DESIGNER FUELS – VON DER BRENNSTOFFCHEMIE ZUR EMISSION

Presentation @ Regenerative Krafstoffe – Unverzichtbare Maßnahme zur Reduktion der Treibhausgasemissionen

27.09.2022

Julia Zinsmeister

Mail: Julia.Zinsmeister@dlr.de

Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR),

Institut für Verbrennungstechnik (VT),

Chemische Kinetik und Analytik (CKA)

DLR

Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR)

Forschungszentrum | Raumfahrtagentur | Projektträger

- ca. 10.000 Mitarbeiter
- 55 Institute und Einrichtungen, 30 Standorte
- Niederlassungen in Brüssel, Paris, Tokio und Washington

Forschungsfelder:

- Luft- und Raumfahrt
- Weltraum
- Energie
- Verkehr
- Sicherheit
- Digitalisierung

*Legende Karte: Standorte, **neue Standorte,** neue Komponenten am Standort*

Institut für Verbrennungstechnik (DLR-VT)

Brennersysteme und Diagnostik

Mehrphasenströmung und Alternative Treibstoffe

Computer Simulation

Hochdruck-Experimente

Chemische Kinetik und Analytik

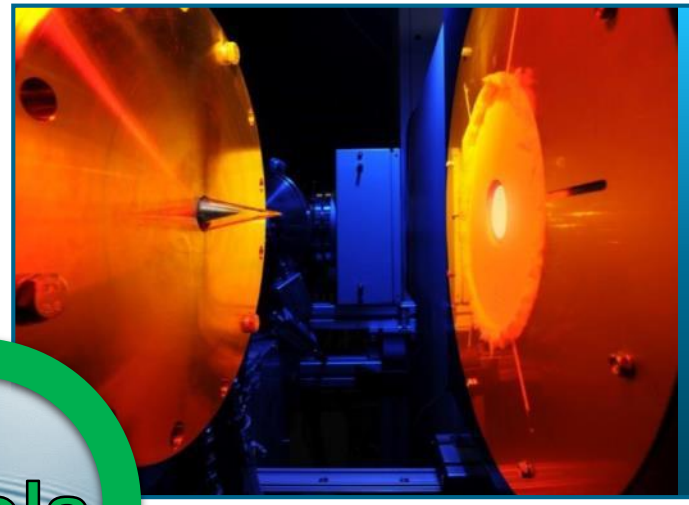
Gasturbinen

Leitung:	Prof. Dr.-Ing. Andreas Huber
Mitarbeiter:innen:	110
Schwerpunkte:	Gasturbinen und Kraftstoffe
Synergien:	KWK-Konzepte, Raketenantriebssysteme, Chemische Speichersysteme

Abteilung “Chemische Kinetik und Analytik” (CKA)

Chemische Analytik

- Chemische Kraftstoffzusammen-setzung
- Thermophysikalische Kraftstoffeigen-schaften



Experimentelle Reaktionskinetik

- Zündverzugszeiten und Laminare Flammengeschwindigk eiten
- Verbrennungschemie
- Radikale und Isomere

Emissionen und Immissionen

- Luftschadstoffe und Partikelmessungen
- Prüfstands- und Feldmessungen
- Mobiles Messfahrzeug: Luftqualitätsmes-sungen

Nummerische Reaktionskinetik

- Modellentwicklung
- Thermophysikalische Berechnungen
- Modellreduktion und -optimierung

Motivation

1

→ Fahrzeugbestand besteht zum Großteil aus Verbrennern

2

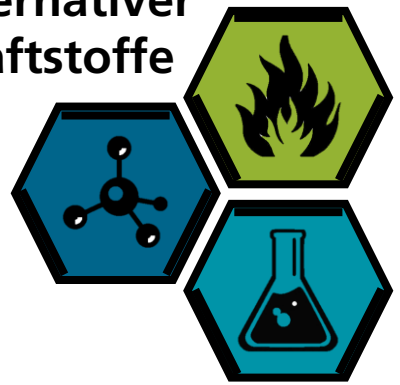
DLR-Institut für Verbrennungstechnik

→ Erforschung alternativer Kraftstoffen

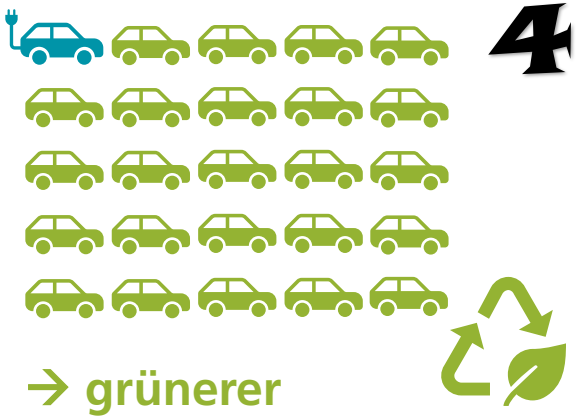
[Kostas Koufogiorgos]

