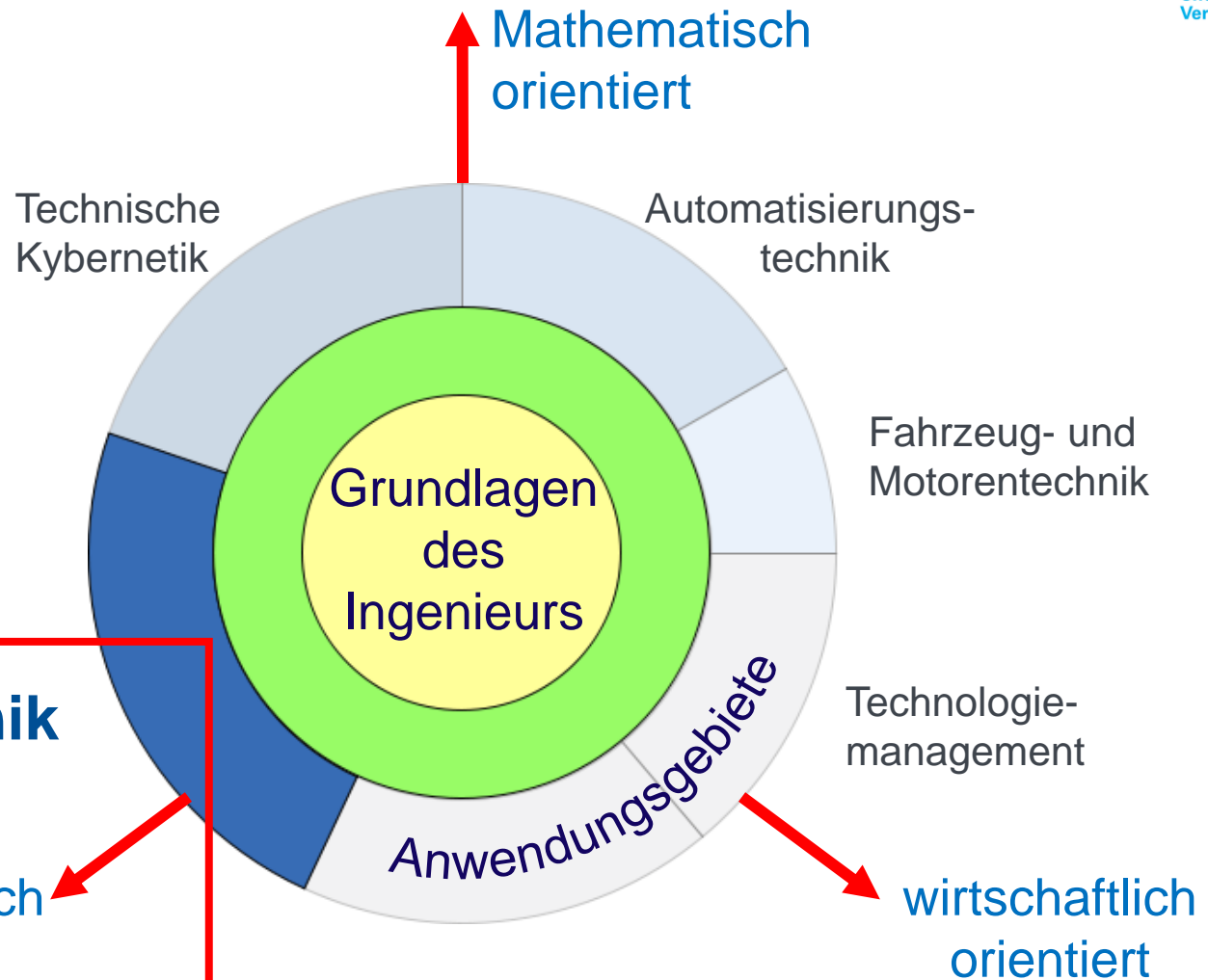


Universität Stuttgart
Institut für Chemische Verfahrenstechnik



Chemische Verfahrenstechnik

Prof. U. Nicken



Chemische Verfahrenstechnik

- **Historische Entwicklung**
- **Arbeitsfelder**
- **Ausbildungsinhalte**
- **Vorlesungsangebot**

Entwicklung der Chemische Verfahrenstechnik

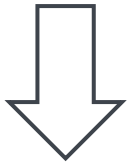
- Stoffumwandlung durch chemische Reaktion
- Bindeglied zwischen Verfahrenstechnik und Chemie
 - Scale-up von Labor zu Produktionsmaßstab



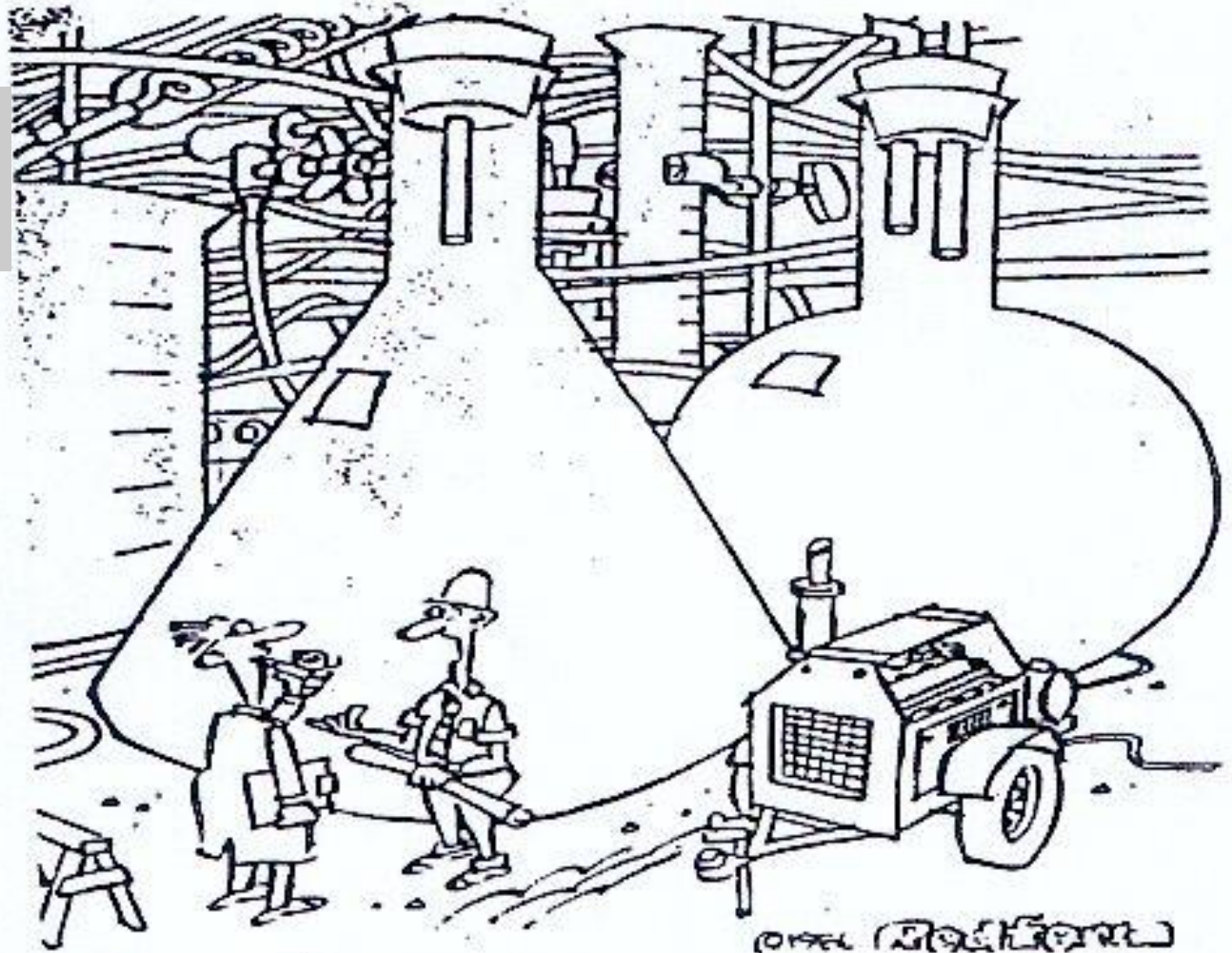
Foto: BASF

Chemische Reaktionstechnik

Chemie:
Ausarbeitung Synthese
abgeschlossen

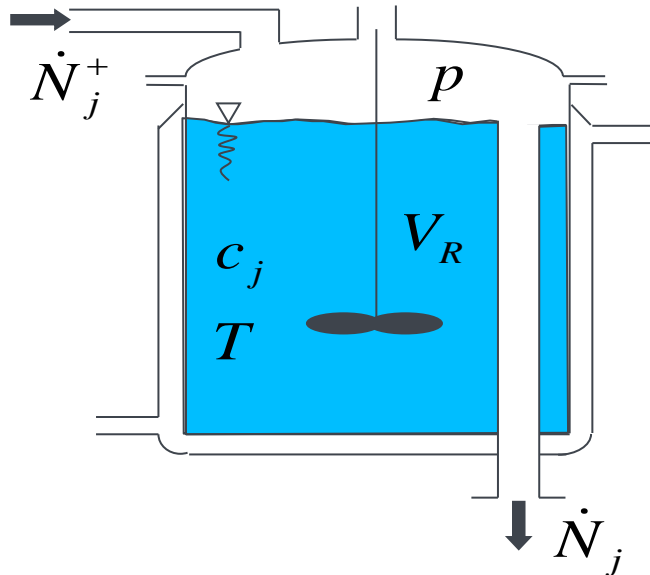


Verfahrenstechnik:
Produktion größerer
Mengen



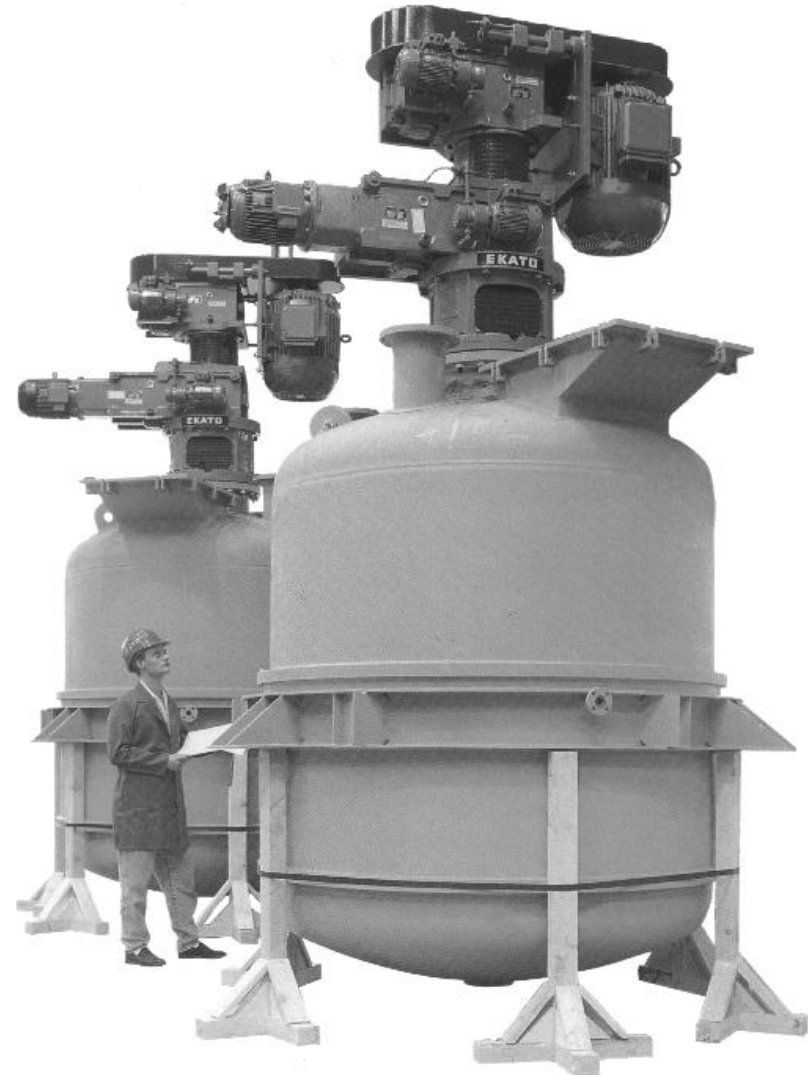
*"Got a few problems going from lab
scale up to full-scale commercial."*

