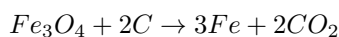
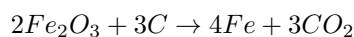

Kapitel 8
Lektion 8

Övning 8.1.

Järnmalmen som finns i Sverige utgörs av en blandning av hematit och magnetit, och idag använder man kol/koks för att reducera järnmalmen till rent järn/stål. Reaktionsekvationerna för att omvandla järnmalm hematit/blodsten Fe_2O_3 och magnetit Fe_3O_4 till järn genom reduktion med kol kan uttryckas som:



- a) Ställ upp reaktionsekvationerna för båda järnmalmsmineralerna om man istället använder direktreduktion av järnmalm med vätgas H_2 .
- b) Beräkna mängden vätgas som behövs för att reducera 1 ton järnmalm. Använd molmassorna från tabellen och sambandet $\text{mol} = \frac{\text{massa [g]}}{\text{molmassa [g/mol]}}$.

Ämne	Molmassa [g/mol]
Fe (Järn)	55.85
O (Syre)	16
H (Vätgas)	1.01

- c) I dagsläget har Sverige en järnmalmsproduktion på ca 29 miljoner ton (Mt) per år. Av denna järnmalm tillverkas ca 4.4 Mt stål. Hur mycket järnmalm går åt för att tillverka 4.4 Mt stål? Antag att järnmalmen bara består av antingen hematit eller magnetit och att stålet endast innehåller rent järn. Hur mycket vätgas skulle gått åt för att reducera den mängden järnmalm till stål?
- d) Om Sverige i framtiden istället tillverkar grönt stål av all järnmalm, hur mycket stål kan det bli av 29 Mt järnmalm? Hur mycket vätgas skulle gått åt att reducera all järnmalm?

- e) Vätgas kan produceras genom att man tillför elektrisk energi E i en elektrolys process som bryter upp vatten till väte och syre enligt: $2H_2O + E \rightarrow 2H_2 + O_2$. Om syre reagerar med vätgas ($2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O + E$) bildas vatten och man får ut energin E . Här är H_2 och O_2 i sina så kallade standardtillstånd (= det stabila tillståndet av ett rent ämne vid referensförhållandet som oftast är $p^0=0.1$ MPa och $T^0=298$ K). Energin som behövs för att 1 mol av ett ämne ska bildas från sina element i deras mest stabila former kallas standardbildningsentalpi ΔH_f^0 . I tabellen nedan visas ΔH_f^0 för några ämnen. Till exempel kan man läsa ut att 393.52 kJ frigörs då 1 mol CO_2 bildas från standardtillstånden (C och syrgas) för p^0 och T^0 . Hur mycket energi frigörs då 1 mol vatten i flytande form (l-liquid) bildas?

Ämne	SO3	CO2	SO	H2O(l)	H2O(g)	C4H10	C	H2	O2
ΔH_f^0 [kJ/mol]	-395.76	-393.52	-296.84	-285.10	-241.83	-124.90	0	0	0

- f) Om vi antar en perfekt elektrolysprocess där vi bara behöver tillföra lika mycket energi för att bryta upp vattenmolekylerna som vid bildandet, när vi vill skapa vätgas från vatten. Hur mycket energi behövs för att bilda 1 ton vätgas?
- g) Hur mycket energi går åt att bilda 1 ton vätgas om vi antar att elektrolysören har en effektivitet på 60%?
- h) Hur mycket energi i TWh skulle det gå åt för att producera den vätgas till direktreduktionen som behövs om Sverige skulle använda all järnamalm till att tillverka grönt stål? $1 \text{ kJ} = 0.2778 \text{ Wh}$.
- i) Relatera detta till Sveriges årliga elkonsumention. Notera att detta är bara behovet för direktreduktionen. Utöver detta kommer behovet för energi till ljusbågsugnar och andra steg i stålproduktionsprocessen också bidra till att öka elbehovet ytterligare.

