

Spezialisierung „Thermische Verfahrenstechnik“

Joachim Groß

Institut für Technische Thermodynamik und Thermische Verfahrenstechnik (ITT)

Vorlesungs - Portfolio am ITT

Vorlesung	(LP)	
Technische Thermodynamik I	(6)	B.Sc.
Technische Thermodynamik II	(6)	
Thermodynamik der Gemische I	(6)	
Thermische Verfahrenstechnik I	(6)	
Thermische Verfahrenstechnik II	(6)	M.Sc.
Nichtgleichgewichts-Thermodynamik: Diffusion und Stofftransport	(3)	
Molekulare Thermodynamik	(3)	
Molekularsimulation	(6)	

Thermo I / II

1. und 2. Hauptsatz,
Reinstoffverhalten und einfache
Mischungen, Kreisprozesse,
Wirkungsgrade

Thermodynamik der Gemische

Phasengleichgewichte in
Mischungen, treibende Kräfte für
Stofftransport, chemisches
Reaktionsgleichgewicht

Thermische Verfahrenstechnik

Methoden zur Trennung von
Mischungen

Grundlagen im Bachelorstudium

Vertiefung im Masterstudium

Thermische Verfahrenstechnik

Anwendung der Grundlagen in TVT I und TVT II

Methoden zur Trennung von Mischungen

Molekulare Thermodynamik

Beschreibt Stoffeigenschaften und
Trennverfahren auf molekularer Ebene

Nicht – Gleichgewichts- thermodynamik

Transportgleichungen sowie energetische
Bewertung von Prozessen (Quantifizieren
von „Nachhaltigkeit“)

... für Studierende Maschinenbau

Empfehlung



Vorlesung	(LP)	
Technische Thermodynamik I	(6)	
Technische Thermodynamik II	(6)	B.Sc.
Thermische Verfahrenstechnik I	(6)	Ergänzungsmodul
Thermodynamik der Gemische I	(6)	Kernfächer
Thermische Verfahrenstechnik II	(6)	
Praktikum Angewandte Thermodynamik	(3)	M.Sc.
Molekularsimulation	(6)	
Molekulare Thermodynamik	(3)	Ergänzungsfächer
Nichtgleichgewichts-Thermodynamik: Diffusion und Stofftransport	(3)	

Empfehlung zur Fächerwahl (MACH)

Variante 1 („Angewandte Thermo“)

- Thermodynamik der Gemische
- Thermische Verfahrenstechnik I
- Thermische Verfahrenstechnik II
- Molekularsimulation / Molekulare Thermodynamik

⇒ führt zu einer verfahrenstechnischen Ausrichtung

⇒ am besten zu ergänzen um energietechnische oder weitere verfahrenstechnische Vertiefungen

Variante 2 („Thermo light“)

- Thermodynamik der Gemische
- Molekularsimulation / Molekulare Thermodynamik

⇒ ergänzt eine materialwissenschaftliche Ausrichtung im Maschinenbau um molekulare Methoden

Thermo I / II

1. und 2. Hauptsatz,
Reinstoffverhalten und einfache
Mischungen, Kreisprozesse,
Wirkungsgrade

Thermodynamik der Gemische

Phasengleichgewichte in
Mischungen, treibende Kräfte für
Stofftransport, chemisches
Reaktionsgleichgewicht

Thermische Verfahrenstechnik

Methoden zur Trennung von
Mischungen

Grundlagen im Bachelorstudium

Vertiefung im Masterstudium

Thermische Verfahrenstechnik

Anwendung der Grundlagen in TVT I und TVT II

Alle Methoden zur Trennung von Mischungen

Molekulare Thermodynamik

Beschreibt Stoffeigenschaften und
Trennverfahren auf molekularer Ebene

Nicht – Gleichgewichts- thermodynamik

Transportgleichungen sowie energetische
Bewertung von Prozessen (Quantifizieren
von „Nachhaltigkeit“)

Was ist Thermische Verfahrenstechnik?

Membran

Mechanismus (1) Unterschiedl. **Löslichkeit**
zweier Stoffe in Membran
(2) Unterschiedl. **Diffusion**
durch Membran

Triebkraft Chemisches Potential

⇒ **Thermische Verfahrenstechnik**

Filtration

Mechanismus Flüssigkeit strömt durch
eine Filterzone, während
eine zweite (feste) Phase
zurückgehalten wird

