

# Der Wasserstoffmotor – Chancen und Herausforderungen auf dem Weg zu einer dekarbonisierten Mobilität

Patrick Lott<sup>1</sup>, Uwe Wagner<sup>2</sup>, Thomas Koch<sup>2,\*</sup> und Olaf Deutschmann<sup>1,\*</sup>

DOI: 10.1002/cite.202100155

 This is an open access article under the terms of the Creative Commons Attribution-NonCommercial License, which permits use, distribution and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited and is not used for commercial purposes.

**Herrn Prof. Dr. Thomas Hirth zum 60. Geburtstag gewidmet**

Auf dem Weg zu einer dekarbonisierten Mobilität kann der Wasserstoffmotor vor allem im Nutzfahrzeugsektor und auf der Langstrecke einen wertvollen Beitrag leisten. Durch die Verwendung von sauberem Wasserstoff als Brennstoff treten Stickoxide als praktisch einzig relevante Schadstoffemissionen auf, die durch motorische Maßnahmen gepaart mit einer Abgasreinigung im Abgasstrang minimiert werden können. Dieser Artikel gibt einen Überblick zu den Einflüssen verschiedener Motorbetriebszustände auf die Emissionen eines Wasserstoffmotors und zeigt aktuelle und zukünftige Möglichkeiten einer effizienten Abgasnachbehandlung auf.

**Schlagwörter:** Dekarbonisierung, deNO<sub>x</sub>, Emissionsreduktion, Mobilität, Wasserstoff

*Eingegangen:* 02. August 2021; *revidiert:* 15. Oktober 2021; *akzeptiert:* 13. Dezember 2021

## Hydrogen Combustion Engines – Chances and Challenges on the Way Towards a Decarbonized Mobility

On the way towards a decarbonized mobility, hydrogen combustion engines can particularly contribute to applications for heavy-duty and long-haul routes. Using clean hydrogen as fuel results in formation of nitrogen oxides as quasi-exclusive pollutant emissions, which can be minimized by combining motor-related measures with an emission control system in the exhaust tailpipe. This review provides an overview on the impact of various engine operation conditions on the emissions of a hydrogen combustion engine and summarizes state-of-the-art and future concepts for an efficient exhaust gas after-treatment.

**Keywords:** Decarbonization, deNO<sub>x</sub>, Emission reduction, Hydrogen, Mobility

### 1 Einleitung

Der stetig steigende Energiebedarf der Weltbevölkerung wird trotz zunehmender Bemühungen um alternative Energiequellen noch immer durch überwiegend fossile Energieträger gedeckt, die aufgrund der damit verbundenen Kohlenstoffdioxidemissionen den Klimawandel begünstigen. Obgleich das Pariser Klimaabkommen aus dem Jahr 2015 [1] zeigt, dass die Notwendigkeit eines Paradigmenwechsels inzwischen in den meisten Staaten weltweit allgemein anerkannt wurde und zumindest in Europa sogar weitestgehend als gesamtgesellschaftlicher Konsens gilt, fehlt es der Energiewende an einigen Stellen noch immer an Schwung. Während erneuerbare Grundchemikalien in der chemischen Industrie bereits seit längerem zunehmende Bedeutung erlangen [2], könnte der Übergang von konventionellen zu

alternativen Technologien, die für eine breite und wirtschaftlich zügig realisierbare Anwendung in der Energiewirtschaft und im Mobilitätssektor in Frage kommen, rascher vonstattengehen. Als erfreulich sind daher die in

<sup>1</sup>Dr. Patrick Lott, Prof. Dr. Olaf Deutschmann  
deutschmann@kit.edu

Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Technische Chemie und Polymerchemie (ITCP), Engesserstraße 20, 76131 Karlsruhe, Deutschland.

<sup>2</sup>Dr. Uwe Wagner, Prof. Dr. Thomas Koch  
thomas.a.koch@kit.edu

Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Institut für Kolbenmaschinen (IFKM), Rintheimer Querallee 2, 76131 Karlsruhe, Deutschland.

eine europäische Dachstrategie eingebetteten Bestrebungen Deutschlands zu werten, Vorreiter für eine Wasserstoffwirtschaft werden zu wollen, die sich sowohl auf stationäre als auch auf mobile Anwendungen erstreckt [3, 4]. Die schrittweise Substitution der aktuell genutzten kohlenwasserstoffbasierten, vorwiegend fossilen Kraftstoffe durch den kohlenstofffreien Energieträger Wasserstoff würde eine vergleichsweise kurzfristige und substantielle Reduktion der CO<sub>2</sub>-Emissionen des Mobilitätssektors erlauben. Gerade im Hinblick auf sogenannten grünen Wasserstoff, der mittels klimafreundlicher Elektrizität beispielsweise aus Windkraft oder Photovoltaik durch Elektrolyse von Wasser gewonnen werden kann, heben Kritiker jedoch berechtigterweise immer wieder die großen energetischen Umwandlungsverluste bei der Transformation von Elektrizität in chemische Energie hervor und empfehlen stattdessen eine direkte Nutzung des grünen Stroms, beispielsweise für batterieelektrische Antriebe.

Während die Eignung von Elektrofahrzeugen zumindest auf der Kurzstrecke unbestritten ist, reichen auch moderne Batteriekapazitäten für eine breite Anwendung im Langstrecken- und Nutzfahrzeugbereich ohne bahnbrechende Innovationen auf absehbare Zeit nicht aus [5]. Eine aktuelle Analyse der Landesagentur für neue Mobilitätslösungen und Automotive Baden-Württemberg, e-mobil BW, kommt zu dem Schluss, dass auch die Brennstoffzelle als viel diskutierte klimafreundliche Alternative für Nutzfahrzeuge zumindest derzeit noch keine echte Lösung darstellt und weitere Entwicklungsarbeit erfordert [6]. Sie verfügt zwar über einen guten Wirkungsgrad und stößt außer Wasser keine nennenswerten Schadstoffe aus, ist jedoch ähnlich wie die Elektromobilität eine teure Technologie [7]. Insbesondere bei hohen Lasten stellt darüber hinaus ein effizientes Thermomanagement zur Wärmeabfuhr der typischerweise bei geringen Temperaturen um 80 °C bis 100 °C betriebenen Brennstoffzellen ein noch ungelöstes Problem dar.

Die auf diese Weise entstehende Technologielücke könnten moderne Wasserstoffmotoren schließen, die gemäß der Technologieanalyse der e-mobil BW hinsichtlich Entwicklungsaufwand und Integration in unternehmensinterne Abläufe bis ins Jahr 2025 Vorteile gegenüber der Brennstoffzelle bieten [6]. Seit der französisch-schweizerische Ingenieur François Isaac de Rivaz die Verbrennung von Wasserstoff zu Beginn des 19. Jahrhunderts erstmalig zur Bewegung eines Hubkolbens nutzte und damit ein Fahrzeug in Bewegung setzte [8], beschäftigten sich zahlreiche namhafte Fahrzeughersteller zumindest zeitweise mit der Entwicklung von Wasserstoffverbrennungsmotoren [9–11]. Moderne H<sub>2</sub>-Motoren erreichen inzwischen Gesamtwirkungsgrade, die vergleichbar zu denen eines herkömmlichen Dieselmotors sind [12]. Obgleich sich der Wasserstoffmotor überdies durch große Zuverlässigkeit und Lebensdauer auszeichnet und mit moderaten Herstellungs- und Wartungskosten einhergeht, konnte sich die Technologie bislang nicht am Markt durchsetzen. Ein Grund ist dabei sicher auch die fehlende Tankstelleninfrastruktur:

Von den aktuell mehr als 14 000 deutschen Tankstellen [13, 14] bieten Stand Juli 2021 weniger als 100 Tankstellen Wasserstoff als Kraftstoff an [15]. Da die zunehmend schärfer werdenden CO<sub>2</sub>-Reduktionsziele ohne den Umstieg auf kohlenstofffreie Treibstoffe jedoch nicht erreicht werden können, könnten sich die Marktchancen des Wasserstoffmotors binnen kurzer Zeit erheblich steigern. Die aus den deutsch-europäischen Ambitionen resultierenden politischen ökonomischen Anreize für eine moderne Wasserstoffwirtschaft dürften nicht nur einen Innovationsschub in puncto nachhaltiger Wasserstoffherzeugung auslösen, sondern werden wohl auch Bestrebungen zum Aufbau einer effizienten Wasserstoffversorgung beflügeln. Zumindest von politischer Seite steht somit auch einer dichten Tankstelleninfrastruktur, die als eine der wichtigsten Voraussetzungen für ein wasserstoffbasiertes Mobilitätskonzept gilt [6], nichts mehr im Wege.

## 2 Motorische Aspekte/Emissionsanalyse eines Wasserstoffmotors

### 2.1 Wasserstoff als Brennstoff

Hinsichtlich seiner Stoffeigenschaften unterscheidet sich Wasserstoff erheblich von herkömmlichen Kraftstoffen für Verbrennungsmotoren (Tab. 1). Neben den im Vergleich zu konventionellen Flüssigkraftstoffen stark unterschiedlichen Dichte- und Aggregatzustandsrandbedingungen des Wasserstoffs, die insbesondere hinsichtlich Handhabung und Speicherung eine Herausforderung darstellen, sind im Kontext des Verbrennungsmotors vor allem die im Folgenden erläuterten verbrennungsseitigen Eigenschaften von Bedeutung [16].

Wasserstoff weist sehr weite Zündgrenzen auf, sodass auch im Vergleich zu konventionellen Kraftstoffen sehr magere Gemische verbrannt werden können. Diese weiten Zündgrenzen gehen mit geringen Zündenergien einher, die zwar einerseits eine Zündung mittels Zündkerze bei otto-motorischen Brennverfahren erleichtern, andererseits jedoch zu unerwünschten Selbstzündphänomenen führen können. Als für den verbrennungsmotorischen Einsatz vorteilhaft erweist sich dagegen die hohe Flammgeschwindigkeit, die auch bei mageren Gemischen noch deutlich über der von konventionellen Gemischen liegt. Indem entsprechend magere Luft-Kraftstoff-Verhältnisse eingesetzt werden, kann diese Eigenschaften sogar einer effektiven innermotorischen Stickoxidreduzierung dienen [17]. Wie in Abb. 1 zu sehen ist, liegt das Maximum der Stickoxidbildung im leicht mageren Bereich um  $\lambda = 1,3$  und nimmt dann mit sinkender Spitztemperatur bei noch mageren Gemischen sehr schnell ab, da vor allem hohe Verbrennungsspitzen Temperaturen zur Bildung von Stickoxiden führen.

