



# Modellierung und Simulation der NOx-Minderung an Speicherkatalysatoren in sauerstoffreichen Abgasen

Jan Koop, Olaf Deutschmann

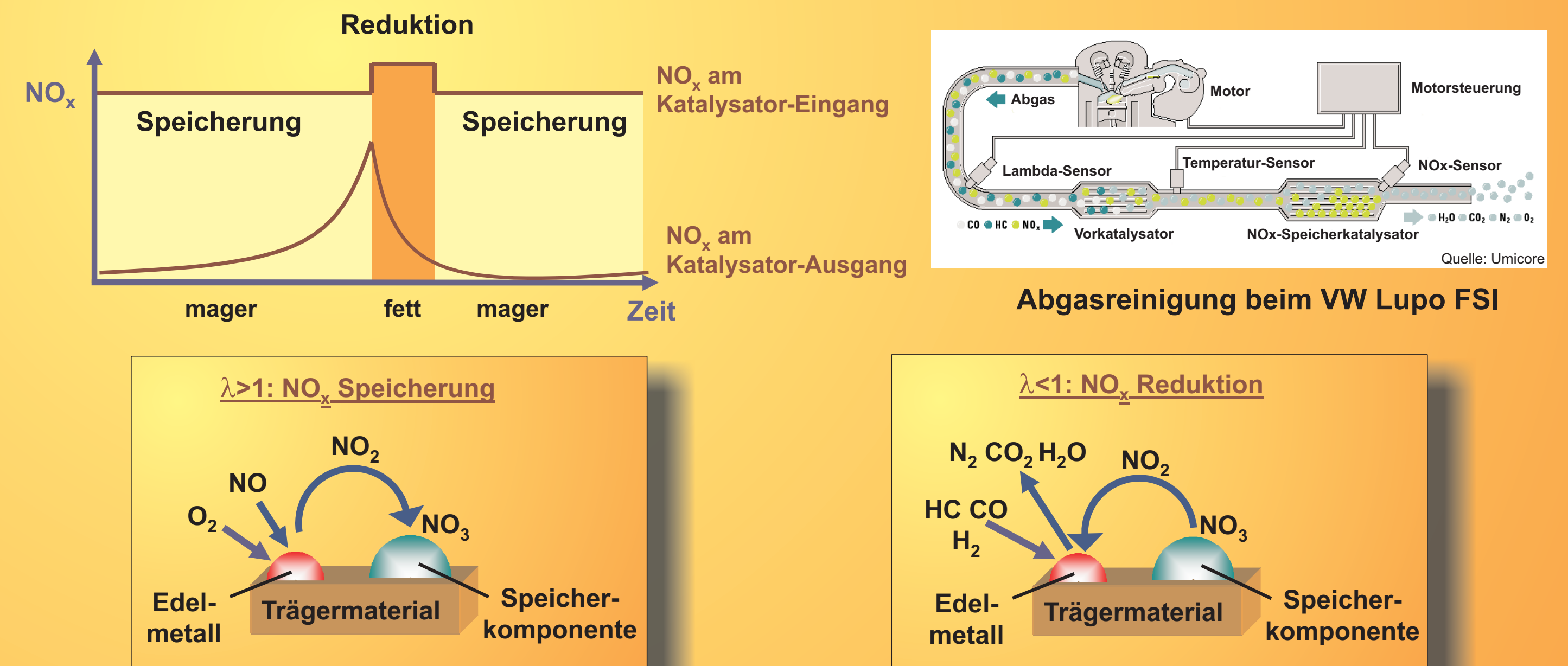
Institut für Technische Chemie und Polymerchemie (ITC), Universität Karlsruhe (TH), Kaiserstraße 12 • 76131 Karlsruhe • e-mail: koop@ict.uni-karlsruhe.de

