

Shichang Wang und Wolfgang Schmidt

Berechnung von Stoffdaten und Phasengleichgewichten mit Excel-VBA

Anwendungen bei Verdampfung, Kristallisation,
Rektifikation und Reaktion



WILEY-VCH

Inhaltsverzeichnis

1	Stoff- und p,v-T-Daten der Reinstoffe	1
1.1	Wasserdampf tabel nach IAPWS-IF97	1
1.2	Inkrementenmethode von Joback	6
1.3	DIPPR-Datenbank	28
1.4	DWSIM – Freewaresoftware zur Prozesssimulation (dwflash).....	36
2	Methoden zur Berechnung von Stoffdaten der Gemische.....	43
2.1	Mischungsregeln.....	43
2.2	Ideale Mischungsregeln.....	43
2.3	Spezielle Lösung zur Exzessgröße am Beispiel der Dichte	59
3	Molekulare Potentiale und Kräfte.....	72
3.1	Atomare Berechnungen und Methode nach Coulomb.....	72
3.1.1	Massendefekt des Heliums.....	72
3.1.2	Das Wasserstoffatom	73
3.1.3	Der Kimball-Ansatz	74
3.1.4	Das Bohr'sche Atommodell	76
3.1.5	Das Wasserstoffmolekül nach dem Kimball-Ansatz.....	77
3.2	Zwischenmolekulare Wechselwirkungen	79
3.2.1	Kinetische Gastheorie eines idealen Gases	80
3.2.2	Die reale Gasgleichung	81
3.2.3	Potenzielle Energie von Molekülen	83
3.2.4	Zwischenmolekulare Energiepotentiale	84
3.2.5	Dipole.....	85
3.2.6	Berechnungen von Dipolen (Coulomb-Dipole)	104
3.2.7	Die Berechnung von Dipolmomenten (BerechnungDipolmoment).....	116
3.3	Methode nach Morse (morse).....	127
3.4	Methode nach Buckingham (buckingham).....	130
3.5	Methode nach Lennard-Jones	153
3.6	Virialtheorem.....	164
3.7	Ermitteln von Lennard-Jones-Parametern	167
3.8	Berechnung der Bindungsenergie mit dem Lennard-Jones-Modell	168

3.9	Molekülsysteme (MolekSimul)	172
3.10	Berechnung des Potentials eines Feststoffes (Usolid).....	176
3.11	Harmonischer Oszillator (harm)	178
3.12	Lineare dynamische Simulation (linearemolekuelsimulation).....	183
3.13	Lineare Bewegung (molsim)	198
4	Phasengleichgewichte	222
4.1	Einführung.....	222
4.2	Berechnungen mit UNIFAC (actcoeff)	222
4.3	Excel-Datei ACTCOEFF.xls	230
4.4	Flashberechnungen mit DWSIM und CHEMCAD	233
4.4.1	Unifac-Programme.....	241
4.5	Berechnungen mit NRTL	243
4.6	Die van-der-Waals-Gleichung.....	244
4.7	Joule-Thomson-Effekt.....	248
4.8	Reale Zustandsgleichung nach SRK (Soave-Redlich-Kwong).....	249
4.9	Wichtige Definitionen	249
4.10	Aggregatzustände	250
4.11	Gesetz von Clausius-Clapeyron (August).....	251
4.12	Phasengleichgewichte.....	252
4.13	Dampf-Flüssig-Gleichgewicht (VLE)	252
4.14	Raoult'sches Gesetz	253
4.15	Dalton'sches Gesetz	253
4.16	Reale Flüssigkeiten und Aktivitätskoeffizient	256
4.17	Feststoffgleichgewicht, Solid-Liquid-Equilibrium (SLE)	265
4.18	Partielle molare Größen.....	267
4.19	Flashberechnung von Phasengleichgewichten.....	268
4.19.1	Gas-Flüssigkeits-Gleichgewicht mit CHEMCAD	273
5	Einführung in die vorwärts-sequenzielle Prozesssimulation in Excel.....	286
5.1	Einführung in die Prozesssimulation	286
5.2	Bilanzierung einer Eindampfanlage als Gesamtanlage – Aufgabe a).....	290
5.3	Berechnung einer Eindampfanlage mit Vorwärmung – Aufgabe b)	297

5.4	Berechnung einer zweistufigen Gegenstromeindampfanlage – Aufgabe c)	299
5.5	Berechnung einer zweistufigen Gleichstromeindampfanlage – Aufgabe d).....	303
5.6	Berechnung einer Eindampfanlage mit thermischer Brüdenverdichtung	307
5.7	Berechnung einer Eindampfanlage mit mechanischer Brüdenverdichtung	309
5.8	Zusammenfassung der Energieeinsparungsmaßnahmen bei der Verdampfung	312
5.9	Berechnung einer Kristallisationsanlage (nur Massenbilanz).....	313
6	Ausgewählte Beispiele der Rektifikation	330
6.1	Einführungsbeispiel mit Flash, Datei „Rektif2016.xls“	330
6.2	Berechnung einer Rektifikationskolonne nach Matz in Excel (Rektifikation2017) ..	339
6.3	Rektifikationen mit CHEMCAD	362
6.3.1	Binäres Gemisch	363
6.3.2	Ternäres Gemisch	369
6.3.3	Azeotropes Gemisch	378
6.3.4	Extraktivrektifikation	386
6.4	Batch-Destillation und –rektifikation	392
7	Chemische Reaktion	408
7.1	Einfacher Batch-Reaktor	409
7.2	Homogener Rührreaktor	415
7.3	Inhomogener Rührreaktor.....	419
7.4	Rohrreaktor.....	424
	Anhang.....	433
	Literaturverzeichnis	456
	Online Literaturverzeichnis	461
	Stichwortregister.....	463