**Universität Stuttgart**
Institut für Technische Thermodynamik
und Thermische Verfahrenstechnik

**Joachim Groß**

# Spezialisierung

## „Molekulare und Thermische Verfahrenstechnik“

## „Angewandte Thermodynamik“

# Vorlesungs - Portfolio am ITT

| Vorlesung | (LP) | |
|---|---|---|
| Technische Thermodynamik I | (6) | |
| Technische Thermodynamik II | (6) | **B.Sc.** |
| 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) | |

## 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

Konzeptioneller Prozessentwurf, Prozessoptimierung, Methoden zur Trennung von Mischungen

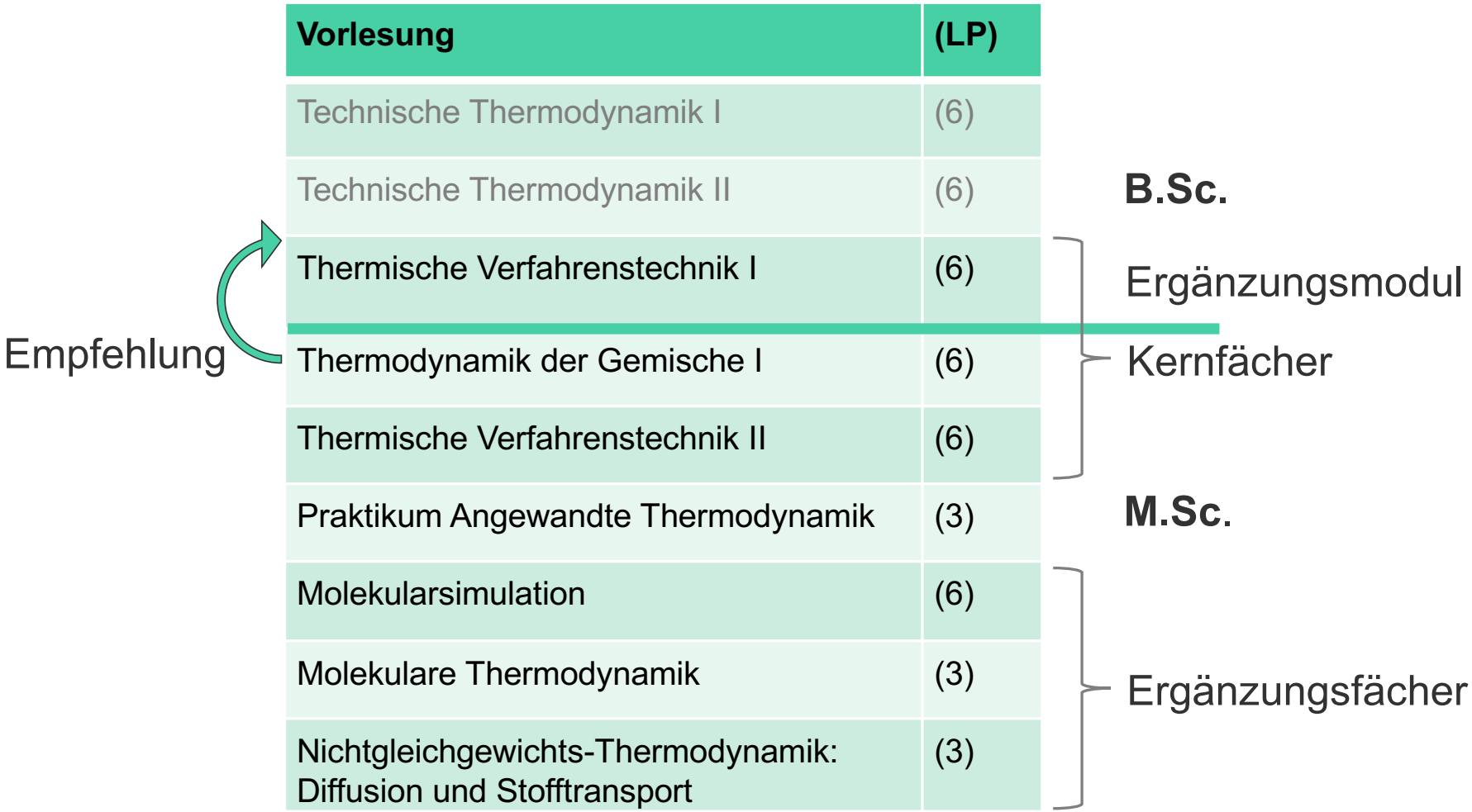
## Molekulare Thermodynamik

Beschreibt Material und Stoffeigenschaften auf molekularer Ebene

