

EINSATZ DES MATRIX-MG5 ZUR UNTERSUCHUNG ALTERNATIVER BRENNSTOFFE

21.06.2023 – Bruker Optics Anwendertreffen

Dr. Steffen Schmitt

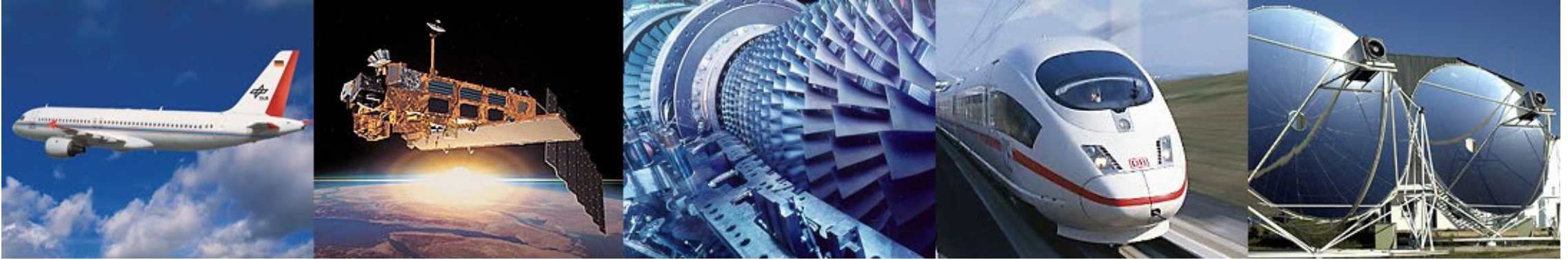
Mail: steffen.schmitt@dlr.de

Deutsches Zentrum für Luft und Raumfahrt

Institut für Verbrennungstechnik



Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) Forschungsgebiete



- Größte europäische Forschungseinrichtung für Luft- und Raumfahrt
- Raumfahrt-Agentur
- Projektträger

Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) Überblick



Forschungseinrichtung | Raumfahrt-Agentur | Projektträger

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

Forschungsbereiche

- Luftfahrt
- Raumfahrtforschung und -technologie
- Verkehr
- Energie
- Digitalisierung und Sicherheit
- Projektträger
- Raumfahrtmanagement



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

Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) Institut für Verbrennungstechnik



Leitung Prof. Dr. Andreas Huber
Mitarbeiter 110
Fokus Brennersysteme für Gasturbinen,
Chemische Energieträger, (Mikro)-
Gasturbinen basierte Kraftwerke und
Antriebe

Abteilungen

- Brennersysteme und Diagnostik
- Chemische Kinetik und Analytik
- Computer Simulation
- Gasturbinen
- Mehrphasenströmung u. Alternative Treibstoffe



**Von wissenschaftlichen
Grundlagen bis zur
technischen Anwendung**

Übersicht Abteilung „Chemische Kinetik und Analytik“



Chemische Analytik

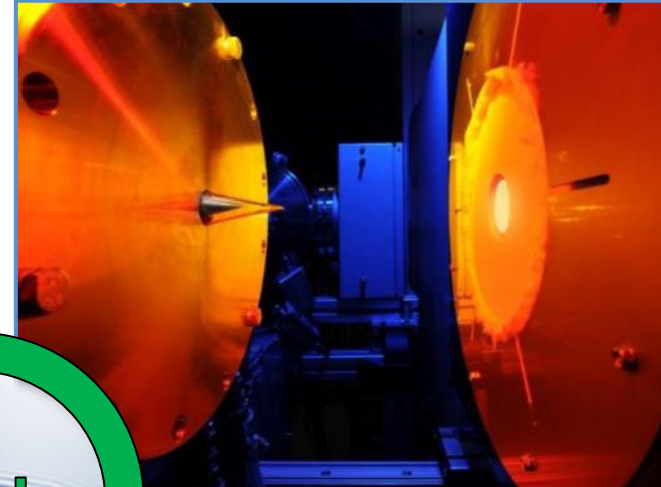
- Chemische Zusammensetzung
- Thermo-physikalische Eigenschaften



Fuels

Experimentelle Reaktionskinetik

- Zündverzugszeiten und Flammengeschwindigkeiten
- Detaillierte Verbrennungschemie
- Radikale und Isomere



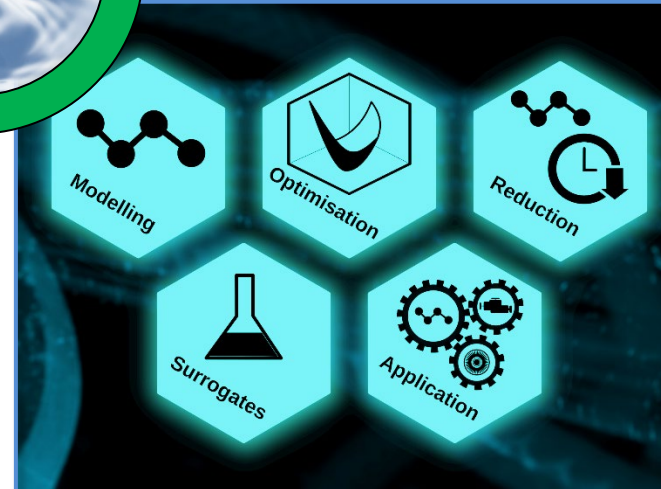
Emissionen / Immissionen

- Luftschadstoff- und Partikelmesstechnik
- Prüfstand bis Feldeinsatz
- DLR Messfahrzeug: Mobile Luftmessung



