



1 Einleitung

1.1 Motivation

Insbesondere eine verstärkte gesellschaftliche Wahrnehmung des Klimawandels sowie der Ausstieg aus der Kernenergienutzung führen in Deutschland und vielen anderen Ländern zu einer Transformation der Energiesysteme hin zu einer defossilisierten Erzeugung. Dieser als Energiewende bezeichnete Prozess birgt technische und ökonomische Herausforderungen, da die regenerative Stromerzeugung mit Windenergie- und Photovoltaikanlagen dargebotsabhängig und stark fluktuierend ist.

Erschwerend kommt hinzu, dass der Umbau der Energiesysteme nicht nur auf globaler Ebene schwierige Verhandlungen über Klimaabkommen mit sich bringt, sondern auch auf nationaler bis lokaler Ebene entsprechend des Sankt-Florian-Prinzips von Demonstrationen, Prozessen und anderen Verzögerungen begleitet wird. Andere gesellschaftliche Akteure hingegen, wie die Proteste der Fridays for Future Bewegung zeigen, fordern eine beschleunigte und konsequentere Energiewende. Zudem gewinnt verstärkt eine Betrachtungsweise der Wirtschaftlichkeit fossiler und nuklearer Primärenergieträger an Beachtung, die in die Kosten der Nutzung dieser zusätzlich die Schäden an der Umwelt, wie den Meeresspiegelanstieg, die Ewigkeitslasten des Bergbaus oder die Endlagerung radioaktiver Abfälle, in Form von externen Umweltkosten mit einbezieht.

Weiterhin wird der Emissionsminderung eine zunehmende Bedeutung zuteil. Beispielsweise werden erheblich geringere Schadstoffemissionen bei Kreuzfahrtschiffen gefordert [8] und auch die Stickoxidemissionen des motorisierten straßengebundenen Verkehrs stehen vor dem Hintergrund des so bezeichneten *Dieselskandals* im Fokus des öffentlichen Interesses [9]. Maßnahmen zur Emissionsminderung können staatlich insbesondere durch gesetzliche Restriktionen, finanzielle Fördermittel, Emissionshandelssysteme oder direkte Brennstoffbesteuerungen umgesetzt und intersektoral angewendet werden. Die Bundesrepublik Deutschland „setzt sich [...] für das Ziel der Treibhausgasneutralität bis 2050 in Europa ein“ [10].

Nach der Skizzierung der rezenten Gemengelage im Energiesektor folgt unausweichlich die Frage, welche Technologien bereitstehen, um die Energiewende erfolgreich zu verwirklichen. Dabei ist festzustellen, dass zukünftige Energiesysteme einen massiven Ausbau regenerativer Erzeugungskapazitäten erfordern und ein Teil der daraus resultierenden fluktuierenden Einspeisung durch Speicherung bedarfsgerecht veredelt werden muss. Zu diesem Zweck können neben bereits etablierten Pumpspeicher- oder selteneren Druckluftspeicherkraftwerken auch elektrische Energiespeicher eingesetzt werden. Diese offerieren aber neben dem vorteilhaften hohen Wirkungsgrad beim Ein- und Ausspeichern auch eine Reihe von Nachteilen, wie der Abhängigkeit von seltenen Materialien, hohen Kosten, niedrigen Energiedichten und verfügbaren Speicherkapazitäten. Aus diesen Gründen können künftig auch stoffliche Energiespeicher eingesetzt werden. Hierbei kann regenerative elektrische Energie beispielsweise in Wasserstoff und weiter in synthetisches Methan, Methanol etc. konvertiert werden. Die meisten dieser Energieträger beinhalten jedoch Kohlenstoff, der sinnvollerweise klimaneutral verwendet werden sollte. Die Verwendung von reinem Wasserstoff bietet verhältnismäßig geringe volumetrische Energiedichten und die Notwendigkeit der Kompression oder Verflüssigung, um Speicherung und Transport adäquat durchführen zu können.



