

---

# Heutige und zukünftige Kraftstoffe für Brennstoffzellen in der Luftfahrt

# 2

Ralf Peters

---

## Nomenklatur

|                |   |
|----------------|---|
| ACARE          | Advisory Council for Aeronautics Research in Europe |
| ASTM           | American Society for Testing and Materials          |
| ATJ            | Alcohol to jet fuel                                 |
| BTL            | Bio-to-liquid                                       |
| CONCAWE        | Conservation of clean air and water in Europe       |
| CTL            | coal-to-liquid                                      |
| DIN EN         | Deutsche Industrie Norm, Europäische Norm           |
| DME            | Dimethylether                                       |
| FAME           | Fatty acid methyl ester                             |
| FT             | Fischer-Tropsch-(Synthese)                          |
| GHG-Emissionen | Greenhouse-Gas-Emissions                            |
| GTL            | gas-to-liquid (Erdgas)                              |
| HC             | Hydrocracker-(Kerosin)                              |
| HVO            | Hydrotreated vegetable oil                          |
| IP             | Intellectual property (IP No. of ASTM)              |
| KUP            | Kurzumtriebsanlage                                  |
| KWK            | Kraft-Wärme-Kopplung                                |
| LOHC           | Liquid Organic Hydrogen Carrier                     |
| MVV            | Mineralölwirtschaftsverband                         |

---

R. Peters (✉)

Forschungszentrum Jülich, Institut für Energie- und Klimaforschung, IEK-3: Elektrochemische Verfahrenstechnik, Brenngaserzeugung und Systeme, 52425 Jülich, Deutschland  
E-Mail: [ra.peters@fz.juelich.de](mailto:ra.peters@fz.juelich.de)

© Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2015

R. Peters (Hrsg.), *Brennstoffzellensysteme in der Luftfahrt*,  
DOI 10.1007/978-3-662-46798-5\_2

|      |   |
|------|---|
| RME  | Rapsölmethylester (engl. <i>FAME</i> )                              |
| SMDS | Shell middle distillate synthesis                                   |
| SOEC | Solid Oxide Electrolysis Cell                                       |
| TG   | Triglycerid   |
| TGA  | Triglyceridfettsäure ( <i>triglycerid acid</i> )                    |
| UOP  | Honeywell UOP, ehem. eigenständig als <i>Universal Oil Products</i> |

---

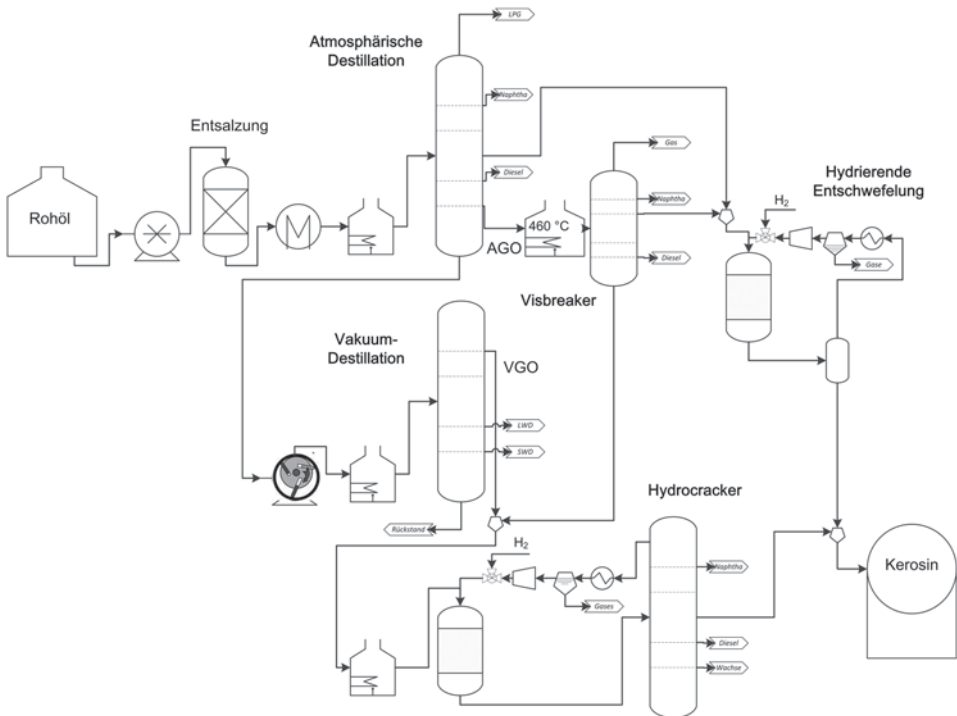
## 2.1 Chemische Zusammensetzung und Spezifikation von Flugturbinen-Kraftstoffen

