

Dirk Schäfer

**Untersuchungen zur Löslichkeit von
Ammoniak und Kohlendioxid in
organisch-wässrigen
Lösungsmittelgemischen**



Cuvillier Verlag Göttingen

Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak und Kohlendioxid in organisch- wässrigen Lösungsmittelgemischen

Dem Fachbereich Maschinenbau
und Verfahrenstechnik
der Universität Kaiserslautern
zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)
vorgelegte Dissertation

vorgelegt von
Dipl.-Ing. Dirk Schäfer
aus Saalfeld

Kaiserslautern 2003

D 386

Bibliografische Information Der Deutschen Bibliothek

Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.ddb.de> abrufbar.

1. Aufl. - Göttingen : Cuvillier, 2004

Zugl.: Kaiserslautern, Univ., Diss., 2003

ISBN 3-86537-015-2

© CUVILLIER VERLAG, Göttingen 2004

Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen

Telefon: 0551-54724-0

Telefax: 0551-54724-21

www.cuvillier.de

Alle Rechte vorbehalten. Ohne ausdrückliche Genehmigung des Verlages ist es nicht gestattet, das Buch oder Teile daraus auf fotomechanischem Weg (Fotokopie, Mikrokopie) zu vervielfältigen.

1. Auflage, 2004

Gedruckt auf säurefreiem Papier

ISBN 3-86537-015-2

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand in der Zeit von 1998 bis 2003 während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter von Herrn Prof. Dr.-Ing. G. Maurer am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik im Fachbereich Maschinenbau und Verfahrenstechnik der Universität Kaiserslautern im Rahmen eines vom Bundesministerium für Bildung und Forschung und der chemischen Industrie geförderten Projektes.

Herr Prof. Maurer hat das Projekt mit großen Engagement verfolgt. Für seine Anregungen und Vorschläge möchte ich mich an dieser Stelle bedanken. Sie haben wesentlich zum Gelingen der Arbeit beigetragen.

Bei Prof. Dr. Kunz bedanke ich mich für die Übernahme des Koreferates, bei Prof. Dr. Steinmann für die Übernahme des Vorsitzes der Prüfungskommission.

Weiter danke ich allen Mitarbeitern des Lehrstuhls für die gute Zusammenarbeit. Besonders hervorheben möchte ich hierbei Frau Monika Reim. Ihr Engagement trug sehr viel zum guten Arbeitsklima am Lehrstuhl bei. Dr. Álvaro Pérez-Salado, Dr. Jingzong Xia, Dr. Michael Jödecke sowie Herr Berthold Mrawek und Herr Roland Sabratzky unterstützten die Arbeit durch ihre Hilfe bei der Erarbeitung des thermodynamischen Modells sowie durch Ratschläge und Mitarbeit im Labor zur Messung der experimentellen Ergebnisse.

Weiterhin bedanke ich mich bei allen Studenten, die im Rahmen von Studienarbeiten, als Praktikanten oder als wissenschaftliche Hilfskräfte einen Beitrag zu der hier vorgestellten Arbeit geleistet haben.

Ganz besonders bedanke ich mich bei meiner Frau Luciana und meinen Eltern. Ohne ihre Unterstützung und ihr Verständnis wäre die Erstellung dieser Arbeit nicht möglich gewesen.

Kaiserslautern, im Februar 2004

Dirk Schäfer

Meiner Frau Luciana und unseren Sohn
in Dankbarkeit gewidmet.

Abstract

In the chemical and in the environmental industries the knowledge of the solubility of gases in liquid solutions is important. The knowledge is necessary for the calculation and optimisation of chemical absorption- and desorption processes with inert or reactive gases (e. g. ammonia, carbon dioxide or sulphur dioxide). The interesting liquid solutions are mixtures containing salt and organic compounds. The correlation of thermodynamic properties of such systems with thermodynamic models is difficult because chemical reactions in the liquid phase lead to ionic species. In previous works (Rumpf (1992), Kurz (1995), Sing (1998)) a thermodynamic model for the solubility of the gases ammonia, carbon dioxide, sulphur dioxide and hydrogen sulphur in aqueous solutions containing salts was developed. This model considers chemical reactions between ammonia and the acid gases in the liquid phase.

The aim of the present work is to extend this thermodynamic model to calculate the solubility of such gases in mixtures of water and an organic solvent.

There are only few methods in literature discussing the phase equilibrium of such complex systems. Therefore, the present work consists of two parts. In the first part the experimental basis is extended and in the second part a thermodynamic model is developed and tested.

In the experimental part the vapour liquid equilibrium of the systems: ammonia + methanol + water, ammonia + methanol + water + salt, carbon dioxide + ammonia + methanol + water, carbon dioxide + ammonia + methanol + water + salt and ammonia + phenol + water was investigated at temperatures of 40, 80 and 120 °C. Sodium chloride and sodium sulphate were used as salts. The concentration of methanol in water was 5, 25, 50, 75, 95 and 100 mol%. In the investigation of the system carbon dioxide + ammonia + methanol + water the concentration of ammonia was 6 and 12 mol/kg (methanol + water). The maximum pressure in the experimental work was around 5 MPa. The concentration of sodium chloride and sodium sulphate in the liquid solution was between 0.15 and 2 mol/kg (methanol + water). In the investigation of the solubility of ammonia in aqueous salt solutions the concentration of ammonia in the liquid solvent was 6 mol/kg (methanol + water).

The experimental part of the work was performed with two equipments, both realizing the analytical method. One equipment had been already used in previous works (Kurz (1995), Sing (1998)), whereas the other one was firstly used here. The main part of the newly used equipment is a 2 dm³ thermostated chrome-vanadium steel cell. The aqueous-organic solution and the gases ammonia and carbon dioxide were weighted into the cell. After reaching thermodynamic equilibrium, temperature, pressure, the level of the liquid and the composition of the vapour phase were determined. The analysis of the vapour phase was done by gas

chromatography. The resulting data were used in mass balances to calculate the composition of the liquid phase.

For the measurements of the simultaneous solubility of ammonia and carbon dioxide in aqueous, salt-containing solutions of methanol it was necessary to determine first the solubility of the salts in mixtures of methanol and water. This was done by an optical as well as a titrimetrical method.

The system phenol + water reveals a liquid-liquid solubility gap at low temperature. The experimental equipment is not suited to investigate a vapour-liquid-liquid equilibrium. Therefore only the solubility of ammonia in phenol + water mixtures on the water rich side, outside the liquid-liquid solubility gap was measured. The concentration of phenol was 1, 2, 3 and 6 mol/kg water, respectively. The maximum concentration of ammonia was 20 mol/kg water and the maximum pressure in those experiments was 1 MPa.

Over 700 equilibrium points were measured in the present work.

When only ammonia is dissolved in the liquid mixtures the pressure almost linearly increases with increasing molality of ammonia. Ammonia is more soluble in mixtures with phenol than in mixtures with methanol. The highest pressure was observed when pure methanol was used as solvent.

The results for the simultaneous solubility of ammonia and carbon dioxide in aqueous solutions of methanol reveal the same characteristics as the results for the solubility of these gases in water, as long as the methanol concentration is small. I.e., adding carbon dioxide to an ammoniacal solution of (water + methanol + salt) at first results in a decrease of the pressure (as volatile ammonium is converted to involatile ions in chemical reactions which also convert carbon dioxide) and later (when nearly all ammonia has been spent in the chemical reactions) the pressure increases (as the carbon dioxide has to be dissolved physically in an aqueous, ionic solution of methanol). However, with increasing methanol concentration in the solvent mixture, the influence of the chemical reactions decreases and adding carbon dioxide to an ammoniacal solution results in an increase of the pressure.

In the theoretical part of the present work Pitzer's model for the excess enthalpy of aqueous ionic liquid mixtures is extended to organic components.

As the model of Pitzer is an osmotic virial equation it can only be used as long the solvent component is not changed, i.e. all additional components have to be treated as solutes. Pitzer's model as developed for the solvent water can be extended to give good results also for aqueous solutions of methanol, but only at low methanol concentrations. In the present work good results could be achieved for aqueous solutions with 5 mole percent of methanol. But the model failed when it was applied to describe the experimental data for higher methanol concentrations in the liquid solvent. The parameters of the Pitzer model for aqueous solutions

of ammonia, carbon dioxide, sodium chloride and sodium sulphate (including also the parameters for interactions with species resulting from the aqueous phase chemical reactions) were taken from Lichtfers (2000). The parameters for interactions between dissolved methanol molecules, methanol and sodium chloride and methanol and sodium sulphate were taken from Jödecke (2003). The properties of the vapour phase were calculated with the virial equation of state truncated after the second virial coefficient. Second virial coefficients were calculated using the method of Hayden and O'Connell (1975). With these parameters a good prediction of the solubility of ammonia in aqueous solution (salt-free and salt containing) of methanol as well as of the simultaneous solubility of carbon dioxide + ammonia in such solutions (with a methanol concentration of 5 mole percent in the liquid solvent) was achieved.

The solubility of ammonia in aqueous solution of phenol was described following the same scheme (solvent: water, solutes: ammonia and phenol). All additional necessary interaction parameters were determined using experimental liquid-liquid equilibrium data from Campbell (1937), Fenby et al. (1983), Rothmund (1898) and Zhuravlev (1947) and the experimental results of the present work. With these interaction parameters a good agreement between calculated and experimental data for the vapour-liquid equilibrium in the system ammonia + phenol + water was achieved.

As Pitzer's model is not able to account for large variations in the properties of the solvent (e.g. when the solvent varies from pure water to pure methanol) another model for the excess Gibbs energy of the liquid phase was tested. That model combines the UNIQUAC equation of Prausnitz and Abrams for non electrolyte solutions with the Debye- Hückel- equation for highly diluted electrolyte solutions. The model was used to describe the solubility of ammonia in aqueous solutions of methanol (in this case the presence of electrolytes is neglected) and to describe the simultaneous solubility of ammonia and carbon dioxide in aqueous solutions of methanol (from pure water to pure methanol).

UNIQUAC surface and volume parameters were calculated according to Abrams and Prausnitz (1975) using data from Marcus (1997). UNIQUAC interaction parameters were fitted to experimental data from the present work (systems ammonia + methanol + water, carbon dioxide + ammonia + methanol + water) and from the literature (methanol + water: Albert et al. (1996), Bao et al. (1995), Bredig et al. (1927), Broul et al. (1969), Butler et al. (1933), Dulitskaya (1945), Grisworld et al. (1952), Hall et al. (1979), Kooner et al. (1980), Kurihara et al. (1995), McGlashan et al. (1976), Ratcliff et al. (1969) and Reamer et al. (1952); ammonia + water, ammonia + carbon dioxide + water: Müller (1983), Göppert (1985), Kurz (1995)).

