

# Inhaltsverzeichnis

<b>Vorwort</b>	<b>I</b>
<b>Abstract</b>	<b>III</b>
<b>Zusammenfassung</b>	<b>IX</b>
<b>Notation</b>	<b>XIX</b>
<b>1 Einleitung &amp; Grundlagen</b>	<b>1</b>
1.1 Brennstoffzellensysteme . . . . .	2
1.2 Wasserstofferzeugungssysteme . . . . .	4
1.3 Regenerative Energieträger . . . . .	10
1.4 $H_2$ -Herstellung aus Ethanol und Dimethylether . . . . .	11
1.5 Chemisches Gleichgewicht . . . . .	15
1.5.1 Gleichgewicht der EOH-Dampfreformierung . . . . .	16
1.5.2 Gleichgewicht der DME-Dampfreformierung . . . . .	18
1.5.3 Gesamtbetrachtung . . . . .	20
1.6 Überblick . . . . .	25
<b>2 Experimentelle Untersuchungen zur Kinetik der Dampfreformierung von EOH und DME</b>	<b>27</b>
2.1 Versuchsaufbau . . . . .	27
2.2 Katalysatoren . . . . .	33
2.3 Versuchsdurchführung . . . . .	33
2.4 Experimentelle Ergebnisse . . . . .	35
2.4.1 EOH-Dampfreformierung . . . . .	35
2.4.2 Kinetische Messungen zur EOH-DR an Schüttungen . . . . .	42
2.4.3 Kinetische Messungen zur EOH-DR im Flachbettreaktor . . . . .	46

2.4.4	DME-Dampfreformierung . . . . .	50
2.4.5	Kinetische Messungen zur DME-DR . . . . .	57
2.5	Kinetische Beschreibung . . . . .	59
2.5.1	Grundlagen der Anpassung . . . . .	59
2.5.2	EOH-DR Allgemein . . . . .	60
2.5.3	EOH-DR-Kinetik an beschichteten Spacern . . . . .	61
2.5.4	EOH-DR-Kinetik an Schüttungen . . . . .	62
2.5.5	DME-DR-Kinetik an Schüttungen . . . . .	67
<b>3</b>	<b>Modellierung von zwei Reaktorkonzepten für die EOH- und DME-Reformierung</b>	<b>73</b>
3.1	Überlegungen zu wärmeintegrierten Faltreformerkonzepten . . . . .	74
3.2	Konzeption eines wärmeintegrierten Druckreformers . . . . .	77
3.3	Allgemeine Modellannahmen . . . . .	79
3.4	Modell des Faltreformers . . . . .	82
3.4.1	Massenbilanzen . . . . .	83
3.4.2	Energiebilanzen . . . . .	85
3.4.3	Material- und Energiebilanzen der Seiteneinspeisungen . . . . .	87
3.4.4	Kinetische Beschreibung der beteiligten Reaktionen . . . . .	88
3.5	Modell des Ringspaltdruckreformers . . . . .	90
3.5.1	Reaktionsraum Reformierung . . . . .	90
3.5.2	Reaktionsraum Verbrennung . . . . .	93
3.5.3	2D-Modell zur Wandkopplung von Reformierungs- und Brenngaskanälen . . . . .	96
3.5.4	Eindimensionales Reaktormodell mit unendlicher radialer Wandwärmeleitung . . . . .	98
3.5.5	Wärmetauscher . . . . .	100
3.5.6	Gesamtapparat . . . . .	100
3.5.7	Modellparameter . . . . .	101
3.6	Numerische Lösung . . . . .	102
<b>4</b>	<b>Simulationsstudien zum Faltreaktor</b>	<b>105</b>
4.1	Randbedingungen und Vorstudien . . . . .	105
4.2	Adaption der Faltreformerkonzepte für EOH . . . . .	115
4.2.1	Brennstoffzufuhr und Optimierung . . . . .	117
4.2.2	Ethanol-Reformer mit Wärmetauschern . . . . .	125

4.2.3	Betriebsverhalten des Gesamtapparats . . . . .	127
4.2.4	Fazit . . . . .	131
4.3	Adaption der Faltreformerkonzepte für DME . . . . .	132
<b>5</b>	<b>Simulationsstudien zum Ringspaltdruckreaktor</b>	<b>137</b>
5.1	Randbedingungen und Vorstudien . . . . .	137
5.1.1	Geometrie . . . . .	139
5.1.2	Einfluss des Wandmaterials . . . . .	142
5.2	Reformiergaskanal . . . . .	145
5.3	Brenngaskanal . . . . .	153
5.4	Kopplung zwischen Brenn- und Reformiergaskanal (2D-Modell) . . .	159
5.5	Vollständiger Reaktor (37 Reaktionskanäle) . . . . .	165
5.5.1	Gesamtapparat mit Wärmetauschern . . . . .	170
5.5.2	Lastverhalten . . . . .	172
5.5.3	Kaltstartverhalten . . . . .	176
5.5.4	Fazit . . . . .	178
	<b>Referenzen</b>	<b>181</b>
<b>A</b>	<b>Weitere Informationen zu Kapitel 2</b>	<b>193</b>
<b>B</b>	<b>Modellparameter und weitere Simulationsergebnisse</b>	<b>199</b>
B.1	Geometrie des Faltapparates . . . . .	199
B.1.1	Phasenanteile . . . . .	200
B.1.2	Spezifische Oberflächen . . . . .	200
B.2	Geometrie des Ringspaltdruckreformers . . . . .	201
B.2.1	Phasenanteile . . . . .	201
B.2.2	Spezifische Oberflächen . . . . .	201
B.3	Stoffwerte der Fluide und des Reaktormaterials . . . . .	202
B.3.1	Gasdichte . . . . .	202
B.3.2	Spezifische Wärmekapazität . . . . .	202
B.3.3	Enthalpie, Entropie und Gleichgewichtskonstanten . . . . .	202
B.3.4	Viskosität, Wärmeleitfähigkeit, Diffusionskoeffizienten . . . . .	204
B.4	Transportparameter . . . . .	207
B.4.1	Axiale Dispersionsparameter . . . . .	207
B.4.2	Wärme- und Stofftransportkoeffizienten . . . . .	209
B.5	Weitere Ergebnisse zum Faltreformer . . . . .	213

B.6	Weitere Ergebnisse zum Ringspaltdruckreformer . . . . .	216
<b>C</b>	<b>Untersuchungen zur reaktionsintegrierten <math>H_2</math>-Abtrennung mit Pd-</b>	
	<b>beschichteten Kapillarmembranen</b>	<b>221</b>
C.1	Hintergrund und Motivation . . . . .	221
	C.1.1 Wärmeintegriertes Membranreaktorkonzept . . . . .	222
C.2	Theoretische Grundlagen . . . . .	224
	C.2.1 Membranmaterialien und Bauformen . . . . .	224
	C.2.2 Pd/ $H_2$ -System . . . . .	225
	C.2.3 Trennwirkung und mathematische Beschreibung . . . . .	226
C.3	Pd-beschichtete Keramikkapillaren . . . . .	228
C.4	Anforderungen . . . . .	230
C.5	Experimentelle Untersuchungen . . . . .	231
	C.5.1 Versuchsaufbau . . . . .	232
	C.5.2 Versuchsdurchführung . . . . .	234
	C.5.3 Ergebnisse . . . . .	236
	C.5.4 Theorien hinsichtlich der Schädigung . . . . .	243
C.6	Simulationsstudien . . . . .	245
C.7	Membranmodul . . . . .	248
C.8	Zusammenfassende Bewertung . . . . .	249