

Lernzettel

Anwendungsszenarien und Fallstudien aus der
Praxis: Industrielle Beispiele zu
Mehrstoff-/Mehrphasen-Gleichgewichten und
Reaktionsgleichgewichten

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 – Anwendungsszenarien und Fallstudien zu Mehrstoff-/Mehrphasen-Gleichgewichten und Reaktionsgleichgewichten**(1) Grundbegriffe und Zielsetzung.**

In industriellen Prozessen treten Mehrstoff-/Mehrphasen-Gleichgewichte sowie Reaktionsgleichgewichte auf. Ziel ist es, diese Gleichgewichte zu verstehen, zu berechnen und für die Auslegung von Trennprozessen (z. B. Destillation, Absorption) sowie von Reaktoren zu nutzen. Die Beherrschung der Gleichgewichtsvorgänge ermöglicht es, betriebliche Kennzahlen zu optimieren, Energieflüsse zu steuern und Prozesssicherheit zu erhöhen.

(2) Grundbegriffe zu Mehrstoff-/Mehrphasen-Gleichgewichten.

Gleichgewicht zwischen Phasen α und β : $\mu_i^{(\alpha)} = \mu_i^{(\beta)}$ für alle beteiligten Komponenten i .

Gibbs'sche Phasenregel (nicht-reaktionsgebunden).

$$F = C - P + 2$$

Mit Reaktionen im System (R unabhängige Reaktionen).

$$F = C - P - R + 2$$

Mehrstoff-/Mehrphasen-Gleichgewicht in Flüssigkeit-Gas (VLE). Bei idealer Lösung gilt oft das Raoult-Gesetz-ähnliche Bild:

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

wobei $P_i^{\text{sat}}(T)$ der Sättigungsdampfdruck von Komponente i ist, x_i die Lösungsfraktion in der Flüssigkeit, y_i die Molenfraktion des Gases und γ_i das Aktivitätskoeffizient. $\gamma_i = 1$ in idealer Lösung, otherwise $\gamma_i \neq 1$.

Allgemeinere Gleichgewichtsbedingung mit Aktivitäten.

$$a_i = \gamma_i x_i \quad (\text{Flüssigkeit}), \quad K = \prod_i a_i^{\nu_i} \quad (\text{Gleichgewicht, z. B. Reaktion})$$

Punktzuordnung und relative Verhältnisse.

$$\text{Relatives Verdampfungs-Verhältnis } \alpha_{AB} = \frac{K_B}{K_A} \quad (\text{relative Volatilität}).$$

Hinweis zur Modellierung.

- Ideale VLE: $\gamma_i \approx 1$.
- Nicht-ideales System: Aktivitätskoeffizienten oder Gleichgewichtskoeffizienten (γ_i bzw. a_i) sind zu berücksichtigen, z. B. mit UNIQUAC/NRTL-Modelle.

(3) Reaktionsgleichgewichte. Gegeben eine Reaktion

$$\sum_i \nu_i A_i \rightleftharpoons 0 \quad (\text{z. B. } aA + bB \rightarrow cC + dD)$$

Der Reaktionsquotient ist

$$Q_r = \frac{\prod_i a_i^{\nu_i}}{1}, \quad \text{und am Gleichgewicht gilt } Q_r = K.$$

Gleichgewichtskonstante und Aktivität.

$$K = \frac{a_C^c a_D^d}{a_A^a a_B^b}$$

Temperaturabhängigkeit (Van't Hoff).

$$\frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta H^\circ}{RT^2} \Rightarrow \ln \frac{K_2}{K_1} = -\frac{\Delta H^\circ}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

Industrielle Beispiele für Reaktionsgleichgewichte. - Ammoniaksynthese: $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightleftharpoons 2\text{NH}_3$ (hoher Druck, moderates bis niedriges Temperaturfenster).

- Methanolsynthese ($\text{CO} + 2 \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{OH}$): Gleichgewicht verschiebt sich mit Temperatur und Druck; K hängt stark von T ab.

(4) Praxisbeispiele und Fallstudien.

Fallstudie 1: Mehrstoff-/Mehrphasen-Gleichgewicht in einer binären VLE-Teilstrecke (Wasser–Ethanol).

Ziel: Bestimmung der Druck- und Temperaturprofile in einem Destillations- oder Flash-Prozess.

Vorgehen: - Bestimme beteiligte Phasen (VLE) und Komponenten.

- Wähle ein Modell (ideal, Aktivitätstheorie).

- Schreibe Gleichungen: $P y_i = x_i \gamma_i P_i^{\text{sat}}(T)$ (Gase/Liquide).

- Falls nötig, nutze K bzw. $a_i = \gamma_i x_i$ und die Phasenregel zur Bestimmung von Unbekannten.

- Verwende Tau- und Druckwerte aus Prozessdaten bzw. Spektralen.

Beispielgleichungen:

$$P y_{\text{EtOH}} = x_{\text{EtOH}} \gamma_{\text{EtOH}} P_{\text{EtOH}}^{\text{sat}}(T), \quad P y_{\text{Wasser}} = x_{\text{Wasser}} \gamma_{\text{Wasser}} P_{\text{Wasser}}^{\text{sat}}(T).$$

Fallstudie 2: CO₂-Abscheidung mit Aminköhärenten Gerüststoffen (Gaswäsche).

Ziel: Bestimme Gleichgewichte zwischen absorbiertes CO₂ in der Lösung und freier Gasphase bei gegebenem Druck. Vorgehen: - Reaktives Gleichgewicht bei der Absorption, ggf. chemische Reaktion ($\text{CO}_2 + \text{RNH}_2 \rightleftharpoons \text{RNHCOO}^- + \text{H}^+$).

- Nutzen Sie Aktivitätskoeffizienten oder Reaktionsgleichgewichtskonstanten K für das gelöste System.

- Abschluss: Bestimme Ausbeute und Kapazität der Lösung.

Fallstudie 3: Ammoniaksynthese – Einfluss von Temperatur und Druck auf das Gleichgewicht.

Ziel: Abschätzung des Gleichgewichtszustands in einem Hochdruckreaktor. Vorgehen: - Verwende die Reaktionsgleichung $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightleftharpoons 2\text{NH}_3$ und $K = \frac{a_{\text{NH}_3}^2}{a_{\text{N}_2} a_{\text{H}_2}^3}$.

- Temperaturabhängigkeit über Van't Hoff-Gleichung.

- Berücksichtige Phasen: Reaktion erfolgt überwiegend gasförmig; ggf. Leichtgas-Überführung in Flüssigkeit außerhalb.

Zusammenfassung.

- Gleichgewichtsbeziehungen liefern zentrale Vorgaben für Trenn- und Reaktionsprozesse in der Industrie.
- Modelle (ideal vs. nicht-ideal) bestimmen, wie man Gleichgewichte berechnet.
- Temperature- und Druck-Abhängigkeiten müssen in Planung und Optimierung beachtet werden.