

Definitionen

Bezeichnungen Edukt / Produkt	' : Eduktseite	" : Produktseite
Allgemeine Schreibweise	$\sum_j v_j' \cdot M_j \rightleftharpoons \sum_j v_j'' \cdot M_j$	
Molmasse und Molmenge Komponente i	M_i bzw. n_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	$\lambda = \frac{\left(\frac{m_L}{m_B} \right)_{stöchiometrisch}}{\left(\frac{\dot{m}_L}{\dot{m}_B} \right)_{stöch}} = \frac{\left(\frac{\dot{m}_L}{\dot{m}_B} \right)_{stöch}}{\left(\frac{n_L}{n_B} \right)_{stöch}}$	
mit	$\left(\frac{m_L}{m_B} \right)_{stöch} = \left(x + \frac{y}{4} \right) \cdot \frac{M_{O_2} + 3.76 \cdot M_{N_2}}{x \cdot M_C + y \cdot M_H}$	gemäss der Stoffbilanz

Stoffbilanzen für die Oxidation von Kohlenwasserstoffen

$$\lambda \geq 1 \quad C_x H_y + \lambda \cdot (x + \frac{y}{4}) \cdot [O_2 + 3.76 \cdot N_2] \rightarrow \\ x \cdot CO_2 + \frac{y}{2} \cdot H_2 O + (\lambda - 1)(x + \frac{y}{4}) \cdot O_2 + 3.76 \cdot \lambda \cdot (x + \frac{y}{4}) \cdot N_2$$

$$\begin{aligned} \lambda < 1 \\ C_x H_y + \lambda \cdot (x + \frac{y}{4}) \cdot [O_2 + 3.76 \cdot N_2] \rightarrow \\ (1 - \lambda) \cdot C_x H_y + \lambda \cdot x \cdot CO_2 + \lambda \cdot \frac{y}{2} \cdot H_2O + 3.76 \cdot \lambda \cdot (x + \frac{y}{4}) \cdot N_2 \end{aligned}$$

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

Reaktionswärme

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

Energiebetrachtungen – Praktisch

Energiebilanz eines offenen Systems

$$\begin{aligned} T_E &= T_{Edukte} \\ T_P &= T_{Produkte} \end{aligned}$$

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

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

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

Adiabate Flammtemperatur

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

oder

$$\begin{aligned} T_E &= T_{Edukte} \\ T_P &= T_{Produkte} \end{aligned}$$

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

 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

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

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

$$Ex = (H - H_o) - T_o(S - S_o)$$

Arbeit bis zur Erreichung
des Gleichgewichts

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

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

Exergiebilanz eines
Systems (stationär)

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

Exergieverluste

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

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

allg.

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

in einer idealen Brennstoffzelle (ohne Volumenarbeit)

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

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

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

Exergetische Effizienz
eines Brenners

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

Brennstoffzellen

nutzbare Energie $\Delta G_R = \Delta H_R - T \Delta S_R \quad i.a. \quad T \neq T_U$

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 $I = \dot{n}_e \cdot e \cdot N_A = \dot{n}_e \cdot F \quad mit \quad F = 96485.3 \frac{A \cdot s}{mol}$

$$I = \dot{n}_e \cdot F = N_E \cdot F \cdot \dot{n}_{Brennstoff}, \\ mit \quad N_E = \text{Anzahl Elektronen pro Molekül Brennstoff}$$

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 $\dot{Q} + P_{BZ} = -\dot{n}_{Brennstoff} H_U(T)$

$$-P_{BZ} = -P_{BZ}^{rev} - T \cdot \dot{S}_{irrev} = U_{rev} \cdot I - T \cdot \dot{S}_{irrev} = \\ = \dot{n}_{Brennstoff} [-\Delta G_R(T, p)] - T \cdot \dot{S}_{irrev}$$

$$mit \quad U_{rev} = -\frac{\Delta G_R(T, p)}{N_E F}$$

abgeföhrter 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 $\eta_{BZ} = \frac{\dot{n}_{Brennstoff}}{\dot{n}_{Brennstoff}^*} \cdot \frac{U(I)}{U_H(T)} \quad mit \quad \dot{n}_{Brennstoff} : \text{tatsächlich umgesetzter,} \\ \dot{n}_{Brennstoff}^* : \text{zugeführter molarer Massenstrom}$

Spannung von Zellenstapel $U_{Stapel} = N \cdot U_{Zelle} \quad mit \quad N = \text{Anzahl Zellen}$