

Modellierung der Methanolsynthese aus CO₂ in Membranreaktoren

Die Umwandlung von CO₂ in Methanol ist ein vielversprechender Weg für eine nachhaltige Kraftstoffproduktion und Kohlenstoffnutzung. Die herkömmliche Methanolsynthese ist jedoch gleichgewichtsbegrenzt, was zu einer unvollständigen Umwandlung führt und energieintensive Trennschritte erfordert. Membranreaktoren bieten einen neuartigen Ansatz zur Verbesserung der CO₂-Hydrierungseffizienz, indem sie selektiv Produkte (z. B. Wasser oder Methanol) entfernen oder Reaktanten kontrolliert einführen, wodurch sich das Reaktionsgleichgewicht verschiebt und die Umwandlungsraten erhöht werden.

$$CO_2 + 3H_2 \rightleftharpoons CH_3OH + H_2O$$
 $\Delta H_R^0 = -50 \frac{kJ}{mol}$

Das Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung und Simulation von Membranreaktorkonzepten für die Methanolsynthese aus CO₂ und H₂. Die Arbeit umfasst die Modellierung der Reaktionskinetik, des Stofftransfers und der Membrantrennleistung, um optimale Reaktorkonfigurationen zu ermitteln. Besonderes Augenmerk wird auf die Evaluierung verschiedener Membranmaterialien und Betriebsbedingungen gelegt, um Selektivität und Ausbeute zu verbessern. Es werden Computersimulationen durchgeführt, um die Prozesseffizienz membrangestützter Methanolsynthese zu analysieren.

Anforderung:

Selbständige Arbeitsweise Interesse an Reaktionsmodellierung Grundkenntnisse in MATLAB® oder Python wünschenswert Grundkenntnisse in OpenFOAM® wünschenswert





OpenVFOAM

Art und Umfang:

Masterarbeit, Semesterarbeit, Bachelorarbeit

Technische Universität München

School of Natural Sciences
Lehrstuhl I für Technische Chemie
Sahib Abdullayev
Lichtenbergstraße 4, 85748 Garching
Tel. +49 89 289 13513
s.abdullayev@tum.de

tc1.ch.tum.de