

ELECTROCHIMIE – FIZICĂ

De la electrochimie la nanotehnologie

Electrochimia

- Este știință a care se ocupă de transformarea reciprocă a energiei chimice și electrice stocate în legăturile chimice, studiul interfețelor încărcate electric
- Folosește noțiuni și concepte împrumutate atât din chimie dar și din domeniul fizicii câmpului electric, dezvoltându-și puternic noțiuni, concepte și legături proprii
- Se află în plină dezvoltare:
 - Bioelectrochimia- studiul proceselor bioelectrochimice din sistemele vii și interacțiunea lor cu mediul exterior
 - Fotoelectrochimia,
 - Nanoelectrochimia- ca
 - Fizico-electrochimia polimerilor semiconductorilor
- Contribuie la elaborarea unor tehnologii moderne, economice și ecologice cum ar fi metodele electrochimice de analiză și control, metodele de depoluare electrochimică, ingineria electronică, etc

Electrochimia-Istoric

- Secolul III î.e.n. – primele atestări de a genera curent electric
- Baterii primitive-scopul acestei baterii primitive: folosirea la galvanizarea unor metale, în scopuri medicale de anestezie, în scopuri rituale.
- 1791 – Luigi Galvani - observații referitoare la mișcările de contracție ale mușchilor unei broaște atunci când aceasta este atinsă de o pensetă bimetalică (experimentul de stimulare neuromusculară al lui Galvani)
- 1793 – Alessandro Volta, continuând cercetările lui Galvani, afirmă că picioarele broaștei s-au mișcat datorită formării unei micropile electrochimice între cele două metale care au intrat în contact prin intermediul unui electrolit.
- 1799 – Alessandro Volta construiește prima pilă electrochimică
- 1805 – Theodor von Grotthuss – oferă prima explicație științifică referitoare la trecerea curentului printr-un electrolit
- 1806-1807 – Sir Humphry Davy obține pe cale electrochimică Na, K, Al
- 1830 – are loc pentru prima dată depunerea controlată, pe cale galvanică, a metalelor prețioase
- 1830-1833 – Michael Faraday formulează una din legile de bază ale electrochimiei, arătând pe cale experimentală că, într-un sistem electrochimic, masa de substanță ce reacționează sub acțiunea a curentului electric este direct proporțională cu cantitatea de electricitate care trece prin sistem și pentru aceeași cantitate de electricitate masa reacționată la electrozi este proporțională cu echivalentul chimic.
- 1834 – Faraday introduce termenii de echivalent electrochimic, catod, anod, electrod, ion, cation, anion, electrolit, numărul lui Faraday (F)

- 1836 – John Daniell prezintă variante incipiente ale pilei electrochimice de curent constant, denumită mai târziu pila Daniell – Jacobi
- 1839 – Wiliam R Grove inventează celula de combustie cu hidrogen și oxigen
- 1842 - Emil du Bois-Reymond arată că impulsul nervos transmis este însoțit de o schimbare a potențialului de membrană
- 1853 – Johann Wilhen Hittorf face primele experimente în domeniul migrației ionilor
- 1859 – Gaston Plante – acumulatorul de plumb ce va domina mai bine de 100 de ani tehnologia pilelor electrochimice reîncărcabile
- 1866 – Georges Leclanche descoperă pila zinc – dioxid de mangan folosită și astăzi cu foarte puține modificări
- 1879 – Hermann von Helmholtz formulează primele teorii ale stratului dublu electric și publică lucrări referitoare la încărcarea interfeței metal – electrolit
- 1886 – Charles M. Hall și Paul Heroult pun bazele, în mod independent, procesului tehnologic de obținere a aluminiului electrolitic
- 1888 – Wilhelm Ostwald (ce ia premiul Nobel în 1920) publică primele cercetări în domeniul disocierii soluțiilor de electroliți și formulează legea diluției
- 1889 – Walther Nernst (în 1920 Premiul Nobel) elaborează teoria potențialului absolut și relativ de electrod și formulează ecuația ce-i poartă numele
- 1890 – Hemilton Castner și Karl Kellner pun la punct procedee tehnologice de obținere a NaOH și Cl₂ pe cale electrochimică
- 1896 – apare prima lucrare de tip monografie “The Elements of Electrochemistry” a lui Max Julius Le Blanc ce va fi completată în 1907
- 1901 – Thomas Alva Edison și Waldemer Jungner inventează prima pilă electrochimică alcalină reîncărcabilă
- 1902 – este fondată Societatea Americană de Electrochimie
- 1909 – Soren Sorensen introduce noțiunea de pH ca unitate de măsură a acidității
- 1910 – Louis Georges Gouy și David L. Chapman oferă primele dezvoltări matematice coerente ale stratului ale stratului dublu electric
- 1912 – Julius Bernstein publică lucrarea “Elektrobiologie” în care apare pentru prima dată aplicarea principiilor electrochimice membranelor celulelor organismelor vii
- 1913 – odată cu producerea oțelului inoxidabil în cantități industriale în Sheffield (Anglia) apar și primele încercări de a explica teoretic pasivarea metalelor
- 1922 – Jaroslav Heyrovsky (premiul Nobel în 1959) pune bazele polarografiei utilizând un electrod picurător de mercur și aplică această tehnică la analiza ionilor din soluții de electroliți
- 1923-1927 – Peter Debye (premiul Nobel în 1936) Enrich Huckel și Lars Onsager (premiul Nobel în 1968) explică de ce aplicarea teoriei ionizării a lui Arrhenius soluțiilor de electroliți este limitată; apare o nouă teorie ce include conceptul de atmosferă ionică și rază ionică
- 1930 – Walter Schottky și Carl Wagner se folosesc de conceptele fizicii cuantice pentru a explica fenomenul de conductibilitate
- 1935 – Arnold Obeckman construiește primul pH-metru de uz industrial
- 1941 – Karl Friedrich Bonhoeffer publică primele studii de pasivare ale fierului și reactivitatea sa în soluții de acid azotic
- 1952 – Allan L. Hodgkin și Andrew F. Huxley (premiul Nobel în 1963) elaborează modelul electrochimic al cuplului Na⁺/K⁺ pentru explicarea transmiterii impulsului nervos
- 1955 – se construiește la Institutul Max Planck (Germania) primul potențostat pe bază de lămpi