### 2.1.1 Herstellung von Kerosin im Raffinerieprozess

Kerosin wird in der Raffinerie im Wesentlichen durch Destillation im Raffinerieprozess aus Rohöl gewonnen. Dabei wird das Rohöl zunächst einer Entsalzung zugeführt und auf ca. 400 °C in Rohröfen erhitzt. Anschließend wird es einer atmosphärischen Destillation zugeführt. Die Destillationskolonne besteht aus zahlreichen Böden, auf denen Flüssigkeit und Gasphase aufeinander treffen. Die flüssige Phase kann durch Öffnungen auf den sich darunter befindlichen Boden ablaufen, die Gasphase steigt durch ventilähnliche Vorrichtungen in den darüber befindlichen Boden auf und durchquert wie auf jedem Boden die Flüssigkeit. Dies können einfache Bohrungen (Siebböden) oder Glocken (Glockenböden) sein. Im Idealfall ergibt sich auf jedem Boden ein von der Zusammensetzung abhängiges chemisches Gleichgewicht. Es stellt sich in der Kolonne ein Temperaturprofil ein. Über den Flüssigkeit- und Gasaustausch und das Temperaturprofil ergibt sich eine stoffliche Trennung bzw. eine Anreicherung von Komponenten in bestimmten Zonen der Kolonne. So werden Gase wie Propan und Butan am Kopf der Kolonne abgezogen. Es folgen dann je nach Ausführung leichtes Rohbenzin, schweres Rohbenzin- Naphtha-Fractionen – und Kerosin und Diesel in der Mitteldestillatfraktion. Am Boden der Kolonne befinden sich Schweröle und der Rückstand. Dieser kann je nach eingesetztem Rohöl durchaus 40–60 % des eingesetzten Rohöls ausmachen. Kerosin selber siedet zwischen 150 und 250 °C.

Raffinerieprozesse sind aufgrund der hohen zu verarbeitenden Massenströme hoch effizient in ihrer stofflichen Ausbeute. Der Rückstand wird daher in einer Vielfalt weiterer Prozesse aufgearbeitet. In den sich anschließenden Prozessen entstehen wieder Ströme der Fraktionen Gase, Naphtha, Mitteldestillate, Schweröle, Wachs und schließlich Koks. Allen Raffinerien gemeinsam ist noch die Vakuumdestillation bei Drücken zwischen 10–30 mbar. Damit können auch Stoffströme fraktioniert werden, die bei Umgebungsdruck Siedetemperaturen oberhalb von 400 °C, zum Teil bis 600 °C aufweisen. Durch den erniedrigten Druck werden die Siedetemperaturen abgesenkt und die Gefahr von unerwünschten Pyrolysereaktionen oberhalb von 400 °C verringert. Mit der Vakuumdestillation werden die Fraktionen Vakuumgasöl, leichtes und schweres Wachsdestillat und ein Vakuumrückstand gewonnen. Die Zusammensetzung des Vakuumrückstands wird zum Beispiel für eine russische und eine chinesische Anlage in der Literatur angegeben [65, 36].

Im Vakuumgasöl sinkt der Anteil an gesättigten Verbindungen ab und der Aromatenanteil steigt an. Die genaue Verteilung hängt aber von der Zusammensetzung des Rohöls ab. Die Paraffine im Vakuumgasöl haben Kettenlängen im Bereich  $C_{21}$ – $C_{44}$ . Im Vergleich dazu liegen die Kettenlängen bei Kerosin im Bereich von  $C_9$ – $C_{13}$ . Um weitere Kraftstoffe aus den Rückständen zu gewinnen, werden Konversionsanlagen eingesetzt. Die unterschiedlichen Crackverfahren spalten die höhermolekularen Verbindungen auf. Damit kann die Produktstruktur der Marktanfrage angepasst werden. Es ist jedoch zu beachten, dass thermische Trennverfahren effizienter sind und ein höherer Grad der Konversion – also eine Erhöhung des Anteils an chemischen veränderten Kraftstoffanteilen die Effizienz verringert. Abbildung 2.1 zeigt mögliche Produktpfade für Kerosin. Es sind zwei Crackprozesse berücksichtigt worden, das Visbreaken und das Hydrocracking. Die Temperaturen liegen zwischen 400–500 °C bei Drücken bis zu 300 bar. Das Visbreaken ist mit 480 °C und 7 bar eine milde Variante des thermischen Crackens (max. 540 °C, 70 bar). Ziel ist es die Viskosität schwerer zähflüssiger Produkte zu senken. Das Produkt wird als Einsatz für den Hydrocracker oder als Verschnitt für Schweröle zur Einstellung der Viskosität verwendet. Im Hydrocracker wird ein Gemisch unterschiedlicher Rückstandsöle unter Wasserstoffzugabe über einem Kobalt-Molybdän-Katalysator aufgespalten. An den entstehenden Bruchstückenden bilden sich neue Bindungen zwischen Wasserstoff und Kohlenstoff