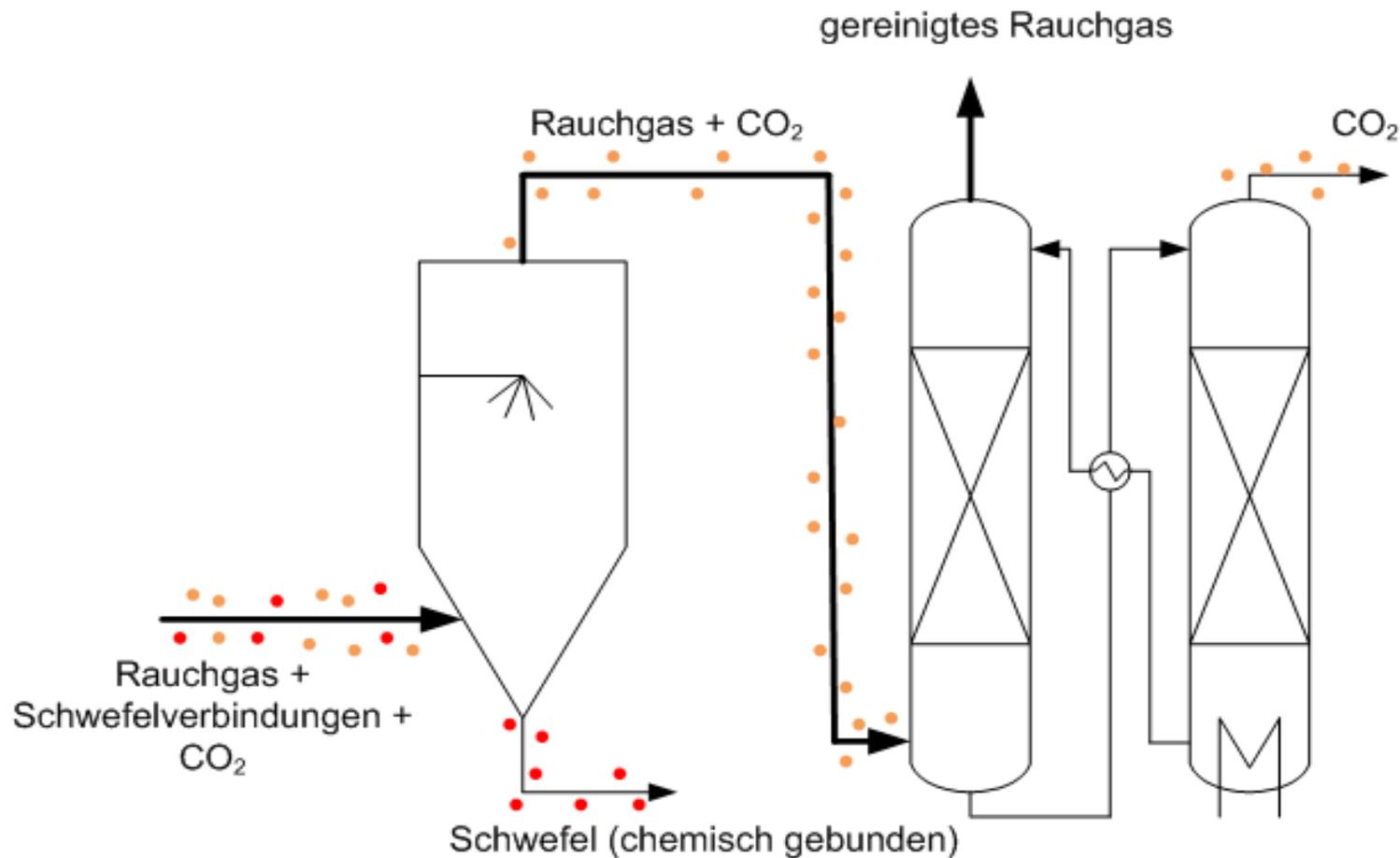
Triebkraft Newtonsche Kräfte

⇒ **Mechanische Grundoperation**

TVT I – Rauchgasreinigung in Kraftwerken

WWF-Rangliste: Vier der fünf dreckigsten Kohlekraftwerke Europas stehen in Deutschland

(22. Juli 2014)

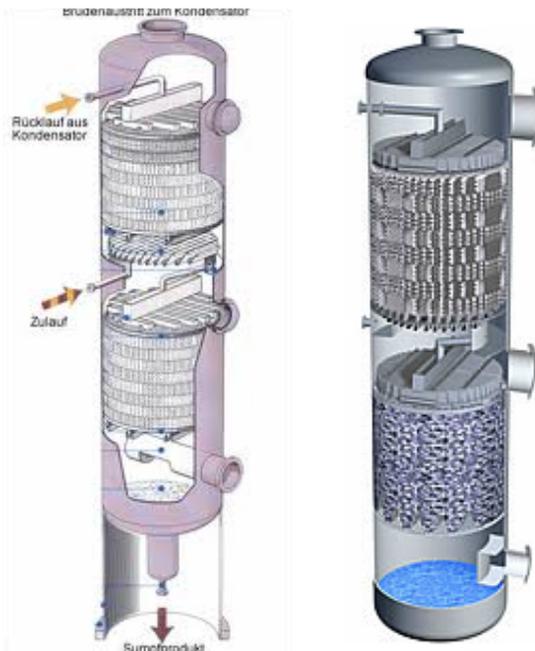


TVT I - Methoden zur Trennung von Mischungen

- Anwendung:
- Chemische Industrie, Biotechnologie, Pharmaindustrie, ...
 - Abwasseraufbereitung, Recycling von Prozessströmen
 - Produktaufarbeitung

Destillation

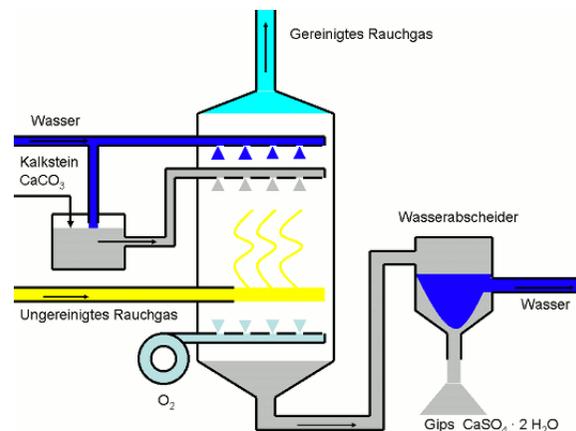
➔ Praktikumsversuch



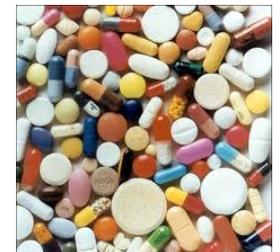
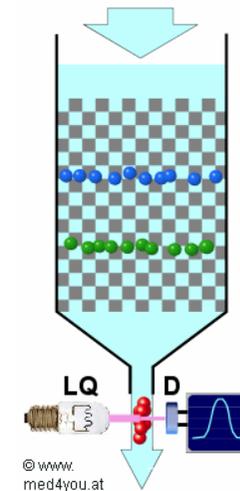
Absorption