## Zielsetzung

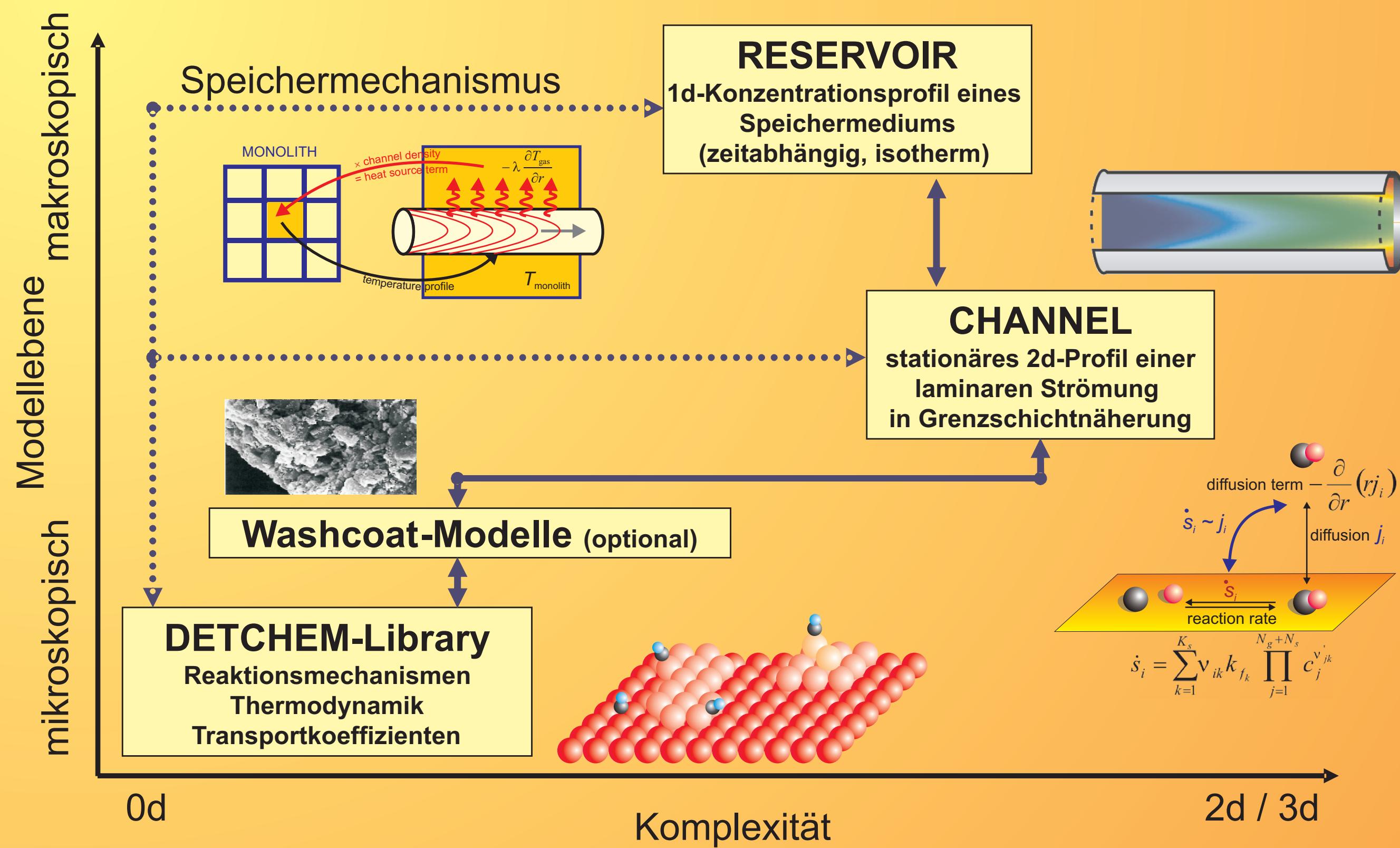
Die Entwicklungszyklen in der Automobilindustrie unterliegen einer stetigen Verkürzung, während gleichzeitig die legislativen Anforderungen an die Schadstoffemissionen immer restriktiver werden. Die dazu notwendige Optimierung der Abgasnachbehandlungssysteme erfordert nicht nur die Ausschöpfung experimenteller Methoden, sondern auch den Einsatz numerischer Simulationen. Durch geeignete Modelle können bereits in einer frühen Entwicklungsphase das Design unterstützende Vorhersagen getroffen werden und somit aufwendige und kostenintensive experimentelle Untersuchungen eingespart werden.

Das Problem der Abgasreinigung ist in verbrauchsarmen Diesel- und Magermotoren bislang ungelöst, was zu erheblicher Emission von Stickoxiden (NOx) führt. Einen viel versprechenden Ansatz zur NOx-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.