Numerische Reaktionskinetik

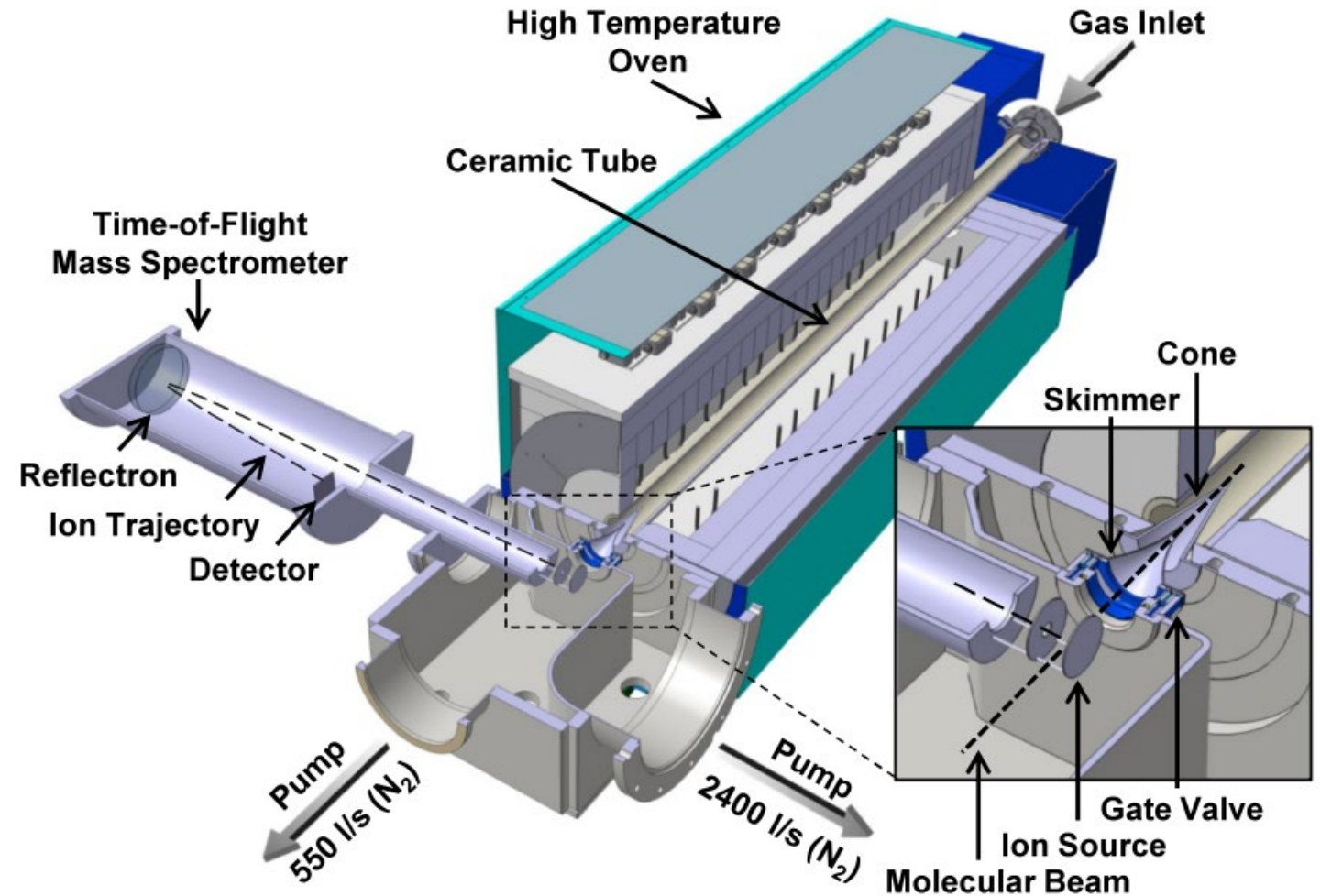
- Modellentwicklung
- Thermo-physikalische Berechnungen
- Reduktion und Optimierung von Reaktionsmechanismen