Rauchgasentschwefelung

➔ Praktikumsversuch

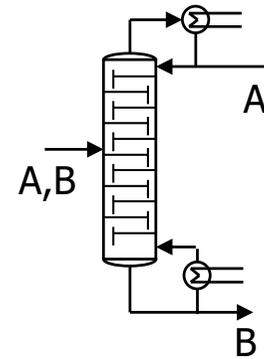


Kristallisation und Chromatographie

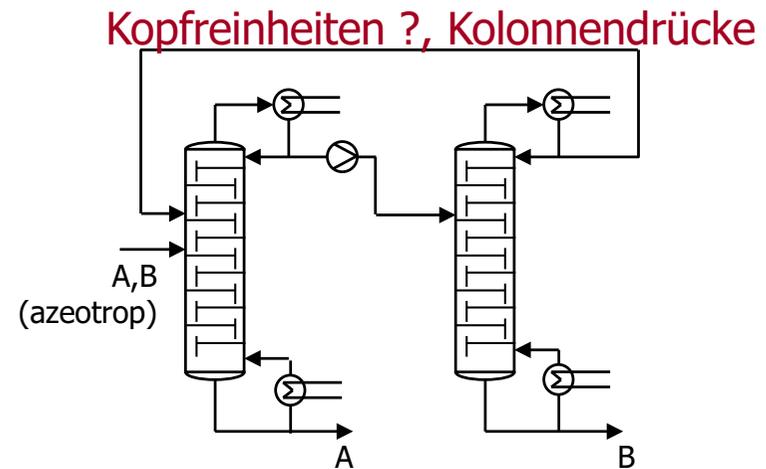


Thermische Verfahrenstechnik II behandelt...

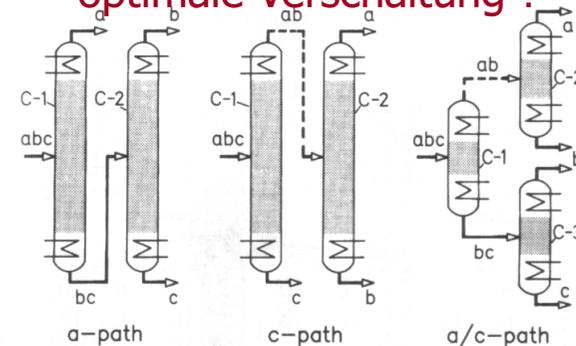
- ... die Wahl von Stoffdatenmodellen und die Berechnung und Dimensionierung von Trennapparaten
- ... die Parameteroptimierung von Trennapparaten und –prozessen
- ... die topologische Optimierung (=optimale Prozessverschaltung) u.a. auch die apparative und energetische Integration von Trennprozessen



Apparat ?
Dimension ?



optimale Verschaltung ?



Thermische Verfahrenstechnik II ...

... behandelt die genannten 3 Aspekte (Dimensionierung von Apparaten, Parameteroptimierung und topologische Optimierung)

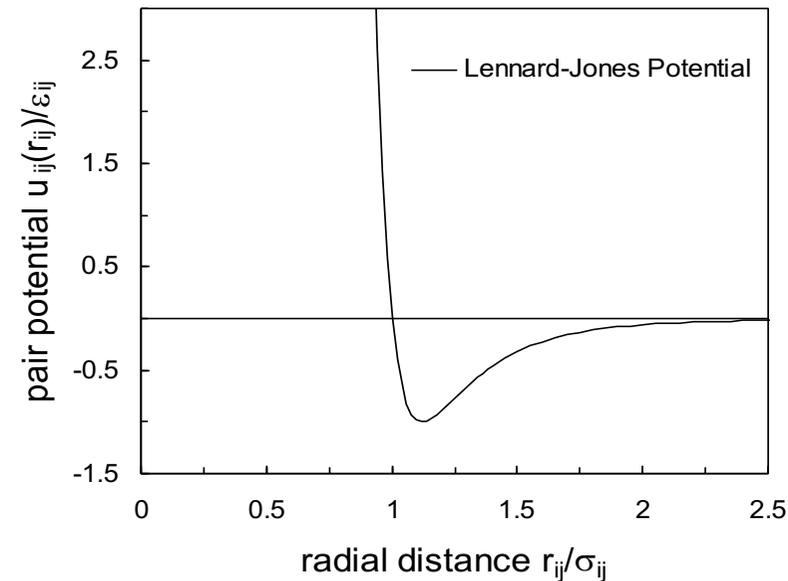
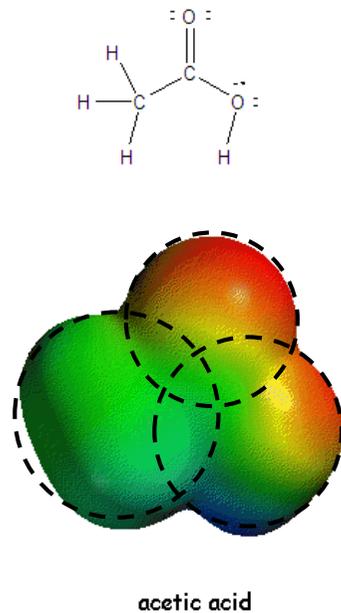
- mit Hilfe von Prozesssimulationen (AspenPlus)
- anhand praktischer Aufgabenstellungen, in 4er-Gruppen
- lernen am praktischen Problem / viel Diskussion / Teamarbeit
- jede Gruppe stellt eine Ausarbeitung in Form einer Präsentation im Forum vor

Behandelte Trennverfahren

- Destillation
- Adsorption
- Technische Chromatographie
- Membrantrennverfahren

Molekulare Thermodynamik / Molekularsimulation

Molekulare Thermodynamik / Molekularsimulation



Aufgabe der Molekularen Thermodynamik: Berechnung von makroskopischen und mikroskopischen (Material)eigenschaften aus intermolekularen Wechselwirkungen