Lösning:

- b) Molmassan för Fe_2O_3 är $2 \times 55.85 + 3 \times 16 = 159.7 \text{ g/mol}$ och 1 ton Fe_2O_3 motsvarar därmed

$$\frac{10^3 \text{ kg}}{159.7 \text{ g/mol}} = 6262 \text{ mol.}$$

Enligt reaktionssekvationen så krävs 6 mol väte för att reducera en mol Fe_2O_3 , och därmed $6 \times 6262 = 37572 \text{ mol}$ för att reducera 1 ton, vilket motsvarar massan

$$37572 \text{ mol} \times 1.01 \text{ g/mol} = 37.95 \text{ kg.}$$

- c) 4.4 Mt järn motsvarar molmassan

$$\frac{4.4 \text{ Mt}}{55.85 \text{ g/mol}} \approx 78.78 \text{ Gmol.}$$

78.78 Gmol Fe motsvarar $\frac{78.78}{2} = 39.39$ Gmol Fe_2O_3 , vilket väger

$$39.39 \text{ Gmol} \times 159.7 \text{ g/mol} = 6.29 \text{ Mt.}$$

Eftersom reduktion av 1 ton Fe_2O_3 kräver 37.95 kg väte, behövs $6.3 \text{ Mt} \times 37.95 \text{ kg/t} = 239 \text{ kt}$ vägas i detta fall.

d) I c) beräknades att förhållandet i vikt mellan järnmalm och den reducerade mängden järn är $\frac{6.3}{4.4} = 1.4318$ respektive $\frac{6.1}{4.4} = 1.386$, för enkelhetens skull använder vi 1.4 (i verkligheten är det närmare 1.6). Detta ger att 29 Mt järnmalm reducerar till 20.7 Mt järn.

f) Vätgas har molmassan $2 \times 1.01 = 2.02$ g/mol och ett ton vätgas motsvarar därför

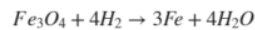
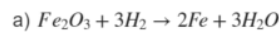
$$\frac{1000 \text{ kg}}{2.02 \text{ g/mol}} = 495 \text{ mol,}$$

och eftersom varje vattenmolekyl innehåller en vätgasmolekyl (H_2) krävs samma antal vattenmolekyler. Energin som behövs blir därmed $285.10 \text{ kJ/mol} \times 495 \text{ mol} = 141 \text{ GJ}$.

g) Med en verkningsgrad på 60% blir energi istället $\frac{141}{0.6} = 235 \text{ GJ}$.

h) 1 Mt vätgas kräver $235 \text{ PJ} = 235 \times 10^6 \text{ GJ}$, så

$$235 \times 10^6 \times 0.2778 = 65 \text{ TWh.}$$



%molmassor

Fe=55.85;
O=16;
H=1.01;

% Dubbelkolla så att första ekvationen stämmer

Fe*2+O*3 + 3*H*2 %VL

ans = 165.7600

2*Fe + 3*H*2+ 3*O %HL

ans = 165.7600

% Dubbelkolla så att andra ekvationen stämmer

Fe*3+O*4 + 4*H*2 %VL

ans = 239.6300

3*Fe + 4*H*2 + 4*O %HL

ans = 239.6300

Figur 8.1: Facit till Övning 8.1.

b.1) Använd molarförhållandet mellan Fe_2O_3 och H_2 . Från ekvationen ser vi att för 1 mol Fe_2O_3 krävs 3 mol H_2 .

```

Fe2O3 = Fe*2+O*3 % molmassa järnoxid [g/mol]

Fe2O3 = 159.7000

% mol = massa / molmassa
Fe2O3_mol = 1000000 / Fe2O3 %antal mol i 1 ton Fe2O3 [mol]

Fe2O3_mol = 6.2617e+03

H2_mol = 3 * Fe2O3_mol % antal mol vätgas    För 1 mol järnmalm krävs 3 mol vätgas

H2_mol = 1.8785e+04

H2 = 2*H % molmassa vätgas

H2 = 2.0200

H2_massag_hematit_1ton = H2_mol * H2 % massa vätgas [g]

H2_massag_hematit_1ton = 3.7946e+04

H2_massa_hematit_1ton = H2_massag_hematit_1ton/1000 % massa vätgas [kg]

H2_massa_hematit_1ton = 37.9461

```

Figur 8.2: Facit till Övning 8.1.

b.2) Använd molarförhållandet mellan Fe_3O_4 och H_2 . Från ekvationen ser vi att för 1 mol Fe_3O_4 krävs 4 mol H_2 .

```

Fe3O4 = Fe*3+O*4 % molmassa järnoxid [g/mol]

Fe3O4 = 231.5500

% mol = massa / molmassa
Fe3O4_mol = 1000000 / Fe3O4 %antal mol i 1 ton Fe3O4 [mol]

Fe3O4_mol = 4.3187e+03

H2_mol = 4 * Fe3O4_mol % antal mol vätgas    För 1 mol järnmalm krävs 4 mol vätgas

H2_mol = 1.7275e+04

H2 = 2*H % molmassa vätgas

H2 = 2.0200

H2_massag_magnetit_1ton = H2_mol * H2 % massa vätgas [g]

H2_massag_magnetit_1ton = 3.4895e+04

H2_massa_magnetit_1ton = H2_massag_magnetit_1ton/1000 % massa vätgas [kg]

H2_massa_magnetit_1ton = 34.8953