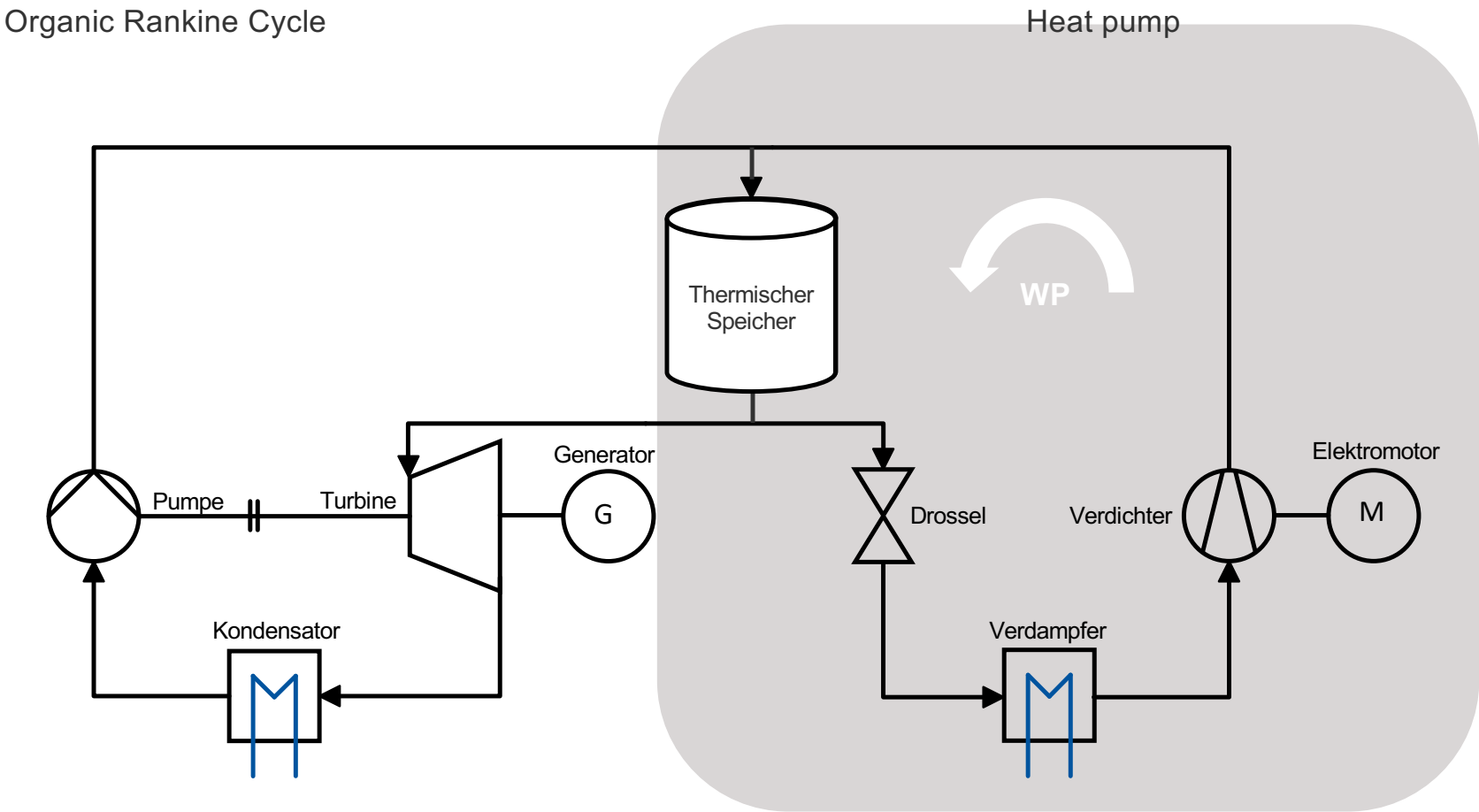
## Nicht-Gleichgewichts-thermodynamik

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

# ... für Studierende Maschinenbau



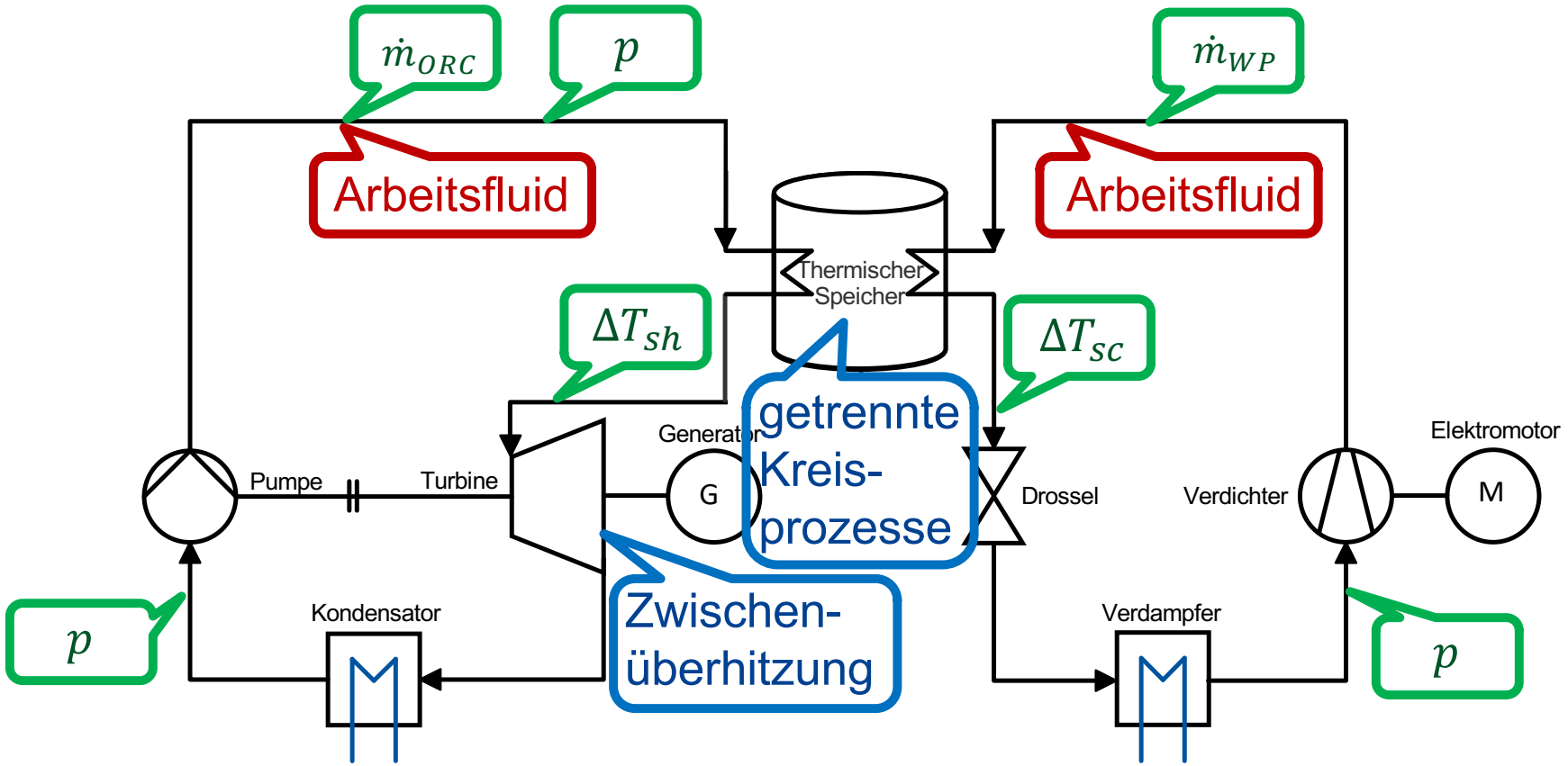
# Die Rolle der „Thermischen Verfahrenstechnik“ – am Beispiel Energiespeicherung