Molekulare Thermodynamik

Motivation von (Verfahrens)Ingenieuren behandelte Systeme sind zunehmend komplex: Makromolekulare Systeme, biologische Vorgänge, Mizellen, Elektrolytlösungen (pH-Abhängigkeiten) ...

wobei

weniger experimentelle Daten



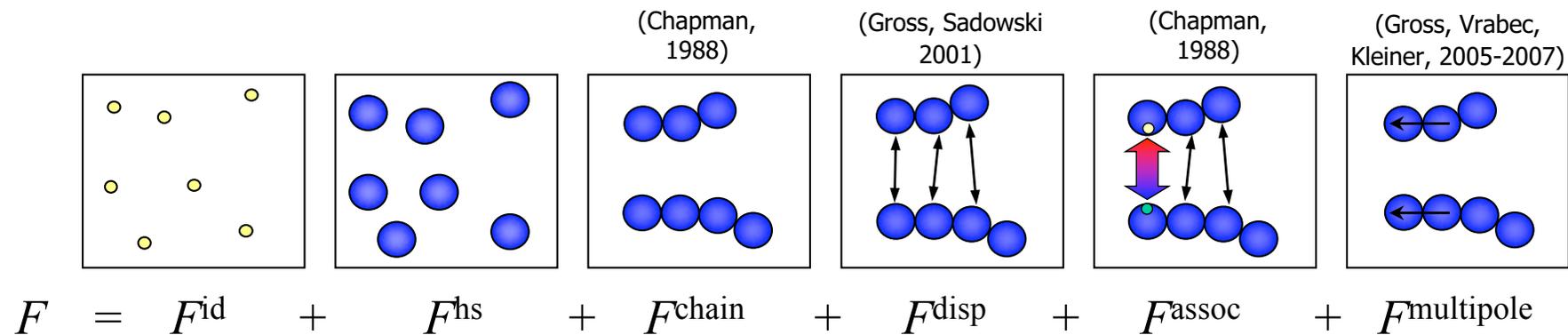
⇒ prädiktive Modelle erforderlich ⇔ **molekulare Methoden** erforderlich

- Lernziele
- 1) Grundlagen der Statistischen Mechanik
 - 2) Berechn. makroskopischer Eigenschaften aus molekul. Größen
 - 3) Entwicklung molekularer Modelle

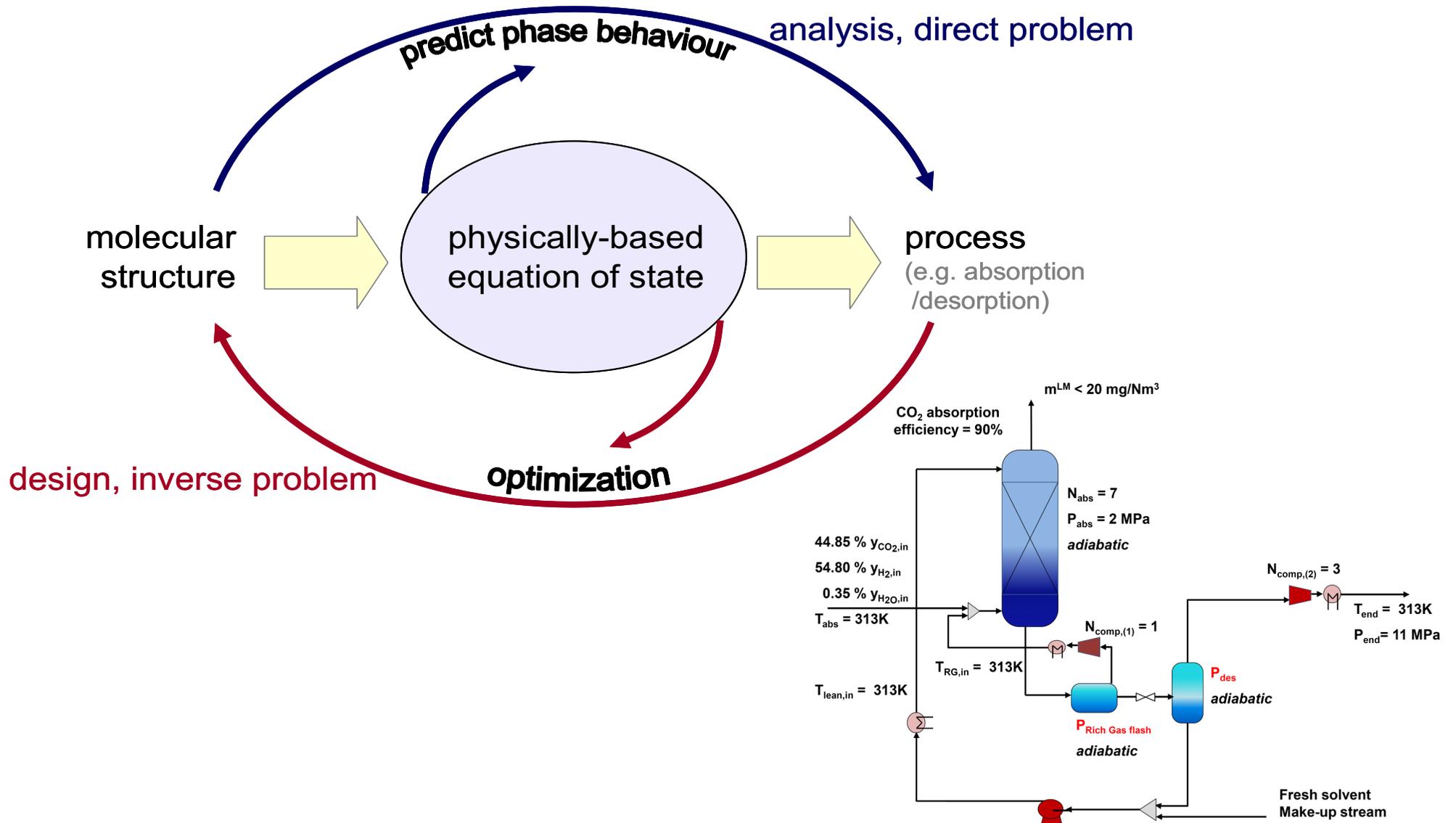
PC-SAFT Equation of state

Perturbed-Chain Statistical Associating Fluid Theory EOS (PC-SAFT)