Ein Szenario, dem bisher vergleichsweise, wenn auch in letzter Zeit mit deutlich zunehmender Tendenz, wenig Beachtung geschenkt worden ist, basiert auf der Verwendung von Ammoniak (NH_3) als Wasserstoffspeicher. Dieser kann aus erneuerbarer Energie, Wasser und Luft hergestellt werden, enthält keinen Kohlenstoff, verfügt mit $3,30 \text{ kWh/l}$ (0°C)¹ über eine höhere Energiedichte als flüssiger Wasserstoff mit $2,37 \text{ kWh/l}$ (-253°C)¹ und kann aufgrund seines Dampfdruckes von $8,58 \text{ bar}$ bei 20°C [11] vergleichsweise einfach gespeichert werden. Ammoniak tanks (bis 45000 t [12]) sowie der Transport von Ammoniak mit Pipelines, LKW, Schiffen und Eisenbahnen sind seit langer Zeit Stand der Technik, da Ammoniak zu den wichtigsten Grundchemikalien zählt und insbesondere für die Düngemittelproduktion benötigt wird. Kritisch wird hingegen oftmals die hohe Toxizität von Ammoniak gesehen.

Um Ammoniak wieder zu verstromen, können Ammoniak-Cracker ein Wasserstoff-Stickstoff-Gasgemisch erzeugen, das z. B. in Brennstoffzellen elektrochemisch umgesetzt werden kann. Solche Systeme eignen sich prinzipiell für viele Anwendungen sowohl im stationären als auch im mobilen Bereich. Das FCH JU Projekt Alkammonia² adressierte die Entwicklung eines alkalischen Brennstoffzellensystems mit Ammoniak-Cracker für die Versorgung von Basissendeempfangstationen (BTS)³. Im Rahmen dieses Projekts arbeitete ich als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Energietechnik der Universität Duisburg-Essen an der Brennstoffzellensystem- und der Ammoniakcrackersimulation. Außerdem unterstützte ich als Lehrstuhlmitarbeiter die Arbeiten des Projektpartners ZBT. Insbesondere arbeitete ich dort an der Untersuchung von Katalysatoren für das Ammoniakcracken und unterstützte bei der Crackerentwicklung. Im EFRE Projekt NH_3 to H_2 ⁴ wird die Weiterentwicklung dieses Ammoniak-Crackers durchgeführt. Auch hier arbeitete ich als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Energietechnik eng mit dem Projektpartner ZBT zusammen. Im DFG-Graduiertenkolleg mobilEM⁵ beschäftigte ich mich ebenfalls mit der Wasserstofferzeugung aus Ammoniak für Brennstoffzellen-Range Extender.

1.2 Aufbau der Arbeit

Ammoniak kann als Energieträger auf vielfältige Art und Weise eingesetzt werden. Alle Möglichkeiten sind zum gegenwärtigen Zeitpunkt überwiegend Stand der Forschung und Entwicklung. Das Ziel dieser Arbeit besteht in der Erweiterung des Stands der wissenschaftlichen Erkenntnisse auf dem Gebiet der Ammoniak-Cracker speziell für die Versorgung von Niedertemperatur-Brennstoffzellen mit Wasserstoff. Ammoniak-Cracker zur Bereitstellung von Wasserstoff für andere Energiewandler können sich insbesondere aufgrund der erforderlichen Gasqualität bzw. des erforderlichen Umsatzgrades deutlich unterscheiden.

Im zweiten Kapitel wird der technologische Hintergrund bezüglich Brennstoffzellen, Ammoniak, Ammoniak-Cracker und thermodynamischer Bewertungskriterien und -methoden abgehandelt. Dabei

¹ Verwendete Stoffeigenschaften sind mit Quellenangaben in Anhang 7.1 angegeben.

² FCH JU, Fuel Cells and Hydrogen Joint Undertaking, Projekt-ID: 325343

³ BTS, Base-Transceiver-Stations, Basissendeempfangstationen

⁴ EFRE, Europäischer Fonds für regionale Entwicklung, Förderkennzeichen: EFRE-0801543, Aktenzeichen LeitmarktAgentur.NRW: EU-2-2-037B

⁵ DFG, Deutsche Forschungsgemeinschaft, mobilEM, Integrierte Energieversorgungsmodul für straßengebundene Elektromobilität, GRK 1856



werden die Nutzungsmöglichkeiten von Ammoniak als Energieträger diskutiert und es findet eine vergleichende Effizienzbetrachtung von Wasserstoff und Ammoniak statt, anhand derer Rückschlüsse über die Zweckmäßigkeit einer energetischen Ammoniaknutzung gezogen werden.

