

Dipl.-Ing. Jadran Vrabec, Bochum

Vorhersage thermo- dynamischer Stoffdaten durch molekulare Simulation

Reihe **3**: Verfahrenstechnik

Nr. **455**

Inhaltsverzeichnis

Häufig verwendete Formelzeichen	VII
1 Einleitung	1
2 Molekulardynamik	3
2.1 Lösung der Bewegungsgleichungen	9
2.1.1 Quaternionen	9
2.1.2 Isobar-isothermes Ensemble	11
2.1.3 Reaktionsfeldmethode	12
2.2 Berechnung thermodynamischer Größen	14
2.2.1 Dichten und Enthalpien	15
2.2.2 Druckableitung von Dichten und Enthalpien	16
2.2.2.1 Isotherme Kompressibilität	16
2.2.2.2 Die Ableitung der Enthalpie nach dem Druck	17
2.2.3 Chemische Potentiale	19
2.2.3.1 Teilcheneinsetzmethode	19
2.2.3.2 Austauschmethode	21
2.2.3.3 Statistische Adjustierung	22
2.2.4 Partielle molare Volumina	25
2.2.4.1 Teilcheneinsetzmethode	25
2.2.4.2 Austauschmethode	25
2.2.4.3 Vergleich der Ergebnisse	26
2.2.5 Statistische Ungenauigkeit	27
3 Reine Fluide	29
3.1 Die NpT+Testteilchenmethode für reine Fluide	29
3.2 Unpolare und quadrupolare reine Fluide	32
3.2.1 Argon	33
3.2.2 Krypton	34
3.2.3 Xenon	35
3.2.4 Methan	37
3.2.5 Ethan	38
3.2.6 Kohlendioxid	39
3.3 Dipolare reine Fluide	42
3.3.1 Test der Hybrid-Zustandsgleichung	42
3.3.2 Festlegung eines Potentialmodells für R152a	47

4 Binäre Gemische	52
4.1 Die NpT+Testteilchenmethode für binäre Gemische	52
4.2 Phasengleichgewichte binärer Lennard-Jones-Gemische	58
4.3 Modellierung realer binärer Gemische	77
4.4 Phasengleichgewichte realer binärer Gemische	82
4.4.1 Argon+Methan	82
4.4.2 Methan+Ethan	86
4.4.3 Methan+Kohlendioxid	89
4.4.4 Kohlendioxid+Ethan	92
4.5 Das Gemisch Kohlendioxid+Ethan in der homogenen Phase	95
5 Ternäre Gemische	101
5.1 Die NpT+Testteilchenmethode für ternäre Gemische	101
5.2 Phasengleichgewichte des ternären Gemischs Methan+Ethan+Kohlendioxid	103
6 Zusammenfassung	109
7 Literaturverzeichnis	111