

**Universität Stuttgart**

Institut für Chemische Verfahrenstechnik



# Vorstellung Vertiefungsrichtung Chemie

U. Nicken

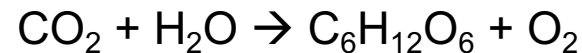
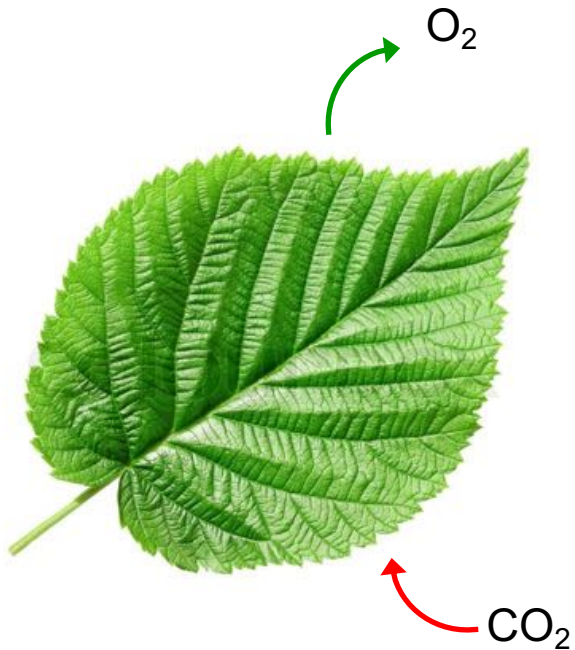
# Vertiefungsrichtung Chemie

- Organische Chemie mit Praktikum
- Physikalische Chemie
- Theoretische Chemie
- Mikroreaktionstechnik

## Ziele:

- Kommunikation in interdisziplinären Teams mit Naturwissenschaftlern
- Grundverständnis auf molekularer Ebene
- Anwendungen in Mikroreaktoren

- Die organische Chemie ist der Grundbaustein für das Leben auf der Erde.
- Bsp.: Photosynthese



## Allgemeine Grundlagen:

- Elektronenkonfiguration des Kohlenstoffs, Hybridisierung, Grundtypen von Kohlenstoffgerüsten: C-C-Einfach-/Zweifach-/Dreifachbindungen, cyclische Strukturen, Nomenklatur (IUPAC); Isomerie: Konstitution, Konfiguration (Chiralität),

## Stoffklassen:

- Alkane, Alkene, Alkine, Halogenalkane, Alkohole, Amine, Carbonsäuren und ihre Derivate, Aromaten, Aldehyde u. Ketone, Polymere, Aminosäuren

## Reaktionsmechanismen:

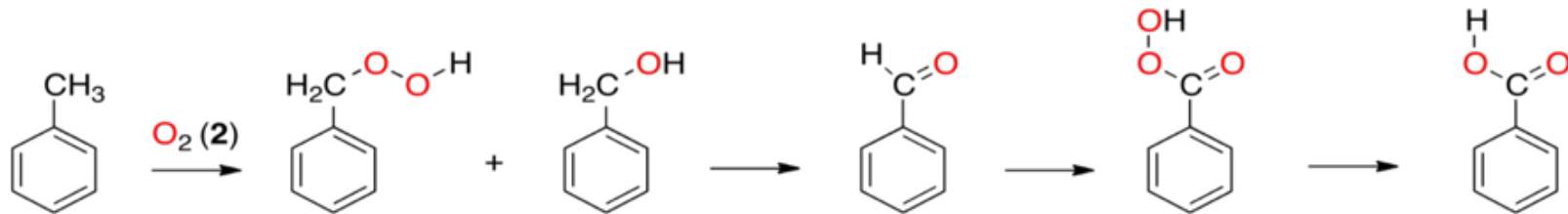
- Radikalische und Nucleophile Substitution, Eliminierung, Addition, elektrophile aromatische Substitution, 1,2-Additionen (Veresterung, Reduktion, Grignard-Reaktion), Reaktionen C-H acider Verbindungen (Knoevenagel-Kondensation, Aldolreaktion);
- Polymerisation (radikalisch, kationisch, anionisch)

# Anwendung der OC

## Oxidation von Toluol zu Benzoesäure

### Vorkommen:

- Konservierungsmittel
- Kosmetika



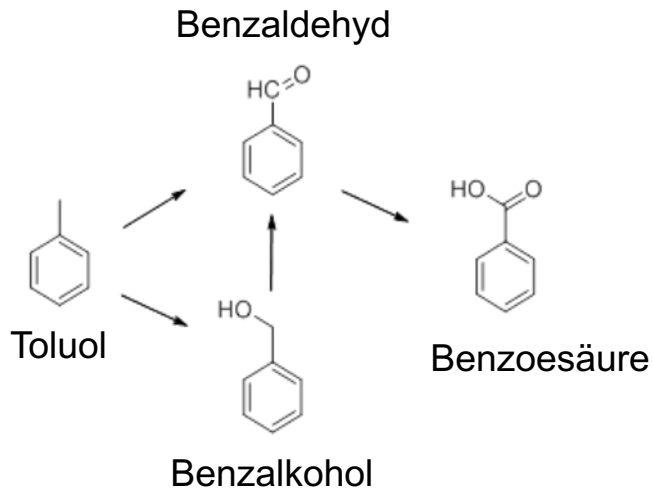
Toluoloxidation und dessen Zwischenprodukte