Rührkesselreaktor

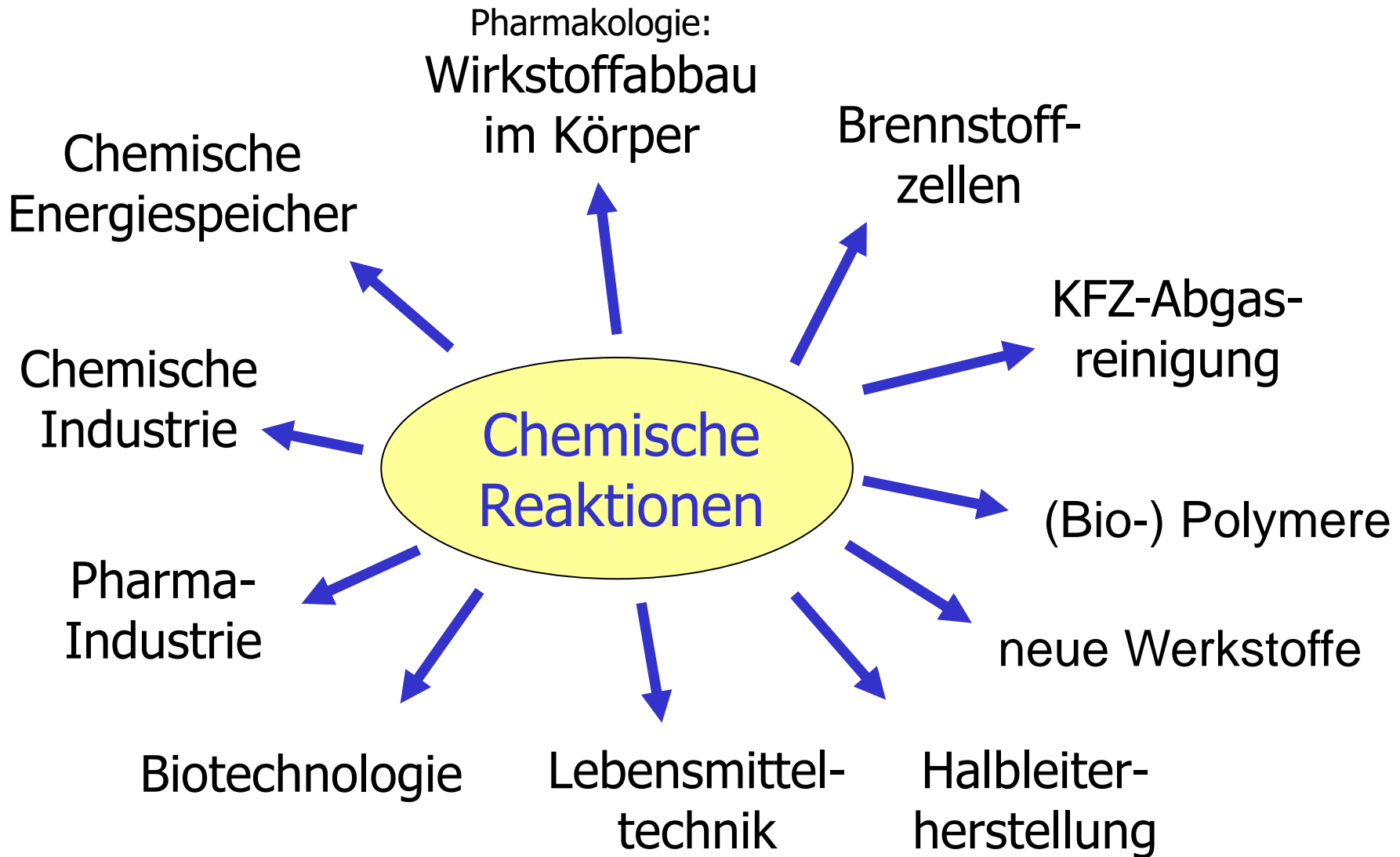


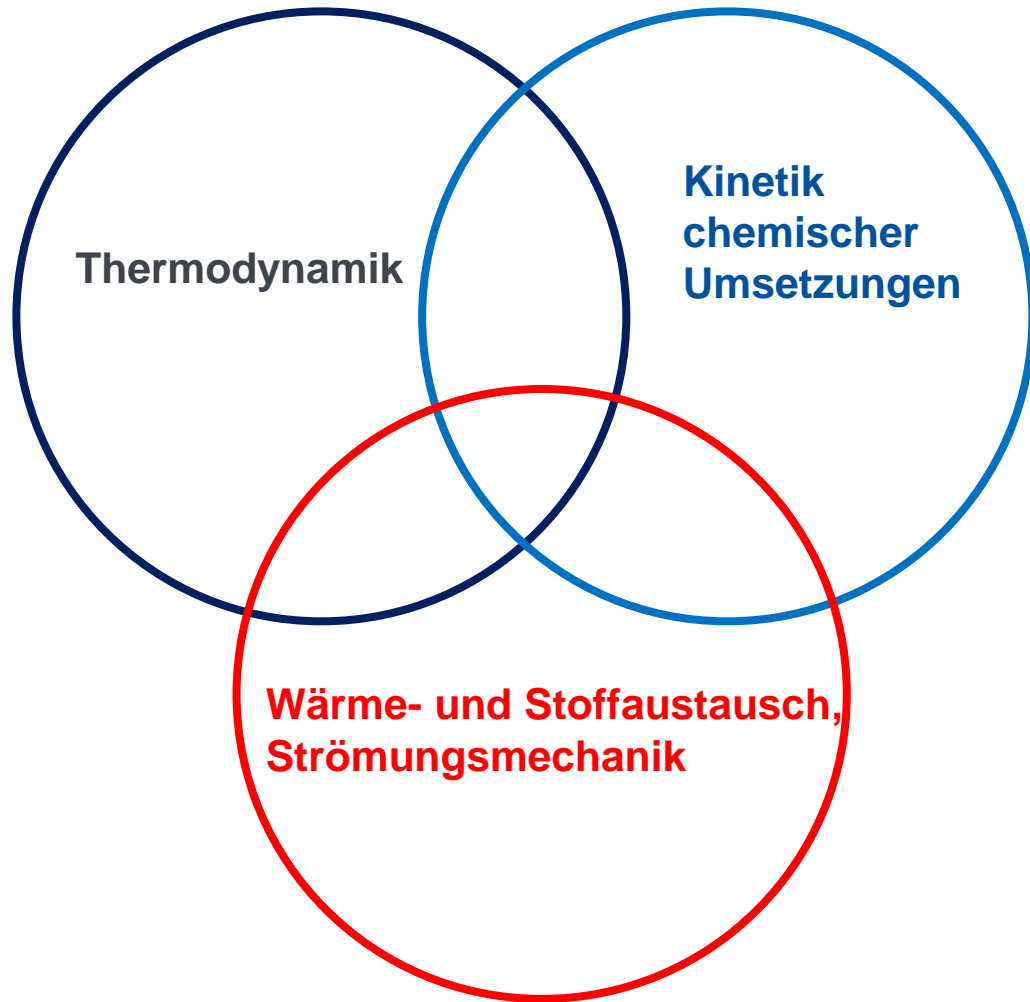
Aufgabe des Ingenieurs:

- Apparatebau
- Vermischung
- Wärmeabfuhr



Arbeitsfelder





**Modellierung von
chemischen Herstellprozessen**

**➔ Prozessmodell
(Makroskala)**

**➔ Detailliertes Modell
(Mikroskala)**

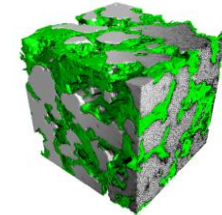
- **Reaktionstechnik**

Prof. Dr.-Ing. Ulrich Nicken



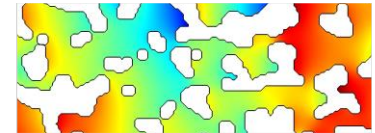
- **Virtuelles Materialdesign**

Prof. Dr.-Ing. Ulrich Nicken



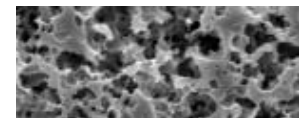
- **Upscaling: von der Mikro- zur Makroskala**

Prof. Dr.-Ing. Ulrich Nicken



- **Polymer- u. Membrantechnik**

Dr. Vladimir Atanasov



Beispiel Reaktionstechnik

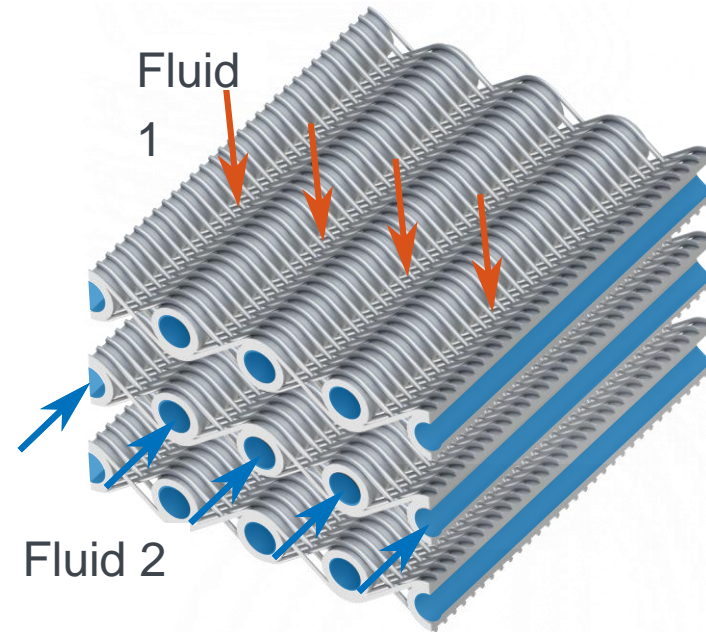
Thermogewebe

- M.Sc. Christian Walter
(Doktorand)

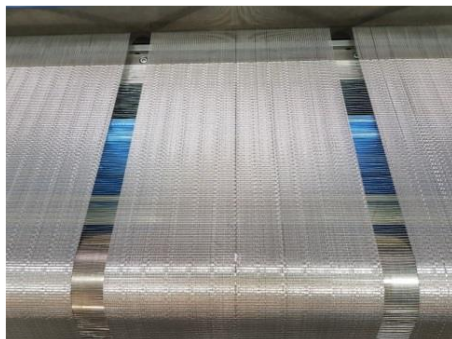


Thermogewebe

- Kapillarrohre (Schussdrähte)
(Innendurchmesser < 2mm)
- Drahtstruktur (Kettdrähte)
(Durchmesser 50 – 200 μm)



