



Masterarbeit

(Theoretisch)

Waste-to-X: Systematischer Vergleich und Modellierung von Reaktionsmechanismen bei der Vergasung von Reststoffen

Beschreibung:

Angesichts der klimabedingten Ressourcen- und Energiewende sowie der hohen Importabhängigkeit fossiler Rohstoffe, ist die Erschließung neuer Rohstoffe, wie z.B. biogener Reststoffe oder Kunststoff-Abfällen von größter Bedeutung. Das Schließen des Kohlenstoffkreislaufs stellt zudem einen wichtigen Aspekt zur nachhaltigeren Gestaltung der chemischen Industrie dar. Eine vielversprechende Möglichkeit liegt hierbei in der Flugstromvergasung zur Umwandlung von Reststoffen oder Biomassen zu hochqualitativem Synthesegas (H_2 & CO), welches anschließend z.B. in IGCC-Kraftwerken verstromt oder in katalytischen Synthesen beispielsweise zu Basischemikalien wie Methanol oder auch zu FT-Produkten umgesetzt werden kann.

Der vollständige Umsatz von Brennstoffen in Flugstromvergasern hängt maßgeblich von der heterogenen Reaktion zwischen Feststoff und Vergasungsmedium ab. Der komplexe Ablauf dieses komplexen Reaktionsschrittes bleibt ungeklärt, wobei diverse Reaktionsmechanismen in der Literatur vorgeschlagen werden. Die Qualität von Modellen zur Abbildung der Vergasung ist dementsprechend stark abhängig vom angewendeten Reaktionsmechanismus zur Beschreibung der Oberflächenreaktionen während der Vergasung.

Ziel dieser Arbeit ist es, verschiedene Reaktionsmechanismen zu vergleichen und die Modellierungsgüte mit experimentellen Daten zu bewerten. In einem ersten Schritt soll hierfür eine ausführliche, systematische Literaturrecherche hinsichtlich verfügbarer Reaktionsmechanismen und deren Anwendung durchgeführt werden. Des Weiteren sollen Modelle für unterschiedliche Mechanismen aufgebaut und deren Güte hinsichtlich der Abbildung von experimentell ermittelten Reaktionskinetiken erprobt werden. Die Ambition der Arbeit liegt darin für die Abbildung von Vergasungsreaktionen und -kinetiken geeignete Mechanismen zu identifizieren. Die Ergebnisse sollen mit der vorhandenen Literatur verglichen und schriftlich dokumentiert werden.

Anforderungen

- Selbstständige Arbeitsweise
- Zuverlässigkeit und Eigenverantwortung
- Programmierkenntnisse wünschenswert

Arbeitspakete:

- Einarbeitung in Reaktionskinetik insbesondere der Flugstromvergasung
- Systematische Untersuchung der Reaktionsmechanismen der Vergasung
- Aufbau von Modellen zur Kinetikmodellierung anhand verschiedener Reaktionsmechanismen
- Dokumentation der Arbeiten und regelmäßige Besprechung mit dem Betreuer

Beginn ab: 01.08.2025

Kontakt: M. Sc. Lukas Springmann

Raum: MW 3711

Tel.: 089 289 16292

Email: lukas.springmann@tum.de