

Masterarbeit

Prof. Dr.-Ing. Ulrich Nieken
 Böblinger Straße 78
 70199 Stuttgart

Modellierung der Katalysatoralterung durch Kohlenstoffbildung am Beispiel der Propandehydrierung

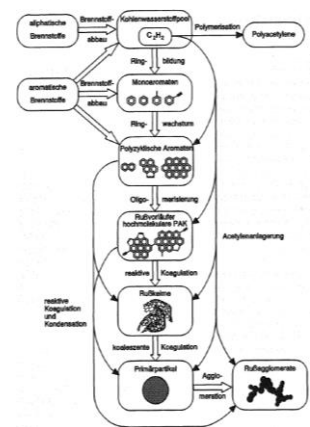
Ansprechpartner
[M.Sc. Jörn Matthies](#)

Stuttgart, 15.10.2020

Motivation

In der chemischen Industrie treten durch die Umstellung der Kohlenwasserstoffchemie auf CO₂-freie Reaktionsschritte vermehrt Probleme mit Verblockung und Deaktivierung des Katalysators durch Kohlenstoffablagerungen auf. Hinzu kommen zahlreiche etablierte Prozesse, die nur durch regelmäßige Regeneration mit Oxidationsmitteln dauerhaft betrieben werden können. Beispielhaft hierfür ist das thermische Cracken von langkettigen Kohlenwasserstoffen bei dem massive Kohlenstoffablagerungen nach wenigen Betriebsstunden zu einem Verschließen der Rohrreaktoren führen kann.

Durch die stete Weiterentwicklung von detaillierten Reaktionsmechanismen ist es möglich die Bildung von Ausgangsstoffen, sog. Precursors, für die Entstehung von Kohlenstoffablagerungen aus polyaromatischen Kohlenwasserstoffen zu beschreiben. So ist es möglich die Bildung von unerwünschten Nebenprodukten zu modellieren und die Prozessbedingungen a-priori so zu optimieren, dass die Betriebszeiten eines Reaktors deutlich verlängert werden können.



Aufgabenstellung

Ziel der Arbeit ist es, ein vorhandenes Modell mit einer validierten Gasphasenkinetik um die Interaktion mit einer katalytischen Oberfläche zu erweitern. Die Ergebnisse sollen an Messungen zur Propandehydrierung überprüft werden. Für Durchführung der Arbeit ist die Toolbox CANTERA vorgesehen.

Im Rahmen der Arbeit sollen folgende Aufgaben behandelt werden:

- Einarbeiten in die Fragestellung und Literaturrecherche zum Thema Kohlenstoffbildung auf katalytischen und nichtkatalytischen Oberflächen
- Einarbeiten in bestehende CANTERA Simulationen
- Erweiterung des Modells um eine Gasphasen-Oberflächen-Wechselwirkung
- Implementierung der Propandehydrierung
- Validierung der Ergebnisse an Messergebnissen



Erforderliche Qualifikationen & Vorkenntnisse

Grundkenntnisse in der Theorie der Reaktionskinetik (CRT 1 und 2).

Gute Programmierkenntnisse und viel Spaß am Modellieren. Idealerweise Kenntnisse in der Anwendung von Python oder MATLAB.

