

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 Gemischleitende 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 gemischleitende 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 Gemischleitende Kathoden	51
4.4.2 Elektronenleitende Kathoden	55
4.4.3 Querleitfähigkeitsmodell	57
4.5 Materialparameter	57
4.5.1 Gemischleitende 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

Inhaltsverzeichnis

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	StromdichteVerteilung in der Kathodenstruktur	104
6.2	Mikrostrukturoptimierung 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