# Die Rolle der „Thermischen Verfahrenstechnik“ – am Beispiel Energiespeicherung

Freiheitsgrade der Prozessoptimierung

- kontinuierliche Größen
- diskrete (topologische) Entscheidungen
- Material

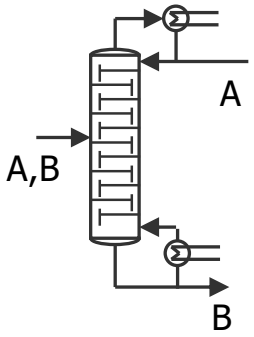


# TVT II

# Thermische VT II behandelt…

Freiheitsgrade der Prozessoptimierung
⇨ kontinuierliche Größen
⇨ diskrete (topologische) Entscheidungen
• Material

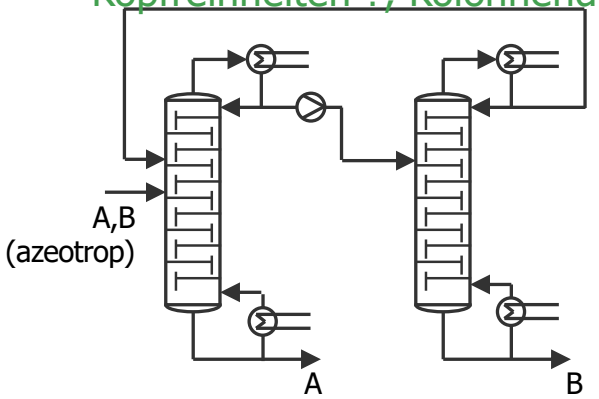
- … die Wahl von Stoffdatenmodellen und die Berechnung und Dimensionierung von Trennapparaten




Apparat ?
Dimension ?

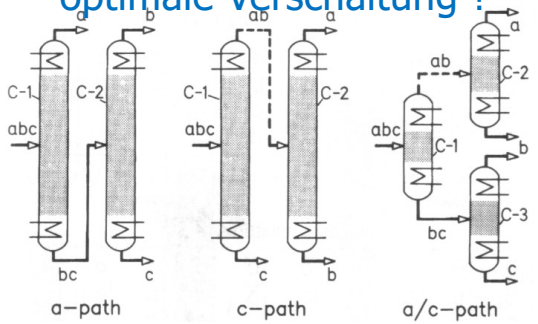
Kopfreinheiten ?, Kolonnendrücke

- … die Parameteroptimierung von Trennapparaten und –prozessen




optimale Verschaltung ?

- … die topologische Optimierung (=optimale Prozessverschaltung) u.a. auch die apparative und energetische Integration von Trennprozessen



## 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 vor

Behandelte Trennverfahren

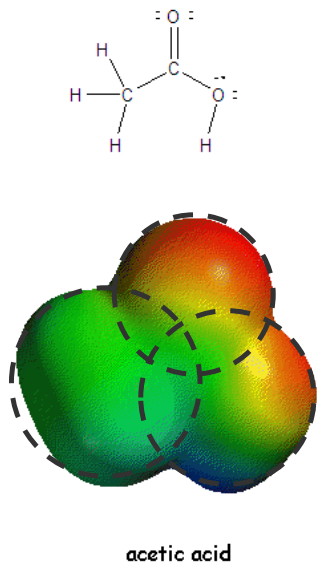
- Destillation
- Adsorption
- Technische Chromatographie
- Membrantrennverfahren

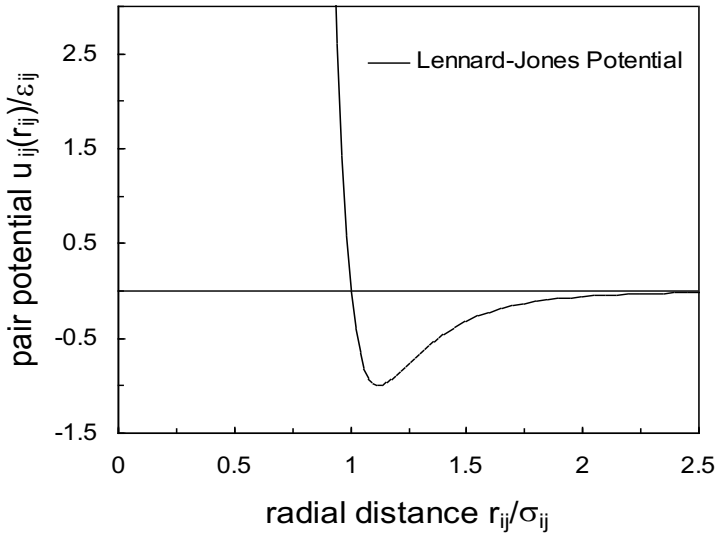
# Molekulare Thermodynamik

# Molekulare Thermodynamik / Molekularsimulation

Freiheitsgrade der Prozessoptimierung
- kontinuierliche Größen
- diskrete (topologische) Entscheidungen