Neben einer Zündungseinleitung durch Fremdzündung kann Wasserstoff auch mittels Selbstzündung eingesetzt

**Tabelle 1.** Kraftstoffeigenschaften des Wasserstoffs im Vergleich zu Benzin, Diesel und Methan. Sofern nicht anders angegeben beziehen sich die Stoffeigenschaften auf 1,013 bar und 0 °C. Tabelle basiert auf Angaben in Klell et al. [16].

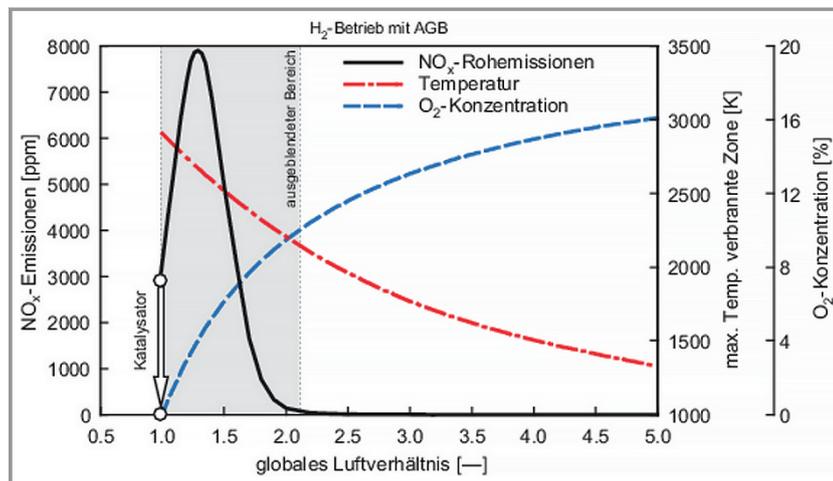
Eigenschaft	Benzin (Super Plus)	Diesel	Methan	Wasserstoff
Dichte (flüssig) [kg m <sup>-3</sup> ]	750–770	820–845	423	70,8
bei [°C]	15	15	-162	-253
Dichte (gasförmig) [kg m <sup>-3</sup> ]	–	–	0,716	0,090
Stöchiometrischer Luftbedarf [-]	14,0	14,7	17,2	34,3
Unterer Heizwert [MJ kg <sup>-1</sup> ]	41,4	42,9	50	120
Energiedichte (flüssig) [MJ dm <sup>-3</sup> ]	31,7	35,8	21	8,5
Energiedichte (gasförmig) [MJ dm <sup>-3</sup> ]	–	–	12,6 <sup>a</sup>	3,0 <sup>a</sup>
Gemischheizwert (gemischansaugend) <sup>b</sup> [MJ m <sup>-3</sup> ]	3,76	–	3,40	3,19
Gemischheizwert (luftansaugend) <sup>b</sup> [MJ m <sup>-3</sup> ]	3,83	3,77	3,76	4,52
Zündgrenzen in Luft [λ-Bereich]	1,4–0,4	1,35–0,48	2–0,6	10–0,13
Selbstzündungstemperatur in Luft [°C]	230–450	250	595	585
Minimale Zündenergie in Luft [mJ]	0,24	0,24	0,29	0,017
Diffusionskoeffizient in Luft [cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]	0,05	–	0,16	0,61
Laminare Flammgeschwindigkeit in Luft bei 25 °C [cm s <sup>-1</sup> ]	≈ 40	≈ 40	≈ 42	≈ 230
ROZ [-]	100	–	130	–
MZ [-]	88	–	100	–
CZ [-]	–	52–54	–	–

<sup>a</sup> Bei 350 bar und 280 K, <sup>b</sup> Bei λ = 1

werden. Bedingt durch die relativ hohe Selbstzündungstemperatur von Wasserstoff ist ein zuverlässiger Dieselmotorbetrieb allerdings nur mit hohen Verdichtungsverhältnissen und teils zusätzlicher Luftvorwärmung darstellbar [18–21], weswegen sich seriennahe Anwendungen häufig (noch) auf ottomotorische Lösungen beschränken.

## 2.2 Typische Abgaszusammensetzung beim Wasserstoffmotor

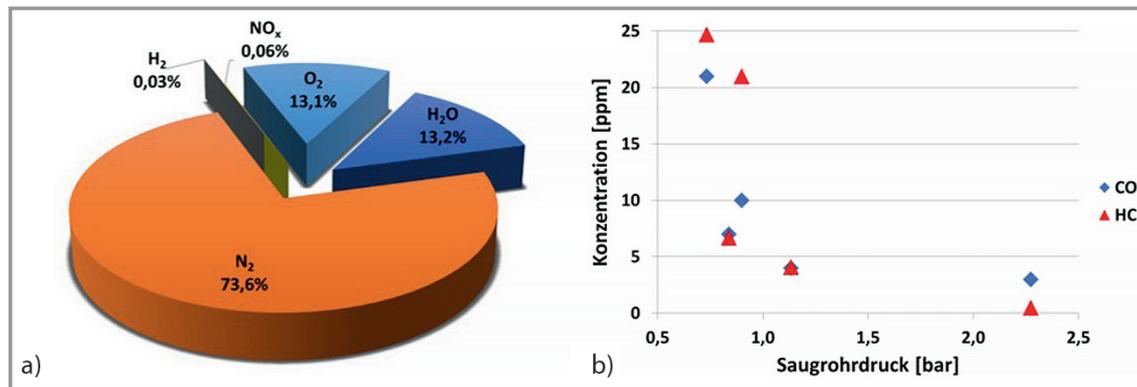
Abb. 2a zeigt eine typische Abgaszusammensetzung eines mit Wasserstoff betriebenen Verbrennungsmotors. Werden konventionelle Kohlenwasserstoff-Kraftstoffe durch reinen



**Abbildung 1.** NO<sub>x</sub>-Emissionen, O<sub>2</sub>-Konzentration und Verbrennungstemperatur bei äußerer Gemischbildung (mit Genehmigung entnommen aus/reprinted by permission from [16], Copyright 2018 Springer Nature; nach einer Abbildung von [17]).

Wasserstoff als Kraftstoff ersetzt, entsteht bei der Verbrennung als originäres Verbrennungsprodukt selbstredend nur Wasser. Entsprechend des Kraftstoffs fällt der Wasseranteil im Vergleich zu konventionellen Kraftstoffen dabei erhöht aus. Daneben enthält das Abgas je nach Betriebsrandbedingungen noch Restsauerstoff sowie Stickstoff. In Abhängigkeit der Betriebsrandbedingungen führen hohe Verbrennungsspitzen Temperaturen darüber hinaus zur Bildung von unerwünschten Stickoxiden, auf die in Abschn. 2.3 näher eingegangen wird. Daneben kann eine unvollständige Wasserstoffverbrennung zu Kraftstoffanteilen im Abgas und somit zu H<sub>2</sub>-Emissionen führen.

Dass im Realabgas eines Wasserstoffverbrennungsmotors trotz des fehlenden kraftstoffseitigen Kohlenstoffs Schadstoff-



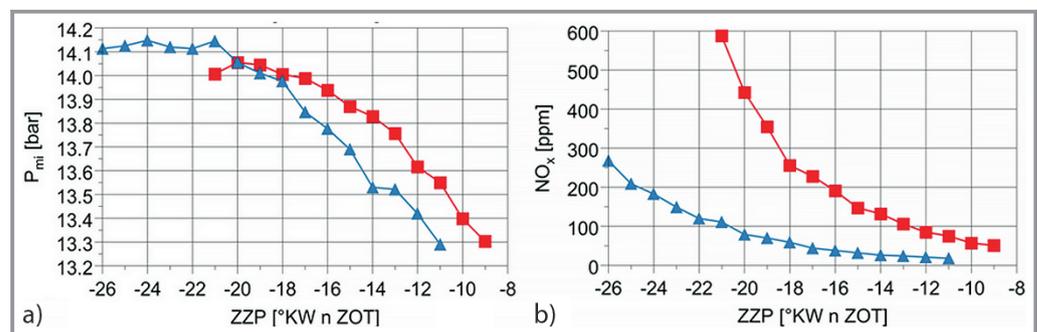
**Abbildung 2.** Typische Abgaszusammensetzung eines Wasserstoffmotors. a) Anteile der verschiedenen Abgaskomponenten exemplarisch für  $\lambda = 2,1$ ,  $p_{mi} = 8$  bar, keine AGR und b) Konzentration der kohlenstoffhaltigen Restschadstoffe CO und HC in Abhängigkeit des Saugrohrdrucks (Abb. 2b mit Genehmigung entnommen aus [22]).

fe wie Kohlenstoffdioxid, Kohlenstoffmonoxid (CO) oder Kohlenwasserstoffe (HC) zumindest in Spuren nachgewiesenen werden können, ist auf einen Schmieröleintrag in den Brennraum zurückzuführen, der bauartbedingt auch für Wasserstoff-Verbrennungsmotoren vorhanden ist. Wie in Abb. 2b dargestellt, kann dieser Eintragsmechanismus aufgrund des Verlaufs der HC- und CO-Konzentrationen in Abhängigkeit des Lade- bzw. Saugrohrdrucks bestätigt werden. Für Saugrohrdrücke unter Umgebungsdruck, d.h. bei sogenanntem gedrosselten Betrieb, steigen diese Emissionen gegenüber Saugrohrdrücken über Umgebungsdruck merklich an. Verantwortlich dafür ist ein leicht erhöhter Schmieröleintrag bei Umkehrung der Druckverhältnisse zwischen Brennraum und Kurbelgehäuse [22]. Es bleibt festzuhalten, dass die Konzentrationen der kohlenstoffhaltigen Schadstoffe mindestens eine, in der Regel sogar um zwei Größenordnungen unter den für  $\text{NO}_x$  und  $\text{H}_2$  beobachteten Konzentrationen liegen. Damit bewegen sie sich nicht nur nahe der Nachweisgrenze, sondern auch weit unterhalb der gesetzlichen Grenzwerte.