- Wertheim's perturbation theory for anisotropic, directional interactions \Rightarrow approach for associating interactions (H-bonding)
- in the limit of infinite association strength \Rightarrow chain formation

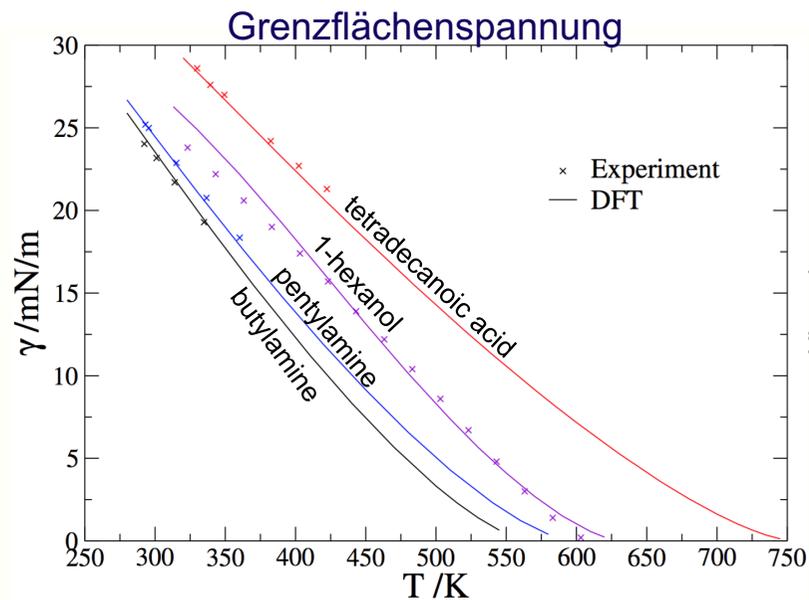


Molekulare Thermodynamik - Lösungsmitteloptimierung

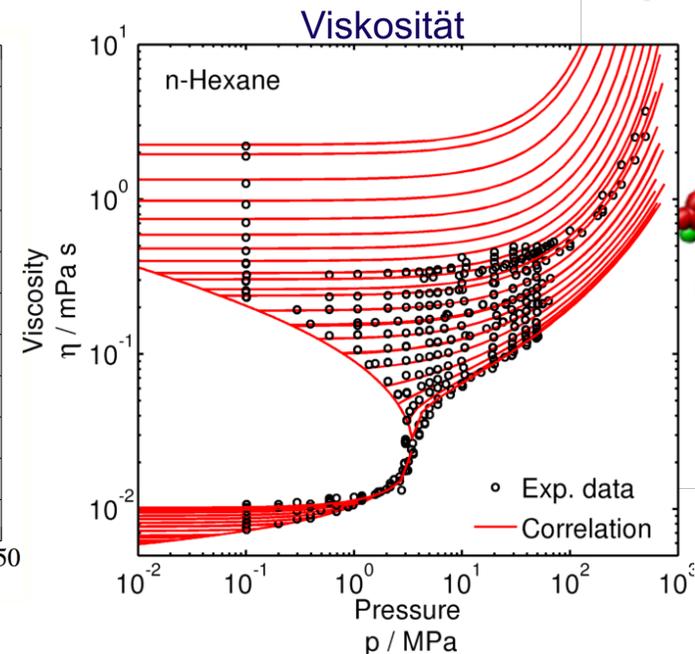


Molekulare Thermodynamik / Molekularsimulation

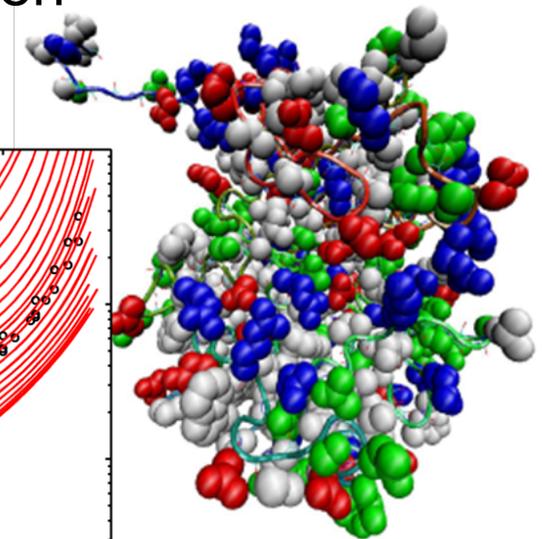
- neue molekulare Methoden erlauben die Vorhersage von Materialeigenschaften
- Grenzflächeneigenschaften, Struktureigenschaften



