

Universität Stuttgart

Institut für Chemische Verfahrenstechnik



Vorstellung Vertiefungsrichtung Chemie

U. Nicken

Vertiefungsrichtung Chemie

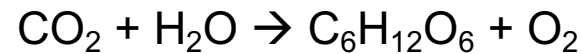
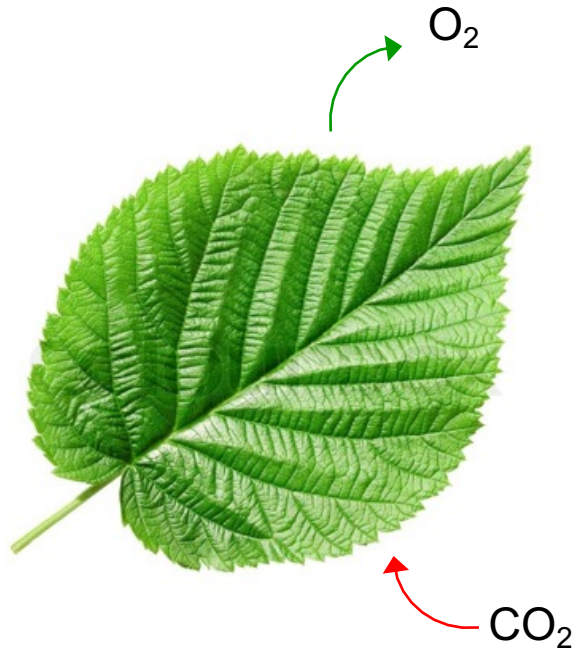
- Organische Chemie mit Praktikum
- Physikalische Chemie
- Theoretische Chemie
- Mikroreaktionstechnik

Ziele:

- Kommunikation in interdisziplinären Teams mit Naturwissenschaftlern
- Grundverständnis auf molekularer Ebene
- Neue Verfahren für die Produktion von Stoffen
- Grundkompetenz in experimentellem Arbeiten

Organische Chemie

- Die organische Chemie ist der Grundbaustein für das Leben auf der Erde.
- Bsp.: Photosynthese



Vorlesung der OC

Allgemeine Grundlagen:

- Elektronenkonfiguration des Kohlenstoffs, Hybridisierung, Grundtypen von Kohlenstoffgerüsten: C-C-Einfach-/Zweifach-/Dreifachbindungen, cyclische Strukturen, Nomenklatur (IUPAC); Isomerie: Konstitution, Konfiguration (Chiralität),

Stoffklassen:

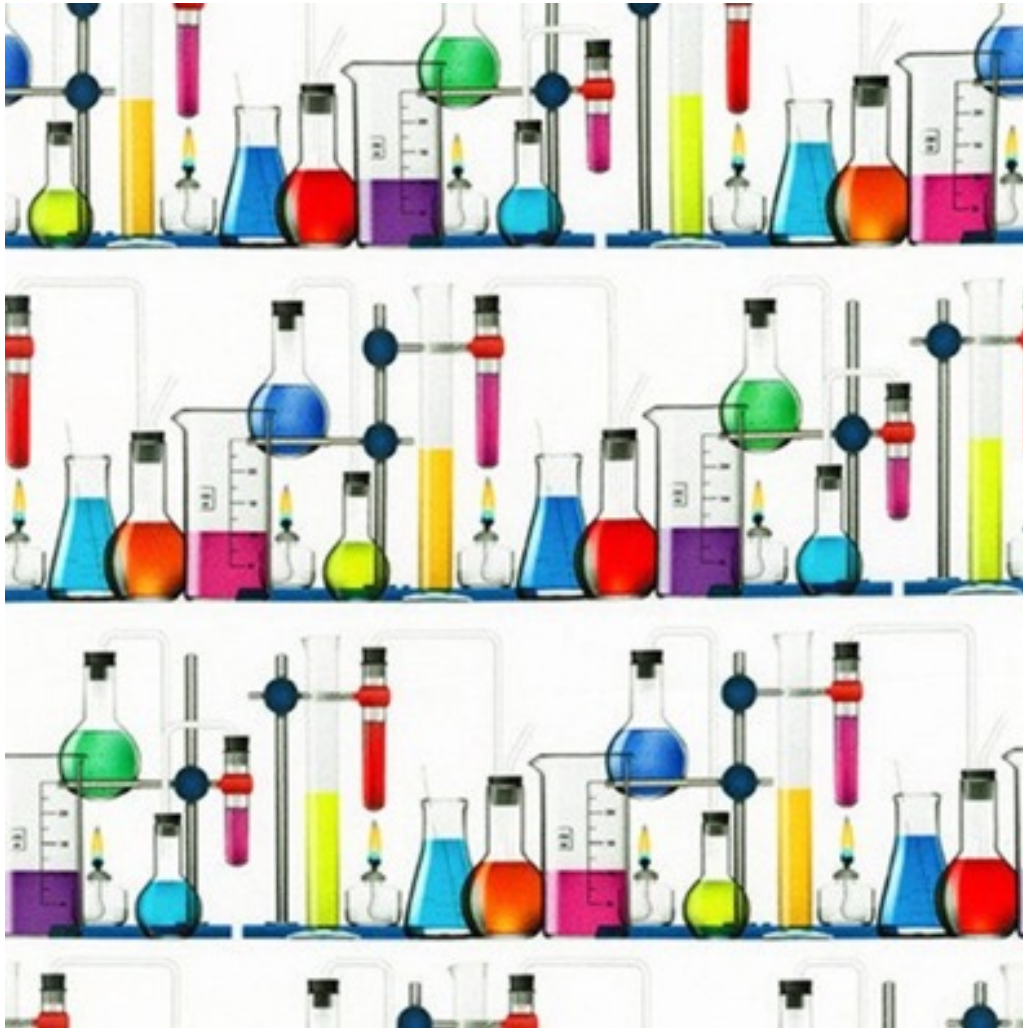
- Alkane, Alkene, Alkine, Halogenalkane, Alkohole, Amine, Carbonsäuren und ihre Derivate, Aromaten, Aldehyde u. Ketone, Polymere, Aminosäuren

Reaktionsmechanismen:

- Radikalische und Nucleophile Substitution, Eliminierung, Addition, elektrophile aromatische Substitution, 1,2-Additionen (Veresterung, Reduktion, Grignard-Reaktion), Reaktionen C-H acider Verbindungen (Knoevenagel-Kondensation, Aldolreaktion);
- Polymerisation (radikalisch, kationisch, anionisch)

Praktikum in OC

Grundkompetenz für experimentelles Arbeiten



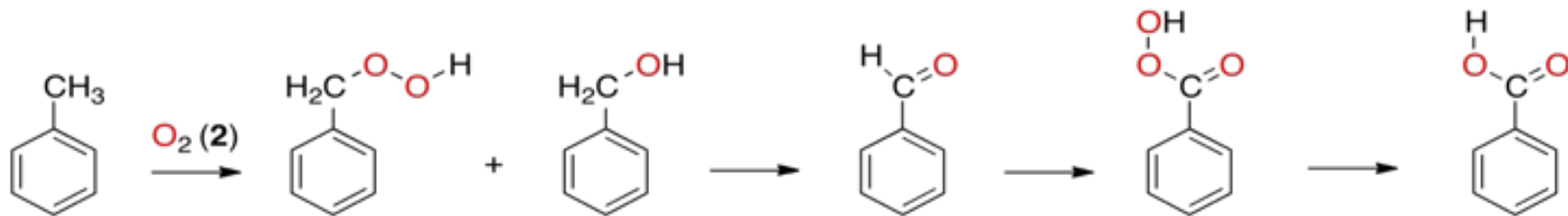
- Handling von Chemikalien
- Chemikaliensicherheit
- Analyse von Ergebnissen
- Aufbau Laborversuche