### 2.3 Einfluss verschiedener Motorbetriebszustände

Wie oben erwähnt handelt es sich bei einem mit Wasserstoff und homogenem Luft-Kraftstoff-Gemisch betriebenen Ver-

brennungsmotor um einen Ottomotor, d. h. die Verbrennung wird mithilfe eines Zündfunken an einer Zündkerze gezündet. Daraus ergibt sich mit dem sogenannten Zündzeitpunkt (ZZP) eine wesentliche Steuergröße, um den Zeitpunkt der Verbrennung zu beeinflussen. Der ZZP sollte zeitlich so früh gelegt werden, dass sich wirkungsgradgünstige Verbrennungsschwerpunktlagen im Bereich 6 bis 8°KW nach dem oberen Totpunkt ergeben. Insbesondere höhere Lasten erweisen sich an dieser Stelle jedoch als problematisch, da bei tendenziell frühen und damit wirkungsgradgünstigen Zündzeitpunkten eine unerwünschte Selbstzündung des Gemisches in Form von Klopfen auftreten kann [23]. Dieses Klopfen sollte unbedingt vermieden werden, da es zu einer massiven Schädigung des Motors führen kann. Abb. 3 zeigt exemplarisch auf, wie stark die Stickoxidemissionen vom Luftverhältnis und der Verbrennungsschwerpunktlage bzw. dem Zündzeitpunkt abhängen. Dargestellt sind die Last als indizierter Mitteldruck  $p_{mi}$  und die  $\text{NO}_x$ -Emissionen in ppm für zwei Luftverhältniszahlen von 2,0 (rot) und 2,2 (blau) für eine konstante Gaseinblasemasse von  $1,9 \text{ kg h}^{-1}$ . Sehr deutlich sind die mit wirkungsgradgünstigen Zündzeitpunkten signifikant ansteigenden Stickoxidemissionen zu erkennen. Schon eine moderate Abmagerung ermöglicht eine substantielle Reduzierung der  $\text{NO}_x$ -Rohemissionen bei weiterhin wirkungsgradgünstigem Verbrennungsschwerpunkt (vgl. hierzu Abb. 3 Zündzeitpunkt  $-20^\circ \text{nZOT}$  oder früher).



**Abbildung 3.** Einfluss des Zündzeitpunktes auf a) Last  $p_{mi}$  und b)  $\text{NO}_x$ -Emissionen bei konstanter Luft- und Kraftstoffmasse. Rot:  $\lambda = 2,0$ ; blau:  $\lambda = 2,2$  (mit Genehmigung entnommen aus [22]).

Der entscheidende Einfluss des Abmagerungsgrades des homogenen Luft-Kraftstoffgemisches wird nochmals deutlicher, wenn für ähnliche Lasten – d. h. konstanter Wasserstoffmassenstrom – verschiedene Luftverhältniszahlen miteinander verglichen werden, wie dies in Abb. 4 dargestellt ist. Ein Vergleich der  $\text{NO}_x$ -Emissionen bei ca. 4 bar  $p_{\text{mi}}$  (graue, rote und violette Werte) macht die Abnahme der  $\text{NO}_x$ -Emissionen ab einem Luftverhältnis von  $\lambda = 2$  unabhängig vom Zündzeitpunkt deutlich erkennbar. Mit einem Luftverhältnis von 2,4 lässt sich die Stickoxidkonzentration im Abgas auf Werte bis in den einstelligen ppm-Bereich reduzieren. Dennoch können durch die vorteilhaften Verbrennungseigenschaften von Wasserstoff Zündzeitpunkte realisiert werden, die weiterhin indizierte Wirkungsgrade von größer 40 % – und damit nur ca. ein Prozentpunkt niedriger als bei einem  $\lambda$  von 2,0 – bieten.

## 2.4 Zusätzliche Maßnahmen zur Minimierung des Schadstoffausstoßes

Neben der Möglichkeit, die Stickoxidbildung durch magere Gemische zu reduzieren, ist die Abgasrückführung (AGR) beim Verbrennungsmotor eine bekannte und etablierte Methode, die auch beim Wasserstoffmotor zur Anwendung kommen kann [24]. Eine Rückführung von Abgasen erhöht dabei den Inertgasanteil im Brennraum und senkt so die Verbrennungsspitzen-temperatur. Aufgrund der Kraftstoffzusammensetzung enthält das Abgas zwar kein  $\text{CO}_2$  mit hoher spezifischer Wärmekapazität, dafür aber relativ hohe Anteile an Wasser. Diese hohe Feuchte im Abgas kann bei Temperaturen, wie sie typischerweise in der Ansaugluft auftreten, schon bei moderaten Abgasrückführaten von unter 15 % in Abhängigkeit der Temperatur zu Kondensation und damit zum Anfallen von flüssigem Wasser im Saugrohr führen.

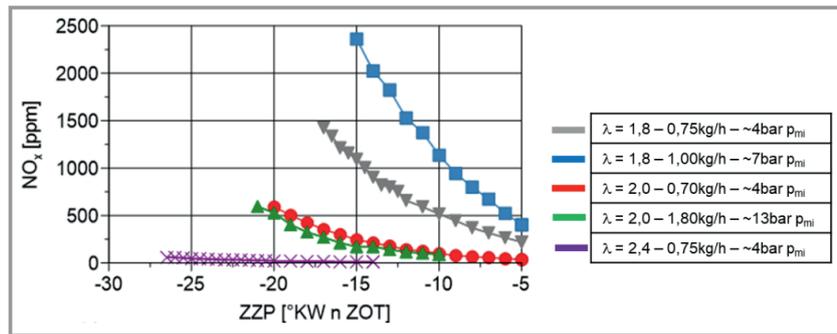


Abbildung 4. Einfluss des Zündzeitpunktes und der Luftverhältniszahl auf die  $\text{NO}_x$ -Emissionen für unterschiedliche Lasten (mit Genehmigung entnommen aus [22]).

ren. Um mit diesem Kondensat entsprechend umgehen zu können, müssen für diesen Fall entsprechende konstruktive Maßnahmen im Saugrohr vorgesehen sein.

Wie die in Abb. 5 dargestellten Daten aufzeigen, lässt sich schon mit moderaten AGR-Raten, die im Folgenden durch die relative Feuchte der Ansaugluft quantifiziert sind, habhaft Einfluss auf die Stickoxidemissionen nehmen. Durch eine relative Feuchte der Ansaugluft von 70 % rel. lassen sich die Stickoxidemissionen im betrachteten Fall bis um den Faktor 10 reduzieren und zusätzlich durch die reduzierte Klopfneigung wirkungsgradgünstigere Verbrennungsschwerpunktlagen durch Frühverstellung des Zündzeitpunkts erzielen.

## 3 Maßnahmen zur Abgasreinigung

Die bereits zusammengefassten motorischen Maßnahmen können die Abgaszusammensetzung positiv beeinflussen und erlauben insbesondere eine Minimierung der  $\text{NO}_x$ -Emissionen. Um auch zukünftigen Anforderungen an ein nahezu emissionsfreies Mobilitätskonzept gerecht zu werden, müssen jedoch zusätzliche Maßnahmen zur Abgasreinigung ergriffen werden. Die folgenden Abschnitte erläutern daher die vielversprechendsten Maßnahmen insbesondere für Nutzfahrzeug- und Langstrecken Anwendungen.

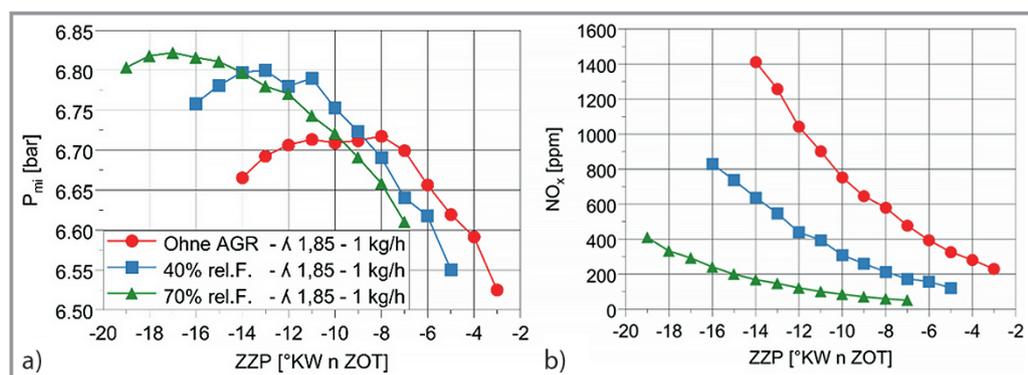


Abbildung 5. Einfluss des Zündzeitpunktes und der relativen Ansaugluftfeuchte auf die  $\text{NO}_x$ -Emissionen (mit Genehmigung entnommen aus [22]).

### 3.1 Selektive katalytische Reduktion von Stickoxiden mit Ammoniak (NH<sub>3</sub>-SCR)

Aufgrund ihrer hohen Effizienz hat sich die selektive katalytische Reduktion (selective catalytic reduction, SCR) als Abgasnachbehandlungskonzept zur Stickoxidminderung in sauerstoffreichen Abgasen von mager betriebenen Diesel- und Erdgasmotoren durchgesetzt [25–27]. Diese bewährte Technologie lässt sich prinzipiell auch auf mager betriebene Wasserstoffmotoren übertragen. Der im Rahmen der SCR typischerweise als Reduktionsmittel verwendete Ammoniak (NH<sub>3</sub>) stammt aus einer in den Abgasstrang eingespritzten Harnstoff-Wasser-Lösung (Handelsname AdBlue<sup>®</sup>), die durch die Thermolyse von Harnstoff (Gl. (1)) und anschließende Hydrolyse der dabei entstehenden Isocyanensäure (Gl. (2)) letztlich NH<sub>3</sub> freisetzt.

