

Modellierung der Co-Fällungskristallisation bei der Synthese Kupfer-basierter Katalysatoren für die Methanol-Katalyse

Typ: Bachelor-/Masterarbeit (numerisch), dementsprechender Zeitaufwand: 3 – 6 Monate

Beginn der Arbeit: ab sofort

Betreuer: M.Sc. David Guse

Aufgabensteller: Prof. Dr.-Ing. Matthias Kind

Motivation und Zielsetzung:

Für die Synthese der essentiellen Grundchemikalien Methanol und Dimethylether aus Synthesegas werden Katalysatoren benötigt. Für die Reaktion sind Kupfer-basierte Katalysatoren geeignet. Diese können u.a. durch Co-Fällungskristallisation mehrerer Metalle aus Metallsalz-Lösung und basischer Lösung hergestellt werden. Die nachgeschalteten Operationen, um aus den Fällungspartikeln geeignetes Katalysatormaterial zu erhalten, sind das Altern, Waschen, Trocknen, Kalzinieren, Pressen und Reduzieren.

In einer Kooperation des TVT mit dem Institut für Katalysatorforschung und -technologie (IKFT) wird die kontinuierliche Synthese metallischer Katalysatoren weiterentwickelt und die Korrelation zwischen Fällungsparametern sowie den weiteren Syntheseschritten und den Katalysatoreigenschaften erforscht. Neben experimentellen Arbeiten ist der Aufbau eines Modells erforderlich, um die ablaufenden Prozesse mathematisch beschreiben und theoretisch fundiert verstehen zu können.



Abbildung 1: Alterung des Fällungsprodukts

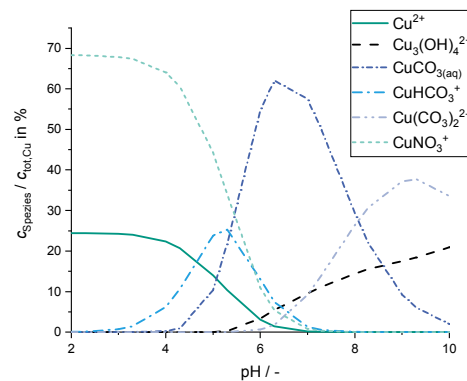


Abbildung 2: Spezies in Abhängigkeit des pH-Werts

Ziel dieser Arbeit ist es, Teilelemente eines Mehrkomponentenmodells für die Co-Fällung in MATLAB aufzubauen. Je nach Umfang der Arbeit (Master/ Bachelor) sind dabei verschiedene Aufgabenpakete zu bearbeiten. Zunächst soll die Berechnung der Sättigungsgrade des Systems mittels Komponentenbilanzen implementiert werden. Hierfür steht Open Source Software zur Verfügung, die es zu erweitern gilt. In einem zweiten Schritt ist das Modell um eine Populationsbilanz zu erweitern. Die Zielgrößen sind Partikelanzahl, -größenverteilung und Feststoffzusammensetzung.

Je nach persönlichem Interesse können Zeitpunkt und Fokus der Arbeit nach Absprache angepasst werden. Vorkenntnisse in MATLAB werden empfohlen, aber nicht vorausgesetzt. Bei Interesse gerne jederzeit melden.

Kontakt:

M.Sc. David Guse

david.guse@kit.edu

Tel.: 0721-608- 45643