

Bachelor/Masterarbeit

„Modellierung und Validierung von Adsorptionsprozessen in FAU-Zeolithen“

Für viele Prozesse der chemischen Industrie ist der Einsatz geeigneter Adsorbentien von zentraler Bedeutung, da die Materialeigenschaften einen entscheidenden Einfluss auf Trennleistung und Prozessstabilität haben. Für die Entwicklung adsorptiver Trennverfahren ist ein fundiertes Verständnis der Wechselwirkungen zwischen Adsorptivmolekülen und FAU-Zeolithen von zentraler Bedeutung. Numerische Simulationsmodelle ermöglichen es, diese Wechselwirkungen auf atomarer Ebene zu untersuchen und experimentelle Messungen gezielt zu ergänzen.

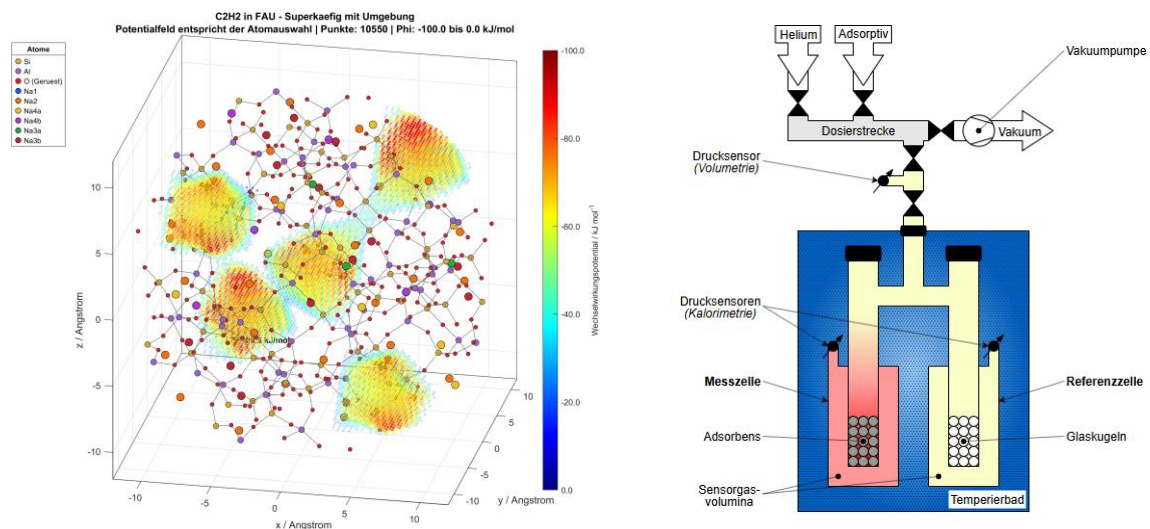


Abbildung 1: Schematische Darstellung des Versuchsaufbaus (rechts), Modellierung von Wechselwirkungen von Ethin und FAU Zeolithen (links)

Ziel der Abschlussarbeit ist die Weiterentwicklung und Validierung eines bestehenden MATLAB-Simulationsmodells zur Beschreibung der Adsorption in FAU-Zeolithen. Der Schwerpunkt liegt auf der Literaturrecherche zu etablierten Modellierungsansätzen, der Erweiterung und Optimierung des vorhandenen Modells sowie der Implementierung zusätzlicher physikalischer Wechselwirkungen. Abschließend sollen die Simulationsergebnisse mit eigenen volumetrischen und kalorimetrischen Adsorptionsmessungen verglichen und hinsichtlich ihrer Aussagekraft bewertet werden.

Beginn: Ab sofort

Dauer: 3 - 6 Monate (Vollzeit)

Betreuer: Anastasia Rosenberg, M.Sc. und Hendrik Löchte, M.Sc.
(anastasia.rosenberg@uni-due.de; hendrik.loechte@uni-due.de)