Thermolyse von Harnstoff:

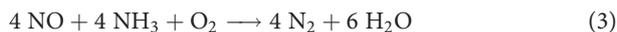


Hydrolyse von Isocyanensäure:

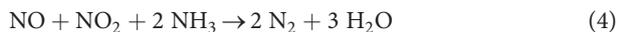


Mechanistisch hängt die selektive katalytische Reduktion stark vom Verhältnis von Stickstoffmonoxid (NO) und Stickstoffdioxid (NO<sub>2</sub>) ab. Da bei der motorischen Verbrennung überwiegend NO entsteht, ist zunächst vor allem die Standard-SCR zwischen NO und NH<sub>3</sub> (Gl. (3)) von Relevanz. Ein vor dem SCR-Katalysator platzierter Oxidationskatalysator, wie im Abgasstrang von Dieselmotoren üblich, kann der Einstellung eines NO/NO<sub>2</sub>-Verhältnisses von etwa 1:1 dienen, was die schnelle SCR (Gl. (4)) mit wesentlich höheren Reaktionsgeschwindigkeiten begünstigt. Noch größere NO<sub>2</sub>-Anteile sind aufgrund der dann dominierenden langsamen NO<sub>2</sub>-SCR (Gl. (5)) hingegen ebenso unerwünscht, wie die als Nebenreaktion auftretende Oxidation von Ammoniak (Gl. (6)), die Bildung des starken Treibhausgases Lachgas (N<sub>2</sub>O, Gl. (7)) oder die Bildung von festem Ammoniumnitrat (NH<sub>4</sub>NO<sub>3</sub>, Gl. (8)).

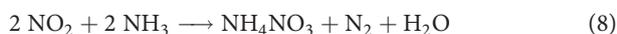
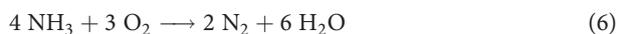
Standard-SCR:



Schnelle SCR:



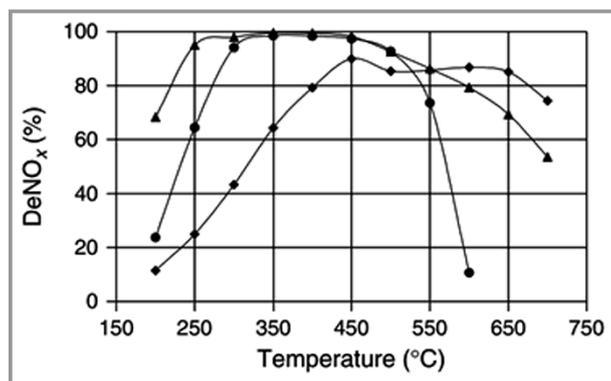
NO<sub>2</sub>-SCR:



Auch wenn der überwiegende Teil der der öffentlich zugänglichen Literatur im Zusammenhang mit NH<sub>3</sub>-SCR im Kontext der DeNOxierung von Dieselabgasen publiziert wurde, sind die dabei gewonnenen Erkenntnisse auch für die Abgasnachbehandlung von Wasserstoffmotoren relevant. Eine Katalysatordeaktivierung in Folge von im Dieselabgas enthaltenen Kohlenwasserstoffen [28, 29] oder Schwefelverbindungen [30–32] ist im Wasserstoffmotorabgas zwar nicht zu erwarten, das Erreichen einer hohen katalytischen Aktivität und Selektivität über breite Temperaturfenster gepaart mit hydrothormaler Langzeitstabilität bleibt hingegen auch im Abgasstrang des Wasserstoffmotors eine Herausforderung.

Für die NH<sub>3</sub>-SCR kommen heute meist Vanadium-basierte VWTi-Systeme mit der chemischen Grundzusammensetzung V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/WO<sub>3</sub>-TiO<sub>2</sub> oder ionenausgetauschte Zeolithe als Katalysatormaterialien zum Einsatz [27, 33, 34]. Der historisch erste industriell eingesetzte VWTi-SCR-Katalysator zeigt in einem relativ breiten Temperaturbereich gute Aktivität, verfügt jedoch aufgrund des volatilen Vanadiums, das bereits bei abgastypischen Bedingungen beispielsweise in Form der flüchtigen Hydroxidspezies VO(OH)<sub>3</sub> emittiert werden kann [35–37], nur über eingeschränkte hydrothermale Stabilität. Der Austrag von Vanadium führt dabei nicht nur zu einem Aktivitätsverlust, sondern stellt aufgrund seiner Einstufung als möglicherweise karzinogener Stoff [38] auch eine ernste Gesundheitsgefährdung dar. Abhängig von der Präparationsmethode und den zugesetzten Promotoren und Stabilisatoren reichen die Angaben zur thermischen Stabilität von etwa 550 °C [31] bis zu ca. 700 °C [39, 40]. Im Grundsatz ist eine moderate thermische beziehungsweise hydrothermale Alterung von VWTi-Katalysatoren, wie sie auch im Abgas von Wasserstoffmotoren erwartet werden kann, jedoch nicht per se schlecht. Mehrere Studien zeigten, dass sich die Aktivität von VWTi-Katalysatoren bei tiefen Temperaturen infolge von Alterung sogar erhöhte [41, 42]. Diese Beobachtung wurde auf ein Sintern des Trägermaterials Titandioxid und die anschließende Bildung von im Tieftemperaturbereich besonders aktiven Vanadiumzentren zurückgeführt.

Im Gegensatz zu ihrem Vanadium-haltigen Pendant weisen ionenausgetauschte Zeolithe auf Nichtedelmetallbasis eine überlegene hydrothermale Stabilität auf [43] und gelten aufgrund des Verzichtes auf giftige Vanadiumkomponenten als wesentlich umweltfreundlichere Alternative [44]. Chemisch gesehen handelt es sich bei Zeolithen um kristalline Alumosilikate, die eine poröse Gerüststruktur mit zahlreichen Poren und/oder Kanälen aufweisen und die für SCR-Anwendungen meist mit Eisen (Fe) oder Kupfer (Cu) beladen werden. Wie bereits aus Abb. 6 hervorgeht, werden Fe-basierte Katalysatoren wie beispielsweise Fe/ZSM5 oder Fe/BEA aufgrund ihrer hohen Aktivität im Hochtemperaturbereich bevorzugt eingesetzt und zeichnen sich daneben auch durch eine geringe Tendenz zur Ammoniakoxidation und Nebenproduktbildung aus [33]. Kupfer kommt hingegen vor allem im Tieftemperaturbereich zum Einsatz und



**Abbildung 6.** NO<sub>x</sub>-Umsatz in Abhängigkeit von der Temperatur unter Standard-SCR Bedingungen (10 vol.-% O<sub>2</sub>, 5 vol.-% H<sub>2</sub>O, 1000 vol. ppm NO, variierender NH<sub>3</sub> und N<sub>2</sub> Gehalt, sodass 10 vol. ppm NH<sub>3</sub> Schlupf verbleiben) für die Katalysatoren (▲) Cu-ZSM5, (\*) V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/WO<sub>3</sub>-TiO<sub>2</sub> und (◆) Fe-ZSM5 (mit Genehmigung entnommen aus/reprinted with permission from [49], Copyright 2007 Elsevier).

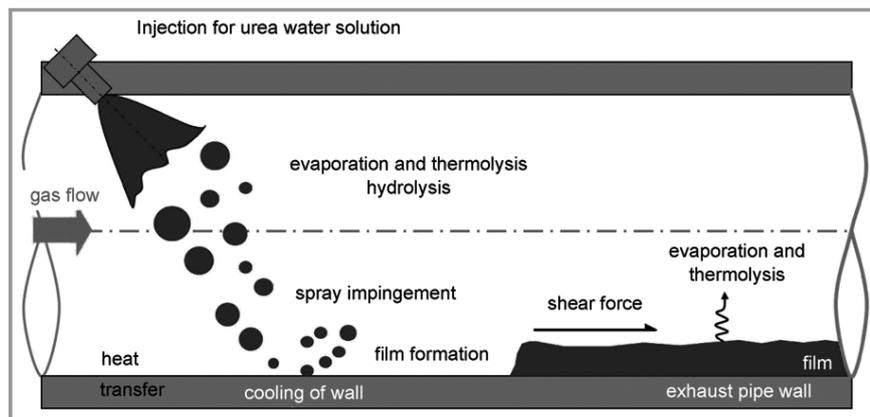
wird häufig mit kleinporigen Zeolithen wie beispielsweise SSZ-13 aus der Chabasit-Familie (CHA) kombiniert, die verglichen mit großporigeren Materialfamilien wie ZSM5 eine noch bessere hydrothermale Resistenz aufweisen [45–48].

Trotz der vorteilhaften Materialeigenschaften von Zeolithen kann eine hydrothermale Langzeitalterung zu einer Dealuminierung des Aluminosilikatgerüsts führen [50–52], eine Migration oder Veränderung der aktiven Eisen- und Kupferzentren hervorrufen [52–55] oder bei besonders hohen Temperaturen einen thermischen Kollaps der gesamten Gerüststruktur verursachen. Als Hauptursache für den mit einem längeren Betrieb einhergehenden Verlust an katalytischer Aktivität wurde dabei die Dealuminierung identifiziert [50, 51], die mit einer Verringerung der Brønsted-Azidität und Ammoniak-speicherfähigkeit in der Katalysatorstruktur einhergeht [56]. Letztere gewährleistet die lokale Verfügbarkeit des Reduktionsmittels Ammoniak an den aktiven Zentren, um beispielsweise eine kurzzeitige Unter- oder Überdosierung von Reduktionsmittel im dynamischen Betrieb bei schnellen Lastwechseln auszugleichen, sodass ein Verlust der Ammoniak-speicherfähigkeit die Zuverlässigkeit und Effizienz des gesamten Abgasnachbehandlungssystems reduziert.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass die bestehenden SCR-Katalysatorsysteme zwar grundsätzlich zur DeNO<sub>x</sub>ierung von Wasserstoffmotorabgasen geeignet sind, eine weitere Optimierung jedoch wünschenswert ist. Eine Herausforderung stellen einerseits die gerade beim Kaltstart geringen Abgastemperaturen dar, welche hohe Aktivität bereits bei tiefen Temperaturen erfordern,

andererseits stellt der hohe Wassergehalt von typischerweise über 15 Vol.-% im Wasserstoffmotorenabgas besondere Anforderungen an die hydrothermale Stabilität der Katalysatoren. Obleich durch den Einsatz von SCR-Katalysatoren nach aktuellem Stand der Technik schon unter Standard-SCR (Gl. (3)) Bedingungen ausreichende Stickoxidumsätze im Wasserstoffmotorabgas erwartet werden können, ist auch die Nutzung der schnellen SCR (Gl. (4)) durch Einsatz eines dedizierten Oxidationskatalysators denkbar. Dessen Funktion wäre in einem solchen Falle nicht nur die kontrollierte Bildung von NO<sub>2</sub> vor dem SCR-Katalysator, sondern auch die vollständige Oxidation von aus der teilweisen Verbrennung von motorischen Schmierstoffen resultierendem Kohlenstoffmonoxid (CO) und Kohlenwasserstoffen (KW<sub>s</sub>). Wird die aktuell gültige EURO VI Norm zu Grunde gelegt sind deren Konzentrationen von wenigen ppm [57] zwar auch ohne Oxidationskatalysator unproblematisch, die Forderung der EU und der amerikanischen Umweltschutzbehörde EPA nach einem Zero Emission Vehicle (ZEV), also einem praktisch emissionsfreien Fahrzeug, könnten dann jedoch nicht erfüllt werden. Andererseits kann NO<sub>2</sub> bei tiefen Temperaturen mit NH<sub>3</sub> zu festem NH<sub>4</sub>NO<sub>3</sub> reagieren, das sich im Abgasstrang ablagert und bei Temperaturen über 250 °C wieder zu klimaschädlichem N<sub>2</sub>O und Wasser zersetzt.