Strömungsreaktor

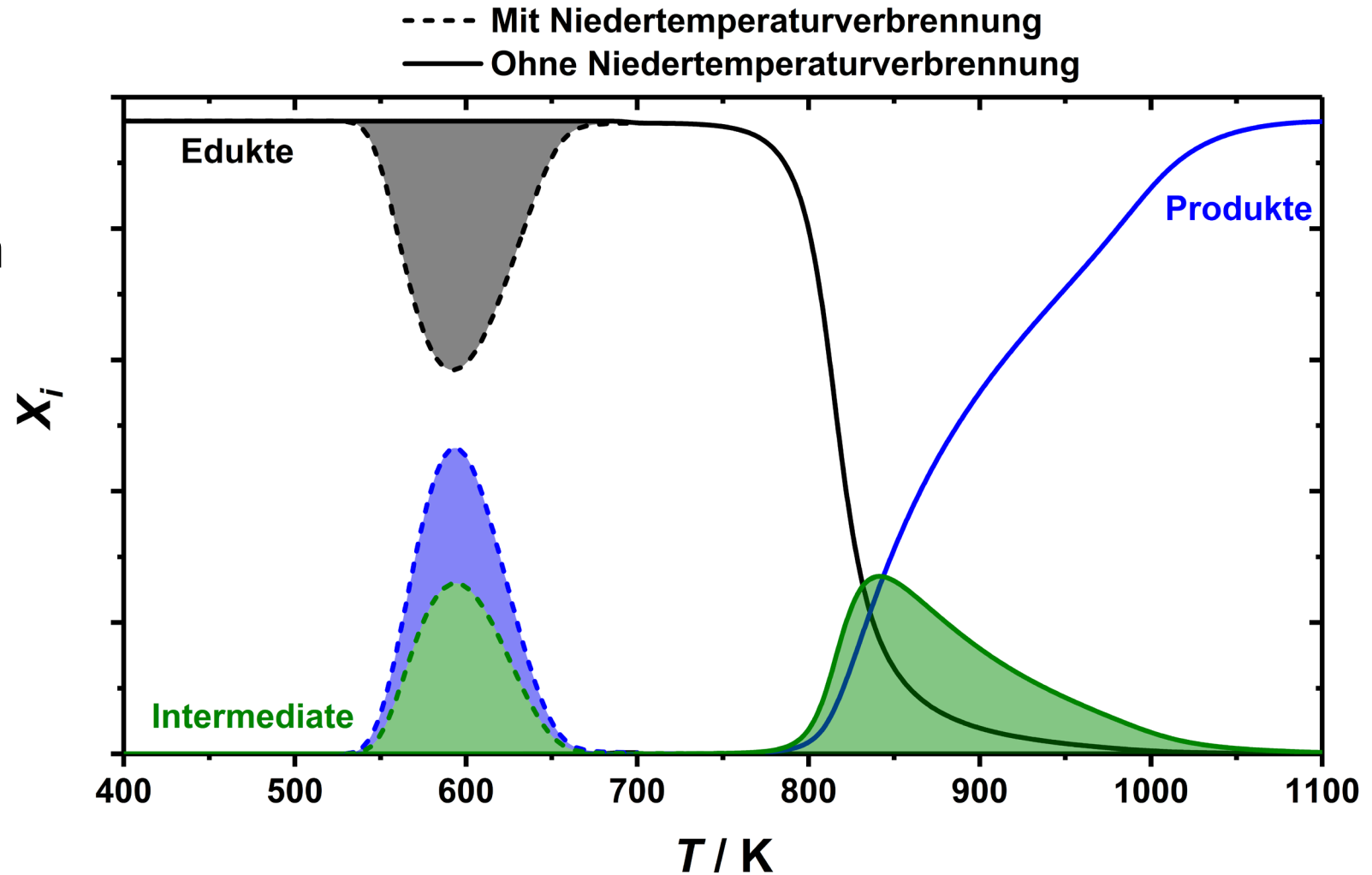
Prinzip

- Gasgemisch (Brennstoff/Sauerstoff/Argon) strömt durch ein beheiztes Rohr
- Kontinuierliche Probenahme am Ende des Rohres
- Üblicherweise Temperaturrampen

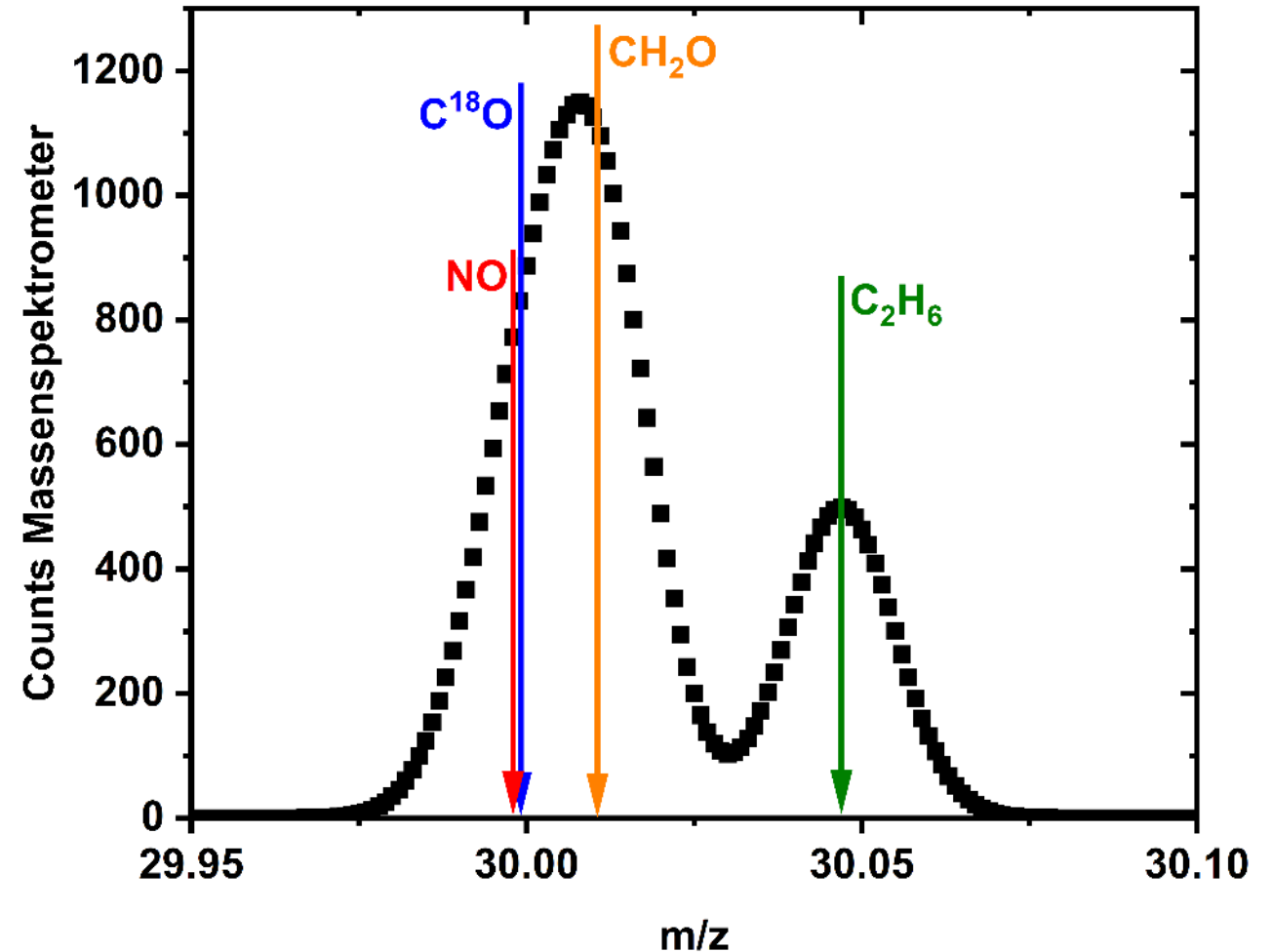


Prinzip

- Gasgemisch (Brennstoff/Sauerstoff/Argon) strömt durch ein beheiztes Rohr
- Kontinuierliche Probenahme am Ende des Rohres
- Üblicherweise Temperaturrampen



- Elektronenstoß-Ionisation (EI)-Massenspektrometrie nicht isomerenselektiv
- Auflösung teilweise nicht ausreichend für Separation bei zu vielen Isobaren (z.B. $m/z=30$)
- Datenauswertung und Quantifizierung sehr zeitaufwendig



