

Inhalt

Symbolverzeichnis	xix
Abkürzungsverzeichnis	xxv
1 Einleitung	1
2 Übersicht über Modellierung und Simulation von PEM-Brennstoffzellen	3
2.1 Grundlagen der PEM-Brennstoffzelle	3
2.2 Übersicht bestehender Modelle	5
2.3 Wasserhaushalt in der Zelleinheit	8
2.3.1 Wassertransport in der Gasphase	9
2.3.2 Transport von Flüssigwasser in der GDL	9
2.3.2.1 Mechanismen	9
2.3.2.2 Modellierung	13
2.3.3 Transport von Flüssigwasser in den Gaskanälen	14
2.3.4 Wassertransport im Ionomer	14
2.4 Modellierung der Katalysatorschichten in makroskopischen Modellen . . .	15
2.5 Thermische Widerstände	17
3 Modellbildung	21
3.1 Strömungsgleichungen in der Gasphase	22
3.2 Flüssigwassertransport	26
3.3 Wassertransport im Ionomer	33
3.4 Phasenwechsel des Wassers	34
3.4.1 Verdunstung und Kondensation	34
3.4.1.1 Theoretische Analyse anhand eines idealisierten Modells . .	35
3.4.1.2 Berechnung der Phasenwechselrate im makrohomogenen Modell	38
3.4.2 Absorption und Desorption	40
3.5 Wasserstoff-Crossover	43
3.6 Ladungstransport und Potentiale	44
3.6.1 Ladungsbilanzen	44
3.6.2 Elektrodenpotential im Gleichgewicht	45
3.6.3 Elektrodenpotential im Ungleichgewicht	48
3.7 Reaktionskinetik	48
3.7.1 Anode	49

3.7.2	Kathode	49
3.7.2.1	Idealisiertes Partikelmodell	49
3.7.2.2	Diskussion und Vereinfachung des Partikelmodells	55
3.8	Energiebilanz	58
3.9	Randbedingungen	63
3.10	Numerisches Verfahren zum Lösen der Modellgleichungen	64
4	Ermittlung thermischer Eigenschaften von Gasdiffusionsschichten	65
4.1	Aufbau des stationären Heatfluxmeters	65
4.2	Vorgehen zur Datenauswertung	67
4.3	Unsicherheitsbetrachtung	69
4.3.1	Vorgehen	69
4.3.2	Angenommene Unsicherheiten	70
4.4	Messergebnisse der thermischen Widerstände	71
4.4.1	Wärmeleitfähigkeit des Heatfluxmeters	71
4.4.2	Thermischer Widerstand des GDL-Substrats	71
4.4.3	Kontaktwiderstand zwischen GDL-Substrat und Bipolarplatte	72
4.4.4	Thermischer Widerstand der MPL	74
4.4.5	Temperaturabhängigkeit	76
4.4.6	Einfluss der Messunsicherheiten	76
4.5	Dicke und Porosität von GDL-Substrat und MPL	78
4.6	Wärmeleitfähigkeit von GDL-Substrat und MPL	79
5	Simulation	83
5.1	Analyse am 2D-Modell	83
5.1.1	Wasserhaushalt	85
5.1.1.1	Einfluss auf die Zelleistung	85
5.1.1.2	Einfluss auf den Sauerstofftransport in den porösen Schichten	93
5.1.1.3	Einfluss der Druckdifferenz	97
5.1.2	Einfluss der Wärmeleitfähigkeit des GDL-Substrats	99
5.1.3	Effekt einer MPL	101
5.1.4	Geringe Katalysatorbeladung	104
5.1.5	Kanalgeometrie	107
5.1.6	Zusammenfassung	108
5.2	Analyse am 3D-Modell	109
5.2.1	Abschätzung der Zustandsänderung in Kanalrichtung	110
5.2.1.1	Druckverlust des Kathodengases	110
5.2.1.2	Feuchteverlauf des Kathodengases	111
5.2.2	Simulationsergebnisse Gleichstrom	112
5.2.3	Simulationsergebnisse Gegenstrom	117
5.2.4	Zusammenfassung	121
6	Validierung	123
6.1	Grundlagen der elektrochemischen Impedanzspektroskopie	123

6.2	Aufbau des Experiments	124
6.3	Messergebnisse	125
6.4	Simulationsergebnisse	131
6.5	Vergleich	135
7	Diskussion	137
7.1	Modell und Simulationsergebnisse	137
7.1.1	Phasenwechsel	137
7.1.2	Flüssigwasser	138
7.1.3	Thermische Widerstände	140
7.1.4	Anisotropie des GDL-Substrats	140
7.1.5	Einfluss einer MPL	141
7.1.6	Stofftransport in der Mikrostruktur	141
7.1.7	Einfluss der Kanalgeometrie	142
7.1.8	Zustandsänderungen entlang der Kanalrichtung	142
7.2	Schlussfolgerungen aus dem Validierungsexperiment	143
7.3	Diskussion der ermittelten thermischen Widerstände	146
8	Zusammenfassung	149
	Literaturverzeichnis	153
	Abbildungsverzeichnis	169
	Tabellenverzeichnis	173
A	Parameter des Basisfalls	175