



TAGUNGSHANDBUCH

22. – 24. September 2014 Universität Stuttgart

Thermodynamik-Kolloquium 2014





Seite Montag, 22. September 2014 vor-**WATT-Sitzung** Fakultätszimmer im Pfaffenwaldring 9, 5. Stock mittags Registrierung mit Snacks zum Mittagessen 13:00 Hörsaal 57.04 Begrüßung durch die Vorsitzenden und Verleihung des WATT-Preises 13:30 **PLENARSITZUNG** Thermodynamik in der Partikeltechnik – Von den Partikelwechselwirkungen 14:00 19 zum Design funktionaler Materialsysteme W. Peukert, Universität Erlangen-Nürnberg Optimale Versuchsplanung: Theorie und Beispiele 20 14:45 W. Nowak, Universität Stuttgart Kaffeepause 15:30 Hörsaal 57.04 **ELEKTROLYTE/ILS** Experimentelle Untersuchung und molekulare Simulation thermodynamischer 16:00 21 Eigenschaften organischer Elektrolytlösungen S. Reiser, M. Horsch, H. Hasse, Universität Kaiserslautern Carbon dioxide solubility in tetrafluoroborate anion ionic liquids at high pressures 16:25 22 and over wide range of temperatures J. Safarov, Universität Rostock; E. Bunyatova, A. Shahverdiyev, Azerbaijan Technical University, Baku/AZ; E. Hassel, Universität Rostock Experimental and simulation results of ${\rm CO_2/CH_4}$ mixtures solvated in the ionic 16:50 23 liquid [C_nMIM][EtSO₄] M. Schenk, Hochschule Bonn-Rhein-Sieg, Sankt Augustin; S. Knauer, EUROTECHNICA GmbH, Bargteheide; T. Köddermann, M. Hülsmann, FhI für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen (SCAI), Sankt Augustin; D. Reith, Hochschule Bonn-Rhein-Sieg, Sankt Augustin Cluster-Bildung Ionischer Flüssigkeiten in Alkoholen 17:15-24 P. Hausmann, L. Mokrushina, A. König, Universität Erlangen-Nürnberg 17:40 Gemeinsame Geschäftssitzung der Thermodynamik-Fachgruppe 17:50und des VDI-GEU-Fachausschusses 19:30 (nicht öffentlich) im Fakultätszimmer im Pfaffenwaldring 9, 5. Stock

Geselliger Abend im Brauhaus Schönbuch

19:30

Seite Montag, 22. September 2014 **WATT-Sitzung** vor-Fakultätszimmer im Pfaffenwaldring 9, 5. Stock mittags Registrierung mit Snacks zum Mittagessen 13:00 Hörsaal 57.04 Begrüßung durch die Vorsitzenden und Verleihung des WATT-Preises 13:30 **PLENARSITZUNG** Thermodynamik in der Partikeltechnik – Von den Partikelwechselwirkungen 14:00 19 zum Design funktionaler Materialsysteme W. Peukert, Universität Erlangen-Nürnberg Optimale Versuchsplanung: Theorie und Beispiele 20 14:45 W. Nowak, Universität Stuttgart 15:30 Kaffeepause Hörsaal 57.02 THERMODYNAMISCHE PROZESSE 16:00 Computer-aided molecular design for Organic Rankine Cycle working fluid selection 25 M. Lampe, RWTH Aachen; E. Sauer, M. Stavrou, J. Gross, Universität Stuttgart; A. Bardow, RWTH Aachen Reverse-Engineering bei der Auswahl von Arbeitsfluiden am Beispiel für 16:25 26 Wärmepumpen D. Roskosch, B. Atakan, UniversitätDuisburg-Essen Nutzung von HCCI-Motoren zur Polygeneration – eine theoretische Untersuchung 16:50 27 R. Hegner, B. Atakan, Universität Duisburg-Essen 17:15-Thermodynamik des biologischen Energiesystems 28 R. Radebold, RADEBOLD Ingenieurbüro, Berlin 17:40 Gemeinsame Geschäftssitzung der Thermodynamik-Fachgruppe 17:50und des VDI-GEU-Fachausschusses 19:30 (nicht öffentlich) im Fakultätszimmer im Pfaffenwaldring 9, 5. Stock Geselliger Abend im Brauhaus Schönbuch 19:30

