

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

Ort: Universität Oldenburg, Standort Oldenburg-Wechloy (Naturwissenschaften), Carl-von-Ossietzky Str. 9-11  
Zeit: 19. -21. (22.) 3. 2013  
Referent: Prof. h.c. Dr. J. Rarey

## Inhalte und Lernziele

Im Rahmen der immer breiteren Anwendung von Prozesssimulatoren zur Entwicklung (Synthese), Auslegung und Optimierung chemischer Verfahren besteht ein immer größerer Bedarf an der Kenntnis der darin benutzten verfahrenstechnischen Grundlagen. Ziel des Kurses ist es, die Teilnehmer aus Industrie und Hochschule mit den heute benutzten Methoden, ihren Anwendungsbereichen und -grenzen vertraut zu machen. Dabei sollen die Aspekte einen besonderen Schwerpunkt bilden, die nach unserer Erkenntnis für die erfolgreiche Modellierung einzelner Trennapparate oder ganzer Anlagen von besonderer Bedeutung sind.

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.

Nach einer tiefgehenden Behandlung der benötigten thermodynamischen Grundlagen wird detailliert auf verschiedenste Ansätze zur Lösung verfahrenstechnischer Probleme mit Hilfe moderner thermodynamischer Methoden eingegangen.

Dazu gehören beispielsweise eine eingehende Diskussion von Hybridverfahren und Zweidruckverfahren, die Auswahl von Zusatzstoffen für Sonderverfahren wie azeotrope und extraktive Rektifikation, Extraktion, ... sowie eine eingehende Diskussion der Möglichkeiten der reaktiven Rektifikation. Es soll dabei besonders auch die Fähigkeit zum Verständnis verschiedener grafischer Darstellungen des Gemischverhaltens (Darstellungen auf lösungsmittelfreier Basis, Iso-Linien, Grenzlinien bzw. -flächen, ...) geschult werden.

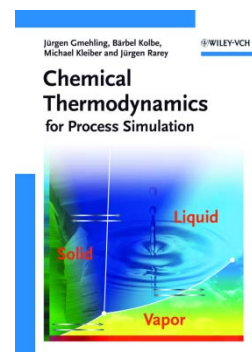
Regelmäßige Übungen dienen der Festigung des Lernstoffs und bieten dem Teilnehmer die Gelegenheit, sein Verständnis durch Klärung offener Fragen zu vertiefen.

Im Anschluß an die ersten drei Tage des Kurses folgt ein optionaler eintägiger Workshop zu den Themen Recherche, Analyse und Bewertung, Regression und Abschätzung von Stoffdaten sowie deren Verifikation für die Prozesssimulation. Die Materialien dazu sind in englischer Sprache.

## Anmeldung, Kosten

Die Anmeldung zum Kurs sollte umgehend erfolgen. Die Anzahl der Teilnehmer ist auf 20 begrenzt. Es werden auch max. 7 Studenten höherer Semester der Universität Oldenburg am Kurs teilnehmen.

Die Kursgebühr beträgt € 1170.- (€ 1440.- für 4 Tage). 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

Aktuelle Informationen finden sich unter [http://www.ddbst.com/en/courses/Thermo\\_GVT.php](http://www.ddbst.com/en/courses/Thermo_GVT.php) (Gross- und Kleinschreibung beachten!). Bezüglich weiterer Informationen wenden Sie sich bitte an

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

Tel.: +49 441 798 3846  
Fax: +49 321 21054378  
E-Mail: [juergen@rarey.net](mailto:juergen@rarey.net)

**Hochschulkurs in Zusammenarbeit mit**

**GVT** Forschungs-Gesellschaft  
Verfahrens-Technik e.V.

## Zeitplan

Dienstag,	10.00 - 10.30	<b>Begrüßung, Einleitung</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- Vorstellung der Teilnehmer</li><li>- Bedeutung von Stoffdaten für die Synthese, Auslegung und Optimierung von chemischen Prozessen</li><li>- Forschungsaktivitäten der Arbeitsgruppe inkl. Geschichte und Entwicklung der Dortmunder Datenbank und des integrierten Programmsystems</li><li>- Geschichte und Entwicklung thermodynamischer Modelle</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, 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>- Realanteile thermodynamischer Funktionen</li><li>- Sättigungsdampfdruck, Verdampfungsenthalpie</li><li>- Viskosität, Wärmeleitfähigkeit</li><li>- Reinstoffdatenbank DDB-Pure, Molekularstruktur und Stoffdatenabschätzung</li></ul>
	15.15 - 15.30	Kaffeepause
	15.30 - 17.15	<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><li>- Beschreibung von Dampf-Flüssig-Gleichgewichten</li><li>- Parameteranpassung, Konsistenztests, ...</li></ul>
	19.00	<b>Geselliger Abend</b>
Mittwoch	9.00 - 10.00	<b>Bedeutung von Phasengleichgewichten Thermodynamische Grundlagen II</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- Aktivitätskoeffizienten bei unendlicher Verdünnung</li><li>- Mischungsenthalpien</li><li>- Simultane Darstellung von Phasengleichgewichtsverhalten und Exzessgrößen (Recommended Values)</li><li>- Trennfaktoren und azeotrope Punkte als Funktion der Temperatur</li></ul>
	10.00 - 10.30	<b>Thermodynamische Grundlagen III</b> Zustandsgleichungen und Mischungsregeln
	10.30 - 10.45	Kaffeepause
	10.45 - 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