3

Brennstoffchemie alternativer Kraftstoffe



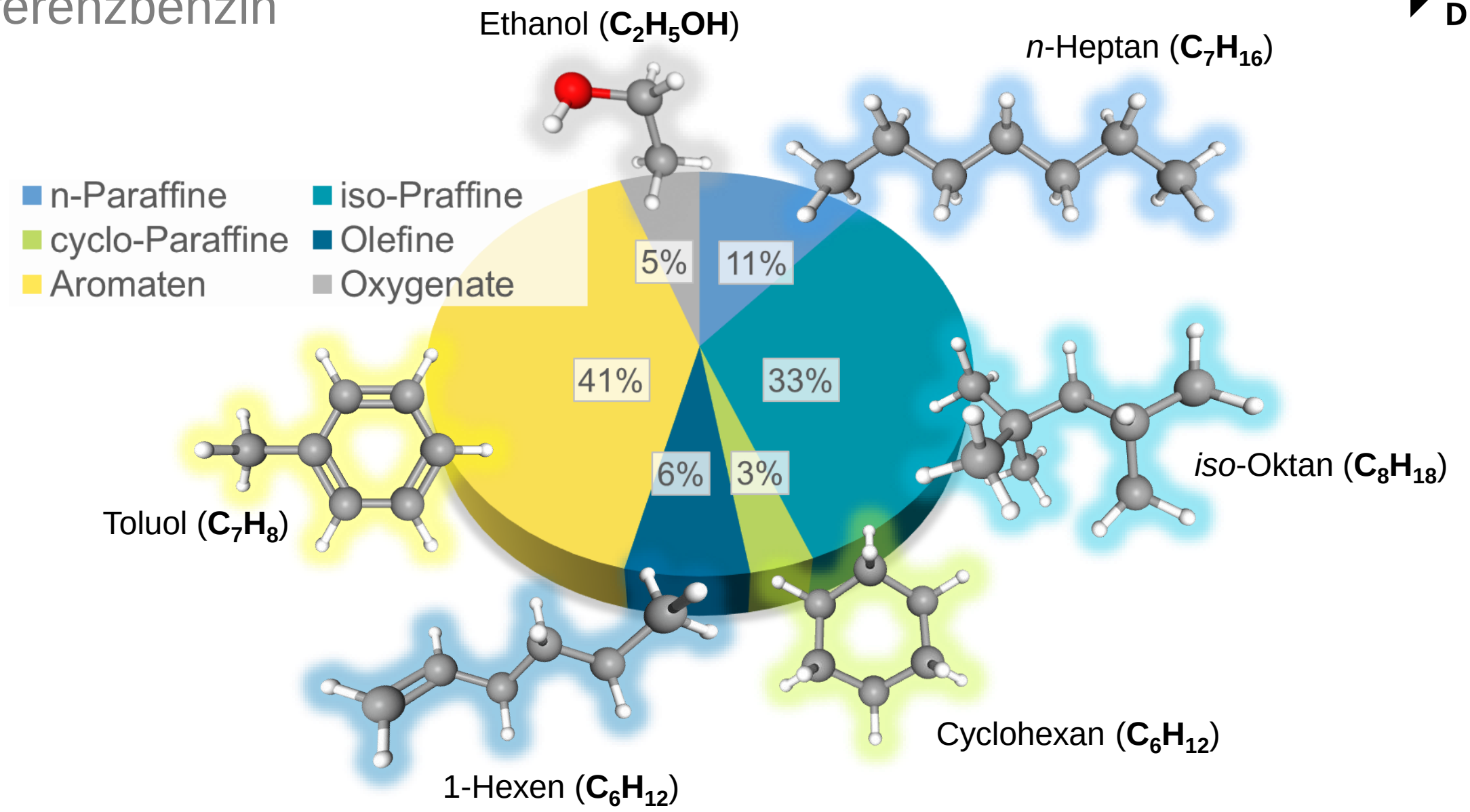
4



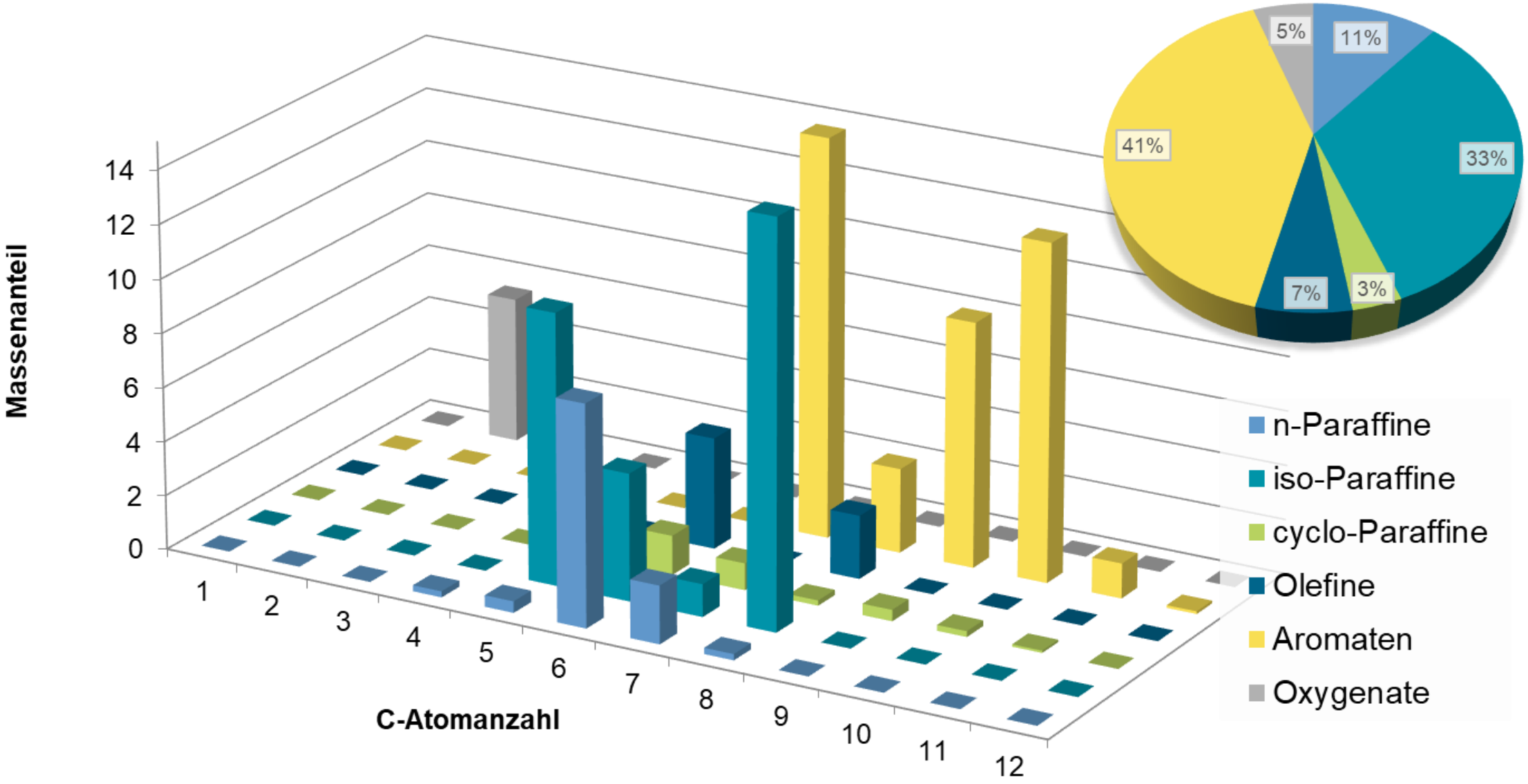
→ **grünerer Fahrzeugbestand durch alternative Kraftstoffe**

KRAFTSTOFFZUSAMMENSETZUNG

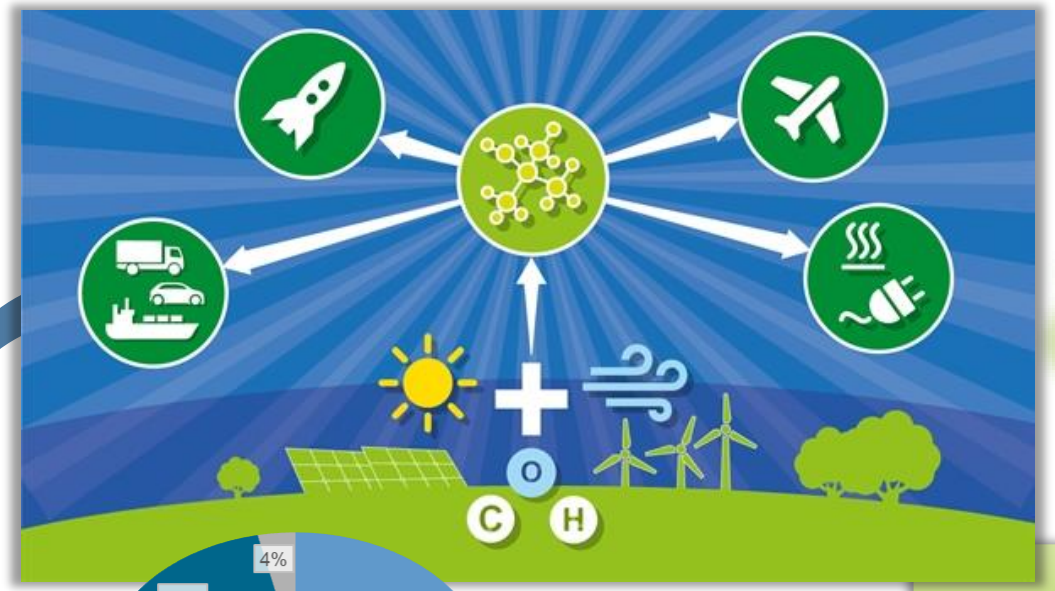
Kraftstoffzusammensetzung
Referenzbenzin