# Anwendung der OC

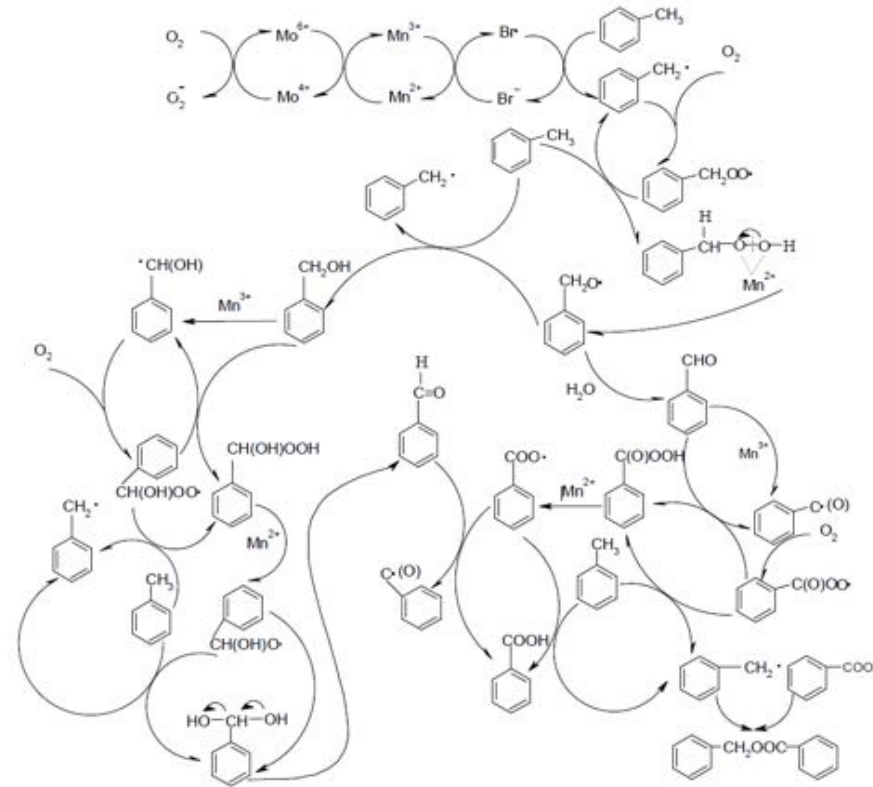
## Oxidation von Toluol zu Benzoesäure

Reaktionsmechanismus:

Einfach



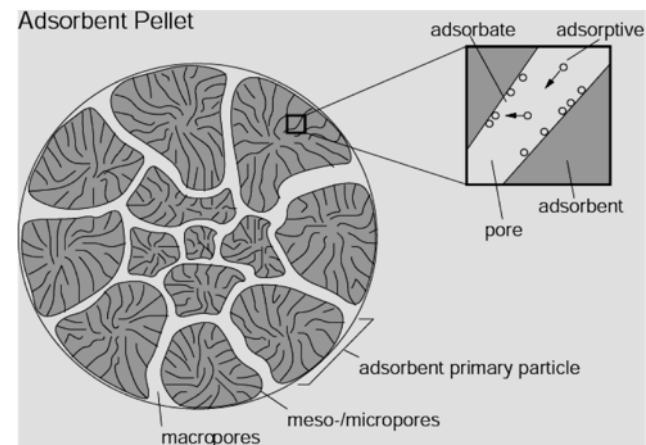
kompliziert



Viele verfahrenstechnische Prozesse sind von physikalischen Vorgängen geprägt. Hierzu gehören **grenzflächendominierte Prozesse**.

Typische Beispiele sind

- Der Lotus-Effekt
- Die Adsorption von Molekülen an einer Oberfläche

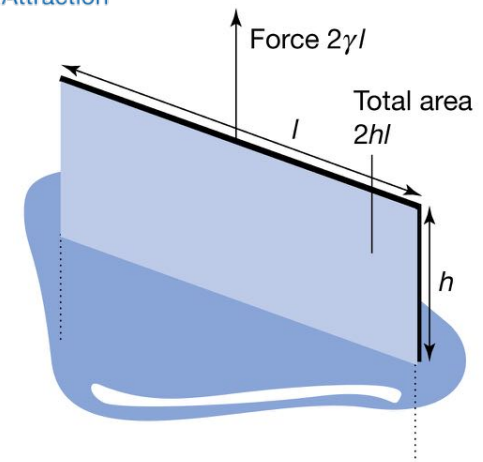
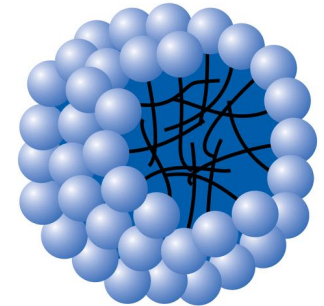
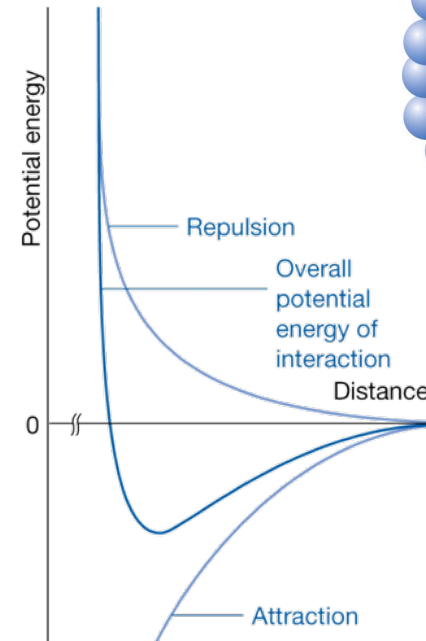


## 1. Aggregatzustände

1. Übersicht und Systematik
2. Das Modell des idealen Gases
3. Intermolekulare Wechselwirkungen
4. Reale Gase und Verflüssigung
5. Einfache Flüssigkeiten
6. ~~Kristalline Festkörper~~ [Einf. Materialwiss.]
7. Komplexe Fluide, *Soft Matter*

## 2. Grenzflächen

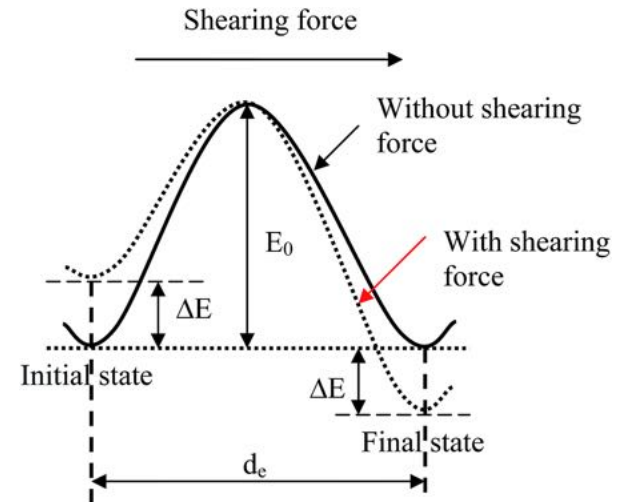
1. Grenzflächenspannung
2. Gekrümmte Grenzflächen
3. Benetzung und Kapillarität
4. Grenzflächenerscheinungen in Mischungen (Lösungen)
5. Adsorption an Festkörperoberflächen