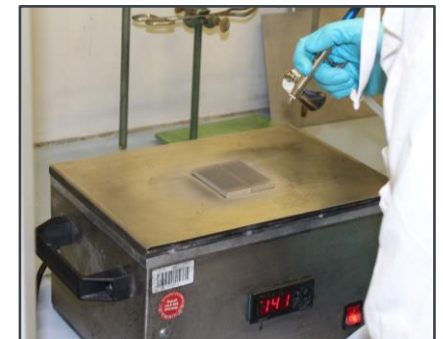
Industrielle Fertigung



Einbau in Rahmen



Katalytische Beschichtung



CFD Simulationen

Durchführung von Simulationen mit zufallsbasierten Geometrien zur Berechnung von Druckverlust (Euler-Zahl), Wärmeübergang (Nusselt-Zahl) und Temperaturverlauf entlang des Drahtes (ΔT_y)

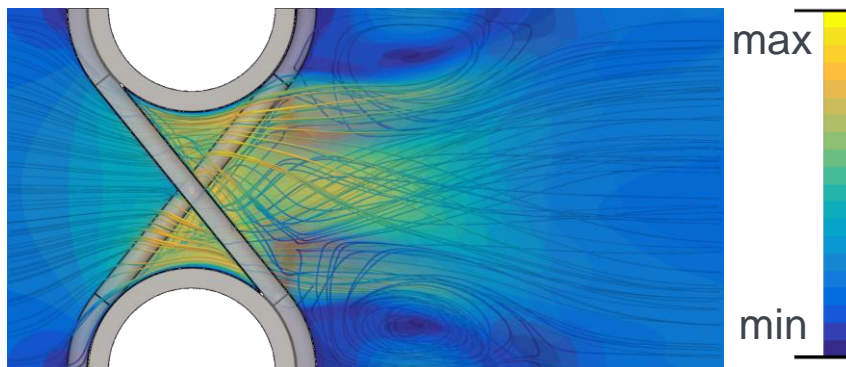


$$Eu \frac{\varepsilon_g d_2}{\varphi} (2D_{12} + 1) F^{2.8} = 14.8 Re_g^{-1} + 1.17 Re_g^{-0.2} \varepsilon_g^{-0.8}$$

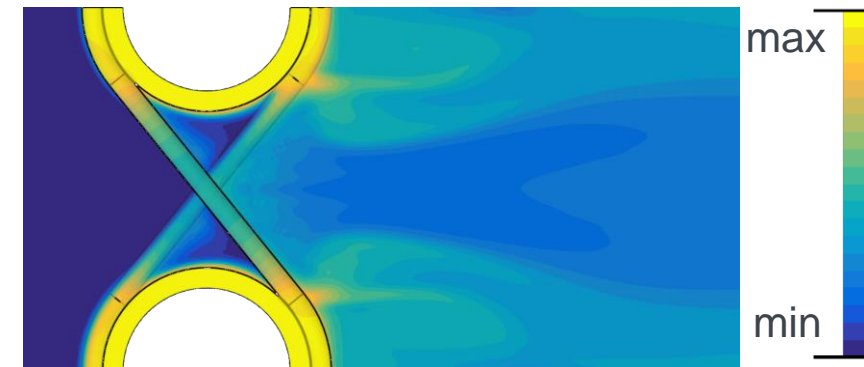
$$Nu = (\phi d_2)^{0,51} \varepsilon^{1,53} Re^{0,41}$$

$$\Delta T_y = (T_{g,in} - T_c) \left(1 - \frac{1}{\cosh(ml_w)} \right) \quad m = \sqrt{\frac{4 h_{g,s}}{\lambda_w d_1}}$$

Geschwindigkeitsfeld

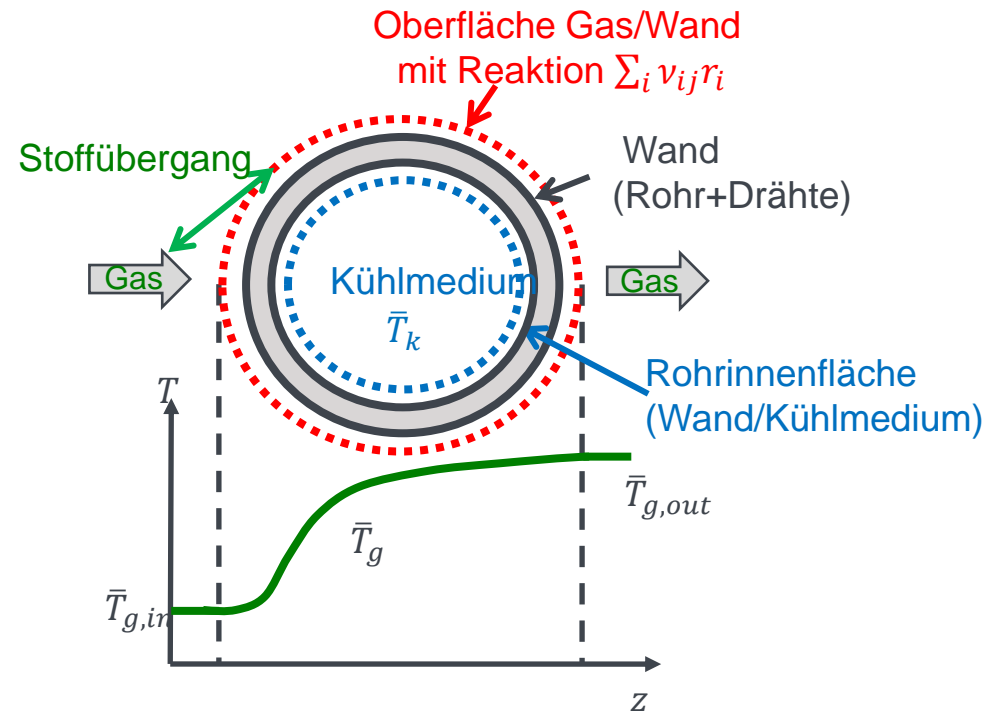
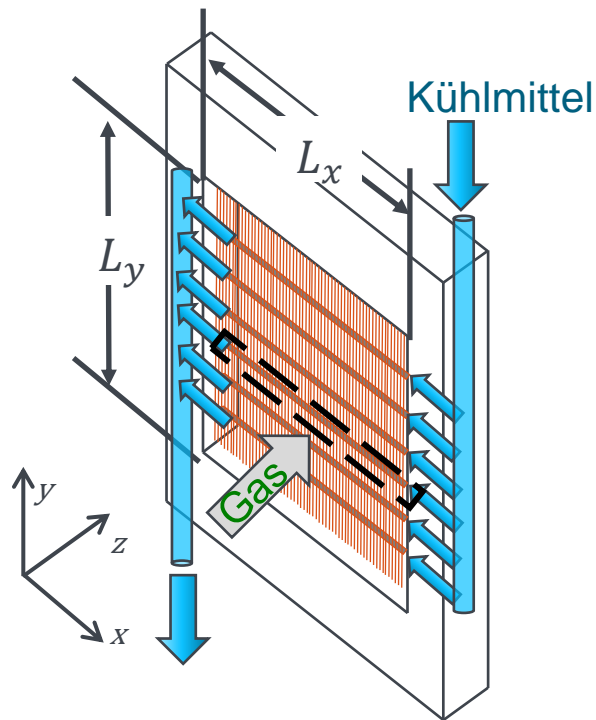


Temperaturfeld



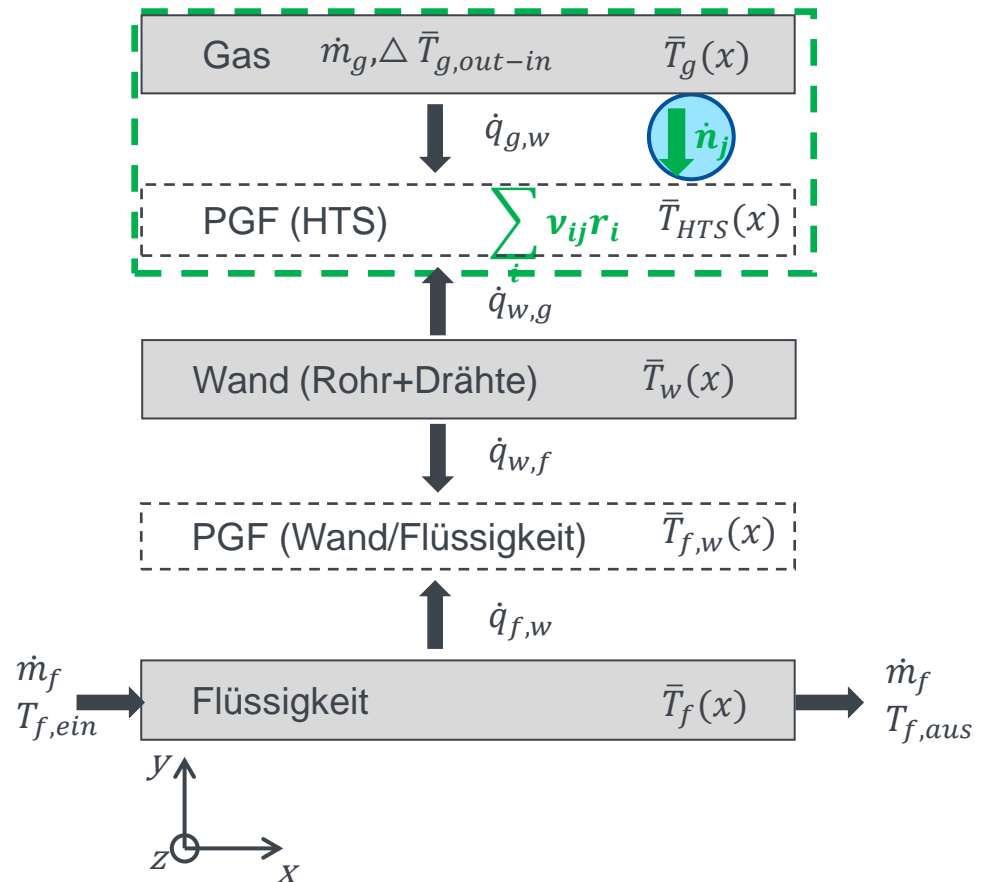
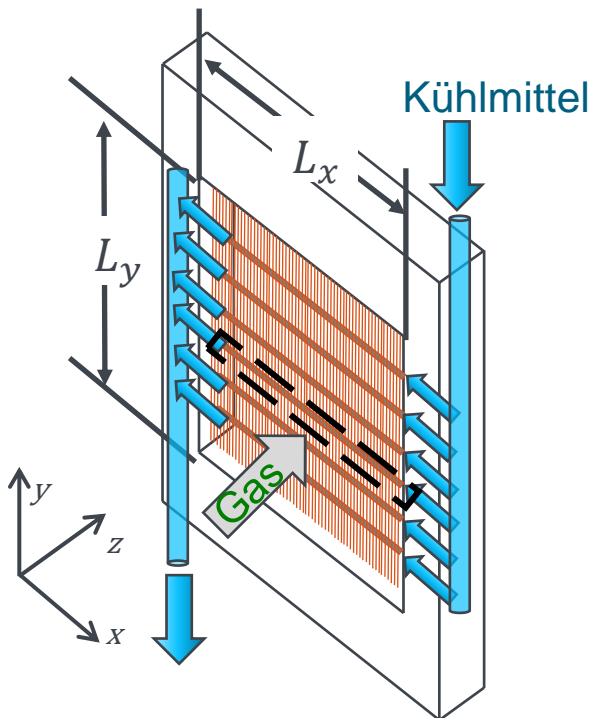
Modellentwicklung - Vereinfachung