**Abb. 2.1** Herstellpfade von Kerosin aus Rohöl in der Raffinerie

aus. Weitere Katalysatoren sind Edelmetalle Pt/Ca Y oder Zeolith basierte Materialien wie NiW/Zeolithe Y [127]. Die Hauptreaktionen sind die Umwandlung von Aromaten in Naphtenen, die Spaltung von Alkylseitenketten und die Hydrierung der Schwefelverbindungen. Dem Hydrocracking folgt in der Raffinerie oft noch ein Entwachsungsprozess [127], der in Abb. 2.1 nicht dargestellt ist.

Jedem Crackverfahren folgt eine erneute fraktionierende Destillation und beim Einsatz von Wasserstoff eine Abtrennung und Zumischung von frischem Wasserstoff als Ersatz für den Verbrauch für die Hydrierungsreaktionen. Stoffströme aus der atmosphärischen Destillation, dem Visbreaker, dem thermischen und rein katalytischen Cracker (ohne Wasserstoffzugabe) enthalten noch Schwefelverbindungen, die bei Bedarf in einem Hydrierungsreaktor selektiv entfernt werden müssen. Es ist jedoch zu beachten, dass die Spezifikation von Kerosin einen Massenanteil von 3000 ppmw Schwefel zulässt. Ein Rohschnitt des Kerosins enthält maximal ca. 1600 ppmw Schwefel, während am Markt befindliches Kerosin zwischen 100–700 ppmw Schwefel [74, 95, 94] enthält.

Die unterschiedlichen Stoffströme werden in der Raffinerie zu einem Treibstoff zusammengemischt, der den Spezifikationsanforderungen entspricht. Die exakte chemische Zusammensetzung kann durchaus unterschiedlich sein, da die Rohölqualität hierauf Einfluss nimmt. Zudem verfügt jeder Raffineriestandort über einen individuellen Anlagenpark mit unterschiedlichen Kapazitäten der Anlagenteile.

## 2.1.2 Qualität von Flugturbinen-Kraftstoffen

Die Qualität von Flugturbinenkraftstoffen wird in Normen geregelt. Tabelle 2.1 zeigt Angaben aus der britischen Spezifikation DEF STAN 91–91 für die Kerosinspezifikation Jet A-1 [29]. Wichtige Kraftstoffeigenschaften für die Nutzung von Kerosin in Strahltriebwerken sind hierin festgehalten. Für die Wasserstofferzeugung aus Kerosin sind vor allem der Schwefelgehalt, die Verdampfungseigenschaften und der Aromatengehalt von Interesse. Zur Verbesserung der Kraftstoffeigenschaften werden dem Kerosin Additive zugegeben. Eine Liste dieser Additive ist in Tab. 2.3 aufgeführt. Weitere Kerosinqualitäten sind in Verbindung mit der Verbreitungsgebiet in Tab. 2.2 genannt. Angaben hierzu sind zudem in [24] zu finden.

Der erlaubte Schwefelgehalt von 3000 ppmw in Jet A-1 führt bei einer tolerierbaren Grenzkonzentration von 10 ppmw für die üblichen Katalysatoren, die in der Wasserstofferzeugung eingesetzt werden, zu einem erheblichen Reinigungsaufwand. Die maximal erlaubten Schwefelgehalte bleiben mit Werten zwischen 1000 ppmw (JP-7) und 4000 ppm (JP-4) in der gleichen Größenordnung. Die für die Brennstoffzellentechnik zwingend durchzuführende Entschwefelung wird in Abschn. 2.4.3 aufgegriffen und detaillierter diskutiert. Der Aromatengehalt entspricht mit 25 % (Vol./Vol.) in etwa dem von Dieselmotorkraftstoffen. Aromaten gelten bei der Reformierung von fossilen Kraftstoffen als weniger reaktionsfreudig gegenüber Alkanen und Cycloalkanen [14, 61, 62]. Der Siedebereich zwischen 200–300 °C ist in Bezug auf die Verdampfungseigenschaften von Vorteil. Der