Anwendung der OC

Oxidation von Toluol zu Benzoesäure

Vorkommen:

- Konservierungsmittel
- Kosmetika



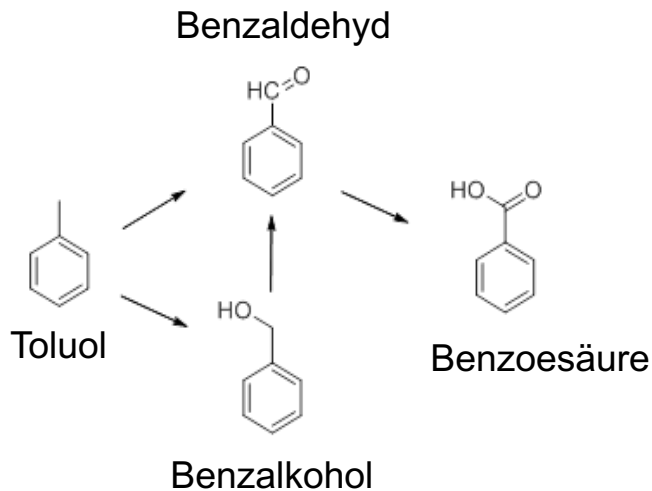
Toluoloxidation und dessen Zwischenprodukte

Anwendung der OC

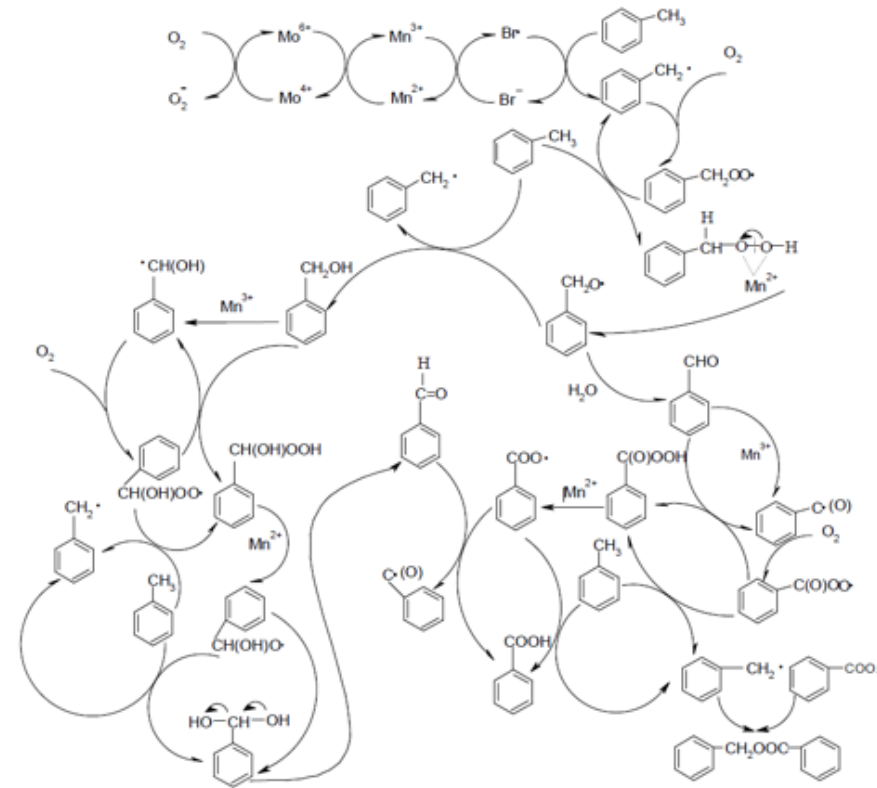
Oxidation von Toluol zu Benzoesäure

Reaktionsmechanismus:

Einfach



kompliziert

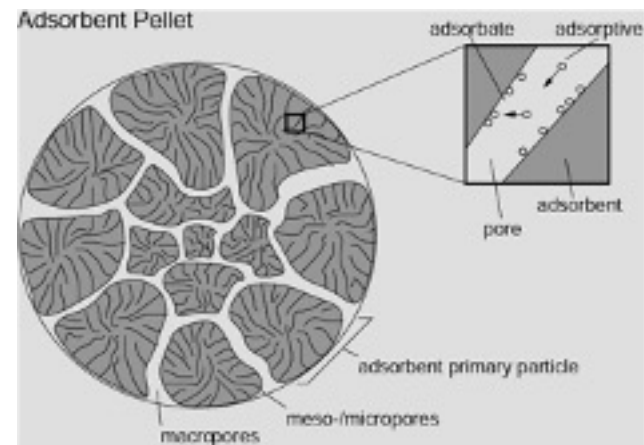


Physikalische Chemie

Viele verfahrenstechnische Prozesse sind von physikalischen Vorgängen geprägt. Hierzu gehören **grenzflächendominierte Prozesse**.

Typische Beispiele sind

- Der Lotus-Effekt
- Die Adsorption von Molekülen an einer Oberfläche

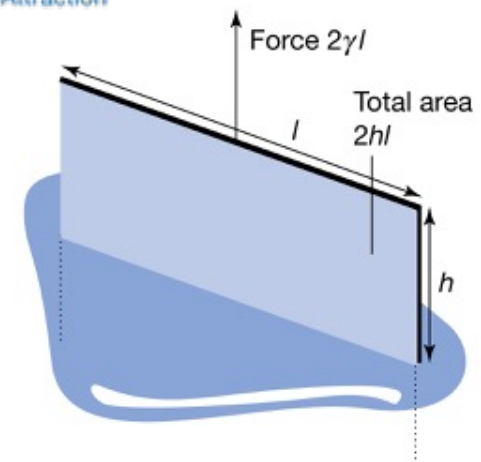
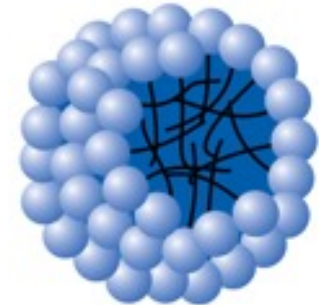
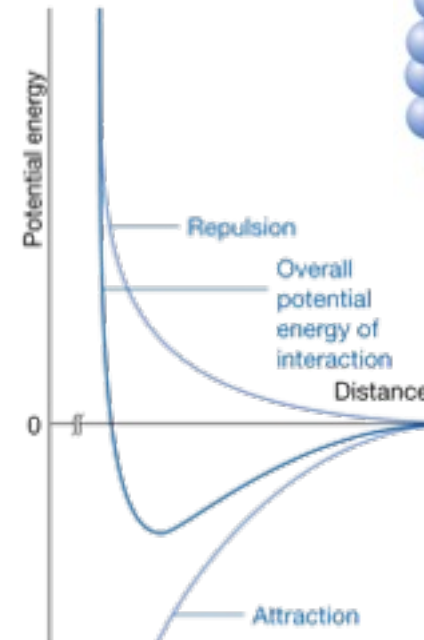


1. Aggregatzustände

1. Übersicht und Systematik
2. Das Modell des idealen Gases
3. Intermolekulare Wechselwirkungen
4. Reale Gase und Verflüssigung
5. Einfache Flüssigkeiten
6. Kristalline Festkörper [→ Einf. Materialwiss.]
7. Komplexe Fluide, *Soft Matter*