Vereinfachung der Geometrie auf repräsentativen Ausschnitt und Berechnung der Reaktion und Wärmeübergänge auf einem Rohr



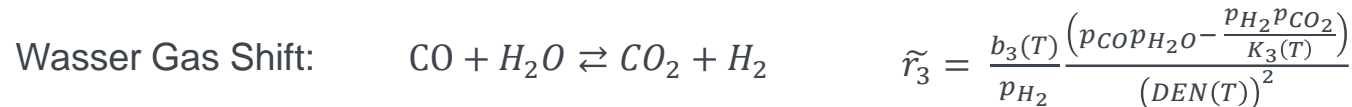
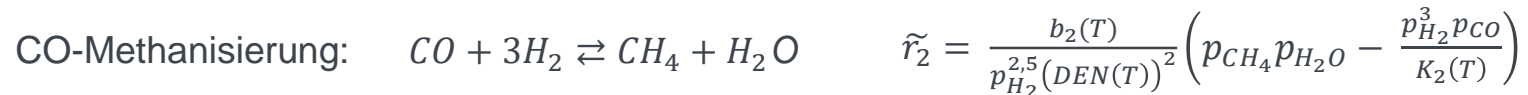
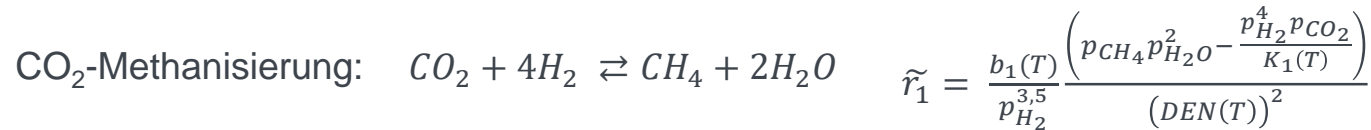
Modellentwicklung - Vereinfachung

Vereinfachung der Geometrie auf repräsentativen Ausschnitt und Berechnung der Reaktion und Wärmeübergänge auf einem Rohr

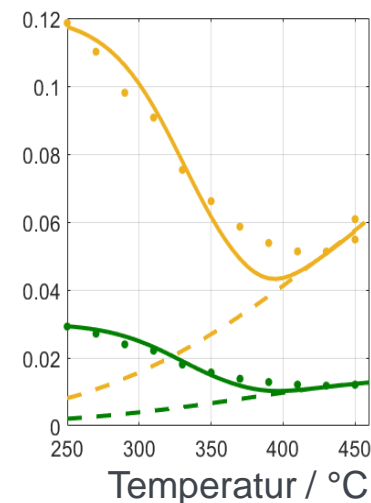
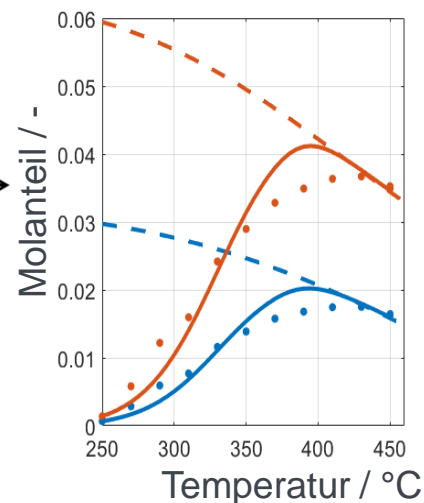
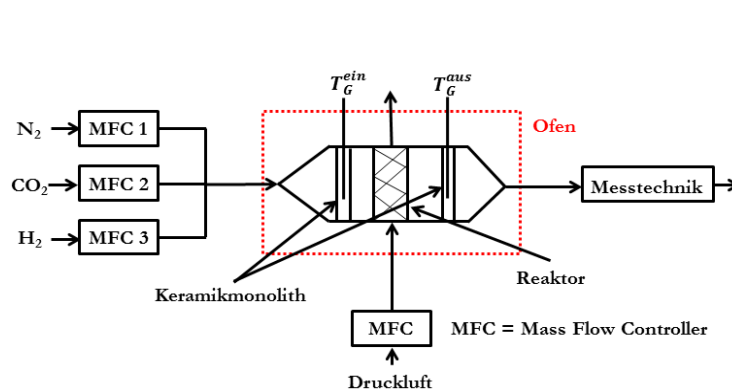


Modellentwicklung - Anpassung an Kinetik

Reaktionskinetik:

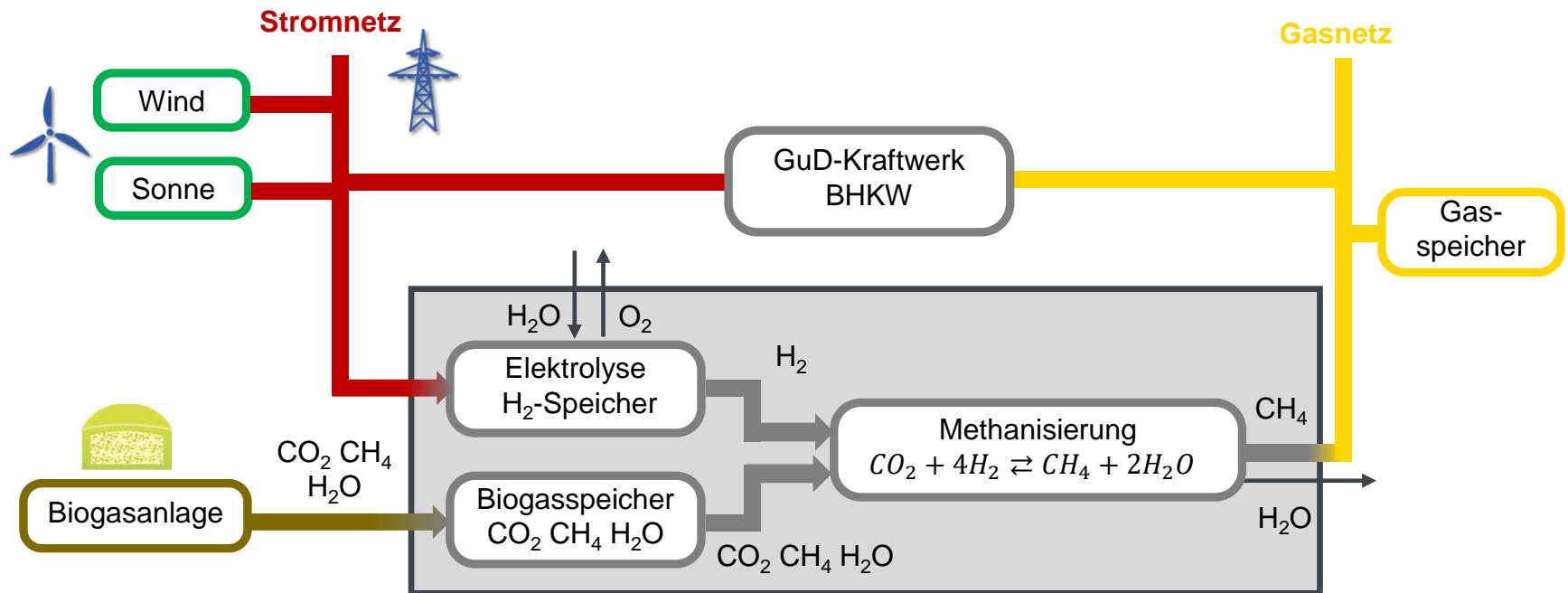
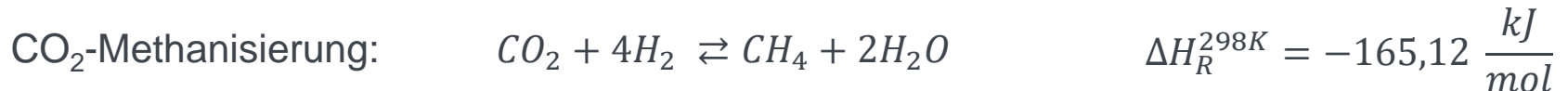


Anpassung an Experimente:



- CH₄
- H₂O
- H₂
- CO₂
- Experiment
- Simulation
- GGW

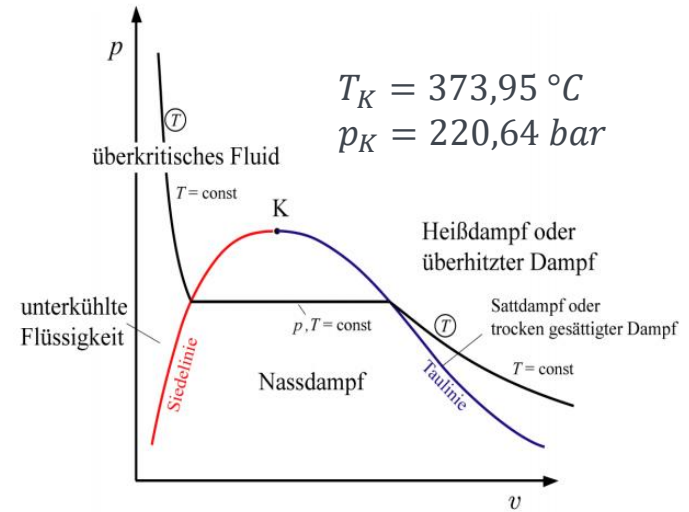
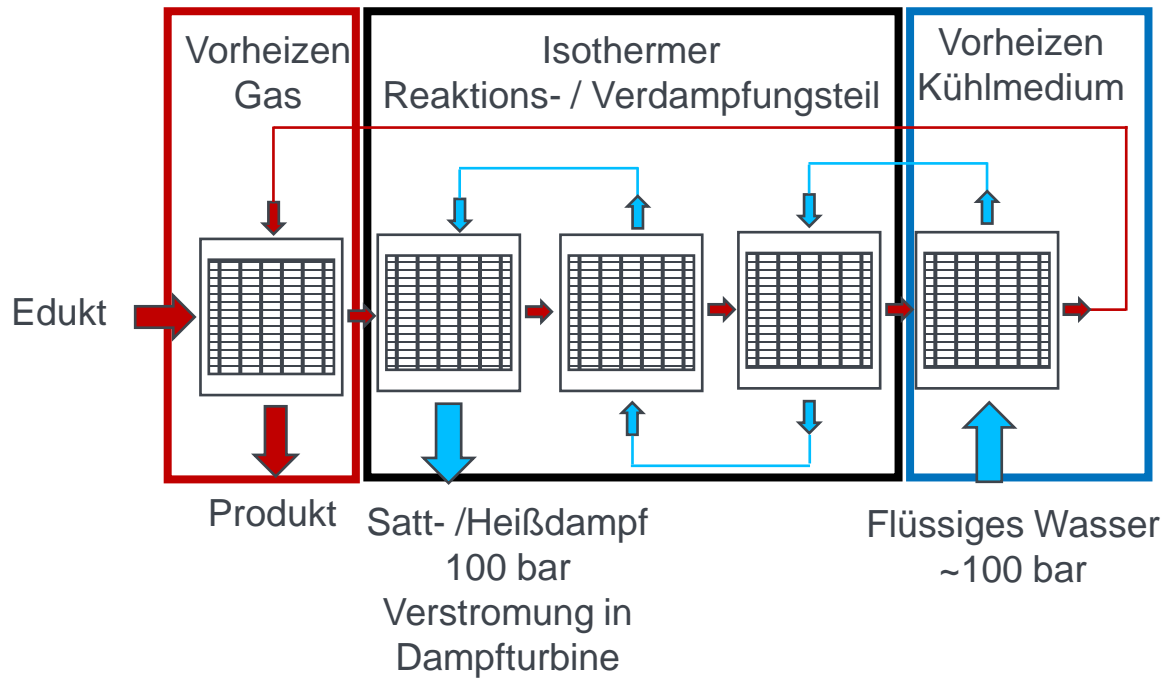
Anwendung: Power To Gas Verfahren