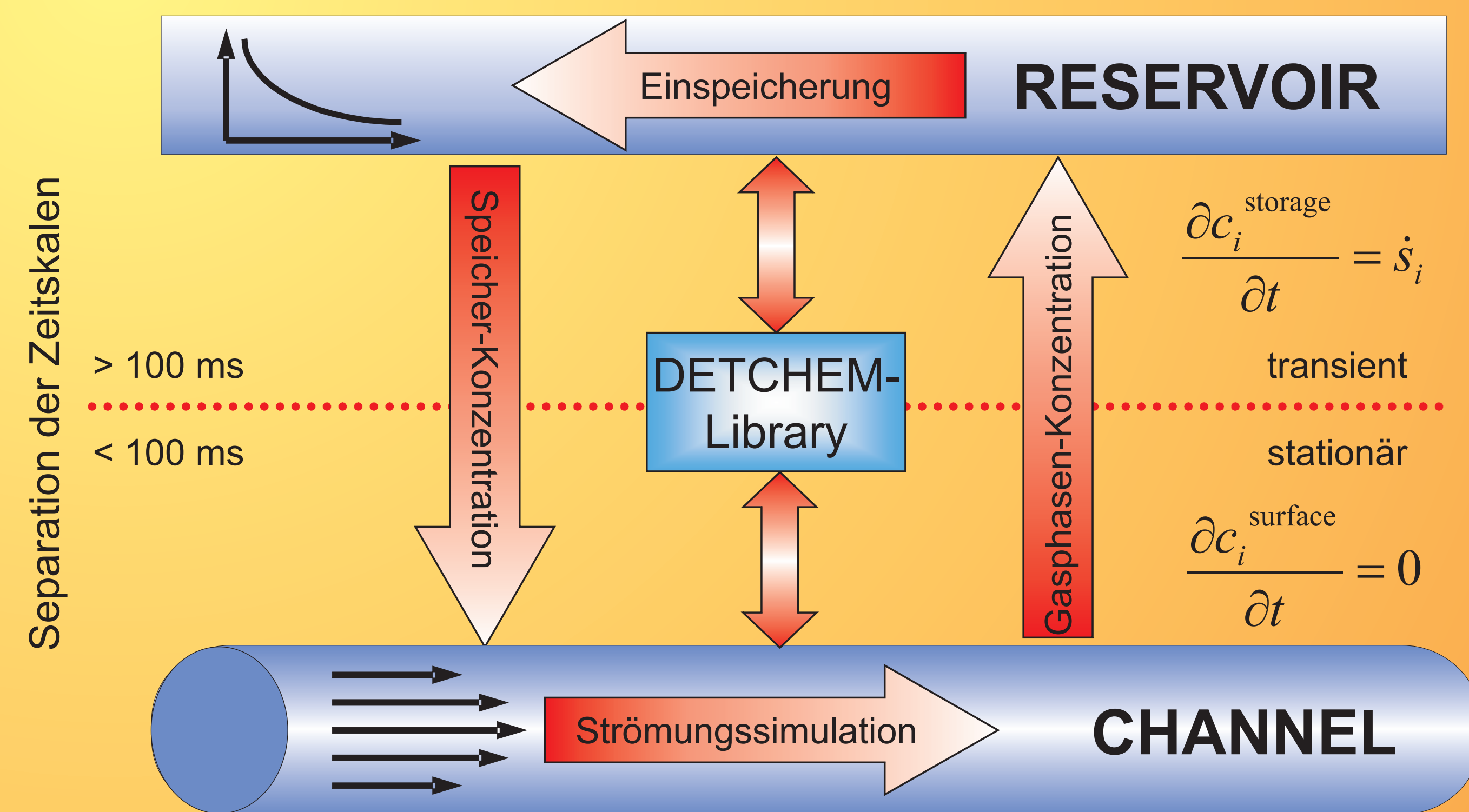
## NOx-Speicherkatalysator



## Numerisches Modell, DETCHEM-Paket [2]

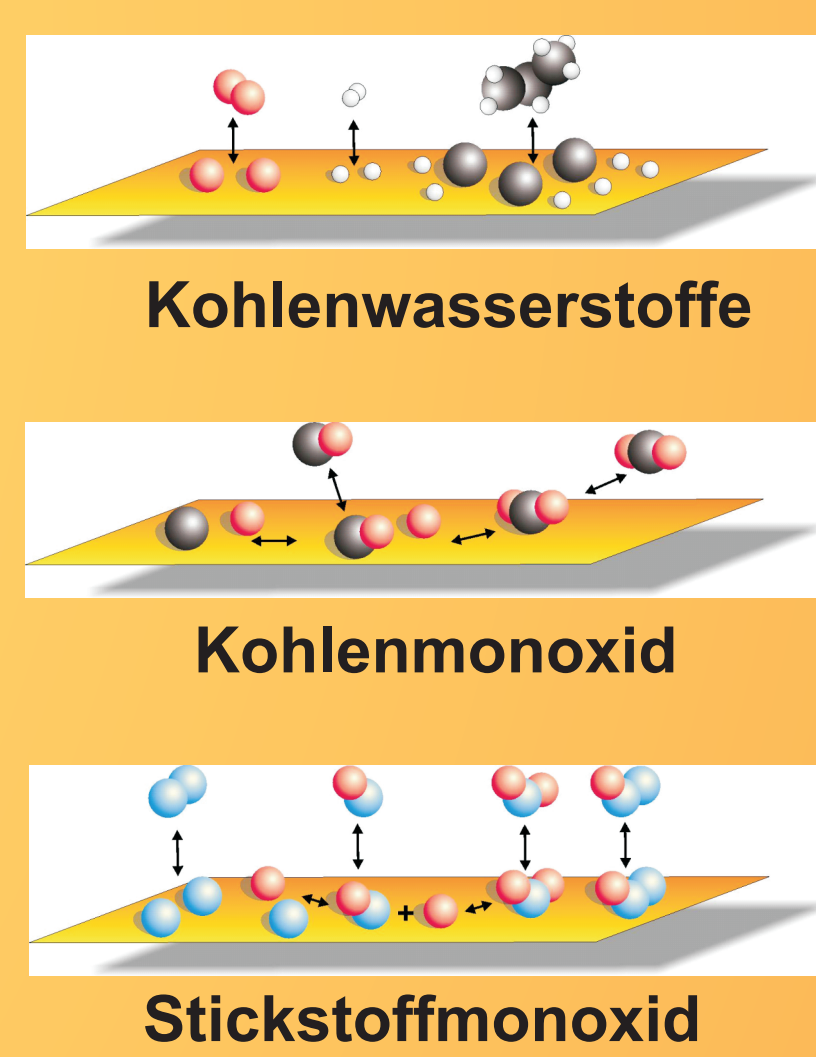
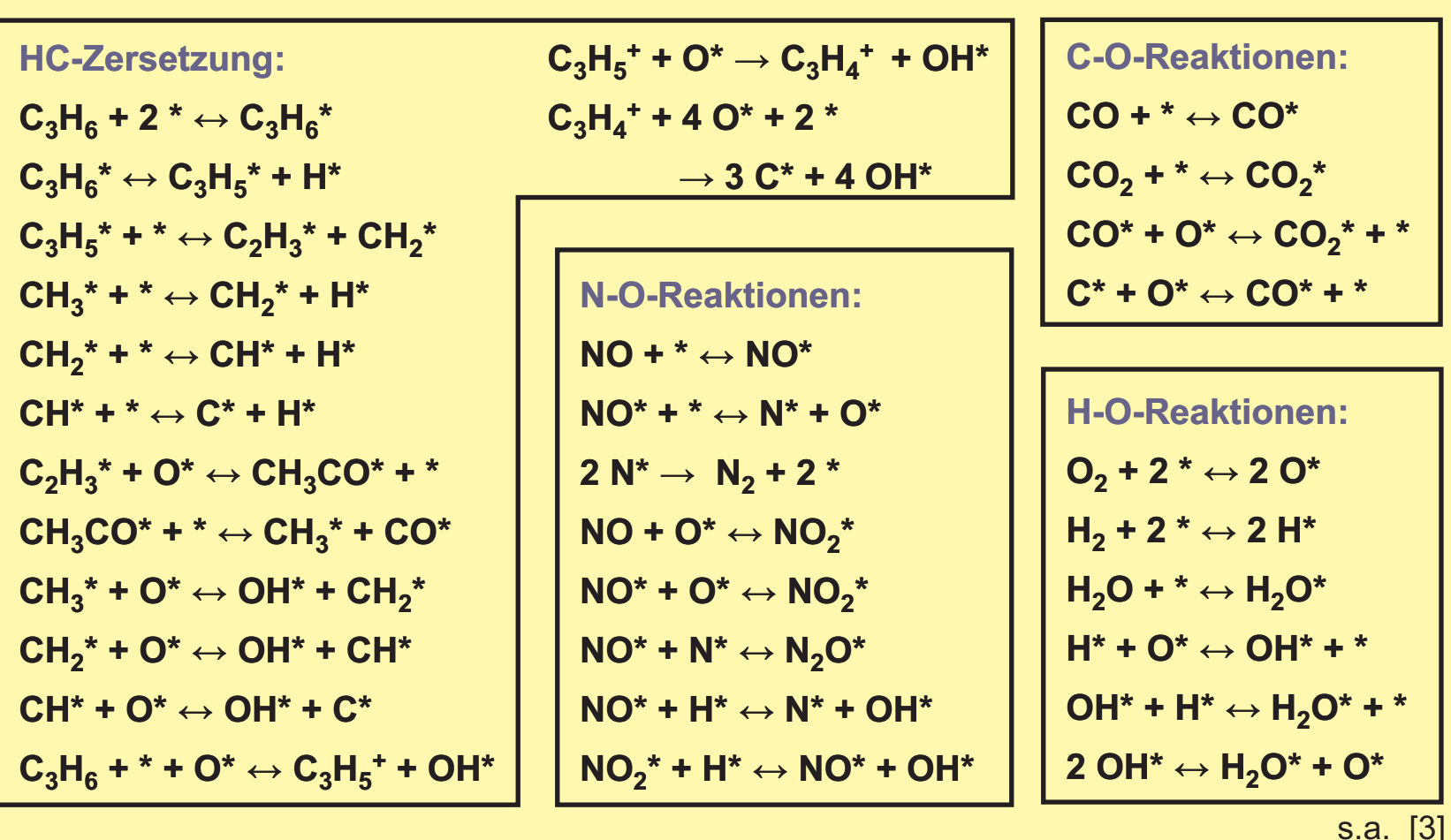