Eine ähnliche Problematik ergibt sich auch bei der Dosierung der als Ammoniakquelle verwendeten Harnstoff-Wasser-Lösung (HWL) [58]. Wie in Abb. 7 schematisch dargestellt, kann sich infolge der HWL-Einspritzung ein Flüssigkeitsfilm an den Wänden des Abgasstrangs bilden, der gerade bei transientem Betrieb und wiederkehrend geringen Temperaturen nicht immer vollständig verdampft. Mit steigender Betriebsdauer können so Harnstoff und seine Zersetzungsprodukte akkumulieren, was die Bildung fester und teilweise unlöslicher Ablagerungen zur Folge hat [59–61]. Diese können nicht nur die Gleichverteilung des Reduktionsmittels NH<sub>3</sub> behindern, sondern auch die Kanäle des SCR-Katalysators verstopfen und einen ausgeprägten Gegendruck im Abgasstrang erzeugen.



**Abbildung 7.** Illustration der physikochemischen Prozesse bei Einspritzung einer Harnstoff-Wasser-Lösung in den Abgasstrang (mit Genehmigung entnommen aus [62], Copyright 2010 Wiley-VCH).

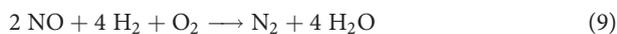
### 3.2 Wasserstoff-assistierte selektive katalytische Reduktion von Stickoxiden mit Ammoniak

Neben den ablagerungsbedingten Herausforderungen erfordert die Thermolyse von Harnstoff darüber hinaus eine Temperatur von mindestens 133 °C, die Hydrolyse läuft sogar erst bei Temperaturen über 180 °C hinreichend schnell ab [63–65]. Gerade bei tiefen Abgastemperaturen während des Kaltstarts wird so die Bildung von Ablagerungen und die Emission von Schadstoffen begünstigt. Neben der Verwendung von Ammoniak als alleinigem Reduktionsmittel wurde in der wissenschaftlichen Literatur daher auch die H<sub>2</sub>-assistierte NH<sub>3</sub>-SCR immer wieder diskutiert, die mit zunehmender Verbreitung des Wasserstoffmotors nicht nur akademische, sondern auch technische Relevanz erlangen könnte. Dabei wird neben Ammoniak auch Wasserstoff in den Abgasstrang dosiert, um Stickoxide selektiv über einem Silber-basierten Katalysator zu reduzieren, der einem klassischen NH<sub>3</sub>-SCR-Katalysator vorgeschaltet ist [66–71]. Hierdurch lässt sich das Temperaturfenster, in dem die selektive katalytische Reduktion angewandt werden kann, signifikant erweitern: Ag/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> beispielsweise zeigt in Anwesenheit von H<sub>2</sub> schon unter 200 °C gute NO<sub>x</sub>-Umsätze [66, 69]. Neben der Notwendigkeit, Wasserstoff über ein geeignetes System zur Verfügung zu stellen, galt insbesondere die hohe Schwefelanfälligkeit der Silberkatalysatoren als großes Hemmnis für eine breite Anwendung der H<sub>2</sub>-assistierte NH<sub>3</sub>-SCR für Dieselanwendungen [72] – Problematiken, die im Wasserstoffmotor entfallen.

Auch wenn die katalytischen und reaktionstechnischen Herausforderungen nach aktuellem Stand der Technik durch geeignete Wahl der Katalysatorzusammensetzung und der Betriebsparameter beherrschbar erscheinen und zu erwarten ist, dass die Technik aufgrund der Erfahrungen mit dieselmotorischer Abgasnachbehandlung zeitnah einsatzbereit ist, erfordert die NH<sub>3</sub>-SCR Technologie stets ein komplexes Einspritz- und Steuersystem sowie einen zusätzlichen Tank für die Harnstoff-Wasser-Lösung. Dies nimmt gerade in mobilen Anwendungen nicht nur wertvollen Platz ein, sondern treibt auch die Kosten. Eleganter wäre es daher, zumindest mittelfristig den ohnehin als Kraftstoff mitgeführten Wasserstoff als alleiniges Reduktionsmittel zu verwenden.

### 3.3 Selektive katalytische Reduktion von Stickoxiden mit Wasserstoff (H<sub>2</sub>-SCR)

Für die selektive katalytische Reduktion von Stickoxid (NO) durch Wasserstoff (H<sub>2</sub>) im Sauerstoffüberschuss wird häufig Gl. (9) als Reaktionsgleichung angegeben [73]. Diese setzt sich formal jedoch aus zwei Konkurrenzreaktionen zusammen, nämlich der reinen H<sub>2</sub>-SCR Reaktion (Gl. (10)) und der H<sub>2</sub>-Oxidation (Gl. (11)).



H<sub>2</sub>-SCR:



H<sub>2</sub>-Oxidation:



Darüber hinaus bilden unerwünschte Nebenreaktionen gesundheitsschädliches NO<sub>2</sub> (Gl. (12)) und NH<sub>3</sub> (Gl. (13)) sowie das starke Treibhausgas N<sub>2</sub>O (Gl. (14)), sodass bei der Entwicklung effizienter Katalysatoren neben der reinen Aktivität auch die Selektivität eine große Rolle spielt.



Auch wenn es einige durchaus ermutigende Studien zu nichtedelmetallbasierten Katalysatorsystemen für die H<sub>2</sub>-SCR gibt, beschäftigt sich der größere Teil der Forschungsarbeiten mit Katalysatoren auf Edelmetallbasis, welche meist deutlich bessere Stickoxidkonversionsraten ermöglichen [73, 74]. Während Platin die größte katalytische Aktivität bezüglich NO-Reduktion mit H<sub>2</sub> zeigt, erlaubt die Verwendung des etwas weniger aktiven Palladiums die größte Selektivität zu N<sub>2</sub> [75, 76]. Zur Steigerung von Aktivität und Selektivität wurden nicht nur bimetallische Systeme wie beispielsweise Palladium-Iridium [77] oder die Kombination von Platin mit Übergangsmetallen vorgeschlagen [78], sondern auch eine Vielzahl an Trägermaterialien getestet, die von Metalloxiden bis hin zu Zeolithen reichen [79–85].

Die Mehrheit der bislang untersuchten H<sub>2</sub>-SCR-Katalysatoren weist vor allem bei tiefen Temperaturen unterhalb von 250 bis 300 °C eine gute katalytische Aktivität und Stabilität auf. Abb. 8a zeigt beispielhaft eine für die H<sub>2</sub>-SCR typische hügelartige NO-Konversionskurve: Über einem Pd/V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/TiO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Katalysator führen steigende Temperaturen zunächst zu einem ausgeprägten Anstieg des NO-Umsatzes, bevor dieser nach Durchlaufen eines Maximums bei etwa 220 °C wieder zurückgeht [86]. Eine Änderung der Katalysatormaterialien verändert zwar das Umsatzmaximum sowie die Produktselektivitäten, der hügelartige Trend der NO<sub>x</sub>-Umsatzkurve bleibt jedoch meist unabhängig von der Katalysatorzusammensetzung erhalten. Der Einfluss des für Wasserstoffmotorabgase typischen großen Wassergehalts auf das Katalysatorverhalten ist dagegen differenzierter zu bewerten. Während Wasser auf Pt/Mg-Ce-O oder Pd/V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/TiO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> in Abhängigkeit der Temperatur entweder nur sehr geringe oder sogar positive Einflüsse hinsichtlich Aktivität, Selektivität und Stabilität zeigte [79, 86], beobachteten Zhao et al. [84] eine wasserinduzierte Verringerung des NO-Umsatzes über Pt/HZSM5 bei Temperaturen über 120 °C. Zusammenfassend lässt sich folglich festhalten, dass der komplexe Einfluss von Wasser,

der stark von der Temperatur, der Abgaszusammensetzung selbst und den verwendeten Katalysatormaterialien abhängt, für eine Applikation der H<sub>2</sub>-SCR-Technologie in Serie weitergehend systematisch untersucht werden muss.