Wärmeintegriertes Reaktorkonzept

Reaktorkonzept **mit Verdampfung**

Nutzung der druckstabilen Rohre und Isothermie der Verdampfung

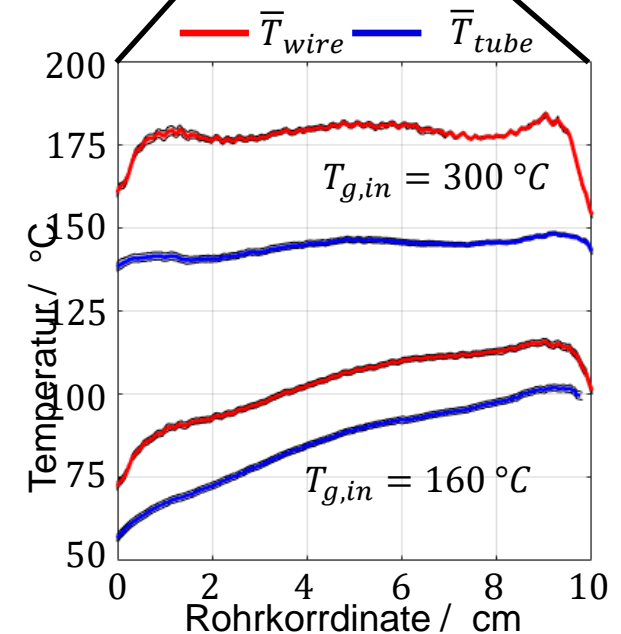
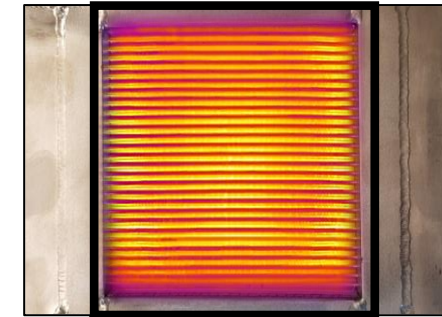
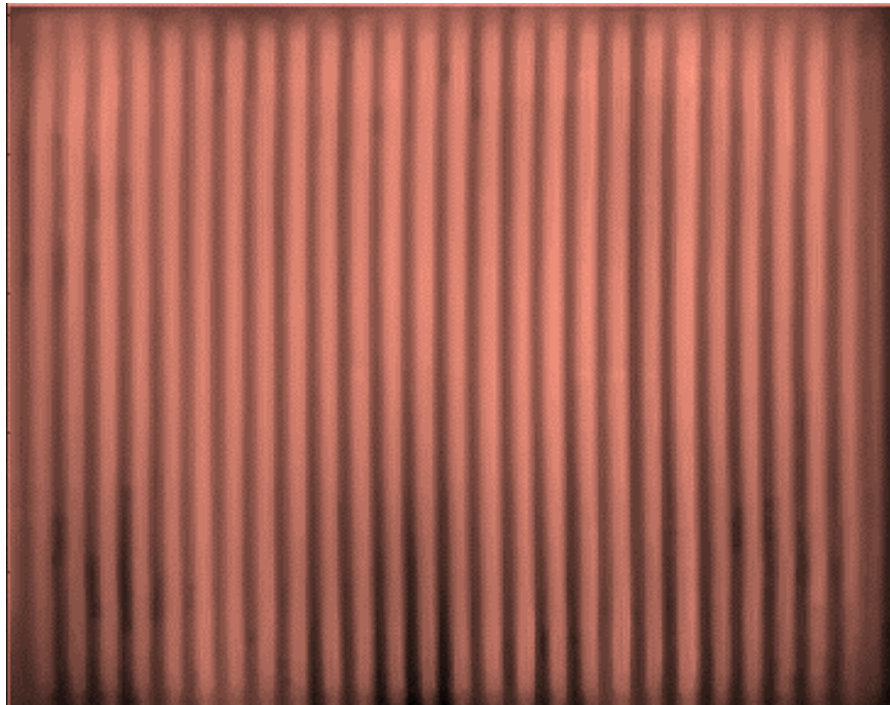


Wärmeintegriertes Reaktorkonzept

Reaktorkonzept mit Verdampfung

Nutzung der druckstabilen Rohre und Isothermie der Verdampfung

Verdampfungsfluktuationen in den Rohren führen zu Isothermie



Aufgabe des Ingenieurs:

- Verständnis für Zusammenwirken von chemischen Umsetzungen (CO , CO_2 , H_2 , CH_4) und Wärmeübertragung
- Vermessung der Geschwindigkeit von Reaktion und Speicherung
- Entwicklung eines **einfachen** mathematischen Modells

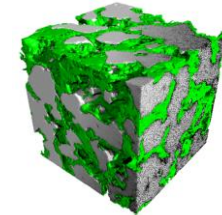
- **Reaktionstechnik**

Prof. Dr.-Ing. Ulrich Nieten



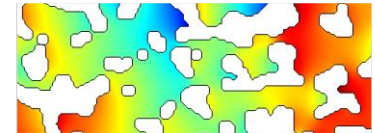
- **Virtuelles Materialdesign**

Prof. Dr.-Ing. Ulrich Nieten



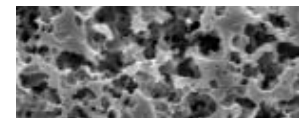
- **Upscaling: von der Mikro- zur Makroskala**

Prof. Dr.-Ing. Ulrich Nieten



- **Polymer- u. Membrantechnik**

Dr. Vladimir Atanasov



Beispiel Virtuelles Materialdesign

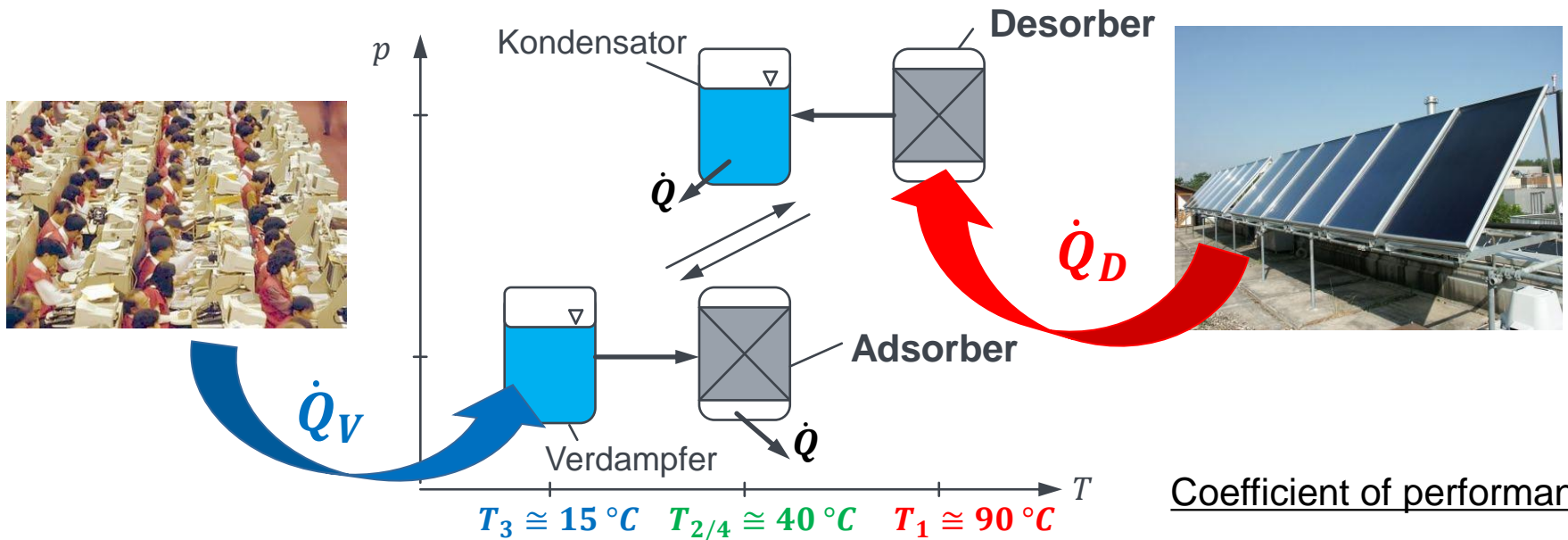
Solare Kühlung

- M.Sc. Marc Scherle
(Doktorand)



Virtuelles Materialdesign

- Beispiel: Solare Kühlung mittels Adsorptionsverfahren



Coefficient of performance

$$COP = \frac{\int_0^{t_{cycle}} \dot{Q}_V dt}{\int_0^{t_{cycle}} \dot{Q}_D dt}$$

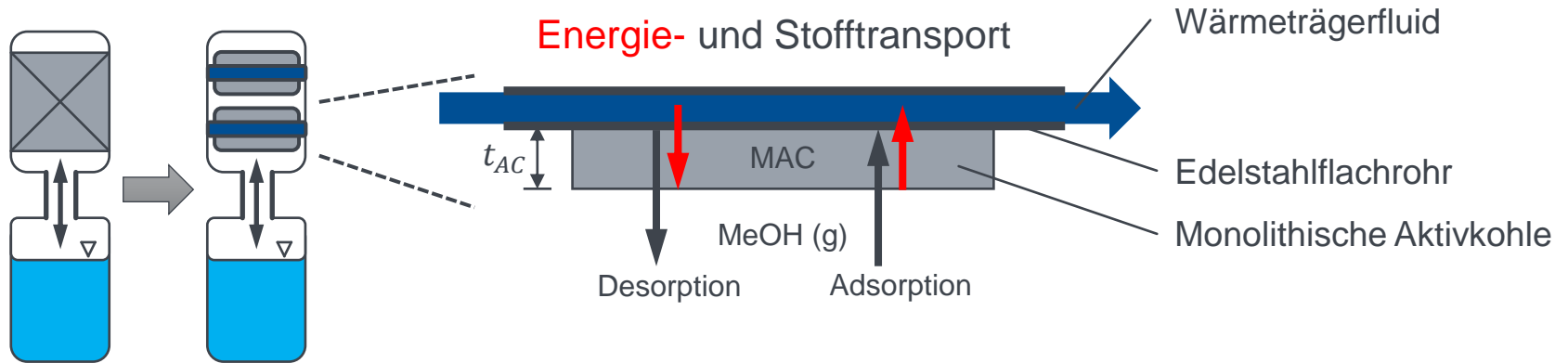
Specific cooling power

$$SCP = \frac{\int_0^{t_{cycle}} \dot{Q}_V dt}{t_{cycle} M_{Ads}}$$

- Prozesssimulation: Zyklische Betriebsweise
- Detaillierte Beschreibung des **Adsorptionsvorgangs**