The properties of the vapour phase (i.e. the fugacity coefficients) were again described by a virial equation of state. The model requires 40 interaction parameters, most of them depend on temperature. A good agreement between experimental and calculated data for the investigated vapour-liquid equilibrium was achieved.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	1
2 Thermodynamische Grundlagen	3
2.1 Simultane Löslichkeit von Ammoniak und Kohlendioxid in Wasser	3
2.2 Modellierung der Phasengleichgewichte	6
2.2.1 Phasengleichgewichtsbedingungen	6
2.2.2 Normierung der chemischen Potentiale in verschiedenen Phasen	7
2.2.3 Auswertung der Phasengleichgewichtsbedingungen	9
2.2.4 Das System Ammoniak + Kohlendioxid + Wasser + Methanol	11
2.3 Thermodynamische Ansätze	14
2.3.1 Elektrolyt-UNIQUAC-Modell	14
2.3.2 Berechnung von Aktivitätskoeffizienten bzw. Aktivitäten	16
2.3.3 Berechnung der Fugazitätskoeffizienten	17
2.3.4 Bestimmung der Henry-Konstanten und der partiellen molaren Volumina	18
2.3.5 Bestimmung der chemischen Gleichgewichtskonstanten	18
2.3.6 Bestimmung der Löslichkeitsprodukte	19
3 Experimentelle Untersuchungen	20
3.1 Messprinzip	20
3.2 Phasengleichgewichtsapparatur	20
3.2.1 Aufbau	20
3.2.2 Druckmessung	23
3.2.3 Temperaturmessung	23
3.2.4 Bestimmung des Gasphasenvolumens	23
3.2.5 Bestimmung der Zusammensetzung der Gasphase	23
3.3 Versuchsdurchführung	27
3.4 Auswertung der Versuche	29
3.5 Untersuchte Systeme	31
3.6 Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in organisch-wässrigen Lösungen	35
3.6.1 Löslichkeit von Ammoniak in Wasser	35
3.6.1.1 Ergebnisse	35
3.6.2 Löslichkeit von Ammoniak in Methanol + Wasser - Gemischen	36
3.6.2.1 Ergebnisse	37
3.6.3 Löslichkeit von Ammoniak in Methanol + Wasser + Salz - Lösungen	39

3.6.3.1 Ergebnisse	39
3.6.4 Löslichkeit von Ammoniak in Phenol + Wasser - Gemischen	41
3.6.4.1 Ergebnisse	42
3.7 Untersuchungen zur simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in organisch-wässrigen salzhaltigen Lösungen	44
3.7.1 Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser	44
3.7.1.1 Ergebnisse	44
3.7.2 Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid in Ammoniak + Methanol + Wasser - Gemischen	45
3.7.2.1 Ergebnisse	46
3.7.3 Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol + Wasser + Salz - Lösungen	47
3.7.3.1 Ergebnisse	48
3.8 Modellierung	50
3.8.1 Modellierung der Phasengleichgewichte für die Systeme Methanol + Wasser, Ammoniak + Methanol + Wasser und Kohlendioxid + Methanol + Wasser	50
3.8.2 Modellierung der simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser	53
3.8.3 Modellierung der Phasengleichgewichte für das System Kohlendioxid + Ammoniak + Methanol + Wasser	58
3.8.4 Modellierung der Phasengleichgewichte für Systeme Wasser + Salz	61
3.9 Modellierung mit dem Pitzer-Modell	63
3.9.1 Modellierung des Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichts methanolhaltiger Systeme mit dem Modell von Pitzer	63
3.9.2 Modellierung des Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichts und Flüssig-flüssig Gleichgewichts phenolhaltiger Systeme mit dem Modell nach Pitzer	68
4 Zusammenfassung	71
5 Literatur	74
Anhang	79
A 1 Ergänzung zur Modellierung	79
A 1.1 Berechnung der im Debye-Hückel-Term verwendeten Größen	79
A 1.2 Dielektrizitätskonstante von Wasser	79
A 1.3 Dampfdruck und Siededichte von reinem Wasser	80
A 1.4 Dampfdruck und Siededichte von reinem Methanol	81
A 1.5 Henry-Konstanten	81
A 1.6 Partielle molare Volumina	82
A 1.7 Thermodynamische Gleichgewichtskonstanten	82

A 1.8	Bestimmung des Löslichkeitsproduktes	83
A 1.9	Volumen- und Oberflächenparameter im UNIQUAC Modell	83
A 1.10	Wechselwirkungsparameter des UNIQUAC Modells für die Systeme Methanol + Wasser, Ammoniak + Wasser, Ammoniak + Methanol und Ammoniak + Methanol + Wasser sowie Kohlendioxid + Wasser, Kohlendioxid + Methanol und Kohlendioxid + Methanol + Wasser	85
A 1.11	Wechselwirkungsparameter des UNIQUAC Modells für das System Kohlendioxid + Ammoniak + Wasser	85
A 1.12	Wechselwirkungsparameter des UNIQUAC Modells für das System Kohlendioxid + Ammoniak + Methanol + Wasser	86
A 1.13	Parameter des G^E -Ansatz nach Pitzer für Wechselwirkungen mit Methanol	87
A 1.14	Wechselwirkungsparameter, Henrykonstanten und Reaktionskonstanten für das Pitzer-Modell mit Phenol	90
A 1.15	Virialkoeffizienten	91
A 2	Berechnung der Unsicherheiten der experimentellen Untersuchungen	93
A 3	Vergleich experimenteller und Literaturdaten mit dem UNIQUAC-Modell nicht reagierender Systeme	96
A 4	Vergleich experimenteller und Literaturdaten mit dem UNIQUAC-Modell reagierender Systeme	97
A 5	Vergleich experimenteller und Literaturdaten mit dem Pitzer-Modell	97
A 6	Löslichkeit von Ammoniak in organisch-wässrig-salzhaltigen Lösungsmittelgemischen: Tabellen der experimentellen Ergebnisse	151
A 7	Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrig-salzhaltigen Methanollösungen: Tabellen der experimentellen Ergebnisse	168
A 8	System Kohlendioxid + Ammoniak + Methanol + Wasser: Vergleich zwischen Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC-Modell)	184
A 9	Systeme Kohlendioxid + Ammoniak + Methanol + Wasser + Natriumsulfat und Ammoniak + Phenol + Wasser: Vergleich zwischen Mess- und Rechenwerten (Pitzer-Modell)	211
A 10	Löslichkeitsgrenze von Salzen in wässrigen Methanollösungen	218
B 1	Liste der Studienarbeiter	221

Formelzeichen, Indizes, Abkürzungen und Definitionen

Lateinische Buchstaben

A_x	Debye-Hückel-Parameter für osmotische Koeffizienten
a_i	Aktivität der Komponente i
a	Wechselwirkungsparameter für UNIQUAC-Modell
B_{ij}	zweiter Virialkoeffizient
B_{mix}	zweiter Virialkoeffizient der Mischung
b	Wechselwirkungsparameter für UNIQUAC-Modell
b	Konstante im erweiterten Debye-Hückel-Ansatz
e	Elementarladung
F_i	Peakfläche der Komponente i
f_i	Fugazität der Komponente i
$f(x)$	Funktion der Variablen x
G^E	Gibbs'sche Exzessenthalpie
$H_{i,W}^{(x)}$	Henry-Konstante für die Löslichkeit eines Gases i in Wasser bzgl. der Molenbruchskala
I	Ionenstärke
k	Boltzmannkonstante
K_i	Löslichkeitskonstante eines Salzes bzgl. der Molenbruchskala
K_R	Gleichgewichtskonstante der chemischen Reaktion R
M_i	Molmasse der Komponente i
M^+	Kation
\tilde{m}_i	Masse der Komponente i
m_i	Molalität der Komponente i
\bar{m}_i	pauschale Molalität der Komponente i
N	Anzahl der Messpunkte bzw. Komponenten
N_A	Avogadrozahl
n_i	Molzahl der Komponente i
\bar{n}_i	pauschale Molzahl
p	Gesamtdruck
p_i	Partialdruck der Komponente i

p_W^S	Dampfdruck von Wasser
p^θ	Standarddruck (0.1 MPa)
q_i	van der Waals'sche Oberfläche
R	chemische Reaktion
R_i	Gaskonstante der Komponente i
r_i	van der Waalsches Eigenvolumen
ra_i	Ionenradius des Ions i
T	Temperatur
V	Volumen
v	spezifische Volumen
X^-	Anion
x_i	Molenbruch der Komponente i in der flüssigen Phase
y_i	Molenbruch der Komponente i in der Gasphase
Z_{mix}	Realgasfaktor einer Gasmischung
z	Koordinationszahl im UNIQUAC- Ansatz
z_i	Ladungszahl der Komponente i

Griechische Buchstaben

α_{ij}	Kalibrierkonstante des Gaschromatographen
$\beta_{i,j}^{(0)}$	binärer Wechselwirkungsparameter für Pitzeransatz
$\gamma_i^{(x)}$	Aktivitätskoeffizient der Komponente i bzgl. der Molenbruchskala normiert
Δ	Differenz
ε_i	Dielektrizitätskonstante der Komponente i
θ_i	Oberflächenanteil der Komponente i
θ	reduzierte Temperatur
ϕ_i	Eigenvolumenanteil der Komponente i
Ψ_{ij}	binärer Wechselwirkungsparameter im UNIQUAC-Modell
φ_i	Fugazitätskoeffizient der Komponente i
ρ	spezifische Dichte
τ_{ijk}	ternärer Wechselwirkungsparameter im Pitzeransatz

π	Kreiszahl
μ_i	chemisches Potential der Komponente i
μ_i^E	Exzessanteil des chemischen Potentials der Komponente i
μ_i^0	chemisches Potential einer Komponente im Referenzzustand
$\nu_{i,R}$	stöchiometrischer Faktor der Komponente i bei Reaktion R
\mathfrak{R}	allgemeine Gaskonstante
ρ_i	molare Dichte der Komponente i
∞	unendlich verdünnt

Abkürzungen und Indizes

aq	in wässriger Lösung
C	Kombinatorischer Anteil im UNIQUAC-Modell
c	kritisch
GPV	Gasprobenventil
i,j,k	Komponenten
liq	flüssig
M	Methanol
(M+W)	Lösungsmittelgemisch aus Methanol und Wasser
R	Residualer Anteil im UNIQUAC-Modell
ref	Referenzzustand
solid	fest
VLE	Gas-Flüssigkeits-Gleichgewicht
VLSE	Gas-Flüssigkeits-Feststoff-Gleichgewicht
vap	gasförmig
W	Wasser
'','''	Kennzeichnung der verschiedenen Phasen (fest, flüssig, gasförmig)

1 Einleitung

In der chemischen Industrie und in der Umwelttechnik sind zur Auslegung und Optimierung chemischer Absorptions- und Desorptionsanlagen – wie etwa Gaswäschen – Kenntnisse über die Löslichkeit inerte aber auch reagierender Gase (z. B. Ammoniak, Kohlendioxid, Schwefeldioxid, Schwefelwasserstoff) in wässrigen, oftmals auch Salze und organische Komponenten enthaltenden Lösungen erforderlich. Die Korrelation und Vorhersage derartiger Phasengleichgewichte wird durch die in der flüssigen Phase ablaufenden chemischen Reaktionen und die dabei auftretenden ionischen Spezies erschwert.

Zur Beschreibung von Phasengleichgewichten in derart komplexen Systemen existieren wenige Methoden. Zum Testen und Weiterentwickeln von Modellen ist eine breite experimentelle Datenbasis erforderlich, die auch Untersuchungen an Randsystemen einschließen muss.

In früheren Arbeiten (Rumpf (1992), Kurz (1994), Sing (1998)) wurde ein thermodynamisches Modell für die Löslichkeit der Gase Ammoniak, Kohlendioxid, Schwefeldioxid und Schwefelwasserstoff in wässrigen, auch salzhaltigen Lösungen entwickelt, wobei chemische Reaktionen zwischen Ammoniak und den sauren Gasen berücksichtigt wurden. Dieses Modell wird in der vorliegenden Arbeit (und in der Dissertation von Jödecke (2003)) auf wässrige Lösungen mit organischen Komponenten d. h. auf wässrig-organische Lösungsmittelgemische erweitert. Dabei wird der gesamte Konzentrationsbereich von reinem Wasser bis zum reinen organischen Lösungsmittel betrachtet.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden die Löslichkeit von Ammoniak und die simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol + Wasser - Gemischen von reinem Wasser bis zu reinem Methanol, auch bei Anwesenheit der Salze Natriumchlorid bzw. Natriumsulfat, sowie die Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Phenol experimentell bestimmt. Die Löslichkeit von Kohlendioxid in den organisch-wässrigen und salzhaltigen Mischungen wurde in einer parallel durchgeführten Arbeit von Jödecke (2003) behandelt.

Das in den früheren Arbeiten zur Beschreibung der Eigenschaften der flüssigen Mischung benutzte Modell von Pitzer bietet nicht die Möglichkeit, Gaslöslichkeiten in einem Lösungsmittelgemisch über den gesamten Konzentrationsbereich zu beschreiben. Eine organische Komponente kann nur als zusätzlich gelöster Stoff d. h. in relativ geringer Konzentration, betrachtet werden.