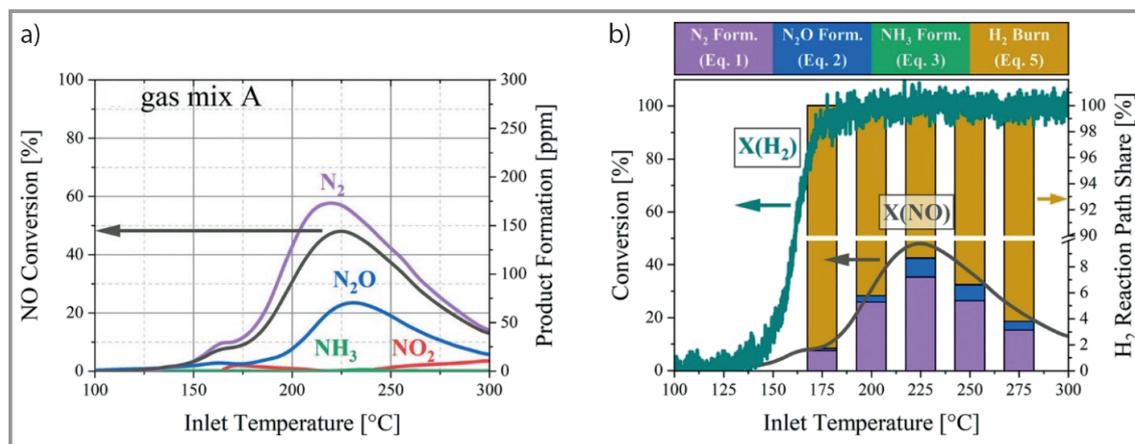
Wie Abb. 8b unterstreicht, stellt über edelmetallbasierten Katalysatoren die H<sub>2</sub>-Verbrennung die größte Konkurrenzreaktion dar, da der eigentlich für die Reduktion von NO<sub>x</sub> benötigte Wasserstoff praktisch vollständig verbraucht wird. Steigende Temperaturen begünstigen die Wasserstoffverbrennung, weswegen für Temperaturbereiche oberhalb von 250 bis 300 °C in der einschlägigen Literatur derzeit noch kein H<sub>2</sub>-SCR-Katalysatorsystem existiert, das unter realitätsnahen Bedingungen zufriedenstellende NO<sub>x</sub>-Umsätze gewährleistet. Da solche Katalysatoren bei einer Etablierung von Wasserstoffmotoren in Nutzfahrzeuganwendungen mittelfristig benötigt werden, kann von zeitnahen Forschungsanstrengungen zur Entwicklung von Hochtemperatur-H<sub>2</sub>-SCR-Katalysatoren ausgegangen werden. Aufgrund ihrer geringeren Aktivität bei der H<sub>2</sub>-Verbrennung und geringen Kosten bieten sich Katalysatoren auf Nichtedelmetallbasis in diesem Zusammenhang an.

Dass bei der technischen Umsetzung einer Abgasreinigung mittels H<sub>2</sub>-SCR weder ein zusätzlicher Reduktionsmitteltank nötig ist noch Dosierungsschwierigkeiten und Ablagerungsbildung infolge tiefer Temperaturen eine Rolle spielen, vereinfacht das Abgasnachbehandlungssystem erheblich und ermöglicht einen Einsatz der deNO<sub>x</sub>-Technologie auch schon während des Kaltstarts. Daneben sollte eine katalysatornahe Dosierung von Wasserstoff in den Abgasstrang gewählt werden, um eine Oxidation noch vor dem Katalysator zu vermeiden. Hierfür geeignete kommerzielle Gasinjektoren sind bereits verfügbar und eine H<sub>2</sub>-Dosierung mittels Gasinjektor wurde bereits erfolgreich am Motorprüfstand erprobt [87, 88]. Dennoch wird eine breite Anwendung eine weitergehende Optimierung der Durchmischung von Wasserstoff und Abgas im Realsystem erfordern.

## 4 Perspektiven und Herausforderungen

Wie in den vorherigen Kapiteln aufgezeigt, können moderne Wasserstoffmotoren einen wertvollen und vor allem vergleichsweise zügigen Beitrag zu einer umwelt- und klimafreundlicheren Mobilität auf der Langstrecke und im Nutzfahrzeugsektor liefern. Eine umweltfreundliche Fortführung der Verbrennungsmotorentechnologie durch den Einsatz von Wasserstoffmotoren würde insbesondere im Schwerlastbereich kurzfristig einen signifikanten Beitrag zu den CO<sub>2</sub>-Reduktionszielen leisten. Da häufig bereits vorhandene Komponenten und Fertigungsstrukturen genutzt werden können, fallen notwendige Investitionen im Vergleich zur ebenfalls mit Wasserstoff betriebenen Brennstoffzelle moderat aus und auch motorische Aspekte nähren die Hoffnung auf einen konkurrenzfähigen Einsatz von Wasserstoffmotoren. Eine Abmagerung des Gemisches in der Brennkammer, eine Optimierung des Zündzeitpunkts sowie eine Abgasrückführung erlauben bereits motorseitig große Potentiale zur Minimierung der NO-Rohemissionen, welche letztlich die einzig kritischen Schadstoffkonzentrationen darstellen.

Auch wenn eine geeignete Wahl der Betriebsparameter die Rohemissionen des per se sehr sauberen Wasserstoffmotors minimiert, können die avisierten Ziele eines nahezu emissionsfreien Antriebs allein durch motorische Maßnahmen nicht erreicht werden. Erst die Implementierung der in der Schadstoffreduktion magerer Abgase etablierten SCR-Technologie kann ein Abgas mit extrem geringem Schadstoffgehalt gewährleisten. Da auf dem Gebiet der H<sub>2</sub>-SCR noch Entwicklungsarbeit geleistet werden muss, können NO<sub>x</sub>-Emissionen des Wasserstoffmotors zunächst durch die Kombination von motorischen Maßnahmen und den Einsatz eines in der mageren Abgasnachbehandlung vielfach verwendeten NH<sub>3</sub>-SCR-Katalysatorsystems effektiv minimiert werden, was eine zügige Etablierung von Motorapplikationen im Serienmaßstab erleichtert. Gerade um den



**Abbildung 8.** a) Temperaturabhängiger NO-Umsatz und b) Reaktionspfadbeiträge während der H<sub>2</sub>-SCR über 1 Gew.-% Pd/5 Gew.-% V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/20 Gew.-% TiO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> in 1000 vol. ppm NO/5000 vol. ppm H<sub>2</sub>/10 vol.-% O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> bei einer Raumgeschwindigkeit von 60 000 h<sup>-1</sup> (mit Genehmigung entnommen aus/reprinted with permission from [86] Copyright 2021 American Chemical Society).

immer strengeren Emissionsgrenzwerten auch bei tiefen Abgastemperaturen, zum Beispiel während des Kaltstarts, gerecht zu werden, ist dabei auch eine Kombination aus  $H_2$ -SCR und  $NH_3$ -SCR denkbar.

Um die Mitführung eines AdBlue®-Tanks mitsamt Peripherie und die mit klassischer  $NH_3$ -SCR einhergehenden Einschränkungen wie Ablagerungsbildung jedoch zu vermeiden, bleibt die Entwicklung einer Technologie zur Anwendung von Wasserstoff als Reduktionsmittel über den gesamten Temperaturbereich ein lohnenswertes Ziel. Die Aktivität von edelmetallbasierten  $H_2$ -SCR-Katalysatoren, die statt des klassischerweise verwendeten Ammoniaks den ohnehin mitgeführten Treibstoff Wasserstoff als Reduktionsmittel nutzen, reicht nach aktuellem Stand der Technik zumindest in tiefen Temperaturbereichen unter  $250\text{ }^\circ\text{C}$  grundsätzlich aus, um auch zukünftige  $NO_x$ -Grenzwerte zu unterschreiten. Eine weitere Steigerung der katalytischen Aktivität durch Optimierung der Katalysatorzusammensetzung dürfte zwar nur eine Frage der Zeit sein, wichtiger könnte jedoch die Verbesserung der Selektivität werden. Gängige  $H_2$ -SCR-Katalysatoren auf Platin- und Palladiumbasis verbrauchen mehr als 90% des eigentlich für die Sickoxidreduktion benötigten Wasserstoffs in der konkurrierenden  $H_2$ -Oxidationsreaktion [81, 86], sodass eine Selektivitätssteigerung die Treibstoffökonomie wesentlich verbessern könnte. Nicht zuletzt die Vermeidung von Nebenprodukten wird bei der (Weiter-)Entwicklung von  $H_2$ -SCR-Katalysatoren eine zentrale Rolle spielen. Insbesondere eine Umwandlung von toxischem  $NO$  in Lachgas ( $N_2O$ ), das einen mehr als 300-mal stärkeren Treibhauseffekt als  $CO_2$  hat, würde die Vorteile eines eigentlich klimaneutralen Kraftstoffs wie Wasserstoff erheblich schmälern. Auch wenn die technischen Hürden bis zu einer serienreifen  $H_2$ -SCR-Technologie anspruchsvoll sind und noch Entwicklungsarbeit geleistet werden muss, können angesichts der stetig steigenden Forschungsanstrengungen auf dem Gebiet der wasserstoffmotorischen Mobilität zeitnahe Fortschritte erwartet werden.

Die gemeinsame Forschung wird gefördert durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) – SFB 1441 – Projektnummer 426888090, wofür sich die Autoren herzlich bedanken. Die Autoren danken außerdem M. Borchers, P. Fürst und K. Keller (ITCP, KIT), I. Scherbej (IKFT, KIT), S. Bernhardt und M. Bucherer (IFKM, KIT) sowie L. Zimmermann (Eberspächer Gruppe GmbH & Co. KG) für die erfolgreiche Zusammenarbeit auf dem Gebiet der Wasserstoffmotoren und deren Abgasnachbehandlung. M. Casapu und J.-D. Grunwaldt danken die Autoren herzlich für die langjährige und erfolgreiche Zusammenarbeit am Abgaszentrum Karlsruhe. Open Access Veröffentlichung ermöglicht und organisiert durch Projekt DEAL.



**Patrick Lott** promovierte nach seinem Chemiestudium und einem Forschungsaufenthalt an der University of Houston 2019 am Karlsruher Institut für Technologie (KIT). Seither ist er am Lehrstuhl Chemische Technik des KIT Gruppenleiter für Emissionskontrolle und übernahm 2020 auch die Position des Chief Technology Officers am Abgaszentrum

Karlsruhe. Sein Forschungsinteresse umfasst darüber hinaus das Verständnis von Reaktionsprozessen und Reaktionsmechanismen mittels In-situ-Messtechniken, die Hochtemperaturkatalyse sowie die Weiterentwicklung nachhaltiger chemisch-technischer Prozesse zur Vermeidung von Kohlenstoffemissionen.



**Uwe Wagner** promovierte nach seinem Maschinenbaustudium und einer Diplomarbeit bei Ricardo Consulting Engineers Ltd. in Großbritannien 2006 an der Universität Karlsruhe (TH). In wechselnden Funktionen prägte er seither die Forschung am Institut für Kolbenmaschinen (IFKM) des Karlsruher Instituts für Technologie

(KIT) und ist seit 2013 als Forschungsgruppenleiter für die Erforschung und Weiterentwicklung von Motorsystemen, alternativen Kraftstoffen und Konzepten zur Abgasnachbehandlung verantwortlich.



