

**Masterarbeit  
für Herrn/Frau**

26. Mai 2020

-----  
**Matrikel-Nr. -----****Thema: Entwicklung eines Einzelpartikelmodells für die Synthese höherer Alkohole in geometrischen Feststoffkatalysatorpartikeln und Katalysatorschüttungen****Topic: *Development of a single particle model for the synthesis of higher alcohols over a geometric solid catalyst and bulk*****Aufgabenstellung:**

Zur Beschreibung von heterogen katalytischen Reaktionen werden meist makrokinetische Ansätze entwickelt, bei denen die Reaktionsrate von der Temperatur, Druck und Gaszusammensetzung abhängt. Die Parameter dieser Ansätze werden mittels mehrerer Versuchsreihen bestimmt. Hierbei werden Versuchsbedingungen gewählt, bei denen der Einfluss von Transportprozessen innerhalb des Katalysators minimiert wird. Sollen nun auf Basis dieser kinetischen Modelle Prozesse in technischen Reaktoren beschrieben werden, muss aufgrund der Größe der Katalysatorpartikel der Einfluss von Diffusion und Wärmeleitung im Korn auf die Reaktionsraten berücksichtigt werden.

Ziel der Arbeit ist die Entwicklung eines Modells zur Beschreibung von Wärme- und Stofftransport in Katalysatorpartikeln. Im zweiten Schritt soll das Modell in ein vorhandenes CFD-Modell eines industriellen Festbettreaktors integriert werden. Das Festbettreaktormodell basiert auf dem CFD-Tool ANSYS FLUENT. Durch die Kombination beider Modelle kann eine detaillierte Auslegung auf der Größenskala eines industriellen Synthesereaktors erfolgen, wobei zusätzlich der Einfluss thermochemischer Transportprozesse innerhalb der Katalysatorkörner des Festbetts berücksichtigt wird.

Die Qualität und Verwendbarkeit des Einzelpartikelmodells soll mittels Sensitivitätsanalysen untersucht, an kugelförmigen, zylindrischen und hohlzylindrischen Katalysatorpartikeln erprobt bzw. bewertet werden. Die durchgeführten Arbeitsschritte, gewonnene Ergebnisse und die Funktionsweise des erstellten Modells sollen umfassend dokumentiert werden.

Weitere Einzelheiten sind mit dem Betreuer am RUB-LEAT abzusprechen.

Beginn der Arbeit: --.--.2020  
Prüfungsordnung: MB-MA  
Betreuer: M. Sc. Thomas Bujara

Prof. Dr.-Ing. V. Scherer