Zur Beschreibung der thermodynamischen Eigenschaften des Lösungsmittelgemisches wurde deshalb zunächst der mit einem Debye-Hückel-Term modifizierte UNIQUAC-Ansatz von Thomsen und Rasmussen (1999) verwendet. Aus den Arbeiten von Thomsen und Rasmussen, die sich überwiegend mit Fest-Flüssig-Gleichgewichten beschäftigen, sind für einige der in der vorliegenden Arbeit untersuchten Systeme vom Typ Gas + Wasser + organisches Lösungsmittel + Salz die erforderlichen Modellparameter bekannt. Allerdings zeigte sich beim Vergleich der Rechenwerte mit den in der vorliegenden Arbeit experimentell bestimmten Phasengleichgewichten nur eine vergleichsweise schlechte Übereinstimmung. Deshalb wurde ein neues Elektrolyt-UNIQUAC-Modell entwickelt und durch Anpassungen an die experimentellen Ergebnisse der vorliegenden Arbeit sowie an Literaturwerte für die hier interessierenden Systeme parametrisiert. Mit diesem Modell ist es möglich, die Druckverläufe sowohl beim Lösen der einzelnen Gase Kohlendioxid und Ammoniak als auch bei der gleichzeitigen Lösung beider Gase zu beschreiben.

2 Thermodynamische Grundlagen

2.1 Simultane Löslichkeit von Ammoniak und Kohlendioxid in Wasser

Die beim simultanen Lösen von Ammoniak und Kohlendioxid in wässrigen Lösungen auftretenden Phänomene werden anhand der Abbildung 2.1 erörtert. Aufgetragen sind der Gesamtdruck sowie die Partialdrücke (bei konstanter Temperatur und einem konstanten pauschalen Ammoniakgehalt in der flüssigen Phase) über der Molalität des zusätzlich gelösten Gases. Ausgehend vom Dampfdruck von reinem Wasser, p_W^S , erreicht man durch die Zugabe von Ammoniak den Druck des binären Randsystems Ammoniak + Wasser. Fügt man dieser Mischung ein inertes Gas hinzu, so beobachtet man einen Anstieg des Gesamtdruckes. Mit zunehmender Molalität des inerten Gases steigt dessen Partialdruck an. Die Partialdrücke von Ammoniak und Wasser bleiben nahezu unverändert. Wird statt des inerten Gases ein saures Gas, z. B. Kohlendioxid, in der wässrigen ammoniakalischen Lösung gelöst, so kommt es zu einem anderen Verhalten: Ausgehend vom Druck des binären Randsystems Ammoniak + Wasser nimmt der Gesamtdruck mit steigender Molalität des sauren Gases zunächst ab und steigt nach Durchlaufen eines Minimums wieder an. Wird (bei hoher Konzentration des sauren Gases) die Löslichkeitsgrenze eines Salzes überschritten, fällt dieses Salz als dritte, feste Phase aus (z. B. NH_4HCO_3 im System Ammoniak + Kohlendioxid + Wasser, vgl. Kurz (1994); Kurz et al. (1996)).

Im Folgenden wird zunächst das System Ammoniak + Kohlendioxid + Wasser betrachtet. Die Abbildung 2.2 zeigt ein Schema des Dampf – Flüssigkeit – Feststoff – Gleichgewichts in Anwesenheit des organischen Lösungsmittels Methanol. Die Gasphase (") enthält Ammoniak, Kohlendioxid, Methanol und Wasser, die flüssige Phase (') darüber hinaus Reaktionsprodukte, da Ammoniak und Kohlendioxid nicht nur physikalisch, sondern auch chemisch gelöst vorliegen (wegen chemischer Reaktionen der Base Ammoniak mit der Säure Kohlendioxid).

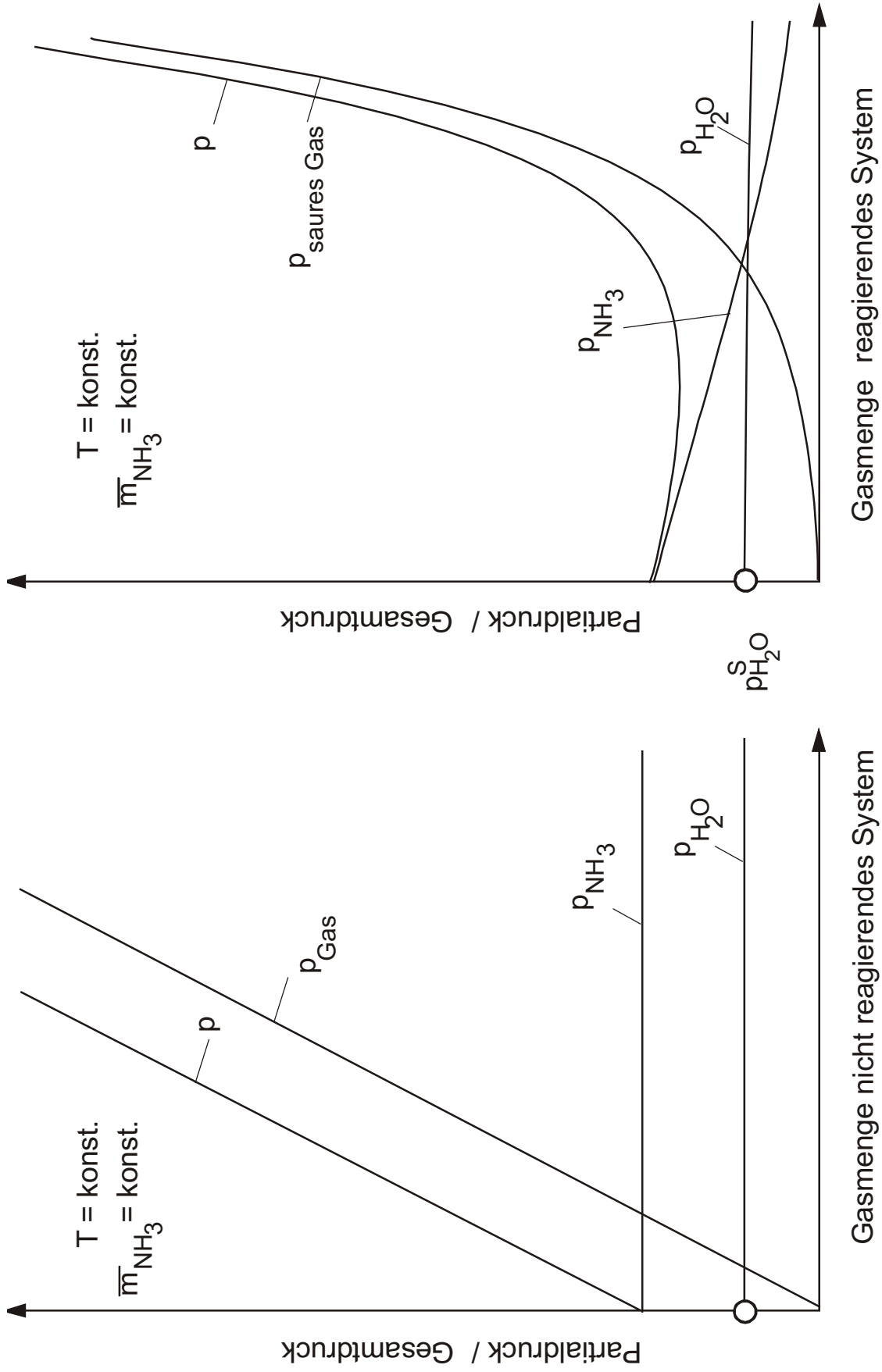


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der Druckverläufe beim Lösen eines inerten Gases (links) bzw. sauren Gases (rechts) in einer wässrigen ammoniakalischen Lösung bei konstanter Temperatur und konstanten Ammoniakgehalt.

Die Modellierung des Phasengleichgewichts derart komplexer Systeme erfordert neben der Berücksichtigung der physikalischen Gleichgewichte zwischen Gas- und Flüssigphase (senkrechte Pfeile) auch die Berücksichtigung der überlagerten chemischen Gleichgewichte in der flüssigen Phase (waagrechte Pfeile). Bei der Modellierung werden fünf chemische Reaktionen berücksichtigt: Die Autoprotolyse von Wasser (R1), die Protolyse von Ammoniak (R2), die Bildung und Dissoziation des Hydrogencarbonats (R3) + (R4) und die Bildung von Carbamat (R5) aus Ammoniak und Hydrogencarbonat.

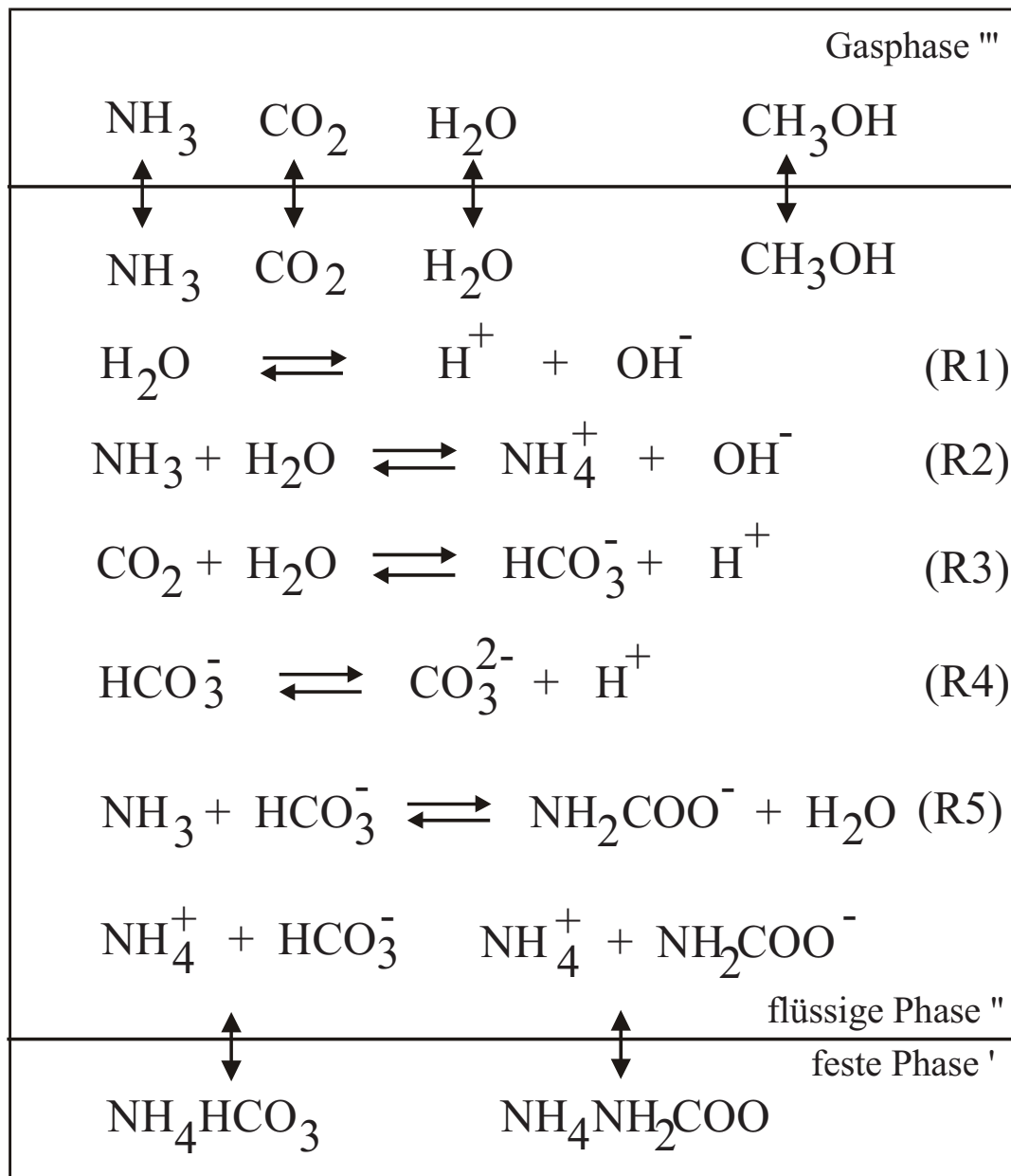


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung des Dampf-Flüssigkeits-Feststoffe-Gleichgewichts im System Ammoniak + Kohlendioxid + Wasser + Methanol

