

## **„Experimentelle Bestimmung, Korrelation und Vorhersage von Dichten und Dampfdrücken“ von E. Christian Ihmels**

Die Dissertation gliedert sich in die Hauptkapitel „Dichte von Fluiden“ und „Dampfdruck hochsiedender Substanzen“. Es werden (kurze) Übersichten zu den Anwendungen und den Messmethoden für Dichten und Dampfdrücke sowie zur Dortmund Datenbank für Reinstoffdaten gegeben. Ausführlicher wird auf die Theorie des Biegeschwingers, der Dampfdruckwaage sowie der Korrelation von Dichten (z.T. auch von Dampfdrücken) eingegangen. Schwerpunkt der Arbeit ist eine automatisierte Anlage zur Bestimmung von Dichten in der flüssigen und überkritischen Phase mit einem Biegeschwinger. Mit der Anlage kann das PpT-Verhalten einer Substanz oder eines Gemisches im Temperaturbereich von 0 bis 350 °C und bei Drücken bis 40 MPa bestimmt werden. Ein „PpT-Scan“ über diesen Bereich mit rund 500 Datenpunkten kann innerhalb von etwa einer Woche durchgeführt werden. Mit der Messanlage wurden 14 verschiedene Reinstoffe [Toluol, Methyl-tert-butylether (MTBE), Ethyl-tert-butylether (ETBE), Diisopropylether (DIPE), 1-Butanol,  $\gamma$ -Butyrolacton, N-Methyl-2-pyrrolidon (NMP), Kohlendioxid (CO<sub>2</sub>), Schwefelhexafluorid (SF<sub>6</sub>), Schwefelwasserstoff (H<sub>2</sub>S), Carbonylsulfid (COS), Distickstoffmonoxid (Lachgas, N<sub>2</sub>O), Schwefeldioxid (SO<sub>2</sub>) und 1,1,1,2,3,3,3-Heptafluorpropan (R227ea)] in der komprimierten flüssigen und überkritischen Phase sowie Diisopropylether (DIPE) – 1-Butanol – Gemische in der flüssigen Phase über weite Temperatur- und Druckbereiche vermessen. Die Dichtemessungen der meisten Substanzen stellen eine erhebliche Erweiterung der vorhandenen Datenbasis dar. Die gemessenen Reinstoffdichten von z.B. Toluol, H<sub>2</sub>S und COS haben am NIST (National Institute of Standards and Technology, Boulder, Colorado, USA) zur Entwicklung neuer verbesserter Helmholtz-Zustandsgleichungen geführt. Die Zuverlässigkeit und hohe Genauigkeit der durchgeführten experimentellen Bestimmung von Dichten und Exzessvolumina wurde durch den Vergleich mit Literaturdaten und Referenzgleichungen demonstriert.

Für die zuverlässige Modellierung von komprimierten Flüssigkeitsdichten wurde auf Basis der Tait-, der Rackett- und der Wagner-Gleichung das Korrelationssystem TRIDEN entwickelt. Mit der TRIDEN-Korrelation der PpT-Daten können zudem abgeleitete Funktionen (z.B. thermische Ausdehnungskoeffizienten, isotherme Kompressibilitätskoeffizienten und  $\Delta c_p$ -Werte) berechnet werden. Auch die Berechnung von Exzessvolumina als Funktion von Temperatur, Druck und Zusammensetzung ist über die Korrelation von Gemischdichten möglich. Für eine einfache, schnelle und zuverlässige Anwendung der Korrelationen für thermodynamische Berechnungen wurde ein Excel-Add-In entwickelt.

Ein anderer Aspekt der Stoffdatenermittlung ist die Vorhersage von flüssigen Sättigungsdichten mit der erweiterten Gruppenbeitragsmethode GCVOL. Diese Methode von Elbro et al. (1991) wurde für die Anwendung auf neue Stoffklassen erweitert und die Parameter an eine erweiterte Datenbasis angepasst. Mit der verbesserten GCVOL-OL Methode können Sättigungsdichten für eine große Zahl an Substanzklassen mit relativ hoher Genauigkeit ohne Verwendung anderer physikalischer Daten (z.B. kritischer Größen) vorhergesagt werden.

Im zweiten Hauptkapitel wird die Dampfdruckwaage als Messmethode zur Bestimmung von Dampfdrücken im Bereich von 0.02 bis 2 Pa vorgestellt (vermessene Substanzen: Thioharnstoff, Pyren, Fluoranthren und Nonadecan). Mit der teil-automatisierten (in der Arbeit modifizierten) Apparatur können im industriellen Laborbetrieb Dampfdruckmessungen in relativ kurzer Zeit mit geringem Arbeitsaufwand und relativ hoher Genauigkeit bestimmt werden.

Die Daten aller Dichte- und Dampfdruckmessungen sind in der Arbeit enthalten.

Das Buch (ISBN 3-8265-9867-9) ist erschienen im Shaker Verlag – [www.shaker.de](http://www.shaker.de)  
Weitere Informationen unter [www.dynasol.de/thesis](http://www.dynasol.de/thesis)