rev} - T \cdot \dot{S}_{irrev} = U_{rev} \cdot I - T \cdot \dot{S}_{irrev} =$ $= \dot{n}_{Brennstoff} [-\Delta G_R(T, p)] - T \cdot \dot{S}_{irrev}$ mit $U_{rev} = -\frac{\Delta G_R(T, p)}{N_E F}$
abgeführter Wärmestrom	$\dot{Q} = -\frac{H_U}{N_E F} I - P_{BZ} = -[U_H - U(I)] \cdot I$
reversibel nutzbarer Wärmestrom	$\dot{Q}_{rev} = -[U_H - U_{rev}] \cdot I$
irreversibler Verlustwärmestrom	$\dot{Q}_{irrev} = -[U_{rev} - U(I)] \cdot I$
energetischer Wirkungsgrad	$\eta_{BZ} = \frac{\dot{n}_{Brennstoff}}{\dot{n}_{Brennstoff}^*} \cdot \frac{U(I)}{U_H(T)}$ mit $\dot{n}_{Brennstoff}$: tatsächlich umgesetzter, $\dot{n}_{Brennstoff}^*$: zugeführter molarer Massenstrom
Spannung von Zellenstapel	$U_{Stapel} = N \cdot U_{Zelle}$ mit $N = \text{Anzahl Zellen}$