Im dritten Kapitel erfolgt die Untersuchung von Katalysatorsystemen und die Aufstellung einer Reaktionsgeschwindigkeitsgleichung für die Nutzung in Simulationsmodellen. Zunächst werden Katalysatoren für die Verwendung in Ammoniak-Crackern vorausgewählt. Dann folgt die Durchführung von Messungen an einem Teststand mit Integralreaktor sowie die Auswertung und Diskussion dieser. Nach der Auswahl eines Katalysators werden an dem dafür modifizierten Teststand kinetische Messungen durchgeführt. Damit werden Parameter für die Reaktionsgeschwindigkeitsgleichung bestimmt (Parameterschätzung). Diese wird im nachfolgenden Kapitel bei der Simulation des Ammoniak-Crackens angewendet.

Im vierten Kapitel finden die Modellbildung und die Simulation des Ammoniakcrackens statt. Es wird der Stand der Technik von Ammoniak-Crackermodulen zusammengefasst und basierend darauf ein am ZBT entwickelter Cracker vorgestellt. Danach erfolgt die mathematische Modellbeschreibung der Wärmeübertragung, des Massen- und Stofftransports und der Impulserhaltung sowie der Stoffeigenschaften. Anschließend erfolgt die dreidimensionale, stationäre Multiphysik-Modellbildung des insbesondere die Brennkammer und die Reaktionszone einschließenden Teils des Crackers. Das Modell wird durch einen Vergleich von Messergebnissen des ZBT-Crackers mit Simulationsergebnissen validiert. Basierend darauf wird ein zweidimensionaler, stationärer Ringspaltreaktor mit Beheizung durch einen innenliegenden Brenner modelliert. Abschließend wird damit eine Reihe von Parametervariationen durchgeführt und deren Einfluss anhand der Simulationsergebnisse bewertet.

Im letzten Kapitel wird die Verschaltung mit Brennstoffzellen zu Gesamtsystemen adressiert. Anhand einer Literaturrecherche wird die Eignung unterschiedlicher Brennstoffzellentypen auf den Betrieb mit ammoniakhaltigem Brenngas zusammengefasst. Es wird die grundlegende Verschaltung eines Ammoniak-Crackers mit Brennstoffzelle gegeben und in prozesssimulationsgestützten Untersuchungen wird der Einfluss relevanter Parameter insbesondere hinsichtlich der Effizienz des Gesamtsystems analysiert.



2 Technologischer Hintergrund

Dieses Kapitel beschreibt zunächst die technologischen Grundlagen von Brennstoffzellen und enthält die für systemische Betrachtungen notwendigen Definitionen von Kennzahlen und Wirkungsgraden, auf die im Verlauf dieser Arbeit zurückgegriffen wird. Die konventionelle und alternative Produktion von Ammoniak wird dargestellt und Ammoniak wird als Energieträger und -speicher eingeführt, seine Eignung dafür diskutiert und mit der von Wasserstoff verglichen. Danach wird auf die theoretischen Grundlagen von Ammoniak-Crackern eingegangen und zuletzt erfolgt die Definition von Kriterien zur thermodynamischen Bewertung von Ammoniak-Crackern und Brennstoffzellensystemen.

2.1 Brennstoffzellen

Brennstoffzellen (BZ, Fuel Cells, FC) sind elektrochemische Energiewandler, die häufig eine hohe Effizienz und wenige bis keine schädlichen Emissionen offerieren. Als Brennstoff kann Wasserstoff verwendet werden, der vor Zufuhr in die Brennstoffzelle mittels Gasprozesstechnik (Reformierung, Cracken, Gasreinigung) aus anderen Brennstoffen wie beispielsweise Erdgas, Biogas oder auch Ammoniak bereitgestellt werden kann. Häufig werden Brennstoffzellen in die folgenden Entwicklungslinien unterteilt:

- Alkalische Brennstoffzellen (Alkaline Fuel Cells, AFC),
- Direktmethanolbrennstoffzellen (Direct Methanol Fuel Cell, DMFC),
- Schmelzkarbonatbrennstoffzellen (Molten Carbonate Fuel Cells, MCFC),
- Phosphorsäurebrennstoffzellen (Phosphoric Acid Fuel Cells, PAFC),
- Polymerelektrolytbrennstoffzellen (Polymer Electrolyte Fuel Cells, PEFC oder auch Proton Exchange Membrane Fuel Cells, PEMFC bzw. PEM-Brennstoffzellen) oder
- Festoxidbrennstoffzellen (Solid Oxide Fuel Cells, SOFC).

