

Kurzfassung

Die Fähigkeit eines Drei-Wege-Katalysators, Schwankungen im Luft-Kraftstoff-Verhältnis zu puffern, hängt stark von seiner Fähigkeit ab, Sauerstoff zu speichern und freizusetzen. Die Sauerstoffspeicherkapazität des Speichermaterials wird durch die Katalysatorzusammensetzung und geometrische Eigenschaften bestimmt und kann auf bestimmte thermodynamische Größen, d.h. die Veränderung der Gibbs-Energie, Enthalpie und Entropie des Speichermaterials, zurückgeführt werden. Diese Werte wurden für mehrere Industrieproben gemessen mit dem Ergebnis, dass sich diese Größen mit dem Reduktionsgrad des Katalysators ändern. Diese Abhängigkeit kann auf den Beitrag von verschiedenen Speicherplätzen im Katalysator, z.B. Oberflächen- und Tiefenspeicher, zurückgeführt werden, welche jeweils eine unterschiedliche thermodynamische Charakteristik aufweisen. Es wurde ein Dual-Speicher-Katalysatormodell entwickelt, das die verfügbare Sauerstoffspeichermenge und deren Veränderungen mit unterschiedlicher Gaszusammensetzung und Temperatur vorhersagt. Dieses Modell kann über die erfassten thermodynamischen Daten der Proben in gängigen Katalysatorsimulationswerkzeugen implementiert werden. Eine Trennung in verschiedene Speicherplätze ermöglicht ferner eine Beschreibung der Kinetik von Sauerstoffspeicherprozessen durch eine geringe Anzahl von Gleichgewichtsreaktionen. Bestehende TWC-Mechanismen können mit diesen Gleichgewichtsreaktionen und um die spezifischen thermodynamischen Werte der Katalysatorprobe erweitert werden.

Wir stellen einen vereinfachten Ablauf für die Parametrierung vor, der als Brücke für eine erfolgreiche Industrieanwendung dienen kann, da die Parametrierung einen Engpass in modellbasierten Entwicklungsprozessen darstellen könnte, die in der Industrie angewendet werden (d. h. modellgestütztes Katalysatordesign, Abgassystemdesign, Steuerung und OBD-Funktionsentwicklung).

Abstract

The ability of a three-way catalyst to buffer fluctuations in the air-to-fuel ratio is heavily dependent on its ability to store and release oxygen. The available amount of oxygen that can be exchanged, the oxygen storage capacity, is determined by the catalyst composition and geometric properties and can be attributed to specific thermodynamic quantities, i.e., the change in Gibbs energy, enthalpy, and entropy of the storage material. We measured these values for several industrial samples and found that they change with the degree of reduction of the catalyst. The dependence can be attributed to the contribution of different storage sites, e.g., a surface and bulk storage, each with individual thermodynamic characteristics. A dual-site catalyst model was developed that can predict the available storage as well as the changes with different inlet composition and temperature. This model can be implemented into catalyst simulation tools via the acquired thermodynamic data of the samples. A separation into different storage sites further allows a description of the kinetics of oxygen storage

processes by a small number of equilibrium reaction. Existing TWC mechanisms may be extended to include these equilibrium reactions and the specific thermodynamic values of the catalyst sample.

Consequently, we present a simplified parametrization workflow that may act as an enabler for successful industry application, as parametrization might represent a bottleneck in model-based development processes applied in the industry (i.e., model-assisted catalyst design, exhaust system design, control and OBD function development).