## Beispiel: Viskosität von Flüssigkeiten

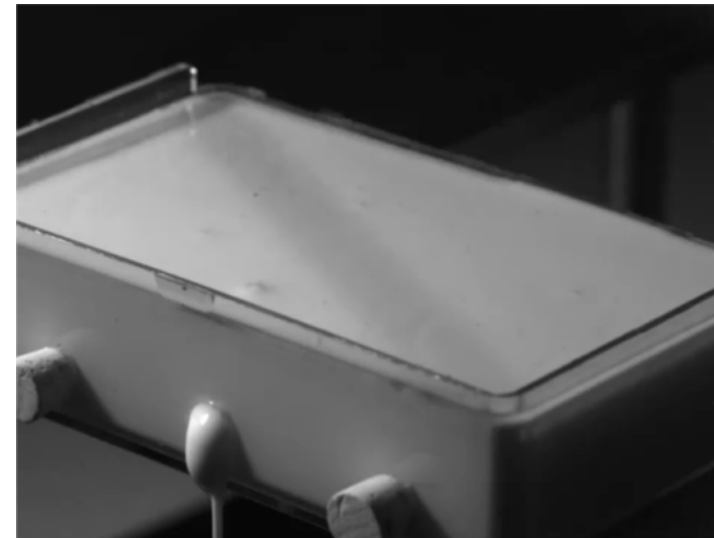
- Was sind die molekularen Ursachen der Viskosität von Flüssigkeiten?
- Was bestimmt die Temperaturabhängigkeit der Viskosität? Warum sinkt die Viskosität einer Flüssigkeit mit steigender Temperatur während die Viskosität eines Gases zunimmt?
- Was ist *scherverdünnendes*, was *scherverdickendes* Verhalten? Was sind jeweils die molekularen Ursachen?



## Laborversuche

- Kritischer Punkt von  $\text{CO}_2$
- Dipolmoment und dielektrische Konstanten von Flüssigkeiten
- Oberflächenspannung von Lösungen
- Adsorption von Essigsäure an Aktivkohle

jeweils ein Nachmittag, in 2er Gruppen



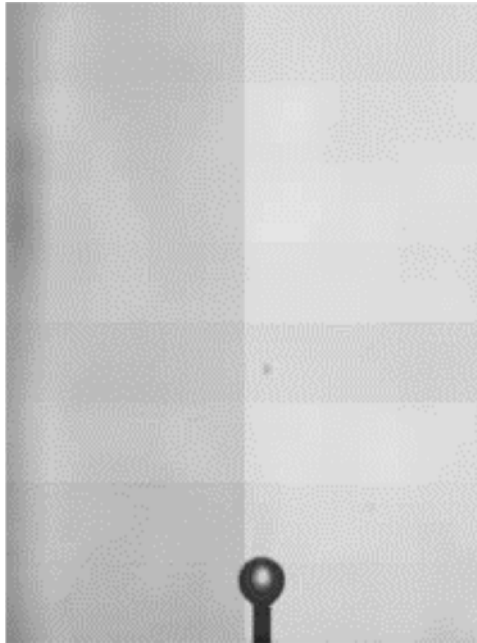
see: [https://youtu.be/hP88C-\\_LgnE](https://youtu.be/hP88C-_LgnE)

# Anwendung der PC

## Gasinjektion in Blasensäule

Blasenbildung und –abriss ist ein physikalischer Prozess.

Experiment



Simulation



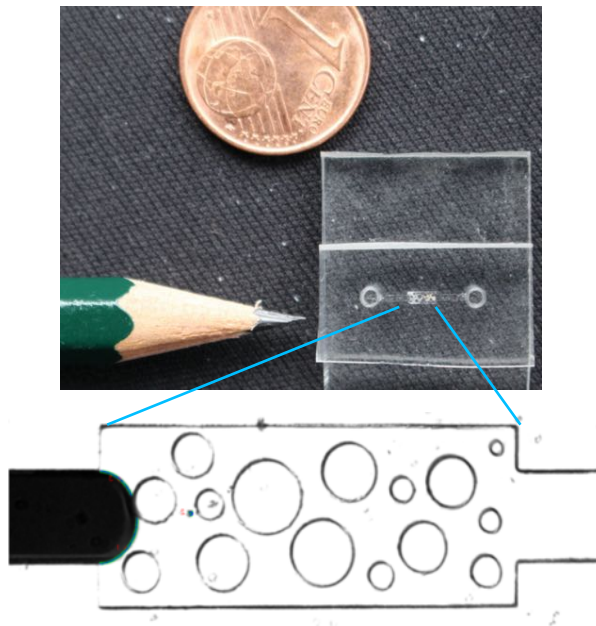
- Untersuchung und Vorhersage der Blasenform bei unterschiedlicher Düsengeometrie und –material.
- Benetzungseigenschaften und Form der Düse beeinflussen Blasenform und Größe bei Abriss.

# Anwendung der PC

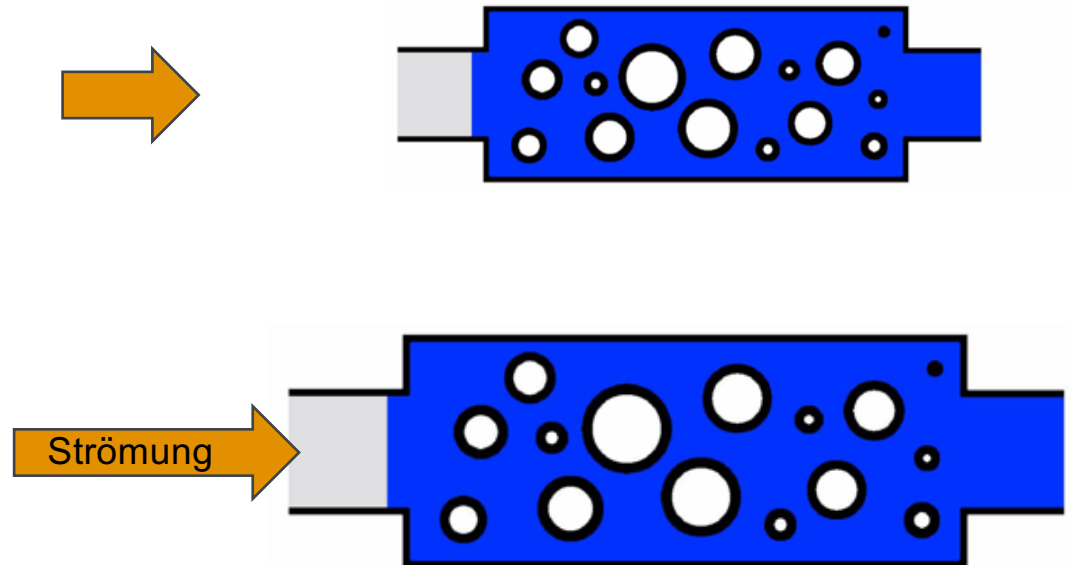
## Mehrphasenströmung in porösen Medien

### Verdrängung von Fluorinert mit Wasser

Experiment (Mikromodell)



