

Programmsystem Physikalische Chemie / Prozessgrundlagen für Lehre und Forschung

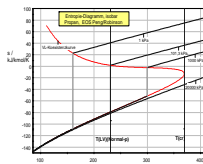
Prof. Dr. D. A. Lempe †

- **Konzeption:** Die vier Komponenten sind als Lehrprogramme für Studenten der Fachrichtungen Chemie, Chemieingenieurwesen, Bioingenieurwesen und Verfahrenstechnik konzipiert. Mit integrierter Datenbankunterstützung kann das Verhalten realer Stoffsysteme mit den verschiedensten Berechnungsmodellen unter Prozessnahen Bedingungen studiert werden. Im Mittelpunkt der Programme steht die Darstellung der Ergebnisse mittels komfortabler und variabler Diagrammgrafik (2D und 3D).
- **Sprache:** Jeweils deutsche und englische Programmversion verfügbar
- **Studentenversion:** Die freie Studentenversion wird mit einer Mini-Stoffdatenbank (52 Stoffe) bereitgestellt
- **Hilfesystem:** Eine integrierte HTML-Hilfe (deutsch) erklärt die Programmbedienung und theoretische Grundlagen und stellt Übungsaufgaben bereit.
- **Betriebssystem:** Windows XP, 7, 8, 10

ZUST

Berechnung fluider Zustände und Prozesse an Reinstoffsystemen.
Als Berechnungsmodelle stehen zur Verfügung

- thermische Zustandsgleichungen, insbesondere kubische;
 - mehrere Typen von Dampfdruckgleichungen;
 - Korrelationsmodelle für Dampfdruckgleichungen;
 - Temperaturfunktionen und Korrelationsmodelle für die Verdampfungsenthalpie;
 - Temperaturfunktionen für Wärmekapazitäten und Flüssigkeitsdichte.
- Neben Phasenzustand, Dampfdruck und Phasendichten eines Systems kann eine Vielzahl von thermodynamischen Funktionen berechnet werden. Mit Grafikunterstützung können isotherme, isobare, isochore, isenthalpe, isentrope oder polytrope Prozesse berechnet werden. Eine spezielle Option erlaubt die Ermittlung von Phasenzustand, Füllstand, Druck (und heterogenen thermodynamischen Funktionen) in Behältern. Die Ergebnisse werden wahlweise als berechnete Einzelwerte, in grafischer 2D- oder 3D-Darstellung oder als MS-Excel-Files ausgegeben.



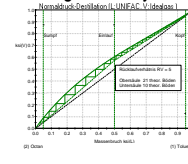
Merseburger Datenbank
für thermophysikalische
Reinstoffeigenschaften
MDB

VLE

ist ein Lehrprogramm zum Komplex **Dampf-Flüssigkeits-(Flüssigkeits-) Phasengleichgewichte (VL(L)E)**. Gleichzeitig ist **VLE** auch ein leistungsfähiges Werkzeug zur Modellierung von Phasengleichgewichten.

Besondere Gesichtspunkte von **VLE** sind:

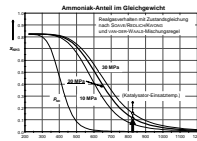
- Gleichgewichtsberechnungen nach dem Raoult-Konzept mit Aktivitätskoeffizienten-Modellen (u. a. UNIFAC) oder nach dem Fugazitätskonzept mit thermischen Zustandsgleichungen;
- Flash-Berechnungen für Gemische mit bis zu 10 Komponenten;
- komfortable Diagrammgrafik für binäre Gemische;
- Parameter-Fitting von Aktivitätskoeffizienten-Modellen an experimentelle V-L-Phasengleichgewichts-Daten;
- thermodynamische Analyse experimenteller Datensätze;
- Destillationsberechnungen (Thiele/McCabe, Mehrkomponenten-Batchdestillation);
- Berechnung von Mischungslücken binärer Systeme;
- Berechnung und grafische Darstellung thermodynamischer Funktionen der Gemische;
- 50 Übungsprojekte, auch überkritische Systeme



KOMPLEX

soll die **Thermodynamik chemischer Reaktionsgleichgewichte** verständlich machen. Gleichzeitig ist **KOMPLEX** auch ein leistungsfähiges Werkzeug zur Analyse von Temperatur-, Druck und Stoffmengeneinflüssen auf die Gleichgewichtslage chemischer Reaktionssysteme.

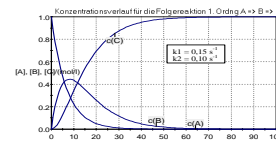
- Gleichgewichtsberechnung von Reaktionssystemen mit bis zu 12 Stoffen und mit bis zu 12 chemischen Reaktionen unter Berücksichtigung des Realverhaltens;
- Reaktionsführung isotherm-isobar, isotherm-isochor, isobar-isentrop, isochor-isentrop, isobar-adiabat oder isochor-adiabat;
- Energie- und Entropiebilanzen für Reaktionsprozesse;
- ausführliche thermodynamische Analyse von Reaktionen;
- Berücksichtigung reiner kondensierter Phasen ist möglich;
- Gleichgewichtskonstanten: Wahlweise thermodynamische Berechnung aus Reinstoffdaten oder direkte Eingabe;
- Berücksichtigung von möglichem Phasenzustand V-L bei der Gleichgewichtsberechnung.



KINETIK

ist ein grafikorientiertes Programm, das die **Kinetik homogener chemischer Reaktionen** behandelt.

- Simulation von Reaktionsabläufen (Konzentrations-Zeit-Funkt.) für verschiedene - auch komplexe - Reaktionsmechanismen;
- Auswertung experimenteller Konzentrations-Zeit-Daten **isotherm** und **nicht-isotherm** mittels verschiedener Fitting-Methoden;
- Auswertung experimenteller Konzentrations-proportionaler Größen
- Auswertung experimenteller Daten der Temperaturabhängigkeit von Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten (ARRHENIUS, EYRING);
- Berechnung von Reaktoren (Batch-R., Rohr-R, kont. Rührkessel, Rührkesselkaskade);
- Zufallssimulation von Reaktionskinetik („Monte-Carlo“);
- visualisierter Versuch „Verweilzeit in einer Rührkessel-Kaskade“
- Modellierung von Verweilzeit-Funktionen
- Modellierung des Blutalkohol-Abbaus



Download der freien Studentenversion: <http://physchem.hs-merseburg.de>
gerd.hradetzky@hs-merseburg.de