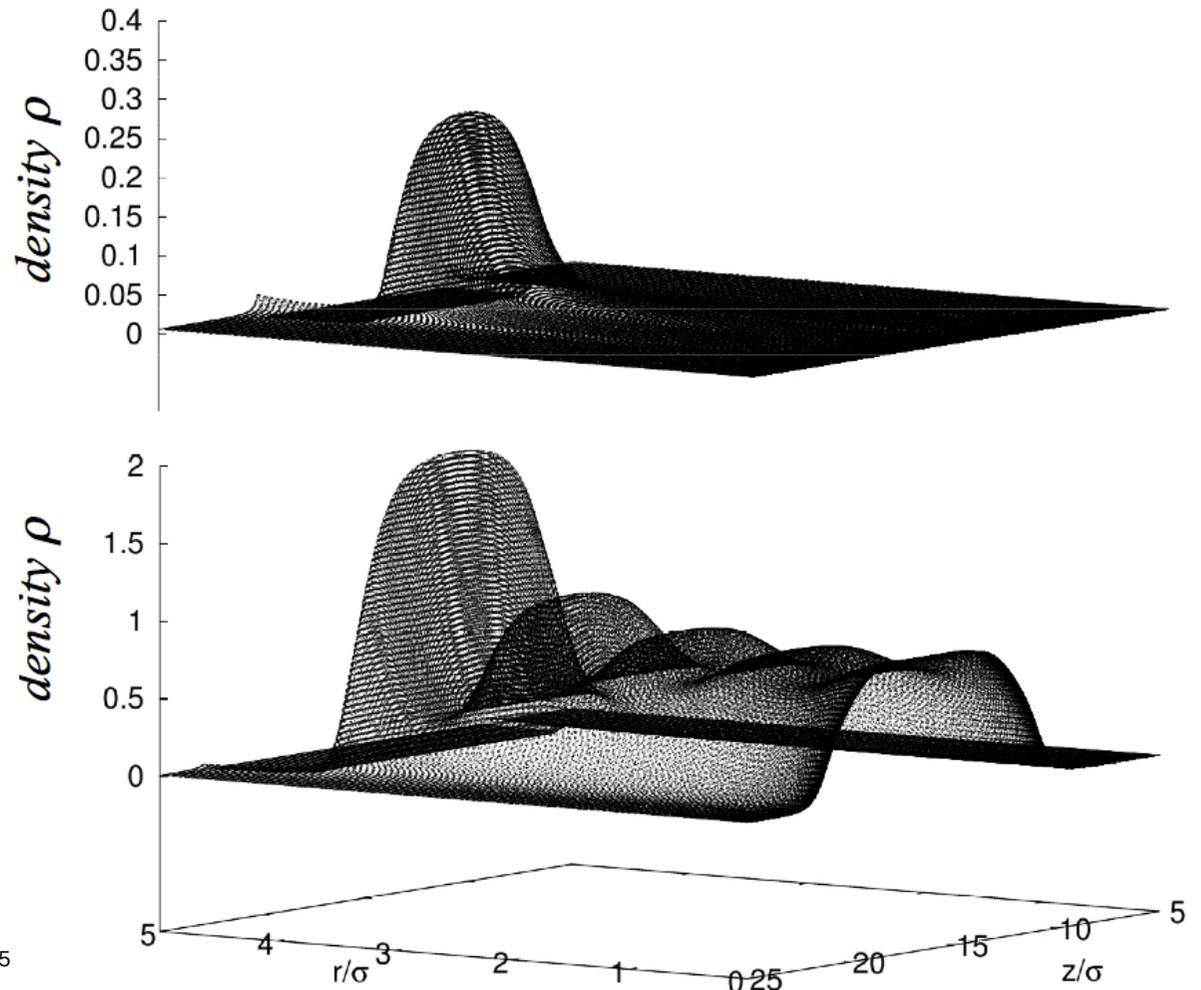
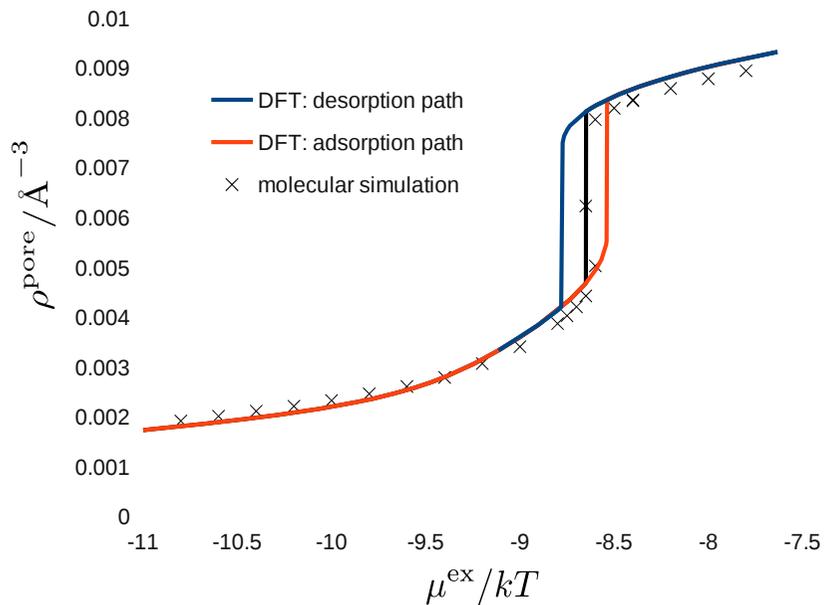
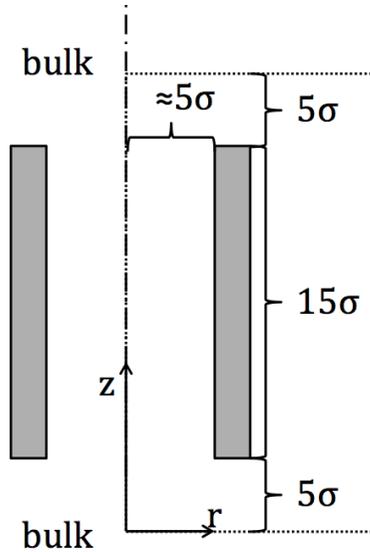
Sauer, Gross, IECR, 2017