**Thomas Koch** promovierte nach seinem Maschinenbaustudium 2002 an der ETH Zürich. Nach 10 Jahren bei der Daimler AG in verschiedenen Positionen in der Nutzfahrzeugmotorenentwicklung wurde er 2013 Leiter des Instituts für Kolbenmaschinen (IFKM) am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) und ist seither verantwortlich für

verbrennungsmotorische Belange in den Bereichen Forschung, Lehre und Innovation. Die anwendungsorientierte Forschung zu einer weiteren und signifikanten Verbesserung der Eigenschaften von Verbrennungsmotoren gehört dabei zu seinen Tätigkeitsschwerpunkten.



**Olaf Deutschmann** promovierte nach seinem Physikstudium in Magdeburg und Berlin 1996 an der Universität Heidelberg. Anschließend forschte er in Minneapolis und Los Alamos und habilitierte sich 2001 in Physikalischer Chemie in Heidelberg. Seit 2003 ist er Professor für Chemische Technik und Direktor am Institut für

Technische Chemie und Polymerchemie des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT). Er ist Mitbegründer des Abgaszentrums Karlsruhe am KIT. Ziel der Forschung seines Lehrstuhls ist die Entwicklung klimafreundlicher und emissionsarmer chemischer Technologien sowie die Bereitstellung von Digitalisierungswerkzeugen. Unter seiner Führung wurden die Softwarepakete DETCHEM und CaRMen entwickelt.

### Formelzeichen

$p_{mi}$  [bar] indizierter Mitteldruck

### Griechische Symbole

$\lambda$  [-] Verbrennungsluftverhältnis

### Abkürzungen

AGR	Abgasrückführung
CZ	Cetanzahl
HWL	Harnstoff-Wasser-Lösung
MZ	Methanzahl
ROZ	Research Oktanzahl
SCR	selektive katalytische Reduktion (selective catalytic reduction)
ZEV	Zero Emission Vehicle
ZOT	Zündung oberer Totpunkt
ZZP	Zündzeitpunkt

### Literatur

- [1] Vereinte Nationen, *Paris Agreement*, [https://treaties.un.org/doc/Treaties/2016/02/20160215\\_06-03\\_PM/Ch\\_XXVII-7-d.pdf](https://treaties.un.org/doc/Treaties/2016/02/20160215_06-03_PM/Ch_XXVII-7-d.pdf) (Zugriff am 15. Juli 2021)
- [2] *Renewable Raw Materials: New Feedstocks for the Chemical Industry* (Eds: R. Ulber, D. Sell, T. Hirth), Wiley-VCH, Weinheim **2011**.
- [3] *Eine Wasserstoffstrategie für ein klimaneutrales Europa*, Europäische Kommission, Brüssel **2020**.
- [4] *Die Nationale Wasserstoffstrategie*, Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi), Berlin **2020**.
- [5] T. Koch, J. Sauer, T. Hirth, O. Toedter, *Sonderprojekte ATZ/MTZ* **2019**, 24 (S2), 28–31. DOI: <https://doi.org/10.1007/s41491-019-0050-y>
- [6] K. Mayr, F. Hofer, G. Ragowsky, W. Gruber, A. Arnberger, A. Kabza, P. Wolf, M. Schmidt, L. Jörissen, *Systemvergleich zwischen Wasserstoffverbrennungsmotor und Brennstoffzelle im schweren Nutzfahrzeug*, E-Mobil BW, Stuttgart **2021**.
- [7] B. Tanç, H. T. Arat, E. Baltacioğlu, K. Aydın, *Int. J. Hydrogen Energy* **2019**, 44 (20), 10120–10128. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.10.112>
- [8] R. Seiffert, in *Die Ära Gottlieb Daimlers*, 1. Aufl., Teubner-Vieweg, Wiesbaden **2009**.
- [9] W. Enke, M. Gruber, L. Hecht, B. Staar, *Motortech. Z.* **2007**, 68, 446–453. DOI: <https://doi.org/10.1007/bf03227411>
- [10] A. Burkert, *Motortech. Z.* **2017**, 78, 8–13. DOI: <https://doi.org/10.1007/s35146-017-0029-8>
- [11] M. Klell, H. Eichseder, A. Trattner, *Wasserstoff in der Fahrzeugtechnik: Erzeugung, Speicherung, Anwendung*, 4. Aufl., Springer Vieweg, Wiesbaden **2018**.
- [12] R. Backhaus, *Motortech. Z.* **2019**, 80, 10–15. DOI: <https://doi.org/10.1007/s35146-019-0091-5>
- [13] Energie Informationsdienst, *EID Tankstellen-Special 01/2021*, DVV Media Group, Hamburg **2021**.
- [14] ADAC, *So viele Tankstellen gibt es in Deutschland*, [www.adac.de/verkehr/tanken-kraftstoff-antrieb/deutschland/tankstellen-in-deutschland/](http://www.adac.de/verkehr/tanken-kraftstoff-antrieb/deutschland/tankstellen-in-deutschland/) (Zugriff am 15. Juli 2021)
- [15] H2 MOBILITY Deutschland GmbH & Co. KG, *Netzausbau live – Der aktuelle Stand für Deutschland*, <https://h2.live/> (Zugriff am 15. Juli 2021)
- [16] M. Klell, H. Eichseder, A. Trattner, in *Wasserstoff in der Fahrzeugtechnik: Erzeugung, Speicherung, Anwendung*, Springer Vieweg, Wiesbaden **2018**.
- [17] T. Wallner, Entwicklung von Brennverfahrenskonzepten für einen PKW-Motor mit Wasserstoffbetrieb, *Dissertation*, TU Graz **2004**.
- [18] M. Gutmann, Die Entwicklung eines Gemischbildungs- und Verbrennungsverfahrens für Wasserstoffmotoren mit innerer Gemischbildung, *Dissertation*, Universität Stuttgart **1984**.

