

V5.04

Modellierung und Simulation der NO_x-Minderung an Speicherkatalysatoren in sauerstoffreichen Abgasen

Dipl.-Ing. J. Koop¹⁾ (E-Mail: koop@ict.uni-karlsruhe.de), Prof. O. Deutschmann¹⁾, Dipl.-Ing. V. Schmeißer²⁾, Dr.-Ing. U. Tuttlies²⁾, Prof. G. Eigenberger²⁾, Prof. U. Nieken²⁾

¹⁾Institut für Technische Chemie, Universität Karlsruhe (TH), Kaiserstraße 12, D-76131 Karlsruhe

²⁾Institut für Chemische Verfahrenstechnik, Universität Stuttgart, Böblinger Straße 72, D-70199 Stuttgart.

10.1002/cite.200650229

NO_x-Speicherkatalysatoren stellen ein aussichtsreiches Konzept für die NO_x-Entfernung aus dem Abgas mager betriebener Verbrennungsmotoren dar. Sie kombinieren die Eigenschaften von 3-Wege-Katalysatoren mit der NO_x-Einspeicherung bei mageren und der schnellen NO_x-Reduktion zu Stickstoff bei kurzzeitig fetten Bedingungen. Zur Optimierung dieses komplexen Katalysatorsystems und der Betriebsstrategien bedarf es der Kenntnis der Wechselwirkung der verschiedenen katalytischen Reaktionsschritte in den einzelnen Arbeitsphasen sowie der Transportprozesse.

Grundlage für die experimentellen Untersuchungen sind wohldefinierte monolithische Modellkatalysatoren zunehmender Komplexität. Als Edelmetallkomponenten werden sowohl Platin als auch Rhodium eingesetzt. Die Washcoatstruktur besteht aus Al₂O₃ und zusätzlich aus Ce- und Ba-haltigen Komponenten zur Aufnahme von O₂ und NO_x. Die Kinetik wird unter isothermen Bedingungen in einem Flachbettreaktor mit einer praxisnahen Modellabgaszusammensetzung untersucht.

Ziel des Vorhabens ist die Entwicklung eines prädiktionsfähigen Modells eines NO_x-Speicherkatalysators. Hierzu werden für die Modellierung zwei unterschiedliche Ansätze verfolgt: (1) Ein rechenzeitintensives mikrokinetisches Modell, gekoppelt mit der zweidimensionalen numerischen Simulation des Massentransports durch Strömung und Diffusion, führt zu einem detaillierten Verständnis und gestattet damit die Optimierung von Katalysatorzusammensetzung und Morphologie. (2) Ein schnelles (CPU) makro-

kinetisches Modell dient als Basis für die Auslegung von Autoabgassystemen und Motorsteuerungskonzepten.