

# Entwicklung einer universellen Gruppenbeitragszustandsgleichung

13885 N

Im Rahmen dieses Forschungsprojekts wurden bekannte Schwächen des PSRK-Modells behoben, wodurch es nun möglich ist, mit dem VTPR (volume translated Peng-Robinson group contribution equation of state)-Modell Reinstoffgrößen und Phasengleichgewichte von unter- bzw. überkritischen, symmetrischen oder asymmetrischen Systemen korrekt zu beschreiben. Dazu gehören das PvT-Verhalten, Verdampfungsenthalpien, Dichten und Wärmekapazitäten.

Außerdem wurde der Anwendungsbereich der Methode durch die Verwendung unterschiedlicher thermodynamischer Daten (neben VLE,  $h^E$ - und  $g^A$  auch SLE-Daten), die einen weiten Temperaturbereich abdecken, erweitert. Damit wird dem Verfahreningenieur ein Instrument in die Hand gegeben, das universell zur Berechnung einer großen Anzahl thermophysikalischer Reinstoffdaten und Gemischeigenschaften verwendbar ist. Auch die Berechnungen von Polymersystemen und Systemen mit überkritischen Fluiden wurden in das VTPR-Modell integriert.

Zusätzlich wurde die Zuverlässigkeit der Vorausberechnung von Exzessenthalpien, Aktivitätskoeffizienten bei unendlicher Verdünnung und Fest-Flüssig-Gleichgewichten mittels der über 200 neu angepaßten Gruppenwechselwirkungsparameter überprüft. Am Beispiel der Ammoniaksynthese konnte gezeigt werden, daß auch der Einfluß der Realität auf das chemische Gleichgewicht mit dem VTPR-Modell zuverlässig vorhergesagt wird.

Bearbeitet wurde das Forschungsthema von 1/2004 bis 4/2006 am **Institut für Reine und Angewandte Chemie, Technische Chemie der Universität Oldenburg** (Carl-von-Ossietzky-Straße 9-11, 26129 Oldenburg, Tel. (0441) 798-3831) unter der Leitung von Prof. Dr. J. Gmehling (Leiter der Forschungsstelle Prof. Dr. J. Gmehling).

[--> TIB](#)

Gefördert durch:



Das IGF-Vorhaben Nr. 13885 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