

Institut für Technische Chemie ITC und Institut für Angewandte Geowissenschaften AGW

Karlsruher Institut für Technologie KIT

WissenschaftlerInnen-Stelle mit Gelegenheit zu einer geowissenschaftlichen Promotion

„Hydrothermale Karbonatisierung von Beton: Entwicklung eines multiskaligen Reaktionsmodells“

**Beginn** Ende 2023/Anfang 2024

**Kontakt** peter.stemmermann@kit.edu

### Hintergründe

Im **anorganischen CO<sub>2</sub>-Kreislauf** werden Mineralphasen wie Kalzium- und Magnesiumsilikate, die technische oder natürliche Gesteine aufbauen, langsam mit Kohlendioxid oder Kohlensäure zu Karbonaten umgesetzt. Im Zuge der Energie- und Ressourcenwende gewinnen CO<sub>2</sub>-negative Prozesse wie die **Karbonatisierung** eine besondere Bedeutung. Für eine technische Nutzung ist es entscheidend, den reaktiven Transport der Kohlensäure zu verstehen und zu kontrollieren.

Technologien zur Karbonatisierung, sogenannte **mineral carbonation** MC-Technologien, werden weltweit entwickelt. Besonders wichtig sind MC-Technologien unter milden **hydrothermalen Bedingungen**. Anwendungen sind z.B. unterirdische *in situ* MC, die Gewinnung von Lithiumcarbonaten aus Thermalwasser und die direkte *ex situ* MC von rezyklierten Zuschlagstoffen aus der Betonverarbeitung die neben der CO<sub>2</sub>-Sequestrierung auch noch die bauphysikalischen Eigenschaften verbessert.

Die offenen **Fragen** sind (oft) die gleichen: Wie beeinflussen Temperatur, Materialporosität, Feuchtigkeitsfilme, innere Oberflächen, Diffusionswege, Stoffübergänge, unterschiedliche Polymorphien die Umwandlung von Ca- und Mg-Phasen? Wie können unerwünschte Reaktionen wie Clogging minimiert werden? Wie lassen sich die Prozesse beschreiben, modellieren und bilanzieren?

### Thema

Im Rahmen der zu besetzenden **Stelle mit Promotionsmöglichkeit** wird daher die **hydrothermale Karbonatisierung von Zementphasen** in Beton oder Betonfraktionen an Einzelphasen, Modellsystemen und realen Betonproben untersucht. Ein besonderer Schwerpunkt liegt auf **Transportreaktionen** in multiskaligen Porositäten, von makroskopischen Klüften bis hin zu Gelporen im Nanobereich.

**Experimente** werden unter Schutzgas in Glove-Boxen und mit verschiedenen **Autoklavensystemen** durchgeführt. Zur Unterscheidung verschiedener Karbonatisierungsgenerationen werden Verfahren zur Dotierung bzw. der Einsatz von Isotopen entwickelt. Als **Analysetechniken** stehen Isotopenanalyse, XRD, TG, TG-FTIR, Raman- und IR-Spektroskopie zur Modelloptimierung im Vordergrund. Im Rahmen der Arbeit sollen vorhandene *in situ* Vorrichtungen (spektroskopische Hydrothermal-Zellen) in Betrieb genommen und an die Fragestellungen angepasst werden. Eine zentrale Rolle soll die Abbildung der resultierenden **Mikrostruktur** mittels Raman Imaging und Elektronen-Mikroskopie spielen. Die Ergebnisse werden **thermodynamisch** und mit **Fluid Simulation Software** modelliert. Eine Mitwirkung bei dem experimentellen Aufbau sowie bei der Betreuung von analytischen Geräten wird erwartet.

### Persönliche Qualifikation

Sie verfügen über ein abgeschlossenes wissenschaftliches Hochschulstudium (Diplom (Uni)/Master) im Bereich der Geowissenschaften, vorzugsweise in angewandter Mineralogie oder einer vergleichbaren Studienrichtung (z.B. Chemie, Physik, etc.).

