

3(4)-tägiger Kurs am Lehrstuhl Technische Chemie der Univ. Oldenburg

(Universität Oldenburg, Standort Oldenburg-Wechloy (Naturwissenschaften), Carl-von-Ossietzky Str. 9-11, 26129 Oldenburg)

Zeit: 20.-22. (23.) 6. 2017

Referent: Prof. h.c. Dr. J. Rarey, Dr. Christian Möllmann

## Inhalte und Lernziele

Im Rahmen der immer breiteren Anwendung von Prozesssimulatoren wie Aspen Plus®, Hysys®, CHEMCAD®, Pro/II®, UNISIM® etc. werden Ingenieure mehr und mehr mit der Komplexität der dieser Software zugrundeliegenden Modelle und thermodynamischen Zusammenhänge konfrontiert. Die Wahl ungeeigneter Modelle oder Parameter führt häufig zu unrealistischen Resultaten. Ein grundlegendes und intuitives Verständnis ist deshalb für die erfolgreiche Entwicklung (Synthese), Auslegung und Optimierung chemischer Verfahren unbedingt erforderlich.

Ziel dieses Kurses ist es, die Teilnehmer aus Industrie und Hochschule (mehr als 1000 in den letzten 15 Jahren) mit den heute benutzten Methoden, ihren Anwendungsbereichen und -grenzen vertraut zu machen. Dabei sollen die Aspekte einen besonderen Schwerpunkt bilden, die nach meiner Ansicht eine gute Grundlage für die erfolgreiche Modellierung einzelner Trennapparate oder ganzer Anlagen bilden.

Dazu gehören neben den thermodynamischen Daten reiner Stoffe besonders das Phasengleichgewichtsverhalten von Gemischen sowie die Analyse des Verhaltens von Multikomponentensystemen. Neben den üblichen Modellen werden dabei auch die Ansätze zur Beschreibung des realen Verhaltens von elektrolythaltigen Gemischen behandelt.

Der Kurs gliedert sich in vier Abschnitte:

- Das grundlegende Verhalten von Reinstoffen und Gemischen wird zusammen mit den üblicherweise verwendeten Modellen (Zustandsgleichungen,  $g^E$ -Modelle, Dampfdruckgleichungen, ...) behandelt. Schwerpunkte bilden besonders Dampf-Flüssig-Gleichgewichte (VLE) (Trennfaktoren, azeotropes Verhalten), Mischungslücken (LLE), Feststofflöslichkeiten sowie Bestimmung von binären Wechselwirkungsparametern (BIP) für die Prozesssimulation.
- Abschätzmethoden für verschiedenste Reinstoffdaten sowie das reale Gemischverhalten (UNIFAC, PSRK, ...) sind im Falle fehlender Parameter unerlässlich. Grundlagen, Anwendungsbereich und zu erwartende Genauigkeit werden eingehend behandelt.
- Nach den thermodynamischen Grundlagen und der Einführung der unterschiedlichen Korrelations- und Abschätzverfahren werden Methoden zur Auswahl geeigneter Lösungsmittel und Zusatzstoffe für die extraktive und azeotrope Rektifikation und Extraktion sowie die Auslegung dieser Verfahren in ternären Diagrammen mit Hilfe von Massenbilanzlinien und Rückstandskurven diskutiert. Dabei sollen die Teilnehmer insbesondere anhand einer Vielzahl von Beispielen mit den verschiedenen grafischen Darstellungen vertraut gemacht werden.
- Den Abschluß des Kurses bildet ein eintägiger optionaler Workshop zu Thermodynamik und Stoffdaten im Simulationsprogramm Aspen Plus (Dr. Christian Möllmann).

Die Materialien zum letzten Tag sind in englischer Sprache.