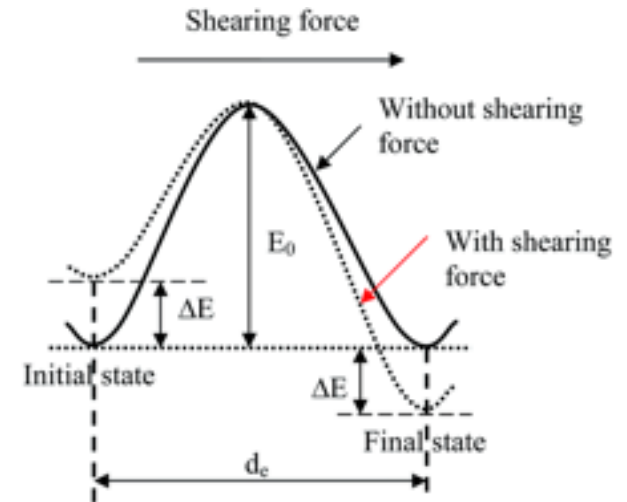
2. Grenzflächen

1. Grenzflächenspannung
2. Gekrümmte Grenzflächen
3. Benetzung und Kapillarität
4. Grenzflächenerscheinungen in Mischungen (Lösungen)
5. Adsorption an Festkörperoberflächen



Beispiel: Viskosität von Flüssigkeiten

- Was sind die molekularen Ursachen der Viskosität von Flüssigkeiten?
- Was bestimmt die Temperaturabhängigkeit der Viskosität? Warum sinkt die Viskosität einer Flüssigkeit mit steigender Temperatur während die Viskosität eines Gases zunimmt?
- Was ist *scherverdünnendes*, was *scherverdickendes* Verhalten? Was sind jeweils die molekularen Ursachen?



Laborversuche

- Kritischer Punkt von CO_2
- Dipolmoment und dielektrische Konstanten von Flüssigkeiten
- Oberflächenspannung von Lösungen
- Adsorption von Essigsäure an Aktivkohle

jeweils ein Nachmittag, in 2er Gruppen



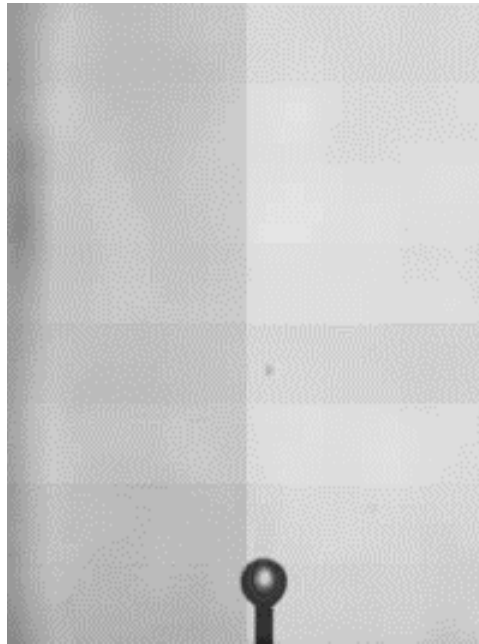
see: https://youtu.be/hP88C-_LgnE

Anwendung der PC

Gasinjektion in Blasensäule

Blasenbildung und –abriss ist ein physikalischer Prozess.

Experiment



Simulation



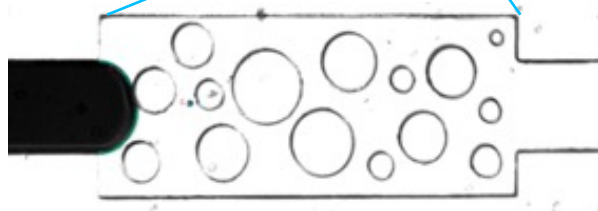
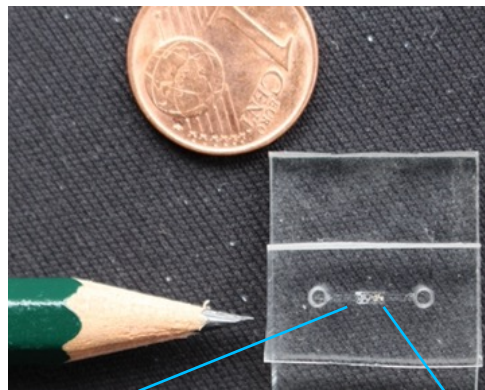
- Untersuchung und Vorhersage der Blasenform bei unterschiedlicher Düsengeometrie und –material.
- Benetzungseigenschaften und Form der Düse beeinflussen Blasenform und Größe bei Abriss.

Anwendung der PC

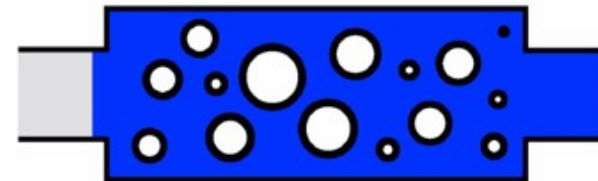
Mehrphasenströmung in porösen Medien

Verdrängung von Fluorinert mit Wasser

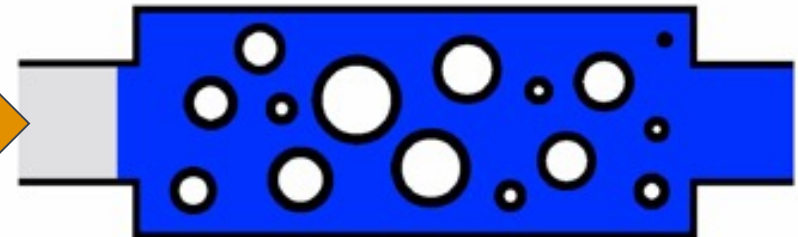
Experiment (Mikromodell)



Simulation



Strömung →

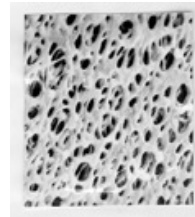
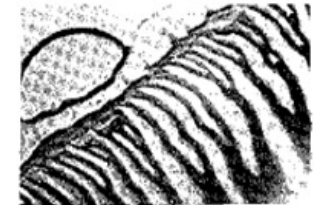
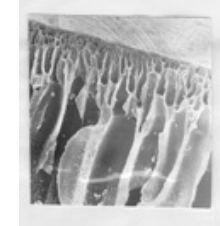


- Benetzungsverhalten z.B. beim Transport von Wasser und Sauerstoff in der Brennstoffzelle

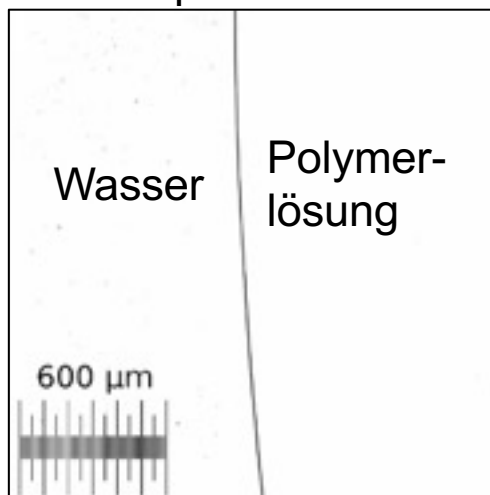
Anwendung der PC

Herstellung von porösen Polymermembranen

- Polymermembranen werden als Filter in der Wassertechnik, Filtration oder Medizintechnik eingesetzt.
- Eine gezielte Membranstruktur ist für funktionelle Materialien wichtig.
- Entstehungsprozess der Porenstruktur ist ein physikalischer (grenzflächendominierter) Prozess



