

VTPRLIFAC – Eine Kombination aus dem VTPR-Modell und dem LIFAC-Modell.

Bei der Auslegung thermischer Trennverfahren muss in vielen Fällen auch der Einfluss von Elektrolyten auf das Phasengleichgewicht der beteiligten Komponenten berücksichtigt werden. Salze sind allgegenwärtig und lassen sich daher in zahlreichen natürlichen und industriellen Prozessen finden. Aus diesem Grund sind Informationen über das Phasengleichgewichtsverhalten elektrolythaltiger Systeme bei der Auslegung und Simulation einer Reihe verfahrenstechnischer Prozesse von großer Bedeutung. Beispiele hierfür sind die Absorption saurer Gase wie SO_2 , CO_2 , und H_2S durch alkalische Absorptionsmittel, die Kristallisation von Salzen aus Lösungsmittelgemischen, die Aufarbeitung salzhaltiger Lösungen und die Salzdestillation. In allen Fällen übt die Elektrolytkomponente einen nicht zu vernachlässigenden und teilweise sogar entscheidenden Einfluss auf das Phasengleichgewichtsverhalten aus. So kann beobachtet werden, dass die Löslichkeit von Gasen in wässrigen Lösungen durch vorhandene Salze verändert werden kann, was man als Ein- bzw. Aussalzeffekt bezeichnet. Bei Dampf-Flüssig-Gleichgewichten von Gemischen führt der Salzzusatz zu einer beträchtlichen Veränderung des Trennfaktors.

Es besteht die Möglichkeit, die Gruppenbeitragszustandsgleichung VTPR, die sowohl zur Beschreibung von unterkritischen als auch überkritischen Systemen geeignet ist, durch Implementierung des LIFAC-Modells auf elektrolythaltige Systeme zu erweitern. In dem neu entwickelten VTPRLIFAC-Modell wird das LIFAC-Modell anstatt des UNIFAC-Modells zur Berechnung der Gibbschen Exzessenthalpie in der VTPR-Mischungsregel verwendet, wobei direkt alle Wechselwirkungsparameter des VTPR-Modells und des LIFAC-Modells genutzt werden können. Neben der Berechnung von Dampf-Flüssig-Phasengleichgewichten elektrolythaltiger Mehrkomponentensysteme (Abbildung 1A) ist auch die Beschreibung von Gaslöslichkeiten (Abbildung 1B) mit Hilfe des VTPRLIFAC-Modells möglich.

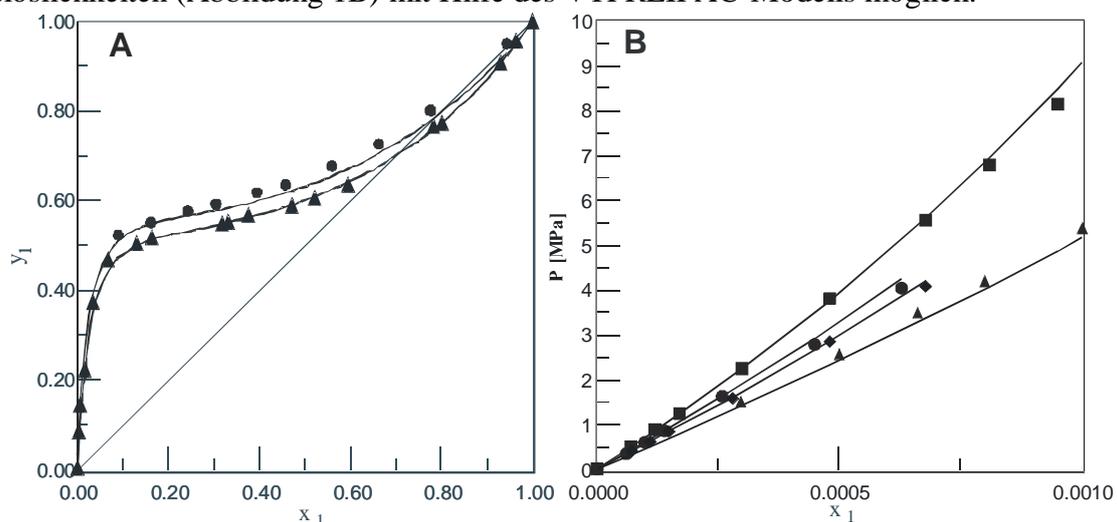


Abb. 1 (A) x - y Daten für das System Propanol (1) + Wasser (2) + LiBr (3) bei 101 kPa und verschiedenen Gewichts% des Salzes, $m = 0.0\%$ (▲), $m = 5.0\%$ (□) (B) P - x Daten für das System Methan (1) + Wasser (2) + LiBr (3) bei $T = 313$ K und verschiedenen Molenbrüchen x des Salzes, $x_{\text{salt}} = 0.000$ (▲), $x_{\text{salt}} = 0.018$ (◆), $x_{\text{salt}} = 0.043$ (□), $x_{\text{salt}} = 0.083$ (■). — VTPRLIFAC

Im Vortrag sollen experimentelle Daten elektrolythaltiger Systeme und die erhaltenen Ergebnisse für das VTPRLIFAC-Modell vorgestellt werden.