- 1960 – Wilson Greatbatch pune la punct un stimulator cardiac ce folosește o baterie Duracell special construită în acest scop de Samuel Ruben
- 1960-1965 – sunt descoperite și dezvoltate simultan o serie de tehnici electrochimice (cronoamperometrie, volumetrie ciclică, etc.)
- 1965 – Manuel M. Baizer face prima electrosinteză organică – electrosinteza adiponitrilului
- 1967 – Neng-Ping Yao și Joseph T. Kummer publică primele cercetări în domeniul caracterizării și al proprietăților b- Al_2O_3 , un important electrolit solid folosit mai târziu în bateriile Na-S
- 1970-1975 – sunt folosite pe scară largă tehnicile spectroelectrochimice pentru identificarea speciilor electroactive
- 1978 – Peter Dennis Mitchell primește premiul Nobel pentru elucidarea mecanismului conversiei adenozindifosfatului în adenozintrifosfat; este considerat ca fiind unul dintre pionierii bioelectrochimiei moderne
- 1979-1987 – Heinz Gerischer contribuie substanțial la dezvoltarea fotoelectrochimiei
- 1990 – este anul de referință al trecerii autovehiculelor propulsate electric de la faza de laborator (prototip) la faza de testare urbană
- 1992 – Rudolph A. Marcus primește premiul Nobel pentru lucrările sale în domeniul teoriei reacțiilor cu transfer de electroni în sistemele redox
- 1993 – primul autobuz comercial cu autonomie mai mare de 100 km alimentat cu energie electrică furnizată de pile de combustie
- 1994 – General Electric aplică în mod experimental pentru prima dată electroforeza capilară și oxidarea în *situ* pentru distrugerea contaminanților din sol
- 1995 – US Filter Corporation SUA a pus la punct o instalație tehnologică de regenerare a apei uzate pe bază de electroodializă, cu funcționare continuă în trei trepte, la care, la finalul treptei a treia, gradul de purificare al apei uzate este similar cu cel al apei obținute prin distilare convențională
- 1997 – Fuji Photo Film Corp fabrică un nou material anodic pentru bateriile Li/ion, bazat pe un material compozit de tipul metal-oxid-sticlă, cu o capacitate de stocare a energiei de circa 1,5 ori mai mare decât cele clasice
- 1998 – Ford introduce pe piață modelul comercial de autoturism electric Ranger Electric 4x4 pe bază de acumulatori Ni/metal hidrură, cu o autonomie de 136-150 km/ciclu de încărcare
- 1999 – National Renewable Energy Laboratory (SUA) anunță producerea unei celule hibrid fotovoltaiică-fotoelectrochimică, capabilă să descompună apa în hidrogen și oxigen cu un randament de 12% (de circa 4-5 ori mai mare decât cele obținute până în 1997 la nivel mondial); tehnologia folosită utilizează o combinație de electrozi compoziți pe bază de galiu-indiu și galiu-arsen
- 1999 – Nissan introduce pe piață modelul Nissan Alta Electric Vehicle ca automobil electric produs în serie, dotat cu 4 locuri, având un motor electric de 30 kW și utilizând acumulatori de Li/ion; autonomia acestui model este de 180 km și poate atinge o viteză maximă de 130 km/h
- 2000 – premiul Nobel pentru obținerea polimerilor conductivi și comportamentul electrochimic al acestora – Alan Heeger, Alan MacDiarmid și Hideki Shirakawa
- 2001 – Schering Plough Antibiotics în colaborare cu Electrosynthesis Company dezvoltă un proces electrochimic de sinteză a 3-exometilen-cefam-sulfoxidului urmat de convertirea lui în cetibuten (cefalosporid puternic din generația a IIIa) cu un randament de aprox. 99%

