

Erweiterung und Parametrisierung von COSMO-RS zur Vorhersage von Flüssig-Flüssig-Phasengleichgewichten in Elektrolytsystemen

T. Gerlach, S. Müller, I. Smirnova

*Institut für Thermische Verfahrenstechnik, Technische Universität Hamburg-Harburg,
Hamburg, Deutschland*

In vielen Prozessen, insbesondere im Bereich der Biotechnologie, stellen Salze einen natürlichen Bestandteil der Medien dar. Darüber hinaus kann durch die Hinzugabe von Salzen eine Extraktion aus wässrigen Medien auch für polare Komponenten ermöglicht werden. Die Modellierung von Phasengleichgewichten salzhaltiger Systeme ist dabei mit verschiedenen Modellen beschrieben worden. Für die meisten Modelle ist dabei eine Anpassung komponentenspezifischer Wechselwirkungsparameter an experimentelle Daten des Systems notwendig, allerdings liegen diese in vielen Fällen nicht vor.

COSMO-RS erlaubt als prädiktives g^E -Modell die Vorhersage des Verteilungsverhaltens von Komponenten in verschiedensten Systemen, eine Bestimmung komponentenspezifischer Wechselwirkungsparameter ist dabei nicht erforderlich. In unserer Gruppe wurde bereits eine Erweiterung von COSMO-RS für Elektrolytsysteme entwickelt. Anhand einzelner Systeme wurde demonstriert, dass der Salzeffekt auf Flüssig-Flüssig-Phasengleichgewichte vorhergesagt werden kann [1]. Hierzu wurden, neben anderen Anpassungen, ionenspezifische Wechselwirkungsparameter in das Modell integriert. Diese wurden auf Grundlage von mittleren ionischen Aktivitätskoeffizienten in wässrigen Systemen parametrisiert.

In dieser Arbeit wurde dieser Modellierungsansatz auf Grundlage einer in unserer Gruppe durchgeführten Re-Implementierung des Modells COSMO-RS weiterentwickelt, so dass ein deutlich größeres Spektrum verschiedener Ionen erfolgreich in die Parametrisierung integriert werden konnte. Anschließend wurde das neue Modell auf Grundlage einer großen Datenbank von Flüssig-Flüssig Phasengleichgewichten salzhaltiger Systeme systematisch quantitativ bewertet. Die erstellte Datenbank enthielt Systeme mit verschiedenen Lösungsmitteln, wie Alkohole, Ester und Ketone. Auf Grundlage dieses Bewertungsschrittes wurden neue Ansätze zur verbesserten Beschreibung der Wechselwirkungen von Ionen entwickelt und auf Basis der Flüssig-Flüssig Phasengleichgewichte parametrisiert. Hierdurch konnte eine quantitativ deutlich genauere Berechnung der Phasengleichgewichte in Elektrolytsystemen erreicht werden. Insbesondere wurden Verbesserungen für Systeme erzielt, welche Alkohole enthielten. Das Modell erzielte dabei zufriedenstellende Vorhersagen auch für verschiedene quaternäre LLE Systeme.

References

[1] T. Ingram, T. Gerlach, T. Mehling, I. Smirnova, *Fluid Phase Equilibria*, 2012, 314, 29-37.