Experiment



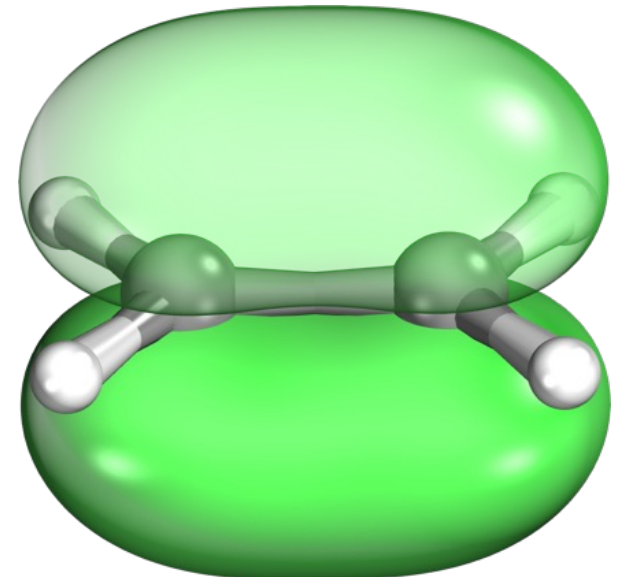
Video in Realzeit

Simulation



Vorlesung

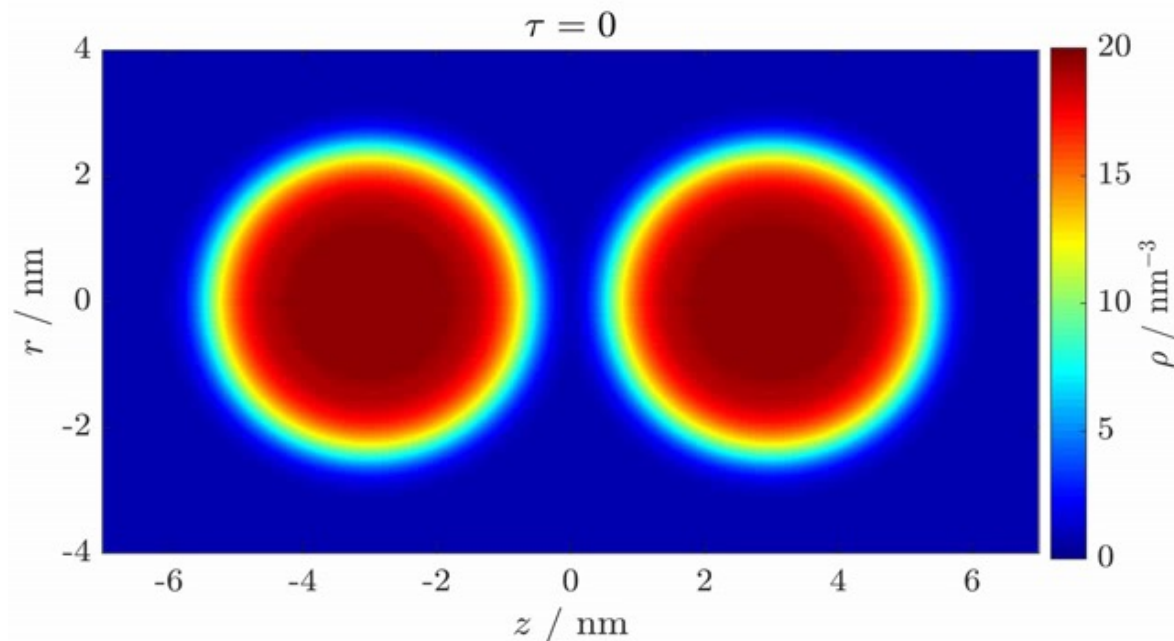
- Grundlagen der Quantenmechanik
- Berechnung von Molekülschwingungen (Infrarot-Spektren)
- Atombau
- Chemische Bindung und Elektronenstruktur von Molekülen



Anwendung der TC

Koaleszenzverhalten von Argon vorhersagen

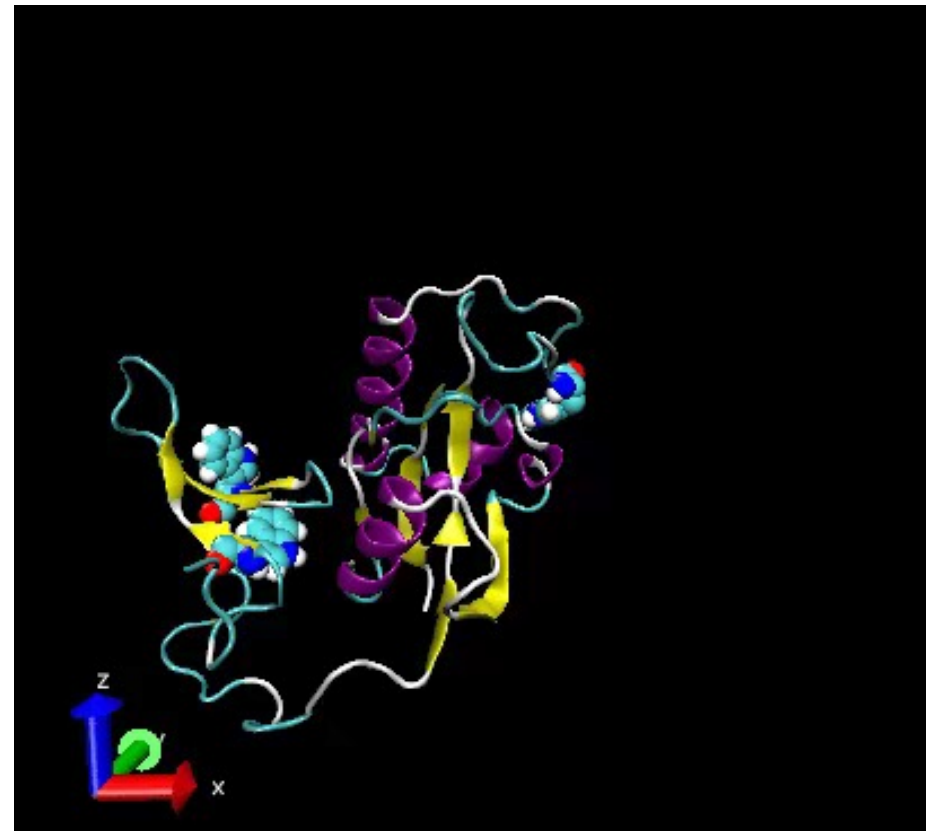
- Störung des chemischen Potentials durch die zweite Grenzfläche (zweiter Tropfen) führt zu Koaleszenz
- DFT prädiktiv für Grenzflächeneigenschaften
- thermodynamisch konsistentes Modell für Koaleszenz als Schnittstelle für die Strömungsmechanik