```

Figur 8.3: Facit till Övning 8.1.

c.1) 1 mol Fe_3O_4 ger 3 mol Fe

```
Fe= 55.85 ; % molmassa järn
Fe3O4 = Fe*3+O*4 ; % molmassa järnoxid
Fe_massa = 4.4; % [Mt]
```

```
Fe_mol = Fe_massa/Fe %
```

```
Fe_mol = 0.0788
```

```
%molförhållandet ger att antalet järnmalm som behövs är:
Fe3O4_mol = Fe_mol / 3
```

```
Fe3O4_mol = 0.0263
```

```
% Och detta motsvarar en massa på:
magnetit_total= Fe3O4*Fe3O4_mol % [Mt]
```

```
magnetit_total = 6.0807
```

```
% vätgas som går åt:
H2_massa_magnetit_1ton*magnetit_total*10^6 % [kg]
```

```
ans = 2.1219e+08
```

c.2) 1 mol Fe_2O_3 ger 2 mol Fe

```
Fe= 55.85 ; % molmassa järn
Fe2O3 = Fe*2+O*3 ; % molmassa järnoxid
Fe_massa = 4.4; % [Mt]
```

```
Fe_mol = Fe_massa/Fe %
```

```
Fe_mol = 0.0788
```

```
%molförhållandet ger att antalet järnmalm som behövs är:
Fe2O3_mol = Fe_mol / 2
```

```
Fe2O3_mol = 0.0394
```

```
% Och detta motsvarar en massa på:
hematit_total = Fe2O3*Fe2O3_mol % [Mt]
```

```
hematit_total = 6.2908
```

```
% vätgas som går åt:
H2_massa_hematit_1ton*hematit_total*10^6 % [kg]
```

```
ans = 2.3871e+08
```

Figur 8.4: Facit till Övning 8.1.

d) Förhållandet mellan vikten av järnmalm och stål är en faktor på ca 1.4 (men är närmare 1.6 i verkligheten):

```
magnetit_total/Fe_massa
```

```
ans = 1.3820
```

```
hematit_total/Fe_massa
```

```
ans = 1.4297
```

Så för att göra det enkelt använder vi faktorn 1.4 Dvs Järnmalm/Stål = 1.4

```
järnmalm_tot_prod = 29 ; % [Mt]
steel_tot = järnmalm_tot_prod/1.4 % [Mt]
```

```
steel_tot = 20.7143
```

```
H2_massa_hematit_1ton* järnmalm_tot_prod * 10^6 % [kg]
```

```
ans = 1.1004e+09
```

```
H2_massa_magnetit_1ton* järnmalm_tot_prod * 10^6 % [kg]
```

```
ans = 1.0120e+09
```

Figur 8.5: Facit till Övning 8.1.

e) Från tabellen: 285.1 kJ går åt för att bilda 1 mol vattenånga

```
H20_energi=285.1; % [kJ/mol]
```

f)

```
H2_energi = H20_energi; % [kJ/mol]
H2 = 2*H % molmassa vätgas [g/mol]
```

```
H2 = 2.0200
```

```
H2_mol = 10^6 / H2 % mol vätgas [mol] i ett ton H2
```

```
H2_mol = 4.9505e+05
```

```
Energi1tonH2 = H2_energi * H2_mol % [kJ]
```

```
Energi1tonH2 = 1.4114e+08
```

g)

```
Energi1tonH2_eta06=Energi1tonH2/0.6
```

```
Energi1tonH2_eta06 = 2.3523e+08
```

Figur 8.6: Facit till Övning 8.1.

