

## Masterarbeit

# Modellierung von Alterungsprozessen in neuartigen CO-freien Reaktionssystemen

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

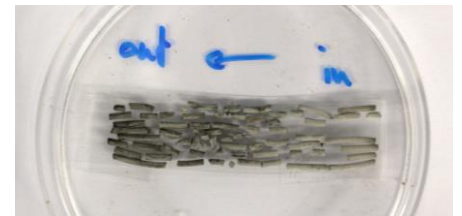
**Ansprechpartner**  
M.Sc. Jörn Matthies  
Stuttgart, 04.02.2022

## Motivation

Die Umstellung traditioneller chemischer Prozesse auf die Nutzung CO<sub>2</sub> freier Prozessführung und Strom aus erneuerbaren Energiequellen als Energieträger, macht neue katalytische Systeme notwendig. Da in der Hochtemperaturreaktionstechnik mit Kohlenwasserstoffen als Ausgangsstoff die meisten etablierten Katalysatoren durch eine partielle Oxidation von Ablagerungen, wie Kohlenstoff, im Betrieb freigehalten werden, müssen bei CO<sub>2</sub> freien Prozessen andere Wege gefunden werden, um eine Deaktivierung der Katalysatoroberfläche zu verhindern.

Die Dehydrierung von Propan ist ein Prozess, der beispielhaft für dieses Problem steht. Hier tritt beim sauerstofffreien Betrieb starke Rußbildung auf, die zu einer langsamen Deaktivierung führt. Neue Katalysatorsysteme aus einer Kombination von Zeolith und Platin haben sich als besonders geeignet herausgestellt, um die katalytische Oberfläche über lange Zeiträume vor Deaktivierungen zu schützen.

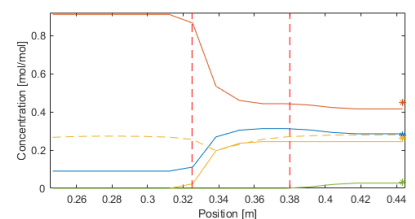
Experimentelle Arbeiten haben einen großen Einfluss der Betriebsbedingungen auf die Deaktivierung und Alterung des eingesetzten Katalysators gezeigt. Dabei konnte unter anderem auch eine örtliche Abhängigkeit der Kohlenstoffbildung nachgewiesen werden. Bei den Reaktionsbedingungen findet sowohl eine katalytische Bildung von Kohlenstoff auf den Aktiven Zentren statt als auch eine passive Bildung von Ablagerungen aus der Gasphase heraus.



Experimentelle Proben mit Gradienten in der Kohlenstoffbildung.

## Aufgabenstellung

Im Rahmen einer Masterarbeit sollen die Reaktionsbedingungen aus den Experimenten strukturiert ausgewertet werden und ein beschreibendes Modell entwickelt werden, um mehr Informationen über den zugrundeliegenden Mechanismus zu gewinnen und eine Auslegungsgrundlage für chemische Prozesse zu schaffen. Dazu kann auf ein bestehendes validiertes Simulationsmodell zurückgegriffen werden, welches die homogene Gasphasenreaktion abbildet.



Simulationsergebnisse der Konzentrationsverläufe in einem Laborkinetikreaktor.

## Gewünschte Qualifikationen & Vorkenntnisse

- Freude am Erlernen neuer Lösungsmethoden
- Kreativität und lösungsorientiertes Arbeiten
- Erfahrungen im Programmieren (Matlab / Python / C)