

Inhaltsverzeichnis

Symbolverzeichnis	VIII
Lateinische Buchstaben	VIII
Griechische Buchstaben	X
Indizes	XI
Abkürzungen	XII
Hinweise	XV
Kurzfassung	XVII
1 Einleitung	1
1.1 Motivation	1
1.2 Aufbau der Arbeit	2
2 Technologischer Hintergrund	4
2.1 Brennstoffzellen	4
2.2 Ammoniak	9
2.2.1 Konventionelle und alternative Herstellungsverfahren	10
2.2.2 Ammoniak als Energieträger und -speicher	13
2.2.3 Wasserstoff und Ammoniak – eine Effizienzbetrachtung	18
2.3 Ammoniak-Cracker	21
2.3.1 Theoretische Grundlagen	21
2.3.2 Wärmebereitstellung	24
2.3.3 Thermodynamische Bewertungskriterien und -methoden	26
3 Katalysatoren und Kinetik	31
3.1 Katalysatorscreening	31
3.1.1 Katalysatorvorauswahl	32
3.1.2 Teststand mit Integralreaktor	36
3.1.3 Ergebnisse und Diskussion	38
3.2 Kinetik des Ammoniakcrackens	42
3.3 Parameterschätzung	45
3.3.1 Teststandsmodifikationen und Messungen	46
3.3.2 Auswertung und Modellfehler	49
3.3.3 Differenzielle Auswertung integraler Messungen (DAIM)	54
3.3.4 Ergebnisse	59
3.4 Einfluss des Katalysators auf den Crackerwirkungsgrad	60
4 Modellierung und Simulation des Ammoniakcrackens	63
4.1 Ammoniak-Crackermodule	63

4.1.1	Stand der Technik.....	63
4.1.2	ZBT-Cracker	65
4.2	Mathematische Beschreibung.....	66
4.2.1	Stoffeigenschaften	66
4.2.2	Wärmeübertragung	70
4.2.3	Massen- und Stofftransport	72
4.2.4	Impulsgleichung	73
4.2.5	Turbulenzmodell.....	74
4.3	Modellierung und Simulationen	77
4.3.1	Referenzmodell und Validierung	77
4.3.2	Modellierung eines Ringspaltcrackers.....	81
4.3.3	Simulationsergebnisse	83
4.3.4	Parametervariationen.....	84
5	Brennstoffzellensysteme mit Ammoniak-Cracker	95
5.1	Eignung von Brennstoffzellen.....	95
5.2	Brennstoffzellensysteme.....	98
5.3	Modellierung und Simulation.....	101
5.3.1	Modellbildung	101
5.3.2	Ergebnisse	104
5.3.3	Fazit.....	111
6	Zusammenfassung und Ausblick	112
7	Anhang	115
7.1	Stoffeigenschaften	115
7.2	Sicherheit.....	121
7.3	Annahmen, Energiebedarfe und Wirkungsgrade bei der Nutzung von Ammoniak und Wasserstoff als Energieträger.....	121
7.4	T- $\dot{Q}$ -Diagramm Cracker.....	124
7.5	Modellfehler durch polytropen Reaktorbetrieb	124
7.6	Bruttoreaktionsgleichungen der Verbrennung unterschiedlicher Brennstoffe	125
7.7	Ergänzung Simulationsergebnisse.....	125
	Abbildungsverzeichnis	127
	Tabellenverzeichnis	131
	Literaturverzeichnis	134