**Tab. 2.1** Spezifikation des Flugturbinenkraftstoffs Jet A-1 nach DEF STAN 91–91 [29]

| Eigenschaft               | Einheit            | Grenzwert  | Methoden/Anmerkung  |
|---------------------------|--------------------|------------|---|
| Aussehen                  | –                  | –          | Klar, hell, ohne Feststoff- und ohne Wasserinhalt bei Umgebungstemperatur |
| Säuregrad                 | mg KOH/g           | Max. 0,015 | IP 354, ASTM D3242  |
| Aromatengehalt            | % (Vol./Vol.)      | Max. 25,0  | IP 156, ASTM D1319  |
| Naphthene                 | % (Vol./Vol.)      | Max. 3,0   | ASTM D1840/ zyklische Aliphaten   |
| Schwefelgehalt            | ppmw               | Max. 3000  | IP 336  |
| davon Mercaptane          | ppmw               | Max. 30    | IP 342, ASTM D3227  |
| Partikel                  | mg/l               | Max. 1,0   | IP 423, ASTM D5452 bei Herstellung  |
| Destillation              | –                  | –          | IP 123, ASTM D86  |
| 10 % (Rückgewinnung)      | °C                 | 205        | –   |
| Endpunkt                  | °C                 | 300        | –   |
| Rückstand                 | % (Vol./ Vol.)     | Max. 1,5   | –   |
| Verlust                   | % (Vol./ Vol.)     | Max. 1,5   | –   |
| Gefrierpunkt              | °C                 | Max. –47,0 | IP 16, ASTM D2326   |
| Flammpunkt                | °C                 | Min. 38,0  | IP 170  |
| Dichte bei 15 °C          | kg/m <sup>3</sup>  | 775–840    | IP 365, ASTM D4052/min-max  |
| Viskosität bei –20 °C     | mm <sup>2</sup> /s | Max. 8000  | IP 71, ASTM D445  |
| Elektrische Leitfähigkeit | pS/sm              | 50–600     | IP 274, ASTM D2624/min-max  |
| Spezifische Energie       | MJ/kg              | Min. 42,8  | Unterer Heizwert  |

Rückstand von max. 1,5 % (Vol./Vol.) ist jedoch zu beachten und verdampft bei zu geringer Misch- bzw. Vorkammertemperatur im Reformier nicht. Den Katalysator erreichen in einem solchen Fall feine Nebeltröpfchen, die auf Grund des Verdampfungsverhaltens wachsartige Paraffine oder mehrkernige Aromaten enthalten können.

Was sind nun die Unterschiede zwischen den unterschiedlichen Kerosinsorten, die in Tab. 2.2 wiederzufinden sind. Nach Rachner [103] sind die gebräuchlichsten Sorten Jet A-1, Jet A, Avtur, JP-8 und JP-5. Regionale Kraftstoffe sind TS-1 für Russland, No. 3 Jet Fuel für China und Flyfotogen 75 in Schweden [24]. Jet A-1 ist das außerhalb der U.S.A. weltweit verbreitete Kerosin. Jet A unterscheidet sich von Jet A-1 nur über einen höheren Gefrierpunkt von –40 °C statt –47 °C und wird in den U.S.A. verwendet. Der von der NATO meist verwendete militärische Flugturbinenkraftstoff ist JP-8. Er unterscheidet sich von Jet A-1 nur über eine unterschiedliche Zugabe an Additiven. Der militärische Kraftstoff Avtur unterscheidet sich in seinen Stoffeigenschaften kaum von JP-8. JP-5 hingegen weist im Vergleich zu Jet A-1 einen deutlich höheren Flammpunkt von 60 °C statt 38 °C, eine geringfügig andere Dichte, einen niedrigeren Dampfdruck und eine geringere spezifische Wärmekapazität auf [103]. Die meisten Kerosinsorten weisen analog zu Jet A-1 einen Siedebereich zwischen 205 (10 % Rückgewinnung) – 300 °C (Siedeende) auf. Daneben gibt es sogenannte wide-cut Kraftstoffe wie JP-4/Jet B mit einem Siedebereich zwischen 100–280 °C oder das russische T-2 (145 °C (10 %) – 280 °C (98 %)).