Adsorptionskältemodul mit monolithischer Aktivkohle

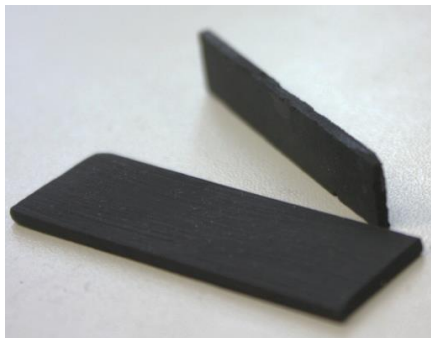
- Adsorptionskältemodul



$$\frac{d\rho^v}{dt} = -\frac{1}{A^v} \frac{d\dot{M}^v}{dz} - \frac{\rho_{ges}}{\epsilon} \cdot \frac{dX}{dt}$$

- ➔ Beschreibung des Stoff- und Energietransports mithilfe von Massen- und Energiebilanzen
- ➔ Herausforderung: Optimierung der Aktivkohle für die Adsorptionskälteanwendung

- Monolithische AK: Aktivkohlepulver mit keramischem Binder extrudiert



$$\left[\bar{c}_p^{ads+ad} \rho_{ges} + \rho^v V^v c_p^v \epsilon - \epsilon \frac{\rho^v R}{MW} \right] \frac{dT}{dt} = -\frac{\dot{M}^v}{A} \frac{dh^v}{dz} - \Delta_{ads} h \rho_{ges} \cdot \frac{dX}{dt} + \frac{\epsilon R T}{MW} \frac{d\rho^v}{dt} - \frac{d\dot{Q}^{ads+ad}}{dz}$$

Integriertes Adsorptionskältemodul

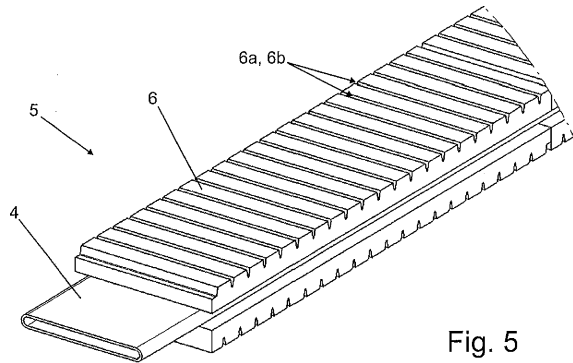


Fig. 5

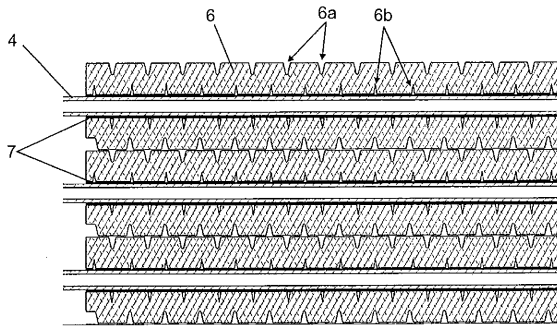


Fig. 6

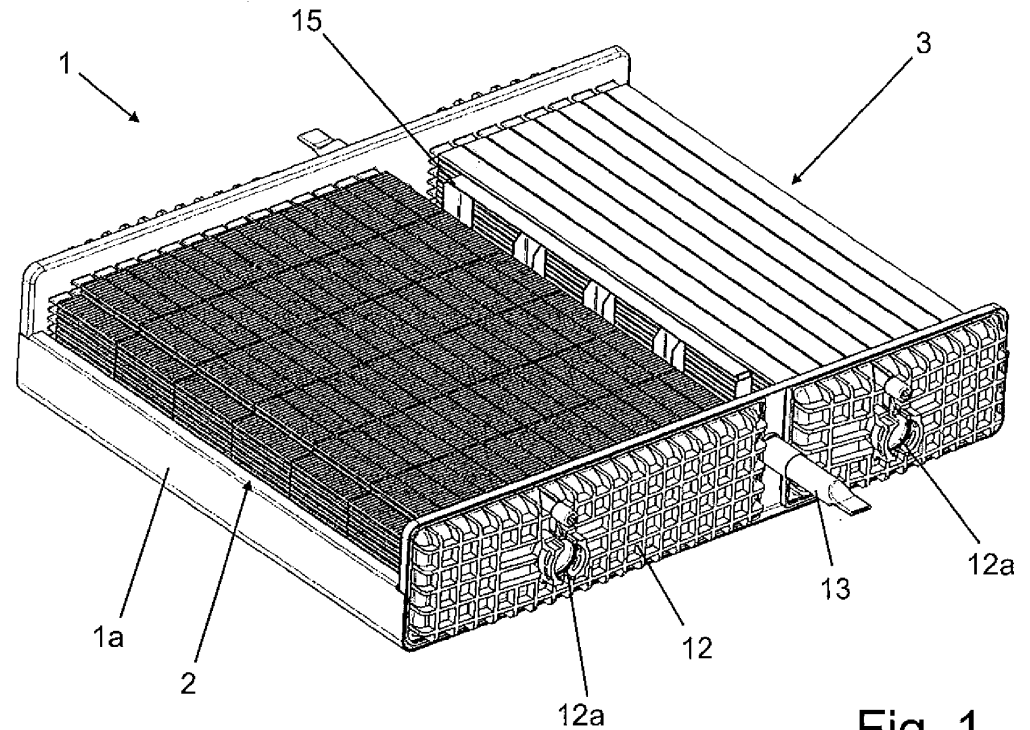


Fig. 1

R. Burk et.al., Modul für eine Adsorptionswärmepumpe, DE102011079586A1

Flachrohre mit Aktivkohleplättchen

Fragestellung: Wie können Wärme- und Stofftransport in den Aktivkohleplättchen optimiert werden für den Adsorptionskälteprozess?

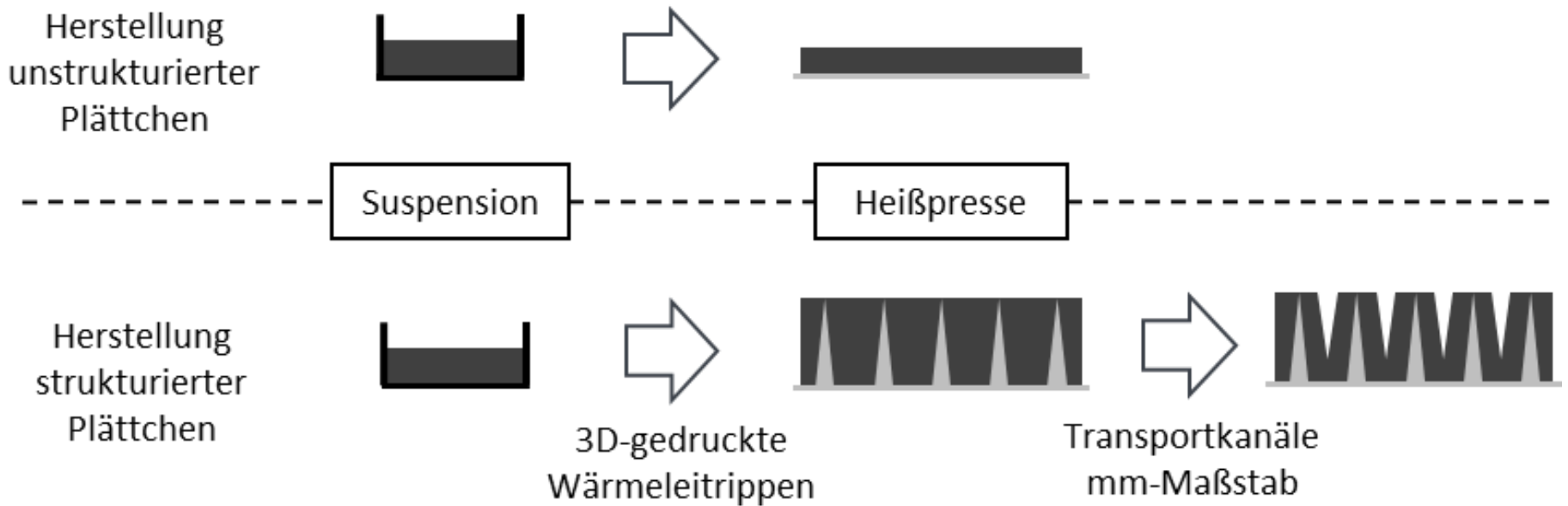


Vorgehen:

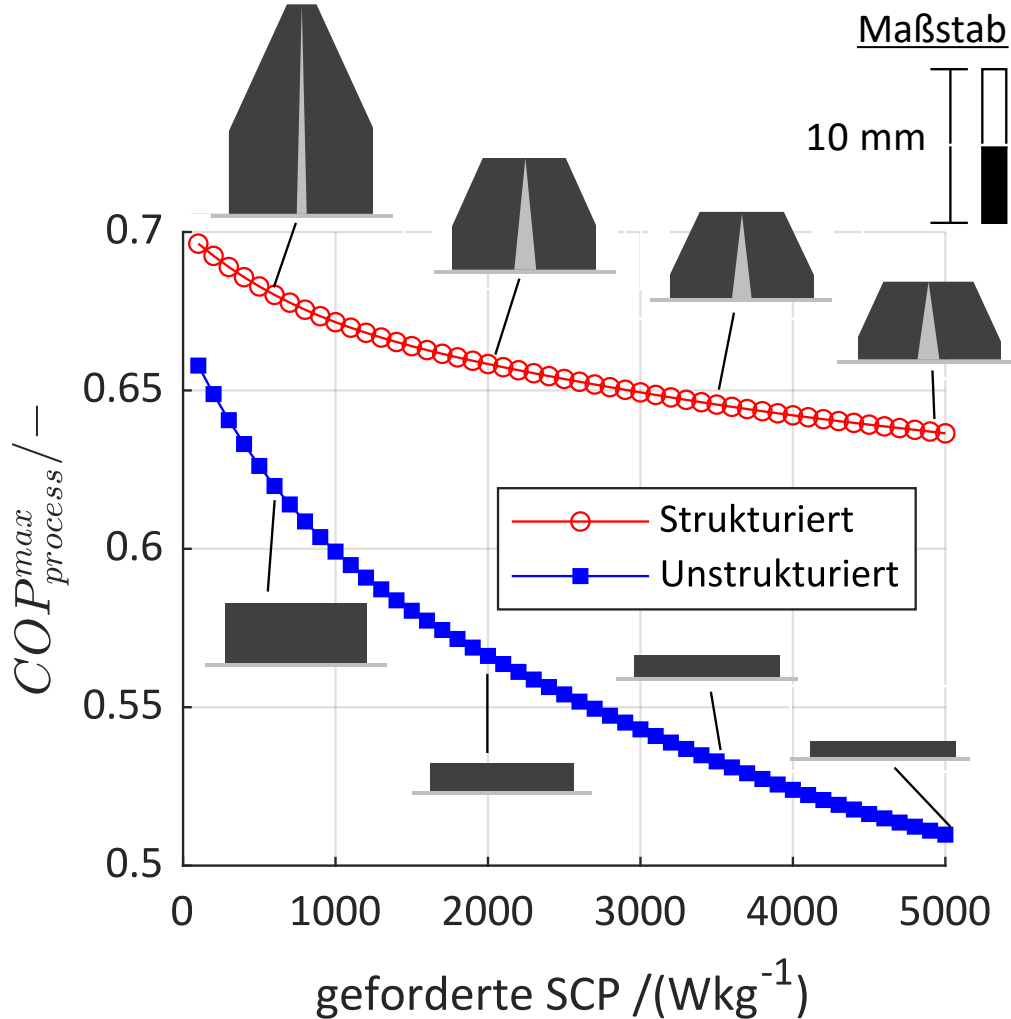
1. Virtuelles Materialdesign mithilfe von Simulationen zur Identifikation einer optimalen Strukturierung
2. Herstellung der strukturierten Aktivkohleplättchen & Experimentelle Bestätigung des verbesserten Materials

Vergleich strukturierter und unstrukturierter Adsorbenzen

Fragestellung: Wie kann Wärme- und Stofftransport in Adsorbens-Plättchen optimiert werden für den Adsorptionskälteprozess?



