

Dipl.-Ing. Andreas Klein, Marl

Thermodynamik flüssiger Mischungen mit Laktonen

Reihe **3**: Verfahrenstechnik

Nr. **479**

Inhaltsverzeichnis

Formelzeichen	VIII
1 Einleitung	1
2 Meßmethoden	3
2.1 Bestimmung der molaren Exzess Gibbs Energie g^E	3
2.1.1 Isotherme Messungen	3
2.1.2 Isobare Messungen	14
2.2 Bestimmung des molaren Exzessvolumens v^E	15
2.3 Bestimmung der isothermen Kompressibilität κ^0	16
3 Eigenschaften der reinen Stoffe	19
3.1 Chemikalien	19
3.2 Dichten der reinen Stoffe	23
3.3 Dampfdrücke der reinen Stoffe	24
4 Das System γ-Butyrolakton + Benzol	27
4.1 Die isothermen Exzess Gibbs Energien g^E	28
4.2 Die isothermen Exzessvolumina v^E	30
4.3 Die isotherme Kompressibilität κ^0	32
5 Das System γ-Butyrolakton + Heptan	33
5.1 Die isothermen Exzess Gibbs Energien g^E	33
5.2 Die isothermen Exzessvolumina v^E	38
6 Das System γ-Valerolakton + Benzol	41
6.1 Die isothermen Exzess Gibbs Energien g^E	42
6.2 Die isothermen Exzessvolumina v^E	44
6.3 Die isotherme Kompressibilität κ^0	46
7 Das System δ-Valerolakton + Benzol	47
7.1 Die isothermen Exzess Gibbs Energien g^E	48
7.2 Die isothermen Exzessvolumina v^E	50
7.3 Die isotherme Kompressibilität κ^0	52

8	Systeme mit ϵ-Caprolakton + Benzol und ϵ-Caprolakton + Benzol + n-Heptan	53
8.1	Die isothermen Exzess Gibbs Energien g^E des Systems ϵ -Caprolakton + Benzol	55
8.2	Das isobare Verdampfungsgleichgewicht des Systems ϵ -Caprolakton + Benzol	57
8.3	Die isothermen Exzessvolumina v^E des Systems ϵ -Caprolakton + Benzol	58
8.4	Die isotherme Kompressibilität κ^0 des Systems ϵ -Caprolakton + Benzol	60
8.5	Das isobare Verdampfungsgleichgewicht des Systems ϵ -Caprolakton + Benzol + Heptan	61
9	Das System ϵ-Caprolakton + Toluol	62
9.1	Die isothermen Exzess Gibbs Energien g^E	63
9.2	Die isothermen Exzessvolumina v^E	65
10	Auswertung und Diskussion der Meßergebnisse	67
10.1	Exzess Gibbs Energien g^E	67
10.1.1	Korrelationen nach Wilson und UNIQUAC	69
10.2	Exzessvolumina v^E	75
10.3	Kompressibilitäten κ^0	77
11	Gruppenbeitragstheorien	85
11.1	Die allgemeine quasi-chemische Theorie (TOM / DISQUAC)	86
11.1.1	Berechnung thermodynamischer Zustandsgrößen von Mischungen	91
11.1.2	Das DISQUAC Modell	93
11.1.2.1	Berechnung der dispersiven Anteile	95
11.1.2.2	Berechnung der quasi-chemischen Anteile	96
11.1.2.3	Bestimmung der geometrischen Parameter	98
11.2	Das UNIFAC-Modell	98
11.2.1	Modifizierte UNIFAC-Modelle	99
11.2.2	Berechnungen der Exzess Gibbs Energien der Lakton + Benzol bzw. + Toluol Mischungen mit der Gruppenbeitragstheorie mod. UNIFAC (Dortmund)	101

11.3	Vergleich der Gruppenbeitragstheorien DISQUAC und UNIFAC	104
12	Ergebnisse der DISQUAC Berechnungen	106
12.1	Geometrische Parameter	106
12.2	DISQUAC Parameter für den Kontakt Alkan - Benzol (a, b) und Alkan - Phenyl (a, p)	107
12.3	DISQUAC Parameter für den Kontakt c-COO - Alkan (l, a)	107
12.4	DISQUAC Parameter für den Kontakt c-COO - Benzol (l, b)	109
12.5	DISQUAC Parameter für den Kontakt c-COO - Phenyl (l, p)	111
12.6	Ergebnisse und Diskussion	113
13	Zusammenfassung und Ausblick	136
14	Anhang	138
I.	Tabellen für das System Cyclohexan + Benzol (Tabelle 1)	139
II.	Tabellen für das System γ -Butyrolakton + Benzol (Tabelle 2 - Tabelle 16)	140
III.	Tabellen für das System γ -Butyrolakton + Heptan (Tabelle 17 - Tabelle 19)	149
IV.	Tabellen für das System γ -Valerolakton + Benzol (Tabelle 20 - Tabelle 34)	151
V.	Tabellen für das System δ -Valerolakton + Benzol (Tabelle 35 - Tabelle 49)	161
VI.	Tabellen für die Systeme mit ϵ -Caprolakton + Benzol und ϵ -Caprolakton + Benzol + n-Heptan (Tabelle 50 - Tabelle 65)	170
VII.	Tabellen für das System ϵ -Caprolakton + Toluol (Tabelle 66 - Tabelle 68)	181
VIII.	Tabellen der Abweichungen ($\Delta = \text{Exp.} - \text{DISQUAC}$) (Tabelle 69 - Tabelle 81)	184
15	Literaturverzeichnis	199