

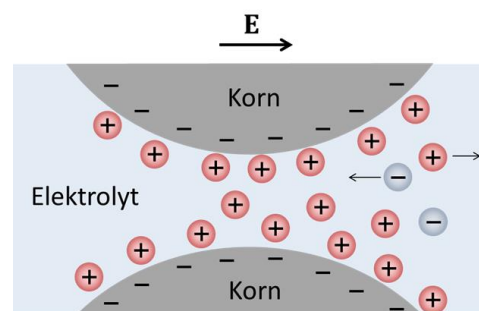
Implementierung eines Modells der Membranpolarisation für komplexe Elektrolyte

Arbeitsgebiet: Angewandte Geophysik

Betreuer: Dennis Kreith, Prof. Dr. Matthias Bucker

Viele geologische Materialien sind granulare Medien, die aus einzelnen Sedimentkörnern bestehen. Die Sedimentkörner selbst sind zwar schlechte elektrische Leiter, aber den Porenraum zwischen den Körnern füllt meist ein gutleitender Elektrolyt. Bestimmen wir die elektrischen Eigenschaften eines solchen Verbundmaterials, stellen wir fest, dass seine mikroskopische Inhomogenität einen messbaren Polarisierungseffekt erzeugt. Mithilfe der geophysikalischen Methode der induzierten Polarisation (IP) vermessen wir solche Effekte und können z.B. Rückschlüsse auf Korngröße, Mineralzusammensetzung oder Elektrolytchemie der Materialien im Untergrund ziehen. Die Kenntnis dieser Materialeigenschaften ist u.a. für den Schutz und die Bewirtschaftung weltweit knapper werdender Grundwasserressourcen von großer Bedeutung.

Derartige Anwendungen der IP-Methode basieren hauptsächlich auf der Vermessung der Polarisation der sog. elektrischen Doppelschicht. Unter dieser Schicht verstehen wir die meist negative Oberflächenladung des Mineralkorns sowie die entsprechende Gegenladung im angrenzenden Elektrolyt. Der Auswertung des gemessenen IP-Effekts werden dann einfache physikalische Modelle zugrunde gelegt. Eines dieser Modelle, die sogenannte Membranpolarisation, beschreibt das ionenselektive Verhalten von Porenengstellen.



Membranpolarisation in einem ionenselektiven Porenhals.

Existierende analytische Modelle gehen der Einfachheit halber von monovalenten, symmetrischen Elektrolyten wie NaCl aus. Reale Porenfluide bestehen hingegen aus einem Gemisch verschiedener Salze. Ziel dieser Arbeit ist es, ein bestehendes mathematisches Modell für die Membranpolarisation komplexer Elektrolyte in ein Computerprogramm zu übersetzen. Zudem untersuchen Sie den Einfluss der Eigenschaften des Porenfluids auf das Polarisationsverhalten, indem Sie verschiedene Parameter wie die Zusammensetzung des Elektrolytgemischs variieren und die resultierenden Veränderungen der modellierten Polarisation diskutieren.

Aufgaben

- Einarbeitung in die Theorie der induzierten Polarisation
- Implementierung des bestehenden analytischen Polarisationsmodells für beliebige Elektrolyte und Elektrolytgemische in Python oder Matlab
- Simulationsrechnungen und Parameterstudien
- Ggf. Ableiten allgemeiner Zusammenhänge zwischen der Elektrolytzusammensetzung und dem resultierenden Polarisationsverhalten