➔ Erwerb und Adaption des FTIR-Spektrometers MATRIX-MG5 an den Strömungsreaktor

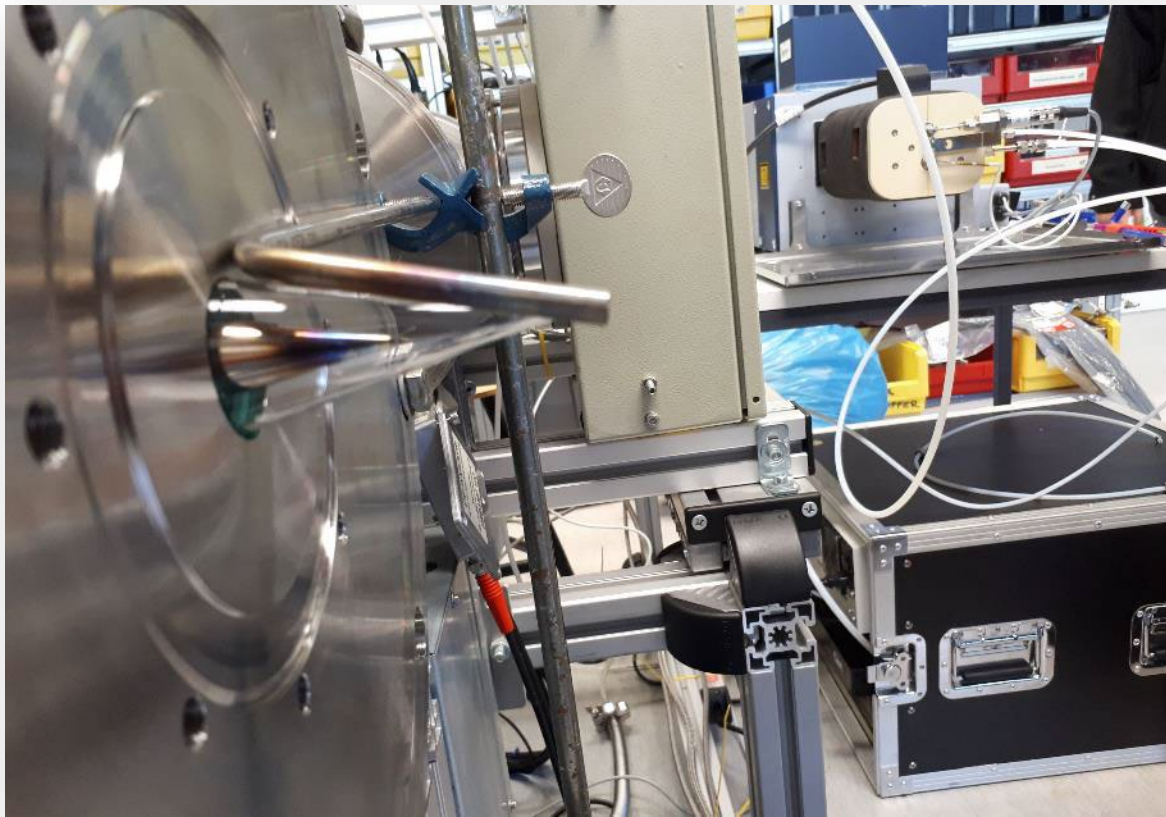
Strömungsreaktor

Experimenteller Aufbau



Strömungsreaktor

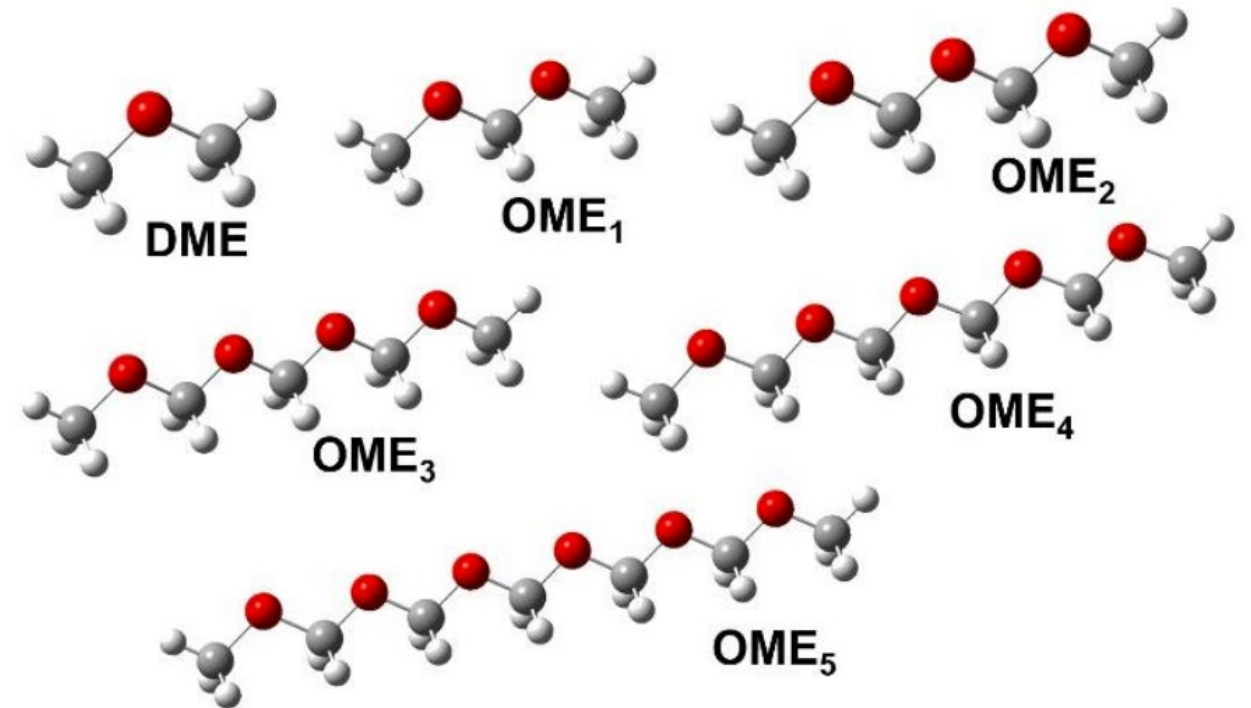
Experimenteller Aufbau



Anwendungsbeispiel: Untersuchung von Oxymethylenethern (OME_x)