Anwendung der TC

Proteinsimulation

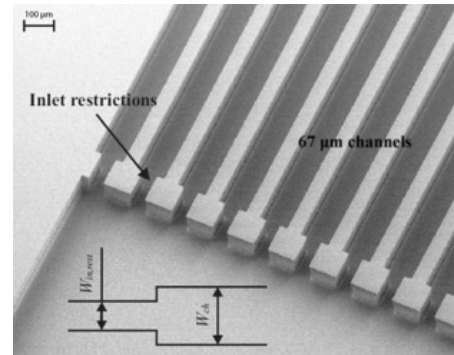
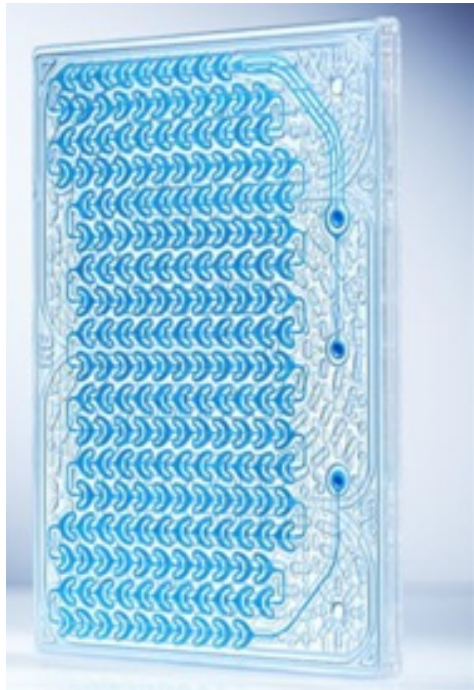
- Untersuchung der Wechselwirkungen des Proteins
- Fragestellung: Wie wirken sich die Eigenschaften des Proteins aus?
- MD-Simulationen von Proteinen zur Untersuchung von:
 - Struktur und Dynamik
 - Stabilität
 - Interaktion mit Lösungsmitteln und anderen Makromolekülen (z.B. Wirkstoffmoleküle)



Protein in Lösungsmittel

Mikroreaktionstechnik

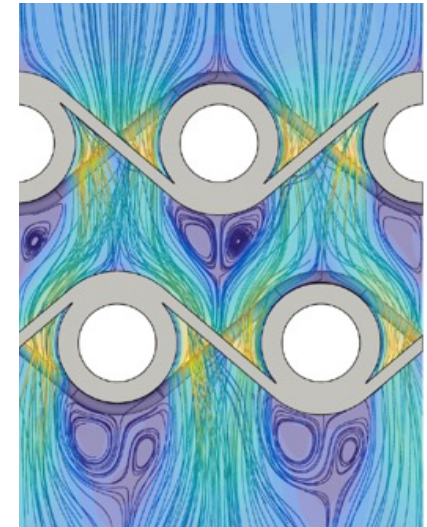
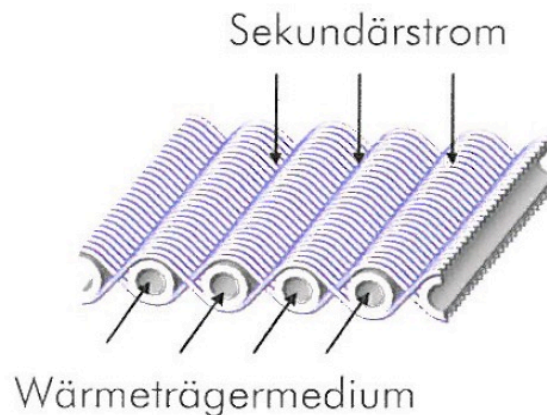
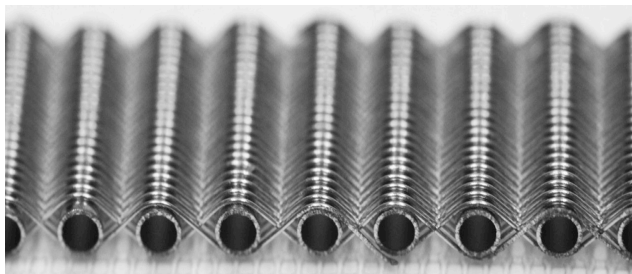
Ziel ist die
Prozessintensivierung,
 d.h. bessere, schnellere, sicherere,
 umweltverträglichere und/oder
 preiswertere Prozesse



M. Schlüter, TU Hamburg-Harburg

Vorlesung der Mikroreaktionstechnik

- „Mikroeffekte“ auf Wärmeleitung, Diffusion und Oberflächen
- Strömungen in Mikroreaktoren
- Apparate der Mikroverfahrenstechnik (Wärmeübertrager, Mischer, Reaktoren)
- Anwendungen der Mikroreaktionstechnik



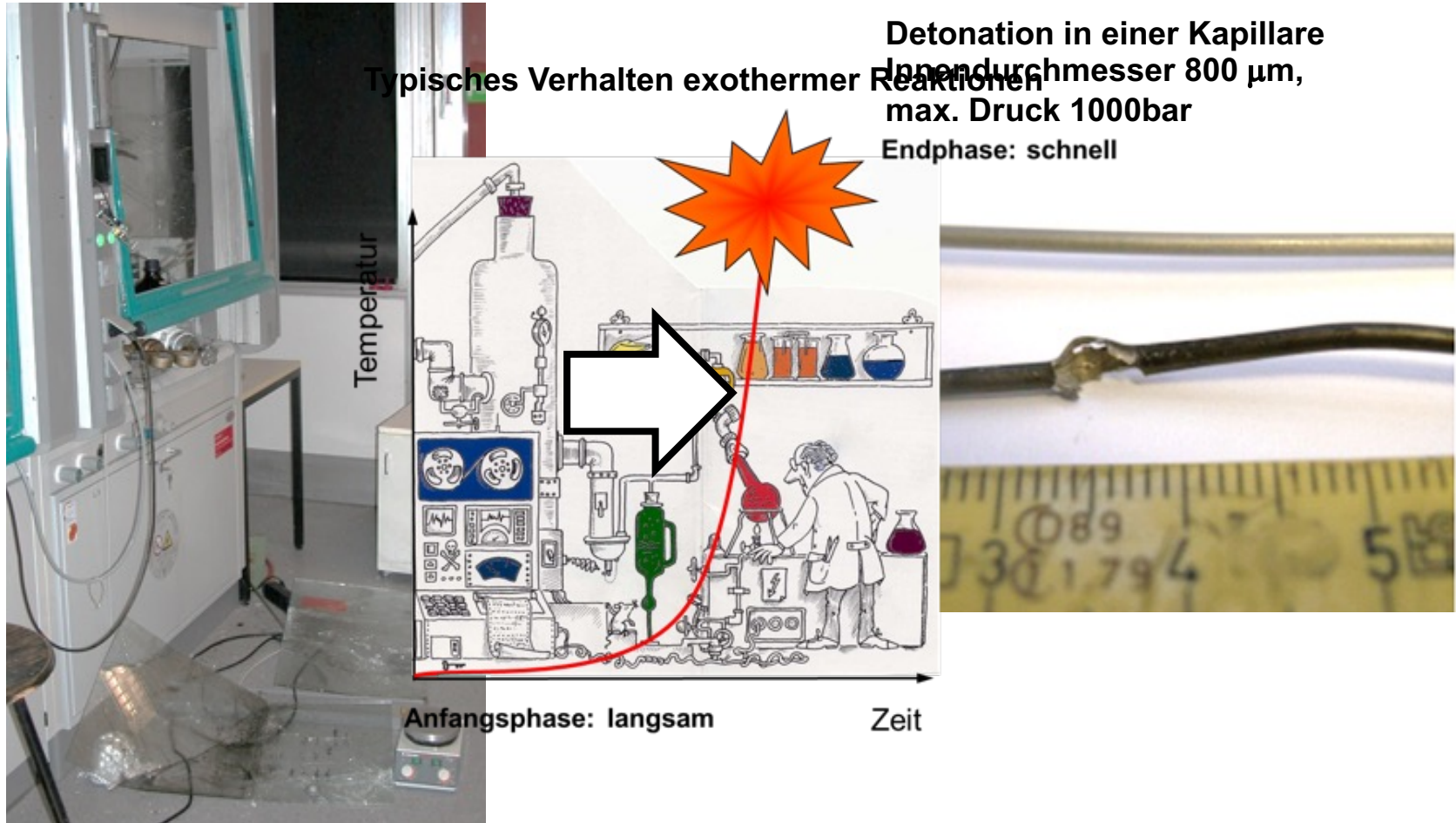
Anwendung der Mikroreaktionstechnik

⇒ sichere Prozessführung

Explosion in einem 300 ml Stahlautoklaven

Typisches Verhalten exothermer Reaktionen

Detonation in einer Kapillare
 Innendurchmesser 800 μm ,
 max. Druck 1000bar
 Endphase: schnell