⇨ Material




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

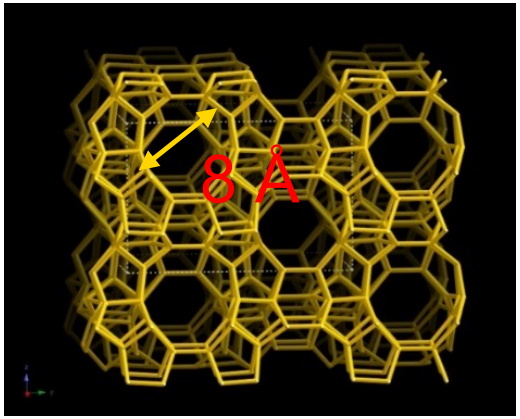
⇒ prädiktive Modelle erforderlich ⇔ **molekulare Methoden** erforderlich

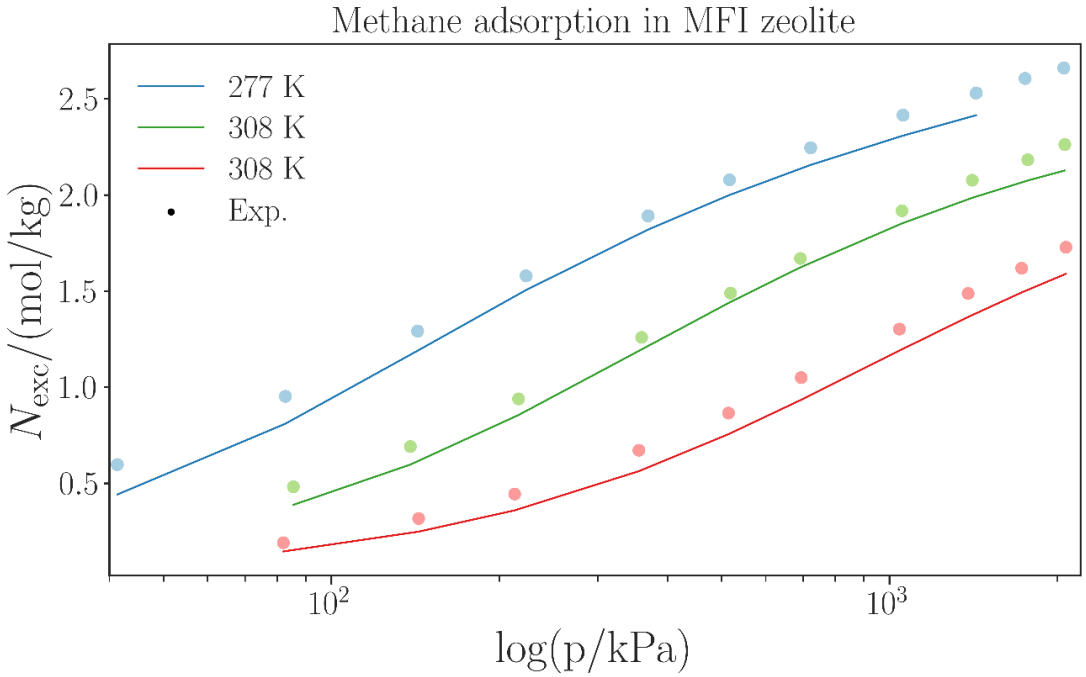
Lernziele

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

# Adsorption in Mikroporen

MFI Silico-Oxide Zeolite

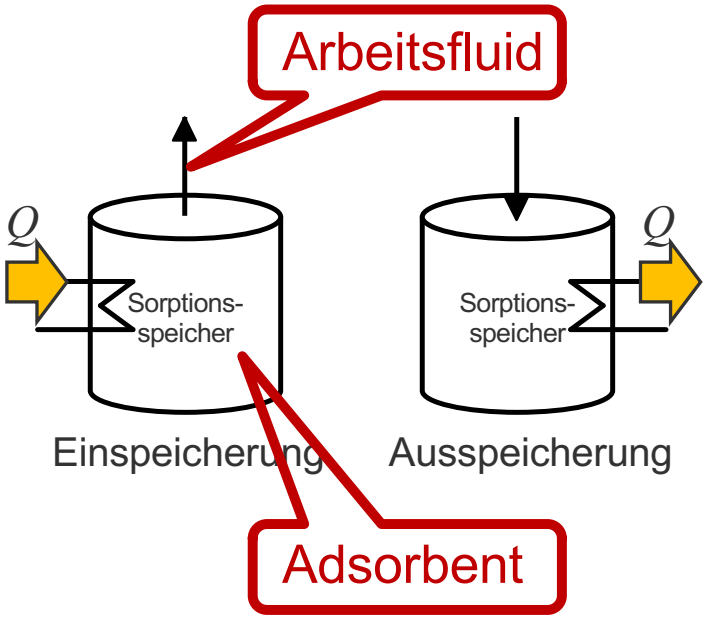



Freiheitsgrade der Prozessoptimierung

- kontinuierliche Größen
- diskrete (topologische) Entscheidungen

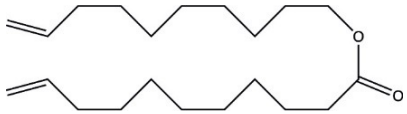
⇨ Material



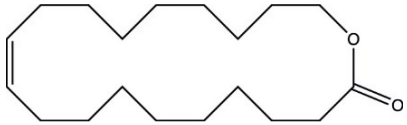
# Ringschluss Metathese in funktionalisiertem mesoporösen Silica

- Development of efficient tool to design surface-functionalized model pores
- MD simulations to study fluid structure and dynamics inside mesopores

