Lehrstuhl I für Technische Chemie
TUM School of Natural Sciences
Technische Universität München

Kinetische Modellierung der Methanoxidation

Durch die wachsende Nachfrage nach einem verbesserten Umwelt- und Klimaschutz werden auch in der maritimen Industrie die Emissionen immer weiter beschränkt. Eine Möglichkeit, um den Ausstoß von umweltschädlichen Stoffen wie Kohlenstoffdioxid, Stickoxiden oder Feinstaubpartikeln zu reduzieren, ist der Wechsel von konventionellen Dieselmotoren zu Dual Fuel- oder Gasmotoren. Bei Betrieb der Motoren mit Erdgas treten jedoch neue Herausforderungen auf, darunter vor allem die unvollständige Verbrennung von Methan. Da Methan ein sehr starkes Treibhausgas mit einer vielfachen Treibhauswirkung von Kohlenstoffdioxid ist, sollen die Methanemissionen weitestgehend gesenkt werden. Dazu soll mithilfe eines Katalysators das unverbrannte Methan zu Kohlenstoffdioxid umgewandelt werden.

$$\mathrm{CH_4} + 2\,\mathrm{O_2} \rightleftarrows \mathrm{CO_2} + 2\,\mathrm{H_2O} \qquad \Delta H_\mathrm{R}^0 = -802\,\mathrm{kJ/mol}$$

Für die Methanoxidation wurden bisher typischerweise Katalysatoren mit Platingruppenmetallen eingesetzt. Da diese jedoch sehr teuer sind, werden neue edelmetallfreie Katalysatorsysteme entwickelt. Diese können allerdings beim Reaktionsmechanismus sowie der Kinetik von den herkömmlichen in der Literatur untersuchten Edelmetallkatalysatoren abweichen. Daher sollen nun auch die neuen Systeme kinetisch untersucht werden, um eine Beschreibung für die Methanoxidationsrate aufstellen zu können. In dieser Arbeit soll ein empirisches kinetisches Modell nach dem Power-Law-Modell verwendet werden, das neben der Reaktionsgeschwindigkeit auch die Inhibierung durch Gasspezies, wie beispielsweise Wasser, berücksichtigt. Durch Fitten kinetischer Datensätze sollen benötigte Parameter wie die Aktivierungsenergie, Reaktionsordnungen und Arrhenius-Konstante mithilfe von MATLAB® regressiert und eine Modelldiskriminierung durchgeführt werden.

Vorkenntnisse und Anforderungen:
Selbstständiges Arbeiten
Interesse an Reaktionsmodellierung
Grundkenntnisse in MATLAB® empfehlenswert

Art und Umfang:
Semesterarbeit, Masterarbeit

Technische Universität München
TUM School of Natural Sciences
Lehrstuhl I für Technische Chemie
Anne Niederdränk
Lichtenbergstraße 4, 85748 Garching
Tel. +49 89 289 13508
anne.niederdraenk@ch.tum.de
www.tc1.ch.tum.de