- [19] C. Vogel, *Motortech. Z.* **1999**, *60*, 704–708. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF03226534>
- [20] H. Rottengruber, E. Berger, G. Kiesgen, M. Klütting, in *Gasfahrzeuge II* (Ed: O. Dingel), Expertverlag, Renningen **2006**.
- [21] H. Eichlseder, P. Grabner, K. Hadl, C. Hepp, R. Luef, *Internationales Wiener Motorensymposium*, Wien, April **2013**.
- [22] U. Wagner, S. Bernhardt, in *Iste Konferenz „Der Wasserstoffmotor“*, Karlsruhe, Oktober **2020**.
- [23] R. Heindl, H. Eichlseder, C. Spuller, F. Gerbig, K. Heller, *SAE Int. J. Engines* **2009**, *2* (1), 1231–1250.
- [24] D. Thomas Koch, A. Sousa, D. Bertram, in *Proc. of 2019 JSAE/SAE Powertrains, Fuels and Lubricants*, SET International, Warrendale, PA **2019**.
- [25] T. V. Johnson, in *Urea-SCR Technology for DeNOx After Treatment of Diesel Exhausts* (Eds: I. Nova, E. Tronconi), Springer, New York **2014**.
- [26] D. Chatterjee, K. Rusch, in *Urea-SCR Technology for DeNOx After Treatment of Diesel Exhausts* (Eds: I. Nova, E. Tronconi), Springer, New York **2014**.
- [27] B. Guan, R. Zhan, H. Lin, Z. Huang, *Appl. Therm. Eng.* **2014**, *66* (1–2), 395–414. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2014.02.021>
- [28] F. Gramigni, U. Iacobone, N. D. Nasello, T. Selleri, N. Usberti, I. Nova, *Ind. Eng. Chem. Res.* **2021**, *60*, 6403–6420. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.0c05894>
- [29] L. Zheng, M. Casapu, M. Stehle, O. Deutschmann, J.-D. Grunwaldt, *Top. Catal.* **2019**, *62*, 129–139. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11244-018-1097-9>
- [30] Y. Cheng, C. Montreuil, G. Cavataio, C. Lambert, in *Proc. of SAE World Congress & Exhibition*, SET International, Warrendale, PA **2009**.
- [31] J. W. Girard, C. Montreuil, J. Kim, G. Cavataio, C. Lambert, *SAE Int. J. Fuels Lubr.* **2009**, *1* (1), 488–494. DOI: <https://doi.org/10.4271/2008-01-1029>
- [32] L. Zhang, D. Wang, Y. Liu, K. Kamasamudram, J. Li, W. Epling, *Appl. Catal. B.* **2014**, *156–157*, 371–377. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2014.03.030>
- [33] S. Brandenberger, O. Kröcher, A. Tissler, R. Althoff, *Catal. Rev. Sci. Eng.* **2008**, *50* (4), 492–531. DOI: <https://doi.org/10.1080/01614940802480122>
- [34] W. Shan, H. Song, *Catal. Sci. Technol.* **2015**, *5*, 4280–4288. DOI: <https://doi.org/10.1039/c5cy00737b>
- [35] S. Hu, J. D. Herner, M. Shafer, W. Robertson, J. J. Schauer, H. Dwyer, J. Collins, T. Huai, A. Ayala, *Atmos. Environ.* **2009**, *43* (18), 2950–2959. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2009.02.052>
- [36] D. M. Chapman, *Appl. Catal. A.* **2011**, *392* (1–2), 143–150. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apcata.2010.11.005>
- [37] Z. G. Liu, N. A. Ottinger, C. M. Cremeens, *SAE Int. J. Engines.* **2012**, *5* (2), 663–671. DOI: <https://doi.org/10.4271/2012-01-0887>
- [38] *Cobalt in Hard Metals and Cobalt Sulfate, Gallium Arsenide, Indium Phosphide and Vanadium Pentoxide*, International Agency for Research on Cancer (IARC), Lyon **2006**.
- [39] T. Maunula, A. Viitanen, T. Kinnunen, K. Kannianen, in *Proc. of the Symposium on International Automotive Technology*, SET International, Warrendale, PA **2013**.
- [40] T. Maunula, T. Kinnunen, K. Kannianen, A. Viitanen, A. Savimaki, in *Proc. of the SAE 2013 World Congress & Exhibition*, SET International, Warrendale, PA **2013**.
- [41] I. Nova, L. Dall'Acqua, L. Lietti, E. Giamello, P. Forzatti, *Appl. Catal. B.* **2001**, *35* (1), 31–42. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0926-3373\(01\)00229-6](https://doi.org/10.1016/S0926-3373(01)00229-6)
- [42] A. Marberger, M. Elsener, R. J. G. Nuguid, D. Ferri, O. Kröcher, *Appl. Catal. A.* **2019**, *573*, 64–72. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apcata.2019.01.009>
- [43] G. Cavataio, J. Girard, J. E. Patterson, C. Montreuil, Y. Cheng, C. K. Lambert, in *Proc. of the SAE World Congress & Exhibition*, SET International, Warrendale, PA **2007**.
- [44] F. Liu, L. Xie, X. Shi, H. He, in *Zeolites in Sustainable Chemistry: Synthesis, Characterization and Catalytic Applications* (Eds: F.-S. Xiao, X. Meng), Springer, Heidelberg **2016**.
- [45] J. H. Kwak, R. G. Tonkyn, D. H. Kim, J. Szanyi, C. H. F. Peden, *J. Catal.* **2010**, *275* (2), 187–190. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcat.2010.07.031>
- [46] S. J. Schmieg, S. H. Oh, C. H. Kim, D. B. Brown, J. H. Lee, C. H. F. Peden, D. H. Kim, *Catal. Today.* **2012**, *184* (1), 252–261. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2011.10.034>
- [47] Q. Ye, L. Wang, R. T. Yang, *Appl. Catal. A.* **2012**, *427–428*, 24–34. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apcata.2012.03.026>
- [48] P. G. Blakeman, E. M. Burkholder, H. Y. Chen, J. E. Collier, J. M. Fedeyko, H. Jobson, R. R. Rajaram, *Catal. Today.* **2014**, *231*, 56–63. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2013.10.047>
- [49] O. Kröcher, *Stud. Surf. Sci. Catal.* **2007**, *171*, 261–289. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0167-2991\(07\)80210-2](https://doi.org/10.1016/S0167-2991(07)80210-2)
- [50] G. Cavataio, H. W. Jen, J. R. Warner, J. W. Girard, J. Y. Kim, C. K. Lambert, *SAE Int. J. Fuels Lubr.* **2009**, *1* (1), 477–487. DOI: <https://doi.org/10.4271/2008-01-1025>
- [51] J. M. Fedeyko, H. Y. Chen, T. H. Ballinger, E. C. Weigert, H. L. Chang, J. P. Cox, P. J. Andersen, in *Proc. of the SAE World Congress & Exhibition*, SET International, Warrendale, PA **2009**.
- [52] S. Brandenberger, O. Kröcher, M. Casapu, A. Tissler, R. Althoff, *Appl. Catal. B.* **2011**, *101* (3–4), 649–659. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2010.11.006>
- [53] D. W. Fickel, R. F. Lobo, *J. Phys. Chem. C.* **2010**, *114* (3), 1633–1640. DOI: <https://doi.org/10.1021/jp9105025>
- [54] L. Wang, J. R. Gaudet, W. Li, D. Weng, *J. Catal.* **2013**, *306*, 68–77. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcat.2013.06.010>
- [55] A. R. Fahami, T. Günter, D. E. Doronkin, M. Casapu, D. Zengel, T. H. Vuong, M. Simon, F. Breher, A. V. Kucherov, A. Brückner, et al., *React. Chem. Eng.* **2019**, *4*, 1000–1018. DOI: <https://doi.org/10.1039/c8re00290h>
- [56] O. Kröcher, M. Devadas, M. Elsener, A. Wokaun, N. Söger, M. Pfeifer, Y. Demel, L. Mussmann, *Appl. Catal. B.* **2006**, *66* (3–4), 208–216. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2006.03.012>
- [57] D. Seboldt, M. Mansbart, P. Grabner, H. Eichlseder, *Motortech. Z.* **2021**, *82*, 46–51. DOI: <https://doi.org/10.1007/s35146-020-0614-0>
- [58] F. Birkhold, U. Meingast, P. Wassermann, O. Deutschmann, in *Proc. of the SAE 2006 World Congress & Exhibition*, SET International, Warrendale, PA **2006**.
- [59] M. Börnhorst, S. Langheck, H. Weickenmeier, C. Dem, R. Suntz, O. Deutschmann, *Chem. Eng. J.* **2019**, *377*, 119855. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2018.09.016>
- [60] C. Kuntz, C. Kuhn, H. Weickenmeier, S. Tischer, M. Börnhorst, O. Deutschmann, *Chem. Eng. Sci.* **2021**, *246*, 116876. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2021.116876>
- [61] M. Börnhorst, O. Deutschmann, *Prog. Energy Combust. Sci.* **2021**, *87*, 100949. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.peccs.2021.100949>
- [62] O. Deutschmann, A. G. Konstandopoulos, in *Handbook of Combustion* (Eds: M. Lackner, F. Winter, A. K. Agarwal), Wiley-VCH, Weinheim **2010**.
- [63] H. L. Fang, H. F. M. DaCosta, *Appl. Catal. B.* **2003**, *46* (1), 17–34. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0926-3373\(03\)00177-2](https://doi.org/10.1016/S0926-3373(03)00177-2)
- [64] W. Yang, Z. Chen, J. Zhou, Z. Huang, K. Cen, *Ind. Eng. Chem. Res.* **2011**, *50*, 7990–7997. DOI: <https://doi.org/10.1021/ie200697r>

- [65] S. Tischer, M. Börnhorst, J. Amsler, G. Schoch, O. Deutschmann, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2019**, *21*, 16785. DOI: <https://doi.org/10.1039/c9cp01529a>
- [66] M. Richter, R. Fricke, R. Eckelt, *Catal. Lett.* **2004**, *94* (1–2), 115–118. DOI: <https://doi.org/10.1023/b:catl.0000019340.51510.ba>
- [67] K. Shimizu, A. Satsuma, *Appl. Catal. B.* **2007**, *77* (1–2), 202–205. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2007.07.021>
- [68] H. Kannisto, X. Karatzas, J. Edvardsson, L. J. Pettersson, H. H. Ingelsten, *Appl. Catal. B.* **2011**, *104* (1–2), 74–83. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2011.02.026>
- [69] D. E. Doronkin, S. Fogel, S. Tamm, L. Olsson, T. S. Khan, T. Bligaard, P. Gabrielsson, S. Dahl, *Appl. Catal. B.* **2012**, *113–114*, 228–236. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2011.11.042>
- [70] S. Fogel, D. E. Doronkin, J. W. Høj, P. Gabrielsson, S. Dahl, *Top. Catal.* **2013**, *56*, 14–18. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11244-013-9921-8>
- [71] S. Tamm, S. Fogel, P. Gabrielsson, M. Skoglundh, L. Olsson, *Appl. Catal. B.* **2013**, *136–137*, 168–176. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2013.01.064>
- [72] D. E. Doronkin, T. S. Khan, T. Bligaard, S. Fogel, P. Gabrielsson, S. Dahl, *Appl. Catal. B.* **2012**, *117–118*, 49–58. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2012.01.002>
- [73] Z. Hu, R. T. Yang, *Ind. Eng. Chem. Res.* **2019**, *58* (24), 10140–10153. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.9b01843>
- [74] P. G. Savva, C. N. Costa, *Catal. Rev. Sci. Eng.* **2011**, *53* (2), 91–151. DOI: <https://doi.org/10.1080/01614940.2011.557964>
- [75] A. Ueda, T. Nakao, M. Azuma, T. Kobayashi, *Catal. Today.* **1998**, *45* (1–4), 135–138. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0920-5861\(98\)00261-2](https://doi.org/10.1016/S0920-5861(98)00261-2)
- [76] P. Granger, F. Dhainaut, S. Pietrzik, P. Malfoy, A. S. Mamede, L. Leclercq, G. Leclercq, *Top. Catal.* **2006**, *39* (1–2), 65–76. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11244-006-0039-0>
- [77] J. Li, G. Wu, N. Guan, L. Li, *Catal. Commun.* **2012**, *24*, 38–43. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.catcom.2012.03.014>
- [78] W. Sun, Z. Wang, Q. Wang, W. Q. Zaman, L. Cao, X.-Q. Gong, J. Yang, *Chem. Commun.* **2018**, *54*, 9502. DOI: <https://doi.org/10.1039/c8cc05279d>
- [79] C. N. Costa, A. M. Efstathiou, *Environ. Chem. Lett.* **2004**, *2* (2), 55–58. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10311-004-0071-x>
- [80] M. Machida, S. Ikeda, D. Kurogi, T. Kijima, *Appl. Catal. B.* **2001**, *35* (2), 107–116. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0926-3373\(01\)00243-0](https://doi.org/10.1016/S0926-3373(01)00243-0)
- [81] F. J. P. Schott, P. Balle, J. Adler, S. Kureti, *Appl. Catal. B.* **2009**, *87* (1–2), 18–29. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2008.08.021>
- [82] M. Leicht, F. J. P. Schott, M. Bruns, S. Kureti, *Appl. Catal. B.* **2012**, *117–118*, 275–282. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2012.01.023>
- [83] G. G. Olympiou, A. M. Efstathiou, *Chem. Eng. J.* **2011**, *170* (2–3), 424–432. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2011.01.001>
- [84] X. Zhao, X. Zhang, Y. Xu, Y. Liu, X. Wang, Q. Yu, *J. Mol. Catal. A: Chem.* **2015**, *400*, 147–153. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molcata.2015.02.013>
- [85] Z. Savva, K. C. Petalidou, C. M. Damaskinos, G. G. Olympiou, V. N. Stathopoulos, A. M. Efstathiou, *Appl. Catal. A.* **2021**, *615*, 118062. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apcata.2021.118062>
- [86] M. Borchers, K. Keller, P. Lott, O. Deutschmann, *Ind. Eng. Chem. Res.* **2021**, *60* (18), 6613–6626. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.0c05630>
- [87] D. T. Koch, E. Eßer, S. Kureti, A. Sousa, *Motortech. Z.* **2020**, *81*, 32–39. DOI: <https://doi.org/10.1007/s35146-020-0234-8>
- [88] J. Krishnanunni, H. Bhanekar, D. Chugh, D. Bhatia, L. M. Das, *Int. J. Hydrogen Energy.* **2020**, *45* (41), 22125–22137. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.05.212>