

# Inhaltsverzeichnis

Danksagung .....	IX
Inhaltsverzeichnis .....	I
Symbolverzeichnis .....	III
Abkürzungsverzeichnis .....	VI
1 Einleitung .....	1
2 Grundlagen .....	5
2.1 Festelektrolytbrennstoffzelle (SOFC) .....	5
2.2 Sauerstoffreduktionsreaktion in Kathoden .....	8
2.3 Gemischtleitende Materialien .....	11
2.3.1 Materialparameter .....	12
2.4 Vergleich unterschiedlicher Kathoden .....	14
2.5 Messtechnik und Auswertung .....	16
2.5.1 Zur Validierung verwendete Messdaten .....	19
3 Mikrostrukturmodellierung von Elektroden .....	23
3.1 Transportphänomene in Elektroden .....	24
3.1.1 Perkolationstheorie .....	26
3.1.2 Perkolation in Kugelschüttungen .....	28
3.1.3 Random-Resistor-Network .....	30
3.2 Modellierung von Elektroden .....	30
3.2.1 Random-Resistor-Network .....	31
3.2.2 Finite-Elemente-Methode .....	32
3.3 Grundlagen der Finite-Elemente-Methode .....	33
3.3.1 Variationelle Formulierung .....	33
3.3.2 Diskretisierung .....	34
3.3.3 Numerische Lösung .....	36
3.4 Modelle für gemischtleitende Kathoden .....	37
3.4.1 Dichte Kathodenschicht .....	37
3.4.2 Rotationssymmetrisches 2D-FEM-Modell .....	39
3.4.3 Betrachtung als homogenes Medium .....	40
4 FEM-Mikrostrukturmodell für Elektroden .....	43
4.1 Modellansatz .....	43
4.1.1 Abbildung der Mikrostruktur .....	43
4.1.2 Erweiterung der RRN-Modelle .....	44
4.1.3 Physikalische Vorgänge .....	45
4.1.4 Finite-Elemente-Methode .....	46
4.2 Implementierung .....	47
4.2.1 Geometrie .....	48
4.2.2 Rechengitter, Materialverteilung und Berechnung .....	48
4.3 Kenngrößen des FEM-Mikrostrukturmodells .....	50
4.3.1 Geometrische Kenngrößen .....	50
4.3.2 Effektive Leitfähigkeit .....	50
4.4 Physikalische Beschreibung der Elektrodentypen .....	51
4.4.1 Gemischtleitende Kathoden .....	51
4.4.2 Elektronenleitende Kathoden .....	55
4.4.3 Querleitfähigkeitsmodell .....	57
4.5 Materialparameter .....	57
4.5.1 Gemischtleitende Materialien .....	59
4.5.2 Elektronenleitende Kathoden .....	62
4.6 Zusammenfassung FEM-Mikrostrukturmodell .....	64
5 Analyse FEM-Mikrostrukturmodell .....	65
5.1 Geometrische Kenngrößen .....	65
5.1.1 Bewertung und Anwendung der geometrischen Kenngrößen .....	66
5.2 Numerische Untersuchungen zum FEM-Mikrostrukturmodell .....	67

5.2.1	Untersuchung zum Rechengitter .....	67
5.2.2	Flüsse über Ecken und Kanten .....	72
5.2.3	Einfluss der Modellgröße .....	75
5.2.4	High-Performance-Computing (HPC) – Modell .....	76
5.3	Transportphänomene in Elektroden .....	77
5.3.1	Perkolationstheorie .....	78
5.3.2	FEM-Mikrostrukturmodell .....	79
5.3.3	Vergleich der Modelle .....	81
5.4	Vorbetrachtungen zum Modell für gemischtleitende Kathoden .....	82
5.5	Experimentelle Verifikation .....	83
5.5.1	Gemischtleitende Kathoden .....	83
5.5.2	LSM-Kathode .....	87
5.6	Zusammenfassung Analyse FEM-Mikrostrukturmodell .....	88
6	Ergebnisse und Diskussion .....	91
6.1	Modell für gemischtleitende Kathoden .....	91
6.1.1	Gemischtleitende Kathoden ohne Porosität .....	91
6.1.2	Gemischtleitende Kathoden mit Porosität .....	92
6.1.3	Einfluss der Porosität auf ratenbestimmende Prozesse .....	96
6.1.4	Vergleich mit Modellen aus der Literatur .....	98
6.1.5	Stromdichtevertelung in der Kathodenstruktur .....	104
6.2	Mikrostrukturop Optimierung gemischtleitender Kathoden .....	107
6.2.1	Kennflächen und Mikrostrukturparameter .....	107
6.2.2	Einfluss der Porosität .....	109
6.2.3	Optimierungsansätze für die Kathodendicke .....	110
6.2.4	Partikelgröße und Kathodendicke .....	113
6.2.5	Komposit-Elektroden .....	118
7	Zusammenfassung und Ausblick .....	123
	Abbildungs- und Tabellenverzeichnis .....	127
	Glossar .....	129
	Eigene Publikationen .....	131
Anhang A	Berechnung der Tortuosität .....	135
Anhang B	Modelle für Elektroden .....	139
Anhang C	Bestimmung der Dreiphasengrenzlänge mit SPIP .....	140
Anhang D	3D-Rekonstruktion der Elektrodenstruktur .....	142
Anhang E	FEM-Mikrostrukturmodell .....	145
Anhang F	Gleichungen .....	153
Anhang G	Parameter .....	154
	Literaturverzeichnis .....	157