Seite

Dienstag, 23. September 2014

	Hörsaal 57.04	
	INDUSTRIELLE PROZESSE	
09:00	Phasengleichgewicht und Mischungsenthalpie von wässrigen Polypropylen Glykol (PPG) und Polyethylen Glykol (PEG) Lösungen <u>U. Dorn</u> , S. Enders, TU Berlin	29
09:25	Industrielle Anwendung prädiktiver thermodynamischer Modelle in der Prozessentwicklung am Beispiel von Trennwandkolonnen T. Grützner, D. Staak, Lonza AG, Visp/CH	30
09:50	Thermodynamic study of a complex system for carbon capture: butyltriacetonediamine + water + carbon dioxide D. Vasiliu, A. Yazdani, TU Kaiserslautern; M. Irfan, R. Schneider, Evonik Industries AG, Hanau-Wolfgang; N. McCann, G. Maurer, E. von Harbou, H. Hasse, TU Kaiserslautern	31
10:15	Investigation of supersaturation in reactive absorption columns <u>E. von Harbou</u> , M. Imle, TU Kaiserslautern; L. Brachert, K. Schaber, Karlsruher Institut für Technologie; H. Hasse, TU Kaiserslautern	32
10:40	Kaffeepause	
	MOLEKULARE MODELLE	
11:10	Thermophysikalische Eigenschaften von CO ₂ und N ₂ O auf Basis hochgenauer zwischenmolekularer <i>ab initio</i> -Potentiale <u>JP. Crusius</u> , R. Hellmann, E. Hassel, E. Bich, Universität Rostock	37
11:35	Neues übertragbares Kraftfeld für die Berechnung von Phasengleichgewichten A. Hemmen, J. Groß, Universität Stuttgart	38
12:00	Dichteprofile in Grenzschichten realer fluider Mischungen aus Dichtegradiententheorie + PC-SAFT und Molekularen Simulationen K. Langenbach, M. Horsch, S. Werth, H. Hasse, TU Kaiserslautern	39
12:25	Atomistische Simulationen supramolekularer Komplexe in wässriger Lösung J. Baz, <u>N. Hansen</u> , Universität Stuttgart	40
12:50	Simulation of activity and stability of <i>C. antarctica</i> lipase B under non-natural conditions T. Kulschewski, Universtität Stuttgart; J. Pleiss, Universität Stuttgart	41
13:15	Weg zum Mittagessen	
13:30	Mittagspause im Commundo-Tagungshotel	

Seite Dienstag, 23. September 2014 Hörsaal 57.04 REAKTIONEN Analyse komplexer Reaktionsnetzwerke und Ermittlung kinetischer Daten aus 48 14:30 reaktiven molekulardynamischen Simulationen W.A. Kopp, M. Döntgen, M.-D. Przybylski-Freund, L. Kröger, K. Leonhard, RWTH Aachen Untersuchung des Lösungsmitteleinflusses auf die Veresterung von Ethanol und 14:55 49 Essigsäure O. Riechert, T. Zeiner, G. Sadowski, TU Dortmund Thermodynamische Modellierung und Analyse der destillativen Trennung von 15:20 50 reagierenden Mischungen aus Formaldehyd, Wasser und mehrwertigen Alkoholen J. Berje, TU Kaiserslautern; J. Baldamus, BASF SE, Ludwigshafen; J. Burger, H. Hasse, TU Kaiserslautern Kaffeepause 15:45 **GRENZFLÄCHEN** 16:15 Verdampfung von einer freien Flüssigkeitsgrenzfläche 54 A. Lotfi, ista International, Essen; J. Vrabec, Universität Paderborn; J. Fischer, Universität für Bodenkultur, Wien/A 16:40 Untersuchung von Oberflächeneigenschaften binärer Mischungen 55 S. Eckelsbach, J. Vrabec, Universität Paderborn Das optimale Diffusionsexperiment 56 17:05 L. Wolff, C. Blesinger, C. Pauls, A. Bardow, RWTH Aachen 17:30-**POSTERPARTY** 20:00

