

Simulative Prognose langzeitlichen Verhaltens nanopartikulären Eisens in Form von Carbo-Iron®-Partikeln auf Basis numerischer Approximationsalgorithmen

Kurzcharakterisierung Carbo-Iron®:

- In-situ-Reagenz zur Grundwasserdekontamination via Chlororganikadehalogenierung:

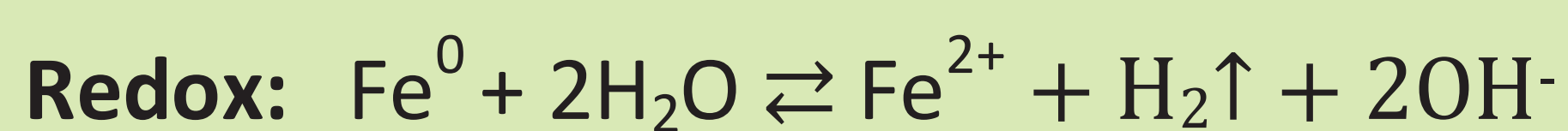
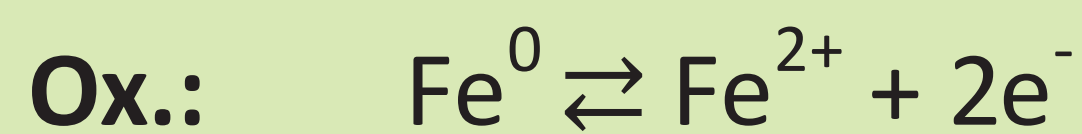
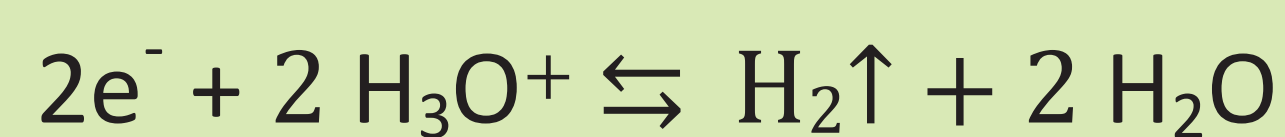
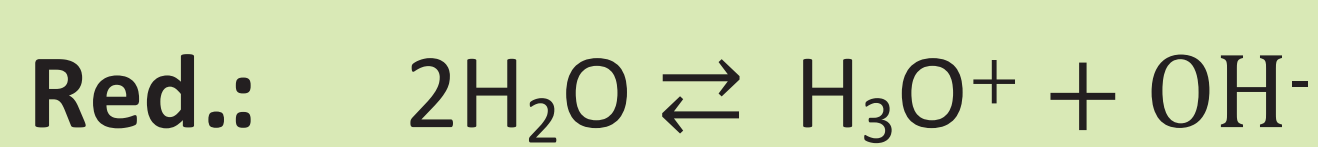


- Nanoeisen-Aktivkohle-Kompositmaterial

- Bildung breiter Sorptions-Reaktions-Zonen in kontaminierten Aquiferen aufgrund der kohlenstoffinduzierten Affinität zu hydrophoben Schadstoffphasen



Mathematisch-chemische Charakteristik der Nanoeisen-Reduktion:



$$\frac{dn(Fe^0)}{dt} = -kn(Fe^0)n^2(H_2O) \approx -k_{total}n(Fe^0)$$

$$\frac{dn(Fe^0)}{dt} \approx n(Fe^0) \frac{\kappa(t)}{k_{Std.}^{n-1}} \prod_{i=1}^n k_i \quad | A, R, T = const.$$

Euler-Cauchy-diskretisierter

eindimensionalisierter Korrosionsreaktionsalgorithmus:

$$\text{Solange } x < \left\lceil \frac{t}{\Delta t} \right\rceil$$

$$n_{x+1}(Fe^0) = n_x(Fe^0) - n_x(Fe^0) \kappa_x \frac{\Delta t}{k_{Std.}^{n-1}} \prod_{i=1}^{n-1} (k_i)$$

$$n_{x+1}(OH^-) = n_x(OH^-) + 2n_x(Fe^0) \kappa_x \frac{\Delta t}{k_{Std.}^{n-1}} \prod_{i=1}^{n-1} (k_i)$$

$$\kappa_{x+1} = \text{funct} \left(14 + \log_{10} \left(\frac{n_{x+1}(OH^-)}{V_{Lösung}} \right) \right)$$

$$T_{x+1} = T_x + \Delta t; \quad x + 1 \rightarrow x$$

Wenn $x \geq \left\lceil \frac{t}{\Delta t} \right\rceil$, dann beende den Algorithmus.

Wenn $x < \left\lceil \frac{t}{\Delta t} \right\rceil$, dann springe zurück zum Beginn des Solange – Befehls.

Bedeutung der Forschung:

- Theoretische Grundsteinlegung weiterer empirischer Untersuchungen

- Mathematisch formalisierte Beschreibung multikatalytischer Korrosionsprozesse reaktiver Eisennanopartikel

- Kosten- und Planungsoptimierung der In-situ-Carbo-Iron-Injektion durch numerische Approximation der Halbwertszeiten bei geringem empirisch-experimentellen Aufwand

- Basis ökonomischer Rentabilisierung aquifer- und grundwassersanierender Methoden (Ökonomie als Schlüssel zur Ökologie)