Brennstoffzellen können nach ihrer Betriebstemperatur in Hochtemperatur-Brennstoffzellen (HT-BZ, MCFC mit 650 °C [13], SOFC mit 1000 °C [13]) und Niedertemperatur-Brennstoffzellen (NT-BZ, AFC mit 60-80 °C [13], DMFC mit 80-130 °C [13], PEMFC mit 60-80 °C [13]) unterteilt werden. Die PAFC wird im mittleren Temperaturbereich (160-220 °C [13]) verortet. Die vorliegende Arbeit fokussiert sich auf die Kombination von Ammoniak-Crackern mit NT-Brennstoffzellen (vgl. Abschnitt 5.1).

Als Brennstoffzellenstack oder -stapel wird die Verschaltung mehrerer einzelner Brennstoffzellen, sogenannter Einzelzellen, bezeichnet. Eine Brennstoffzelle besteht aus den wesentlichen Komponenten Anode, Kathode und Elektrolyt. Der Aufbau einer Einzelzelle ist vereinfacht in Abbildung 2.1 dargestellt. In der Praxis führen Bipolarplatten Brennstoff und Sauerstoff respektive Luftsauerstoff gleichmäßig über eine Gasdiffusionslage (GDL) den Elektroden zu. Zwischen der Anode und der Kathode befindet sich der Elektrolyt. Dieser kann entweder in fester Form, wässrig in einer Matrix oder Membran fixiert oder als zirkulierende Flüssigkeit ausgeführt sein. Der Elektrolyt gewährleistet eine räumliche Trennung der Oxidations- und Reduktionsreaktion und leitet dennoch Ionen. Elektroden mit Membran werden als Membran-Elektroden-Einheit (Membrane Electrode Assembly, MEA) bezeichnet. Die Elektroden sind zur Herabsetzung der Aktivierungsenergie der chemischen Teilreaktionen katalytisch beschichtet und an ihnen befinden sich die Stromabnehmer.

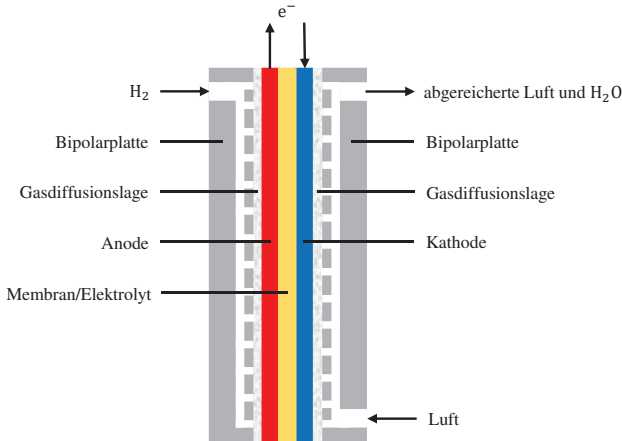


Abbildung 2.1: Aufbau einer Brennstoffzelle

Wasserstoff oder auch andere Brennstoffe werden anodenseitig zugeführt. An der Kathode dient meist Luft als Oxidationsmittel. Die Reaktanden sind durch einen Elektrolyten voneinander getrennt. Die an der Anode freigesetzten Elektronen werden über einen äußeren Stromkreis ab- und an der Kathode zugeführt. Die Bruttoreaktionsgleichung einer mit Wasserstoff versorgten Brennstoffzelle lautet:



Die molare Standardreaktionsenthalpie Δh_{R}^0 beträgt bei flüssigem Produktwasser $-285,81 \text{ kJ/mol}_{\text{H}_2}$ ⁶ und bei gasförmigem Produktwasser $-241,83 \text{ kJ/mol}_{\text{H}_2}$ ⁶. Die maximal entnehmbare elektrische Arbeit, die reversible Reaktionsarbeit, ist die Gibbs-Energie G , die nach der Fundamentalgleichung bei Isothermie durch