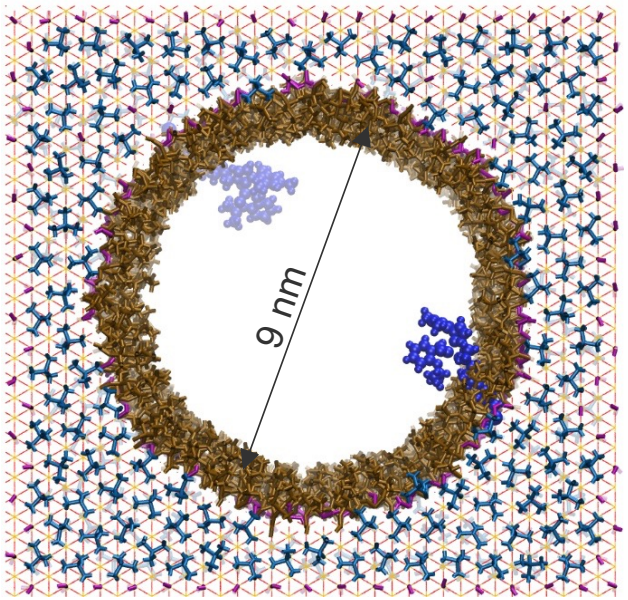
Reactant



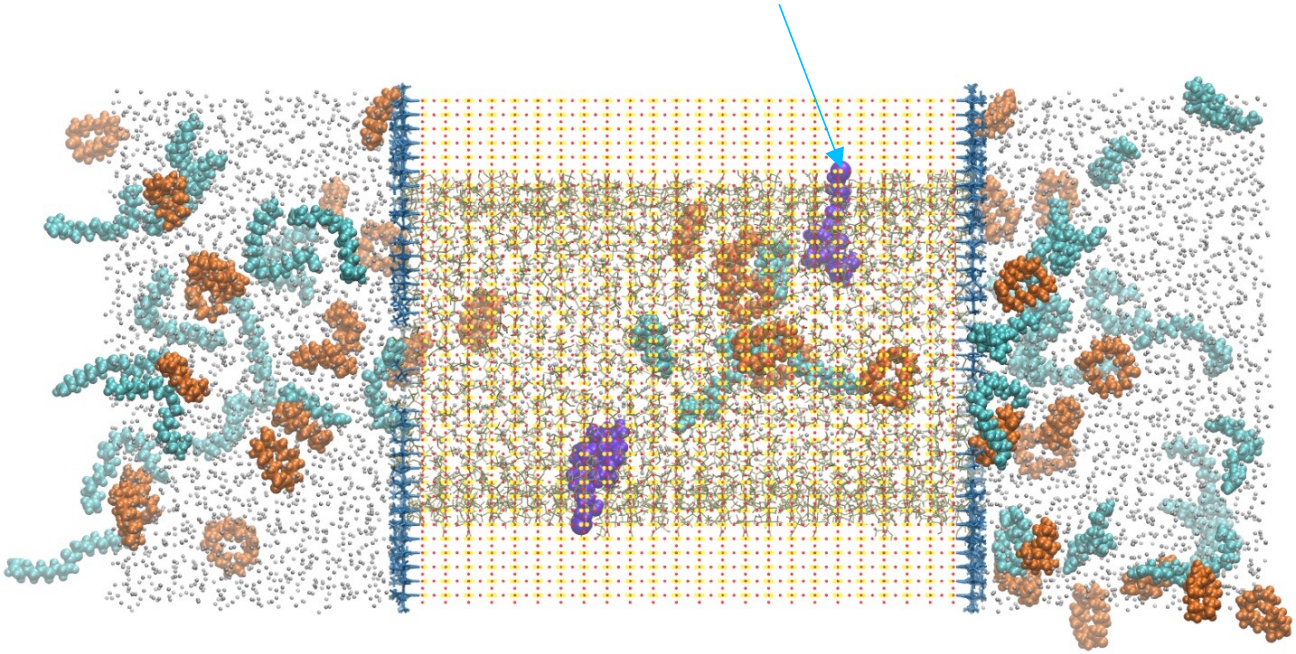
Product



Lösungsmittel: Benzol




Katalytischer Komplex



H. Kraus, J. Rybka, U. Tallarek, N. Hansen, *in preparation*

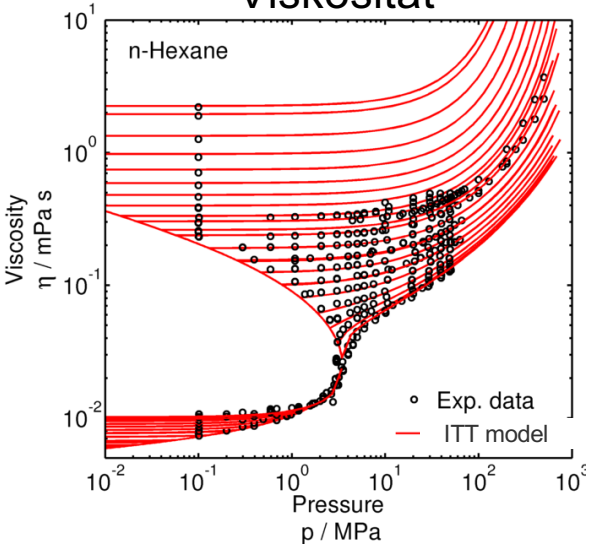
# Nichtgleichgewichts-Thermodynamik