- 2001 – Shin Fuji Paper Company și Oji Paper Company elaborează un procedeu electrochimic de producere *in-situ* a peroxizilor și a apei oxigenate, cu un randament de 95%
- 2002 – puterea totală a centralelor electrice pe bază de pile de combustie în SUA este estimată la 4100 MW

Celula electrochimică este un sistem electrochimic

- sistem electrochimic = ansamblu de elemente în care au loc reacții chimice de tip redox ca urmare a unui transfer de electroni la nivelul unor interfețe de tipul solid-lichid.
- Celula electrochimică este alcătuit din:
 - Electrozi solizi de interfață numit electrod (metal, nemetal – grafit -, semiconductor)
 - *rol*: preia sarcina electrică și să o transporte din și în circuitul exterior
 - conductor de tip ionic (soluție de electrolit sau un electrolit topit, sau în ultimul timp un electrolit solid – cum sunt polimeri conductivi)
 - *rol*: transporta curentul electric între electrozi

Clasificarea sistemelor electrochimice

- sisteme conduse - în care o reacție chimică este produsă ca urmare a trecerii unui curent electric (de ex. electroliza); celula de electroliză – fig.1

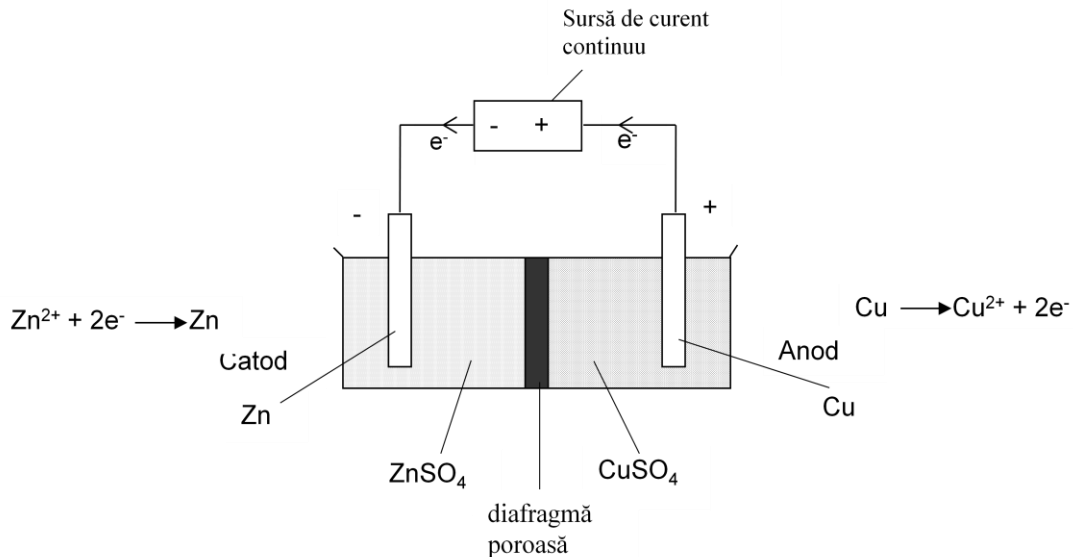


Figura 1 Sistem electrochimic condus (celula de electroliză)

- sisteme autoconduse – în care o tensiune este generată ca urmare a producerii unei reacții chimice spontane (de ex. pila electrică); pila primară – fig. 2

