

Berichte aus der Verfahrenstechnik

Ute Lichtfers

**Spektroskopische Untersuchungen zur Ermittlung
von Speziesverteilungen im System
Ammoniak - Kohlendioxid - Wasser**

D 386 (Diss. Universität Kaiserslautern)

Shaker Verlag
Aachen 2001

Die Deutsche Bibliothek - CIP-Einheitsaufnahme

Lichtfers, Ute:

Spektroskopische Untersuchungen zur Ermittlung von Speziesverteilungen
im System Ammoniak - Kohlendioxid - Wasser / Ute Lichtfers.

Aachen : Shaker, 2001

(Berichte aus der Verfahrenstechnik)

Zugl.: Kaiserslautern, Univ., Diss., 2000

ISBN3-8265-8477-5

Copyright Shaker Verlag 2001

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen
oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungs-
anlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 3-8265-8477-5

ISSN 0945-1021

Shaker Verlag GmbH • Postfach 1290 • 52013 Aachen

Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9

Internet: www.shaker.de • eMail: info@shaker.de

Zusammenfassende Beschreibung der Arbeit zum Thema: „Spektroskopische Untersuchungen zur Ermittlung von Speziesverteilungen im System Ammoniak-Kohlendioxid-Wasser“

Wässrige Lösungen, die Ammoniak und saure Gase wie Kohlendioxid oder Schwefeldioxid enthalten, müssen in vielen Bereichen der industriellen Technik aufgearbeitet werden. Die Aufarbeitung erfolgt in der Regel mit thermischen Trennverfahren, zu deren Auslegung die thermodynamischen Eigenschaften der aufzuarbeitenden Gemische bekannt sein müssen. Hier sind Modelle, die die thermodynamischen Eigenschaften (z.B. Phasengleichgewicht, kalorische Effekte, Speziesverteilungen) zuverlässig beschreiben, von großem Interesse.

Das Phasengleichgewicht bei der Lösung von Ammoniak und Kohlendioxid in wässrigen Lösungen wird wesentlich durch die chemischen Reaktionen in der flüssigen Phase beeinflusst. Durch diese Reaktionen werden die Gase in ionischer, nicht flüchtiger Form gelöst und die Mischung weist aufgrund der weitreichenden coulombschen Wechselwirkungen ein stark reales Verhalten auf. Auf der Basis früherer Arbeiten wurde ein thermodynamisches Modell entwickelt, welches in dieser Arbeit hinsichtlich der Beschreibung der Speziesverteilungen in der flüssigen Phase zunächst überprüft und dann verbessert wurde. Hierzu wurden in den Lösungen Speziesverteilungen mit Hilfe der FTIR-ATR-Spektroskopie ermittelt.

Mit dieser Arbeit wurde ein Modell zur Verfügung gestellt, das nicht nur das Phasengleichgewicht, sondern auch die Verteilung der gelösten Gase auf die durch chemische Reaktionen entstehenden Spezies und kalorische Daten (Enthalpieänderungen beim Vermischen/Verdünnen sowie beim partiellen Verdampfen) beschreibt. Es ist in dieser Arbeit erstmalig gelungen, die Speziesverteilungen im System Ammoniak-Kohlendioxid-Wasser zu bestimmen und durch die Einbeziehung der spektroskopischen Daten in die Modellierung die Beschreibung der thermodynamischen Eigenschaften in diesem komplexen System sowie in höheren Systemen zu verbessern. Die Ergebnisse dieser Arbeit dienen als Grundlage für weiterführende Arbeiten, z.B. zur Ermittlung von Speziesverteilungen im System Ammoniak-Schwefeldioxid-Wasser oder zur Erweiterung des Modells auf die Beschreibung von Transport- und Reaktionskinetiken.