09:25

10:15

10:40

11:10

11:35

12:00

12:25

12:50

13:15

13:30

messanlage

solutions

Salz-Lösungen

mittels kombinierter LIF-Techniken

GFZ

Seite Dienstag, 23. September 2014 Hörsaal 57.02 KLIMATISIERUNG/KÜHLUNG 09:00 Klimaturbo und Turbolader für die PKW-Klimatisierung 33 D. Hebecker, Universität Halle-Wittenberg Effizienzsteigerung von Haushaltskühlgeräten durch polymergebundene Phasen-34 wechselmaterialien G. Sonnenrein, A. Elsner, Universität Paderborn; K. Fieback, PCM-innovativ GmbH, Michendorf; K. Lessmann, Pfinder KG, Böblingen; A. Morbach, Miele & Cie. KG, Gütersloh; J. Vrabec, Universität Paderborn 09:50 Sorptionsgestützte Klimatisierung von Elektrobussen 35 H. Schreiber, U. Bau, A. Bardow, RWTH Aachen Geothermisch- und sorptionsgestützte Klimatisierung 36 A. Speerforck, G. Schmitz, TU Hamburg-Harburg Kaffeepause MESSMETHODEN Eine neue Methode zur Untersuchung von Sorptionseffekten und zur Bestimmung 42 der Taulinie von binären Gasgemischen mithilfe einer Zwei-Senkkörper Dichte-M. Richter, Ruhr-Universität Bochum; M.O. McLinden, National Institute of Standards and Technology, Boulder, CO/USA Hochtemperatur-Sorptionsmessungen für die Bestimmung von Oberflächeneffekten 44 an Festbrennstoffen T.M. Fieback, Ruhr-Universität Bochum A modified flow-through apparatus for high pressure viscosity measurements of salt 45 U. Hoffert, H. Milsch, Helmholtz-Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum Experimentelle Untersuchung von N-Isopropylacrylamid Hydrogele in wässrigen 46 D. Althans, S. Enders, TU Berlin

47

Einsatz von Tracer-Mischungen für innermotorische Multi-Parameter-Messungen

Weg zum Mittagessen

Mittagspause im Commundo-Tagungshotel

S. Lind, J. Trost, L. Zigan, A. Leipertz, S. Will, Universität Erlangen-Nürnberg

8

Seite Dienstag, 23. September 2014 Hörsaal 57.02 **ENERGIESPEICHERUNG** Thermodynamische Bewertung der Wasserstoffspeicherung in Metallhydriden 14:30 51 P. Adametz, K. Müller, W. Arlt, Universität Erlangen-Nürnberg Verfahrensentwicklung für dezentrale adiabate Druckluftspeicherkraftwerke 14:55 52 (Mini-CAES) M. Krüger, M. Schwarzenbart, S. Zunft, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V., Stuttgart Hochtemperatur Schüttwärmespeicher: thermomechanische Aspekte bei 15:20 53 großtechnischen Anwendungen V. Dreißigacker, S. Zunft, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V., Stuttgart Kaffeepause 15:45 THERMODYNAMISCHE GRUNDLAGEN Bestimmung einer Nu-Funktion für die Wärmeübertragung eines Kanals mit 16:15 57 beidseitigen Dimple-Oberflächen im Übergangsbereich zur turbulenten Strömung mit Hilfe von Direkter Numerischer Simulation V. Pawlik, A. Luke, Universität Kassel 16:40 Isentropen von Fluiden im Zweiphasengebiet 58 <u>U.K. Deiters</u>, Universität zu Köln; A.R. Imre, MTA Centre for Energy Research, Budapest/H; S.E. Quiñones-Cisneros, Universidad Nacional Autónoma de México, México D.F./MEX Richard Mollier zum 150. Geburtstag – Leben und Werk 17:05 59 A. Dittmann, TU Dresden 17:30-**POSTERPARTY** 20:00