Temperatur

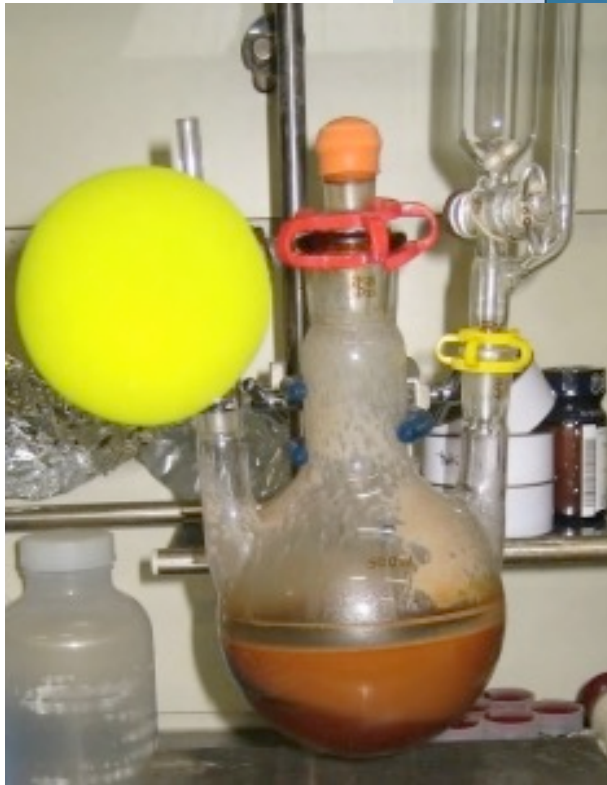
Anfangsphase: langsam

Zeit

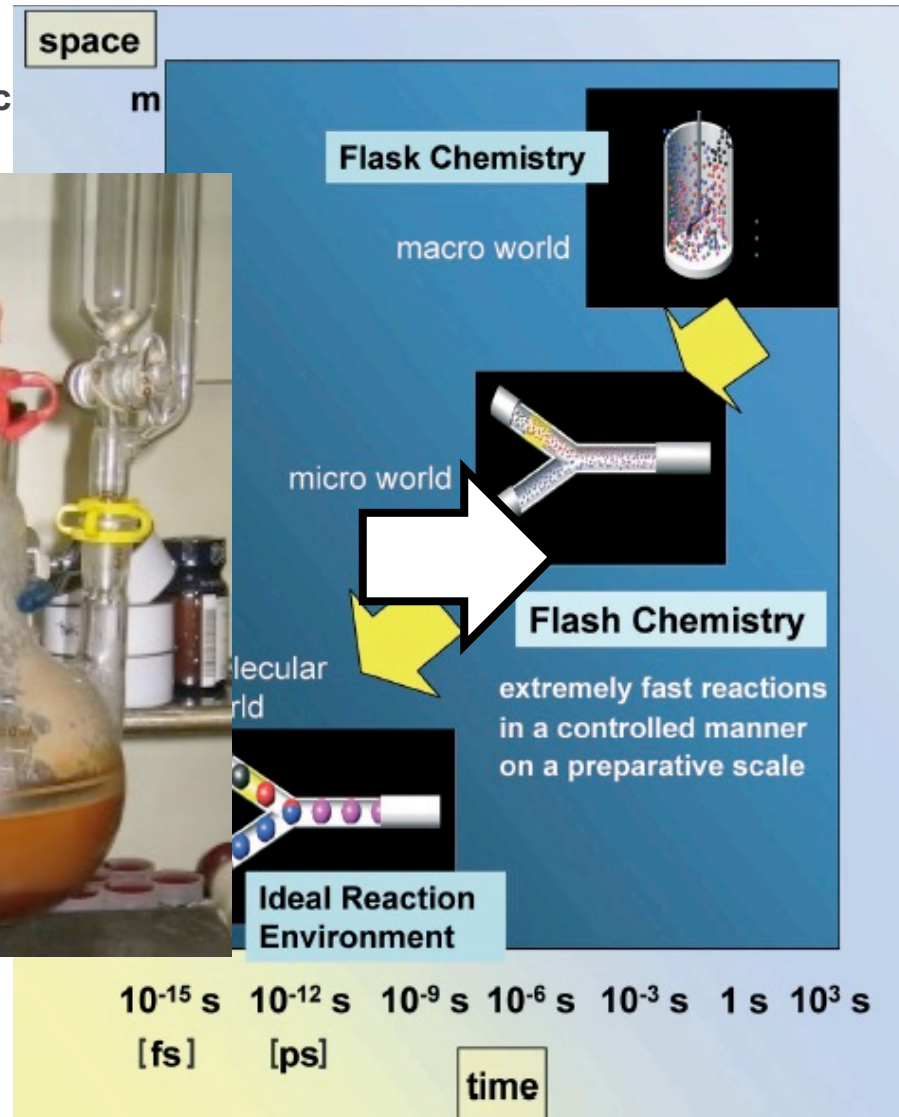
Anwendung der Mikroreaktionstechnik

⇒ Flash Chemistry

Klassische Chemische
(Dreihalskolben)



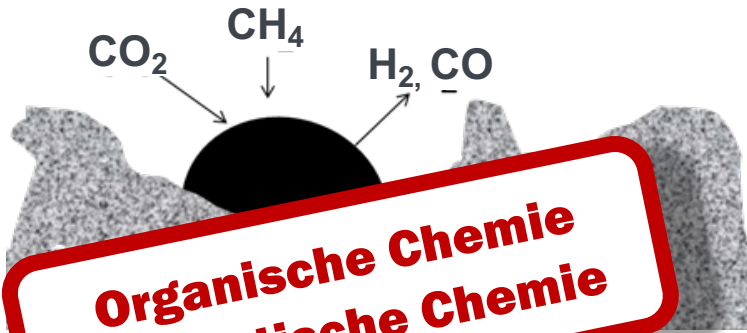
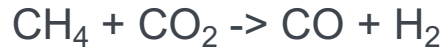
Chemische Forschung
(Mikroreaktoren)