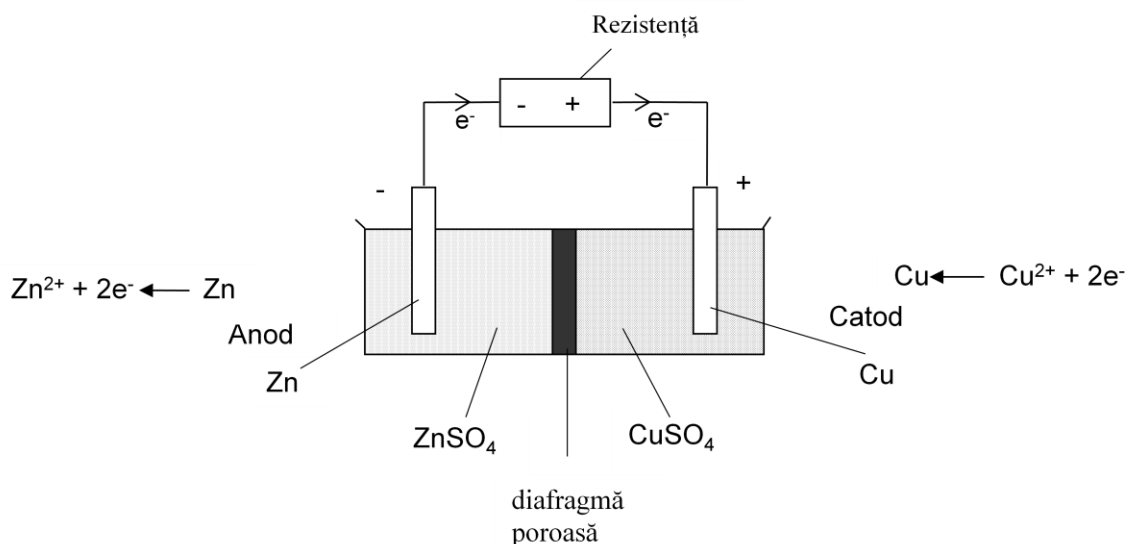
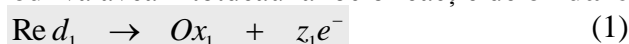


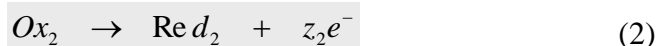
Figura 2 Sistem electrochimic autocondus (pilă primară)

Semnul și denumirea electrozilor atât pentru sistemele conduse cât și pentru cele autoconduse depind de natura proceselor care au loc la electrozi și anume:

- la **anod** va avea întotdeauna loc o reacție de **oxidare** (cedare de electroni):



- la **catod** va avea întotdeauna loc o reacție de **reducere** (acceptare de electroni):



- Ținând cont de acestea și de fluxul electronilor:

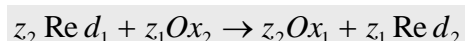
- în sistemele conduse: **anodul are semnul (+)**

catodul are semnul (-)

- în sistemele autoconduse: **anodul are semnul (-)**

catodul are semnul (+)

Reacția globală se obține echilibrând stoechiometric relațiile (1) și (2):



Sistem electrochimic Condus-Autocondus, Reversibilitate-ireversibilitate?!

- două sisteme electrochimice, identice din punct de vedere constructiv și al compoziției electrolitului, pot funcționa atât ca sistem condus cât și ca sistem autocondus, în funcție de regimul de exploatare
 - ex.: acumulatorul cu plumb este sistem condus la încărcare și autocondus la descărcare
 - condiția ca aceste sisteme să poată opera în mod alternativ este ca procesele de electrod să aibă un grad mare de *reversibilitate*

sau

- reactanții și produșii de reacție sunt identici în două sisteme electrochimice, dar diferă prin modul în care este construită celula și prin modul de operare

- ex.: celula de electroliză a apei – sistem condus și pila de combustie oxigen/hidrogen – sistem autocondus

Legea (legile) lui Faraday

$$m = \frac{M}{zF} It = K_e It \quad (3)$$

$$\text{dar } Q = It$$

$$\text{atunci } m = K_e \cdot Q \quad (4)$$

$$F = N_A \cdot e$$

- m = masa de substanță produsă sau reacționată la electrozi (g)
- K_e = echivalentul electrochimic al speciei considerate = (din relația 4) cantitatea dintr-un element, în grame, formată sau transformată la electrozi de către un coulomb
- I = intensitatea curentului electric (A)
- t = timpul de reacție (s)
- M = masa atomică sau moleculară a speciei electroactive (g)
- z = numărul de electroni implicați în reacție
- F = constanta lui Faraday = 96485 C/echiv.g = cantitatea de electricitate necesară pentru a neutraliza sarcinile electrice ale unui echivalent gram de ioni
- N_A = numărul lui Avogadro = $6,0221 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
- e = sarcina electronului = $1,6022 \times 10^{-19} \text{ C}$
- Q = cantitatea de electricitate (C)

Prima lege a lui Faraday

Masa de substanță formată sau transformată la electrozii unui sistem electrochimic este proporțională cu cantitatea de electricitate ce străbate sistemul și cu echivalentul electrochimic al substanței

Pentru o cantitate de electricitate constantă și ținând cont că $M/z = E_{ch}$ (echivalent chimic) se poate scrie:

$$\frac{m_1}{E_{ch1}} = \frac{m_2}{E_{ch2}} = \dots = \frac{m_n}{E_{chn}} \quad (5)$$

A doua lege a lui Faraday

La trecerea unei cantități identice de electricitate, masele de substanță care se formează sau se transformă la electrozi sunt proporționale cu echivalenții lor chimici

