

Bericht zum Forschungsaufenthalt an der University of Warwick

Entwicklung semi-keramischer Katalysatorträger für elektrisch beheizbare Reaktoren

Verena Schallhart

MCI Management Center Innsbruck / Universität Stuttgart

verena.schallhart@mci.edu

Seit 2016 vergibt die ProcessNet-Fachgruppe Reaktionstechnik jährlich Stipendien zur Förderung des internationalen Austauschs junger WissenschaftlerInnen, für einen mindestens zweimonatigen Forschungsaufenthalt in ausländischen Arbeitsgruppen. Im Rahmen dieses Stipendiums wurde es mir ermöglicht, drei Monate an der University of Warwick zu verbringen, um an einem Modell zur Simulation elektrischer Eigenschaften von keramischen Kompositen zu arbeiten.

Die zur Abgasnachbehandlung von Fahrzeugen eingesetzten Katalysatoren können erst nach Erreichen einer bestimmten Mindesttemperatur (light-off Temperatur) Schadstoffemissionen effizient umsetzen und somit dazu beitragen, Abgasnormen zu erfüllen, beispielhaft dargestellt in Abbildung 1.

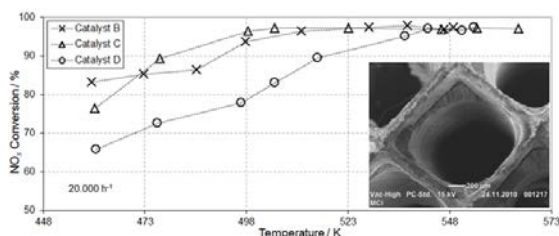


Abbildung 1: Temperaturabhängiger NO_x-Umsatz für unterschiedliche Katalysatoren [2]

Besonders kritisch sind dabei Phasen direkt nach Motorstart beziehungsweise während der Warmlaufphase zu betrachten, in welchen eine effiziente katalytische Abgasreinigung nicht gewährleistet werden kann und verhältnismäßig große Mengen an Schadstoffen unbehandelt ausgestoßen werden. Das übergeordnete Ziel für Systeme zur Abgasnachbehandlung ist, dass zu jedem Zeitpunkt eine effiziente Umsetzung der Rohemissionen gewährleistet werden kann. Dadurch begründet sich die Forderung nach einer deutlich verkürzten light-off Phase der Katalysatoren [1, 2]. In Hinblick auf die dargestellte Problematik ist die Zielsetzung meiner Dissertation die Entwicklung eines

direkt elektrisch beheizbaren Katalysators unter Verwendung eines semi-keramischen Trägermaterials. Dadurch können die Vorzüge der Keramik, wie beispielsweise höhere Wärmekapazität oder geringere Produktionskosten, gegenüber metallischen Trägern ausgenutzt und durch die Möglichkeit einer elektrischen Beheizung eine effiziente Schadstoffumsetzung zu jedem Zeitpunkt garantiert werden [3]. Die bisherige Betrachtung dieses Themas stützt sich hauptsächlich auf die Herstellung und experimentelle Untersuchung unterschiedlicher keramischer Komposite, jedoch nicht auf die Modellierung der Ausbildung eines durchgängigen Netzwerks für den Erhalt eines elektrisch leitenden Kompositwerkstoffs.

Die 1965 gegründete University of Warwick in Coventry zählt mit rund 26500 Studierenden zu einer der größten Universitäten in England. Die über 75 Forschungseinrichtungen der Universität Warwick sprechen für die industrienahe und forschungsintensive Ausrichtung der Universität. Im Zuge des dreimonatigen Forschungsaufenthalts in der, im Bereich „Advanced Materials and Steels Research“ angesiedelten, Arbeitsgruppe von Prof. Michael Auinger wurde ein Modell zur Berechnung des Perkulationsverhaltens von Kompositwerkstoffen erstellt. Dieses Modell bildet die Grundlage, um die im Laufe des Forschungsprojekts bereits entwickelten semi-keramische Materialien in Hinsicht ihrer makroskopischen, elektrischen Eigenschaften zu optimieren.

Der Anteil an leitfähigem in isolierendem Material muss bei den hergestellten Kompositen über einem kritischen Grenzwert liegen, um ein durchgängiges Netzwerk auszubilden und somit die elektrische Leitfähigkeit sicherzustellen. Im Falle eines binären Gemischs bestehend aus einer

isolierenden und einer leitfähigen Verbindung, verändern sich die elektrischen Eigenschaften bei überschreiten dieses Grenzwerts schlagartig von isolierend zu leitfähig, Abbildung 2. Die Leitfähigkeit ist dabei in derselben Größenordnung wie die des eingesetzten leitfähigen Materials [4].