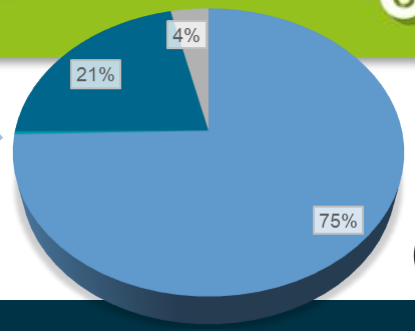


Kraftstoffzusammensetzung
Referenzbenzin



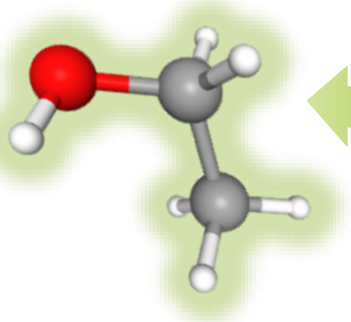
Kraftstoffzusammensetzung
Synthetische Kraftstoffe & Biokraftstoffe



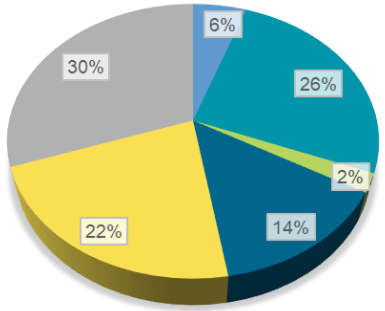


FT-Rohbenzin
(paraffinisch)

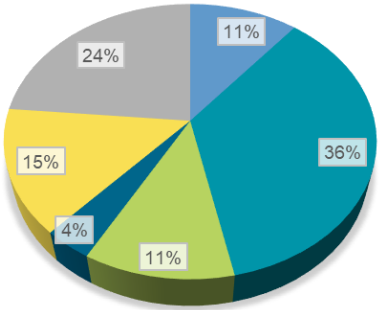
Ethanol
(C_2H_5OH)



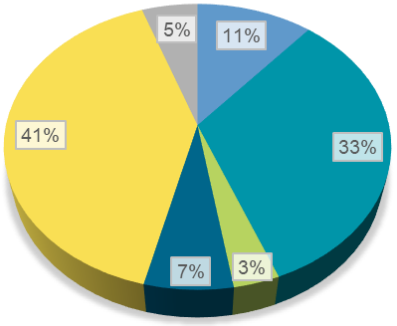
Ethanol/Benzin



Regenerativ/Benzin



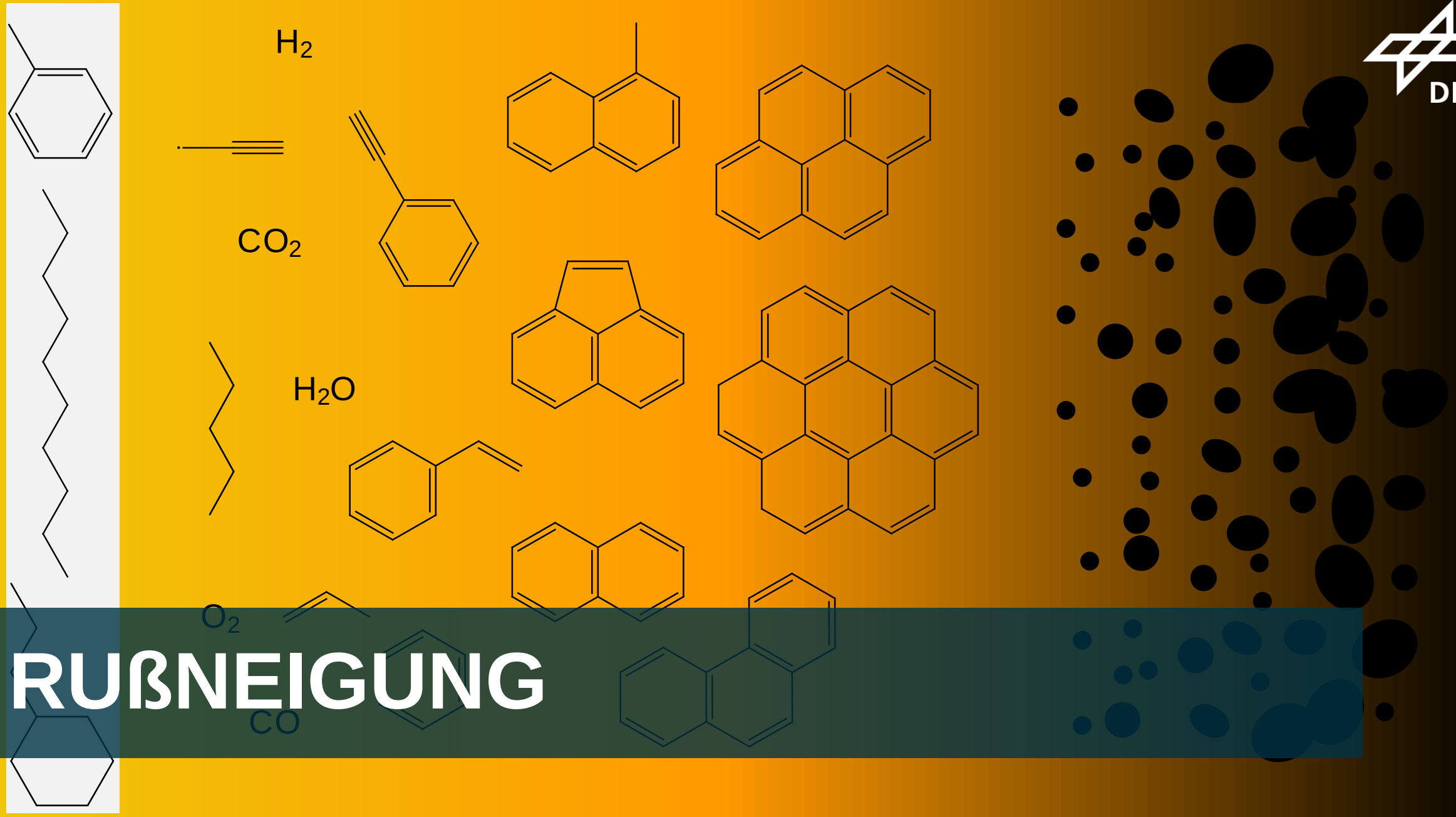
Referenzbenzin



- n-Paraffine
- iso-Paraffine
- cyclo-Paraffine
- Olefine
- Aromaten
- Oxygenate

- Synthetische Kraftstoffe: Fischer-Tropsch (FT)-, Methanol-zu-Benzin (MtG)-Synthese
- Biokraftstoffe: Fermentierung, Vergasung, etc. von Biomasse, Reststoffen, etc.