Simulation

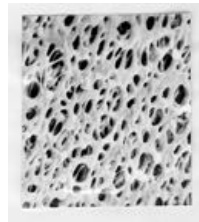
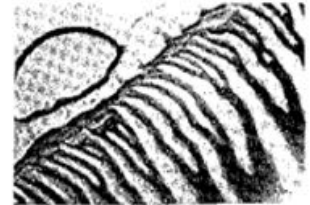


- Benetzungsverhalten z.B. beim Transport von Wasser und Sauerstoff in der Brennstoffzelle

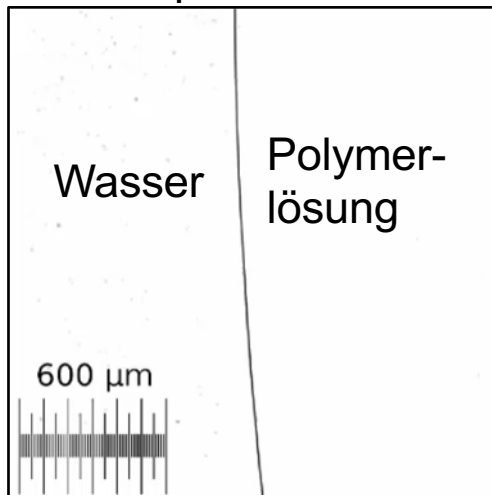
# Anwendung der PC

## Herstellung von porösen Polymermembranen

- Polymermembranen werden als Filter in der Wassertechnik, Filtration oder Medizintechnik eingesetzt.
- Eine gezielte Membranstruktur ist für funktionelle Materialien wichtig.
- Entstehungsprozess der Porenstruktur ist ein physikalischer (grenzflächendominierter) Prozess



Experiment



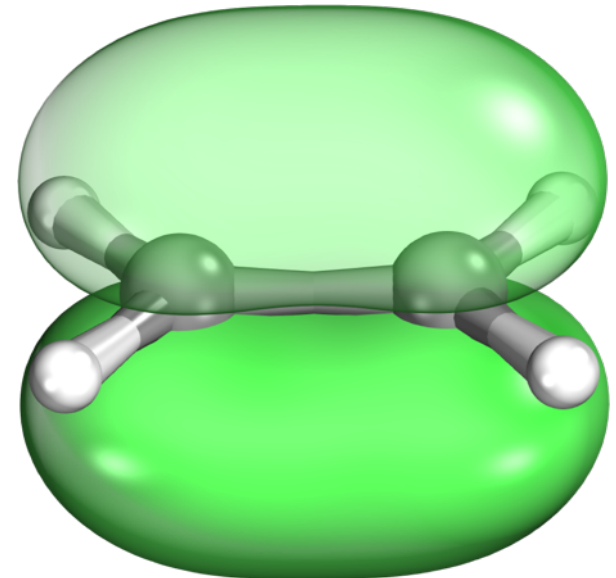
Video in Realzeit

Simulation



## Vorlesung

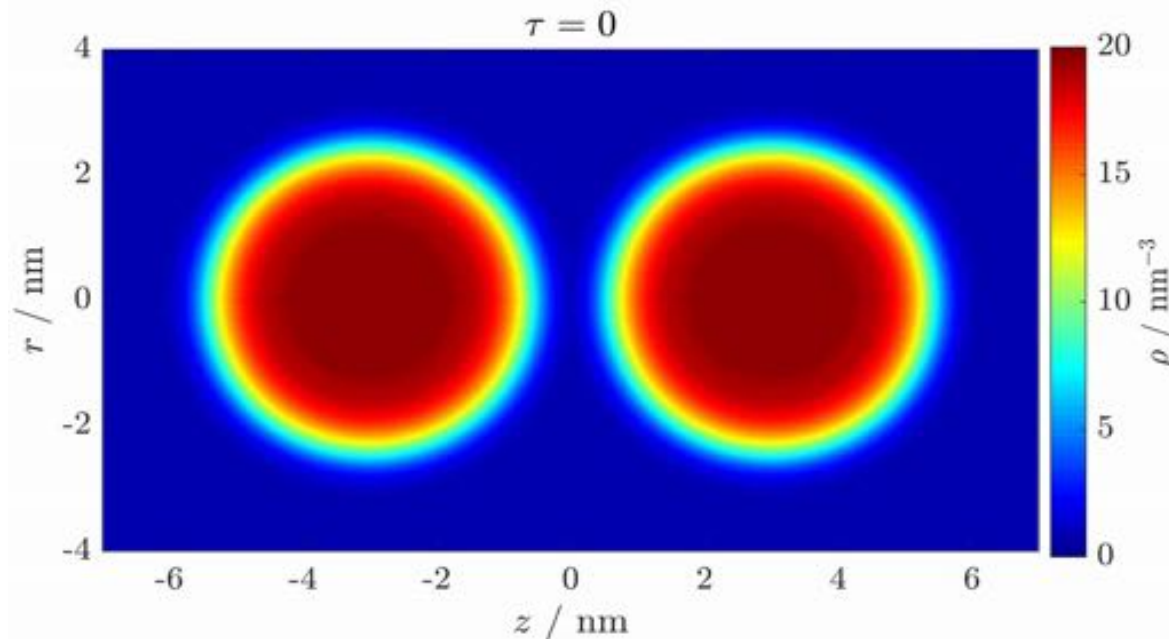
- Grundlagen der Quantenmechanik
- Berechnung von Molekülschwingungen (Infrarot-Spektren)
- Atombau
- Chemische Bindung und Elektronenstruktur von Molekülen



# Anwendung der TC

## Koaleszenzverhalten von Argon vorhersagen

- Störung des chemischen Potentials durch die zweite Grenzfläche (zweiter Tropfen) führt zu Koaleszenz
- DFT prädiktiv für Grenzflächeneigenschaften
- thermodynamisch konsistentes Modell für Koaleszenz als Schnittstelle für die Strömungsmechanik



# Anwendung der TC

## Proteinsimulation

- Untersuchung der Wechselwirkungen des Proteins
- Fragestellung: Wie wirken sich die Eigenschaften des Proteins aus?
- MD-Simulationen von Proteinen zur Untersuchung von:
  - Struktur und Dynamik
  - Stabilität
  - Interaktion mit Lösungsmitteln und anderen Makromolekülen (z.B. Wirkstoffmoleküle)