## DETCHEM<sup>RESERVOIR</sup>



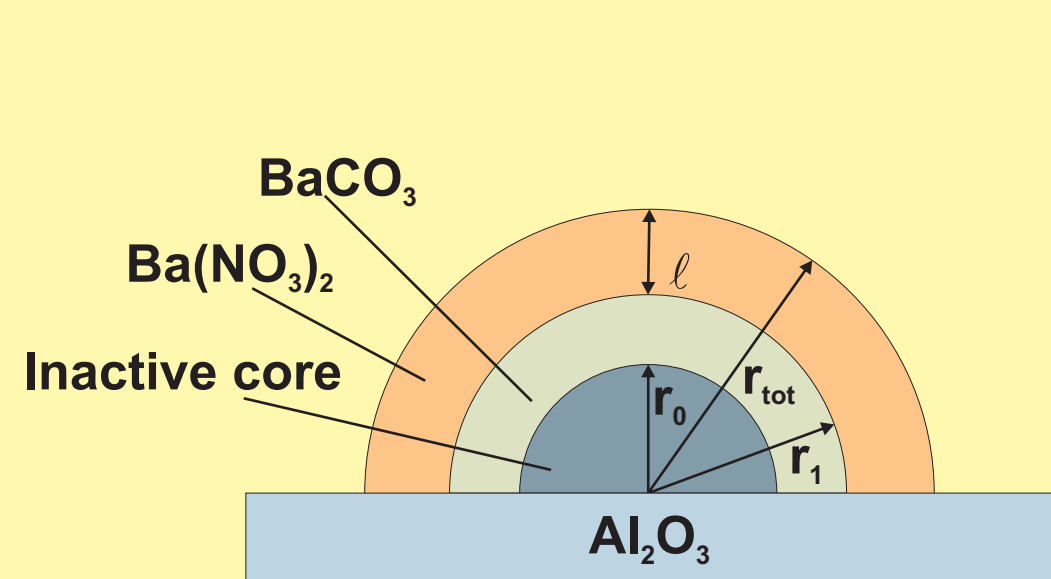
## Reaktionsmechanismen

### Elementarmechanismus an Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

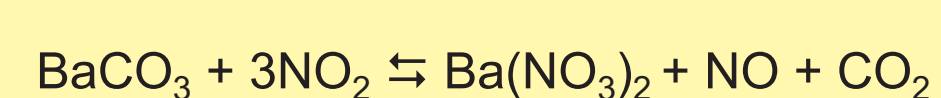
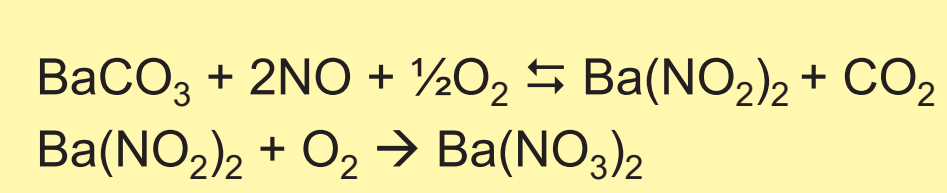
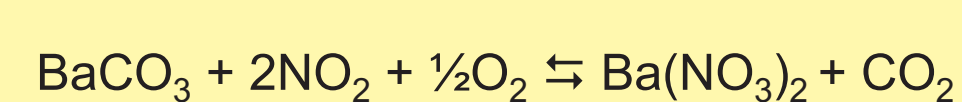


### Globalmechanismus zur Speicherung/Reduktion von NOx an Barium

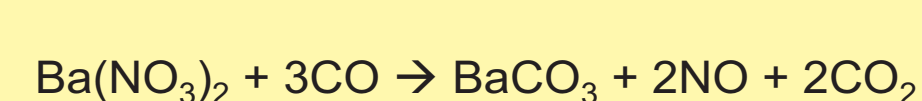
#### Shrinking Core Modell mit Inactive Core



