

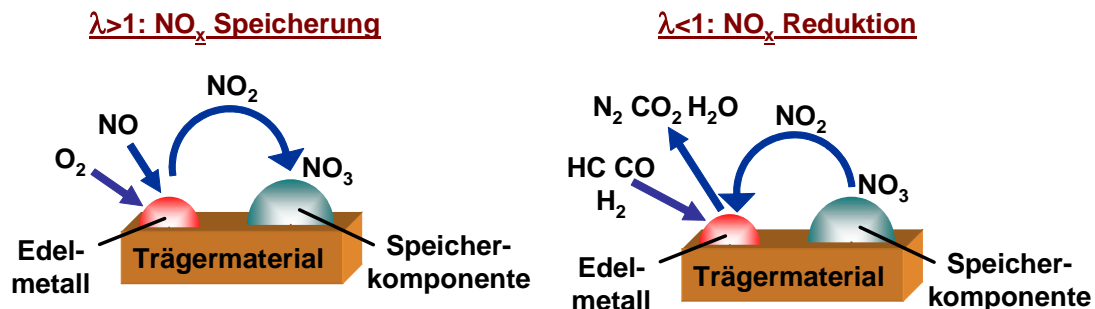
# Modellierung und Simulation der $\text{NO}_x$ -Minderung an Speicherkatalysatoren in sauerstoffreichen Abgasen

*J. Koop, O. Deutschmann*

*Institut für Technische Chemie und Polymerchemie, Universität Karlsruhe (TH),  
Kaiserstraße 12, D-76128 Karlsruhe*

## Einleitung

Das Problem der Abgasreinigung ist in verbrauchsarmen Diesel- und Magermixmotoren bislang ungelöst, was zu erheblicher Emission von Stickoxiden ( $\text{NO}_x$ ) führt. Einen viel versprechenden Ansatz zur  $\text{NO}_x$ -Minderung stellt der so genannte Speicherkatalysator dar, der auf der Einspeicherung der Stickstoffoxide in Form von Nitraten und deren Reduktion durch kurzzeitiges Anfeuchten des Kraftstoff/Luft-Gemisches basiert [1]. Erst bei genauer Kenntnis der ablaufenden komplexen Prozesse an den Speicherkomponenten als Grundlage einer detaillierten Modellierung wird in Zukunft das volle Potential dieser Technologie nutzbar, da die Betriebszustände des Motors und des Katalysatorsystems ständig aufeinander abgestimmt werden müssen.



## Experimentelle Arbeiten

Grundlage für die experimentellen Untersuchungen, die am Institut für Chemische Verfahrenstechnik der Universität Stuttgart durchgeführt werden, sind wohldefinierte monolithische Modellkatalysatoren unterschiedlicher Komplexität. Als Edelmetallkomponenten kommen sowohl Platin als auch Rhodium zum Einsatz. Die Washcoatstruktur besteht aus  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$  und bei den komplexeren Systemen zusätzlich aus Ce- und Ba-haltigen Washcoatkomponenten zur Aufnahme von  $\text{O}_2$  und  $\text{NO}_x$ . Die

gezielte Untersuchung der Kinetik findet unter isothermen Bedingungen in einem Flachbettreaktor mit einer praxisnahen Modellabgaszusammensetzung statt.

### **Numerisches Modell**

Die numerischen Simulationen werden mit Hilfe der entwickelten Modelle, unter Benutzung des Softwarepakets DETCHEM durchgeführt [2]. Als Basis der Modellierung dienen detaillierte Transportmodelle, sowie die auf dem molekularen Geschehen basierenden Oberflächenreaktionsmechanismen [3]. Diese heterogenen Reaktionen werden mittels der mean-field-Approximation beschrieben, bei der die Oberfläche lokal durch mittlere Bedeckungsgrade modelliert wird.

### **Ergebnisse**

Vorgelegt werden die numerischen Ergebnisse von Pt/ $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Pt/Ba/ $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> und Pt/Ce/Ba/ $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Katalysatoren bei zyklischen Mager-/Fettwechselln ( $0,88 < \lambda < 2,4$ ). Der zur Simulation der ablaufenden Oxidations- und Reduktionsvorgänge verwendete Mechanismus besteht dabei aus mehr als 70 Reaktionen und beinhaltet Reaktionen sowohl für die Sauerstoffspeicherung an Cer als auch die NO<sub>x</sub> Aufnahme an Bariumkomponenten.

### **Danksagung**

Diese Arbeiten werden von der Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen e.V. (FVV) gefördert (Vorhaben 608331, DeNO<sub>x</sub>-Modell III, Obmann: Dr. Chatterjee). Die Autoren bedanken sich für die Bereitstellung der Messergebnisse bei Dipl.-Ing. Schmeisser und Prof. G. Eigenberger vom Institut für Chemische Verfahrenstechnik der Universität Stuttgart und für die Bereitstellung der Katalysatoren bei der Firma Delphi Catalyst (Dr. Kern).

### **Literatur**

- [1] Boegner, W., M. Kraemer, et al. (1995) Applied Catalysis, B: Environmental **7**(1-2): 153-71
- [2] O. Deutschmann, S. Tischer et al. (2004) DETCHEM software package, [www.detchem.de](http://www.detchem.de)
- [3] Chatterjee, D., O. Deutschmann, et al. (2001). Faraday Discussions **119**: 371-384.

### **Kontakt**

Dipl.- Ing. Jan Koop, Institut für Technische Chemie und Polymerchemie, [koop@ict.uni-karlsruhe.de](mailto:koop@ict.uni-karlsruhe.de)