

Inhaltsverzeichnis

1	Stoff- und p,v-T-Daten der Reinstoffe	1
1.1	Wasserdampf tafel nach IAPWS-IF97	1
1.2	Inkrementenmethode von Joback	6
1.3	DIPPR-Datenbank	28
1.4	DWSIM – Freewaresoftware zur Prozesssimulation (dwflash).....	36
2	Methoden zur Berechnung von Stoffdaten der Gemische.....	43
2.1	Mischungsregeln.....	43
2.2	Ideale Mischungsregeln.....	43
2.3	Spezielle Lösung zur Exzessgröße am Beispiel der Dichte.....	59
3	Molekulare Potenziale und Kräfte.....	72
3.1	Atomare Berechnungen und Methode nach Coulomb.....	72
3.1.1	Massendefekt des Heliums.....	72
3.1.2	Das Wasserstoffatom	73
3.1.3	Der Kimball-Ansatz.....	74
3.1.4	Das Bohr'sche Atommodell	76
3.1.5	Das Wasserstoffmolekül nach dem Kimball-Ansatz.....	77
3.2	Zwischenmolekulare Wechselwirkungen	79
3.2.1	Kinetische Gastheorie eines idealen Gases	80
3.2.2	Die reale Gasgleichung	81
3.2.3	Potenzielle Energie von Molekülen	83
3.2.4	Zwischenmolekulare Energiepotenziale	84
3.2.5	Dipole.....	85
3.2.6	Berechnungen von Dipolen (Coulomb-Dipole)	104
3.2.7	Die Berechnung von Dipolmomenten (Berechnung Dipolmoment).....	116
3.3	Methode nach Morse (morse).....	127
3.4	Methode nach Buckingham (buckingham).....	130
3.5	Methode nach Lennard-Jones.....	153
3.6	Virialtheorem.....	164
3.7	Ermitteln von Lennard-Jones-Parametern	167
3.8	Berechnung der Bindungsenergie mit dem Lennard-Jones-Modell	168

- 3.9 Molekülsysteme (MolekSimul)172
- 3.10 Berechnung des Potenzials eines Feststoffes (Usolid).....176
- 3.11 Harmonischer Oszillator (harm)178
- 3.12 Lineare dynamische Simulation (linearemolekuelsimulation).....183
- 3.13 Lineare Bewegung (molsim)198
- 4 Phasengleichgewichte222
 - 4.1 Einführung.....222
 - 4.2 Berechnungen mit UNIFAC (actcoeff)222
 - 4.3 Excel-Datei ACTCOEFF.xls230
 - 4.4 Flashberechnungen mit DWSIM und CHEMCAD233
 - 4.4.1 Unifac-Programme.....241
 - 4.5 Berechnungen mit NRTL243
 - 4.6 Die van-der-Waals-Gleichung.....244
 - 4.7 Joule-Thomson-Effekt.....248
 - 4.8 Reale Zustandsgleichung nach SRK (Soave-Redlich-Kwong).....249
 - 4.9 Wichtige Definitionen249
 - 4.10 Aggregatzustände250
 - 4.11 Gesetz von Clausius-Clapeyron (August).....251
 - 4.12 Phasengleichgewichte.....252
 - 4.13 Dampf-Flüssig-Gleichgewicht (VLE)252
 - 4.14 Raoult'sches Gesetz253
 - 4.15 Dalton'sches Gesetz253
 - 4.16 Reale Flüssigkeiten und Aktivitätskoeffizient256
 - 4.17 Feststoffgleichgewicht, Solid-Liquid-Equilibrium (SLE)265
 - 4.18 Partielle molare Größen267
 - 4.19 Flashberechnung von Phasengleichgewichten.....268
 - 4.19.1 Gas-Flüssigkeits-Gleichgewicht mit CHEMCAD273
- 5 Einführung in die vorwärts-sequenzielle Prozesssimulation in Excel.....286
 - 5.1 Einführung in die Prozesssimulation286
 - 5.2 Bilanzierung einer Eindampfanlage als Gesamtanlage – Aufgabe a)290
 - 5.3 Berechnung einer Eindampfanlage mit Vorwärmung – Aufgabe b)297

5.4	Berechnung einer zweistufigen Gegenstromeindampfanlage – Aufgabe c)	299
5.5	Berechnung einer zweistufigen Gleichstromeindampfanlage – Aufgabe d).....	303
5.6	Berechnung einer Eindampfanlage mit thermischer Brüdenverdichtung	307
5.7	Berechnung einer Eindampfanlage mit mechanischer Brüdenverdichtung	309
5.8	Zusammenfassung der Energieeinsparungsmaßnahmen bei der Verdampfung	312
5.9	Berechnung einer Kristallisationsanlage (nur Massenbilanz).....	313
6	Ausgewählte Beispiele der Rektifikation	330
6.1	Einführungsbeispiel mit Flash, Datei „Rektif2016.xls“	330
6.2	Berechnung einer Rektifikationskolonne nach Matz in Excel (Rektifikation2017) ..	339
6.3	Rektifikationen mit CHEMCAD	362
6.3.1	Binäres Gemisch	363
6.3.2	Ternäres Gemisch	369
6.3.3	Azeotropes Gemisch	378
6.3.4	Extraktivrektifikation	386
6.4	Batch-Destillation und –rektifikation	392
7	Chemische Reaktion	408
7.1	Einfacher Batch-Reaktor	409
7.2	Homogener Rührreaktor	415
7.3	Inhomogener Rührreaktor.....	419
7.4	Rohrreaktor.....	424
	Anhang.....	433
	Literaturverzeichnis	456
	Online Literaturverzeichnis	461
	Stichwortregister	463