Mit den Grundtechniken der Mineralogie (z.B. Röntgendiffraktometrie, Polarisation- und Elektronenmikroskopie, etc.) sind Sie vertraut. Ihre Bereitschaft zur Einarbeitung in neue Methoden und Werkzeuge der Mineralogie und Strukturaufklärung setzen wir voraus.

Gute Deutsch- und Englischkenntnisse in Wort und Schrift sind erforderlich.

Darüber hinaus sind folgende Zusatzqualifikationen wünschenswert: Erfahrung mit Synthesen und Festkörpern, Verständnis von Reaktionsprozessen und Kinetik, Kenntnisse in der Zementchemie sowie Erfahrung in thermodynamischer Modellierung bzw. Fluid-Simulation in porösen Medien.

Institute for Technical Chemistry ITC and Institute of Applied Geosciences AGW  
Karlsruhe Institute of Technology KIT

Scientist-Position with PhD opportunity in Geosciences

„Hydrothermal carbonation of concrete: Development of a multi-scale reaction model“

**Start** End of 2023/Beginning of 2024

**Contact** peter.stemmermann@kit.edu

### Background

Mineral phases such as calcium and magnesium silicates, which exist naturally as rocks, react with CO<sub>2</sub> or carbonic acid resulting in the gradual formation of carbonates: the **inorganic CO<sub>2</sub> cycle**. These carbonation reactions are CO<sub>2</sub> negative and their importance increases because of the transitions of our energy system and limited resource availability. To apply this on a technical scale or to speed up processes, it is crucial to understand and control the process in detail.

Research on carbonation technologies, so called **mineral carbonation MC**, is currently of great interest worldwide. MC technologies at gentle **hydrothermal conditions** are of major importance. These include both: *in situ*, subsurface MC applications collecting lithium carbonate from geothermal waters, and *ex situ* direct MC of aggregates from concrete recycling, thus capturing CO<sub>2</sub> and improving the aggregate properties.

Both applications share common **challenges**: How is the transformation of Ca and Mg phases controlled by temperature, solid porosity, moisture films, inner surfaces, diffusion paths, mass transfer, polymorphism? How to suppress unwanted clogging? How to characterize, model and balance the processes?

### Subject

The main topic is the **hydrothermal carbonation of cementitious phases** in concrete or concrete fractions. As a possible **PhD project** it will investigate single phases, simplified model systems and technical concrete samples while focussing on transport phenomena in multiscale pore spaces, macroscopic fissures to gel pores of nanometer size.

**Experiments** are performed under inert gas in glove boxes and with various **autoclave systems**. Different layers, generations of carbonation will be discriminated by isotope techniques. For **extended characterization and modelling** a range of analytical techniques is available: isotope analyses, XRD, TG, TG-FTIR, Raman and IR spectroscopy. Within the scope of the work, existing *in situ* equipment, e.g. hydrothermal cells for spectroscopy, will be set up and adapted. Microstructure imaging using Raman and electron microscopy will be of primal importance. Modelling of thermodynamics and fluid dynamics is a goal. Finally, a considerable participation in running analytics, maintenance and assistance with new set-ups is expected.

### Personal Qualifications

- Academic degree (Master's or comparable) in the field of geosciences, preferably with a focus on mineralogy or a comparable degree (e.g. chemistry, physics, etc.)
- You are familiar with the analytical techniques like X-ray diffraction, polarization and electron microscopy, etc.
- Willingness to learn new methods and tools in mineralogy and structure elucidation is a prerequisite
- Good written and spoken German and English skills are required
- The following additional qualifications would be advantageous:
  - experience with solid syntheses and handling
  - understanding of reaction processes and kinetics
  - knowledge of cement chemistry
  - background in thermodynamic modelling or fluid simulation in porous media.