Seite

Mittwoch, 24. September 2014

Hörsaal 57.04

	ANALYTISCHE MODELLE	
09:00	Vorhersage des Protein-Verteilungsverhaltens in wässrigen Zweiphasensystemen mithilfe osmotischer Virialkoeffizienten <u>C. Kreß</u> , C. Brandenbusch, G. Sadowski, TU Dortmund	60
09:25	Vergleich zwischen Gruppenbeitragsmethoden homo- und heterogener Segmente basierend auf der PCP-SAFT Zustandsgleichung E. Sauer, M. Stavrou, J. Groß, Universität Stuttgart	61
09:50	Berechnung des Schmelzverhaltens von verzweigten, semi-kristallinen Polymeren M. Fischlschweiger, S. Enders, TU Berlin	62
10:15	Untersuchung der Überlagerung von Flüssig-Flüssig und Fest-Flüssig Phasengleichgewichten linearer und verzweigter Moleküle T. Goetsch, TU Dortmund; P. Zimmermann, S. Enders, TU Berlin; T. Zeiner, TU Dortmund	63
10:40	Kaffeepause	
Raum:	Hörsaal 57.04	
	PLENARSITZUNG	
11:10	In situ Ramanspektroskopie für die Thermodynamik: Von der Phasengleichgewichtsbestimmung zur Sprayuntersuchung A. Bräuer, Universität Erlangen-Nürnberg	69
11:55	Reaktionsgleichgewichte biologisch relevanter Reaktionen C. Held, TU Dortmund	70
12:40	Abschluss und Preisverleihungen für den besten Vortrag und das beste Poster	
13:00	Ende des Thermodynamik-Kolloquiums 2014	

		Seite
1	Temperature dependence of adsorption of PEGylated lysozyme and pure PEG on a hydrophobic resin E. Hackemann, A. Werner, H. Hasse, TU Kaiserslautern	73
2	Thermodynamische Grundlagen der Produktion von Biopolymeren aus Ölsäure A. Fröscher, H. Hasse, TU Kaiserslautern	74
3	Thermodynamik der ATP-Hydrolyse in der Glykolyse <u>F. Meurer</u> , C. Held, G. Sadowski, TU Dortmund	75
4	Thermophysical properties of 1-butanol at high pressures and temperatures B. Ahmadov, Azerbaijan Technical University, Baku/AZ; J. Safarov, Universität Rostock; S. Mirzayev, A. Shahverdiyev, Azerbaijan Technical University, Baku/AZ; E. Hassel, Universität Rostock	76
5	Density of North Atlantic seawater at high pressures and temperatures A. Mirzaliyev, Azerbaijan Technical University, Baku/AZ; J. Safarov, Universität Rostock; A. Shahverdiyev, Azerbaijan Technical University, Baku/AZ; E. Hassel, Universität Rostock	77
6	Der neue IAPWS-Industriestandard für die Berechnung der thermodynamischen Eigenschaften von Meerwasser HJ. Kretzschmar, S. Herrmann, Hochschule Zittau/Görlitz; R. Feistel, Leibniz Institut für Ostseeforschung, Warnemünde; W. Wagner, Ruhr-Universität Bochum	78
7	The relation between fluid adsorption in mesopores and properties of liquid foam films explored by dynamic DFT computer simulation H. Morgner, Universität Leipzig	79
8	Bestimmung des Brennwerts von Methan mit dem optimierten GERG-Kalorimeter N. Kurzeja, R. Span, Ruhr-Universität Bochum	80
9	(p, ρ, T, x) Messungen von verflüssigten Erdgasen (LNG) mithilfe einer neuen Ein-Senkkörper Dichtemessanlage R. Lentner, M. Richter, R. Kleinrahm, R. Span, Ruhr-Universität Bochum	81
10	Thermodynamische Grenzen der Produktzusammensetzungen von Gegenstromextraktionskolonnen M. Kaul, J. Burger, H. Hasse, TU Kaiserslautern	83
11	Regelleistungsverschleißmodell für primär- und sekundärgeregelte thermische Kraftwerke im ENTSO-E-Netz A. Berndt, H. Weber, <u>M. Richter</u> , J. Nocke, E. Hassel, Universität Rostock	84
12	Bestimmung der thermischen und mechanischen periodischen Beanspruchungen hochbelasteter Bauteile thermischer Kraftwerke <u>C. Gierow</u> , J. Nocke, E. Hassel, Universität Rostock	85
13	Modeling the condensation of water and sulfuric acid in low-temperature EGR-coolers M. Reißig, FVTR GmbH, Rostock; A. Hoppe, Universität Rostock; B. Buchholz, EVTR GmbH, Bostock, E. Hossel, Universität Poetock	86

