

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Thermodynamische Grundlagen	5
2.1	Einführung in die statistische Thermodynamik	7
2.1.1	Definition der Zustandssumme im NVT -Ensemble	7
2.1.2	Bestimmung des freien Volumens	10
2.2	Van-der-Waals-EOS und Modifikationen	13
2.3	Zustandsgleichungen basierend auf der Störungstheorie abgeleitet aus Hartkugelmodellen	16
2.3.1	Perturbed Hard-Chain Theory	16
2.3.2	Statistical Associating Fluid Theory	19
2.4	Das Gitterbild der Flüssigkeit	22
2.4.1	Vorstellung der Gitterparameter	24
2.4.2	Gitterbasierte Zustandssumme	26
2.4.3	Freie-Volumen-Theorien im Gitter	32
2.4.4	Gitterzustandsgleichungen	35
3	Modifikation kubischer Zustandsgleichungen mit prädiktiver G^E-Mischungsregel	39
3.1	Bestimmung der Parameter einer kubischen EOS aus G^E -Mischungsregeln	39
3.1.1	Mischungsregel nach Huron und Vidal	41
3.1.2	Mischungsregel nach Wong und Sandler	43
3.1.3	Die Wahl des G^E -Modells	45
3.2	Anwendung von G^E -Mischungsregeln für nichtideale Mischungen	47
4	Integration von Hartkugelmodellen in Gitterzustandsgleichungen	53
4.1	Optionsbaum zur Bestimmung von Q_R eines Gitterfluids	54
4.2	HS-Lattice-EOS	63
4.2.1	HS-Lattice-1-EOS	64
4.2.2	HS-Lattice-2-EOS und HS-Lattice-3-EOS	67

4.3	Non-Random-Teil der HS-Lattice-EOS	72
4.4	Grenzverhalten der HS-Lattice-EOS	77
5	Anwendung der Zustandsgleichung auf reale Komponenten	81
5.1	Vergleichsbasis für die HS-Lattice-EOS-Ansätze	82
5.1.1	Definition der Referenz-Gitterzustandsgleichung	82
5.1.2	PC-SAFT-EOS	93
5.2	Anwendung der HS-Lattice-EOS-Ansätze	96
5.3	Auswertung von Verdampfungsenthalpien und zweiten Virial-Koeffizienten mit den HS-Lattice-EOS-Ansätzen	104
5.4	Bestimmung des Wechselwirkungsenergieparameters der HS-Lattice-EOS aus MOQUAC	108
6	Zusammenfassung	113
7	Anhang	117
7.1	Zusatzmaterial zu Kapitel 2	117
7.1.1	Bestimmung der Parameter der Van-der-Waals-EOS	117
7.1.2	Vorstellung von Veytsman-Statistics	118
7.1.3	Kurze Einführung in die Berechnung von Phasengleichgewichten mit dem Programm „EOS.for“	120
7.2	Zusatzmaterial zu Kapitel 3	125
7.2.1	Mischungsregel nach Huron und Vidal	125
7.2.2	Mischungsregel nach Wong und Sandler	127
7.3	Zusatzmaterial zu Kapitel 4	130
7.3.1	Zwischenschritte zur Herleitung von HS-Lattice-1-EOS	130
7.3.2	Zwischenschritte zur Herleitung von HS-Lattice-2-EOS	132
7.3.3	Vergleich der Isothermen der HS-Lattice-EOS-Ansätze	135
7.4	Zusatzmaterial zu Kapitel 5	137
7.4.1	Sensitivitätsanalyse der Lattice-EOS-Parameter	137
7.4.2	Anwendung der HS-Lattice-EOS-Ansätze	154
7.4.3	Anwendung der PC-SAFT-EOS	159
	Verzeichnis der Formelzeichen	167
	Abbildungsverzeichnis	171
	Tabellenverzeichnis	177
	Literaturverzeichnis	179