

## Aufbau eines Kristallisationsmodells aus Populations- und Stoffmengenbilanzen für die Co-Fällung von Kupfer-Katalysatoren

**Typ:** Masterarbeit (numerisch, ggf. experimenteller Anteil)

**Beginn der Arbeit:** ab sofort, Zeitaufwand: 6 Monate

**Betreuer:** M.Sc. David Guse

**Aufgabensteller:** Prof. Dr.-Ing. Matthias Kind

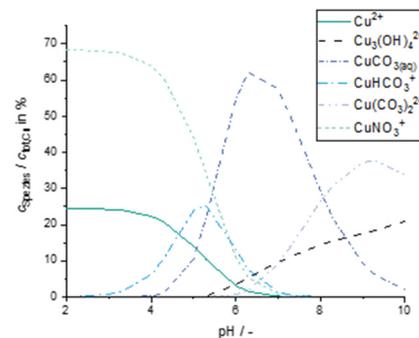
### Motivation und Zielsetzung:

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

In einer Kooperation des TVT mit dem Institut für Katalyseforschung 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 im Labor und Modellaufbau



Matlab 



Abbildung 2: Spezies (aq) in Abhängigkeit des pH-Werts

Ziel dieser Arbeit ist es, ein Mehrkomponentenmodell für die Co-Fällung in python oder MATLAB aufzubauen. Dieses soll aus einer Kopplung von Populationsbilanzen für die Feststoffphasen und einer Stoffmengenbilanz für die Flüssigphase bestehen. Für die dafür benötigten Stoffdaten und zu berechnenden Übersättigungen kann auf die Ergebnisse und Berechnungen einer Bachelorarbeit zurückgegriffen werden. Zielgrößen sind Partikelanzahl, -größenverteilung und Feststoffzusammensetzung. Je nach Fokussierung der Arbeit sind neben den numerischen Arbeitspaketen sind auch einzelne experimentelle Validierungsexperimente denkbar.

Zeitpunkt und Fokus der Arbeit können entsprechend des individuellen Interesses angepasst werden. Bei Interesse an der Arbeit gerne jederzeit melden.

### Kontakt:

M.Sc. David Guse

[david.guse@kit.edu](mailto:david.guse@kit.edu)

Tel.: 0721-608- 45643