#### Speicherung

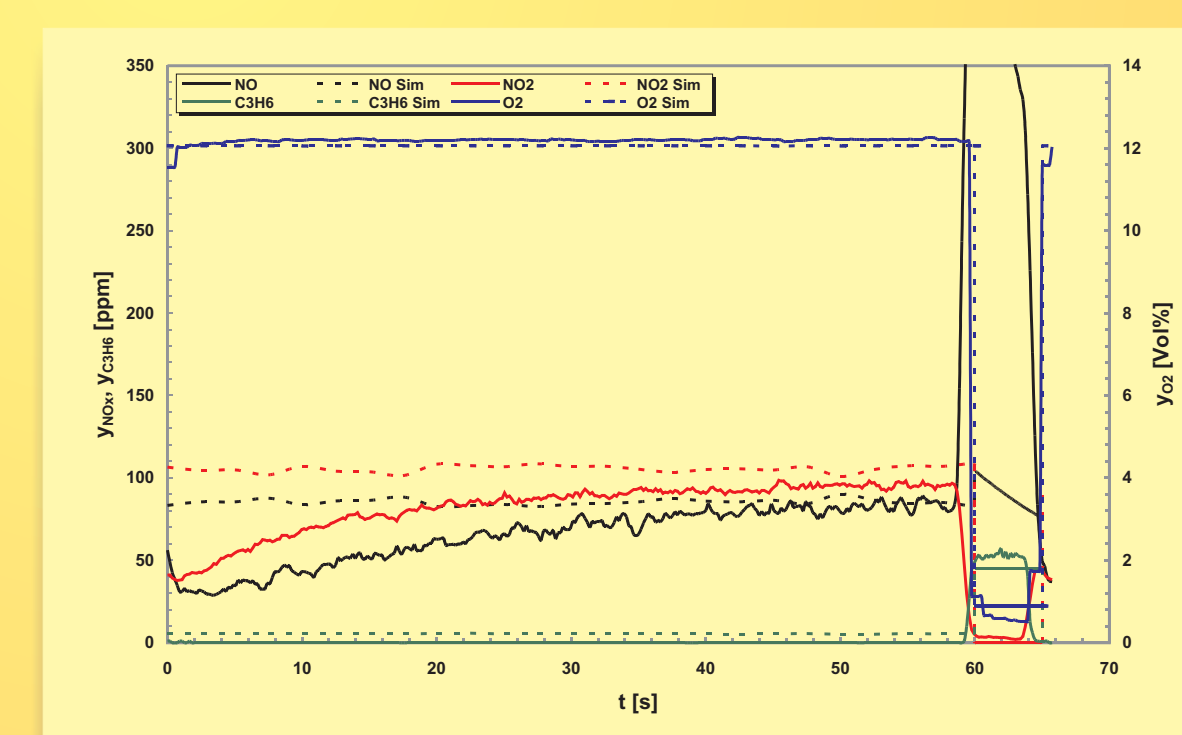


#### Reduktion

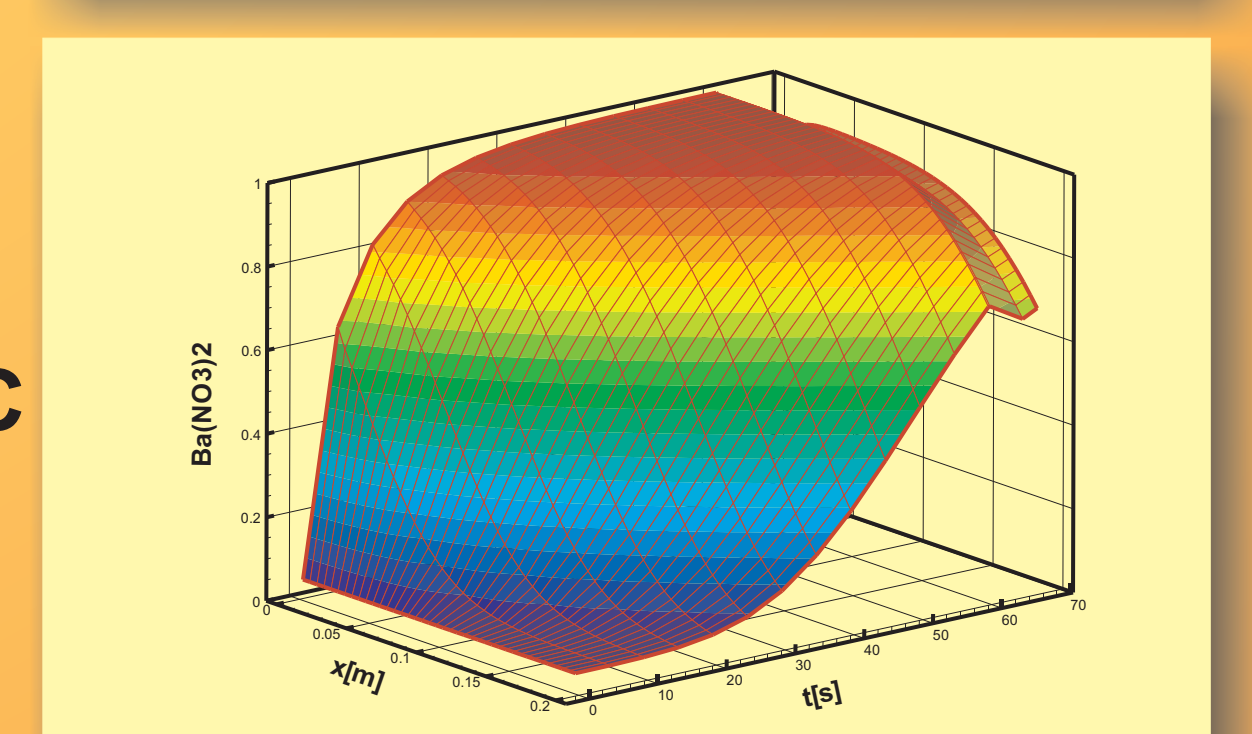
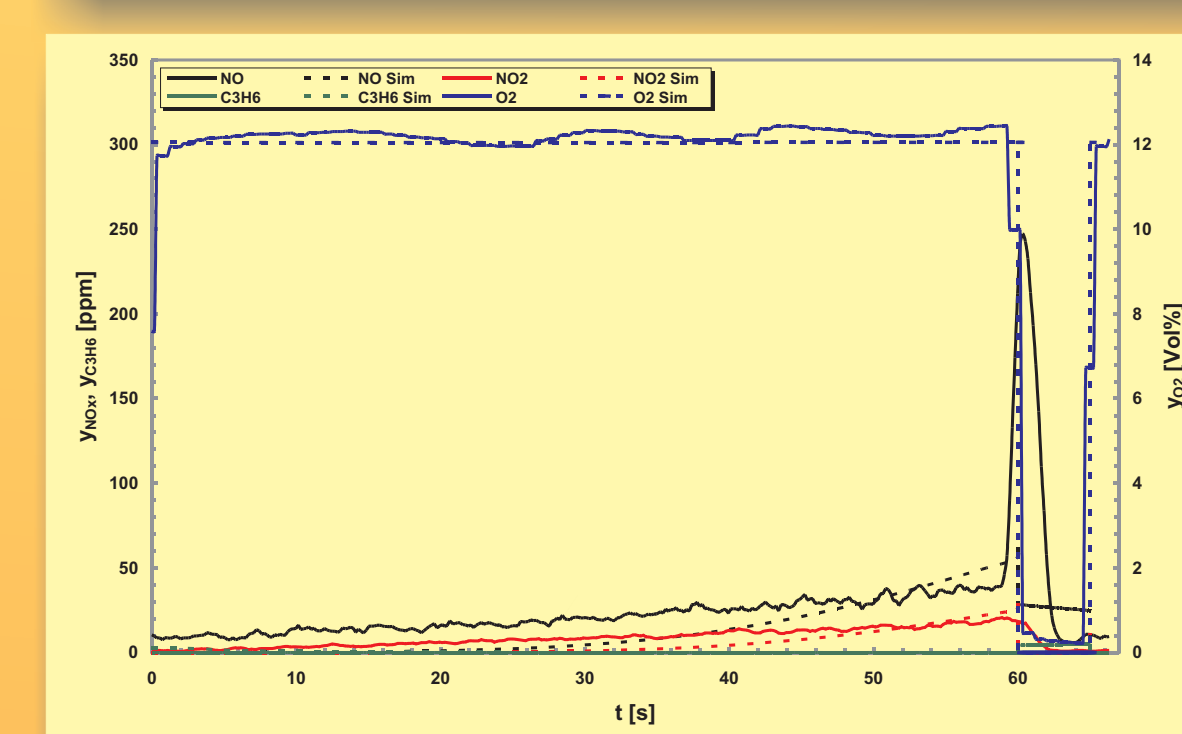
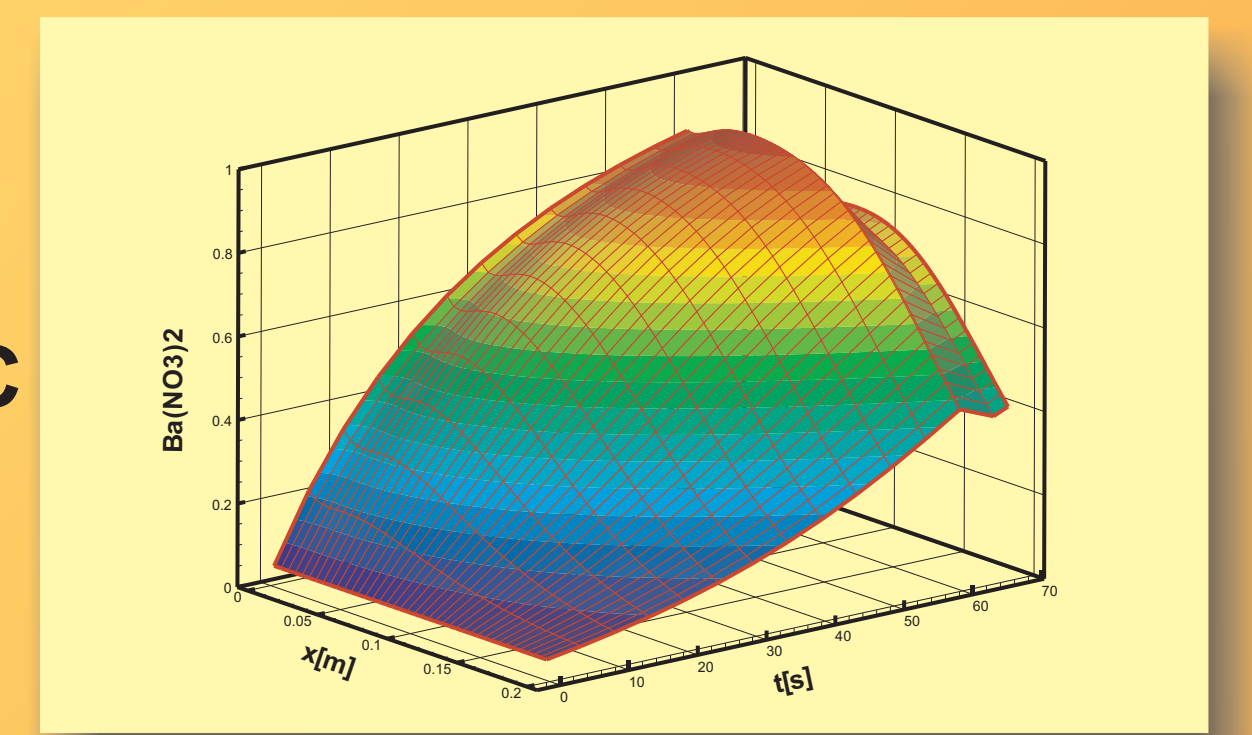
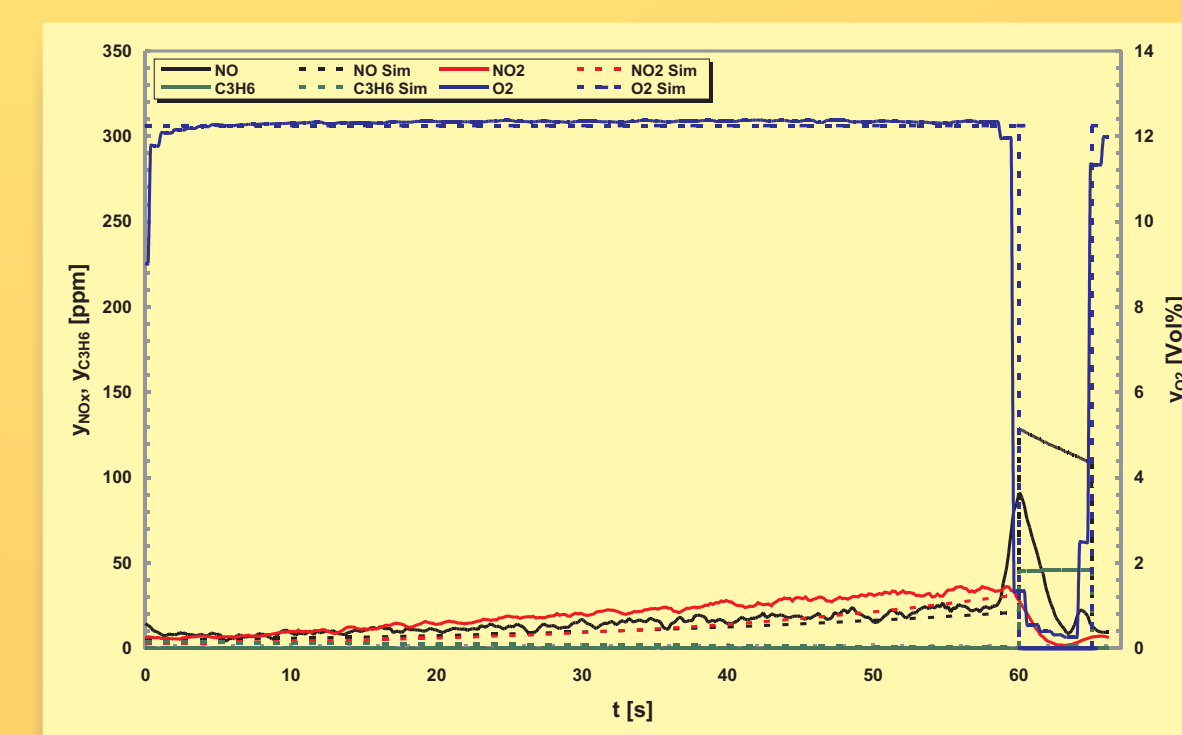
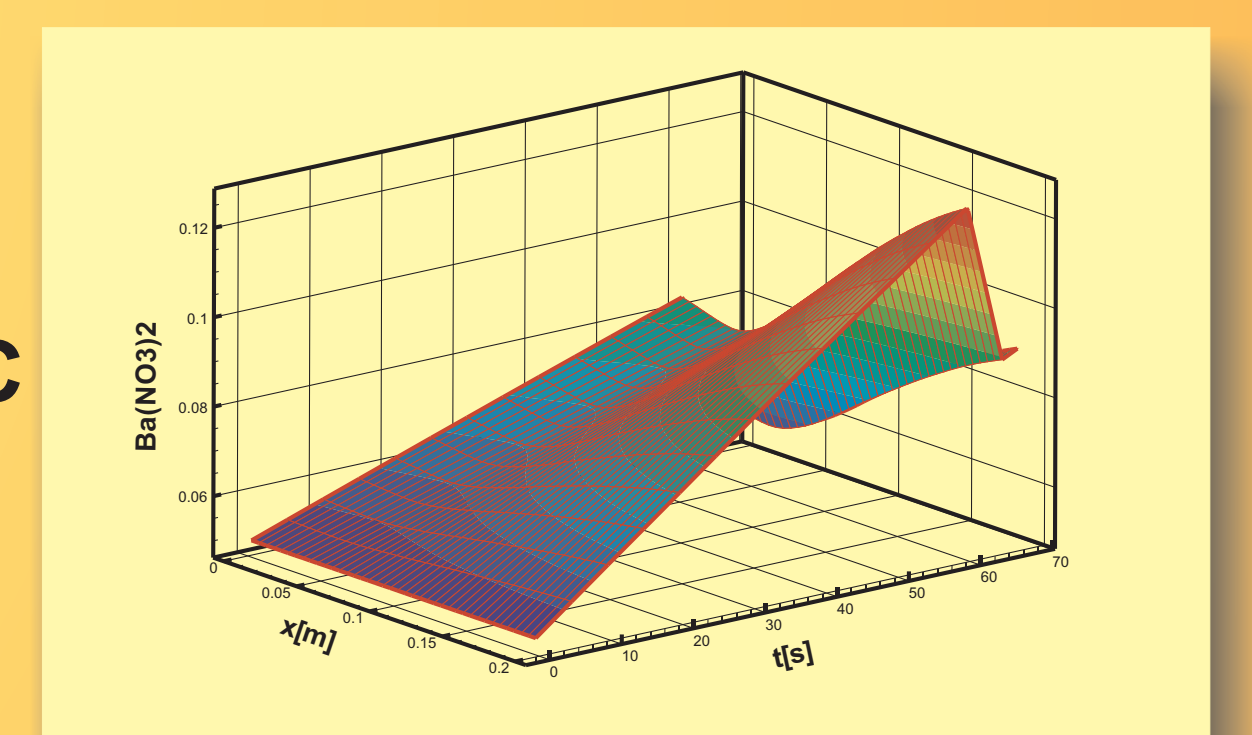


## Simulationsergebnisse für Pt/Ba/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

### Mager/Fett Zyklus



### Beladung von Ba(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>



## 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
- [3] D. Chatterjee, O. Deutschmann, J. Warnatz, Faraday Discussions 119 (2001)

## Danksagung

Diese Arbeiten werden von der Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen e.V. (FVV) gefördert (Vorhaben 608331, DeNOx-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).