## Anmeldung, Kosten

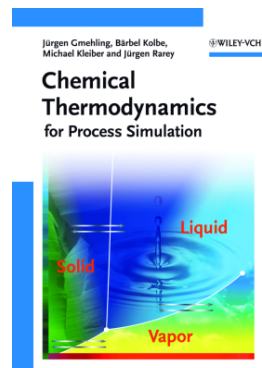
Die Anmeldung zum Kurs sollte umgehend erfolgen. Die Anzahl der Teilnehmer ist auf 15 begrenzt. Es können auch max. 7 Studenten höherer Semester der Universität Oldenburg am Kurs teilnehmen.

Die Kursgebühr beträgt € 1260.- (€ 1550.- für 4 Tage). Bei Anmeldungen vor dem 31.3.2017 wird ein Frühbucherrabatt von € 100 gewährt. Kursteilnehmer aus Mitgliedsfirmen der GVT erhalten einen Rabatt von € 50.-. Die Teilnehmergebühren sind umsatzsteuerfrei gemäß § 4 Ziffer 22 UStG-MWSt. In der Kursgebühr sind die Kosten für das Kursmaterial (Kopien der verwendeten Folien), das Lehrbuch "Chemical Thermodynamics for Process Simulation", Getränke und Snacks in den Pausen sowie ein geselliges Abendessen am ersten Tag enthalten.

## Ansprechpartner

Prof. h.c. Dr. Jürgen Rarey  
Technische Chemie (Fakultät V)  
Universität Oldenburg  
26111 Oldenburg

Fax: +49 321 21054378  
E-Mail: juergen@rarey.net



## Hochschulkurs in Zusammenarbeit mit

## Zeitplan

Dienstag,	10.00 - 10.30	<b>Begrüßung, Einleitung</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- Vorstellung</li><li>- Kursüberblick</li><li>- Organisatorisches</li></ul>
	10.30 - 12.15	<b>Reinstoffdaten I</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- PvT-Verhalten reiner Stoffe</li><li>- Zustandsgleichungen VdW, SRK, PR, Korrespondenzprinzip, kritische Daten</li></ul>
	12.15 - 13.15	Mittagspause
	13.15 - 15.15	<b>Reinstoffdaten II</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- chemische Theorie, Präzisionszustandsgleichungen, PC-SAFT</li><li>- Realanteile, Enthalpieberechnung in Prozesssimulatoren</li><li>- Sättigungsdampfdruck, Verdampfungsenthalpie</li></ul>
	15.15 - 15.30	Kaffeepause
	15.30 - 16.15	<b>Reinstoffdaten III</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- Viskosität, Wärmeleitfähigkeit</li><li>- Molekülstruktur und Stoffdatenabschätzung, Joback und neuere Methoden</li></ul>
	16.15 - 17.30	<b>Bedeutung von Phasengleichgewichten Thermodynamische Grundlagen I</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- Hilfsgrößen <math>\gamma_i</math>, <math>\varphi_i</math></li><li>- Aktivitätskoeffizientenmodelle (<math>g^E</math>-Modelle)</li></ul>
	19.00	<b>Geselliger Abend</b>
Mittwoch	9.00 - 10.30	<b>Bedeutung von Phasengleichgewichten Thermodynamische Grundlagen II</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- Berechnung von Dampf-Flüssig-Gleichgewichten</li><li>- Parameteranpassung, Konsistenztests, ...</li><li>- Aktivitätskoeffizienten bei unendlicher Verdünnung, Mischungsenthalpien</li><li>- Simultane Darstellung von Phasengleichgewichtsverhalten und Exzessgrößen (Recommended Values)</li><li>- Trennfaktoren und azeotrope Punkte als Funktion der Temperatur</li></ul>
	10.30 - 10.45	Kaffeepause
	10.45 - 11.15	<b>Thermodynamische Grundlagen III</b> Zustandsgleichungen und Mischungsregeln
	11.15 - 12.15	<b>Übung zu Reinstoffdaten und Phasengleichgewichten</b>
	12.15 - 13.15	Mittagspause
	13.15 - 14.45	<b>Spezielle Phasengleichgewichte I</b> Flüssig-Flüssig-Gleichgewichte, Gaslöslichkeiten, Fest-Flüssig-Gleichgewichte, Überkritische Extraktion, Osmotischer Druck
	14.45 - 15.00	Kaffeepause
	15.00 - 15.45	<b>Spezielle Phasengleichgewichte II</b> Elektrolytsysteme, VLE elektrolythaltiger Gemische, Salzlöslichkeit