Potentielle e-Fuels

- Wiederholungseinheit $-\text{CH}_2\text{O}-$
- Können CO_2 -neutral hergestellt werden
- Keine C-C-Bindungen
 - Sehr geringes Rußpotential



Gaiser et al., Fuel 313, 2022

Oxymethylenether (OME_x)



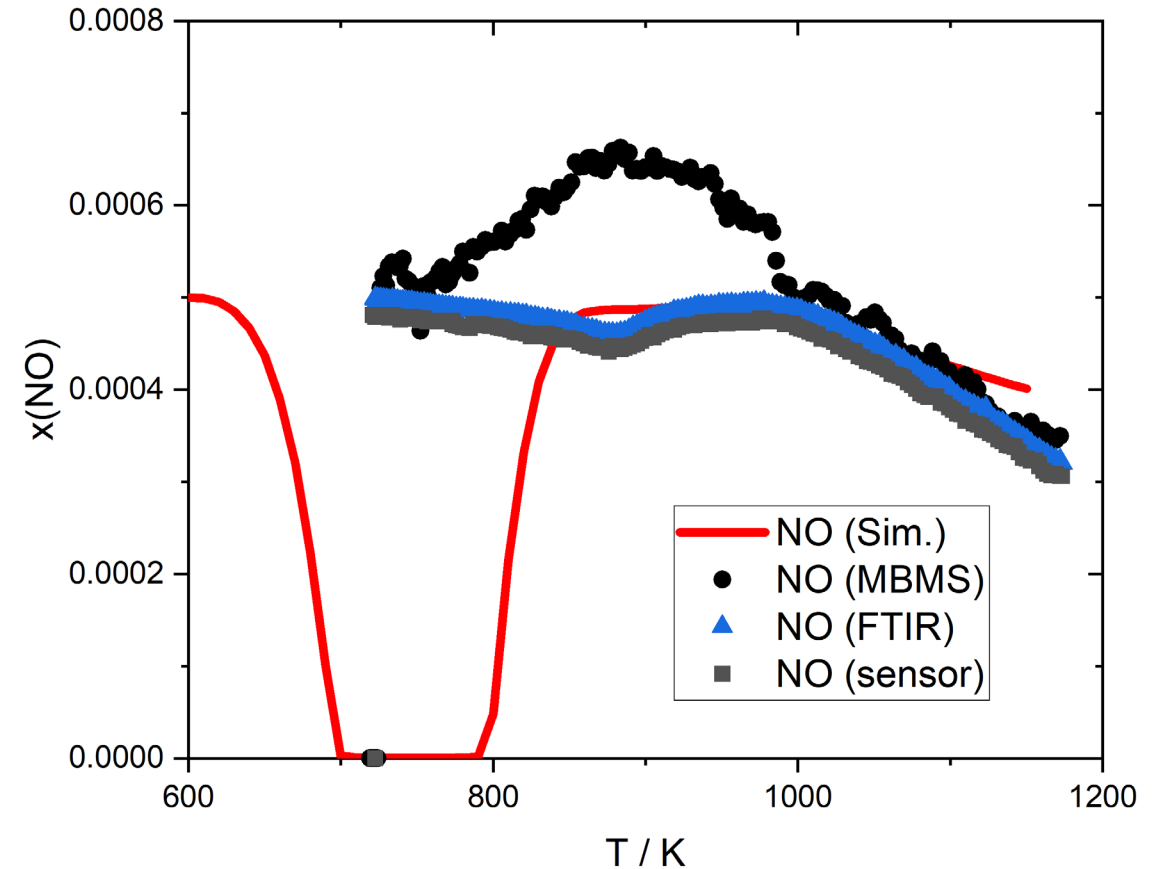
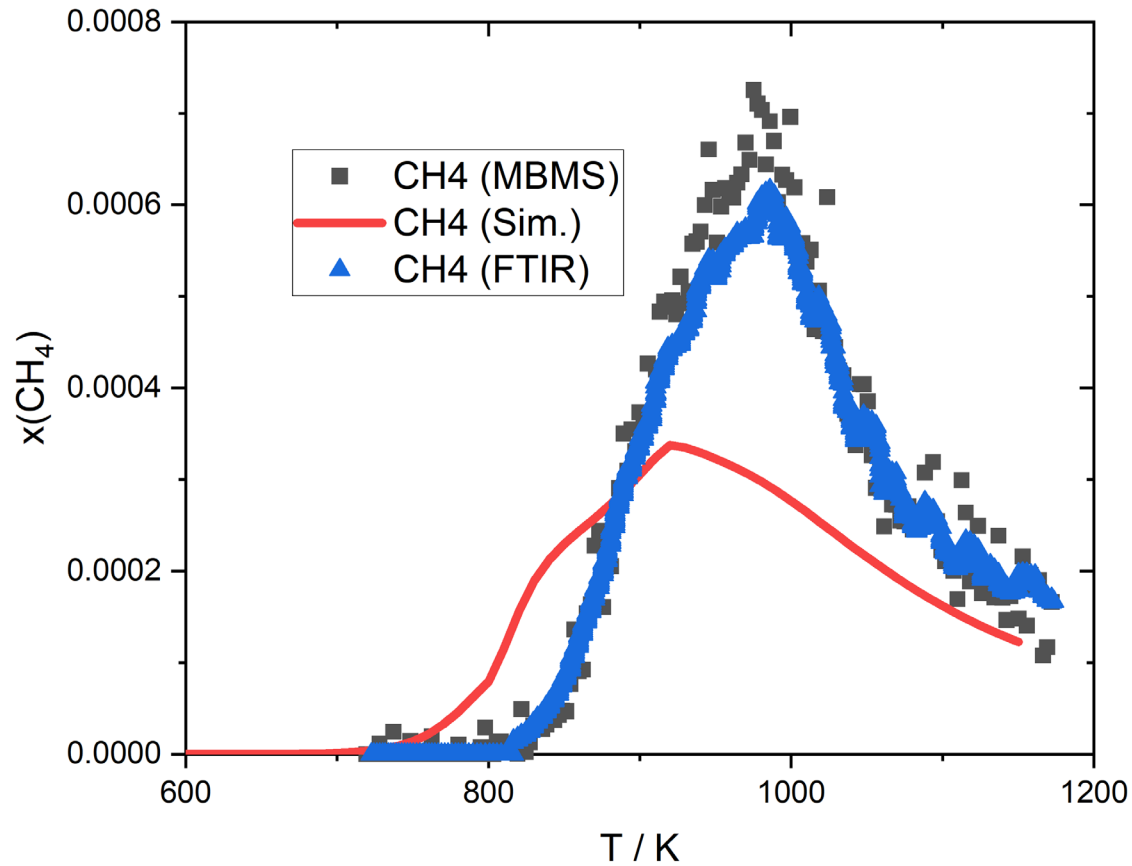
Spezies-Übersicht