Randament electrochimic și consumul specific de energie electrică

- Eficiența unui proces electrochimic și costul final al produselor obținute sunt date de gradul de transformare al unui reactant în produsul dorit precum și de cantitatea de energie folosită în acea transformare.
- D.p.d.v. economic este necesar să se cunoască dacă un procedeu electrochimic este mai rentabil decât altul folosit în obținerea aceluiași produs atât d.p.d.v. al conversiei masice cât și d.p.d.v. energetic.
- randament de tensiune - η_U

$$\eta_U = \frac{U_{\min}}{U_{pr}} = \frac{E}{U_{pr}}$$

- U_{\min} = tensiunea minimă la electroliză (V)
- U_{pr} = tensiunea practică de lucru (V)
- E = tensiunea electromotoare a sistemului (V)

- randament de curent - η_I

$$\eta_I = \frac{I_j}{I}$$

- I_j = curentul strict folosit pentru obținerea produsului util (A)
- I = curentul total ce trece prin circuit (A)

Explicitând din legea lui Faraday valorile celor doi curenți în funcție de masa practică și masa teoretică rezultă:

$$\eta_I = \frac{\frac{m_{practica}}{K_e \cdot t}}{\frac{m_{teoretica}}{K_e \cdot t}} = \frac{m_{practica}}{m_{teoretica}}$$

- randament de energie - η_w

Randamentul de energie se obține prin combinarea celor două randamente (6) și (7):

$$\eta_w = \frac{U_{\min} I_j t}{U_{pr} I t} = \eta_U \eta_I$$

mărimă globală ce caracterizează procesul

- consumul specific de energie masic – CSE_{masic}
- consumul specific de energie molar – CSE_{molar}

Consumurile specifice se obțin prin raportarea cantității de energie folosită în mod real la masa, respectiv numărul de moli de produs obținute în electroliză

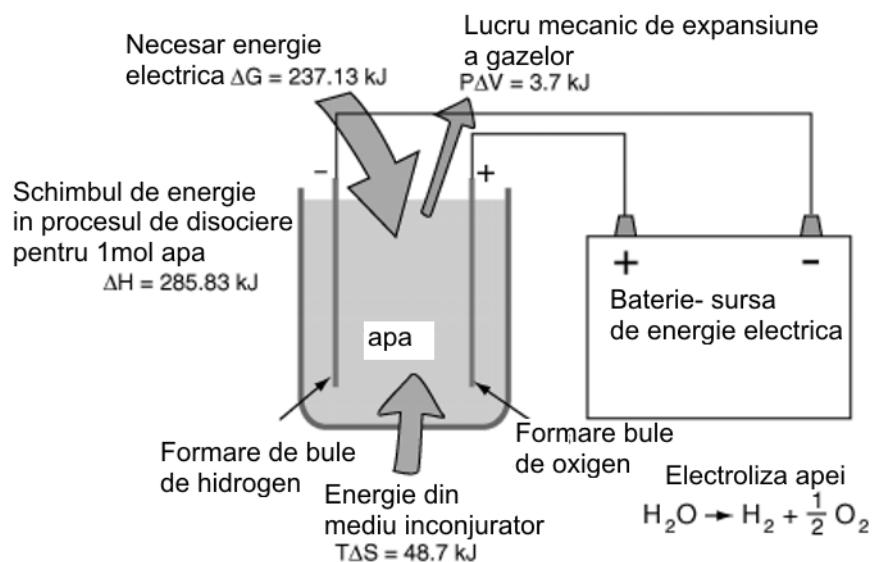
$$CSE_{masic} = \frac{U_{pr} It}{m}$$

$$CSE_{molar} = \frac{MU_{pr} It}{m}$$

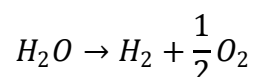
- m = masa practică de produs obținut
- M = masa molară sau atomică a produsului

Electroliza apei

Apa se poate disocia în hidrogen (H_2) și oxigen (O_2) molecular prin aplicarea unei energii electrice într-o soluție de electrolit a unei celule electrochimice. Acest process este un bun exemplu de utilizare a potențialelor termodinamice.



Electroliza unui mol de apă produce un mol de hidrogen și 0,5 moli de oxigen în forma normală de molecule biatomice



O analiză detaliată a procesului se realizează prin potențialele termodinamice și din principiul I al termodinamicii. Presupunând că avem condițiile normale de temperatură (298K) și presiune atmosferică avem din tabelele de termodinamică proprietățile substanțelor

| Mărimea | H ₂ O | H ₂ | 0.5 O ₂ | diferența final-inițial |
|-----------|------------------|----------------|--------------------|-------------------------|
| Enthalpia | -285.83 kJ | 0 | 0 | ΔH = 285.83 kJ |
| Entropia | 69.91 J/K | 130.68 J/K | 0.5 x 205.14 J/K | TΔS = 48.7 kJ |

$$\Delta H = H_{H_2} + H_{O_2} - H_{H_2O}$$

$$\Delta S = S_{H_2} + S_{O_2} - S_{H_2O}$$

În procesul de electroliză se furnizează energie pentru disociere și se efectuează lucru mecanic prin expansiunea gazelor produse până la presiunea normală. Un mol de gaz ocupă indiferent de natura lui un volum de 22,4 dm³ (vezi legile gazelor ideale din orice manual de liceu). Lucrul mecanic de expansiune a gazelor la 298K este dat de:

$$W = P\Delta V = (101.3 \times 10^3 \text{ Pa})(1.5 \text{ moles})(22.4 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{mol})(298\text{K}/273\text{K}) \\ = 3715 \text{ J}$$