h)

```

% Från d) vet vi att vi behöver ca 1 Mt
vatgas_SWE_järnmalm_ton % [ton] för att reducera all järnmalm

vatgas_SWE_järnmalm_ton = 1.0562e+09

% Från g) vet vi hur mycket energi som behövs för att bilda 1 ton vätgas
Energi1tonH2_eta06

Energi1tonH2_eta06 = 2.3523e+08

% Energin som behövs för 1 Mt vätgas
tot = Energi1tonH2_eta06 * 10^6 % [kJ]

tot = 2.3523e+14

tot_TWh = tot * 0.2778 * 10^(-12) % [TWh]

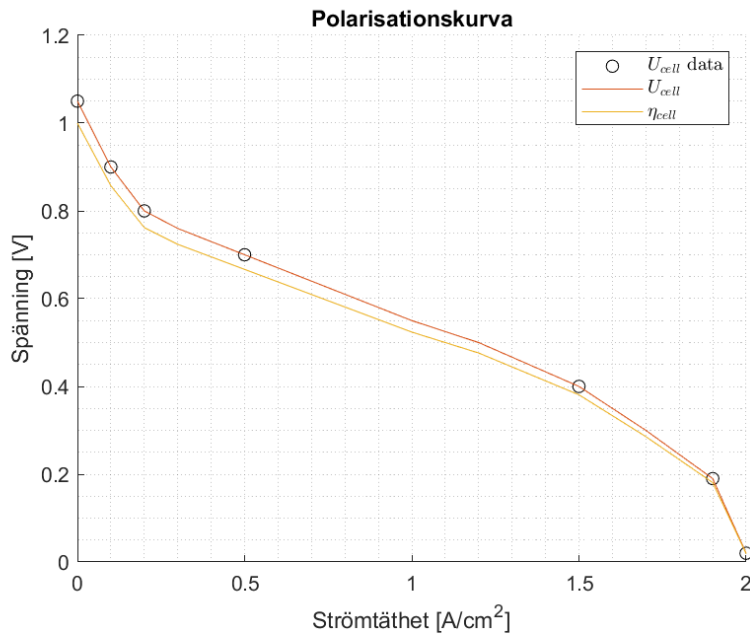
tot_TWh = 65.3472

```

Figur 8.7: Facit till Övning 8.1.

Övning 8.2.

I Figur 8.8 visas polarisationskurvan för en bränslecell och datat visas i Tabell 8.1. I denna uppgift låter vi strömtätheten ha beteckningen I_{fc} och den representerar strömmen genom en cell som är 1 cm^2 .



Figur 8.8: Figur till Övning 8.2. Polarisationskurva för en bränslecell.

Reaktionen som sker i en bränslecell är $H_2 + \frac{1}{2}O_2 \Rightarrow H_2O$. Denna frigör $P_{in} = U_{id}I_{fc}$, där U_{id} ges av termodynamiken och är konstant, till exempel 1.05 V. Notera att P_{in} växer linjärt med strömmen

- a) Effekten ut från en cell är $P_{cell} = U_{cell}I_{fc}$. Visa att effektiviteten för en cell $\eta_{cell} = \frac{P_{cell}}{P_{in}}$ är oberoende av strömmen dvs bara beror på cellspänningen och konstanten U_{id} .
- b) Fyll i tabellen med P_{cell} .
- c) Vi antar att bränslecellens stödsystem kräver en konstant effekt $P_{aux} = 0.15P_{cell,max}$. Stödsystemet består bland annat av kompressor, vattenpump, kylsystem, etc... Beräkna och fyll i $P_{ut} = P_{cell} - P_{aux}$.
- d) Beräkna systemeffektiviteten $\eta_{sys} = \frac{P_{ut}}{P_{in}}$.
- e) Rita in P_{cell} , P_{ut} , η_{sys} i figuren med polarisationskurvan. Notera att bränslecellens maxeffekt inte antas vid maximal ström.

I_{fc}	U	P_{in}	P_{cell}	P_{ut}	η_{cell}	η_{sys}
0	1.05	0			1	
0.1	0.9	0.11			0.86	
0.2	0.8	0.21			0.76	
0.4	0.73	0.42			0.7	
1.5	0.4	1.58			0.38	
1.9	0.19	2			0.18	
2.0	0.02	2.1			0.02	

Tabell 8.1: Tabell till Övning 8.2. Prestandatabell för en bränslecell.

Lösning:

Se facit.

Övning 8.3.

Från cell till stack. I förra övningen räknade vi på en enskild cell och nu ska vi växla upp cellen till ett system med en stack. Alla celler har area 375 cm^2 och systemet har 300 seriekopplade celler. Räkna ut maximal cellspänning, maximal levererad effekt och ström vid denna effekt. Reflektionsfråga: Varför är det dåligt att belasta bränslecellssystemet med en ström som är större än den vid maximal effekt?

Lösning:

Se facit.