**Tab. 2.2** Bekannte Kerosinsorten nach Rachner [103] und Exxon Mobil Aviation [24]

| Bezeichnung   | Anmerkungen   | Weitere Bezeichnungen                   | Gefrierpunkt<br>(°C) | Flammpunkt<br>(°C) | Verbreitung                  |
|---------------|---|---|----------------------|--------------------|------------------------------|
| Jet A-1       | Kommerzieller Turbinenkraftstoff  | –                                       | –47                  | 38                 | außerhalb U.S.A.             |
| Jet A         | Kommerzieller Turbinenkraftstoff  | –                                       | –40                  | 38                 | innerhalb U.S.A.;            |
| Avtur         | Britische Militärspezifikation ähnlich zu Jet A-1                       | NATO F-35;<br>NATO F-34 in Kanada       | –47                  | 38                 | Großbritannien               |
| JP-1          | Vorgänger Jet A   | –                                       | –60                  | –                  | Nicht mehr im Markt          |
| JP-4          | Militärturbinenkraftstoff; wide cut: 100–270 °C;<br>4000 ppmw S         | NATO F-40; zivil (Jet B);<br>AVTAG/FSII | –58                  | –                  | Abgelöst durch JP-8          |
| JP-5          | Kerosin mit hohem Flammpunkt  | NATO F-44;<br>AVCAT High Flash          | –46                  | 60                 | U.S.A.;<br>Militärkraftstoff |
| JP-7          | Erhöhter Energieinhalt;<br>43,5 kJ/kg; Wide cut: 182–288 C; 1000 ppmw S | –                                       | –43,3                | 60                 | U.S.A.;<br>Militärkraftstoff |
| JP-8          | Primärer Militär-Turbinenkraftstoff                                     | NATO F-34/ F-35                         | –47                  | 38                 | U.S.A.                       |
| TS-1          | 150–250 °CN<br>2500 ppmw S  | Premium:<br>2000 ppmw S                 | –60                  | 28                 | Russland                     |
| T-1           | 150–280 °C;<br>1000 ppmw S  | –                                       | –60                  | 30                 | Russland                     |
| T-2           | 145–280 °C;<br>2500 ppmw S  | –                                       | –60                  | –                  | Russland                     |
| No 3 Jet Fuel | –   | –                                       | –47                  | 38                 | China                        |
| Flyfotogen 75 | 1000 ppmw S   | –                                       | –50                  | 38                 | Schweden                     |

**Tab. 2.3** Zugelassene Additive zum Flugturbinenkraftstoff Jet A-1 nach der Spezifikation DEF STAN 91–91 [29, 110]. 1 mg/l entspricht ca. 1,25 ppmw bei 800 kg/m³

| Wirkung   | Substanz  | Grenzen/Methode   |
|---|---|---|
| Antioxidans                                     | 2,6 ditertiärbutylphenol<br>2,6 ditertiärbutyl, 4-methylphenol<br>2,4 dimethyl, 6-tertiärbutylphenol<br>und Mischungen daraus | 17–24 mg/l  |
| Metalldeaktivator                               | N,N-disalicylidene<br>1,2-propanediamin   | Max. 2,0 mg/l (Erstzugabe);<br>Max. 5,7 mg/l (Auffrischung) |
| Antistatischer Zusatz                           | Stadis® 450   | Max. 3,0 mg/l (Erstzugabe);<br>Max. 5,0 mg/l (Auffrischung) |
| Korrosionsinhibitor/<br>Schmierfähigkeitszusatz | Hitec® 580; Hitec® 4745 etc.  | 9–23 mg/l   |
| Anti-Icing                                      | Diethylenglycolmethylether  | 0,10–0,15 % (Vol./Vol.)                                     |
| Lecksuchstoff                                   | Produkt nach [29]   | 1 mg/kg   |