	15.45 - 16.45	<b>Gruppenbeitragsmethoden zur Abschätzung von Phasengleichgewichten</b> - UNIFAC, mod. UNIFAC - Zustandsgleichungen, Mischungsregeln, moderne Gruppenbeitragszustandsgleichungen (z.B. PSRK, VTPR)
	16.45 - 17.30	<b>Anwendung der Dortmunder Datenbank, DDBSP</b>
Donnerstag	9.00 - 11.00	<b>Möglichkeiten zur Anwendung von <math>g^E</math>-Modellen</b> - Rückstandskurven, Grenzdestillationslinien, Destillationsfelder <b>Sonderverfahren</b> - extraktive und azeotrope Rektifikation <b>Kriterien zur Auswahl selektiver Zusatzstoffe</b>
	11.00 - 11.15	Kaffeepause
	11.15 - 12.15	<b>Übung zu Thermodynamischen Eigenschaften und Anwendungen</b>
	12.15 - 13.15	Mittagspause
	13.15 - 14.45	<b>Labortour - LTP (Laboratory for Thermophysical Properties)</b>
	14.45 - 15.30	<b>Weitere Möglichkeiten zur Anwendung von <math>g^E</math>-Modellen und Zustandsgleichungen</b> - chemisches Gleichgewicht, Lösungsmittelleffekte, Druckabhängigkeit - ...
	15.30 - 15.45	Kaffeepause
	15.45 - 16.30	<b>Zusammenfassung, Diskussion</b>
Freitag	9.00 - 10.45	<b>Physical Properties in Aspen Plus</b> Methods assistant and pure component property analysis Txy diagrams for homogeneous and heterogeneous mixtures and their interpretation Ternary maps for liquid-liquid equilibrium, residual curve maps
	10.45 - 11.00	Coffee Break
	11.00 - 12.15	Flash calculations, Chemistry object and reactive systems
	12.15 - 13.15	Lunch Break
	13.15 - 14.45	Providing physical property parameters, creating user components Property data and models in Aspen Plus (estimation & regression)
	14.45 - 15.00	Coffee Break
	15.00 - 16.30	Final Workshop

# ORGANISATION

Der Kurs beginnt am Dienstagmorgen um 10.00 Uhr und endet am Donnerstag um 17.00 Uhr bzw. am Freitag um 16.30 Uhr. Oldenburg liegt etwa 45 km westlich von Bremen, von wo aus es sehr leicht mit dem Zug erreicht werden kann. Im Falle einer Anreise per Flugzeug steht ein Transfer vom Flughafen Bremen zur Verfügung ([www.luftibus.de](http://www.luftibus.de)), der zur Sicherheit etwa eine Woche im voraus gebucht werden sollte. Oldenburg ist durch die Anbindung an das Autobahnnetz auch mit dem PKW einfach und schnell zu erreichen.

Der Stoff wird in den unter Programm aufgeführten Vorlesungen und Übungen vermittelt. Es ist ein geselliger Abend angesetzt.

Anmeldungen sind mit beiliegendem Anmeldeformular zu richten an

Forschungs-Gesellschaft Verfahrens-Technik e.V.  
Theodor-Heuss-Allee 25, 60486 Frankfurt am Main

**Tel.:** +49 (0) 69 7564-118

**FAX:** +49 (0) 69 7564-437

**Email:** [gvt-hochschulkurse@gvt.org](mailto:gvt-hochschulkurse@gvt.org)

**Keyword:** Hochschulkurs „Thermische Trennprozesse“

Die Gebühr für den Kurs ist unter Angabe o.g. Kennwortes erst nach Erhalt einer endgültigen Teilnahmebestätigung der GVT einzuzahlen auf das auf der Rechnung angegebene Konto. Die Teilnehmergebühren sind steuerfrei gemäß § 4 Ziffer 22 UStG-MWSt.