- Üblicherweise 20 bis 40 verschiedene Spezies im Laufe des Verbrennungsprozesses nachweisbar
- Komplexe Mischungen in Argon-Verdünnung (93-99% Ar)
- Reaktortemperatur von 200 bis 900 °C

EI-MBMS	FTIR	NOx Sensor
CH4	CH4	CH4
NH3	NH3	NH3
H2O	H2O	H2O
C2H2	C2H2	C2H2
C2H4	C2H4	C2H4
N2	N2	N2
CO	CO	CO
CH2O	CH2O	CH2O
NO	NO	NO
C2H6	C2H6	C2H6
CH3OH	CH3OH	CH3OH
O2	O2	O2
Ar	Ar	Ar
CO2	CO2	CO2
C2H4O	C2H4O	C2H4O
C2H6O	C2H6O	C2H6O
NO2	NO2	NO2
HONO	HONO	HONO
C2H4O2	C2H4O2	C2H4O2
CH3NO2	CH3NO2	CH3NO2
OME ₁	OME ₁	OME ₁

Wie verlässlich ist die Quantifizierung des MATRIX-MG5 unter diesen Bedingungen?

Vergleichbarkeit Matrix-MG5 (FTIR) mit ToF-MS und NO_x-Sensor



- Exzellente Vergleichbarkeit zwischen Massenspektrometer/ NO_x-Sensor und MATRIX-MG5

