

## **Selektivität von Probemolekülen bei der Adsorption an Aktivkohlen aus der flüssigen Phase**

Die Adsorption hat als Feinreinigungsverfahren große industrielle Bedeutung. Im Vergleich zu anderen thermischen Trennverfahren, wie Rektifikation, Extraktion oder Absorption, sind die physikalischen Vorgänge jedoch zumeist weniger gut verstanden. Auch sind industrielle Adsorptionsverfahren technologisch vielfach weniger reif als andere thermische Trennverfahren. Für eine effiziente Auslegung von Adsorptionsapparaten fehlt es oft sowohl an der Stoffdatenbasis, als auch an geeigneten Simulationsmodellen.

Speziell die Adsorption aus der flüssigen Phase an Aktivkohlen ist bisher ein in vielerlei Hinsicht unverstandenes Phänomen. Komplexe Wechselwirkungen an einer chemisch stark heterogenen Oberfläche sowie eine breite Porenradienverteilung tragen dazu bei. Vielfältige Anwendungen, insbesondere im Bereich der Trinkwasseraufbereitung, der Lösemittelrückgewinnung und der Goldindustrie, machen die Aktivkohle jedoch zu einem der bedeutendsten industriellen Adsorbentien. Gerade hier besteht daher ein Bedarf an Beiträgen zur Grundlagen- und Anwendungsforschung.

Bekanntermaßen beeinflusst die heterogene Oberflächenchemie der Aktivkohle das Ergebnis des Adsorptionsprozesses stark. Eine eindeutige Vorhersage, wie sich die Oberflächenchemie auf das Adsorptionsgleichgewicht auswirkt, kann jedoch meist nicht getroffen werden. Zwar existieren diverse physikalische und chemische Messverfahren, mit denen die Oberflächeneigenschaften der Aktivkohle charakterisiert werden können, jedoch liefert keine der bekannten Methoden ein umfassendes Bild der Oberflächenchemie. Oftmals sind nur qualitative Aussagen über die Oberflächeneigenschaften möglich. Eine Übertragung der Charakterisierungsergebnisse auf Simulationsmodelle wurde bisher nur selten versucht. Zumeist sind Simulationen auf die Interpolation von Messdaten mittels Isothermenmodellen beschränkt.

Ziel dieser Arbeit ist es, Beiträge zum Verständnis der Flüssigphasenadsorption an Aktivkohlen zu liefern. Dabei soll ein Charakterisierungsverfahren der Aktivkohleoberfläche entwickelt werden, das eine quantitative Beschreibung der Oberflächenchemie erlaubt. Die Ergebnisse sollen dann in ein thermodynamisches Gleichgewichtsmodell zur Berechnung des Adsorptionsexzesses integriert werden.