

Tabla de contenido

1. Introducción	1
1.1. Escenario energético en Chile y el mundo	1
1.2. Tecnologías de gasificación	4
1.3. Celdas de combustible de óxido sólido	5
1.4. Objetivo general del Trabajo de Memoria de Título	8
2. Fundamentos de electroquímica	9
2.1. Principios termodinámicos	9
2.1.1. Entalpía de reacción	11
2.1.2. Entropía de reacción	12
2.1.3. Energía libre de Gibbs	12
2.1.4. Eficiencia termodinámica	13
2.1.5. Voltaje de equilibrio o de circuito abierto (OCV)	13
2.2. Principios cinéticos	14
2.2.1. Sobrepotenciales de activación	15
2.2.2. Sobrepotenciales de concentración	16
2.2.3. Pérdidas óhmicas de voltaje	18
2.2.4. Densidad de potencia de celda	19
2.2.5. Eficiencia de voltaje y generación de calor	20
2.2.6. Utilización de combustible	20
2.2.7. Eficiencia de celda	20
3. Revisión bibliográfica	21
3.1. Materiales para celdas de combustible de óxido sólido	22
3.1.1. Materiales para el electrolito	23
3.1.2. Materiales para el cátodo	26
3.1.3. Materiales para el ánodo	28
3.2. Celdas de combustible de tipo carbón-aire	34
3.2.1. Celdas de combustible de óxido sólido de tipo carbón-aire (CA-SOFC)	34
3.2.2. Celdas de combustible de tipo carbón-aire basadas en electrolitos fundidos	37
3.2.3. Celdas de combustible de óxido sólido de tipo carbón-aire (CA-SOFC) basadas en gasificación de carbón	41
3.3. Modelo cero dimensional de una celda de combustible	46
3.3.1. Voltaje de equilibrio o de circuito abierto (OCV)	46
3.3.2. Sobrepotenciales de activación	47
3.3.3. Sobrepotenciales de concentración	53
3.3.4. Pérdidas óhmicas de voltaje	58

3.4. Objetivos específicos del Trabajo de Memoria de Título	62
4. Montaje experimental	63
4.1. Fabricación de nanopartículas de CMO	63
4.2. Fabricación de celdas de combustible de óxido sólido	64
4.3. Mediciones electroquímicas	68
5. Metodología	69
5.1. Modelo cero dimensional del sistema	69
5.1.1. Voltaje de equilibrio y eficiencia termodinámica	70
5.1.2. Sobrepotencial de activación catódico	75
5.1.3. Sobrepotencial de activación anódico	77
5.1.4. Sobrepotencial de concentración catódico	85
5.1.5. Sobrepotencial de concentración anódico	86
5.1.6. Pérdidas óhmicas de voltaje	89
5.2. Simulaciones de los modelos matemáticos	91
5.2.1. Modelo cero dimensional del sistema con alimentación de hidrógeno . . .	91
5.2.2. Modelo cero dimensional del sistema con alimentación de gas de síntesis .	93
6. Resultados y discusión	94
6.1. Celda de combustible de óxido sólido con alimentación de hidrógeno	94
6.1.1. Celda de combustible de óxido sólido con ánodo de CMO/YSZ	94
6.1.2. Celda de combustible de óxido sólido con ánodo de Ni/YSZ	99
6.2. Celda de combustible de óxido sólido con alimentación de gas de síntesis	103
6.2.1. Celda de combustible de óxido sólido con ánodo de CMO/YSZ	103
6.2.2. Análisis de sensibilidad para la presión de equilibrio de desorción de hidrógeno	107
6.2.3. Comparación con el desempeño del sistema alimentado con hidrógeno . . .	108
7. Conclusiones	111
8. Trabajo futuro	113
Bibliografía	113
A. Datos termodinámicos de especies químicas	126
A.1. Entalpías y entropías estándar	126
A.2. Calores específicos	126
B. Derivación de modelos de Butler–Volmer	129
B.1. Reducción electroquímica de oxígeno sobre LSM/YSZ	129
B.2. Oxidación electroquímica de hidrógeno sobre Ni/YSZ	131
B.3. Oxidación electroquímica de hidrógeno sobre CMO/YSZ	135
B.4. Oxidación electroquímica de monóxido de carbono sobre CMO/YSZ	137

C. Determinación de adivinanzas iniciales y parámetros	141
C.1. Estimación de adivinanza inicial para resistencia óhmica total	141
C.2. Estimación de conductividades de CMO/YSZ y CMO	141
C.3. Determinación del voltaje de equilibrio para operación con gas de síntesis	143
D. Ejemplos de código	149
D.1. Código para modelo cero dimensional	149
D.2. Función auxiliar para el cálculo de voltajes reversibles	157
D.3. Función auxiliar para el modelo cero dimensional de la celda con hidrógeno	161
D.4. Función auxiliar para el modelo cero dimensional de la celda con gas de síntesis	162
D.5. Código para comparación con una celda con ánodo de Ni/YSZ	162
D.6. Código para el cálculo de voltajes de equilibrio y eficiencias termodinámicas	170