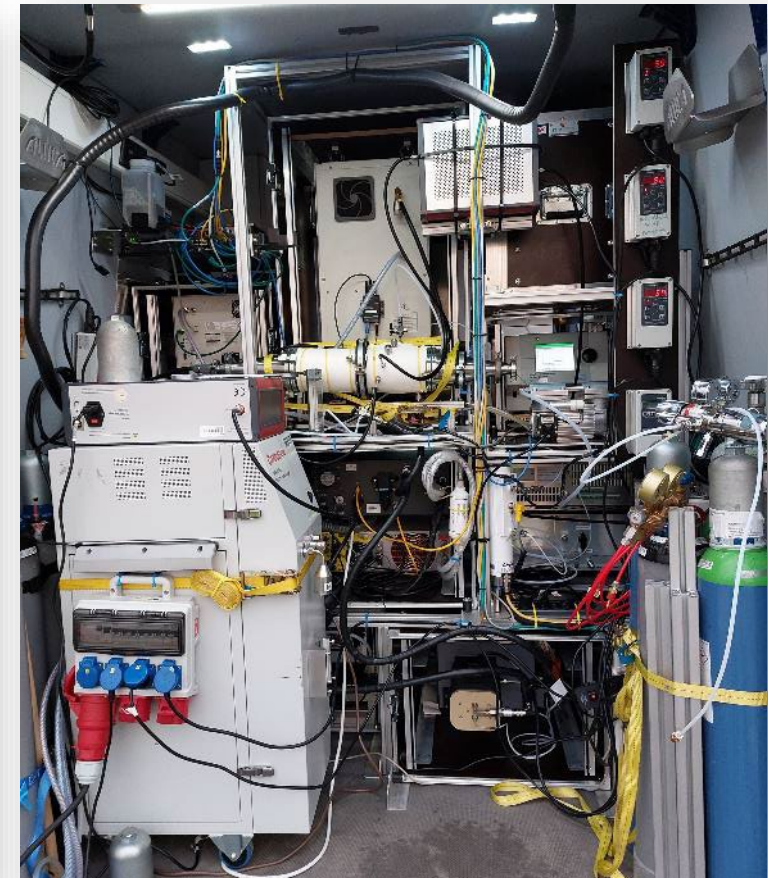
Messungen am Flughafen Kopenhagen

Überblick



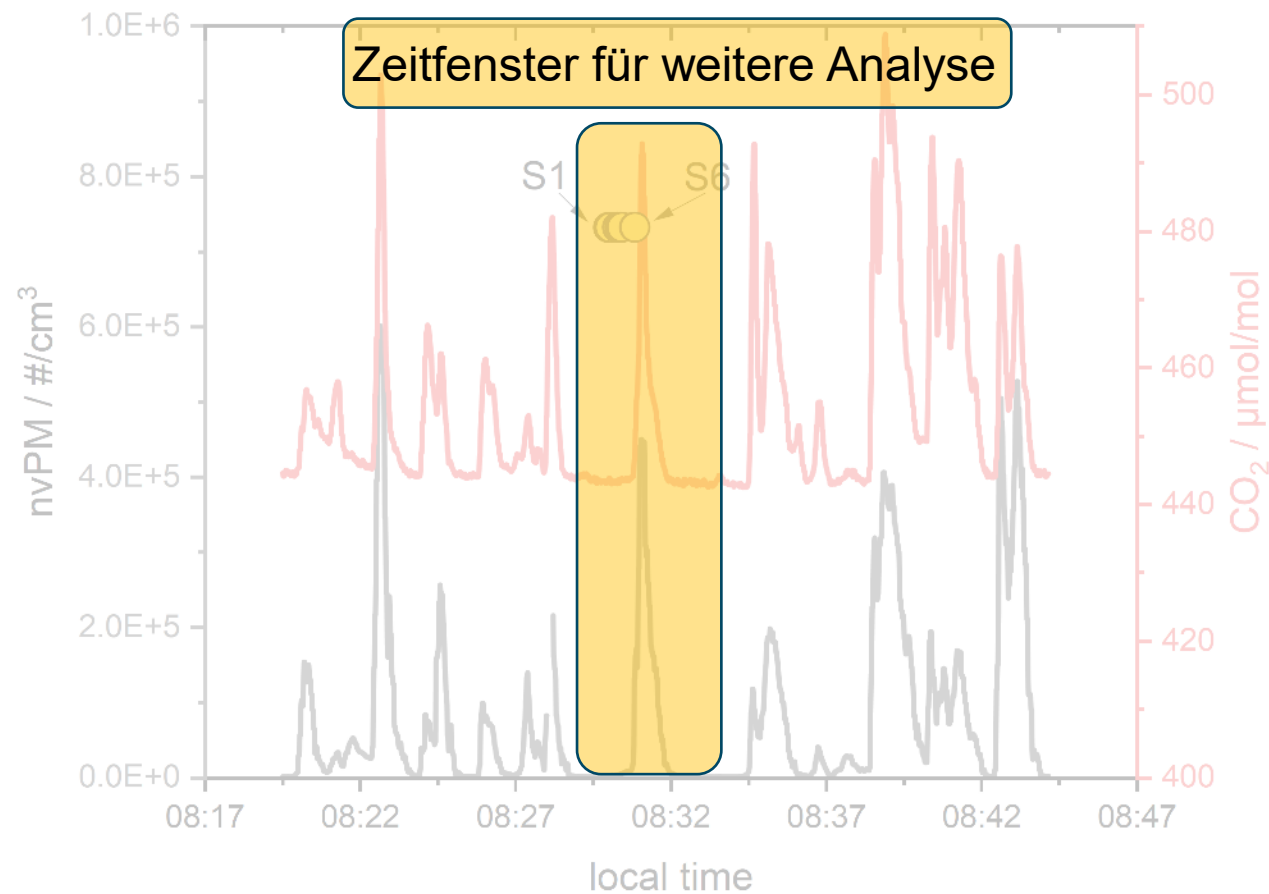
Messungen am Flughafen Kopenhagen

- Referenzphase: konventionelles Jet-A1
- Testphase: 66% Jet-A1, 34% SAF (sustainable aviation fuel, HEFA-SPK)



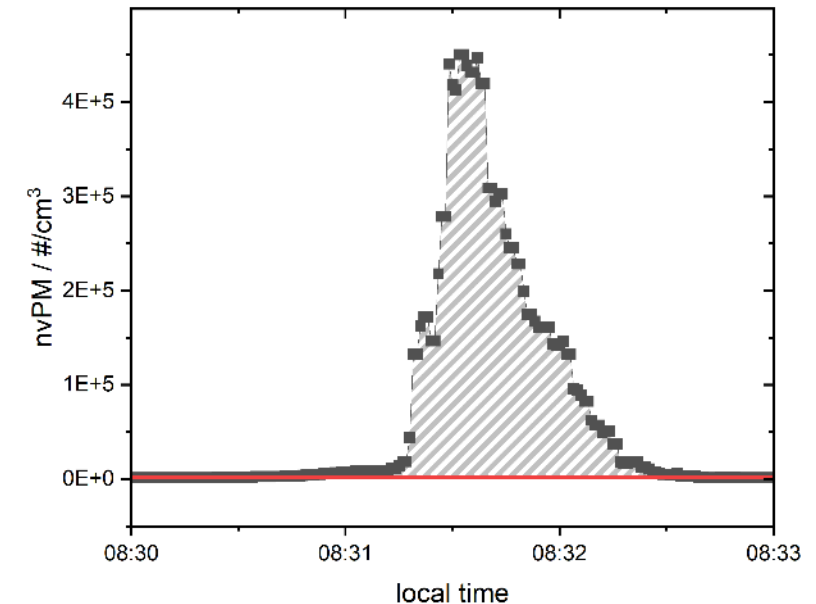
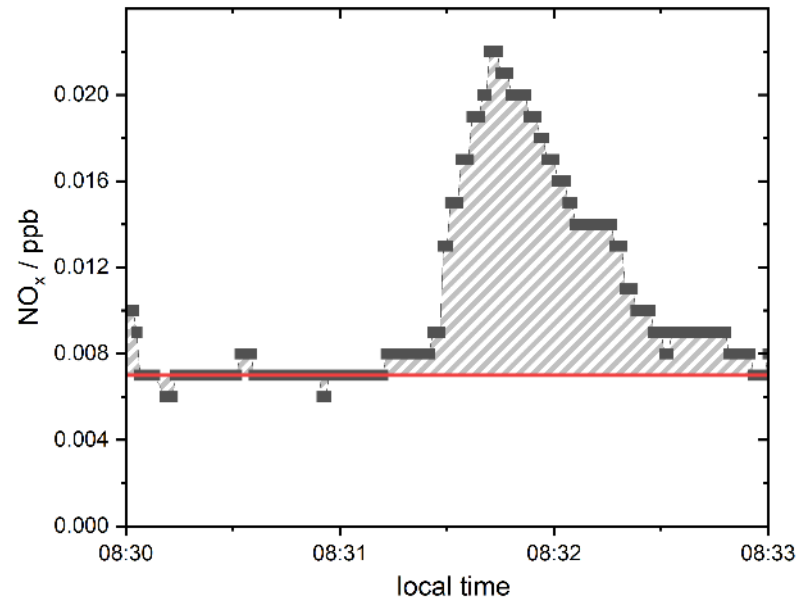
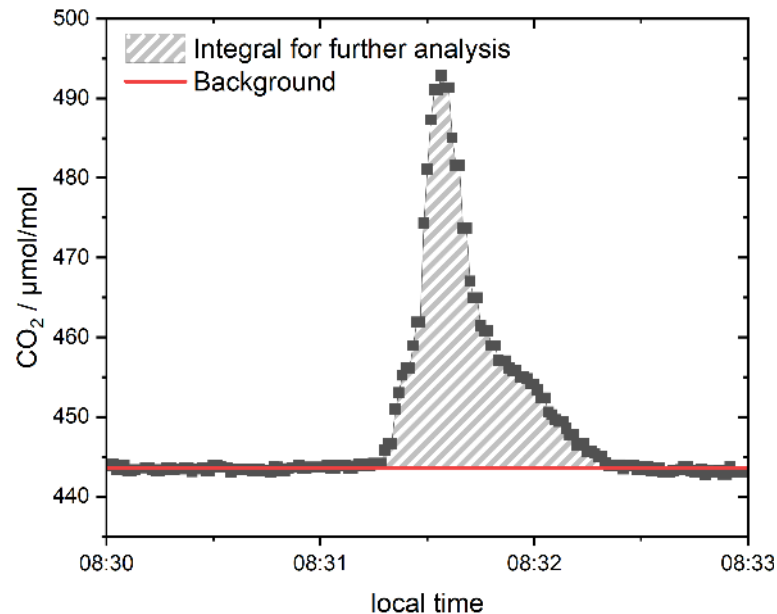
Datenauswertung – Zuordnung gemessener Peaks zum Zielflugzeug (SER-OU)