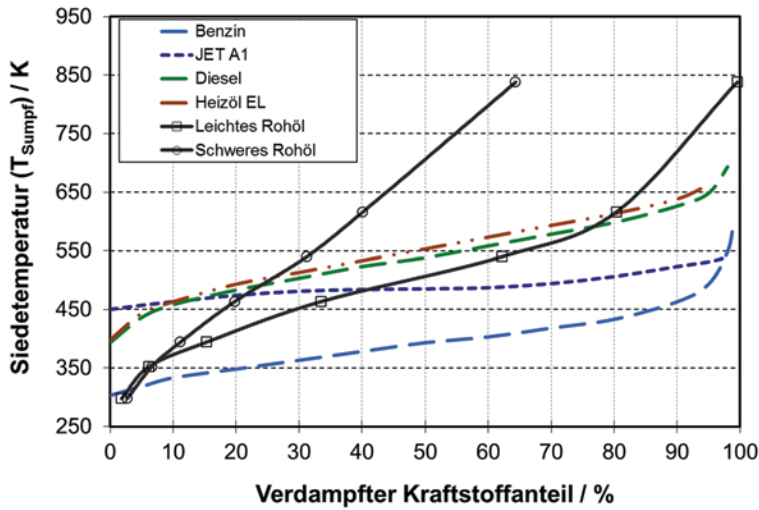
Flugturbinenkraftstoffe unterscheiden sich von Kerosinfraktionen in der Raffinerie durch die Zugabe zahlreicher Additive. Diese sind in Tab. 2.3 aufgelistet. Deren Funktion sei in Anlehnung an [110] kurz erläutert. Antioxidantien verhindern die Oxidation des Kraftstoffs. Wird der Kraftstoff hydriert beträgt die Zugabe ca. 17–24 mg/l an alkyliertem Phenol als Antioxidans. Bei nicht hydrierten Kraftstoffen ist die Zugabe optional, darf aber nicht den Maximalwert überschreiten. Ein Metalldeaktivator reagiert mit den löslichen Metallen wie z. B. Kupfer und bildet Chelate und trägt zu einer besseren thermischen Stabilität bei. Die elektrische Leitfähigkeit wird durch antistatische Additive verbessert, Diethylenglycolmethylether als Anti-Icingmittel verhindert bei Konzentrationen von 0,1–0,15 % (Vol./Vol.) die Eisbildung des Restwassers im Kerosin bei niedrigen Temperaturen.

2.1.3 Physiko-chemische Prozesseigenschaften von Kerosin

Die thermodynamischen Eigenschaften und die chemische Zusammensetzung eines Kraftstoffs sind für die Anwendung eines Kraftstoffs in der Brennstoffzellentechnik wichtiger als die Spezifikation der Treibstoffe Benzin und Diesel für Verbrennungsmotoren und *Jet fuel* für Flugturbinen. Bestandteile der Kraftstoffe sind in den Normen nicht detailliert in ihrer chemischen Zusammensetzung spezifiziert sondern es wird nur das Siedeverhalten in engen Grenzen vorgeben.

2.1.3.1 Siedeverhalten

Das Siedeverhalten eines Kraftstoffs wird üblicherweise in Normen und Regelwerken festgelegt wie sie auch in Tab. 2.1 herangezogen wurden. Für Jet A-1 sind festgelegt, dass 10 % des Kerosins bei maximal 205 °C verdampft sein müssen, dass das Siedende bei maximal 300 °C liegt und das sich ein Rückstand von max. 1,5 % ergibt. Siedekurven für verschiedene Kerosinqualitäten sind im Handbook of Aviation Fuel Properties [24]



**Abb. 2.2** Siedeverhalten von Benzin, Diesel und Kerosin im Vergleich zu schwerem und leichtem Rohölqualitäten

zu finden. Abbildung 2.2 zeigt das Siedeverhalten von Kerosin nach Jet A-1 Qualität im Vergleich zu Benzin, Diesel und Heizöl EL (extra leicht). Die Siedekurve für Jet A-1 ist auf einem relativ engen Siedebereich (180–300 °C) begrenzt. Sie unterscheidet sich damit deutlich von der des Benzins mit niedrigeren Siedetemperaturen in weiten Bereichen und der der beiden anderen Mitteldestillate Diesel und Heizöl EL. In Anlehnung an die in Abschn. 2.1.1 vorgestellten Raffinerieprozesse sind die Siedekurven eines leichten und eines schweren Rohöls dargestellt. Für das leichte Rohöl würde prinzipiell eine atmosphärische Destillation zur Auftrennung der Fraktionen reichen, zu dem ist der Rückstand sehr gering. Bei schwerem Heizöl endet die Siedekurve bei 850 K und einem verdampften Anteil von 65 %. Bei 650 K, der Maximaltemperatur auf der Siedekurve von Diesel bei der 95 % verdampft sein müssen, beträgt der Anteil für das schwere Rohöl in etwa 50 %. In der Raffinerie würde daher ein Anteil schweren Rohöls von mindestens 35 %, eher aber von 50 % in die Vakuumdestillation und die sich daran anschließenden Crackprozesse geleitet werden.