Vom Detail zur Anwendung

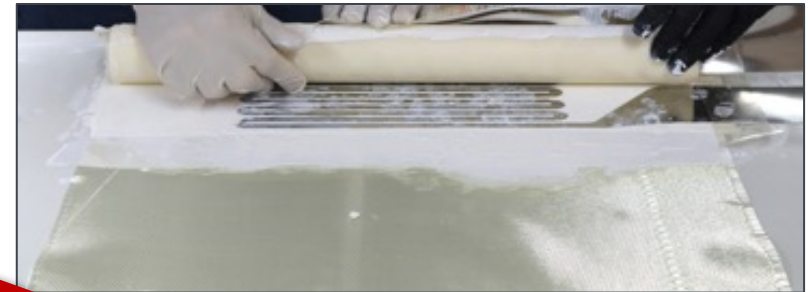
Elektrifizierung chemischer Synthesen

Verständnis der katalytischen Reaktion



Organische Chemie
Theoretische Chemie

Elektrisch beheizbare Keramikrohre



Aufgabe des Ingenieurs



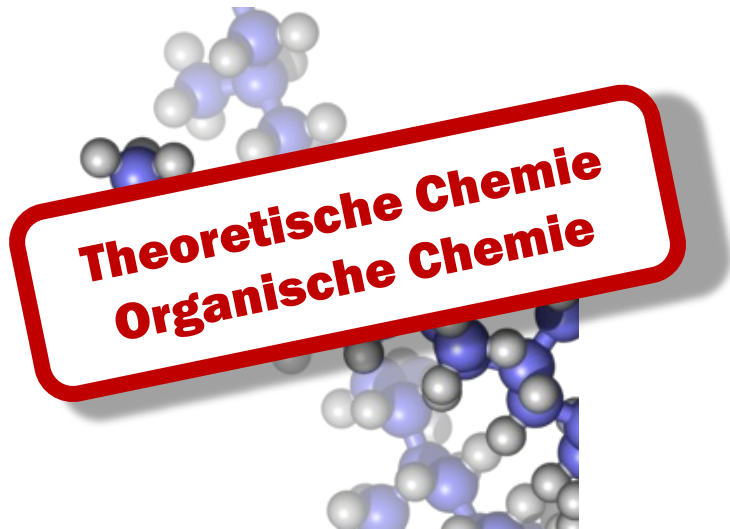
eOCMC Tube after 3h TOS @1100°C



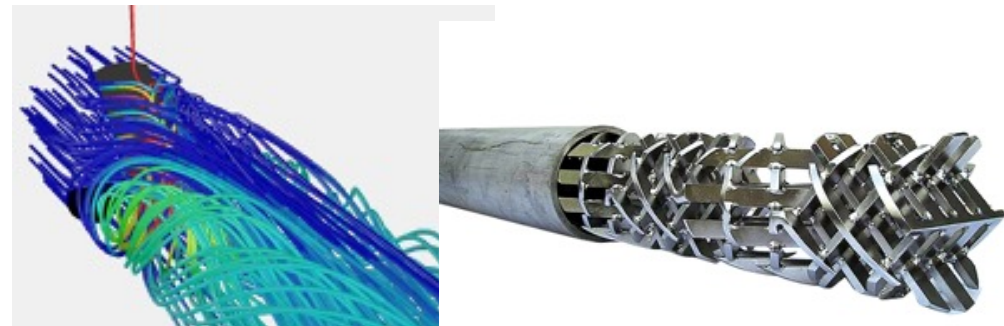
Vom Detail zur Anwendung

Beispiel Polymere

Verständnis des Molekülaufbaus



Kontinuierliches Herstellverfahren



Herstellung Spezialpolymere

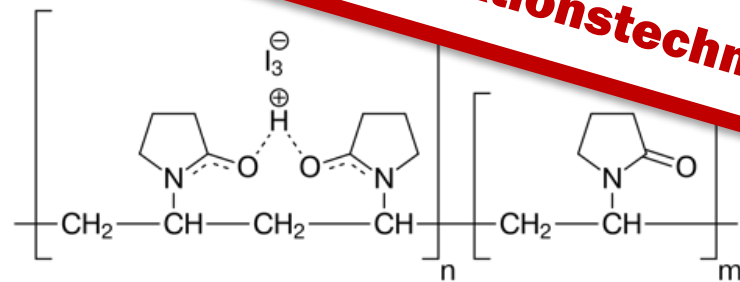
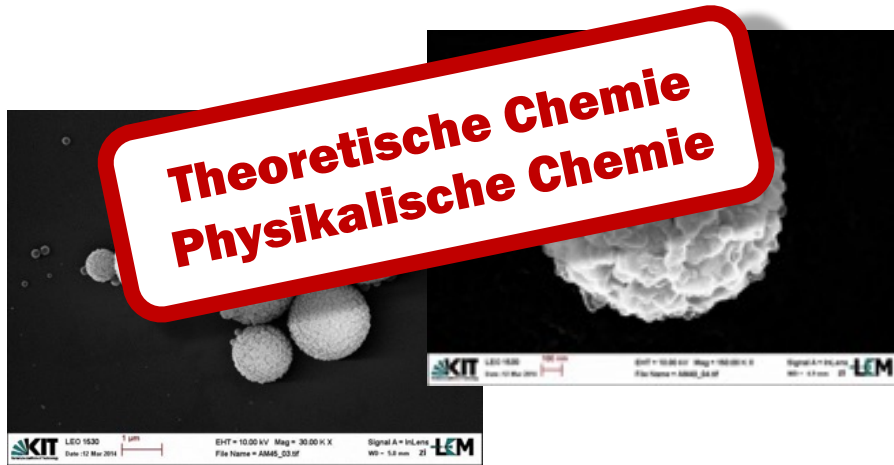


