

Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät

Institut für Biowissenschaften / Chemie / Mathematik / Physik

Fachgebiet: *Chemie*

Betreuer: Prof. Dr. Angelika Brückner

Ihr Name: Simon Haida

(e-mail: simon.haida@catalysis.de)

Structure-Reactivity Relationships of MoO₃-based Catalysts for the Hydrodeoxygenation of Lignin Pyrolysis Products

Deutsche Zusammenfassung

Die Produktion von Aromaten, unter Verwendung von Lignin, ist mit Hilfe einer Hydrodeoxygenierung (HDO) in der Gasphase besonders energieeffizient. In der vorliegenden Arbeit wurden die Struktur-Reaktivitäts Beziehungen von Molybdänoxid (MoO₃) basierten Katalysatoren untersucht, welche mit Zweitmetallen (Ni, Co) modifiziert wurden. Diese sind aufgrund ihrer hohen Selektivität zu den BTX-Aromaten von besonderem Interesse, erwiesen sich jedoch im Vergleich zu Edelmetallkatalysatoren als weniger aktiv. Die katalytischen Eigenschaften in der Gas- und Flüssigphase wurden anhand verschiedener Modellsubstrate (Anisol, Phenol, Guajacol) untersucht und vergleichend betrachtet. Mit Hilfe verschiedener in-situ Methoden wurde die Bildung, Zersetzung und Regeneration der aktiven Phase (MoO_xC_yH_z), unter Reaktionsbedingungen studiert. Zusätzlich wurde der Einfluss des Nickels auf die MoO_xC_yH_z Bildung und der direkte/indirekte Einfluss auf die Selektivität betrachtet. Dabei konnten erhebliche Steigerungen der Aktivität bei nahezu gleichbleibender Selektivität in der Gasphase erzielt werden.

Englische Zusammenfassung

The production of aromatics using lignin is particularly energy efficient with the aid gas-phase hydrodeoxygenation (HDO). In the present work, the structure-reactivity relationships of molybdenum oxide (MoO₃)-based catalysts modified with secondary metals (Ni, Co) were investigated. MoO₃ catalysts are of particular interest due to their high selectivity to BTX aromatics, but proved to be less active compared to noble metal catalysts. The catalytic properties in the gas- and liquid-phase were investigated and compared using various model substrates (anisole, phenol, guaiacol). Multiple in-situ methods were used to investigate the formation, decomposition and regeneration of the active phase (MoO_xC_yH_z) under reaction conditions. The influence of nickel on MoO_xC_yH_z formation and the direct/indirect influence on selectivity was investigated. Significant increases in activity with almost constant selectivity were achieved for the gas phase.