- 15.45 - 16.45 **Gruppenbeitragsmethoden zur Abschätzung von Phasengleichgewichten**  
 - UNIFAC, mod. UNIFAC  
 - Zustandsgleichungen, Mischungsregeln, moderne Gruppenbeitragszustandsgleichungen (z.B. PSRK, VTPR)
- 16.45 - 17.30 **Anwendung der Dortmunder Datenbank, DDBSP**
- 17.30 - 19.00 **Laborbesichtigung und Diskussion (für interessierte Teilnehmer)**
- Donnerstag 9.00 - 9.30 **Quantenmechanische Methoden zur Abschätzung von Stoffdaten (COSMO-RS, ...)**
- 9.30 - 11.00 **Möglichkeiten zur Anwendung von  $g^E$ -Modellen**  
 - Rückstandskurven, Grenzdestillationslinien, Destillationsfelder  
**Sonderverfahren**  
 - extraktive und azeotrope Rektifikation  
**Kriterien zur Auswahl selektiver Zusatzstoffe**  
 - mit Hilfe thermodyn. Modelle  
 - über Datenbankzugriff  
 - extraktive und adduktive Kristallisation  
 - Demonstration des Programmpakets SYNTHESE
- 11.00 - 11.15 Kaffeepause
- 11.15 - 12.15 **Übung zu Thermodynamischen Eigenschaften und Anwendungen**
- 12.15 - 13.15 Mittagspause
- 13.15 - 14.45 **Labortour - LTP (Laboratory for Thermophysical Properties)**
- 14.45 - 15.30 **Weitere Möglichkeiten zur Anwendung von  $g^E$ -Modellen und Zustandsgleichungen**  
 - chemisches Gleichgewicht - ...
- 15.30 - 15.45 Kaffeepause
- 15.45 - 16.30 **Reaktive Rektifikation, diskont. Rektifikation, Absorption, Extraktion, Kristallisation, Adsorption, Membranverfahren**
- 16.30 - 17.00 **Zusammenfassung, Diskussion**
- Freitag 9.00 - 12.15 **Workshop: Einführung in die Dortmunder Daten-bank und das integrierte Softwarepaket DDBSP**  
 - Allgemeine Struktur, Literatur, Komponenten, Daten  
 - Einführendes Training  
 - Reinstoff- und Gemischeigenschaften  
 - Datenrecherche, grafische Darstellungen, Parameteranpassung
- 12.15 - 13.15 Mittagspause
- 13.15 - 16.00 **Vorteile simultaner Datenanpassung Stoffdatenabschätzung und Überprüfung von Parametern für die Prozesssimulation**  
**Andere Datenquellen: Reaxys, NIST-TDE, ...**
- 16.00 - 16.30 **Besprechung der Ergebnisse**

# O R G A N I S A T I O N

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 7564-414  
**Email:** [GVT-Hochschulkurse@DECHEMA.de](mailto:GVT-Hochschulkurse@DECHEMA.de)  
**Kennwort:** 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 in 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

Mitautor der DECHEMA Chemistry Data Series (4 Bücher),  
"Chemical Thermodynamics for Process Simulation", Wiley 2012  
ca. 40 Publikationen in wissenschaftlichen Zeitschriften.



**Brief-/Fax-Antwort**

**Fax-Nr. 069/7564-414**

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

---

**Anmeldung** für den GVT-Hochschulkurs 70221 vom 19. – 21.(22.) März 2013

**"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 €1170,- (€1440 für 4 Tage) bzw. für Teilnehmer aus Mitgliedsfirmen der GVT €1120,- (€1390,- für 4 Tage). Erst nach der endgültigen Teilnahmebestätigung durch die GVT bitten wir um Überweisung. Wird eine Anmeldung bis zum 19. Februar 2013 storniert, erfolgt 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