		Seite
14	Vorausberechnung der Oberflächeneigenschaften binärer und ternärer schwefelhaltiger Mischungen	87
	C. Bühl, A. Danzer, G.O. Nino-Amezquita, S. Enders, TU Berlin	
15	Lösemittel-Adsorptions-Studien an modifizierten Aktivkohlen <u>B. Curdts</u> , M. Helmich, C. Pasel, D. Bathen, B. Atakan, C. Pflitsch, Universität Duisburg-Essen	88
16	Untersuchung thermographischer Phosphore zur Verwendung als Temperaturverlaufsensoren D. Stenders, C. Pflitsch, B. Atakan, Universität Duisburg-Essen	89
17	CVD-Abscheidung und Analyse thermisch isolierender ZiO ₂ -Schichten auf Spritzgießwerkzeugen <u>V. Khlopyanova</u> , Universität Duisburg-Essen; S. Mausberg, F. Mumme, Kunststoff-Institut Lüdenscheid; B. Atakan, Universität Duisburg-Essen	90
18	Berechnung von Grenzflächeneigenschaften von Reinstoffen und Mischungen an Dampf-Flüssig- und Flüssig-Flüssig-Grenzflächen mittels DFT C. Klink, J. Groß, Universität Stuttgart	91
19	Eine Gruppenbeitragsmethode zur Berechnung der Transportgrößen von Reinstoffen und Mischungen mittels PCP-SAFT und Entropie-Skalierung O. Lötgering-Lin, M. Hopp, J. Groß, Universität Stuttgart	92
20	Monte-Carlo-Simulation von Zustandsdaten für Argon mittels hochgenauem <i>ab initio-</i> Paarpotential und nichtadditivem Dreikörperpotential P. Jennerjahn, JP. Crusius, E. Hassel, Universität Rostock	93
21	Vorhersage von Löslichkeiten in strukturisomeren Lösungsmitteln mit Hilfe der LCT-EOS <u>C. Walowski</u> , S. Enders, TU Berlin	94
22	Molekulare Modellentwicklung zur Vorhersage thermophysikalischer Eigenschaften durch Kombination effizienter globaler und lokaler Verfahren M. Hülsmann, A. Krämer, Hochschule Bonn-Rhein-Sieg, Sankt Augustin; T. Köddermann, Fhl für Algorithmen und Wiss. Rechnen (SCAI), Sankt Augustin; D. Reith, Hochschule Bonn-Rhein-Sieg, Sankt Augustin	95
23	Modellierung der Co-Nichtlöslichkeit thermoresponsiver Oligomere in Mischungen aus Wasser und organischen Lösungsmitteln mit COSMO-RS K. Leonhard, A. Schwarz, RWTH Aachen	96
24	Reduktion des experimentellen Aufwandes zur Beschreibung von Hochdruck-VLE mittels semi-prädiktiver PCP-SAFT B. Liebergesell, S. Kaminski, C. Pauls, K. Leonhard, RWTH Aachen; T.W. de Loos, T.J.H. Vlugt, TU Delft/NL; A. Bardow, RWTH Aachen	97