Lötgering-Lin, Gross, IECR, 2015

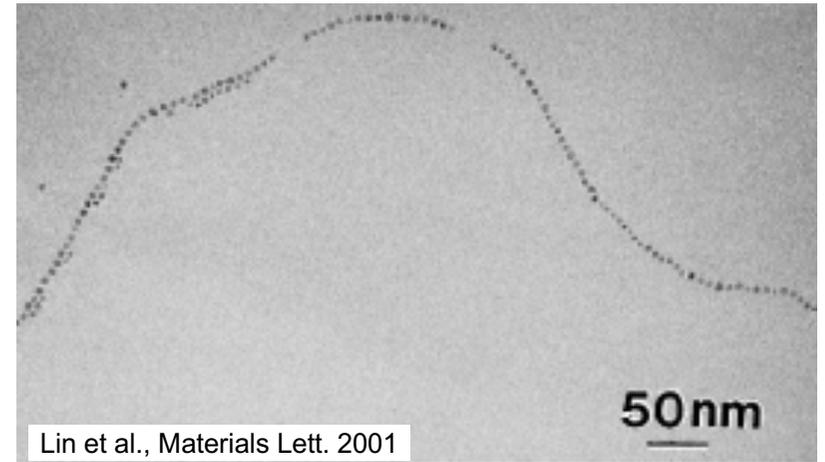
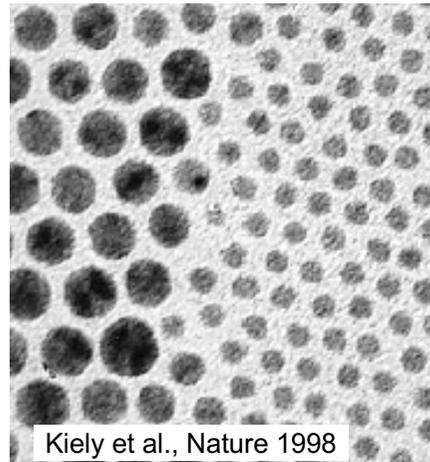
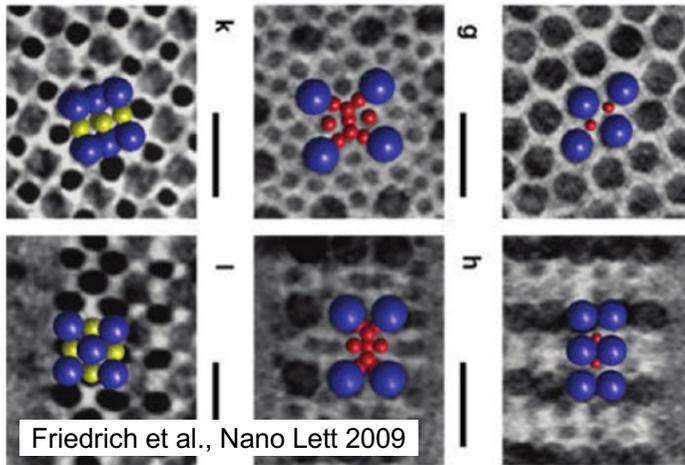
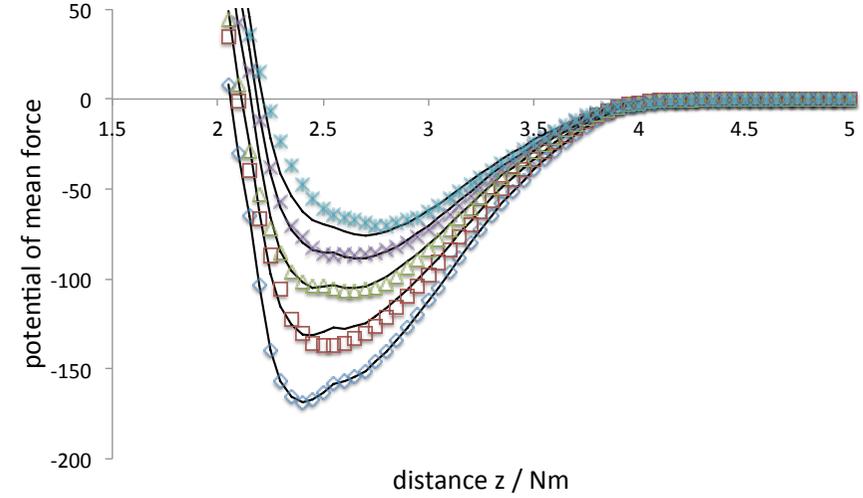
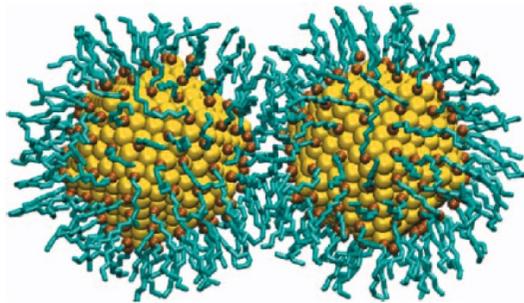