# Nichtgleichgewichts-Thermodynamik: Diffusion und Stofftransport

- führt zur thermodynamisch konsistenten Beschreibung von Transportprozessen
- erlaubt die Dimensionierung / Optimierung von Apparaten

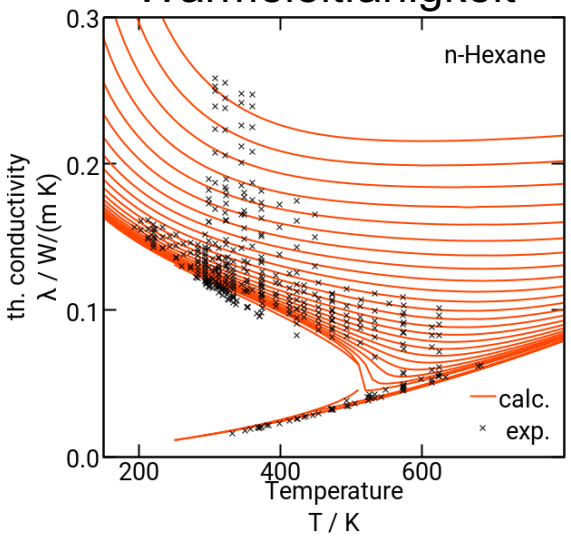
- im Zusammenspiel mit Molekularer Thermodynamik
  ⟹ prädiktive Modelle