## Referent

### Jürgen Rarey (Prof. h.c. Dr.)

---

1979 - 1985	Studium der Chemie an der Universität Dortmund
1985 - 1989	Wissenschaftlicher Mitarbeiter bei Prof. Gmehling am Institut für Chemietechnik, Univ. Dortmund
1991	Promotion an der Universität Dortmund (Institut für Chemietechnik)
seit 1989	Wissenschaftlicher Mitarbeiter bei Prof. Gmehling an der Universität Oldenburg Geschäftsführer der DDBST GmbH, Oldenburg
seit 2004	Honorary Research Fellow an der School of Chemical Engineering, University of Kwazulu-Natal, Südafrika
seit 2005	Prof. h.c. an der School of Chemical Engineering, University of Kwazulu-Natal, Südafrika
seit 2016	Faculty member, ChEPS-KMUTT, Thonburi, Thailand



Mitautor der DECHEMA Chemistry Data Series (4 Bücher),  
"Chemical Thermodynamics for Process Simulation", Wiley 2012  
ca. 45 Publikationen in wissenschaftlichen Zeitschriften.

### Christian Möllmann (Dr.)

---

1992 - 1996	Wissenschaftlicher Mitarbeiter, Carl von Ossietzky Universität Oldenburg
1997 - 2004	Customer Support Consultant, AspenTech Europe S.A. / N.V., Brussels
2004 - 2010	Senior Process Engineer, UHDE GmbH, Bad Soden/Ts.
2011 - 2012	Technical Account Manager, Process Systems Enterprise Ltd., London
2012 - 2016	Senior Process Engineer, Evonik Industries AG, Hanau
since 2016	Senior Project Manager, Evonik Resource Efficiency GmbH, Darmstadt



**Brief-/Fax-Antwort**

**Fax-Nr. 069/7564-437**

**GVT  
Forschungs-Gesellschaft  
Verfahrens-Technik e.V.  
Theodor-Heuss-Allee 25**

**60486 Frankfurt am Main**

---

**Anmeldung** für den GVT-Hochschulkurs 70221 vom 20. – 22.(23.) Juni 2017

**"Grundlagen zur Auswahl, Synthese und Auslegung thermischer Trennprozesse"**

in Oldenburg

Die Anmeldungen werden entsprechend der Reihenfolge des Eingangs berücksichtigt.

---

**Veranstaltungsteilnehmer**

Kurs 3 Tage

Herr  Frau

Kurs 4 Tage

Name.....

Vorname.....

Titel / Beruf.....

Firma.....Abt.....

Straße.....

PLZ / Ort.....

Tel. / Fax.....E-Mail.....

**Rechnungsanschrift** (sofern abweichend von obiger Anschrift)

Firma.....

Abteilung.....

Straße.....

PLZ / Ort.....

Die Kursgebühr beträgt € 1260,- (€ 1550 für 4 Tage) bzw. für Teilnehmer aus Mitgliedsfirmen der GVT € 1210,- (€ 1510,- für 4 Tage). Bei Anmeldung bis zum 31.3.2017 wird ein Nachlass von € 100,- gewährt. Erst nach der endgültigen Teilnahmebestätigung durch die GVT bitten wir um Überweisung. Wird eine Anmeldung bis zum 20. Mai 2017 storniert, erfolgt eine Erstattung der Teilnehmergebühr abzgl. einer Bearbeitungsgebühr von € 50,-. Bei Stornierung zu einem späteren Termin ist eine Erstattung nicht mehr möglich, jedoch steht die Benennung eines anderen Teilnehmers jederzeit offen. Unsere Teilnehmergebühren unterliegen nicht der Mehrwertsteuerpflicht (Steuerbefreiung nach § 4.22 UstG), da die GVT als gemeinnützig anerkannt ist.

Mitarbeiter einer GVT-Mitgliedsfirma: Ja  Nein

.....  
Datum, Unterschrift + Firmenstempel