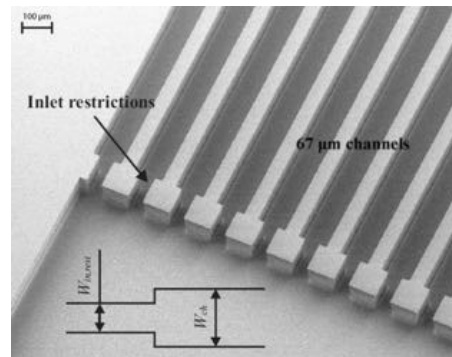
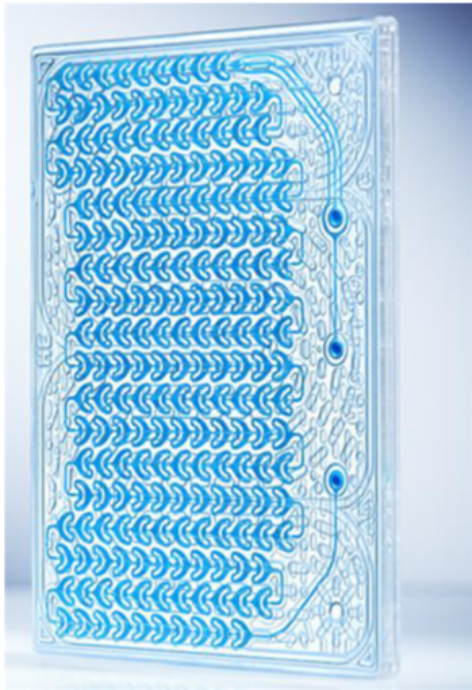


Protein in Lösungsmittel



# Mikroreaktionstechnik

Ziel ist die  
**Prozessintensivierung**,  
 d.h. bessere, schnellere, sicherere,  
 umweltverträglichere und/oder  
 preiswertere Prozesse

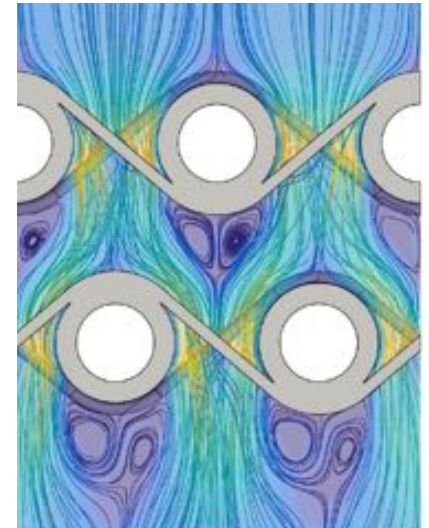
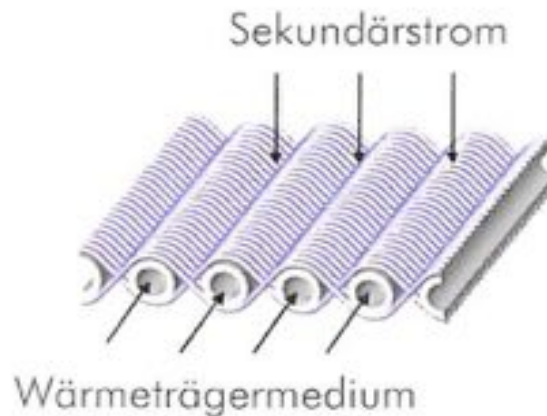


M. Schlüter, TU Hamburg-Harburg



# Vorlesung der Mikroreaktionstechnik

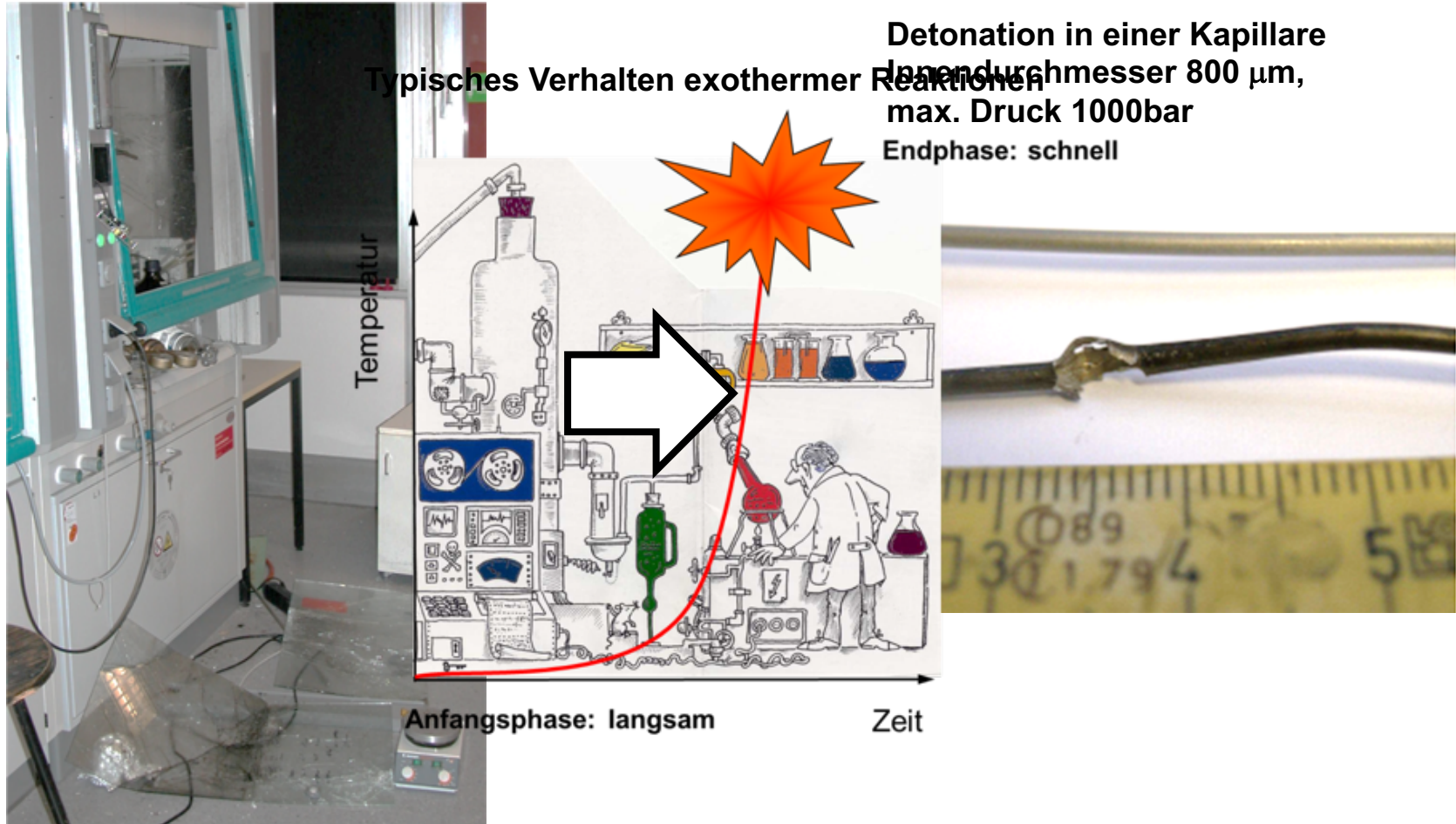
- „Mikroeffekte“ auf Wärmeleitung, Diffusion und Oberflächen
- Strömungen in Mikroreaktoren
- Apparate der Mikroverfahrenstechnik (Wärmeübertrager, Mischer, Reaktoren)
- Anwendungen der Mikroreaktionstechnik



