

Modellierung und Simulation von Abgaskatalysatoren

Jan Koop, Olaf Deutschmann

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

Das Problem der Abgasreinigung ist in verbrauchsarmen Diesel- und Magermixmotoren bislang ungelöst, was zu erheblicher Emission von Stickoxiden (NO_x) führt. Einen viel versprechenden Ansatz zur NO_x-Minderung stellt der so genannte Speicherkatalysator dar, der auf der Einspeicherung der Stickstoffoxide in Form von Nitraten und deren Reduktion durch kurzzeitiges Anfetten 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.

Die Basis für diese Technologie bilden monolithische Katalysatoren mit Platin und Rhodium als Edelmetallkomponenten. Die Washcoatstruktur besteht hauptsächlich aus γ -Al₂O₃ mit Zusätzen von Ce- und Ba-haltigen Komponenten zur Aufnahme von O₂ und NO_x.

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. Der zur Simulation der ablaufenden Oxidations- und Reduktionsvorgänge verwendete Mechanismus besteht dabei aus mehr als 80 Elementarreaktionen mit 35 Spezies und beinhaltet Reaktionen sowohl für die Sauerstoffspeicherung an Cer als auch die NO_x Aufnahme an Bariumkomponenten.

Diese Arbeiten werden von der Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen e.V. (FVV) gefördert (Vorhaben 608331, DeNO_x-Modell III, Obmann: Dr. Chatterjee).

[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

[3] Chatterjee, D., O. Deutschmann, et al. (2001). Faraday Discussions 119: 371-384.