



# UNTERSUCHUNGEN ZUM MECHANISMUS DER FISCHER-TROPSCH-SYNTHESE IM PROFILREAKTOR

M. Sc. Florian Wolke, Dr. Erik Reichelt, Dr. Matthias Jahn

Die Fischer-Tropsch-Synthese ist eine zentrale Prozessstufe zahlreicher Power-to-X-Konzepte zur nachhaltigen Herstellung hochwertiger chemischer Produkte aus  $\text{CO}_2$  und  $\text{H}_2\text{O}$  unter Nutzung erneuerbarer Energien. Wesentliche Merkmale der Produktsynthese an eisenbasierten Katalysatoren, z. B. zur Erzeugung höherer Alkohole, sind das Vorliegen zahlreicher katalytisch aktiver Phasen, ein großes Reaktionsnetzwerk sowie ein Produktgemisch aus Kohlenwasserstoffen verschiedener Stoffgruppen und Kettenlängen. Aufgrund dieser Komplexität ist der zugrundeliegende Reaktionsmechanismus bisher nur unzureichend verstanden – dies erschwert die Prozessoptimierung nach ökologischen und ökonomischen Kriterien. Der Einsatz von in-situ-Analyseverfahren bietet einen vielversprechenden Zugang zu bisher nicht zugänglichen Informationen.

Das neuartige Reaktorkonzept des Profilreaktors erlaubt erstmals einen Blick ins Innere von Rohrreaktoren, so dass ablaufende Haupt-, Neben- und Parallelreaktionen direkt anhand der Produktverteilung beobachtbar sind. Zur Probennahme dient eine zentral im Katalysatorbett angeordnete Kapillare, welche relativ zur Katalysatorschüttung bewegt werden kann. Die hierüber entnommene Gasphase wird gaschromatographisch auf ihre Zusammensetzung untersucht. Das Ergebnis sind positionsaufgelöste Reaktionsprofile, die Rückschlüsse zulassen auf den Charakter des Kettenwachstums, auf kinetische Kenngrößen wie die Reaktionsrate, auf Readsorption sowie auf Sekundärreaktionen von Zwischenprodukten.

Durch Variation der Katalysatorzusammensetzung und der Betriebsbedingungen sind Aussagen zu den Struktur-Wirkungs-Beziehungen im Katalysator möglich. In den durchgeführten

Untersuchungen konnten direkte Zusammenhänge zwischen dem Ausmaß der ablaufenden Sekundärreaktionen und den Reaktionsbedingungen aufgezeigt werden. Insbesondere Oxygenate wie höhere Alkohole – ein vielversprechendes Zielprodukt der Fischer-Tropsch-Synthese an Eisenkatalysatoren – tendieren aufgrund ihrer chemischen Struktur stark dazu, in Nebenreaktionen zu unerwünschten Sekundärprodukten umgesetzt zu werden. Für eine Optimierung der Ausbeute an höheren Alkoholen ist deshalb das Verständnis des Reaktionsmechanismus besonders wichtig. Konkret konnte gezeigt werden, dass es durch eine gezielte Einstellung von Betriebsbedingungen wie Temperatur, Katalysatorbelastung sowie Druck möglich ist, diese unerwünschten Reaktionen zu unterdrücken. Weiterhin kann durch Applikation sogenannter Promotoren wie Kalium, Kupfer oder Molybdän die Produktselektivität in Richtung der höheren Alkohole verschoben werden.

Die etablierte Methodik kann auch zur Untersuchung und Aufklärung von Reaktionsmechanismen anderer komplexer Reaktionen eingesetzt werden.

- 1 Profilreaktor.
- 2 Reaktionsprofile der  $\text{C}_1$ - $\text{C}_9$ -Produkte an einem Eisenkatalysator bei 473K/21bar.