

Diss. Nr. 4746

**Entwicklung eines Modells
zur allgemeinen Beschreibung von
Diffusions-Adsorptions-Reaktions-Systemen**

ABHANDLUNG

zur Erlangung
der Würde eines Doktors der Technischen Wissenschaften
der
EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN HOCHSCHULE
ZÜRICH

vorgelegt von

ROLAND OTT
dipl. Ing.-Chem. ETH
geboren am 21. Februar 1941
von Brittnau (Kt. Aargau)

Angenommen auf Antrag von
Prof. Dr. H. Zollinger, Referent
Prof. Dr. P. Rys, Korreferent

Juris Druck + Verlag Zürich
1971

D. ZUSAMMENFASSUNG

- a. In den Kap. 1 - 3 wurde eine Einführung in das Gebiet der Diffusion und Adsorption gegeben. Es wurden hauptsächlich jene Gesichtspunkte hervorgehoben, welche für das Verständnis von Sorptionsprozessen von grundsätzlicher Bedeutung sind.
- b. Das Kap. 4 bildet den Kern der vorliegenden Arbeit: in ihm wurde ein allgemeines Diffusions-Immobilisierungs-Modell entwickelt, aus dem sich die bisher bestehenden Modelle zur Beschreibung spezifischer Diffusions-Adsorptions-Reaktions-Systeme als Grenzfälle ableiten lassen. Eine Analyse dieses Modells führte zu einfachen Kriterien, die es dem experimentell arbeitenden Chemiker erlauben, ohne grossen Aufwand festzustellen, ob und wann Diffusions- und/oder Adsorptionsvorgänge einen chemischen Prozess beeinflussen.
Die Erweiterung des 1-Komponentensystems auf ein Mehrkomponentensystem ermöglichte die Simulierung der Konkurrenzadsorption zweier Sorptive.
- c. Im Kap. 5 wurden die numerischen Methoden, die die Lösung der partiellen Differentialgleichungen ermöglichten, sowie die auftretenden Instabilitäten kurz beschrieben.
- d. Im praktischen Teil (vgl. Kap. 6 - 8) wurde auf das für die experimentelle Überprüfung des Diffusions-Immobilisierungs-Modells notwendige Sorbens-Sorptiv-Lösungsmittel-System eingegangen sowie die Durchführung der Isothermenbestimmung und der Diffusionsversuche beschrieben.
- e. Die mit Hilfe unseres Diffusions-Immobilisierungs-Modells berechneten Daten stimmten mit den experimentell gefundenen Resultaten überein. Dieses Ergebnis zeigt, dass das Modell praktisch anwendbar ist und ein gegebenes System beschreiben kann.