# Anwendung der Mikroreaktionstechnik

⇒ sichere Prozessführung

## Explosion in einem 300 ml Stahlautoklaven



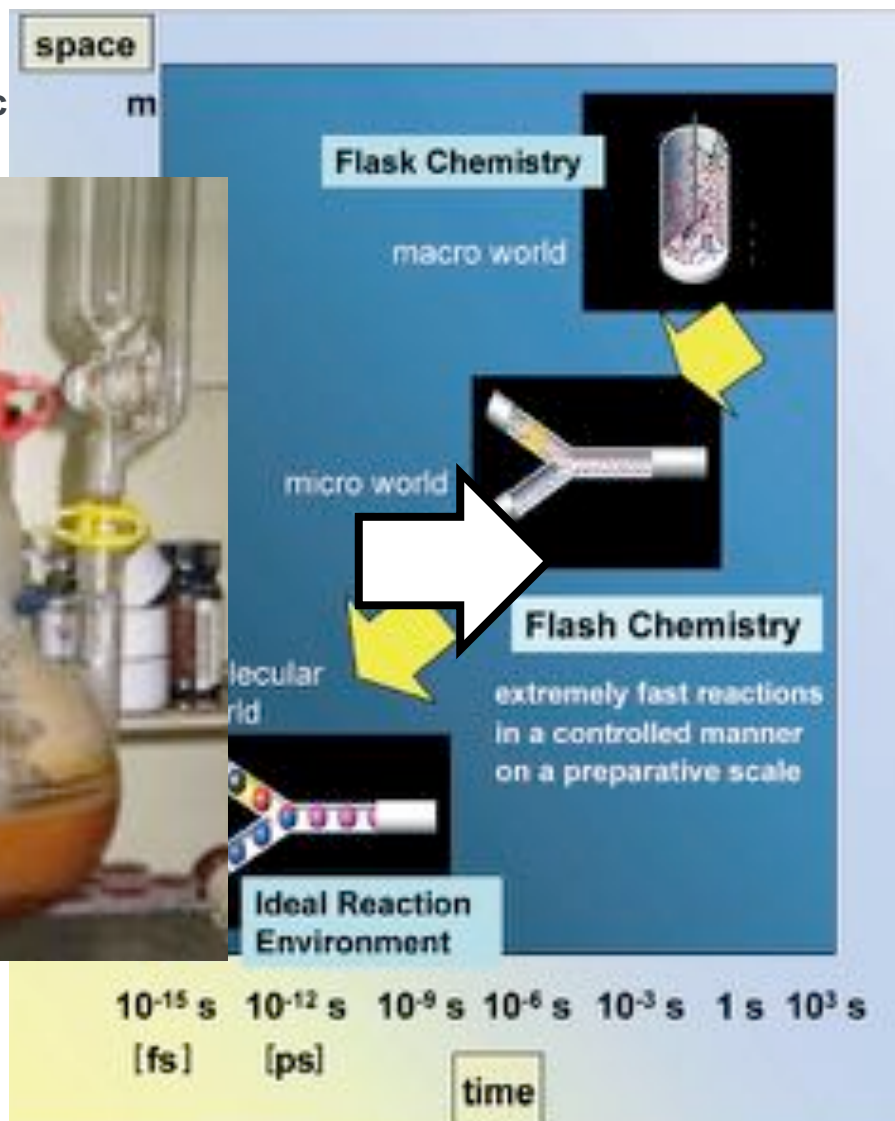
# Anwendung der Mikroreaktionstechnik

⇒ Flash Chemistry

Klassische Chemie  
(Dreihalskolben)



Chemische Forschung  
(Mikroreaktoren)



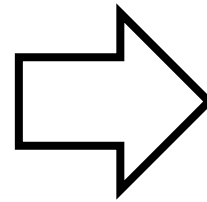
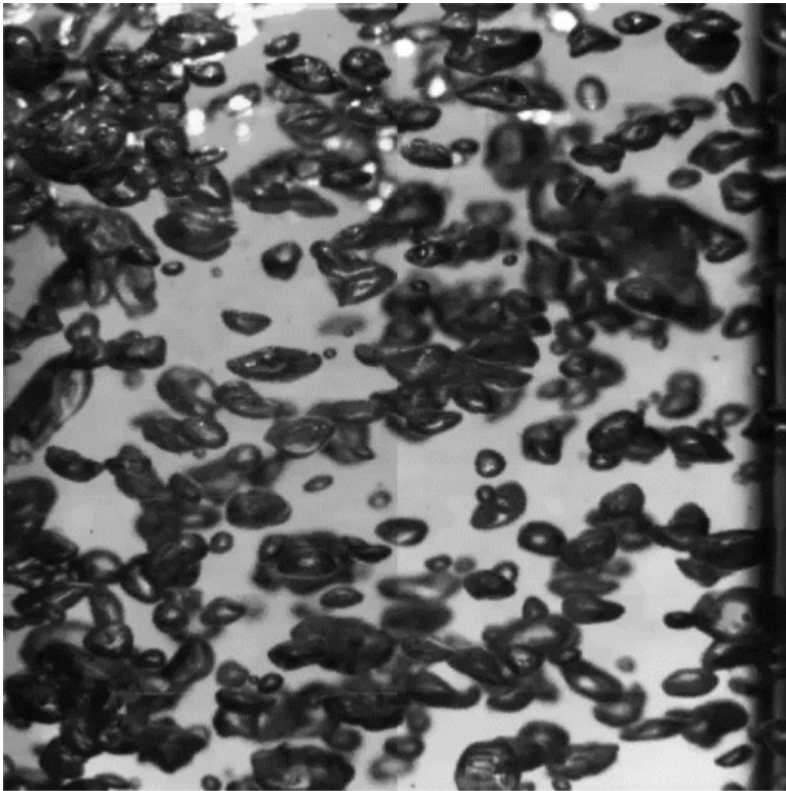


