

Lernzettel

Stoff- und Energieintegration in Verfahren:
Design- und Entwicklungsaspekte von
Produkten/Prozessen basierend auf
Gleichgewichtsanalysen

Universität: Technische Universität Berlin
Kurs/Modul: Thermodynamik II
Erstellungsdatum: September 6, 2025



Zielorientierte Lerninhalte, kostenlos!
Entdecke zugeschnittene Materialien für deine Kurse:

<https://study.AllWeCanLearn.com>

Thermodynamik II

Lernzettel: Thermodynamik II**(1) Stoff- und Energieintegration in Verfahren: Design- und Entwicklungsaspekte von Produkten/Prozessen basierend auf Gleichgewichtsanalysen****(2) Grundlagen der Gleichgewichte in Verfahren**

Mehrstoff- und Mehrphasen-Gleichgewichte. Gleichgewichte entstehen, wenn in allen Phasen die chemischen Potenziale der Spezies gleich sind:

$$\mu_i^\alpha = \mu_i^\beta \quad (\text{Gleichgewicht zwischen Phase } \alpha \text{ und Phase } \beta)$$

Für das Gesamtsystem minimiert sich die Gibbs-Energie:

$$G = \sum_i n_i \mu_i$$

unter Berücksichtigung von Massen- und Phasenzusammenhängen.

Reaktionsgleichgewichte. Für eine Reaktion

$$\sum_i \nu_i A_i \rightleftharpoons 0$$

gilt das Gleichgewichtskriterium über die freie Reaktionsenthalpie:

$$\Delta_r G = \sum_i \nu_i \mu_i$$

Gleichgewichtskriterium:

$$\Delta_r G = 0 \quad \Rightarrow \quad Q = K$$

mit dem Gleichgewichtskonstante

$$K = \exp\left(-\frac{\Delta_r G^0}{RT}\right)$$

und dem Reaktions-quoienten

$$Q = \prod_i a_i^{\nu_i} = \prod_i (\gamma_i x_i)^{\nu_i} \text{ in der Lösung}$$

(Entspricht für ideale Lösung $a_i = x_i$).

Vapor-Liquid-Gleichgewicht (VLE). Ideales Gas-Lösungs-Verhalten:

$$y_i P = x_i P_i^{\text{sat}}(T)$$

Für nicht-ideale Lösungen:

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^{\text{sat}}(T)$$

mit Aktivität γ_i und Sättigungsdrücken $P_i^{\text{sat}}(T)$.

Mehrphasengleichgewicht (LLE, VLE, PLE). - LLE: Verteilung zwischen organischer und wässriger Phase. - PLE: Druck-abhängig; ähnliche Konzepte wie VLE. - Ziel: Bestimmung der Phasenaufspaltung bei gegebenem T, P und Zusammensetzung.

Aktivitätskoeffizienten und Gleichgewichtsmodelle. Für nicht ideale Gemische gilt

$$a_i = \gamma_i x_i$$

Aktivitätskoeffizienten anhand gängiger Modelle: - Margules, - NRTL (Non-Random Two-Liquid), - UNIQUAC (Universal Quasi-Chemical).

Methode zur Gleichgewichtsberechnung (Grundidee).

- Festlegung des thermodynamischen Modells (z.B. Raoult, VLE, Aktivitätstheorie).
- Datensammlung: Sättigungsdrücke $P_i^{\text{sat}}(T)$, ΔG^0 , Aktivitätskoeffizienten-Parameter.
- Aufstellen von Massenbilanzen und Gleichgewichtsbedingungen (Gleichheit der chemischen Potentiale oder $Q = K$).
- Numerische Lösung (z.B. Newton-Verfahren) zur Bestimmung von x_i und y_i .

(3) Design- und Entwicklungsaspekte aus Gleichgewichtsanalysen

Stoff- und Energieintegration in Verfahren. - Gleichgewichtsbedingungen steuern die Trenn- und Reaktionspfade in der Produkt/Prozessentwicklung. - Wichtige Zielgrößen: Produktausbeute, Reinheit, Energiebedarf, Umweltaspekte.

Energieintegration und Wärmeübertragung. - Ziel: Minimierung externer Wärmezufuhr, Maximierung Wärmerückgewinnung. - Methoden: Pinch-Analyse, Wärmeübertragungsnetz (HEN). - Kennzahlen: minimale Temperatur-Differenz ΔT_{min} , Gesamt-Wärmebedarf $\dot{Q}$, Wärmebilanzen.

Gleichgewichtsbasierte Design-Strategien. - Wahl von Reaktionswegen unter Gleichgewichtsbarrieren. - Trenntechnik-Integration (Destillation, Extraktion, Entzug) basierend auf Phasenverhalten. - Produkt- und Prozessentwicklung: Berücksichtigung von Stabilität, Wärme-, Massen- und Exergie-Opportunitäten.

Beispiele typischer Gleichgewichtssituationen in der Praxis. - Reaktionsgleichgewicht in der Synthese chemischer Vorprodukte (z. B. exotherme bzw. endotherme Reaktionen). - VLE in der Trennung von Gemischen (z. B. Ethanol-Wasser, Toluol-Wasser). - LLE in Mehrphasen-Trennprozessen (organisch/wässrig).

(4) Rechenbeispiele und Interpretationen (Beispiele).

- Berechnen Sie das Gleichgewichtskonstante K einer Reaktion bei gegebenem $\Delta_r G^0$ und T :

$$K = \exp\left(-\frac{\Delta_r G^0}{RT}\right)$$

- Gegeben $P = 1$ bar, $P_A^{\text{sat}}(T)$ und $P_B^{\text{sat}}(T)$ sowie idealen Bedingungen, bestimmen Sie das VLE-Verhalten der Binäremischung A–B.

$$y_A P = x_A P_A^{\text{sat}}(T), \quad y_B P = x_B P_B^{\text{sat}}(T)$$

- Skizzieren Sie grob, wie sich das Gleichgewicht auf eine Destillationskolonne auswirkt, wenn sich der Druck verändert.

(5) Literaturrecherche und wissenschaftliche Diskussion

- Klassische Grundlagen: Thermodynamik- und Gleichgewichtstexte (z. B. Callen, Smith/Van Ness, Villi). - Moderne Modelle: NRTL, UNIQUAC, COSMO-RS (falls vorhanden). - Fachzeitschriften und Konferenzberichte im Bereich Thermodynamik, Energiesysteme und Prozessdesign.

(6) Übungsaufgaben (UE)

- Gegebenes Reaktionssystem mit $\Delta_r G^0$ bei 350 K; berechnen Sie K .
- Ein Binärmischungssystem bei gegebenem T und P: verwenden Sie idealen Gas/ idealer Lösung, um x_i und y_i zu finden (VLE).
- Skizzieren Sie grob die Auswirkungen einer Änderung von ΔH_{rxn} auf das Gleichgewicht eines exothermen Prozesses.

Hinweis zur Notation und Umsetzung

- Formeln stets getrennt darstellen (eine Gleichung pro Zeile). - Textdateien mit Umlauten sind durch `utf8`-Inputenc gut lesbar. - Alle Formeln escapen, z. B. $f(x) = \ln(1 + x)$. - Keine tabellarische Zusammenfassung, außer nötig; bei Tabellen: darauf achten, dass sie auf Hochkant-Seite passen.