- Peaks können mit GPS- und Wetterdaten einzelnen Flugzeug-Vorbeifahrten zugeordnet werden
- CO₂ Konzentration als Parameter für den Emissionsanteil, der am Messfahrzeug ankommt



Datenauswertung – Postprocessing der SER-OU Peaks

- Signalform unterscheidet sich abhängig von Wetter, Geschwindigkeit/Fahrtrichtung des Flugzeugs
 - Background-korrigierte Integrale als stabilste Messgröße
- Konzentration weiterer Gasphasen-Spezies schwierig zu bestimmen (Konzentration zu niedrig aufgrund der Versuchsanordnung? Referenzspektren nicht ausreichend?)

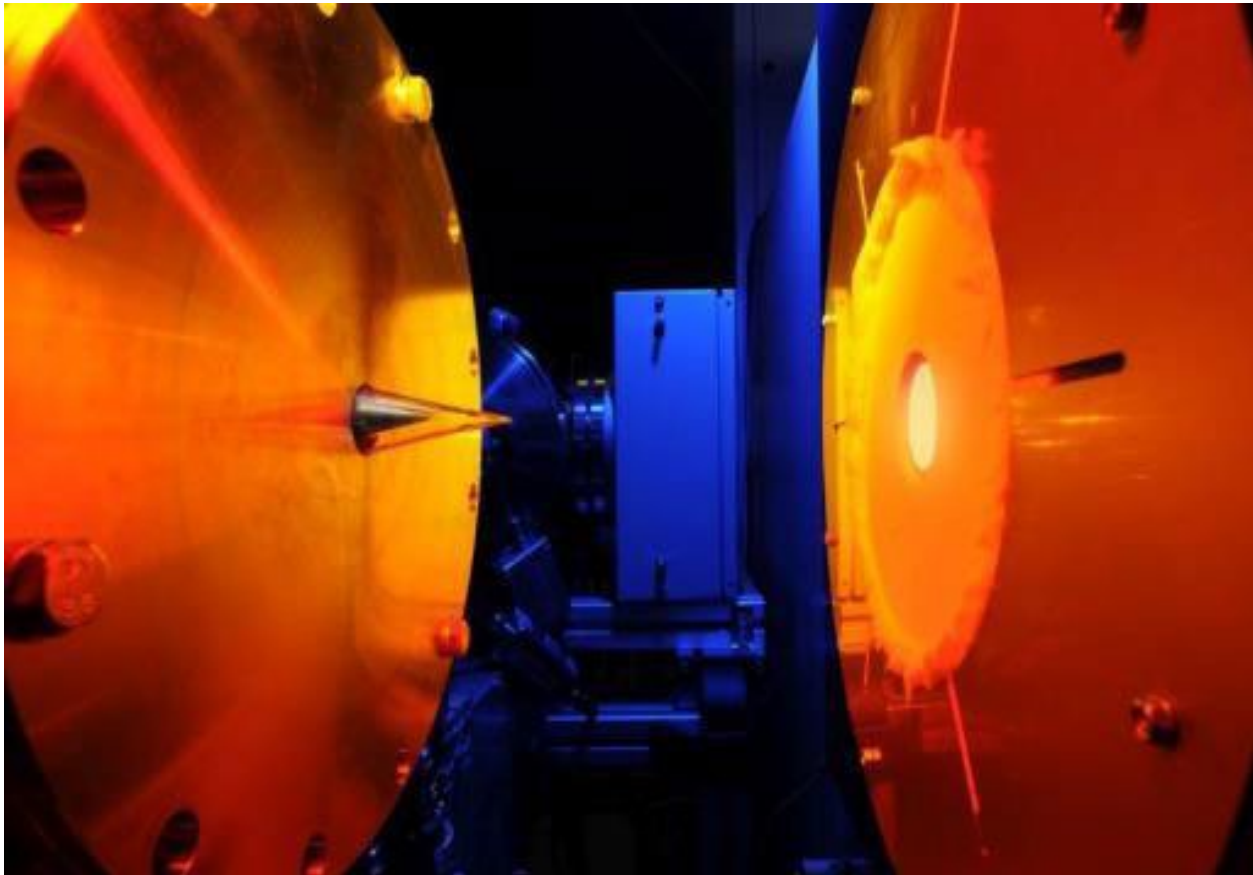


Zusammenfassung & Optimierungsvorschläge



- Einsatz des MATRIX-MG5 in Modellversuchen (Strömungsreaktor) und unter anwendungsnahen Bedingungen (Messkampagne am Flughafen)
- Sehr gute Vergleichbarkeit mit anderen Instrumenten trotz komplexer Mischungen
- Kontinuierliche Messungen ohne externes Medium (wie z.B. flüssig-N₂) möglich

- Verbesserungsvorschläge Software:
 - OPUS und OPUS GA in ein Programm vereinen
 - Aussagekräftigere Fehlermeldungen
 - Vorgefertigte Auswertepakete für spezifische Anwendungen (z.B. Abgasmessungen)
 - Mehr Komfort bei der Auswahl/Darstellung von Referenzspektren
 - Optionale Limitierung der Dateigröße für lange Messreihen



**VIELEN DANK FÜR IHRE
AUFMERKSAMKEIT!**