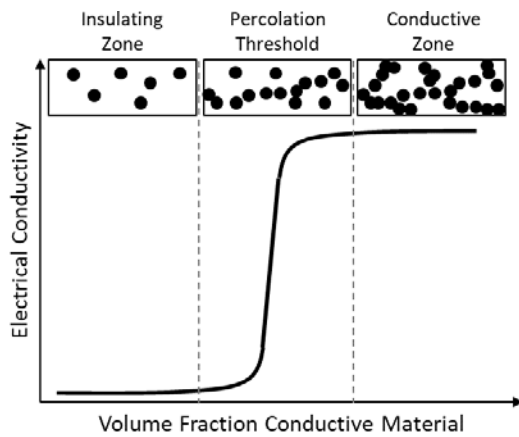


Abbildung 2: Schematische Darstellung der Perkolationsgrenze

Die Modellierung der Ausbildung eines leitfähigen Netzwerks erfolgt allgemein mithilfe einer Monte Carlo Simulation, da die möglichen Anordnungen leitfähiger Partikel in einer isolierenden Matrix mit $2^{r \times s}$ (Reihen und Spalten) ansteigen. Der im Rahmen des Forschungsaufenthaltes gewählte Ansatz verfolgt jedoch eine neuartige analytische Betrachtung der Problemstellung mithilfe von diskreter Kombinatorik. Die Ausbildung eines durchgängigen Clusters wird dafür in folgende Teilprobleme aufgeteilt: die Anordnung leitfähiger Partikel in 1D, die Interaktion der Reihen in 2D und die Netzwerkausbildung im dreidimensionalen Raum.

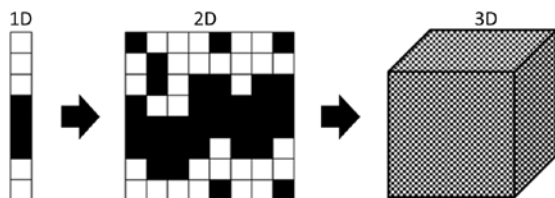


Abbildung 3: Forschungslogischer Ablauf

Abbildung 4 zeigt exemplarisch die berechnete Wahrscheinlichkeit für das Auftreten mindestens eines Clusters leitfähiger Partikel mit unterschiedlicher Mindestlänge in einer Reihe für eine gesamte Anzahl an verfügbaren Plätzen von 25 und einer Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines Partikels von 50%. Anhand des erstellten Modells kann nicht nur die

Möglichkeit für ein durchgängiges Netzwerk analytisch bestimmt werden, sondern auch Fragen zu Clusterlängen und Mindestanzahl an benachbarten Partikeln beantwortet werden. Dadurch ist es möglich, einen optimalen Anteil an der leitfähigen Komponente zu bestimmen, um Engstellen beziehungsweise Schwachstellen im Netzwerk mit nur einem verbindenden leitfähigen Partikel zu verhindern.

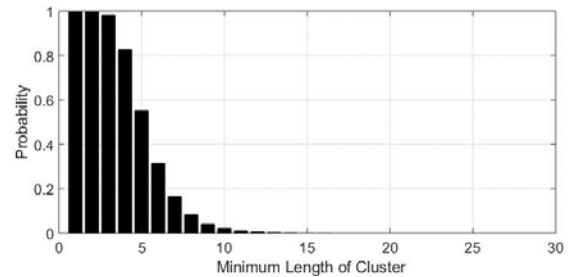


Abbildung 4: Wahrscheinlichkeit für einen Cluster bestimmter Mindestlänge, (50 Plätze, $p(\text{leitfähig}) = 50\%$)

Neben meiner wissenschaftlichen Weiterentwicklung konnte ich viele persönliche Eindrücke an der Universität Warwick sammeln und auch für die Erkundung der attraktiven Gegend rund um die Universität blieb am Wochenende glücklicherweise noch etwas Zeit übrig. Abschließend bleibt festzuhalten, dass der Forschungsaufenthalt sowohl in fachlicher als auch persönlicher Hinsicht sehr wertvoll war. Ich möchte mich bei der ProcessNet-Fachgruppe Reaktionstechnik für die finanzielle Unterstützung bedanken, ohne die der Forschungsaufenthalt nicht möglich gewesen wäre. Außerdem bedanke ich mich bei Prof. Michael Auinger und seiner Arbeitsgruppe für die herzliche Aufnahme und die hilfreiche Unterstützung bei diesem Projekt.

[1] Laible, T.; et al.; "Light-off/out-Unterstützung beim Katalysator von Dieselmotoren." Motortechnische Zeitschrift 11, 2015, ISSN 0024-8525 10824.

[2] Moeltner, L.; et al.; "Experimental and Numerical Analysis of Low Temperature NOx-Conversion in Urban Busses." SAE Technical Paper, 2016.

[3] Radwan, N.; et.al.; "Cordierite as catalyst support for cobalt and manganese oxides in oxidation-reduction reactions." Applied Catalysis A: General (274), 2004.

[4] Seung H.; et.al.; "The effect of polymer particle size on three-dimensional percolation in core-shell networks of PMMA/MWCNTs nanocomposites." Composites Science and Technology (165), 2018.