### 2.1.3.2 Transporteigenschaften


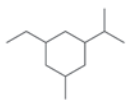
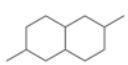
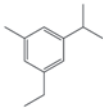
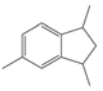
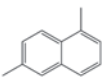

Die Begrifflichkeit der Transporteigenschaft bezieht sich auf den fluiddynamischen Transport und die elektrische Leitfähigkeit der Kraftstoffe. Die Kerosinsorten, die in Tab. 2.2 gelistet sind, unterscheiden sich bezüglich ihrer kinematischen Viskosität bei –20 °C mit Werten zwischen  $8\text{--}8,8 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$  kaum voneinander. Lediglich die russischen Qualitätsstufen TS-1 und T-2 sind bei anderen Temperaturen definiert und erreichen noch 8 bzw.  $6,10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$  bei –40 °C. Die elektrische Leitfähigkeit liegt zwischen 50–450 oder 50–600  $10^{-12} \text{ S/m}$ . Einzelne Angaben sind in [24, 139] zu finden.



### 2.1.3.3 Chemische Zusammensetzung

Kerosin besteht aus einer Mischung aus Alkanen, Cycloalkanen (den Naphthenen), Aromaten und Olefinen. Jet A enthält fast ausschließlich Verbindungen mit 9 bis 17 Kohlenstoffatomen, wobei der Schwerpunkt – 19,5 % (Masse) als  $C_{12}$ -Verbindung vorliegen. Ein typischer Gehalt liegt bei 37 % Alkanen, 47 % Cycloalkanen, 15 % Aromaten und 1 % Olefinen [74]. Nach Rachner [103] hängt die exakte Zusammensetzung sehr stark vom Rohöl und dessen Herkunft ab. Es werden verschiedene Quellen mit einer Bandbreite von 35,4–78 % (Masse) Alkane, 9,8–60,3 % (Masse) Naphthene und 2,5–22 % (Masse) Aromaten angeführt. Die Aromaten bestehen zum größten Teil aus Monoaromaten. Ein kleiner Teil weist Di- und Triaromate auf. Mit steigender Zahl der aromatischen Kerne hin zum polyzyklischen Aromaten nehmen die kritischen Eigenschaften solcher Moleküle zu. Nach Rachner ergab eine Analyse von neun verschiedenen Lieferungen einen mittleren Aromatengehalt von 18,6 % (Vol.) mit einer Schwankung zwischen 14,5–20,5 % (Vol.). Die Konzentration an Diaromaten betrug demnach im Mittel 1,3 % (Vol.), 0,5–1,88 % (Vol.). Olefine waren mit 0,54 % (Vol.) im Mittel vorhanden. Weitere Analysen sind in [103] vorhanden. In einer Jet A Probe fanden sich 36,5 % Alkane, 48,7 % Naphthene und 15 % Aromaten. Die Naphthene gliederten sich auf in 35,9 % (Vol.) einkernige und 12,8 % (Vol.) zweikernige Naphthene. Bei den Aromaten konnten neben den einkernigen Alkylbenzolen (10,4 %) und dem Diaromaten (1,3 %) auch Indane und Tetraline – in Summe 3,3 % (Vol.) gefunden werden. Hierbei wird ein Benzolmolekül mit einem Fünfer bzw. Sechsering gekoppelt. Da die Konzentration an Aromaten für die Reformierung besonders wichtig ist sei noch eine weitere Zusammenstellung kurz benannt [24]. Es fanden sich in Proben für Jet A-1, Jet A, JP-8 und JP-5 Aromatengehalte zwischen 17,3–19,1 % (Vol.). Lediglich in JP-4 und JP-7 wurden mit 8,1 und 1,5 % deutlich geringere Konzentrationen gemessen. Die Spezifikation DEF STAN 91–91 verlangt für synthetische Kraftstoffe jedoch einen Mindestgehalt von 8 % Aromaten [29].

Abbildung 2.3 fasst die oben beschriebenen Angaben nochmals zusammen. Als Vertreter für die einzelnen Stoffklassen der Alkane (Iso- und n-Alkane), der Cycloalkane (Naphthene), der Aromaten und der Alkene (Olefine) wurden mögliche Vertreter dargestellt. Diese ausgesuchten Moleküle weisen im Gegensatz zur realen Zusammensetzung jeweils 12 Kohlenstoffatome auf. Mit einer solchen Mischung würde eine Zusammensetzung von  $C_{12}H_{23,2}$  erreicht, welches einer Angabe von Rachner [103] entspricht. Diese Mischung ist nicht dazu geeignet das Siedeverhalten nach Abb. 2.2 zu beschreiben. Eine Abschätzung ergibt einen Siedebeginn mit Isodekan bei 468 K und ein Siedende bei ca. 530 K, der Siedetemperatur des Dimethylnaphthalins. An dieser Stelle sei auf die Auswahl der Modellkraftstoffe für die Verfahrensanalyse in Abschn. 8.2.2.2 verwiesen. Ein idealer Modellkraftstoff besteht aus einer Mindestanzahl an Komponenten mit denen einerseits das Siedeverhalten, andererseits der Aromaten-, Naphthen-, Olefin- und Paraffingehalt in einem realitätsnahen Konzentrationsbereich vorliegt. Für den Kraftstoff Benzin konnte eine entsprechende Mischung von Samsun und Peters gefunden werden [111], für Kerosin mangelt es auf Grund der längeren Kettenlänge der Moleküle an geeigneten Reinstoffdaten.