Expresia entalpiei este $H = U + PV$ prin urmare variația de energie internă va fi dată de:

$$\Delta U = \Delta H - P\Delta V = 285.83 \text{ kJ} - 3.72 \text{ kJ} = 282.1 \text{ kJ}$$

Această modificare în energia internă reprezintă variația de energie datorată ruperii legăturilor chimice a apei și formarea de noi molecule. Entalpia conține și componenta energiei interne datorată modificărilor forțelor de interacție moleculară (forțele intermoleculare) care este transpusă în lucrul mecanic de expansiune. Prin urmare variația de entalpie reprezintă necesarul de energie pentru a realiza electroliza apei. Oricum acest necesar de energie nu trebuie pus integral pe seama necesarului de energie electrică ce trebuie alimentată celula de electroliză.

Entropia crește în procesul de disociere iar cantitatea $T\Delta S$ ce reprezintă căldura degajată din proces este eliberată spre mediul înconjurător la temperatura T . Prin urmare energia netă ce trebuie furnizată din exterior prin energie electrică este diferența dintre energia totală conținută (entalpia de reacție) și căldura disipată adică variația de energie Gibbs

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S = 285.83 \text{ kJ} - 48.7 \text{ kJ} = 237.1 \text{ kJ}$$

Astfel în procesul de electroliză rezultă o creștere de entropie $T\Delta S$, care este contribuția în căldura din partea mediului înconjurător (poate fi și un termostat). Utilitatea energiei libere Gibbs este aceea că ne precizează căta cantitate de energie sub alte forme poate fi introdusă în sistem pentru a avea loc procesul de electroliza

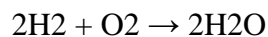
Pile de combustie cu hidrogen

1. Principii de bază

Principiul de operare a unei pile de combustie cu hidrogen este extrem de simplu. Prima demonstrație a funcționării unei pile de combustie a fost efectuată de avocatul și om de știință William Grove în 1839 în sensul schemei prezentate în figura a și b. În figura a apa este disociată prin electroliză în hidrogen și oxigen prin trecerea unui curent electric prin electrolitul acidulat. Hidrogenul și oxigenul este acumulat în eprubetele din electrozi. Prin eliminarea bateriei și înlocuirea cu un ampermetru se observă apariția unui curent electric. În figura b hidrogenul acumulat în eprubetă este oxidat de către electrodul de platina ($\text{H}_2 \rightarrow 2\text{H}^+ + 2\text{e}^-$). Electronii trec în circuitul exterior iar protonii traversează electrolitul spre electrodul unde este acumulat oxigenul unde este redus la apă: $2\text{e}^- + 2\text{p} + 1/2\text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$. Analogia cu sursa de energie electrică este descrisă în figura c unde miscarea fluidului este asociată cu direcția de curgere a curentului electric

Prin urmare electroliza și pila de combustie pot fi reversibile.

De notat că diferența dintre procesul de ardere (combustie) a hidrogenului și procesul de recombinare catalitică în pila de combustie este majoră. Arderea hidrogenului după reacția:



Care este exotermă și produce numai energie termică. În pila de combustie se generează energie electrică, căldură și apă fiind un sistem termodinamic deschis

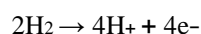
Experimentul din figura b este demonstrația principiului de bază a funcționării unei pile de combustie. Energia electrică produsă de pila este mică. Din termodinamică se poate estima tensiunea electromotoare însă curentul în particular cantitatea de electricitate generată în unitatea de timp este dependentă de mai mulți factori:

- Aria de contact dintre gaz, electrod și electrolit este mică
- Distanța mare dintre electrozi – rezistența internă a electrolitului, natura conductivității protonului prin electrolit, procesele de difuzie, adsorbție (captura a protonului)

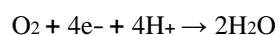
Pentru a depăși aceste inconveniente electrozii sunt de regulă planari ce delimitează un strat subțire de electrolit. Electrodul are o structură poroasă ce permite difuzia gazului spre electrolit (electrod de difuzie sau strat de difuzie). La interfața electrod – electrolit este depus catalizatorul (platina) sub formă de particule nanometrice.