→ Potentiell CO_2-neutrale Kraftstoffe ermöglichen Dekarbonisierung der Bestandsflotte.



RUßNEIGUNG

[Bockhorn, 1994]

Rußbildung

Schritte der Rußbildung

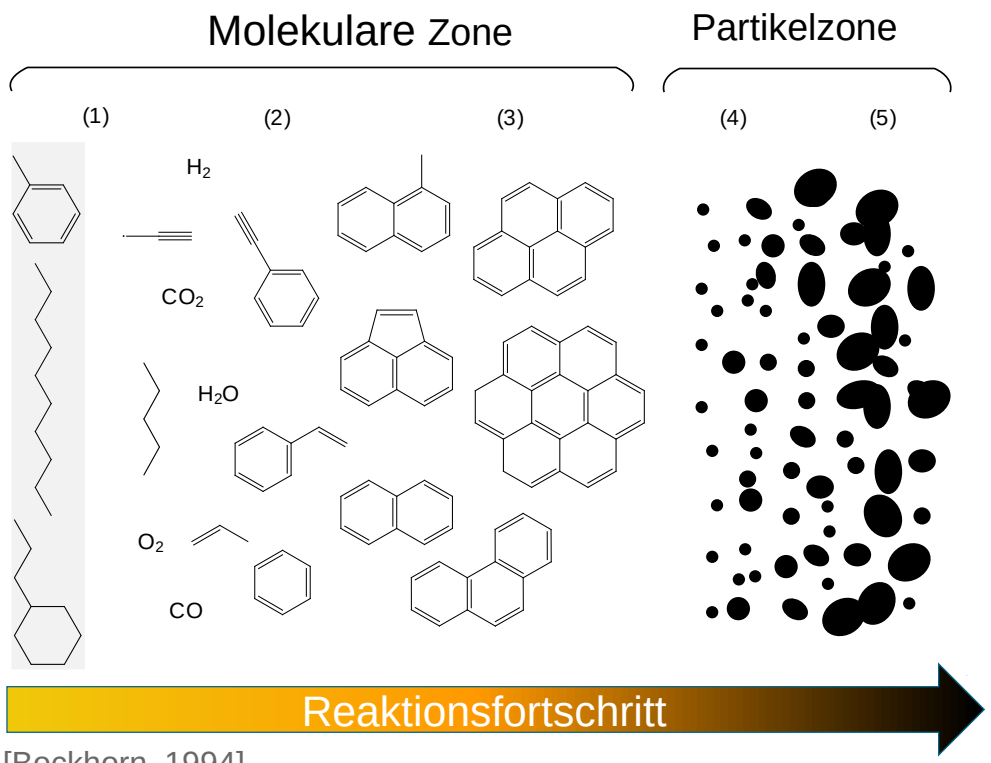
(1) Zerfall des Kraftstoffes

(2) Bildung der ersten Ringstrukturen

(3) Wachstum der polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffe (PAKs)