		Seite
25	Entwicklung einer Fundamentalgleichung in Form der Helmholtz-Energie für schweres Wasser S. Herrig, R. Span, Ruhr-Universität Bochum; A.H. Harvey, E.W. Lemmon, NIST, Boulder, CO/USA	98
26	Characterization of aklylsilane self assembling monolayers by molecular simulation J. Castillo Sanchez, University of Kaiserslautern; M. Klos, University of Saarland, Saarbrücken; M. Horsch, University of Kaiserslautern; K. Jacobs, University of Saarland, Saarbrücken; H. Hasse, University of Kaiserslautern	99
27	Parametrization of two-center Lennard-Jones plus pointquadrupole force field models by multicriteria optimization K. Stöbener , Fraunhofer ITWM, Kaiserslautern; S. Werth, M. Horsch, TU Kaiserslautern; K.H. Küfer, Fraunhofer ITWM, Kaiserslautern; H. Hasse, TU Kaiserslautern	100
28	<i>ms</i> 2 : open source code for molecular simulation of thermodynamic properties of fluids <u>M. Schappals</u> , S. Deublein, TU Kaiserslautern; E. Elts, TU München; C.W. Glass, Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart; G. Guevara Carrión, Universität Paderborn; S. Reiser, TU Kaiserslautern; HJ. Bungartz, TU München; M. Horsch, TU Kaiserslautern; J. Vrabec, Universität Paderborn; H. Hasse, TU Kaiserslautern	101
29	Berechnung der Oberflächenspannung mittels molekularer Simulation: Vorhersage und Optimierung S. Werth, TU Kaiserslautern; K. Stöbener, Fraunhofer Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik, Kaiserslautern; M. Horsch, H. Hasse, TU Kaiserslautern	102
30	Molecular model for nitrous oxide and its application in the CO ₂ -N ₂ O-analogy M. Kohns, M. Horsch, H. Hasse, TU Kaiserslautern	103
31	Bewertung einer neuen Störungstheorie für Elektrolytlösungen durch Vergleich mit Molekularsimulationen F. Drunsel, J. Groß, Universität Stuttgart	104
32	Different ways of looking at the effective interaction between nano particles A. Lange, G. Bauer, F. Danecker, J. Groß, Universität Stuttgart	105
33	Vorausberechnung der Adsorptionsisothermen binärer Aldehyd-Gemische mit Dichtefunktionaltheorie und Peng-Robinson-Zustandsgleichung P. Zimmermann, TU Berlin; T. Goetzsch, T. Zeiner, TU Dortmund; S. Enders, TU Berlin	106
34	Molekulardynamische Simulationen von Cyclodextrin-Komplexen S. Jakobtorweihen, I. Smirnova, TU Hamburg-Harburg	107
35	Molekulardynamische Simulationen zum Gemischbildungsvorgang von Wasserstoff und Sauerstoff in Brennkammern S. Eckelsbach, J. Vrabec, Universität Paderborn; M. Pfitzner, Universität der Bundeswehr München	108

		Seite
36	Experimentelle Untersuchungen zum Einsatz von Isobutan in einer Wasser/Wasser Wärmepumpe V. Venzik, U. Bergmann, B. Atakan, Universität Duisburg-Essen	109
37	Simulation und exergetische Bewertung eines mit einem thermischen Speicher gekoppelten Organic Rankine Cycles A. König-Haagen, D. Brüggemann, Universität Bayreuth	110
38	Thermodynamische Analysen von chemischen Wärmepumpen K. Müller, J. Obermeier, K. Krieger, W. Arlt, Universität Erlangen-Nürnberg	11:
39	Untersuchung von Dimethylether als Zündbeschleuniger für Methan-Luft Gemische in einer schnellen Kompressionsmaschine M. Werler, T. Indlekofer, A. Zor, R. Ruiz, H. Wirbser, R. Schiessl, U. Maas, Karlsruher Institut für Technologie	112
40	Direkte partielle Oxidation von Methan bei höherem Druck und die Auswirkung von Propen und Ethan als Additiv: Experiment und Simulation F. Sen, U. Bergmann, T. Kasper, B. Atakan, Universität Duisburg-Essen	113
41	Gemischbildungsanalyse bei alternativen Dieselkraftstoffen mit Hilfe der Laser-induzierten Exciplex-Fluoreszenz W. Mühlbauer, S. Lehmann, S. Lorenz, D. Brüggemann, Universität Bayreuth	11/
42	Untersuchungen zum Einfluss von Motorbetriebsparametern auf die Größe, Struktur und Reaktivität von Dieselpartikeln C. Zöllner, W. Mühlbauer, S. Lehmann, D. Brüggemann, Universität Bayreuth	115
43	Ganzheitliches Bewertungsmodell für die Stromerzeugung aus industrieller Abwärme mittels Organic Rankine Cycle M. Preißinger, D. Brüggemann, Universität Bayreuth	116
44	Simulation eines abgasbeheizten Rankine-Cycles in mobiler Anwendung J. Wiedemann, R. Span, Ruhr-Universität Bochum	117
45	Data gaps in thermophysical fluid data for geothermal applications H. Milsch, U. Hoffert, Deutsches GeoForschungsZentrum GFZ, Potsdam; H. Hofmann, University of Alberta, Edmonton/CDN	118
46	The partial molal volume of the calcium sulphate ion pair <u>U. Hoffert,</u> Helmholtz-Zentrum Potsdam Deutsches GeoForschungsZentrum GFZ; W. Voigt, TU Bergakademie Freiberg	119
47	Reaktivextraktion von Dicarbonsäuren aus wässrigem Medium J. Gorden, C. Brandenbusch, T. Zeiner, G. Sadowski, TU Dortmund	120
48	Modeling release kinetics of pharmaceutical drugs from polymeric formulations using a non-equilibrium thermodynamic model Y.H. Ji, A. Prudic, R. Paus, A.K. Lesniak, G. Sadowski, TU Dortmund	122

