



3(4)-tägiger Kurs am Lehrstuhl Technische Chemie der Univ. Oldenburg unter Leitung von Herrn Prof. Dr. J. Gmehling

Ort: Universität Oldenburg, Standort Oldenburg-Wechloy (Naturwissenschaften), Carl-von-Ossietzky Str. 9-11  
Zeit: 9.-11. (12.) 2. 2010  
Referenten: Prof. Dr. J. Gmehling, 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 (zum Teil mit Hilfe des Programms MathCAD) 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 25 begrenzt. Es werden auch max. 7 Studenten höherer Semester der Universität Oldenburg am Kurs teilnehmen.

Die Kursgebühr beträgt € 1010,- (€ 1270,- 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), Getränke und Snacks in den Pausen sowie ein geselliges Abendessen am ersten Tag enthalten.

## **Ansprechpartner**

Aktuelle Informationen finden sich unter <http://www.uni-oldenburg.de/tchemie/GVTCourse.htm> (Gross- und Kleinschreibung beachten!). Bezüglich weiterer Informationen wenden Sie sich bitte an

Prof. Dr. Jürgen Gmehling  
Lehrstuhl Technische Chemie (Fakultät V)  
Universität Oldenburg  
26111 Oldenburg

Tel.: ++49 441 798 3831  
Fax: ++49 441 798 3330  
E-Mail: [gmehling@tech.chem.uni-oldenburg.de](mailto:gmehling@tech.chem.uni-oldenburg.de)

## **Hochschulkurs in Zusammenarbeit mit**

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

## Zeitplan

Dienstag, 9. 2. 2010	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>	Prof. Dr. J. Gmehling
	10.30 - 12.15	<b>Reinstoffdaten I</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- pVT-Verhalten reiner Stoffe</li><li>- Zustandsgleichungen, Korrespondenzprinzip</li><li>- kritische Daten</li><li>- Realanteile thermodynamischer Funktionen</li></ul>	Dr. J. Rarey
	12.15 - 13.15	Mittagspause	
	13.15 - 14.45	<b>Reinstoffdaten II</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- Sättigungsdampfdruck, Verdampfungsenthalpie</li><li>- Schmelzpunkt als f(T), Viskosität, Wärmeleitfähigkeit</li><li>- Reinstoffdatenbank DDB-Pure, Molekularstruktur und Stoffdatenabschätzung</li></ul>	Dr. J. Rarey
	14.45 - 15.30	<b>Bedeutung von Phasengleichgewichten Thermodynamische Grundlagen I</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- Hilfsgrößen <math>\gamma_i</math>, <math>\phi_i</math></li><li>- Aktivitätskoeffizientenmodelle (<math>g^E</math>-Modelle)</li><li>- Beschreibung von Dampf-Flüssig-Gleichgewichten</li></ul>	Prof. Dr. J. Gmehling
	15.30 - 15.45	Kaffeepause	
	15.45 - 17.15	<b>Bedeutung von Phasengleichgewichten Thermodynamische Grundlagen II</b> <ul style="list-style-type: none"><li>- Parameteranpassung, Konsistenztests, ...</li><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>	Prof. Dr. J. Gmehling
	19.00	<b>Geselliger Abend</b>	
Mittwoch 10. 2. 2010	9.00 - 10.30	<b>Einführung in MathCAD, Übung zu Reinstoffdaten und Phasengleichgewichten</b>	Dr. J. Rarey
	10.30 - 10.45	Kaffeepause	
	10.45 - 11.15	<b>Thermodynamische Grundlagen III</b> Zustandsgleichungen und Mischungsregeln	Prof. Dr. J. Gmehling
	11.15 - 12.15	<b>Spezielle Phasengleichgewichte I</b> Flüssig-Flüssig-Gleichgewichte, Gaslöslichkeiten, Fest-Flüssig-Gleichgewichte, Überkritische Extraktion, Osmotischer Druck	Dr. J. Rarey
	12.15 - 13.15	Mittagspause	
	13.15 - 14.30	<b>Spezielle Phasengleichgewichte II</b> Elektrolytsysteme	Dr. J. Rarey