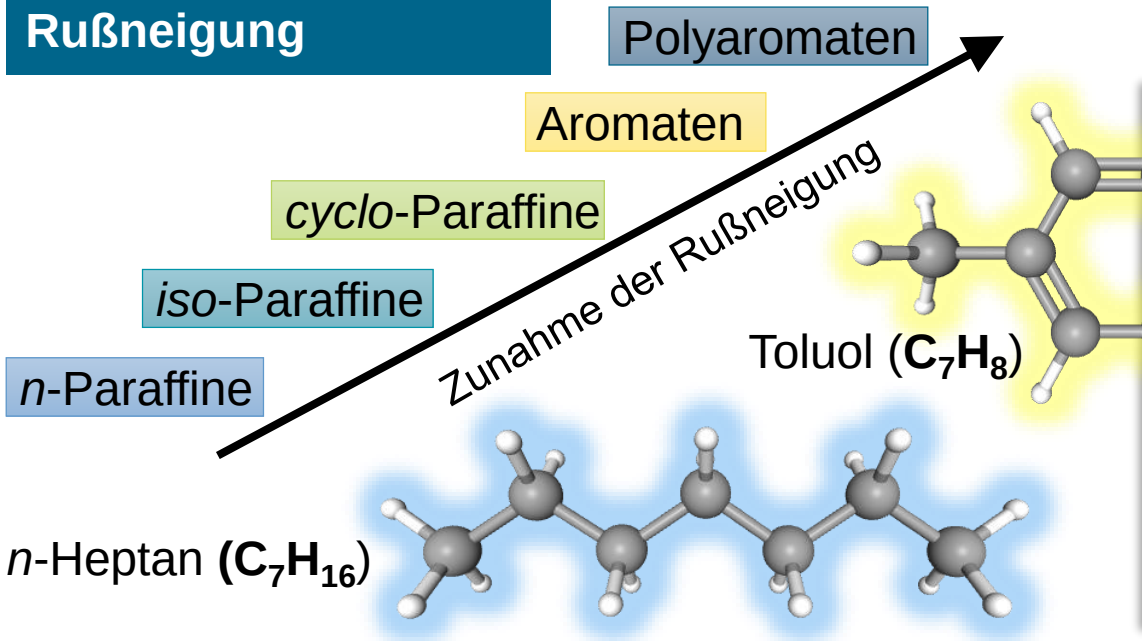
(4) Koagulation

(5) Agglomeration



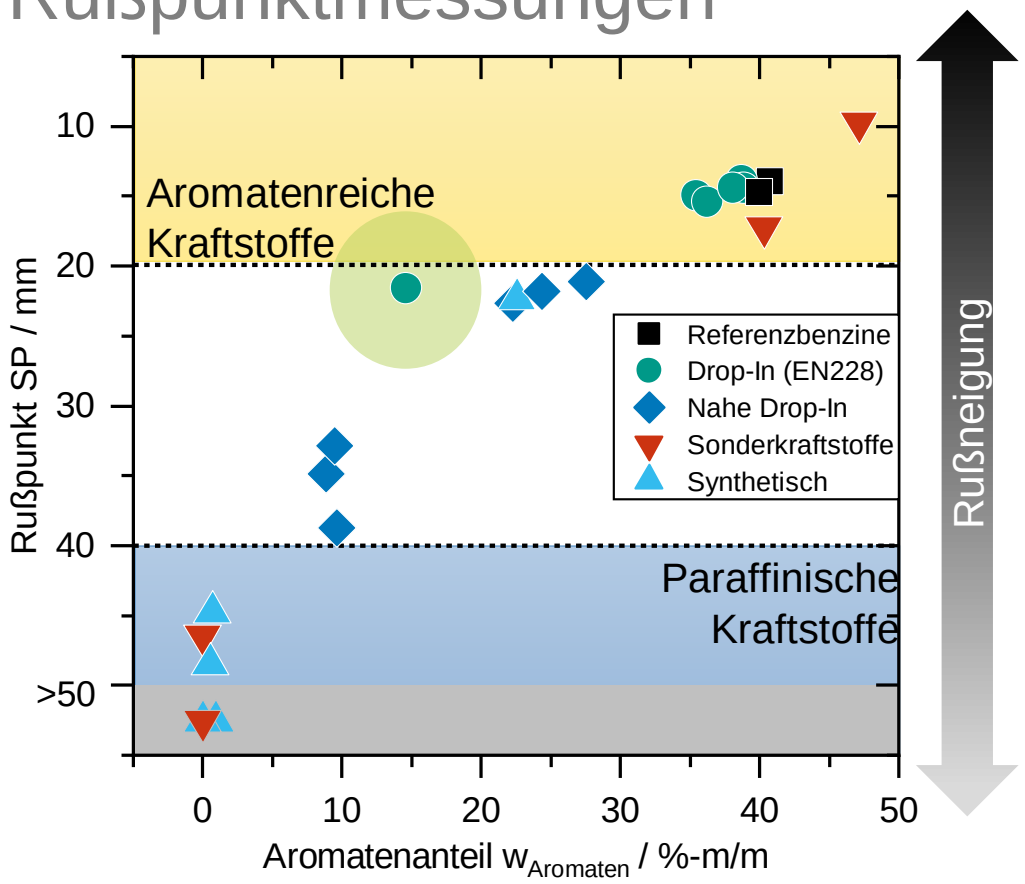
[Bockhorn, 1994]

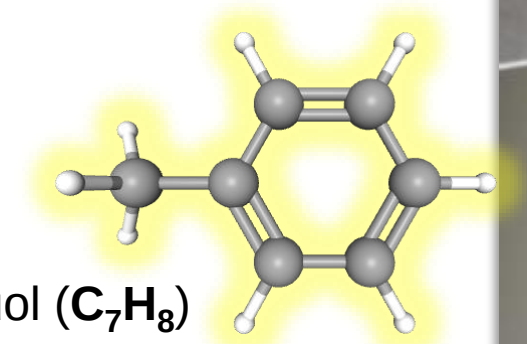
Rußneigung



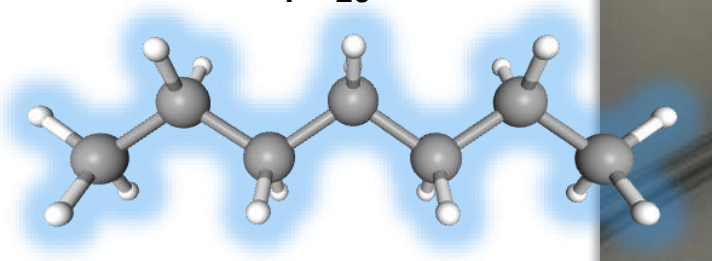
[Nady - adobe.stock.com]

Rußneigung
Rußpunktmessungen

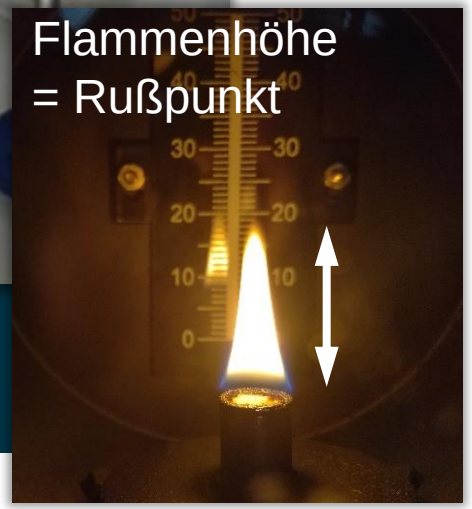




Toluol (C_7H_8)

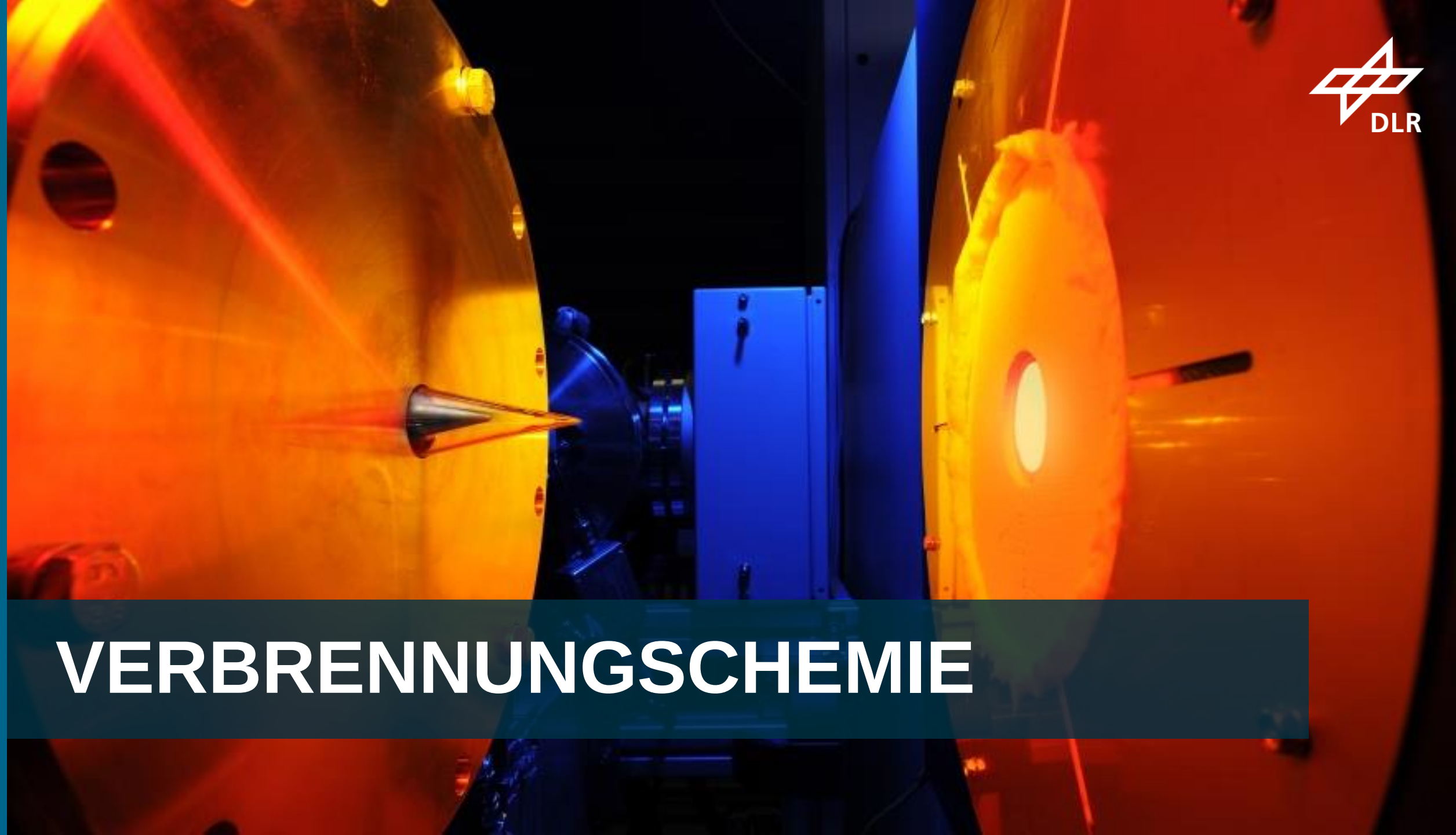


n-Heptan (C_7H_{16})



- Aromatische Kraftstoffe (Gelb): ⇧ Hohe Rußneigung.
- Paraffinische Kraftstoffe (Blau): ⇩ Geringe Rußneigung.

