



Entwicklung eines Gesamtmodells zur Beschreibung des instationären Verhaltens eines 3-Wege-Katalysators



DAIMLERCHRYSLER

J. Koop^a, M. Crocoll^a, L. Maier^a, S. Tischer^a, O. Deutschmann^a,
D. Chatterjee^b, B. Bandl-Konrad^b, J. Halbe^c

^a Institut für Technische Chemie und Polymerchemie, Universität Karlsruhe (TH), Kaiserstraße 12, D-76128 Karlsruhe
^b DaimlerChrysler AG, Mercedesstraße 137/1, D-70327 Stuttgart
^c J. Eberspächer GmbH & Co KG, Eberspächerstraße 24, D-73730 Esslingen

Zielsetzung

Das Ziel ist das bessere Verständnis und die Vorhersage der an den jeweiligen Edelmetallkomponenten (Pt, Pd und Rh) des Katalysators ablaufenden Reaktionen inklusive der Entwicklung eines Gesamtmodells zur Beschreibung des instationären Verhaltens eines 3-Wege-Katalysators.

In der ersten Projektphase wurden basierend auf experimentellen Laboruntersuchungen zur Kinetik, Messungen an Motorprüfständen und theoretischen Studien detaillierte Reaktionsmechanismen für die Edelmetalle Pt, Pd und Rh entwickelt, die jeweils die Oxidation von CO und Kohlenwasserstoffen sowie die Reduktion von NO unter realistischen Abgasbedingungen beschreiben.

Laborexperiment

Die Bestimmung der Mikrokinetik des Reaktionssystems erfolgt an einem Konzentrations- und Temperaturgradientenfreien Differentialkreislaufreaktor (CSTR).

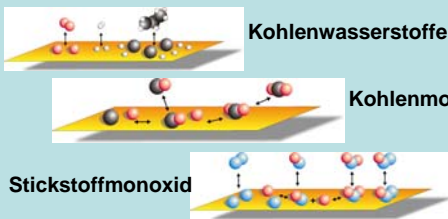
Untersucht werden Edelmetall beschichtete Wabenkörper mit synthetischem Abgas unter stöchiometrischen, mageren und fettem Bedingungen bei Temperaturen von 100°C bis 500°C.



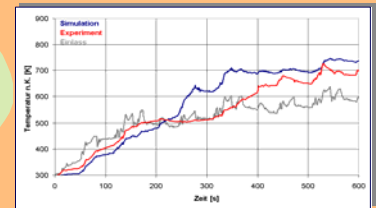
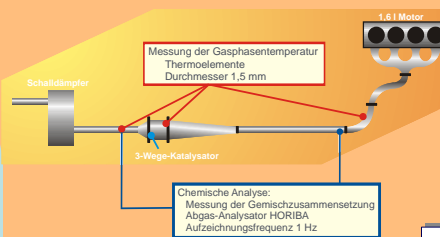
Mechanismusentwicklung

a) Evaluierung der Einzelmechanismen an Pt, Pd und Rh. Die Mechanismen basieren auf der mean-field-Approximation.

b) Entwicklung des Mechanismus für Mehrkomponentensysteme aus Addition der Einzelmechanismen und Berücksichtigung möglicher spill-over Effekte.

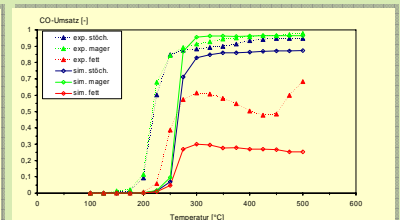
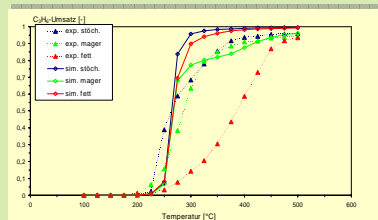
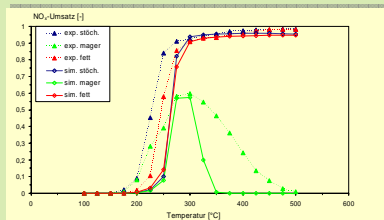


Prüfstandexperimente



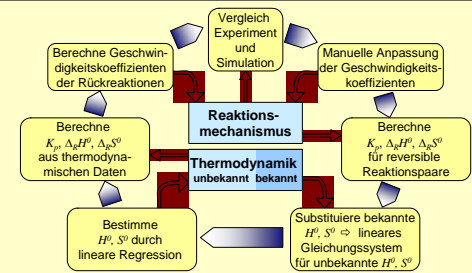
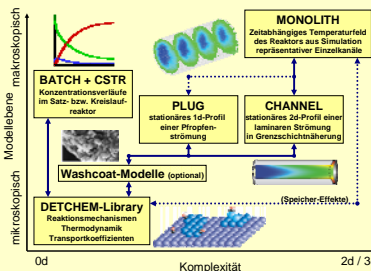
Modellbildung

Kreislaufreaktor- experimente



Simulation

Zur numerischen Simulation wird das Programmpaket DETCHEM [4] eingesetzt. Auf Grundlage einer detaillierten Reaktionskinetik können einfache und komplexe Reaktormodelle untersucht werden (links). Gegenwärtiger Schwerpunkt der Modellbildung ist die Konstruktion von thermodynamisch konsistenten, aus Elementarreaktionen aufgebauten Oberflächenreaktionsmechanismen (rechts).



[1] D. Chatterjee, O. Deutschmann, J. Warnatz, "Detailed surface reaction mechanisms in a three-way catalyst", Faraday Discussions 119 (2001)

[2] J. Braun, T. Hauber, H. Többen, J. Windmann, P. Zacke, D. Chatterjee, C. Correa, O. Deutschmann, L. Maier, S. Tischer, J. Warnatz, SAE Paper 2002-01-0065 (2002).

[3] J. Windmann, J. Braun, P. Zacke, S. Tischer, O. Deutschmann, J. Warnatz, SAE-Paper 2003-01-0937 (2003).

[4] O. Deutschmann, S. Tischer et al.: DETCHEM Version 2.0, Karlsruhe (2005). <http://www.detchem.com>