$$G = H - T dS = H - \dot{Q}_{\text{rev}} \quad \text{Gl. 2.2}$$

ausgedrückt wird. $\dot{Q}_{\text{rev}}$ bezeichnet die reversible Wärmeleistung. Darauf basierend können vier Zellspannungen unterschieden werden. Erstens, die auf den Brennwert⁷ bezogene Zellspannung, zweitens, die auf den Heizwert bezogene Zellspannung, drittens, die auf die obere Gibbs-Energie bezogene Zellspannung und viertens, die auf die untere Gibbs-Energie bezogene Zellspannung. Die thermoneutrale Zellspannung U_{th} , auch als enthalpische Zellspannung [14] oder fiktive Heizwertspannung [14] bezeichnet, existiert nur in der Theorie, da sie voraussetzt, dass der Heizwert und nicht die Gibbs-Energie in elektrische Arbeit gewandelt werden kann. Die thermoneutrale Zellspannung kann mit der Reaktionsenthalpie bei Standardbedingungen (25°C , 1 atm) bei nicht kondensiertem $\Delta h_{\text{R,i}}$ oder kondensiertem $\Delta h_{\text{R,s}}$ Wasser im Produkt und daher mit Hilfe des betragsmäßig

⁶ Die Quellenangaben respektive Berechnungsvorschriften aller in der vorliegenden Arbeit genannten Bildungs- und Reaktionsenthalpien sowie Heiz- und Brennwerte sind im Anhang in Abschnitt 7.1 gegeben. Hierauf wird im Folgenden nicht mehr separat verwiesen.

⁷ Der Begriff *Heizwert* wird ausschließlich für den *unteren Heizwert* H_i verwendet und der *obere Heizwert* wird ausschließlich als *Brennwert* H_s bezeichnet. Es gelten die Definitionen nach DIN 5499 [15].



gleichen Heizwertes ($H_{i,H_2}=241,83 \text{ kJ/mol}_{H_2}$) oder Brennwertes ($H_{s,H_2}=285,81 \text{ kJ/mol}_{H_2}$) berechnet werden [13]:

$$U_{th,i}^0 = -\frac{\Delta h_{R,i}^0}{z F} = 1,25 \text{ V} \quad \text{Gl. 2.3}$$

$$U_{th,s}^0 = -\frac{\Delta h_{R,s}^0}{z F} = 1,48 \text{ V} \quad \text{Gl. 2.4}$$

Dabei bezeichnet F die Faraday-Konstante ($F=96485,34 \text{ C/mol}$ [16]) und z die Ladungszahl (hier die Anzahl der beteiligten Elektronen pro Molekül Wasserstoff $z=2$). Auch die reversible Zellspannung U_{rev} kann in der Praxis nicht entnommen werden, denn dies würde voraussetzen, dass keine Überspannungen, sogenannte Spannungsverluste, auftreten. Die reversiblen Zellspannungen werden mit der spezifischen Gibbs-Energie im Standardzustand bei flüssigem ($\Delta g_s^0 = -237,14 \text{ kJ/mol}^8$) oder gasförmigem Produktwasser ($\Delta g_i^0 = -228,56 \text{ kJ/mol}^8$) wie folgt berechnet [13]:

$$U_{rev,i}^0 = -\frac{\Delta g_i^0}{z F} = 1,18 \text{ V} \quad \text{Gl. 2.5}$$

$$U_{rev,s}^0 = -\frac{\Delta g_s^0}{z F} = 1,23 \text{ V} \quad \text{Gl. 2.6}$$

Der ideale Wirkungsgrad, auch als thermodynamischer Wirkungsgrad bezeichnet [14], beschreibt das Verhältnis von Gibbs-Energie zur Reaktionsenthalpie im Standardzustand und kann auch als Verhältnis von reversibler zu thermoneutraler Zellspannung ausgedrückt werden [14]:

$$\eta_{ideal} = \frac{\Delta G}{\Delta H} = 1 - \frac{\dot{Q}_{rev}}{\Delta H} = \frac{U_{rev}}{U_{th}} \quad \text{Gl. 2.7}$$

Der ideale Wirkungsgrad beträgt unter Standardbedingungen bei der Reaktion von Wasserstoff und Sauerstoff bei flüssigem Produktwasser 83,3 % und bei gasförmigem Produktwasser 94,5 % [13].