| Beispiele   | Klasse                          | Bezeichnung   | Chemische Formel | Anteil der Klasse im Kerosin   |
|---|---------------------------------|---|------------------|--|
|  | Alkane                          | Isododekan<br><i>2,2,5,5-tetramethylhexan</i>                           | $C_{12}H_{26}$   | 37 % (Masse)<br>35 – 80 %  |
|  | Cycloalkane<br><i>Naphthene</i> | Alkyliertes Cyclohexan<br><i>3-methyl, 5-ethyl, isopropylcyclohexan</i> | $C_{12}H_{24}$   | 47 % (Masse)<br>10 – 60 %<br>ca. 2/3 einkernig<br>& 1/3 zweikernig                           |
|  | Cycloalkane<br><i>Naphthene</i> | Alkyliertes Decalin<br><i>2,7-dimethyldecalin</i>                       | $C_{12}H_{22}$   |  |
|  | Aromaten                        | Alkyliertes Benzol<br><i>3-ethyl, 5-methyl, isopropylbenzol</i>         | $C_{12}H_{18}$   | 15 % (Masse)<br>2,5 – 22 %<br>max. 25 % (spezifiz.)<br>ca. 2/3 einkernig<br>& 1/3 zweikernig |
|  | Aromaten<br>Indane              | Alkyliertes Indan<br><i>3,5,8-trimethylindan</i>                        | $C_{12}H_{16}$   |  |
|  | Aromaten<br>Diaromaten          | Alkyliertes Naphthalin<br><i>2,8-dimethylnaphthalin</i>                 | $C_{12}H_{12}$   |  |
|  | Alkene<br><i>Olefine</i>        | 1-Dodeken   | $C_{12}H_{24}$   | 1 % (Masse)<br>0,3 – 1 %   |

**Abb. 2.3** Chemische Hauptbestandteile nach Klassen in Jet A-1Bildrechte: [Urheberrecht beim Autor]

#### 2.1.3.4 Schwefelkomponenten

Erdöl enthält schwefelhaltige Kohlenwasserstoffverbindungen als natürlicher Bestandteil. Diese Schwefelverbindungen sind über den gesamten Siedebereich des Rohöls verteilt, wenngleich der Schwefelgehalt im Rückstand am größten ist. Generell steigt der Schwefelgehalt in den Fraktionen mit steigender Temperatur an. Der Anteil in den einzelnen Fraktionen ist jedoch sehr stark von der Rohölqualität abhängig. Es existieren Rohöle mit bis zu 14 % Schwefelverbindungen, in kommerziell relevanten Qualitäten beträgt der Anteil zwischen 1000 ppmw und 3 % (Masse). Der Durchschnitt aller nachgewiesenen Reserven liegt bei 1,8 % (Masse). Da der Massenanteil an Schwefel in der Kerosinfraktion - teilweise auch als Petroleumfraktion bezeichnet - bei maximal nur 2000 ppmw liegt, wird im Prinzip keine zusätzliche Entschwefelung im Hinblick auf den Grenzwert von 3000 ppmw S benötigt. Im Rohkerosin aus nordafrikanischem Rohöl und dem der Nordsee beträgt der Schwefelgehalt nur 100–200 ppmw S. Dies erklärt wieso der Gesamtgehalt des Kerosins in Abb. 2.4 für eine Kerosinqualität mit mittlerem Schwefelgehalt in Summe nur knapp mehr als 600 ppmw S enthält. Ein höherer Schwefelgehalt von 1600 ppmw S war durch Bezug eines Rohkerosins russischer Herkunft möglich.

Die in den Kraftstoffen enthaltenen Schwefelverbindungen gliedern sich typischerweise in zwei Gruppen, den aliphatischen und den aromatischen Verbindungen. Zu den

<http://www.springer.com/978-3-662-46797-8>

Brennstoffzellensysteme in der Luftfahrt

Peters, R. (Hrsg.)

2015, XXI, 409 S. 198 Abb., 20 Abb. in Farbe.,

Hardcover

ISBN: 978-3-662-46797-8