# Anwendung der Mikroreaktionstechnik

⇒ Gas/Flüssig-Reaktionen

Kontrollierte Reaktion im  
Blasennachlauf in einer Kapillare

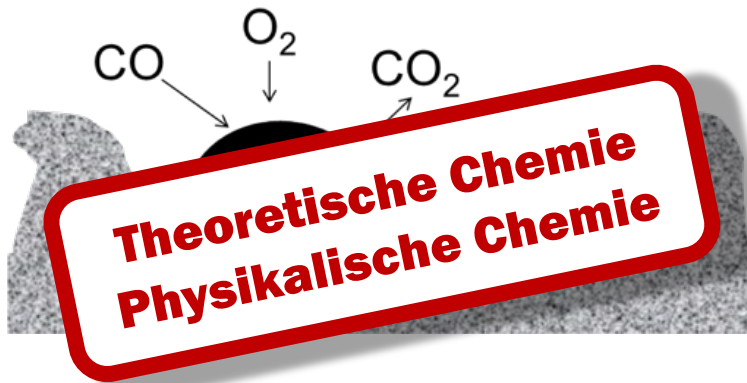
Klassische Reaktion in einer Blasensäule



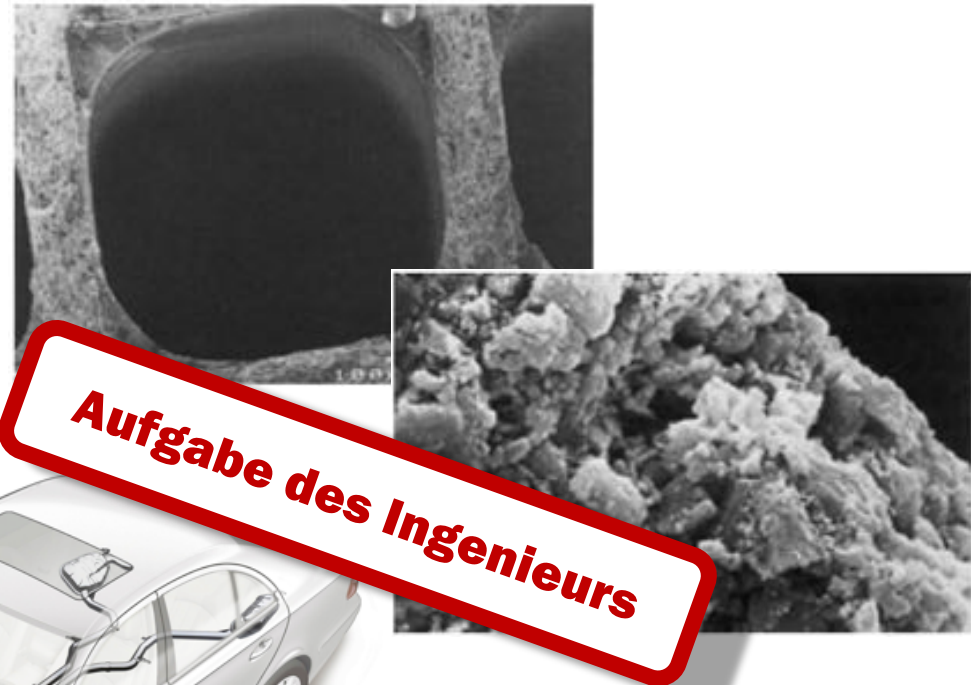
# Vom Detail zur Anwendung

## Beispiel Autoabgaskatalyse

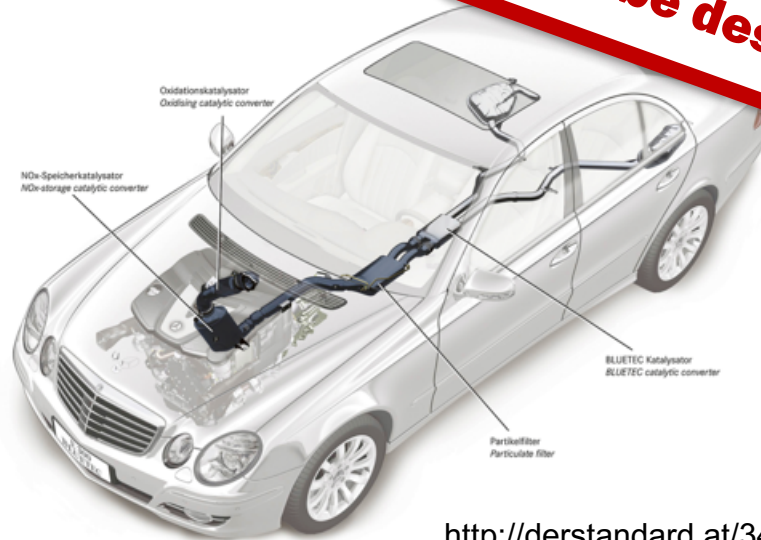
Verständnis der katalytischen Reaktion  
an einem Platin-Partikel