„Poren- Adsorption / Desorption Hysterese“



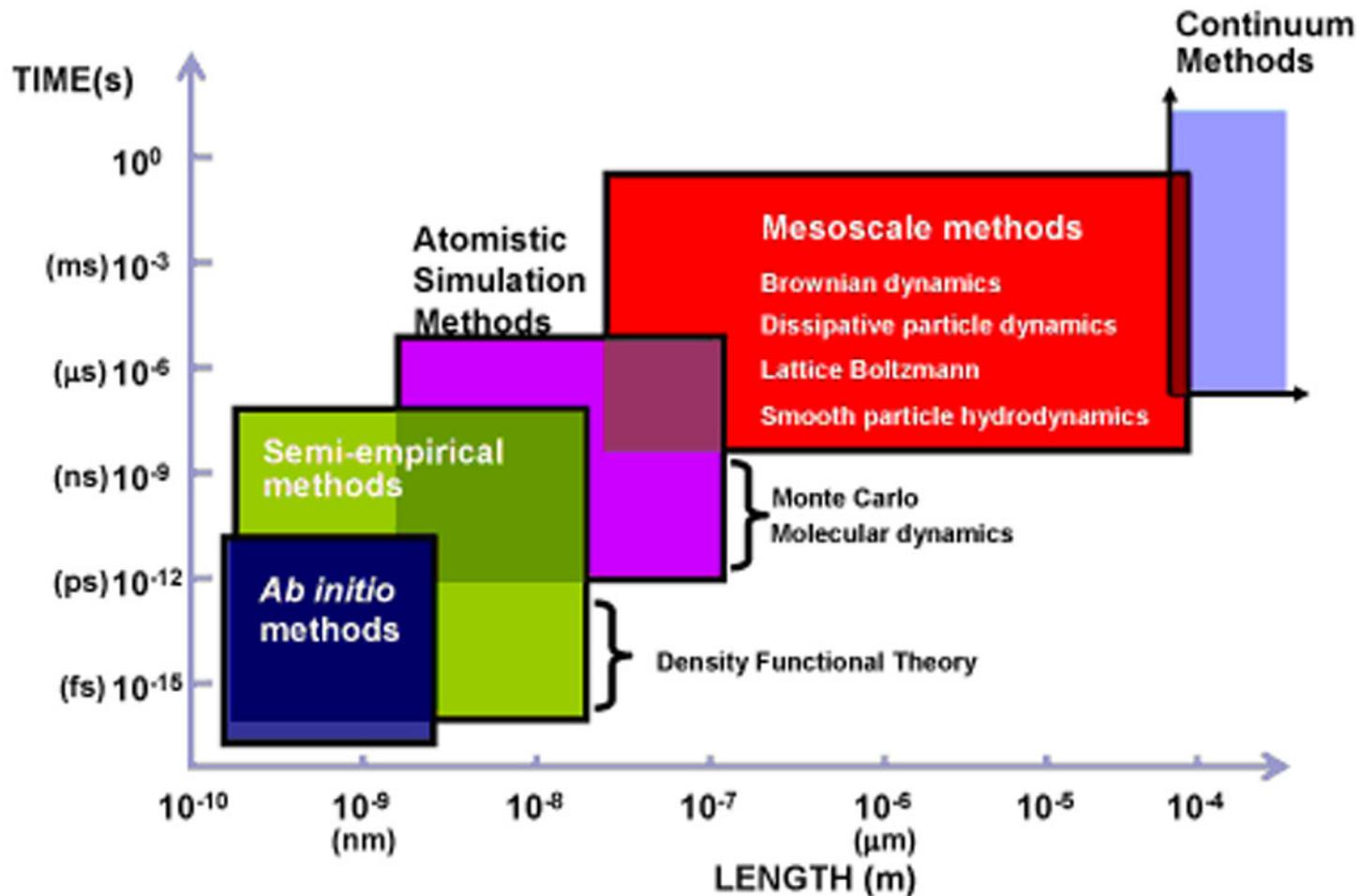
Molekularsimulation

Nanokristalle



Herausforderung – Skalenübergreifende Modellierung

Hierarchy of Computer Simulations



Nichtgleichgewichts-Thermodynamik: Diffusion und Stofftransport

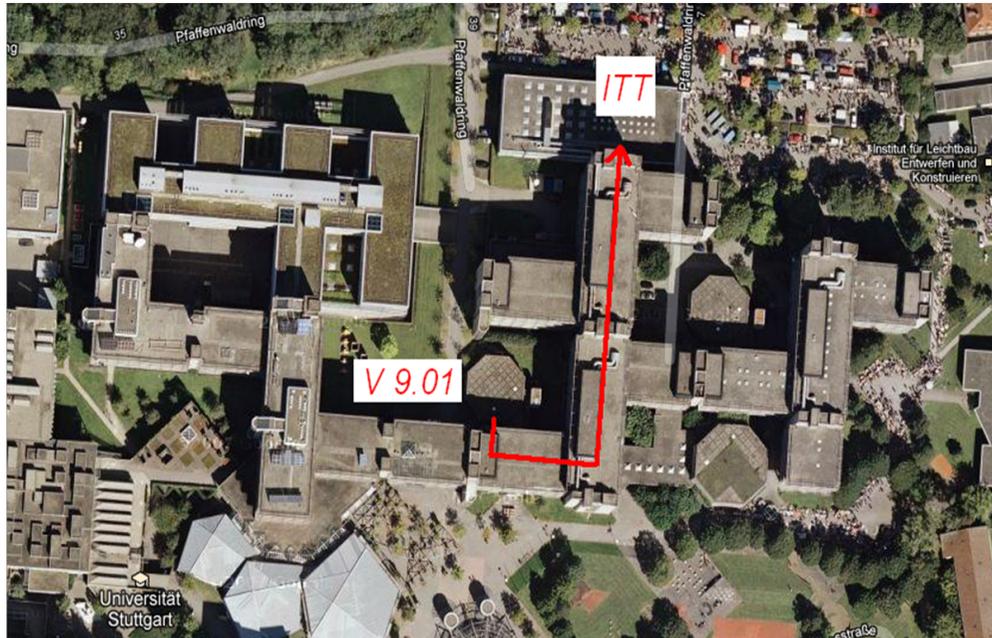
...führt zur Beschreibung der Entropieproduktion

- Ein Prozess ohne Entropieproduktion hinterlässt keinen Fußabdruck in der Umwelt
- Entropieproduktion ist ein Maß für die (Nicht)Nachhaltigkeit



... führt zur thermodynamisch konsistenten Beschreibung von Transportprozessen

Standort des ITT



ITT, Pfaffenwaldring 9, 1. Stock

Vorlesung	(LP)	
Technische Thermodynamik I	(6)	B.Sc.
Technische Thermodynamik II	(6)	
Thermodynamik der Gemische I	(6)	
Thermische Verfahrenstechnik I	(6)	
Thermische Verfahrenstechnik II	(6)	
Nichtgleichgewichts-Thermodynamik: Diffusion und Stofftransport	(3)	M.Sc.
Molekulare Thermodynamik	(3)	
Molekularsimulation	(6)	

Fragen ?