Vergleich strukturierter und unstrukturierter Adsorbentien



Strukturierung liefert
deutliche Verbesserung des
Wirkungsgrades (COP)!

Aufgabe des Ingenieurs:

- Quantifizierung des Stoff- und Wärmetransportes
- Design & Auswahl geeigneter Materialien
- Design der Wärmepumpe
- dynamische Simulation und Optimierung der Wärmepumpe

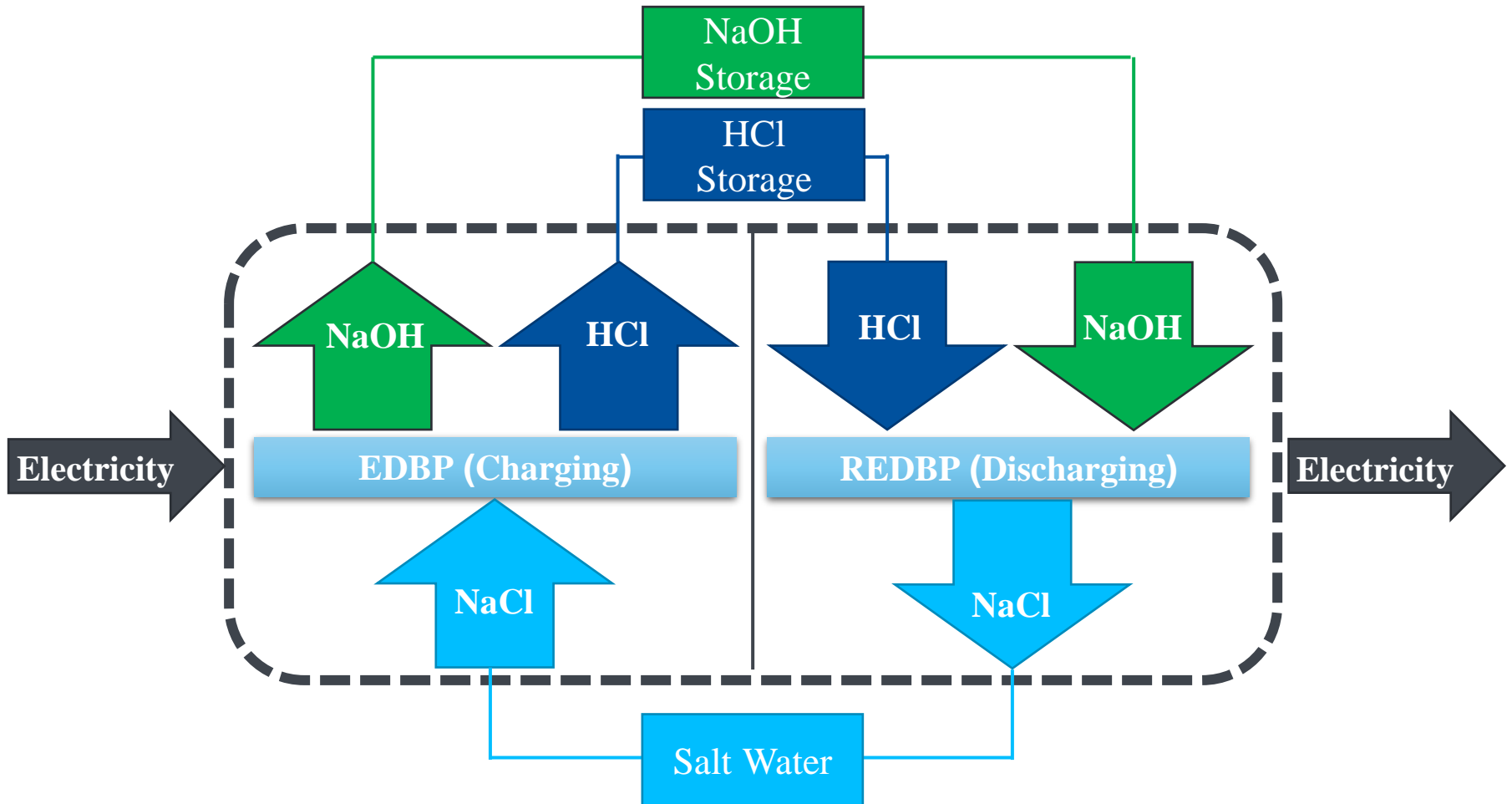
Beispiel: elektrochemische Reaktionstechnik

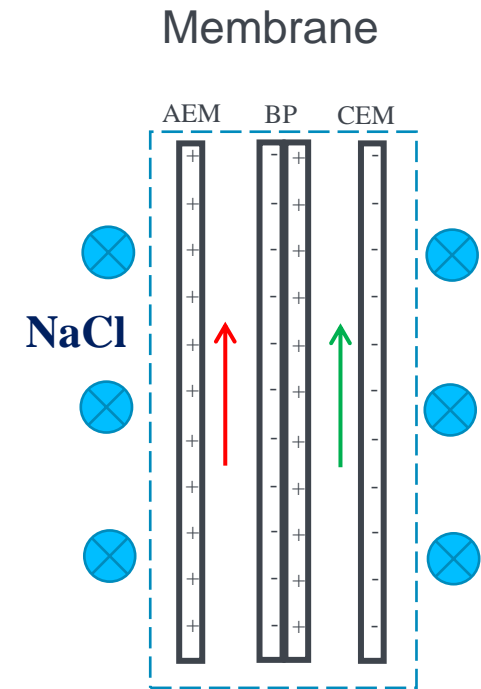
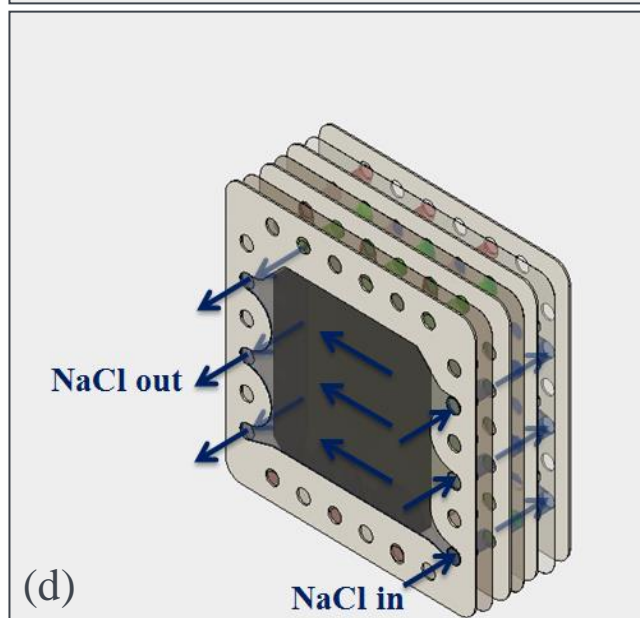
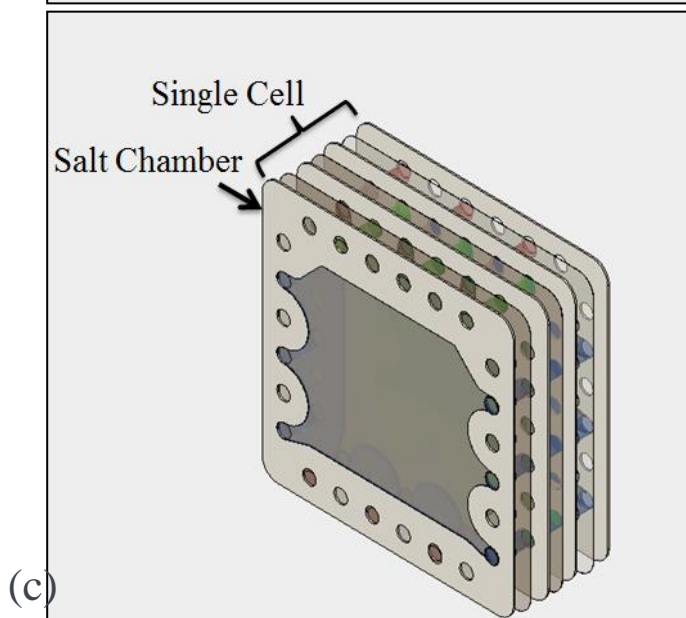
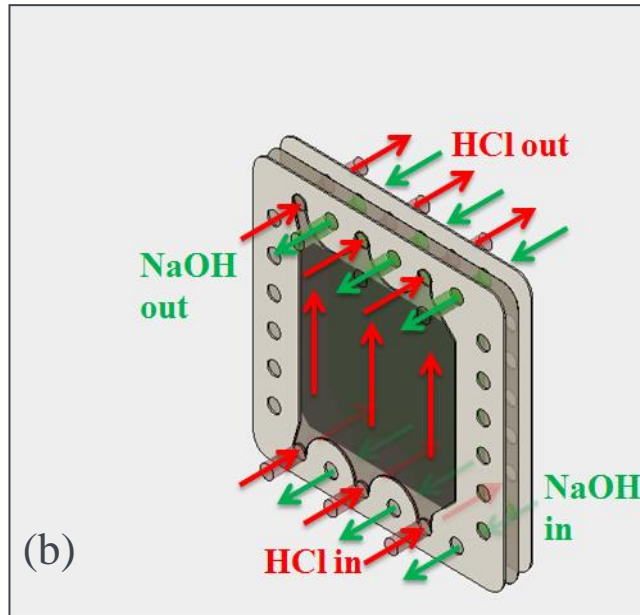
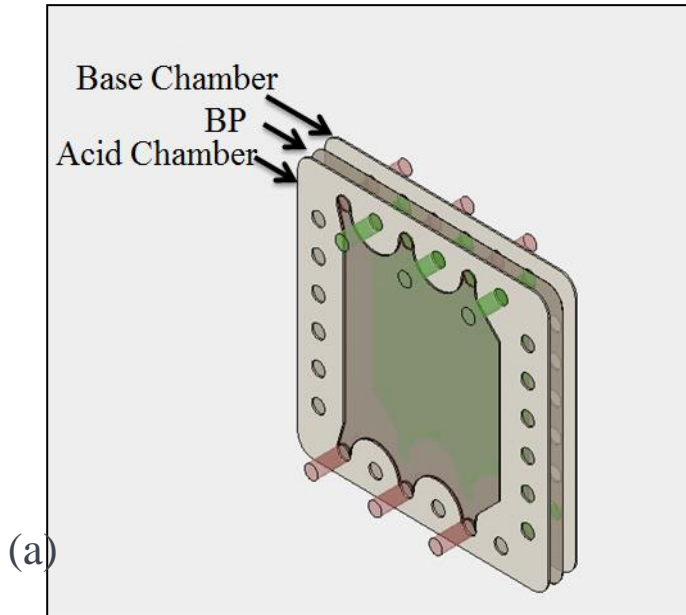
Flüssigkeitsbatterie

