

# Weiterentwicklung einer universellen Gruppenbeitragszustandsgleichung "VTPR"

15345 N

In dem Vorhaben wurde eine universell einsetzbare Gruppenbeitragszustandsgleichung zur zuverlässigen Vorausberechnung thermophysikalischer Eigenschaften von Reinstoffen und Gemischen entwickelt. Diese erleichtert den KMU die Auslegung und Optimierung ihrer vielfältigen Anlagen, insbesondere von Trennprozessen, indem sie eine Vielzahl thermophysikalischer Daten verlässlich vorausberechnet. So können zeit- und kostenaufwändige, experimentelle Arbeiten auf ein Minimum reduziert und die Wettbewerbsfähigkeit der KMU durch Kosteneinsparungen und kürzere Entwicklungszeiten von neuen Produkten gesteigert werden.

Ein wichtiger Bestandteil für die Evolutionsschritte des VTPR-Modells ist das systematische Messen von zuverlässigen, thermodynamischen Gemischdaten, mit deren Hilfe die VTPR-Matrix um die notwendigen Wechselwirkungsparameter erweitert werden kann. Hier wurde durch die systematische Überarbeitung der Prozedur zur Anpassung von Gruppenwechselwirkungsparametern an binäre Phasengleichgewichtsdaten sowie der Molekülzerlegungsvorschriften eine signifikante Steigerung der Vorhersagequalität der volumentranslatierten Peng-Robinson Gruppenbeitragszustandsgleichung erreicht. Die Verwendung einer deutlich breiteren Datenbasis (neben VLE und azeotropen Daten,  $hE$ -, und  $\gamma^\infty$  auch SLE- und LLE-Daten) bei der Anpassung der Gruppenwechselwirkungsparameter für das VTPR-Modell führte zu einer Erweiterung des Anwendungsspektrums. So kann VTPR inzwischen neben der Vorhersage des Phasengleichgewichtsverhaltens von Multikomponenten-, Elektrolyt- und Polymersystemen ebenso erfolgreich zur Vorhersage von Flüssig-Flüssig-Gleichgewichten sowie Flüssigdichten und der zuverlässigen Auswahl von Entrainern eingesetzt werden.

Da sich die Anwendbarkeit eines universellen Modells in der chemischen Industrie nicht auf die Vorausberechnung von Phasengleichgewichten und thermodynamische Größen beschränken darf, wurde in diesem Projekt gezeigt, dass das VTPR-Modell auch zur Berechnung chemischer Gleichgewichte ( $K_\gamma$  bzw.  $K_\Phi$ ) eingesetzt werden kann. Neben den bisher genannten Anwendungsgebieten ist das VTPR-Modell auch in der Lage, die Anforderungen auf dem Gebiet der Wärmekraftmaschinen zu erfüllen. So ist es gelungen, die Gruppenbeitragsmethode in sehr guter Übereinstimmung mit experimentellen Daten zur Auslegung von Kreisprozessen heranzuziehen. Des Weiteren wurde die Zuverlässigkeit der  $T_{wu}$ - $\alpha$ -Funktion bei überkritischen Bedingungen überprüft sowie zusätzliche  $T_{wu}$ -Parameter ermittelt.

Die Überprüfung der breiten Anwendbarkeit des VGTPR-Modells, mit dessen Hilfe ein großer Teil der Wechselwirkungsparameter des modifizierten UNIFAC Modells (Dortmund) direkt übernommen werden könnte, führte zu dem Ergebnis, dass eine Anwendung für den Fall unterkritischer Systeme mit allen Vorteilen einer Gruppenbeitragszustandsgleichung möglich ist. Für den überkritischen Bereich konnten jedoch keine zufriedenstellenden Ergebnisse erzielt werden.

Bearbeitet wurde das Forschungsthema vom 03/08 bis 11/10 an der **Universität Oldenburg, Institut für Reine und Angewandte Chemie, Technische Chemie** (Carl-von-Ossietzky-Straße 9-11, 26129 Oldenburg, Tel.: 0441/798-3831) unter der Leitung von Prof. Dr. J. Gmehling (gleichzeitig Leiter der Forschungsstelle).

[--> TIB](#)

Gefördert durch:



Das IGF-Vorhaben Nr. 15345 N der Forschungsvereinigung DECHEMA, Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V., Theodor-Heuss-Allee 25, 60486 Frankfurt am Main wurde über die AiF im Rahmen des Programms zur Förderung der industriellen Gemeinschaftsforschung (IGF) vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages gefördert.

aufgrund eines Beschlusses  
des Deutschen Bundestages