Aus den Ausgangsstoffen Ammoniak, Kohlendioxid und Wasser resultieren in der flüssigen Phase sechs ionische Spezies. In der Abbildung 2.2 ist weiterhin angenommen, dass bei hohen Ammoniak- und Kohlendioxidmolalitäten, aber auch bei hohen Methanolkonzentrationen Ammoniumhydrogencarbonat bzw. Ammoniumcarbamat als Feststoff ausfallen. Mit den erwähnten Reaktionen sind die in Abbildung 2.1 dargestellten Partialdruckverläufe zu erklären: Durch Zugabe von Kohlendioxid wird molekular gelöstes, flüchtiges Ammoniak in ionische, nichtflüchtige Spezies überführt, wodurch der Ammoniakpartialdruck sinkt. Gleichzeitig bleibt der Partialdruck von Kohlendioxid verschwindend gering, da Kohlendioxid zunächst fast ausschließlich in ionischer, nichtflüchtiger Form in der flüssigen Phase gelöst wird. Erst wenn nahezu alles Ammoniak zu ionischen Spezies abreagiert ist, wird Kohlendioxid auch in molekularer Form in der „salzhaltigen“ wässrig-organischen Lösung gelöst und der Partialdruck steigt an. Die Partialdrücke von Wasser und Methanol werden von diesen Vorgängen wenig beeinflusst. Wird die Löslichkeitsgrenze von Ammoniumhydrogencarbonat bzw. Ammoniumcarbamat überschritten, dann ändert sich die Steigung insbesondere im Verlauf der Partialdrücke von Kohlendioxid und Ammoniak und damit auch im Gesamtdruck.

2.2 Modellierung der Phasengleichgewichte

Die Beschreibung der Modellierung der Phasengleichgewichte lehnt sich an die Dissertation von Sing (1998) an.

2.2.1 Phasengleichgewichtsbedingungen

Koexistieren drei Phasen (*fest* : x' , *flüssig* : x'' und *gasförmig* : x''') im thermodynamischen Gleichgewicht, so müssen die Bedingungen für das thermische, mechanische und stoffliche Gleichgewicht erfüllt sein:

$$\text{thermisches Gleichgewicht: } T' = T'' = T''' \quad (2.1)$$

$$\text{mechanisches Gleichgewicht: } p' = p'' = p''' \quad (2.2)$$

$$\text{stoffliches Gleichgewicht: } \mu'_i = \mu''_i = \mu'''_i \quad (2.3)$$

Laufen darüber hinaus chemische Reaktionen in der flüssigen Phase " ab, so gilt für jede Reaktion R als Bedingung für das chemische Gleichgewicht:

$$\sum \nu_{i,R} \cdot \mu_i'' = 0 \quad (2.4)$$

$\nu_{i,R}$ sind die stöchiometrischen Faktoren der Reaktion R ($\nu_{i,R} > 0$ für Produkte, $\nu_{i,R} < 0$ für Edukte).

2.2.2 Normierung der chemischen Potentiale in verschiedenen Phasen

Das chemische Potential der Komponente i wird als Summe aus zwei Anteilen dargestellt:

$$\mu_i(T, p, x_j) = \mu_i^\circ(T, p^\circ) + R \cdot T \cdot \ln a_i \quad (2.5)$$

$\mu_i^\circ(T, p)$ ist das chemische Potential der Komponente i im Referenzzustand und a_i die Aktivität der Komponente i .

Für gasförmige Komponenten wählt man üblicherweise als Referenzzustand das reine ideale Gas bei der Temperatur T und beim Standarddruck $p^\circ = 0.1$ MPa. Dann erhält man mit Hilfe der Fugazität f_i''' bzw. dem Fugazitätskoeffizienten ϕ_i''' und dem Partialdruck $y_i \cdot p$ der Komponente i :

$$\mu_i(T, p, y_i) = \mu_i^\circ(T, p)_{\text{id.Gas}} + R \cdot T \cdot \ln \left(\frac{f_i'''}{p^\circ} \right) \quad (2.6)$$

$$\text{mit } f_i = p \cdot y_i \cdot \phi_i''' .$$

Als Referenzzustand für einen Feststoff i wird üblicherweise der reine, feste Stoff bei der Temperatur T und beim Standarddruck $p^\circ = 0.1$ MPa verwendet:

$$\mu_i' = \mu_i^{\text{rein}}(T, p^\circ)_{\text{solid}} + \Delta\mu_i(T, p^\circ \rightarrow p)_{\text{solid}} \quad (2.7)$$

$$\text{wobei } \Delta\mu_i(T, p^\circ \rightarrow p)_{\text{solid}} = \int_{p^\circ}^p v_{i,\text{solid}}^{\text{rein}}(T, p) \cdot dp \approx 0 \quad (2.8)$$

angenommen werden kann, da das molare Volumen $v_{i,\text{solid}}^{\text{rein}}$ klein ist und damit für nicht allzu hohe Drücke $v_{i,\text{solid}}^{\text{rein}} \cdot p$ nur einen kleinen Korrekturbeitrag liefert.

Nimmt man an, dass der Feststoff in reiner Form ausfällt, gilt $a_i = 1$.

Das chemische Potential einer im Lösungsmittelgemisch gelösten Komponente (ionisch bzw. ungeladen) wird entsprechend dem Henry'schen Gesetz normiert, wobei in der vorliegenden Arbeit im Unterschied zu Sing (1998) als Konzentrationsmaß der Molanteil verwendet wird:

$$\mu_i'' = \mu_{i,W}^{\infty,(x)}(T, p) + R \cdot T \cdot \ln a_i'' \quad (2.9)$$

$\mu_{i,W}^{\infty,(x)}(T, p)$ ist das chemische Potential der Komponente i in einem hypothetischen Referenzzustand bei der Temperatur T und dem Druck p der Mischung. In diesem Referenzzustand liegt die Komponente bei der Standardkonzentration $x_i = 1$ (d. h. rein) vor und erfährt die gleichen Wechselwirkungen wie in unendlicher Verdünnung ($x_i \rightarrow 0$):

$$\mu_{i,W}^{\infty,(x)}(T, p) = (T, p, \underset{\text{Konzentration}}{x_i \rightarrow 1}, \underset{\text{Wechselwirkung}}{x_i \rightarrow 0 \text{ in Wasser}}) \quad (2.10)$$

Die Aktivität der gelösten Komponente i in der flüssigen Phase wird als Produkt aus Konzentration (Molanteil) und Aktivitätskoeffizient ausgedrückt:

$$a_i'' = x_i \cdot \gamma_i^{(x)} \quad (2.11)$$

Das chemische Potential der Lösungsmittelkomponenten Wasser und Methanol wird entsprechend dem Raoult'schen Gesetz normiert; d. h. als Referenzzustand wird reines flüssiges Wasser bzw. reines flüssiges Methanol bei der Temperatur T und dem Druck p der Mischung gewählt:

$$\mu_i'' = \mu_i^{\text{rein}}(T, p)_{\text{liq.}} + R \cdot T \cdot \ln a_i \quad i = W, M \quad (2.12)$$

2.2.3 Auswertung der Phasengleichgewichtsbedingungen

Das chemische Potential einer reinen flüssigen Komponente im Referenzzustand, $\mu_i^{rein}(T, p)_{liq.}$, wird ausgehend vom chemischen Potential des reinen Dampfes im Zustand des idealen Gases bei T und p^\ominus berechnet:

$$\mu_i^{rein}(T, p)_{liq.} = \mu_i^{rein}(T, p^\ominus)_{id.Gas} + R \cdot T \cdot \ln \left(\frac{p_i^S(T) \cdot \phi_i^S(T)}{p^\ominus} \right) + \int_{p_i^S}^p v_{i,liq}^{rein}(T, p) \cdot dp. \quad (2.13)$$

Als Bedingung für das Dampf-Flüssigkeits-Phasengleichgewicht folgt aus den Gleichungen (2.3), (2.12) und (2.13) das verallgemeinerte Raoult'sche Gesetz:

$$p_i^S(T) \cdot \phi_i^S(T) \cdot \exp \left(\int_{p_i^S}^p \frac{v_{i,liq}^{rein}(T, p)_{liq.}}{R \cdot T} \cdot dp \right) \cdot a_i'' = p \cdot y_i \cdot \phi_i''' \quad (2.14)$$

Darin wird die Exponentialfunktion als Poynting-Korrektur bezeichnet. $v_{i,liq}^{rein}(T, p)_{liq.}$ ist das molare Volumen des reinen flüssigen Lösungsmittels, das bei nicht allzu hohen Drücken durch das molare Volumen von reinem flüssigem Lösungsmittel im Siedezustand, $v_{i,liq}^{rein}(T, p^S)_{liq.}$ ersetzt werden darf:

$$p_i^S(T) \cdot \phi_i^S(T) \cdot \exp \left(\frac{v_{i,liq}^{rein}(T, p^S)_{liq.} \cdot (p - p_i^S(T))}{R \cdot T} \right) \cdot a_i = p \cdot y_i \cdot \phi_i''' \quad (2.15)$$

In der vorliegenden Arbeit wird als Lösungsmittel nicht nur Wasser, sondern ein Lösungsmittelgemisch aus Wasser und einer organischen Komponente (Methanol) betrachtet. Das Raoult'sche Gesetz wurde für jede Lösungsmittelkomponente ausgewertet.

Für das Dampf-Flüssigkeitsgleichgewicht eines im Lösungsmittel molekular gelösten Stoffes i folgt aus den Gleichungen (2.3) und (2.9) bis (2.11):

$$\mu_i^{rein}(T, p^\ominus)_{id.Gas} + R \cdot T \cdot \ln \left(\frac{y_i \cdot p \cdot \phi_i'''}{p^\ominus} \right) = \mu_{i,W}^{\infty,(x)}(T, p) + R \cdot T \cdot \ln(x_i \cdot \gamma_i^{(x)}). \quad (2.16)$$

Führt man unter Verwendung der Molenbruchskala die Henry'sche Konstante $H_{i,W}^{(x)}(T, p)$ für die Löslichkeit eines Stoffes i in reinem Wasser ein:

$$H_{i,W}^{(x)}(T, p) = p^\theta \cdot \exp\left(\frac{\mu_{i,W}^{\infty,(x)}(T, p_W^S) - \mu_i^{rein}(T, p^\theta)_{id.Gas}}{R \cdot T}\right), \quad (2.17)$$

so folgt aus Gleichung (2.16) das sogenannte verallgemeinerte Henry'sche Gesetz:

$$H_{i,W}^{(x)}(T, p) \cdot x_i \cdot \gamma_i^{(x)} = y_i \cdot p \cdot \phi_i''' \quad (2.18)$$

Die Henry'sche Konstante $H_{i,W}^{(x)}(T, p)$ für die Löslichkeit eines Stoffes i in reinem Wasser kann in einen temperaturabhängigen und einen druckabhängigen Anteil aufgespalten werden:

$$H_{i,W}^{(x)}(T, p) = H_{i,W}^{(x)}(T) \cdot \exp\left(\int_{p_W^S}^p \frac{v_{i,W}^{\infty}(T, p)}{R \cdot T} \cdot dp\right), \quad (2.19)$$

wobei die Exponentialfunktion als Krichesky-Kasarnovsky-Korrektur bezeichnet wird.

Damit folgt aus Gleichung (2.18)

$$H_{i,W}^{(x)}(T) \cdot \exp\left(\int_{p_W^S}^p \frac{v_{i,W}^{\infty}(T, p)}{R \cdot T} \cdot dp\right) \cdot x_i \cdot \gamma_i^{(x)} = y_i \cdot p \cdot \phi_i''' \quad (2.20)$$

In Analogie zum Raoult'schen Gesetz (2.14) kann $H_{i,W}^{(x)}(T)$ als Dampfdruck der pseudoreinen Komponente i (vgl. Gleichung 2.10) interpretiert werden. $v_{i,W}^{\infty}(T, p)$ ist das partielle molare Volumen des gelösten Stoffes i in unendlicher Verdünnung in Wasser. p_W^S ist der Dampfdruck von reinem Wasser bei der Temperatur T .