Bereitstellung des Katalysators auf  
einer Trägerstruktur



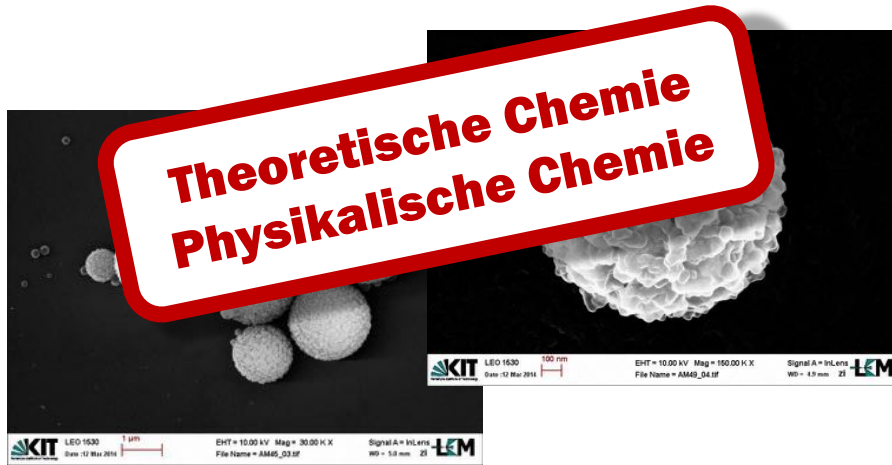
Gesamtprozess im Auto



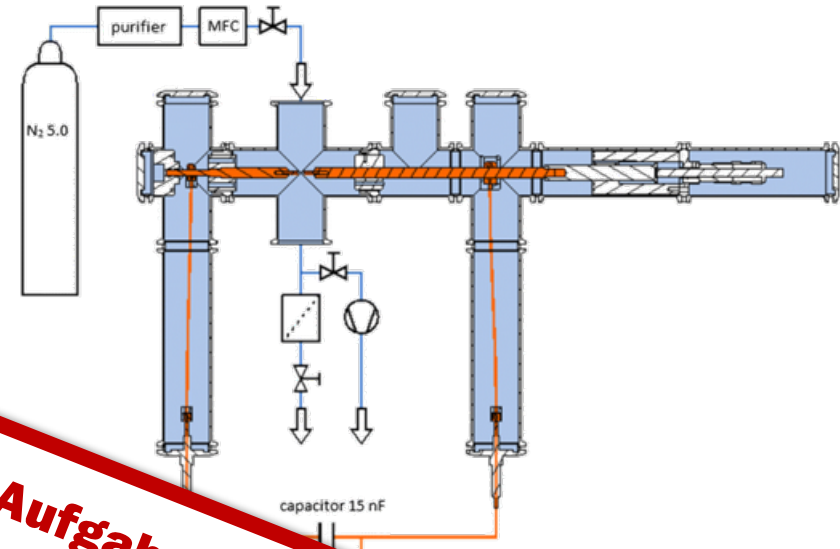
# Vom Detail zur Anwendung

## Beispiel Nanopartikel

Nanopartikel mit unterschiedlichen  
Eigenschaften



Herstellung von Nanopartikeln



**Aufgabe des Ingenieurs**

Oberflächenbeschichtungen mit  
speziellen Eigenschaften



# Vom Detail zur Anwendung

## Gasdiffusionselektroden (GDE)

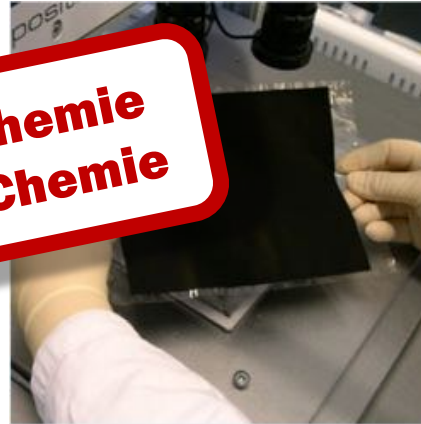
Brennstoffzellen

Metall-Luft-Batterien

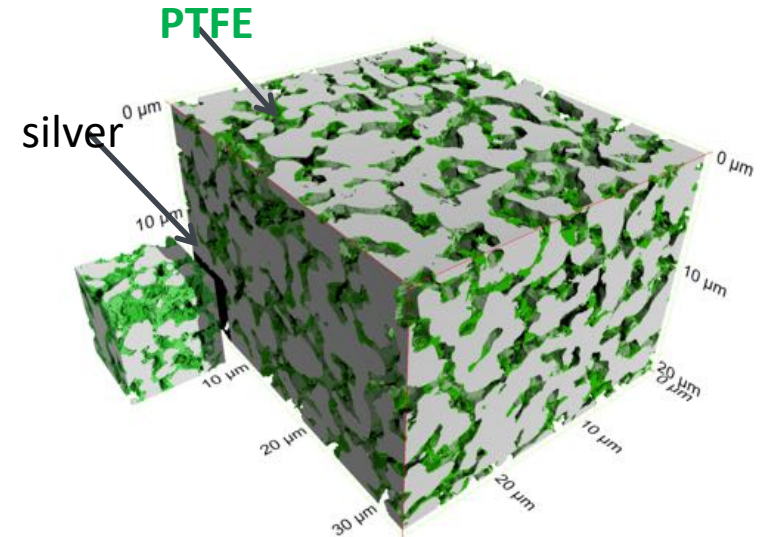
Energiespeicher

GDE für Brennstoffzellen

**Theoretische Chemie**  
**Physikalische Chemie**



[fuelcellstore.com](http://fuelcellstore.com)



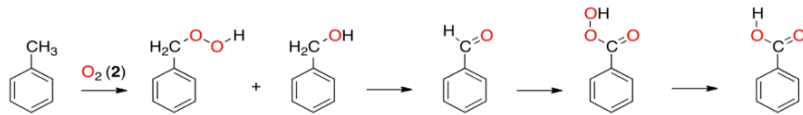
**Aufgabe des Ingenieurs**



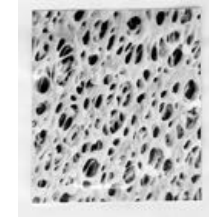
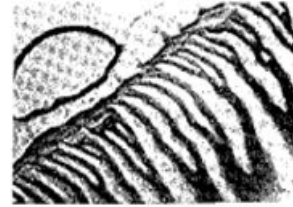
[covestro.com](http://covestro.com)



## Organische Chemie

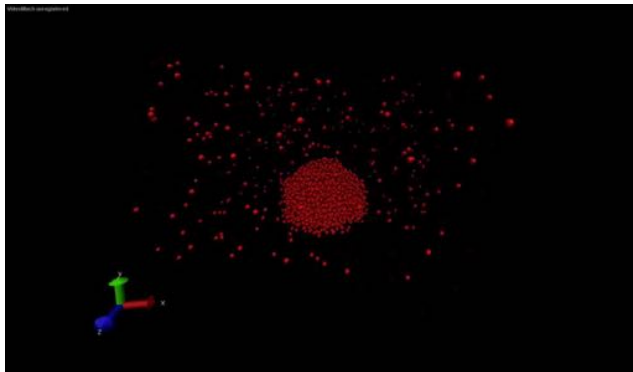


## Physikalische Chemie



## Fragen ?????

## Theoretische Chemie



## Mikroreaktionstechnik