Die nachfolgend dargestellte Strom-Spannungs-Kennlinie (U - I -Kennlinie) einer Brennstoffzelle beschreibt den Zusammenhang zwischen elektrischer Spannung U und elektrischem Strom I oder auch Strom pro Fläche bzw. Stromdichte I/A . Anhand der U - I -Kennlinie können prinzipielle Verlustmechanismen von Brennstoffzellen in den verschiedenen Betriebsbereichen aufgezeigt werden. Neben diesen Spannungsverlusten ist insbesondere der daraus hervorgehende Stackwirkungsgrad sowie die elektrische Leistung der Zelle im jeweiligen Betriebspunkt von Bedeutung.

⁸ Die Gibbs-Energie im Standardzustand wird für die Reaktion nach Gl. 2.1 entsprechend Gl. 2.2 mit den Standardentropien aus Tabelle 7.11 berechnet.

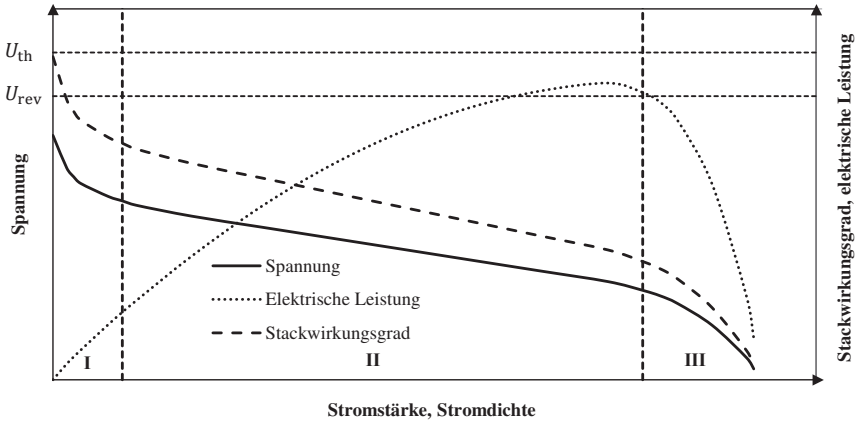


Abbildung 2.2: Strom-Spannungs-Kennlinie einer Brennstoffzelle

In der U - I -Kennlinie in Abbildung 2.2 sind drei für Brennstoffzellen charakteristische Bereiche zu unterscheiden, die durch verschiedene Verlustmechanismen gekennzeichnet sind. Im Bereich hoher Spannungen und niedriger Ströme (I) dominiert die Durchtritts- oder Aktivierungsüberspannung ΔU_A . Diese Limitierung ist elektrokinetisch bedingt und wird gemeinhin durch die Kathode dominiert [14]. Der Bereich mittlerer Spannungen und Ströme (II) ist geprägt durch lineare ohmsche Verluste (Widerstandsüberspannung ΔU_R). Diese treten sowohl im Elektrodenmaterial wie auch beim Ionentransport durch den Elektrolyten bzw. die Membran auf [14]. Im Bereich niedriger Spannungen und hoher Ströme (III) tritt die Diffusions- oder Konzentrationsüberspannung ΔU_D in den Vordergrund. Die Verluste sind durch den gehemmten diffusiven und konvektiven Stofftransport begründet [14]. Die der Zelle entnehmbare elektrische Leistung entspricht dem Produkt aus Strom und Spannung im entsprechenden Betriebspunkt auf der Kennlinie und ist, wie auch der Stackwirkungsgrad η_{Stack} , zudem in Abbildung 2.2 gesondert eingezeichnet. Der Stackwirkungsgrad ist im Bereich niedrigster Ströme maximal.

Der Spannungswirkungsgrad η_U ist definiert als Quotient aus Zellspannung im Betriebspunkt U zur reversiblen Zellspannung U_{rev} [13]:

$$\eta_U = \frac{U}{U_{\text{rev}}} \quad \text{Gl. 2.8}$$

Aus dem Spannungswirkungsgrad η_U und dem idealen Wirkungsgrad η_{ideal} kann der Stackwirkungsgrad η_{Stack} berechnet werden:

$$\eta_{\text{Stack}} = \eta_{\text{ideal}} \eta_U = \frac{U}{U_{\text{th}}} = \frac{P_{\text{el}}}{\dot{n}_{\text{H}_2, \text{um}} H_{\text{i, H}_2}}. \quad \text{Gl. 2.9}$$

Dieser kann auch als Verhältnis der elektrischen Leistung P_{el} zur Brennstoffleistung $\dot{n}_{\text{H}_2, \text{um}} H_{\text{i, H}_2}$ angegeben werden. Aus Gründen der Vergleichbarkeit mit Wirkungsgraden anderer Energiewandler



empfiehlt sich die in der Energietechnik allgemein übliche Definition mit dem Heizwert. Der Strom- bzw. Faraday'sche Wirkungsgrad

$$\eta_I = \frac{I}{z \dot{n}_{H_2} F} \quad \text{Gl. 2.10}$$

beschreibt den Anteil des Stroms, der tatsächlich zum Stromfluss beiträgt und nicht z. B. in Nebenreaktionen gebunden wird [13].