Für das chemische Gleichgewicht einer Reaktion R folgt mit den Gleichungen (2.4) und (2.5):

$$\sum_{i=1}^N \nu_{i,R} \cdot \left(\mu_i^o(T, p) + R \cdot T \cdot \ln a_i \right) = 0, \quad (2.21)$$

$$\text{bzw.} \quad \sum_{i=1}^N \nu_{i,R} \cdot \mu_i^o(T, p) + R \cdot T \cdot \ln \prod_i a_i^{\nu_{i,R}} = 0 \quad (2.22)$$

Mit der Einführung der chemischen Gleichgewichtskonstanten K_R für die Reaktion R :

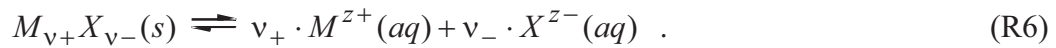
$$K_R(T, p) = \exp\left(\frac{-\sum_i \nu_{i,R} \cdot \mu_i^o(T, p)}{R \cdot T}\right), \quad (2.23)$$

erhält man:

$$K_R(T, p) = \prod_i a_i^{\nu_i, R} \quad (2.24)$$

Die Druckabhängigkeit der Gleichgewichtskonstanten wird in der vorliegenden Arbeit vernachlässigt, da der Einfluss des Druckes auf die Eigenschaften flüssiger Phasen gering ist.

Fällt aus der wässrigen Lösung ein reines Salz aus, so kann man das Fest-Flüssig-Gleichgewicht mit Hilfe des „Löslichkeitsproduktes“ beschreiben. Die in der flüssigen Phase gelösten Kationen M^{Z+} und Anionen X^{Z-} bilden den Feststoff gemäß folgender Beziehung:



Das chemische Potential einer ionischen Spezies ist nach Gleichung (2.9), das des Feststoffs nach Gleichung (2.7) normiert. Daraus folgt:

$$K_{M_{\nu_+} X_{\nu_-}}(T, p) = \exp \left(- \frac{\nu_+ \cdot \mu_{M^{Z+}, aq}^{\infty, (x)}(T, p) + \nu_- \cdot \mu_{X^{Z-}, aq}^{\infty, (x)}(T, p) - \mu_{M_{\nu_+} X_{\nu_-}}^{rein}(T, p)_{solid}}{R \cdot T} \right)$$

$$= \frac{(a_{M^{Z+}})^{\nu_+} \cdot (a_{X^{Z-}})^{\nu_-}}{a_{M_{\nu_+} X_{\nu_-}}} = (a_{M^{Z+}})^{\nu_+} \cdot (a_{X^{Z-}})^{\nu_-} \quad (2.25)$$

Die Größe $K_{M_{\nu_+} X_{\nu_-}}(T, p)$ wird als Löslichkeitsprodukt bezeichnet. In der vorliegenden Arbeit wird, da der Einfluss des Druckes auf das Löslichkeitsprodukt sehr klein ist, die Druckabhängigkeit von $K_{M_{\nu_+} X_{\nu_-}}$ vernachlässigt.

2.2.4 Das System Ammoniak + Kohlendioxid + Wasser + Methanol

Für die in der Abbildung 2.2 angegebenen Reaktionen ergeben sich nach Gleichung (2.24) und mit der gewählten Normierung des chemischen Potentials der ionischen Spezies nach dem Henry'schen Gesetz bezüglich der Molenbruchskala die chemischen Gleichgewichtskonstanten zu:

$$K_{R1}(T) = \frac{a_{H^+} \cdot a_{OH^-}}{a_W} = \frac{x_{H^+} \cdot x_{OH^-} \cdot \gamma_{H^+}^{*(x)} \cdot \gamma_{OH^-}^{*(x)}}{x_W \cdot \gamma_W^{(x)}} \quad (2.26)$$

$$K_{R2}(T) = \frac{a_{NH_4^+} \cdot a_{OH^-}}{a_{NH_3} \cdot a_W} = \frac{x_{NH_4^+} \cdot x_{OH^-}}{x_{NH_3} \cdot x_W} \cdot \frac{\gamma_{NH_4^+}^{*(x)} \cdot \gamma_{OH^-}^{*(x)}}{\gamma_{NH_3}^{*(x)} \cdot \gamma_W^{(x)}} \quad (2.27)$$

$$K_{R3}(T) = \frac{a_{HCO_3^-} \cdot a_{H^+}}{a_{CO_2} \cdot a_W} = \frac{x_{HCO_3^-} \cdot x_{H^+}}{x_{CO_2} \cdot x_W} \cdot \frac{\gamma_{HCO_3^-}^{*(x)} \cdot \gamma_{H^+}^{*(x)}}{\gamma_{CO_2}^{*(x)} \cdot \gamma_W^{(x)}} \quad (2.28)$$

$$K_{R4}(T) = \frac{a_{CO_3^{2-}} \cdot a_{H^+}}{a_{HCO_3^-}} = \frac{x_{CO_3^{2-}} \cdot x_{H^+}}{x_{HCO_3^-}} \cdot \frac{\gamma_{CO_3^{2-}}^{*(x)} \cdot \gamma_{H^+}^{*(x)}}{\gamma_{HCO_3^-}^{*(x)}} \quad (2.29)$$

$$K_{R5}(T) = \frac{a_{NH_2COO^-} \cdot a_W}{a_{NH_3} \cdot a_{HCO_3^-}} = \frac{x_{NH_2COO^-} \cdot x_W}{x_{NH_3} \cdot x_{HCO_3^-}} \cdot \frac{\gamma_{NH_2COO^-}^{*(x)} \cdot \gamma_W^{(x)}}{\gamma_{NH_3}^{*(x)} \cdot \gamma_{HCO_3^-}^{*(x)}} \quad (2.30)$$

Der Ausfall des Salzes Ammoniumhydrogencarbonat NH_4HCO_3 wird durch:

$$K_{NH_4HCO_3}(T) = a_{NH_4^+} \cdot a_{HCO_3^-} \quad (2.31)$$

der Ausfall von Ammoniumcarbammat NH_2COONH_4 durch:

$$K_{NH_2COONH_4}(T) = a_{NH_4^+} \cdot a_{NH_2COO^-} \quad (2.32)$$

berücksichtigt.

Für die Komponenten Ammoniak, Kohlendioxid, Methanol und Wasser folgt damit als Verknüpfung von pauschalen (\bar{n}) und wahren (n) Molzahlen in der flüssigen und festen Phase:

$$\bar{n}_{NH_3} = n''_{NH_3} + n''_{NH_4^+} + n''_{NH_2COO^-} + n'_{NH_4HCO_3} + 2 \cdot n'_{NH_2COONH_4} \quad (2.33)$$

$$\bar{n}_{CO_2} = n''_{CO_2} + n''_{HCO_3^-} + n''_{CO_3^{2-}} + n''_{NH_2COO^-} + n'_{NH_4HCO_3} + n'_{NH_2COONH_4} \quad (2.34)$$

$$\bar{n}_W = n''_W + n''_{OH^-} + n''_{HCO_3^-} + n''_{CO_3^{2-}} + n'_{NH_4HCO_3} \quad (2.35)$$

$$\bar{n}_M = n''_M \quad (2.36)$$

Aus der Elektroneutralitätsbedingung für die flüssige Phase folgt:

$$\sum_i n_i'' \cdot z_i = 0 \quad . \quad (2.37)$$

Mit den Gleichungen 2.26 bis 2.37 wird bei Vorgabe der Temperatur und der pauschalen Molzahlen \bar{n}_{NH_3} , \bar{n}_{CO_2} und \bar{n}_W (bzw. der pauschalen Molalitäten \bar{m}_{NH_3} und \bar{m}_{CO_2}) die Zusammensetzung der flüssigen Phase (n''_{NH_3} , $n''_{NH_4^+}$, $n''_{NH_2COO^-}$, n''_{CO_2} , $n''_{HCO_3^-}$, $n''_{CO_3^{2-}}$, n''_W , n''_{OH^-} , n''_{H^+} , n''_M) und die Menge der ausfallenden Feststoffe ($n'_{NH_4HCO_3}$ und $n'_{NH_2COONH_4}$) berechnet. Aus der Zusammensetzung der flüssigen Phase werden mit Hilfe der Gleichungen 2.15 und 2.20 die Partialdrücke der flüchtigen Komponenten in der Gasphase und der Gesamtdruck berechnet. Zur Berechnung müssen allerdings thermodynamische Größen, wie Gleichgewichtskonstanten, Aktivität- und Fugazitätskoeffizienten u. a. bekannt sein.

2.3 Thermodynamische Ansätze

2.3.1 Elektrolyt-UNIQUAC-Modell

Die Aktivitäten der in der flüssigen Phase vorhandenen Spezies werden mit einem von Abrams und Prausnitz (1975) entwickelten UNIQUAC-Ansatz für die Gibbs'sche Exzessenergie, der von Pérez-Salado (2000) um einen Debye-Hückel-Term erweitert wurde, beschrieben. Dieser Ansatz besteht aus 3 Teilen: einem Debye-Hückel-, einem kombinatorischen und einem residualen Anteil. Ein ähnliches Modell wurde auch von Thomsen und Rasmussen (1999, 2000) zur Beschreibung von Phasengleichgewichten der Systeme Kohlendioxid + Ammoniak + Wasser bzw. Methanol + Wasser + Salz verwendet.

$$\left(\frac{G^E}{n_T \mathfrak{R} T}\right)^* = \left(\frac{G^E}{n_T \mathfrak{R} T}\right)_{DH}^* + \left(\frac{G^E}{n_T \mathfrak{R} T}\right)_C^* + \left(\frac{G^E}{n_T \mathfrak{R} T}\right)_R^* \quad (2.38)$$

Die Konzentrationen werden in diesem Ansatz mit der Molenbruchskala beschrieben. Die chemischen Potentiale von Wasser und Methanol in der flüssigen Phase werden nach Raoult, diejenigen der gelösten Gase und Ionen nach Henry (unendlich verdünnt in reinem Wasser) normiert.

Für den empirisch modifizierten Debye-Hückel-Term gilt:

$$\left(\frac{G^E}{n_T \mathfrak{R} T}\right)_{DH}^* = -\frac{4 A_x I_x}{\rho} \ln(1 + \rho \sqrt{I_x}) \quad (2.39)$$

mit
$$\rho = b \left(\frac{1}{M^*}\right)^{1/2} \quad (2.40)$$

und $b = 2.0 \text{ (mol/kg)}^{-0.5}$.

Die Ionenstärke I_x ist wie folgt definiert:

$$I_x = \frac{1}{2} \sum_i x_i z_i^2 \quad (2.41)$$

A_x ist der Debye-Hückel-Parameter:

$$A_x = \frac{1}{3} \left(\frac{2 \pi N_A d m^\circ}{M^*} \right)^{1/2} \left(\frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 \epsilon k T} \right)^{3/2} \quad (2.42)$$

Seine Druckabhängigkeit wird vernachlässigt (vgl. Rumpf, 1992; Pérez-Salado, 1997). ϵ ist die relative dielektrische Konstante von Wasser (vgl. Anhang A.1.2). M^* ist die Molmasse des Lösungsmittelgemisches. Sie wird aus der Zusammensetzung des Lösungsmittelgemisches berechnet (vgl. Anhang A1.1). d ist die spezifische Dichte des Lösungsmittels (z.B. Wasser + Methanol). Sie wird aus den spezifischen Dichten von Wasser und Methanol und der Zusammensetzung der Mischung berechnet (vgl. Anhang A1.1).