→ Reduktion von Aromaten im Kraftstoff ≠ Rußreduktion.

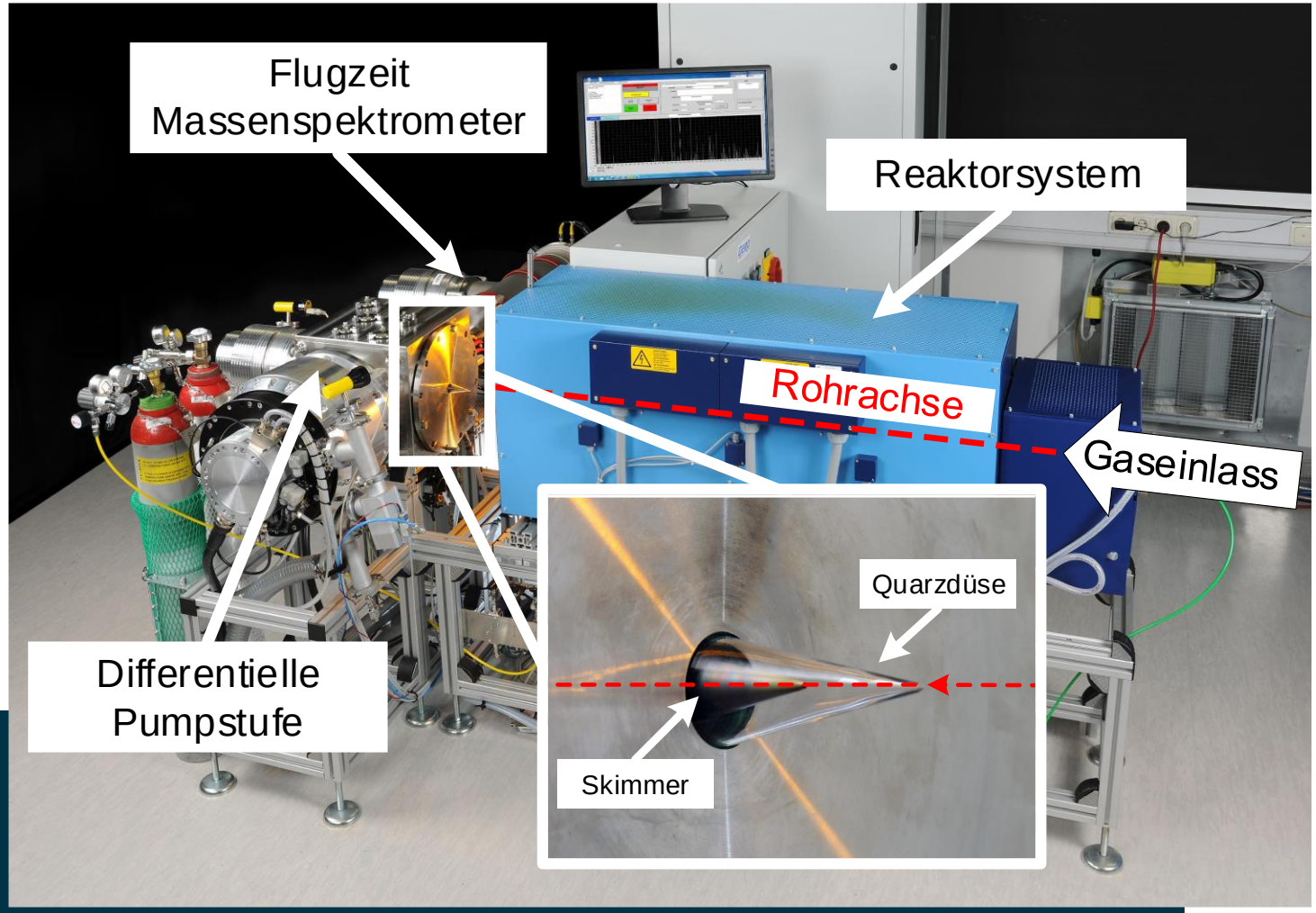


VERBRENNUNGSCHEMIE

Experimenteller Aufbau
Atmosphärischer laminarer Strömungsreaktor (ALFR)

Molekularstrahl Massenspektrometrie

- Gleichzeitiger Nachweis fast aller für die Verbrennung relevanten Spezies
- *In-situ*-Detektion von Radikalen und anderen hochreaktiven Spezies
- Großer Massenbereich von molekularen Gasphasenspezies
- Genaue Masse und Elementzusammensetzung (C/H/O)



Experiment zur Untersuchung von chemischer Spezies in reaktiven Strömungen.

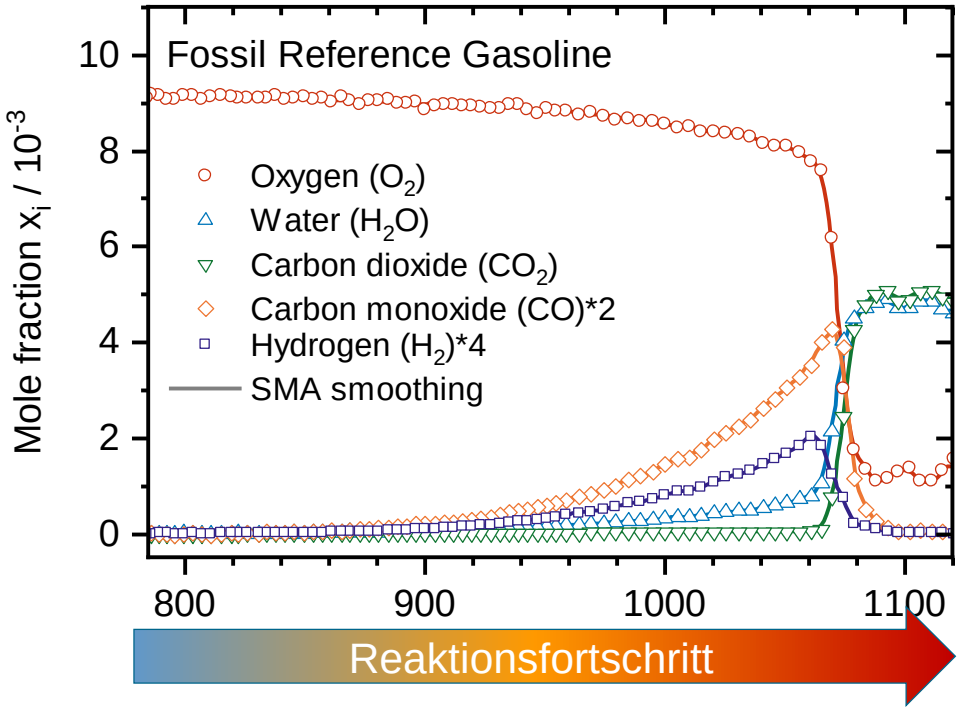
Verbrennungschemie
Vom Massenspektrum zum Speziesprofil

