

# Erweiterung der PSRK-Gruppenbeitragszustandsgleichung zur Beschreibung salzhaltiger Mischungen

12219 N/1+2+3

Nach der Evaluierung verschiedener Modellansätze wurde der geeignetste Ansatz zur Weiterentwicklung der PSRK-Methode vorangetrieben. Die erweiterte Methode wurde nun auf Systeme mit starken Elektrolyten angewendet. Das modifizierte Modell kann dabei sowohl Vorhersagen für Dampf-Flüssig-Gleichgewichte (VLE) elektrolythaltiger Systeme in gleicher Präzision wie das LIFAC-Modell liefern als auch Phasengleichgewichte elektrolythaltiger Systeme mit überkritischen Komponenten zuverlässig beschreiben.

Im experimentellen Teil wurden Datenlücken gezielt durch Gaslöslichkeitsmessungen von Kohlendioxid und Methan in Wasser und Methanol mit verschiedenen Salzen (NaCl, KCl, KBr, NaNO<sub>3</sub>, KNO<sub>3</sub>, LiBr, LiCl) über einen weiten Temperaturbereich (40-120°C) und einen Druckbereich von 0-10 MPa gemessen (insgesamt 68 isotherme Datensätze). Mit den experimentell bestimmten Flüssigdichten (insgesamt Dichtedaten für 14 elektrolythaltige Systeme) ließ sich letztlich eine zuverlässige Methode der Korrelation der Dichtedaten zur Berechnung der volumetrischen Größen bei gegebener Temperatur und Konzentration entwickeln.

Im theoretischen Teil wurde untersucht, welcher Ansatz geeignet ist, die Gaslöslichkeit elektrolythaltiger Systeme zu berechnen. Die Kernideen bestehen zum einen in der Übernahme des Salzeinflusses auf die Aktivitätskoeffizienten der Nichtelektrolytkomponenten, ohne daß die Salze als Komponenten explizit in die Zustandsgleichung eingeführt werden; zum anderen in der Beschreibung von Salzen oder Ionen mit Hilfe der Zustandsgleichung und in der Einführung von Salzen oder Ionen als weitere PSRK-Strukturgruppen.

Um die PSRK-Methode zu erweitern, wurde ein generalisierbarer Ansatz gewählt, bei dem die benötigten Reinstoffparameter für Salze oder Ionen verfügbar sind. Die Ergänzung des Ausdruckes für die Aktivitätskoeffizienten in der PSRK-Mischungsregel erwies sich dabei als viel versprechend, da Reinstoffparameter der Salze selten oder gar nicht zugänglich sind. Durch dieses Vorgehen konnte der Salzeinfluß durch die Änderung der Aktivitätskoeffizienten der Nichtelektrolytkomponenten eingeführt werden, ohne daß die Salze als Komponenten explizit in die Zustandsgleichung eingeführt werden müssen. Mit einer verifizierten FORTRAN-Routine wurden insgesamt 25 Wechselwirkungsparametersätze an die Datenbasis (Literaturdaten und eigene Messungen) angepaßt.

Bearbeitet wurde das Forschungsthema von 12/99 bis 11/02 am **Laboratory for Thermophysical Properties GmbH** (Oppelner Straße 12, 26135 Oldenburg, Tel.: 0441 / 798-3832 unter Leitung von Dr. K. Fischer (Leiter der Forschungsstelle Dr. K. Fischer), an der **Universität Oldenburg**, Fachbereich 9, Technische Chemie (Postfach 2503, 26111 Oldenburg, Tel.: 0441 / 798-3831) unter Leitung von Prof. Dr. J. Gmehling (Leiter der Forschungsstelle Prof. Dr. J. Gmehling) und bei der **Dortmund Data Bank Software and Separation Technology GmbH** (Industriestraße 1, 26121 Oldenburg, Tel.: 0441 / 778-0226) unter Leitung von Dr. J. Rarey (Leiter der Forschungsstelle Dr. J. Rarey).

[->TIB](#)

Gefördert durch:



Bundesministerium  
für Wirtschaft  
und Energie

Das IGF-Vorhaben Nr. 12219 N/1+2+3 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