Der kombinatorische Term des UNIQUAC-Ansatzes lautet:

$$\left(\frac{G^E}{n_T \mathcal{R} T} \right)_C = \sum_k x_k \ln \left(\frac{\phi_k}{x_k} \right) - \frac{z}{2} \sum_k q_k x_k \ln \left(\frac{\phi_k}{\theta_k} \right) \quad (2.43)$$

Φ_k und θ_k sind die Volumen- und Oberflächenanteile der Komponente k:

$$\phi_k = \frac{x_k r_k}{\sum_l x_l r_l} \quad (2.44)$$

$$\theta_k = \frac{x_k q_k}{\sum_l x_l q_l} \quad (2.45)$$

z ist die Koordinationszahl. Sie wird üblicherweise zu $z = 10$ gesetzt. Die van der Waals'schen Eigenvolumen-, r_i , und Oberflächenparameter, q_i , wurden nicht - wie von der Arbeitsgruppe von Thomsen und Rasmussen (1999, 2000) - als anpassbare Parameter betrachtet. Für Wasser, Methanol, Ammoniak und Kohlendioxid wurden diese Parameter aus der ASPEN- Datenbank (Gmehling, Onken (1977)) übernommen, für die Ionen nach Abrams und Prausnitz (1975) mit von Marcus (1997) angegebenen Ionenradien berechnet (vgl. Tabelle A1.7).

Der residuale Teil des UNIQUAC-Ansatzes lautet:

$$\left(\frac{G^E}{n_T \mathcal{R} T} \right)_R = - \sum_l x_l q_l \ln \left(\sum_k \theta_k \Psi_{kl} \right) \quad (2.46)$$

Die binären Wechselwirkungsparameter Ψ_{kl} sind folgendermaßen aufgebaut:

$$\Psi_{kl} = \exp\left(a_{kl} + \frac{b_{kl}}{T}\right) \quad (2.47)$$

Die binären Wechselwirkungsparameter a_{kl} und b_{kl} wurden an experimentelle Ergebnisse angepasst. Die Wechselwirkungsparameter zwischen gleich geladenen ionischen Spezies wurden vernachlässigt, d. h. $\Psi_{kl} = 1$ gesetzt.

2.3.2 Berechnung von Aktivitätskoeffizienten bzw. Aktivitäten

Das chemische Potential eines gelösten Stoffes i wird durch Differenziation der Gibbs'schen Energie G nach der Molzahl n_i berechnet. Für den Exzessanteil des chemischen Potentials einer im Lösungsmittelgemisch gelösten Spezies i , folgt:

$$\mu_i^E = \mu_i - \mu_{i,id.Misch.} = \left(\frac{\partial G^E}{\partial n_i}\right)_{T,p,n_{j \neq i}} = R \cdot T \cdot \ln \gamma_i^{(x)} \quad (2.48)$$

Damit folgt für den Aktivitätskoeffizienten $\gamma_i^{(x)}$ der gelösten Stoffe (Gase und Ionen i):

$$\ln \gamma_i^* = \ln \gamma_{i,DH}^* + \ln \gamma_{i,C}^* + \ln \gamma_{i,R}^* \quad (2.49)$$

Für den Beitrag aus dem Debye-Hückel-Term erhält man:

$$\ln \gamma_{i,DH}^* = -2 A_x \left[\frac{z_i^2}{\rho} \ln(1 + \rho \sqrt{I_x}) + \sqrt{I_x} \frac{\left(\frac{1}{2} z_i^2 - I_x\right)}{(1 + \rho \sqrt{I_x})} \right] \quad (2.50)$$

Für den kombinatorischen und residualen Anteil:

$$\ln \gamma_{i,C}^* = \ln\left(\frac{\phi_i}{x_i}\right) - \frac{\phi_i}{x_i} - \ln\left(\frac{r_i}{r_W}\right) + \frac{r_i}{r_W} - \frac{z}{2} q_i \left[\ln\left(\frac{\phi_i}{\theta_i}\right) - \frac{\phi_i}{\theta_i} - \ln\left(\frac{r_i}{r_W} \frac{q_W}{q_i}\right) + \frac{r_i}{r_W} \frac{q_W}{q_i} \right] \quad (2.51)$$

$$\ln \gamma_{i,R}^* = q_i \left[-\ln\left(\sum_k \theta_k \Psi_{ki}\right) - \sum_k \frac{\theta_k \Psi_{ik}}{\sum_l \theta_l \Psi_{lk}} + \ln \psi_{Wi} + \psi_{iW} \right] \quad (2.52)$$

Die Aktivitätskoeffizienten für die Lösungsmittelkomponenten Methanol und Wasser setzen sich ebenfalls aus einem Debye-Hückel-Term und aus dem kombinatorischen und den residualen UNIQUAC-Anteilen zusammen.

$$\ln \gamma_{W,DH} = -4 \left[\ln(1 + \rho \sqrt{I_x}) \frac{n_T I_x}{\rho} \left\{ \frac{dA_x}{d\tilde{x}_W} + \frac{A_x}{2 M^*} \frac{dM^*}{d\tilde{x}_W} \right\} \frac{n_M}{(n_W + n_M)^2} \right. \\ \left. - \left(\frac{\sqrt{I_x}}{1 + \rho \sqrt{I_x}} \frac{\rho}{2 M^*} \frac{dM^*}{d\tilde{x}_W} \frac{n_M}{(n_W + n_M)^2} + \frac{\rho \sqrt{I_x}}{2 (1 + \rho \sqrt{I_x}) n_T} \right) \frac{A_x I_x n_T}{\rho} \right] \quad (2.53)$$

$$\ln \gamma_{M,DH} = -4 \left[\ln(1 + \rho \sqrt{I_x}) \frac{n_T I_x}{\rho} \left\{ \frac{dA_x}{d\tilde{x}_W} + \frac{A_x}{2 M^*} \frac{dM^*}{d\tilde{x}_W} \right\} \frac{(-n_W)}{(n_W + n_M)^2} \right. \\ \left. - \left(\frac{\sqrt{I_x}}{1 + \rho \sqrt{I_x}} \frac{\rho}{2 M^*} \frac{dM^*}{d\tilde{x}_W} \frac{(-n_W)}{(n_W + n_M)^2} + \frac{\rho \sqrt{I_x}}{2 (1 + \rho \sqrt{I_x}) n_T} \right) \frac{A_x I_x n_T}{\rho} \right] \quad (2.54)$$

Die Beiträge des UNIQUAC-Ansatzes zum Aktivitätskoeffizienten einer Lösungsmittelkomponenten (Wasser und Methanol) lauten:

$$\ln \gamma_{i,C} = \ln \left(\frac{\phi_i}{x_i} \right) + 1 - \frac{\phi_i}{x_i} - \frac{z}{2} q_i \left[\ln \left(\frac{\phi_i}{\theta_i} \right) + 1 - \frac{\phi_i}{\theta_i} \right] \quad (2.55)$$

$$\ln \gamma_{i,R} = q_i \left[1 - \ln \left(\sum_k \theta_k \Psi_{ki} \right) - \sum_k \frac{\theta_k \Psi_{ik}}{\sum_l \theta_l \Psi_{lk}} \right] \quad (2.56)$$

$$i = W, M$$

2.3.3 Berechnung der Fugazitätskoeffizienten

Die Fugazitätskoeffizienten in der Gasphase φ_i''' werden mit der nach dem zweiten Koeffizienten abgebrochenen Virialgleichung berechnet:

$$Z_{mix} = 1 + B_{mix} \cdot \frac{P}{R \cdot T} \quad , \quad (2.57)$$

$$\text{mit} \quad B_{mix} = \sum_i \sum_j y_i \cdot y_j \cdot B_{ij} \quad (2.58)$$

Damit folgt für den Fugazitätskoeffizienten der Komponente i in der Gasphase:

$$\ln \varphi_i''' = \left(2 \cdot \sum_j y_j \cdot B_{ij} - B_{mix} \right) \cdot \frac{p}{R \cdot T} \quad (2.59)$$

Die Virialkoeffizienten B_{ij} werden mit der Methode von Hayden und O'Connell (1975) ermittelt. Dabei werden die von Rumpf (1992) angegebenen Reinstoff- und Assoziationsparameter verwendet. Die zweiten Virialkoeffizienten der reinen Stoffe (B_{ii}) werden aus empirischen Korrelationen nach Rumpf et al. (1993) ermittelt (vgl. Anhang A 1.15).

2.3.4 Bestimmung der Henry-Konstanten und der partiellen molaren Volumina

Die Henry'sche Konstante eines Gases in Wasser wird von Rumpf (1992) übernommen. Für Ammoniak und Kohlendioxid sind die Henry'schen Konstanten für die Löslichkeit in Wasser (bei $p = p_W^S$) im Anhang A 1.5 zusammengestellt.

Die zur Beschreibung des Druckeinflusses auf die Henry'sche Konstante benötigten partiellen molaren Volumina der in unendlicher Verdünnung in Wasser gelösten Gase werden nach der Methode von Brelvi und O'Connell (1972) berechnet (vgl. Anhang A 1.6).

2.3.5 Bestimmung der chemischen Gleichgewichtskonstanten

Die in den Gleichungen (2.26) bis (2.30) erwähnten thermodynamischen Gleichgewichtskonstanten der Reaktionen (R1) bis (R5) wurden aus der Literatur (vgl. Tabelle A1.5 im Anhang A 1.7) übernommen.

2.3.6 Bestimmung der Löslichkeitsprodukte

In der Gleichung (2.25) ist die Beziehung zwischen dem Löslichkeitsprodukt eines Salzes und den Aktivitäten der beteiligten Spezies angegeben. In der vorliegenden Arbeit werden folgende Feststoffe berücksichtigt:



Bei der Berechnung von Phasengleichgewichten wird zunächst die Bildung einer festen Phase vernachlässigt. Ergibt sich dann bei einer Überprüfung, dass das Produkt der Aktivitäten größer ist als das Löslichkeitsprodukt (z. B. ist für Ammoniumhydrogencarbonat das Produkt der Aktivitäten größer als das Löslichkeitsprodukt $K_{\text{NH}_4\text{HCO}_3}(T) \leq a_{\text{NH}_4^+} \cdot a_{\text{HCO}_3^-}$), dann wird die Rechnung wiederholt und dabei das Auftreten einer festen Phase aus Ammoniumhydrogencarbonat berücksichtigt. Zahlenwerte für das Löslichkeitsprodukt von Ammoniumhydrogencarbonat und Ammoniumcarbamat werden von Lichtfers (2000) übernommen (vgl. Anhang A 1.8).

3 Experimentelle Untersuchungen

3.1 Messprinzip

Für die experimentellen Untersuchungen wurden zwei nach der analytischen Methode arbeitende, bauähnliche Anlagen verwendet. Eine wurde von Göppert (1985) aufgebaut und von Kurz (1994) und Sing (1998) modifiziert. Aufgrund des Messbereiches des eingebauten Druckaufnehmers ist der Gesamtdruck dieser Anlage auf 7 bar beschränkt. Die andere Anlage wurde am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik der Universität Kaiserslautern konstruiert und gebaut, aber erst in der vorliegenden Arbeit vervollständigt und in Betrieb genommen. Beide Anlagen arbeiten nach dem gleichen Prinzip:

In eine evakuierte, thermostatisierte Gleichgewichtszelle wird zunächst das organisch-wässrige Lösungsmittelgemisch vorgelegt. Anschließend wird Ammoniak eingewogen. Nach Erreichen der gewünschten Ammoniakkonzentration wird schrittweise Kohlendioxid zugefüllt. Nach jeder Füllung wird die Einstellung des thermodynamischen Gleichgewichtes abgewartet. Danach werden Temperatur, Druck und Volumen der flüssigen Phase bestimmt sowie eine gaschromatographische Analyse der Gasphase vorgenommen.