Ansamblul electrod(anod)-catalizator-electrolit-catalizator-electrod (catod) se numește ansamblu membrană electrod atunci când electrolitul este o membrană schimbătoare de ioni (protoni). Cel mai bun exemplu de membrană schimbătoare de protoni sunt polimerii perfluorosulfonati cunoscuți sub denumirea de Nafion

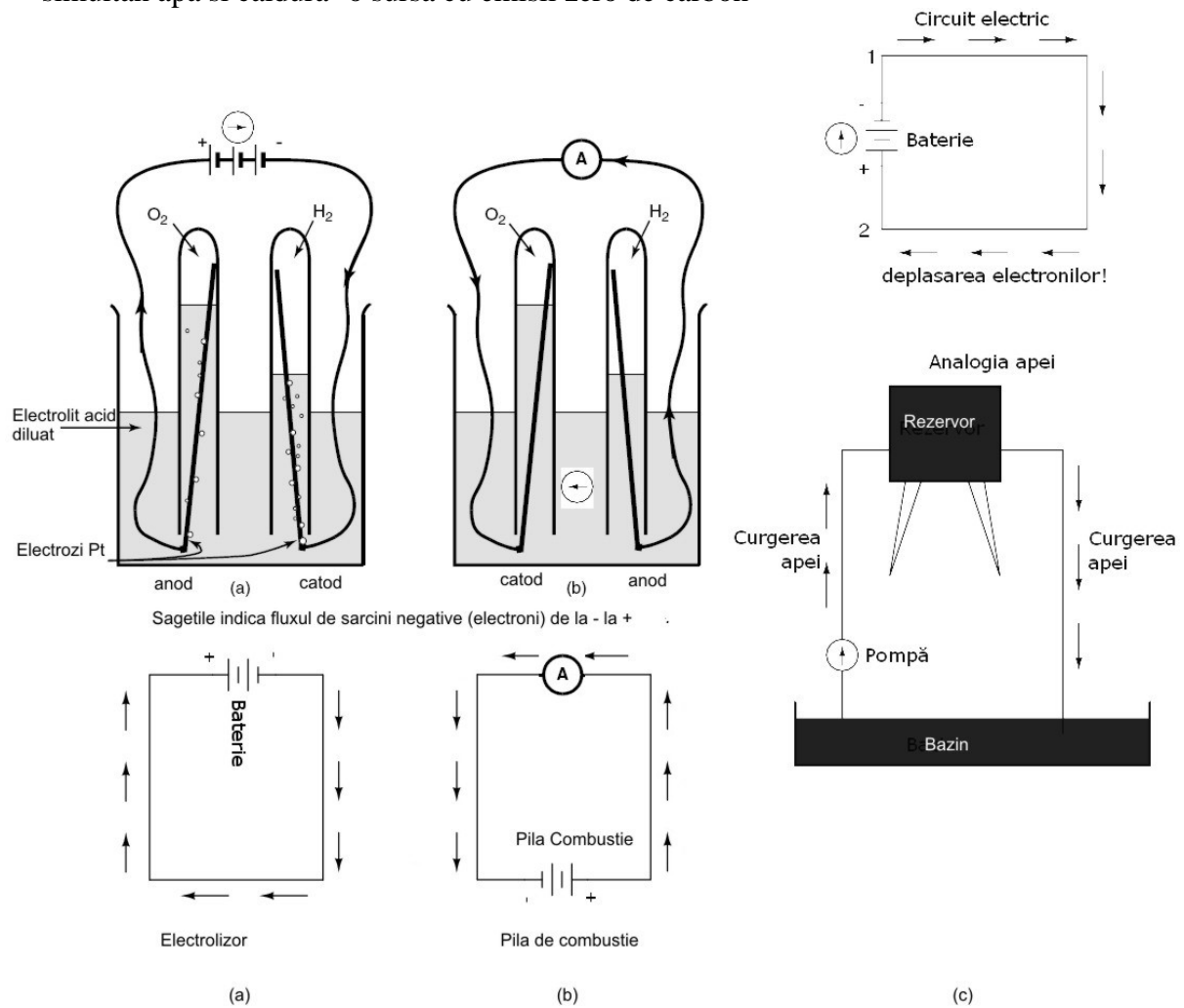
La anod hidrogenul este oxidat generându-se protoni și electroni. Electrolitul preia protonii având conductivitatea ionică mare iar cea electronică mică. Electronii sunt preluați de electrodul poros (în general hirtie carbonică). Reacția de oxidare este:



La catod oxigenul reacționează cu electronii preluați din circuitul exterior și cu protonii ce traversează electrolitul obținându-se apă și căldură