Foto: fluitec

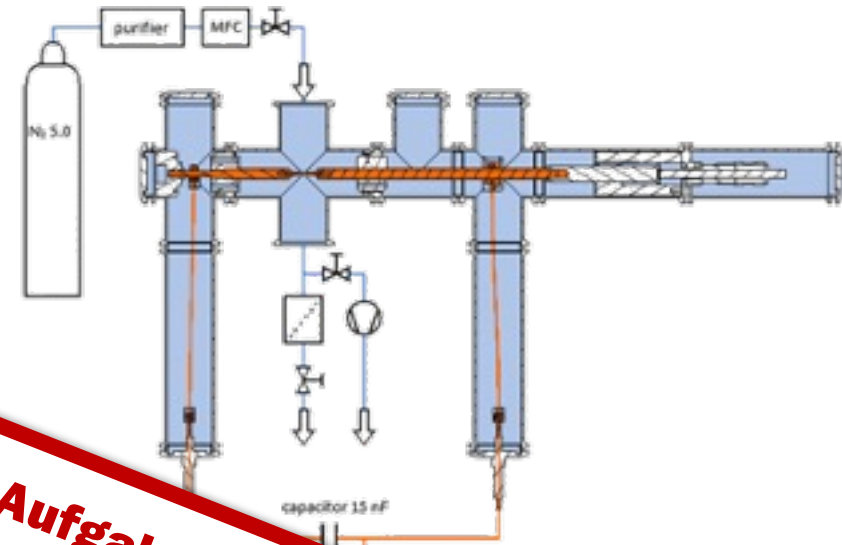
Vom Detail zur Anwendung

Beispiel Nanopartikel

Nanopartikel mit unterschiedlichen Eigenschaften



Herstellung von Nanopartikeln



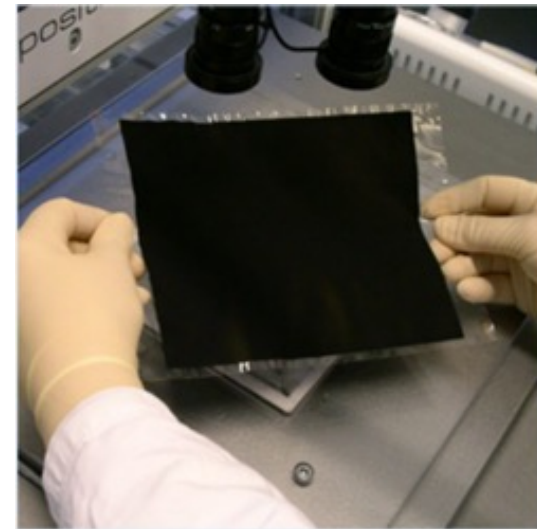
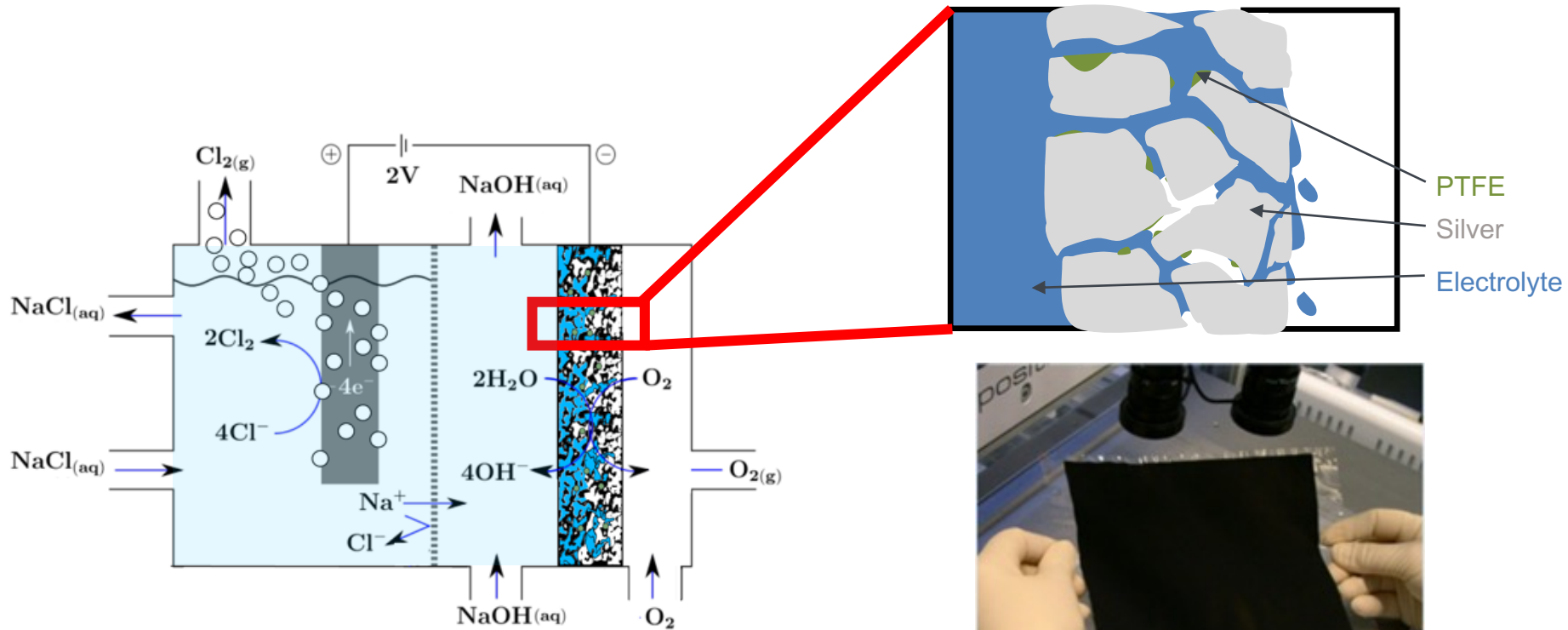
Aufgabe des Ingenieurs

Oberflächenbeschichtungen mit speziellen Eigenschaften



Vom Detail zur Anwendung

Elektrochemie: Gasdiffusionselektroden (GDE)



Vom Detail zur Anwendung

Elektrochemie: Gasdiffusionselektroden (GDE)

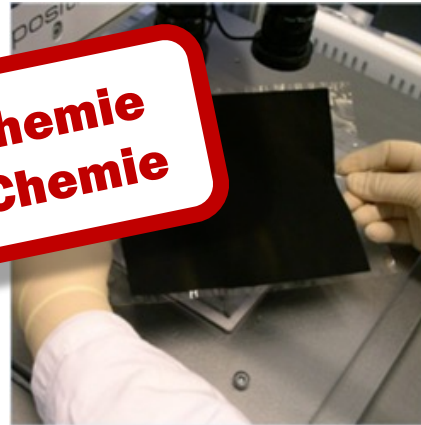
Brennstoffzellen

Metall-Luft-Batt

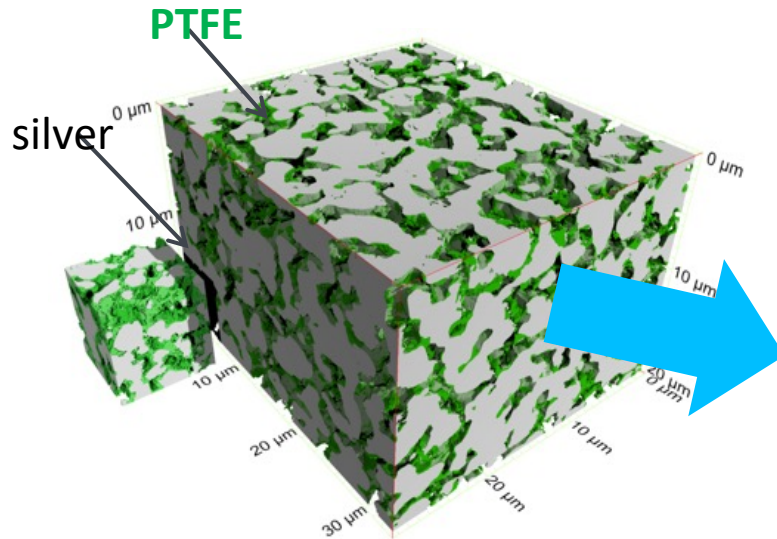
Energie

GDE für

Theoretische Chemie
Physikalische Chemie



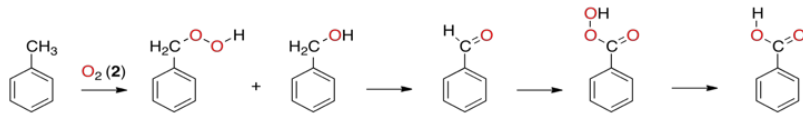
fuelcellstore.com



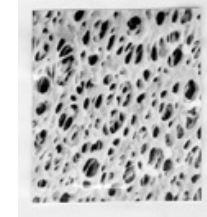
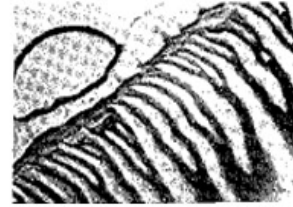
Aufgabe des Ingenieurs



Organische Chemie

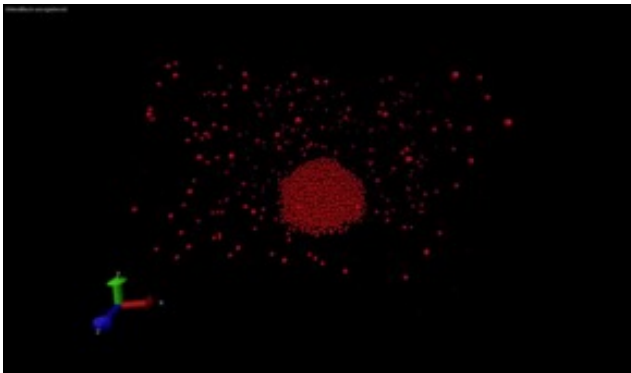


Physikalische Chemie



Fragen ?????

Theoretische Chemie



Mikroreaktionstechnik