Aus diesen Angaben werden die Mengen der Versuchsstoffe (Wasser, organisches Lösungsmittel, Ammoniak und beim simultanen Lösen zusätzlich Kohlendioxid) in der Gasphase bestimmt. Da die in die Zelle eingewogenen Massen bekannt sind, erhält man aus Massenbilanzen die Stoffmengen in der flüssigen Phase. In der Anlage von Göppert ist ein Auftreten einer festen Phase nur an dem gemessenen Druckverlauf erkennbar. In der neuen Anlage sind Sichtfenster vorhanden, die es ermöglichen, den Salzausfall visuell zu beobachten. Durch die Sichtfenster kann auch das Auftreten einer zweiten flüssigen Phase beobachtet werden, wie es z. B. bei den Untersuchungen mit Phenol-Wasser-Gemischen auftrat. Bei der weiteren Beschreibung wird nur die neu in Betrieb genommene Anlage betrachtet. Die von Göppert aufgebaute Anlage wurde von Sing (1998) ausführlich beschrieben.

3.2 Phasengleichgewichtsapparatur

3.2.1 Aufbau

Die Abbildung 3.1 zeigt ein Schema der Versuchsanlage. Kernstück der Anlage ist eine aus Edelstahl (Werkstoffnummer: 1.4571) gefertigte Hochdrucksichtzelle mit einem Volumen von ca. 1.6 dm^3 und einer lichten Höhe von ca. 20 cm. Zur Thermostatisierung ist die Zelle in ein Ölbad eingebaut, dessen Temperatur mit einem Thermostaten (Typ US 12, MGW

LAUDA, Königshofen) konstant gehalten wird. Ein weiteres thermostatisiertes Ölbad ist über dem Deckel der Zelle installiert. Es enthält ein Gasprobenventil und wird auf eine höhere Temperatur als das untere Ölbad beheizt, um Kondensation im Gasprobenventil bei der Probenahme zu vermeiden. In der Nähe des Bodens der Zelle sind im Mantel zwei Saphirgläser eingebaut. Durch ein Saphirglas wird die Zelle beleuchtet, das zweite dient zum visuellen Beobachten der Zelle insbesondere in Bodennähe, um das Auftreten einer zweiten flüssigen Phase oder einen Salzausfall zu beobachten. Im Deckel der Zelle ist eine Leitung zu den außen angebrachten Druckaufnehmern montiert. Es werden zwei Druckaufnehmer eingesetzt. In den Druckaufnehmern wird der Zellendruck von einer Membran auf Silikonöl und von diesem über eine Kapillarleitung an die Sensoren übertragen. In den Sensoren wird der Druck über Piezokristalle in ein elektrisches Signal umgewandelt, das digital angezeigt wird. Der Druckaufnehmer mit dem kleineren Messbereich ist mit einem Ventil abriegelbar. Ein axial verschiebbarer Tauchstab, der ebenfalls durch den Zellendeckel geführt wird, dient zur Ermittlung des Gasphasenvolumens. Er ist von der Zelle elektrisch isoliert. Zur Bestimmung des Gasphasenvolumens wird eine Spannung zwischen Zelle und Tauchstab angelegt und der Tauchstab so lange verschoben, bis seine Spitze die Flüssigkeitsoberfläche berührt. Durch den Übergang aus der Gasphase in die flüssige Phase wird ein elektrischer Strom ausgelöst, der von einem Ampéremeter angezeigt wird. Der Verschiebeweg des Tauchstabes wird auf einer Messuhr abgelesen. Aus Kalibrierversuchen ist der Zusammenhang zwischen Verschiebeweg und Gasphasenvolumen bekannt.

Die Befüllung der Zelle erfolgt mit dem in der Abbildung 3.1 gezeigten Leitungs- und Ventilsystem. Aus einem Vorratsbehälter wird ein Lösungsmittelgemisch bekannter Zusammensetzung in die zuvor evakuierte Zelle eingewogen. Über das gleiche System (jedoch mit einer anderen Anschlussleitung) werden auch die Gase Ammoniak und Kohlendioxid aus Wägekondensatoren zugegeben. In den Wägekondensatoren liegen die Gase in kondensierter Form vor. Während und nach der Füllung der Zelle sorgt ein Begasungsrührer in der Zelle für eine gute Durchmischung, wodurch die Einstellung des thermodynamischen Gleichgewichtes beschleunigt wird. Nach Einstellung des Gleichgewichtes werden (mehrfach) Druck, Temperatur und die Höhe des Flüssigkeitsstandes gemessen. Aus der Gasphase wird mit einem Gasprobenventil eine Probe entnommen und in einem Gaschromatographen analysiert. Auch diese Analyse wird mehrfach wiederholt.

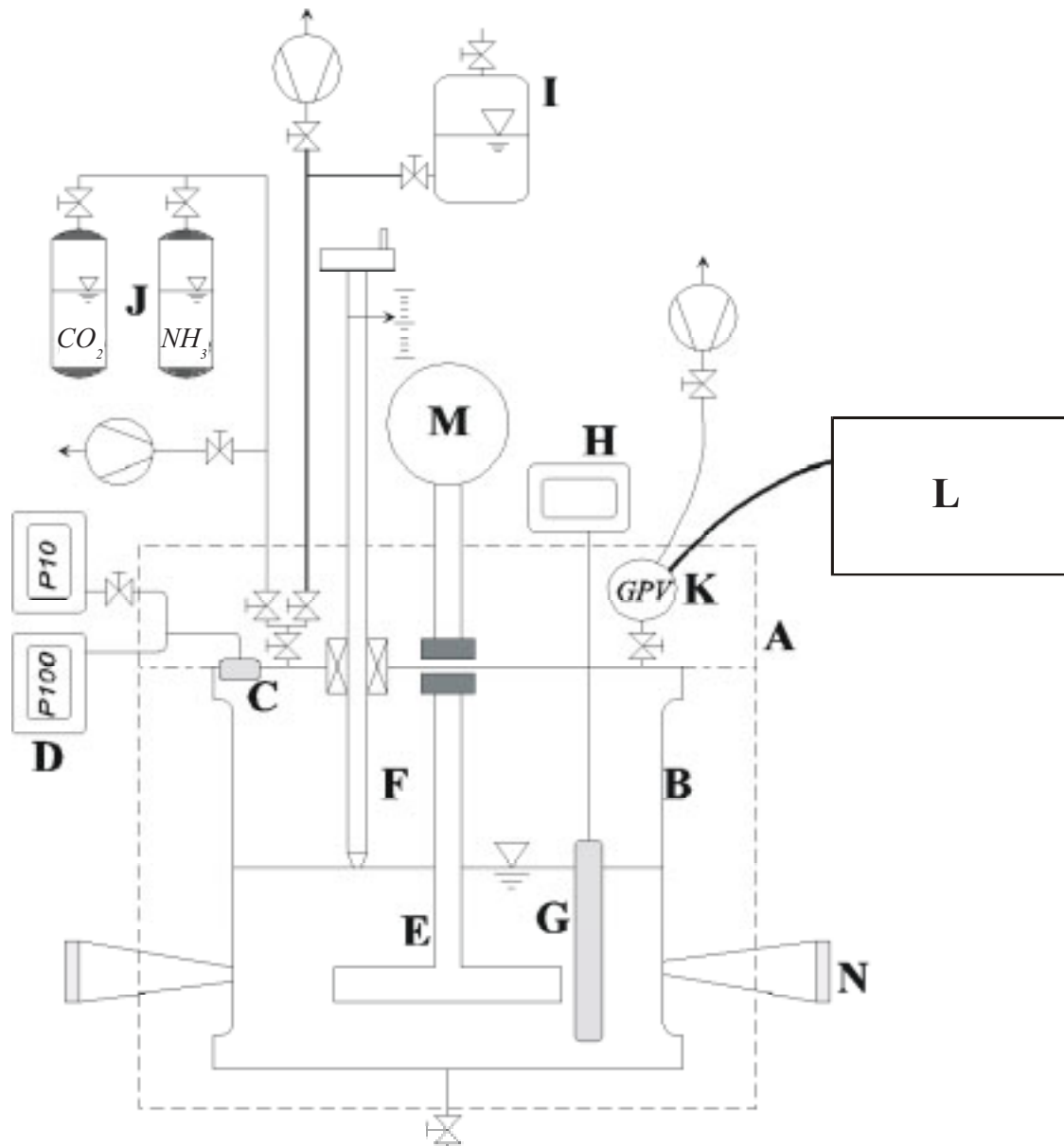


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der Versuchsanlage, A thermostatisierter Bereich, B Messzelle, C Anschluss der Druckaufnehmer, D Druckaufnehmer, E Begasungsrührer, F Tauchstab, G Widerstandsthermometer, H Anzeigegerät für Temperatur, I Vorlagegefäß für Flüssigkeit, J Gaskondensatoren, K Gasprobenventil, L Gaschromatograph mit Auswertecomputer, M Rührermotor, N Saphirglas

3.2.2 Druckmessung

Die Druckmessung erfolgt mit zwei Druckaufnehmern der Firma Wika, Klingenberg. Ein Druckaufnehmer hat einen Messbereich von 0 bis 1 MPa (Absolutdruck) und eine Auflösung von 0.1 kPa, der zweite Druckaufnehmer einen Messbereich von 0 bis 10 MPa (Absolutdruck) bei einer Auflösung von 1 kPa. In regelmäßigen Abständen bzw. bei Temperaturänderungen oder nach Umbauarbeiten wurden die Druckaufnehmer kalibriert. Im Überdruckbereich erfolgte die Kalibrierung mit einer Präzisionsdruckwaage (Typ 5201, Fa. Desgranges et Huet, Nieder-Roden), im Unterdruckbereich mit einem Quecksilbermanometer der Firma Dosch, Berlin. Die Unsicherheit der Druckmessung beträgt im Bereich bis 1 MPa ca. 0.5 kPa und bei höheren Drücken ca. 1 kPa.

3.2.3 Temperaturmessung

Die Temperatur in der Zelle wird mit einem ummantelten Platinwiderstandsthermometer Pt 100 in Vierleiterschaltung in Verbindung mit einer Messbrücke (Typ 5017, Fa. Prema, Mainz) gemessen. Die Unsicherheit der Temperaturmessung wird auf ± 0.1 K geschätzt. Zur Kontrolle wird mit zusätzlichen Thermoelementen die Temperatur im Gasprobenventil bzw. an den außenliegenden Druckaufnehmern und im oberen Thermostatenbad gemessen.

3.2.4 Bestimmung des Gasphasenvolumens

Das Gesamtvolumen der Zelle wird für jede Temperatur mit einer Gaspresse (Typ M118, Fa. Leukert Instruments, Adendorf) bestimmt. Das Gesamtvolumen der Zelle beträgt ca. 1600 cm^3 .

Das Volumen der flüssigen Phase (typisch ca. 1100 cm^3) wird aus einer Kalibrierung der Tauchstabstellung mit flüssigem Wasser bestimmt. Die Unsicherheit wird auf $\pm 2 \text{ cm}^3$ geschätzt. Für das Gasphasenvolumen ergibt sich daraus eine maximale Unsicherheit von $\pm 5 \text{ cm}^3$. Bei einem (typischen) Gasphasenvolumen von ca. 500 cm^3 (durch den Verfahrensweg des Tauchstabes begrenzt) beträgt die relative Unsicherheit somit $\pm 1 \%$.

3.2.5 Bestimmung der Zusammensetzung der Gasphase

Nach jedem Befüllschritt werden nach Einstellung des Gleichgewichtszustandes mehrere Gasproben aus der Zelle entnommen und in einem Gaschromatographen (Typ 6890, Fa. HP/Agilent, Waldbronn) mit angeschlossenem Personalcomputer (Typ K6-200, Fa. FSE, Pirmasens) unter Einsatz einer kommerzieller Auswertesoftware (Typ HP Chemstation)

analysiert. Dazu wird zuerst die Probenschleife des Gasprobenventils (Typ AC6WE, Fa. Valco, Houston, USA) evakuiert. Durch Öffnen des Zellenventils zur Probenentnahme expandiert die Gasphase in das Gasentnahmesystem - bestehend aus Gasprobenschleife (0.3 cm^3), Ventilen und Rohrleitungen ($1/16''$ und $1/4''$). Das Gesamtvolumen des Gasprobensystems beträgt ca. 3 cm^3 .