Für den Betrieb einer Brennstoffzelle ist zusätzlich zum Brennstoff auch elektrischer Eigenbedarf erforderlich, um z. B. Gebläse zur Brennstoff- und Luftzufuhr oder Kühlaggregate anzutreiben. Hierfür lässt sich ein Eigenbedarfs- oder Abgabewirkungsgrad formulieren:

$$\eta_{\text{Eigen}} = \frac{P_{\text{el,brutto}} - P_{\text{Eigen}}}{P_{\text{el,brutto}}} = \frac{P_{\text{el,netto}}}{P_{\text{el,brutto}}}. \quad \text{Gl. 2.11}$$

Der elektrische Eigenbedarf P_{Eigen} berücksichtigt alle elektrischen Verbraucher. Der Eigenbedarf kann auch auf komplette Brennstoffzellensysteme, d. h. auf eine Verschaltung einer Brennstoffzelle mit Gasprozesstechnik, wie Reformern oder Crackern, bezogen werden.

Brennstoffzellen können, sofern reiner Wasserstoff als Brenngas verwendet wird, im sogenannten Dead End Betrieb ausgeführt werden. Soll jedoch beispielsweise ein Wasserstoff-Stickstoff-Gasgemisch, wie es beim Cracken anfällt, oder ein Wasserstoff-Kohlenstoffdioxid-Gasgemisch, wie es bei der Reformierung entsteht, als Brennstoff genutzt werden, muss der inerte Stickstoff bzw. das Kohlenstoffdioxid wieder aus der Brennstoffzelle abgeführt werden. Dabei wird mit der Abgabe des inerten Bestandteils auch ein Teil des Wasserstoffs mit abgeführt. Ergo wird der Brennstoff nur teilweise ausgenutzt. Um die Menge des umgesetzten Brennstoffs $\dot{n}_{\text{um}}$ zu maximieren, kann durch entsprechende Gestaltung der Bipolarplatten oder durch anodenseitige Rezirkulation des Brenngases den Verlusten entgegengewirkt werden. Zur Beschreibung der Brennstoffausnutzung wird ein Brennstoffausnutzungsgrad (Fuel Utilization, FU) η_{FU} eingeführt. Dabei wird die Menge des umgesetzten Brennstoffs auf die in die Brennstoffzelle eintretende Brennstoffmenge $\dot{n}_{H_2,\text{ein}}$ bezogen [1]:

$$\eta_{\text{FU}} = \frac{(\dot{n}_{H_2,\text{ein}} - \dot{n}_{H_2,\text{aus}}) H_{i,H_2}}{\dot{n}_{H_2,\text{ein}} H_{i,H_2}} = \frac{\dot{n}_{H_2,\text{um}}}{\dot{n}_{H_2,\text{ein}}} \quad \text{Gl. 2.12}$$

Im einschlägigen Schrifttum hat sich ebenfalls die Definition, bei der das Produkt aus idealem Wirkungsgrad, Spannungswirkungsgrad und Brennstoffausnutzungsgrad als Stackwirkungsgrad bezeichnet wird, eingebürgert. Daher ist bei der Betrachtung von Wirkungsgraden eine genaue Definition derer unausweichlich.

Analog zum Brennstoffausnutzungsgrad kann ein Sauerstoffausnutzungsgrad (Oxygen Utilization, OU) definiert werden. Dieser beschreibt den an der Kathode aus der Luft umgesetzten Sauerstoff bezogen auf den mit der Luft eintretenden Sauerstoff:

$$\eta_{\text{OU}} = \frac{\dot{n}_{O_2,\text{um}}}{\dot{n}_{O_2,\text{ein}}} \quad \text{Gl. 2.13}$$