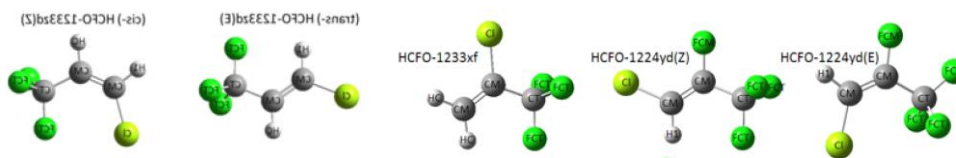


Studienarbeit/Masterarbeit:

MD Simulationsstudien zu den thermophysikalischen Stoffeigenschaften von HCFO-Komponenten

Derzeit werden in thermischen Systemen wie Klima- und Kälteanlagen, Wärmepumpen oder Organic Rankine Cycles in der Regel fluorierte Kohlenwasserstoffe (HFKW) als Arbeitsmittel eingesetzt, die jedoch ein hohes Erderwärmungspotenzial (GWP) besitzen. Dem Kyoto Protokoll folgend, das von Industrieländern die Reduktion ihrer Emission von Treibhausgasen fordert, sind daher weltweit verschiedene Regularien für eine schrittweise Beschränkung der Verwendung von HFKW in Kraft getreten. Als alternative Arbeitsfluide für verschiedene technische Anwendungen werden u.a. ungesättigte fluorierte Kohlenwasserstoffe, so genannte Hydrofluoroolefine (HFO) diskutiert, die aufgrund ihrer kurzen Lebensdauer in der Atmosphäre einen deutlich reduzierten GWP-Wert aufweisen. Unlängst wurden auch chlorierte HFO-Komponenten, sogenannte Hydrochloro- fluoroolefine (HCFO) als neue 'low-GWP' Arbeitsfluide vorgeschlagen. Obwohl HCFO Komponenten chlorhaltig sind, haben sie aufgrund ihrer kurzen atmosphärischen Lebenszeit ebenfalls ein vernachlässigbares Ozonzerstörungspotenzial (Ozon Depletion Potential, ODP).

Um die Eignung dieser vielfältigen neuartigen Arbeitsmittel in technischen Anwendungen beurteilen zu können, sind Kenntnisse der relevanten thermophysikalischen Stoffdaten erforderlich, wie beispielsweise des Phasenverhaltens, der Dichten, Viskositäten, usw. Da bisher aber nur wenige HFO bzw. HCFO kommerziell produziert werden, stehen in der Regel nicht genügend experimentelle Stoffdaten für diese neuen Arbeitsfluide zur Verfügung. Am IfT wurde daher ein molekulares Modell (Force Field) für HFO-Komponenten entwickelt, das die Vorhersage der Stoffeigenschaften dieser neuen Klasse von Arbeitsfluiden mittels molekularer Simulation ermöglicht. Aktuell erfolgt eine Reparametrisierung des Force Fields für die Beschreibung von verschiedenen HCFO-Komponenten.



Da die Optimierung des Force Fields nur anhand von Messdaten für Dampfdrücke und Sättigungsdichten der verschiedenen Komponenten erfolgt, soll im Rahmen dieser studentischen Arbeit untersucht werden, wie gut mit den neuen Force Field Parametern auch Transporteigenschaften der HCFO-Komponenten wiedergegeben werden können. Dazu sollen MD Simulationen in der flüssigen Phase durchgeführt, und Dichten und Viskositäten der HCFO-Komponenten über einen weiten Zustandsbereich ermittelt werden. Diese sollen mit Messdaten oder mit den Korrelationsergebnissen geeigneten Vorhersagemethoden verglichen werden.

Betreuer: PD Dr.-Ing. Gabriele Raabe