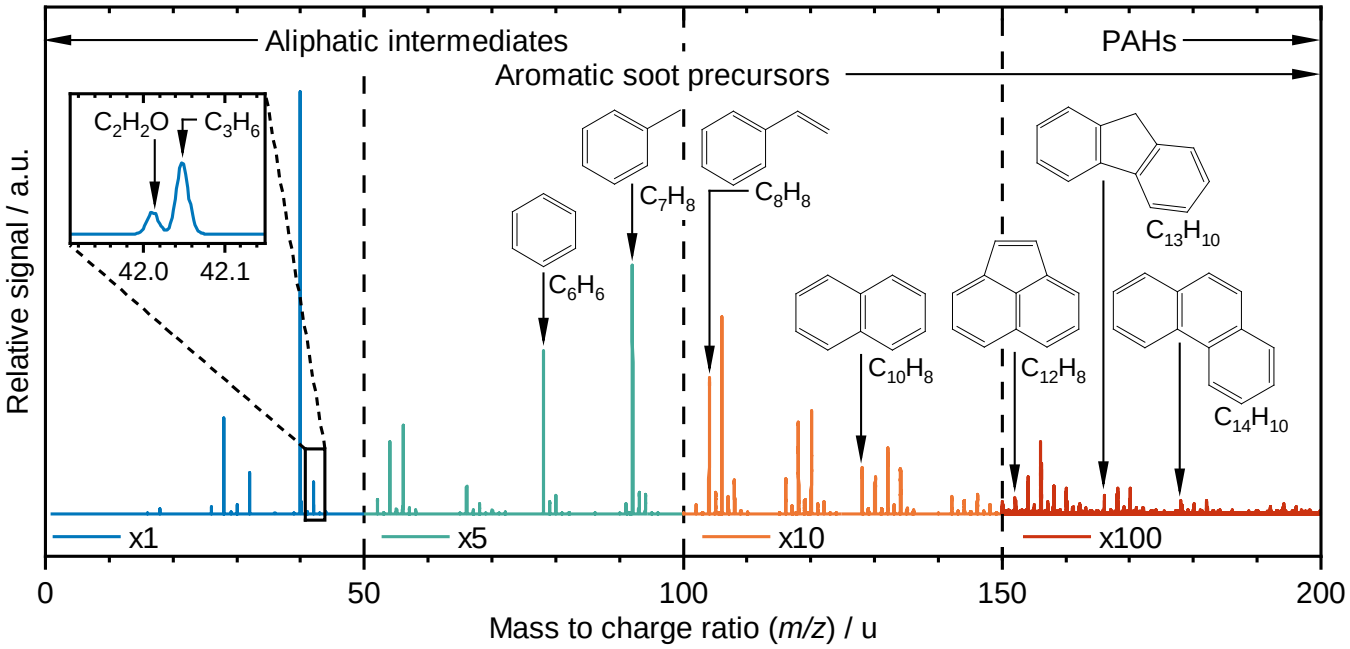
Globale Verbrennungsreaktion

$$C_nH_mO_p + \left(n + \frac{m}{4} - \frac{p}{2}\right) O_2 \longrightarrow n\,CO_2 + \frac{m}{2}\,H_2O$$

Quantifizierte Speziesprofile

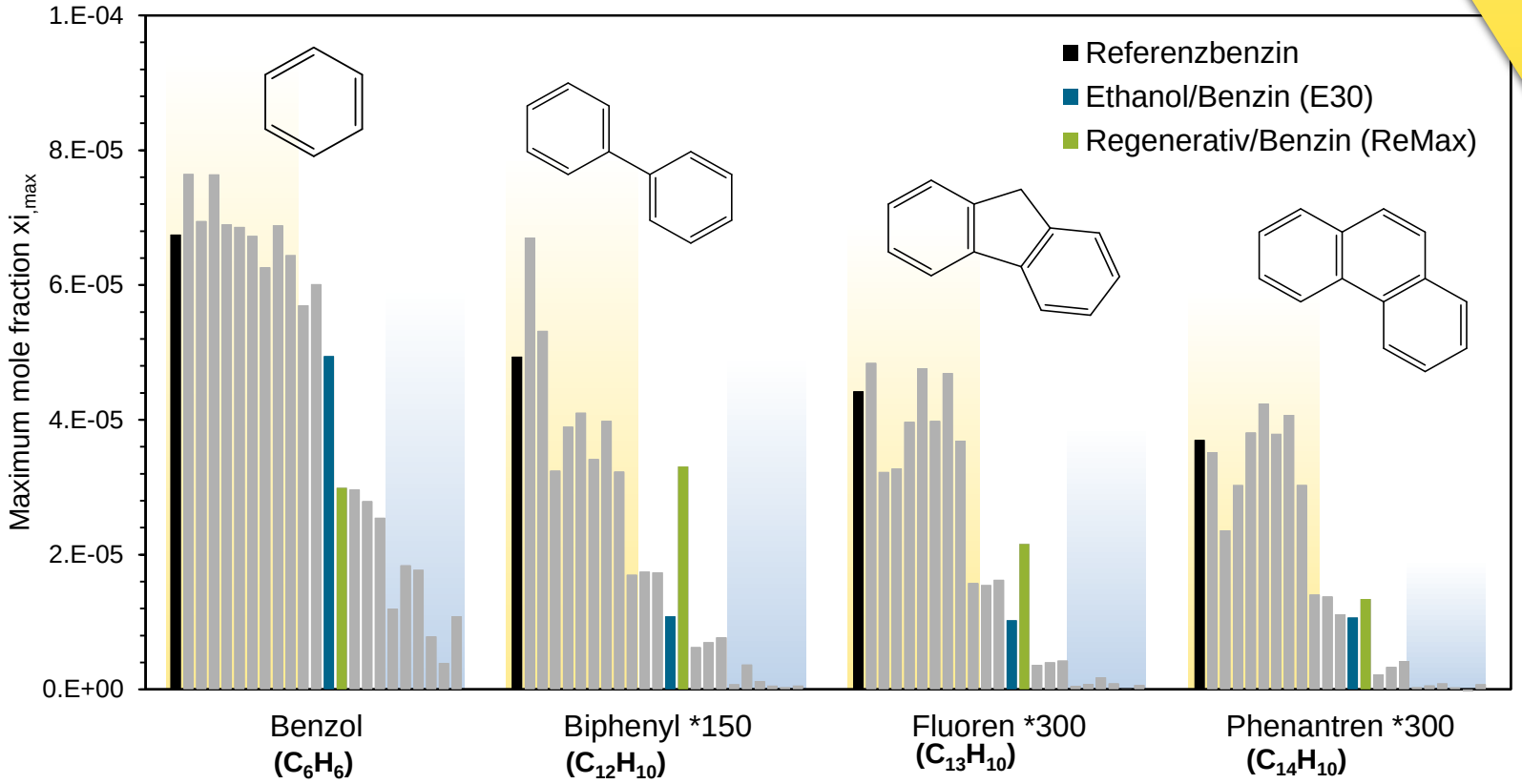
Massenspektrum der Oxidation eines Referenzbenzines @ 1065K