Viskosität




Lötgering-Lin, Gross, IECR, 2015

Wärmeleitfähigkeit




Hopp, Gross, IECR, 2017

# Nichtgleichgewichts-Thermodynamik: Diffusion und Stofftransport

führt zur Beschreibung der Entropieproduktion

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

# Spezialisierung

# Molekulare und Thermische Verfahrenstechnik

# Angewandte Thermodynamik

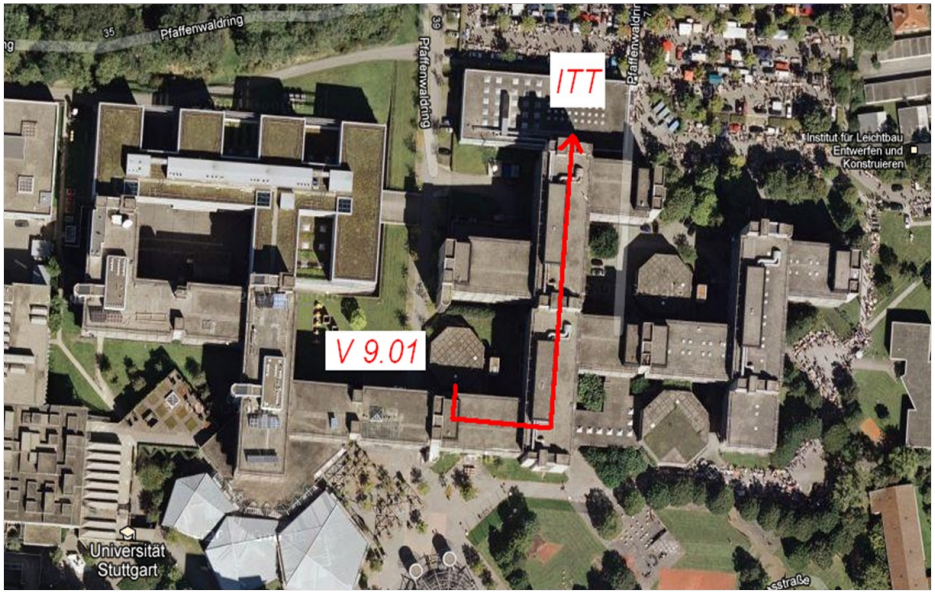
# Spezialisierung Molekulare und Thermische Verfahrenstechnik

**Vertiefungsmodul Thermische Verfahrenstechnik**

| Obligatorische Module | Dozent (Institut) | V/Ü | Sem. | LP |
|---|---|---|---|---|
| Molekulare Thermodynamik | J. Groß (ITT) | 2/0 | SS | 3 |
| Nichtgleichgewichts-Thermodynamik: Wärme und Stofftransport | J. Groß (ITT) | 2/0 | WS | 3 |
| Thermische Verfahrenstechnik II | J. Groß (ITT) | 2/2 | SS | 6 |

| Wählbare Module | Dozent (Institut) | V/Ü | Sem. | LP |
|---|---|---|---|---|
| Molekularsimulation | N. Hansen (ITT) | 2/2 | WS | 6 |
| Chemische Reaktionstechnik II | U. Nieken (ICVT) | 4/0 | SS | 6 |
| Berechnung von Wärmeübertragern | W. Heidemann (ITW) | 2/2 | SS | 6 |
| Simulationstechnik (für Verfahrenstechniker) | O. Sawodny (ISYS) | 2/0 | WS | 3 |
| Bioprodutaufbereitung | R. Takors (IBVT) | 2/0 | WS | 3 |
| Rechnergestütze Projektierungsübung | U. Nieken (ICVT) | 2/0 | WS/SS | 3 |
| Prozessführung und Production IT in der Verfahrenstechnik | J. Birk (BASF) | 2/0 | SS | 3 |
| Mehrgrößenregelung | F. Allgöwer (IST) | 2/0 | SS | 3 |
| Vertiefte Grundlagen der technischen Verbrennung | A. Kronenburg (ITV) | 2/0 | SS | 3 |
| Thermodynamik der Energiespeicher | A. Thess (IES) | 2/0 | WS | 3 |

# Standort des ITT




ITT, Pfaffenwaldring 9, 1. Stock

| Vorlesung | (LP) | |
|---|---|---|
| Technische Thermodynamik I | (6) | |
| Technische Thermodynamik II | (6) | **B.Sc.** |
| 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 ?