	14.30 -	16.00	<b>Gruppenbeitragsmethoden zur Abschätzung von Phasengleichgewichten</b> - UNIFAC, mod. UNIFAC - Zustandsgleichungen, Mischungsregeln, moderne Gruppenbeitragszustandsgleichungen (z.B. PSRK)	Prof. Dr. J. Gmehling
	16.00 -	16.15	Kaffeepause	
	16.15 -	17.30	<b>Anwendung der Dortmunder Datenbank, DDBSP</b>	Dr. J. Rarey
	17.30 -	19.00	<b>Laborbesichtigung und Diskussion (für interessierte Teilnehmer)</b>	
Donnerstag, 11. 2. 2010	9.00 -	9.30	<b>Quantenmechanische Methoden zur Abschätzung von Stoffdaten (COSMO-RS, ...)</b>	Dr. J. Rarey
	9.30 -	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> - mit Hilfe thermodyn. Modelle - über Datenbankzugriff - extraktive und adduktive Kristallisation - Demonstration des Programmpakets SYNTHESE	Prof. Dr. J. Gmehling
	11.00 -	11.15	Kaffeepause	
	11.15 -	12.15	<b>Übung zu Thermodynamischen Eigenschaften und Anwendungen</b>	Dr. J. Rarey
	12.15 -	13.15	Mittagspause	
	13.15 -	14.45	<b>Reaktive Rektifikation, diskont. Rektifikation, Absorption, Extraktion, Kristallisation, Adsorption, Membranverfahren</b> <b>Weitere Möglichkeiten zur Anwendung von <math>g^E</math>-Modellen und Zustandsgleichungen</b> - chemisches Gleichgewicht - ...	Dr. J. Rarey
	14.45 -	15.00	Kaffeepause	
	15.00 -	16.30	<b>Übung Stofftrennung (zum Teil am Rechner)</b>	Dr. J. Rarey
	16.30 -	17.30	<b>Zusammenfassung, Diskussion</b>	
Freitag, 12. 2. 2010	9.00 -	12.15	<b>Workshop: Einführung in die Dortmunder Datenbank und das integrierte Softwarepaket DDBSP</b> - Allgemeine Struktur, Literatur, Komponenten, Daten - Einführendes Training - Reinstoff- und Gemischeigenschaften - Datenrecherche, grafische Darstellungen - Parameteranpassung	Dr. J. Rarey
	12.15 -	13.15	Mittagspause	
	13.15 -	16.00	<b>Vorteile simultaner Datenanpassung Stoffdatenabschätzung und Überprüfung von Parametern für die Prozesssimulation</b> <b>Andere Datenquellen: Beilstein Crossfire, ...</b>	Dr. J. Rarey
	16.00 -	16.30	<b>Besprechung der Ergebnisse</b>	Dr. J. Rarey

# ORGANISATION

Der Kurs beginnt am Dienstagmorgen um 10.00 Uhr und endet am Donnerstag um 17.30 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  
**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 die Konto Nr. 930 945 00, BLZ 500 800 00, Dresdner Bank AG, Frankfurt. Die Teilnehmergebühren sind steuerfrei gemäß § 4 Ziffer 22 UStG-MWSt.

## Referenten

### Prof. Dr. Jürgen Gmehling

1962 - 1965 Chemielaborantenlehre bei der Duisburger Kupferhütte  
1965 - 1968 Studium des Chemieingenieurwesens an der Ingenieurschule Essen  
1968 - 1970 Studium der Chemie an den Universitäten Clausthal und Dortmund  
1973 Promotion an der Universität Dortmund ( Anorganische Chemie )  
1977 – 1978 Forschungsaufenthalt in Berkeley, USA ( Prof. Dr. J. M. Prausnitz )  
1982 Habilitation in der Abt. Chemietechnik der Univ. Dortmund (Venia Legendi für Technische Chemie)  
1970 - 1989 Wissenschaftlicher Mitarbeiter, später Privatdozent und außerordentlicher Professor an der Universität Dortmund  
seit 1989 Ordentlicher Professor (C4) für Technische Chemie an der Universität Oldenburg  
Präsident der DDBST GmbH, Oldenburg  
Seit 1999 Direktor der LTP GmbH, Oldenburg  
Autor der DECHEMA Chemistry Data Series (VLE,  $h^E$ ,  $\gamma^\infty$ ) und des Tabellenwerks Azeotropic Data (Wiley-VCH Weinheim)(>40 Bände), Autor des Buches Vapor-Liquid Equilibria Using UNIFAC, der Lehrbücher „Thermodynamik“, „Grundoperationen“, „Technische Chemie“ sowie „Thermodynamik der Phasengleichgewichte“, „Thermische Verfahrenstechnik“ im Winnacker-Küchler (2004), Inhaber des Arnold-Eucken-Preises der GVC 1982 und des Rossini Lecture Award 2008 sowie mehr als 360 Publikationen in wissenschaftlichen Zeitschriften.  
Berufenes Mitglied verschiedener Fachausschüsse der GVC und der DECHEMA, Mitglied verschiedener Editorial Boards wissenschaftlicher Zeitschriften.

### Prof. h.c. Dr. Jürgen Rarey

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), ca. 37 Publikationen in wissenschaftlichen Zeitschriften

Brief-/Fax-Antwort

Fax-Nr. 0049/69/7564-414

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

**60486 Frankfurt am Main**

---

**Anmeldung** für den GVT-Hochschulkurs 70221 vom 9. – 11. (12.) Februar 2010

**"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 € 1010,- (€ 1270 für 4 Tage) bzw. für Teilnehmer aus Mitgliedsfirmen der GVT € 960,- (€ 1220 für 4 Tage). Erst nach der endgültigen Teilnahmebestätigung durch die GVT bitten wir um Überweisung. Wird eine Anmeldung bis zum 20. Januar 2010 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