

# **Beiträge zur Vorhersage der Adsorption von Phenolderivaten aus organischen Flüssigkeiten mit Aktivkohlen im Spurenbereich**

Aufgrund der stetig steigenden Nachfrage nach hochreinen Lösungsmitteln entwickelt sich die Adsorption aus der flüssigen Phase zu einem immer wichtiger werdenden thermischen Trennverfahren. Der Mangel an Stoffdaten und fehlende Vorhersagemodelle schränken die Anwendungsmöglichkeiten allerdings ein. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Adsorption von Phenolderivaten aus verschiedenen organischen Lösungsmitteln mit Hilfe von Aktivkohlen untersucht. Von zentralem Interesse war die Beantwortung der Frage nach dem quantitativen Einfluss verschiedener Lösungsmittel und Adsorptive auf den Adsorptionsprozess.

Zuerst wurde ein Messverfahren für Adsorptionsisothermen im Spurenbereich entwickelt und eine Datenbank für die Messdaten generiert. Die Konzentrationsanalytik erfolgte mit Hilfe einer HPLC-Anlage. Die Experimente wurden im Batchverfahren durchgeführt.

Es konnten drei Haupteinflussfaktoren identifiziert werden, die den Gesamtprozess bestimmen. Hierbei handelt es sich um strukturelle Moleküleigenschaften von Lösungsmittel und Adsorptiv, nämlich die  $\pi$ -Elektronendichte, die Polarität und der Grad an sterischer Komplexität. Es wurde an drei verschiedenen Aktivkohlen gezeigt, dass die beobachteten Phänomene in nahezu allen Fällen sowie in derselben Art und Weise auftreten.

Zudem wurden zwei einfach zu handhabende mathematische Modelle entwickelt, die beide geeignet sind, die Ergebnisse der Adsorption korrekt zu beschreiben und die Beladungen für ähnliche Stoffsysteme vorherzusagen.