- M.Sc. Jiabing Xia

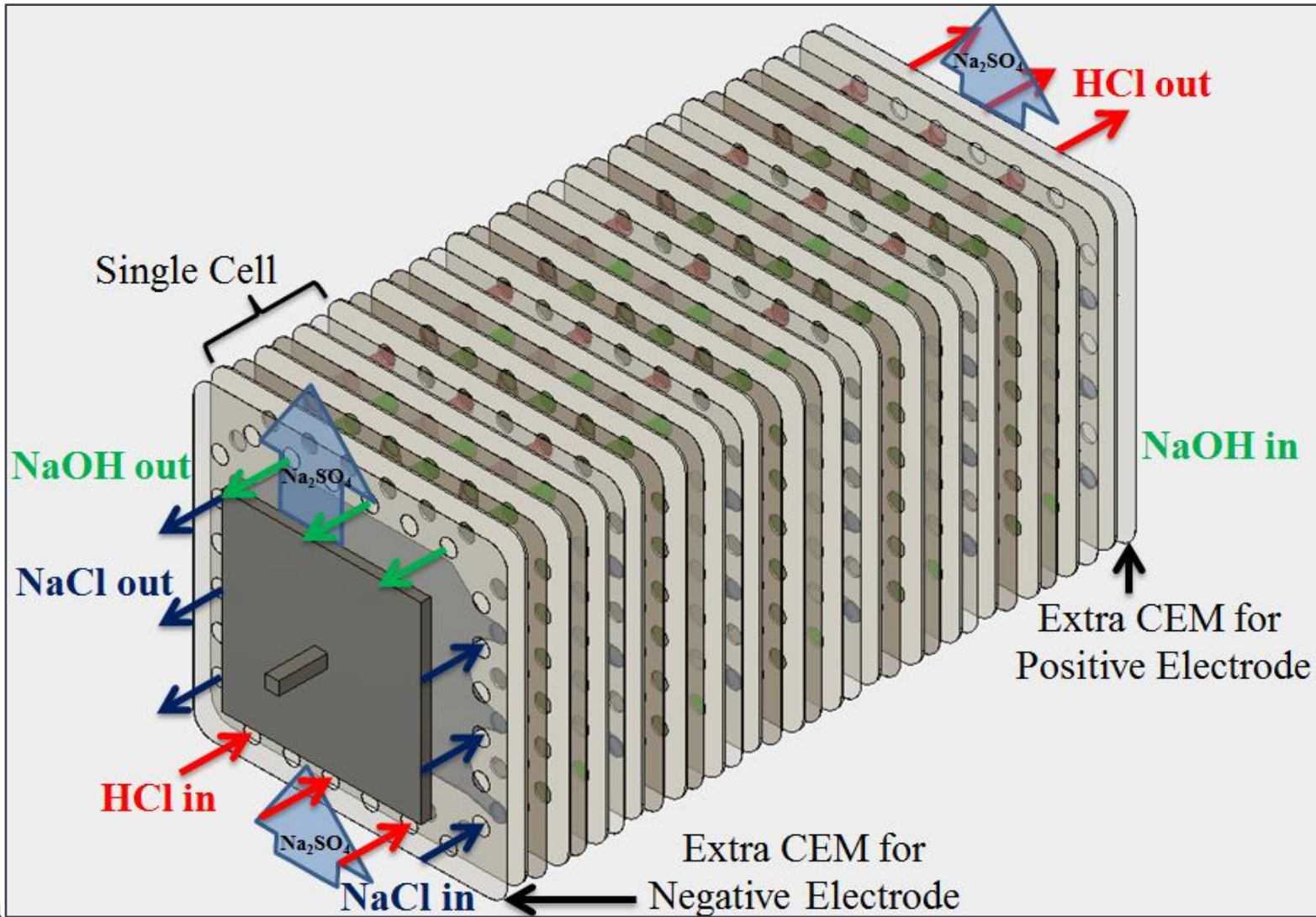


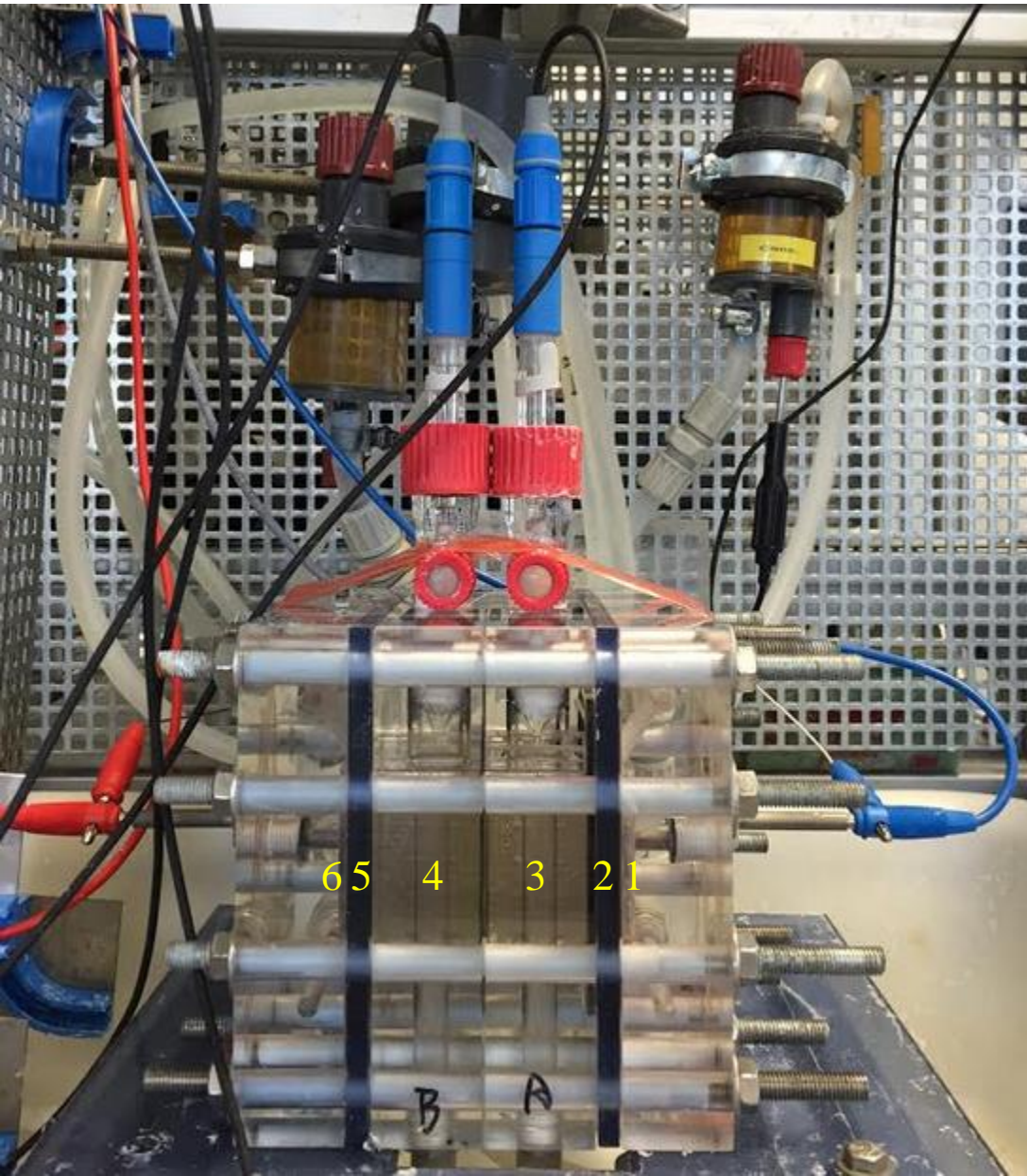
Funktionsprinzip





Aufbau eines Stacks





Working Cell

- 5 x 5 cm²

Aufgabe des Ingenieurs:

- Grundlagen Elektrochemie
- Aufbau und Betrieb Prototyp
- Optimierung des Aufbaus
- Auswahl und Bewertung der Membran
- Simulation der Leistungsverluste

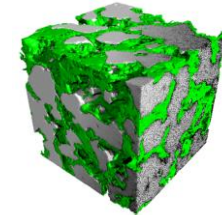
- **Reaktionstechnik**

Prof. Dr.-Ing. Ulrich Nieken



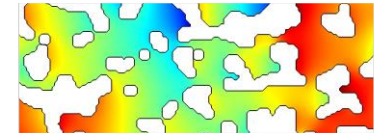
- **Virtuelles Materialdesign**

Prof. Dr.-Ing. Ulrich Nieken



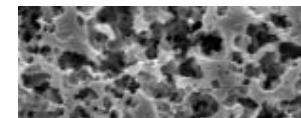
- **Upscaling: von der Mikro- zur Makroskala**

Prof. Dr.-Ing. Ulrich Nieken



- **Polymer- u. Membrantechnik**

Dr. Vladimir Atanasov



Grundlagen

Thermodynamik
von Mischungen

Strömungsmechanik

Chemische
Reaktionstechnik I

Numerik I

Modellierung verfahrenstechnischer Prozesse

Numerik II

Spezialisierung: Chemische Verfahrenstechnik

Vorlesungsangebot zum Spezialisierungsfach **Chemische Verfahrenstechnik**

Chemische Reaktionstechnik II

Chemische Reaktionstechnik III – Industrielle Reaktionstechnik

Vertiefte Grundlagen der technischen Verbrennung

Nichtgleichgewichts-Thermodynamik: Diffusion und Stofftransport

Polymer-Reaktionstechnik

Teil 1: Mechanismen und Praktikum

Teil 2: Berechnung und Simulation

Elektrochemische Verfahrenstechnik

Lithiumbatterien: Theorie und Praxis

Prozessführung und Production IT in der Verfahrenstechnik

Reaktionstechnik

Thermodynamik

Polymere

**Elektrochemische
Verfahren**

Regelungstechnik

Chemische Reaktionstechnik II

Grundlagen **mehrphasiger Systeme**, **Versuche**,
Simulation

Chemische Reaktionstechnik III

Vertieftes Verständnis, **Praxis**

Vertiefte Grundlagen der technischen Verbrennung,
Theorie, **Grundlagen**

**Reaktions-
technik**

Polymerreaktionstechnik I

Grundlagen, Basiswissen, Praktikum

Polymerreaktionstechnik II

Berechnungsmethoden, Modellierung und Simulation

Polymere

Elektrochemische Verfahrenstechnik

Übersicht, Theorie Elektrochemie

Lithiumbatterien: Theorie und Praxis

Spezialvorlesung zu aktuellem Thema

**Elektro-
chemische
Verfahren**

Vielen Dank für Ihre
Aufmerksamkeit!

Institut für Chemische Verfahrenstechnik

