

## **Elektromigration und Schalenmechanismus bei der Regeneration von Ionenaustauscherharzen**

Ionenaustauschverfahren werden seit über sechzig Jahren in der Aufbereitung und Reinigung von Brauch- und Abwasser eingesetzt. Die Regeneration des erschöpften Austauscherharzes ist dabei ein wichtiger Prozeßschritt, der mit einem hohen Chemikalienverbrauch und großen Investitionskosten verbunden sein kann. Dadurch wird die Ökonomie und Ökologie des Verfahrens entscheidend beeinflusst.

Helferich postulierte schon 1965 aufgrund rein theoretischer Überlegungen das Auftreten eines Schalenmechanismus in Ionenaustauscherpellets, bei dem eine scharfe Phasengrenze als freier Rand den unverbrauchten Kern von der Produktschale trennt. Dieses Phänomen tritt z.B. bei Ionenaustausch mit nachgeschalteter schneller irreversibler chemischer Reaktion auf, wie einige Jahre später auch experimentell bestätigt wurde.

Die bisherige mathematische Modellierung solcher Systeme basiert auf der Formulierung des Stofftransportes ausschließlich durch Fick'sche Diffusion, obwohl bekannt ist, daß elektromotorische Kräfte in ionischen Systemen zu sogenannter Elektromigration führen. Diese bewirkt insbesondere eine Kopplung aller Transportgleichungen und erschwert dadurch die numerische Behandlung solcher Systeme.

In der vorliegenden Arbeit wird dieser Einfluß des elektrischen Feldes auf den Schalenmechanismus und das makroskopische Verhalten regenerierender Ionenaustauscherpellets untersucht. Dabei ist das Ziel, herauszufinden in welchen Situationen Elektromigration einen signifikanten Effekt hat.

Zu diesem Zweck wird die mathematische Modellierung mit und ohne Elektromigration durchgeführt. Die numerischen Simulationsrechnungen erfolgen auf der Basis eines neuartigen numerischen Lösungsansatzes, der die Berechnung des freien Randes als explizite Systemvariable erlaubt. Durch Sensitivitätsanalyse wird als signifikanter Modellparameter der sogenannte hindrance-Faktor identifiziert, der die Hemmung des Stofftransportes der mobilen Systemspezies innerhalb der Austauschermatrix beschreibt. Dieser wird aufgrund von unabhängigen experimentellen Messungen des freien Randes an mit Kupferionen beladenen regenerierenden Einzelpellets des schwach sauren Kationenaustauscherharzes Amberlite IRC-86 bestimmt.

Die numerische Simulation beider Modelle ergibt für die während der Regeneration frei werdenden Kupferionen unterschiedliche zeitliche Konzentrationsverläufe in der Bulkphase. Die Validierung durch experimentell gemessene Bulkkonzentrationen ergibt nur für das Modell mit elektromotorischen Kräften gute Übereinstimmung. Somit hat Elektromigration einen signifikanten Einfluß auf das makroskopische Systemverhalten und muß zur korrekten Modellierung solcher Prozesse mit berücksichtigt werden.