

Vom Gleichgewicht der Stoffe

DFG-gefördert: Verlässliche Vorhersagen für Stoffgemische bei Trenn- und Reinigungsprozessen entwickeln

Birte Urban-Eicheler

Täglich werden bei industriellen Fertigungsprozessen zahlreiche Stoffgemische eingesetzt. Je nach Prozessziel müssen dabei die flüssigen wie gasförmigen Mischungen in Reinstoffe getrennt werden. So entstehen durch Trenn- und Reinigungsprozesse zum Beispiel aus dem natürlich vorkommenden Gemisch Rohöl erst für uns nutzbare Fraktionen. Oder es können mit diesem Verfahren auch große Mengen Abwasser gereinigt und wiederverwertet werden.

Um Stoffgemische zu trennen, werden die unterschiedlichen Eigenschaften der Einzelstoffe genutzt wie Teilchengröße, Löslichkeit, Siedetemperatur, Dichte und andere. Das hört sich einfach an, jedoch können flüssige Mischungen aus mehreren Komponenten nicht in jedem Fall zuverlässig theoretisch beschrieben werden. Dies betrifft sowohl Flüssigkeit-Dampf- und Flüssigkeit-Flüssigkeit-Gleichgewichte als auch Adsorptionsgleichgewichte. Befindet sich etwa Wasser anteilig in einem Stoffgemisch, wird es schwierig, denn H_2O ist eine ganz besondere Flüssigkeit: Wassermoleküle lagern sich über Wasserstoffbrücken zusammen und können so komplexe Strukturen – sogenannte Cluster – aufbauen. Solch' ein Verbund besteht nur für einen Bruchteil von Sekunden, ehe sich einzelne Wassermoleküle in einem permanenten Prozess lösen und neu verketteten. Doch genau diese charakteristische Verkettung erhöht den Aufwand bei der Beschreibung von Trenn- und Reinigungsprozessen beträchtlich, sobald sich Wasser im Gemisch mit verschiedenen chemischen Komponenten befindet.

Verlässliche Vorhersagen sind gefragt, um effizienter und kostengünstiger Trenn- und Reinigungsprozesse von Stoffgemischen in der industriellen Praxis durchzuführen. Mit ihrer Forschungsarbeit, die seit September 2016 für drei Jahre von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) gefördert wird, setzt Dr. Mandy Klauck von der Fakultät Landbau/Umwelt/Chemie genau hier an: Sie entwickelt ein optimiertes Berechnungsmodell, mit dem sich Adsorptionsgleichgewichte beliebiger Stoffmischungen korrekt prognostizieren lassen. Dazu sollen die bisher genutzten Modelle zur Vorhersage der Mehrkomponentenadsorption weiterentwickelt und verbessert werden.

Bei bisherigen Vorhersagemodellen wie dem Absolutionsformalismus ist definiert, dass die Grenzschichten zweier Stoffe eine bestimmte Dicke haben. Grenzschichten sind zum Beispiel die Übergänge zwischen zwei Flüssigkeitsphasen, wenn Öl und Wasser aufeinandertreffen. Der Exzessformalismus

besagt, dass die Phasen ineinander übergehen und dabei kontinuierlich ihre Konzentration ändern. Mandy Klauck nutzt für ihr zu entwickelndes Berechnungsmodell die beiden Methoden und verknüpft dabei die Grenzflächen- und Mischphasendynamik, wobei der Einfluss der Fluid-Fluid-Wechselwirkungen auf die Adsorption stärker berücksichtigt wird als bisher.

Ob sich ihr Algorithmus in der Realität bewährt, wird die Dresdner Chemieingenieurin mit experimentellen Adsorptionsthermen für stark reale Mischungen evaluieren. Ihre thermodynamische Grundlagenforschung vor dem Hintergrund einer energieeffizienten Stofftrennung und -reinigung könnte später für ein Computerprogramm genutzt werden, um ohne aufwendige Experimente Adsorptionsgleichgewichte von Stoffmischungen zu berechnen.



Kontakt

Fakultät Landbau/Umwelt/Chemie
Dr.-Ing. Mandy Klauck
klauck@htw-dresden.de

Dr. Klauck widmet sich Adsorptionsgleichgewichten von Gemischen in porösen Festkörpern.