•		Seite
49	Thermodynamische Eigenschaften wässriger Zwei-Phasen Systeme basierend auf Polymeren mit unterschiedlicher Architektur <u>A. Kulaguin Chicaroux</u> , T. Zeiner, TU Dortmund	123
50	Anwendung der PC-SAFT EOS für Mischungen aus ionischer Flüssigkeit und einem kurzkettigen Alkohol H. Rudolph, S. Enders, TU Berlin	124
51	Neue Apparatur zur gravimetrischen Bestimmung der Hydratisierung zweidimensionaler organischer Modelloberflächen <u>C. Norton</u> , Ruhr-Universität Bochum; F. Dreisbach, Rubotherm GmbH, Bochum; T. Fieback, Ruhr-Universität Bochum	125
52	Vorhersage des Einflusses von Elektrolyten auf Flüssig-Flüssig Phasengleichgewichte <u>T. Gerlach</u> , I. Smirnova, TU Hamburg-Harburg	126
53	Dissipation of turbulent fine structures in confined flows <u>V. Zhdanov</u> , N. Kornev, E. Hassel, Universität Rostock	127
54	Sorption von Lösungsmitteldämpfen in Formgedächtnis-Naturkautschuk N. Gushterov, G. Sadowski, TU Dortmund	128

Der neue IAPWS-Industriestandard für die Berechnung der thermodynamischen Eigenschaften von Meerwasser

<u>Hans-Joachim Kretzschmar</u>, Sebastian Herrmann, Hochschule Zittau/Görlitz, Zittau Rainer Feistel, Leibniz-Institut für Ostseeforschung Warnemünde, Rostock Wolfgang Wagner, Ruhr-Universität Bochum, Bochum

Genaue und schnell berechenbare thermodynamische Stoffdaten für Meerwasser werden in der Industrie für die Auslegung, den Betrieb und die Optimierung von Meerwasserentsalzungsanlagen und Kraftwerkskühlungen benötigt.

Die "International Association for the Properties of Water and Steam" (IAPWS) verabschiedete 2013 einen neuen internationalen Standard, "IAPWS Advisory Note No. 5: Industrial Calculation of the Thermodynamic Properties of Seawater", für die Berechnung der thermodynamischen Zustandsgrößen von Meerwasser für industrielle Anwendungen. Dieser neue Industriestandard basiert auf einer Fundamentalgleichung für die freie Enthalpie bestehend aus einem Anteil für reines Wasser und einem Salzanteil. Der Wasseranteil wird mit dem internationalen Industrie-Standard IAPWS-IF97 und der Salzanteil nach dem wissenschaftlichen Standard IAPWS-08 für Meerwasser berechnet.

Alle thermodynamischen Eigenschaften wie Dichte ρ , spezifische Enthalpie h, spezifische Entropie s, spezifische isobare Wärmekapazität c_p und Differential-quotienten sind mit dieser Fundamentalgleichung und deren Ableitungen als Funktion von Druck, Temperatur und Salzgehalt berechenbar.

Der neue Industriestandard ist im Temperaturbereich von 261 bis 353 K, im Druckbereich von 0.3 kPa bis 100 MPa und für Salzgehalte zwischen 0 (reines Wasser) und 120 g kg^{-1} gültig.

Die Unsicherheiten der Industrie-Formulation entsprechen im Wesentlichen denen der wissenschaftlichen Formulierung IAPWS-08 und sind für industrielle Anwendungen ausreichend. Die Anwendungsrechenzeiten der Industrie-Formulation sind im Vergleich zur wissenschaftlichen Formulation im Mittel um den Faktor 200 geringer.

Um die Anwendung der neuen Industrie-Formulation für Meerwasser zu erleichtern, wurde die Stoffwert-Bibliothek LibSeaWa erarbeitet. Sie ist in Excel, MATLAB, Mathcad, LabVIEW, Engineering Equation Solver, Dymola und SimulationX nutzbar.