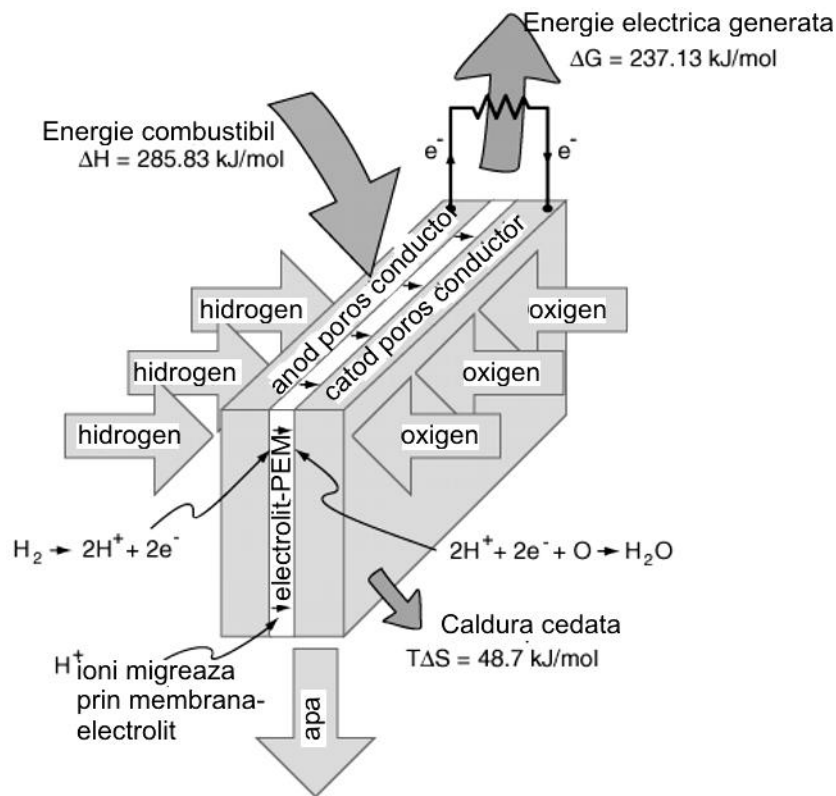
Dupa cum se observa pila de combustie este cea mai curata sursa de energie producand simultan apa si caldura- o sursa cu emisii zero de carbon



Analiza termodinamica a pilei de combustie este simpla si descrisa in tabelul urmatoar:

| Marimea | H_2 | $0.5 O_2$ | H_2O | diferenta |
|-----------|------------|-------------------------|------------|-------------------------|
| Enthalpie | 0 | 0 | -285.83 kJ | $\Delta H = -285.83$ kJ |
| Entropie | 130.68 J/K | 0.5×205.14 J/K | 69.91 J/K | $T\Delta S = -48.7$ kJ |

Combinand un mol de hidrogen cu jumatate de mol de oxigen in conditii normale de temperatura si presiune (298K, 1atm) se obtine un mol de apa



Pila de combustie ideala Hidrogen-Oxigen

Energia este furnizata prin combinarea atomilor de hidrogen si oxigen avand loc o contractie a volumului prin urmare se efectueaza un lucru mecanic de comprimare:

$$W = P\Delta V = (101.3 \times 10^3 \text{ Pa})(1.5 \text{ moles})(-22.4 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{mol})(298\text{K}/273\text{K}) = -3715 \text{ J}$$

Entalpia, $H = U + PV$, se modifica corespunzator cu datele din tabel. In consecinta si energia interna a sistemului se modifica:

$$\Delta U = \Delta H - P\Delta V = -285.83 \text{ kJ} - 3.72 \text{ kJ} = -282.1 \text{ kJ}$$

Entropia gazelor descreste cu 48.7 kJ in procesul de recombinare deoarece numarul de molecule de apa este mai mic decat numarul molecule de hidrogen si oxigen care se combina.

Deoarece entropia totala descreste atunci exel de entropie in cantitate de $T\Delta S$ trebuie eliminat sub forma de caldura catre mediul exterior.

Cantitatea de energie per mol de hidrogen ce poate fi furizata ca energie electrica este direct calculata din energia Gibbs ce exprima energie existenta in reactia chimica (ΔH) minus caldura disipata spre exterior ($T\Delta S$) adica energia potentiala ce efectueaza lucru mecanic de transport a asarcinilor electrice

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S = -285.83 \text{ kJ} + 48.7 \text{ kJ} = -237.1 \text{ kJ}$$

Sau pentru a produce un mol de apa in pila de combustie se genereaza o tensiune electromotoare de:

$$\Delta G = \text{numar electroni } (2) \times \text{sarcina } e \text{ (} 1,6 \times 10^{-19} \text{ C) } \times N_{A} \times E \text{ (tensiunea electromotoare)}$$

Unde tensiunea electromotoare E este aproximativ 1,23 V.
Randamentul ideal al pilei de combustie este simplu:

$$\text{Randament} = \Delta G / \Delta H = 237.1 / 285.8 \times 100\% = 83\%$$

Acesta este pe departe mult mai mare decat randamentele ciclurilor termodinamice, a centralelor electrice sau celulelor solare.