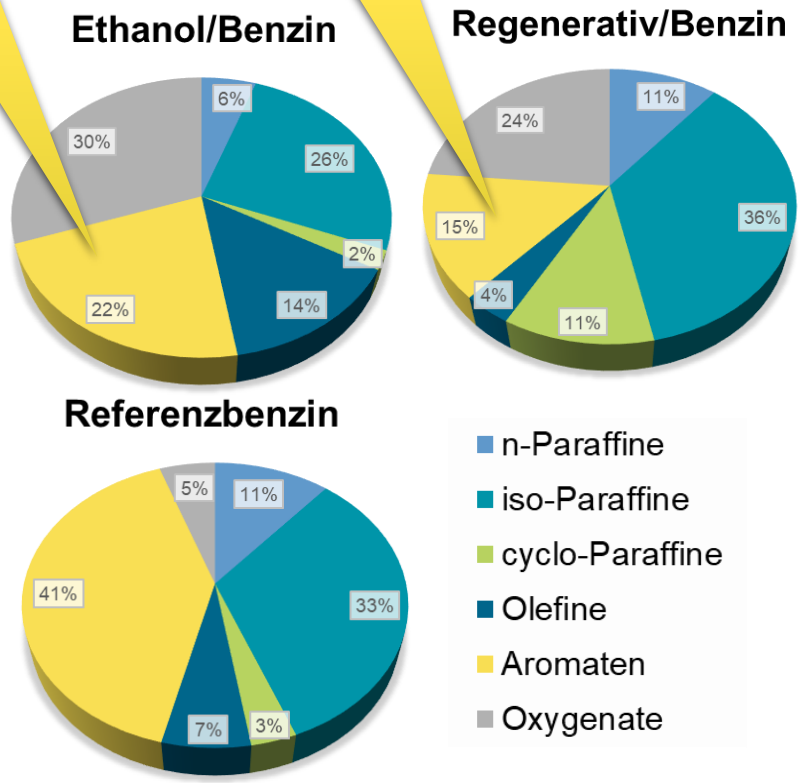
[Zinsmeister et al., 2022]

Verbrennungschemie
Aromatische Rußvorläufer-spezies



Leichte Aromaten (C_7/C_8)

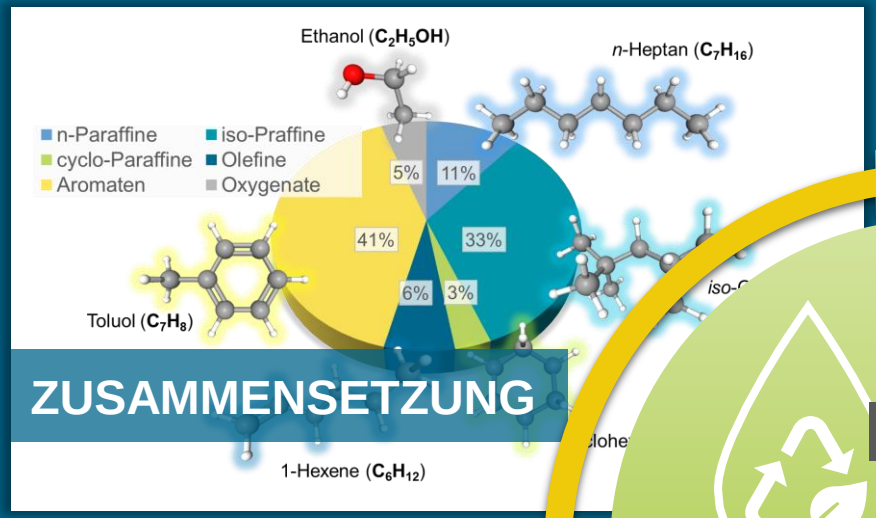
Schwere Aromaten (C_9/C_{10})

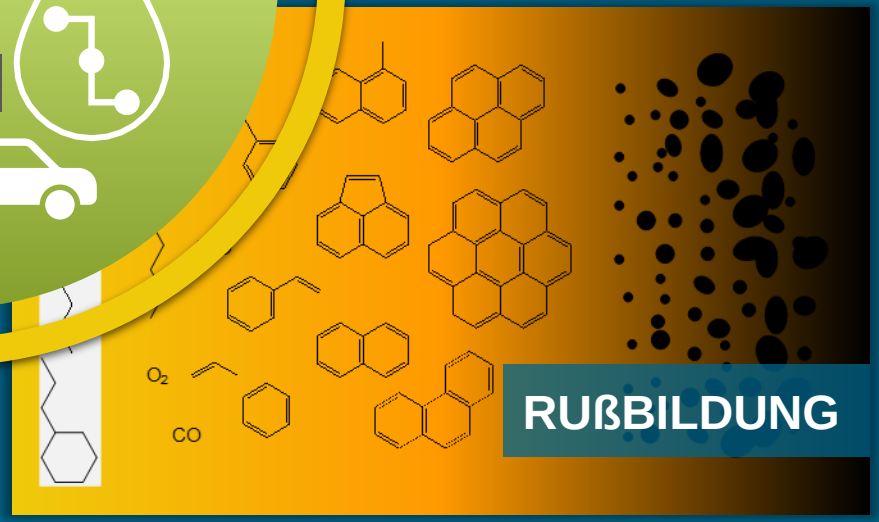


- Aromatische Kraftstoffe (Gelb): ⇧ Hohe Konzentration an arom. Rußvorläufern.
- Paraffinische Kraftstoffe (Blau): ⇩ Geringe Konzentration an arom. Rußvorläufern.

→ Reduktion schwerer Aromaten im Kraftstoff = Rußreduktion.

Zusammenfassung





→ Reduktion der „richtigen“ Aromaten im Kraftstoff = Rußreduktion.

Impressum

Thema: **Fuel Chemistry of renewable Gasoline Fuels**
From detailed Fuel Composition to Combustion Chemistry

Date: 07.09.2022

Autors:

Julia Zinsmeister
Mail: Julia.Zinsmeister@dlr.de
German Aerospace Center (DLR),
Institute of Combustion Technology,
Chemical Kinetics and Analytics (CKA)

Credits: German Aerospace Center (DLR)