Anschließend wird die Probe vom Trägergas (Helium) in den Gaschromatographen transportiert. Das gesamte Probenentnahmesystem (incl. der Transportleitung vom Gasprobenventil zum Gaschromatographen) befindet sich im oberen Thermostatenbad bzw. wird auf ca. 10 K über der Zellentemperatur thermostatisiert, um Kondensation im Leitungssystem und damit eine Verfälschung der Analyse zu vermeiden.

Zur Trennung der Komponenten im Gaschromatographen wird eine Kapillarsäule (AT-Plot Q, 30 m Länge, 0.32 mm Durchmesser, Fa. Alltech, München) verwendet, die vor dem ersten Einsatz ca. 24 h bei ca. 500 K konditioniert wurde. Die Analyse erfolgt mit einem Temperaturprogramm, das die Ofentemperatur ausgehend von $80 \text{ }^\circ\text{C}$ nach 3 min mit 20 K/min auf $180 \text{ }^\circ\text{C}$ erhöht und anschließend konstant hält. Die Gesamtdauer der Analyse beträgt 10 min . Danach schließt sich eine Abkühlphase von ca. 5 min an. Wenn der Gaschromatograph wieder seine Anfangstemperatur erreicht hat, kann die nächste Probe analysiert werden. Die Abbildung 3.2 zeigt ein typisches Chromatogramm.

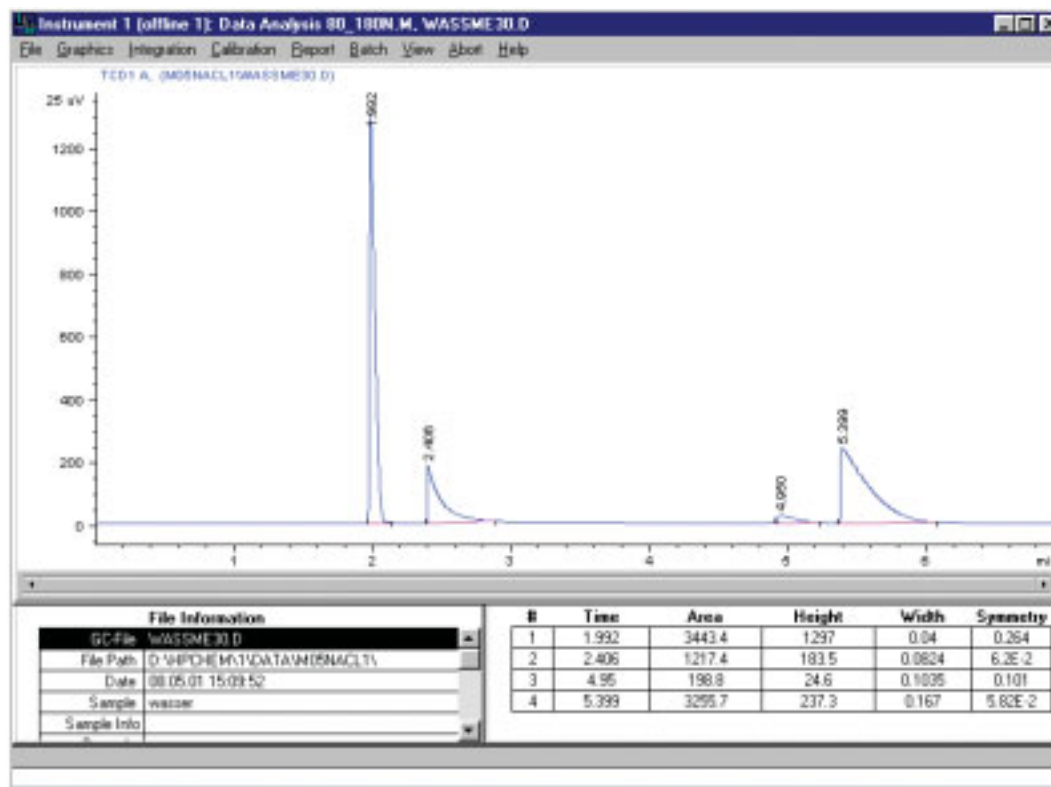


Abbildung 3.2: Typisches Chromatogramm mit den Peaks (von links) Kohlendioxid, Ammoniak, Wasser und Methanol

Zur Auswertung der gaschromatographischen Analysen muss der Zusammenhang zwischen dem Molanteil y_i eines Stoffes und der bei der Analyse ermittelten Peakfläche F_i bekannt sein. Jeweils vor, zwischen und nach den Messreihen wurden Kalibriermessungen mit binären Mischungen aus Wasser + Ammoniak, Wasser + Kohlendioxid, Wasser + Methanol, Methanol + Ammoniak sowie Methanol + Kohlendioxid durchgeführt. Bei der Kalibrierung mit Wasser + Methanol wurden flüssige Mischungen in Rollrandampullen hergestellt und verschlossen. Aus diesen Ampullen wurden mittels Mikroliterspritze Proben entnommen und in den Gaschromatographen eingespritzt. Bei allen anderen binären Mischungen wurde Wasser bzw. Methanol gasförmig vorgelegt. Danach wurde Ammoniak bzw. Kohlendioxid in kleinen Schritten eingewogen. Nach Einstellung des thermodynamischen Gleichgewichts wurden die Gasmischungen analysiert. Aus dem bekannten Verhältnis der Molanteile und dem gemessenen Flächenverhältnis wurden die Kalibrierfaktoren $\alpha_{i,j}$ berechnet.

$$\frac{y_i}{y_j} = \alpha_{i,j} \cdot \frac{F_i}{F_j} \quad (3.1)$$

Damit ist der gesuchte Zusammenhang zwischen Peakfläche und Molanteil eines Stoffes i in der Gasprobenschleife und damit auch in der Gasphase der Zelle bekannt. Die Reproduzierbarkeit der Kalibrierung beträgt etwa $\pm 5\%$. Die Tabelle 3.1 gibt einen Eindruck, wie sich die Kalibrierfaktoren mit der Zeit veränderten.

Tabelle 3.1: Beispiele für Kalibrierfaktoren im System Wasser-Kohlendioxid von Anlage 2

Kalibrierung	$\alpha_{w,c}$
Januar 2000	2.4100
April 2000	2.4412
April 2001	2.4190
August 2001	2.5857
Mittelwert	2.464
max. Abweichung	5.0%

Im System Ammoniak + Wasser + Phenol ist die oben beschriebene Kalibrierung nicht möglich, weil der Dampfdruck von Phenol zu gering ist. Aus diesem Grund wurden zur Kalibrierung flüssige, binäre Mischungen aus Wasser und Phenol verwendet. Diese Mischungen wurden in die Zelle eingewogen und die Zusammensetzung der Gasphase aus Literaturangaben zum Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht ermittelt. Diese Zusammensetzungen wurden dann der Berechnung des Kalibrierfaktors zugrunde gelegt.

3.3 Versuchsdurchführung

Angaben zu den in der vorliegenden Arbeit verwendeten Chemikalien sind in der Tabelle 3.2 zusammengestellt. Alle Chemikalien wurden ohne weitere Reinigung verwendet.

Zur Herstellung eines salzhaltigen Lösungsmittelgemisches wurde zunächst Salz in einen Vorlagenbehälter (bekannter Leermasse) aus Edelstahl ($V = 1.5 \text{ dm}^3$) eingewogen. Dieser Behälter wurde zur Entgasung bzw. Entwässerung des Salzes an eine Vakuumpumpe angeschlossen. Zur Untersuchung salzfreier Mischungen wurde, um eine ausreichende Leitfähigkeit der Lösung zur Messung der Füllstandshöhe zu gewähren, eine geringe Menge Natriumchlorid (ca. 0.02 g) in den Vorlagenbehälter eingewogen, die aber im weiteren nicht beachtet wurde. Nach dem Salz wurde die organische Komponente eingewogen und durch Evakuieren entgast. Die eingefüllten Massen wurden gravimetrisch (als Differenz der Masse des mit organischen Komponenten gefüllten Behälters zur Leermasse bzw. zur Masse des Behälters mit Salz) bestimmt. Das zur Herstellung der Lösung verwendete Wasser wurde in einem weiteren Vorlagenbehälter durch Evakuieren entgast und durch Erhitzen über einen Teflonschlauch in den Vorlagenbehälter mit der organischen Komponente und dem Salz gepresst. Die genaue Wassermasse wurde durch Differenzwägung bestimmt. Zur intensiven Durchmischung der eingefüllten Komponenten enthält der Vorlagenbehälter einen teflunumantelten Magnetprüher.

Tabelle 3.2: Chemikalien, Bezugsquellen und Reinheit der verwendeten Stoffe

Chemikalie		Bezugsquelle	Reinheit
NH ₃	Ammoniak UHP	Messer-Griesheim, Ludwigshafen	99.999 mol%
CO ₂	Kohlendioxid 4.5	Messer-Griesheim, Ludwigshafen	99.999 mol%
NaCl	Natriumchlorid p.a.	Carl Roth GmbH, Karlsruhe	99.5 Massen-%
Na ₂ SO ₄	Natriumsulfat p.a.	Merck KGaA, Darmstadt	99 Massen-%
CH ₃ OH	Methanol p.a.	Merck KGaA, Darmstadt	99.8 Massen-%
C ₆ H ₅ OH	Phenol p.a.	Merck KGaA, Darmstadt	99.5 Massen-%
H ₂ O	Wasser	Universität Kaiserslautern	-

Zu Beginn einer Messreihe wurde das Lösungsmittelgemisch in die gereinigte und evakuierte Zelle gefüllt. Dazu wurde das Vorlagegefäß mit der Flüssigkeit erhitzt, sodass der Druck im Vorlagegefäß ca. 0.1 MPa über dem Dampfdruck der Lösung in der Gleichgewichtszelle lag. Beim Befüllen der Gleichgewichtszelle verblieb ein Teil des Lösungsmittelgemisches im Leitungssystem. Dessen Masse wurde in einem separaten, sonst jedoch identisch durchgeführten Versuch (ohne Befüllung der Zelle) bestimmt.

Nach dem Befüllen mit dem Lösungsmittel erfolgte die Befüllung mit dem Gas. Im Unterschied zur Befüllung mit dem Lösungsmittel verblieb bei der Befüllung mit einem Gas kein Gas (Ammoniak oder Kohlendioxid) im Leitungssystem, da durch Abkühlen des Wägekondensators in flüssigem Stickstoff das Gas zurückkondensiert wurde. Bei den Untersuchungen zur Einzelgaslöslichkeit von Ammoniak in wässrig-organischen, salzhaltigen Lösungen wurde Ammoniak in zuvor festgelegten Mengen schrittweise zugegeben. Bei den Untersuchungen zur simultanen Löslichkeit von Ammoniak und Kohlendioxid erfolgte zuerst die Befüllung mit Ammoniak bis zu einer vorgegebenen Konzentration. Anschließend wurde Kohlendioxid schrittweise eingewogen.

Die Befüllung der Zelle mit Gasen erfolgte aus Wägekondensatoren. Dabei wurde der Wägekondensator auf eine Waage (Typ 1364 MP, Fa. Satorius, Göttingen) gelegt, um die in die Zelle eingebrachte Masse bei der Befüllung zu kontrollieren. Damit sich das thermodynamische Gleichgewicht schneller ausbildet, wurde bei jeder Zufüllung der Zelleninhalt mit einem Hohlrührer intensiv vermischt.

Nach Annäherung an das thermodynamische Gleichgewicht, d. h. wenn sich der Druck in der Zelle nicht mehr änderte, wurde der Hohlrührer abgeschaltet. Nach einer weiteren Ausgleichzeit von mindestens 120 min wurde mit der Aufnahme der Messgrößen (Druck, Temperatur, Überhitzung des Gasprobenentnahmesystems und Füllstand) begonnen und die gaschromatographischen Analysen der Gasphase durchgeführt. Nach Abschluss einer Analysenreihe erfolgte eine weitere Befüllung mit Kohlendioxid. Diese Zyklen (Zufüllung, Einstellung des Gleichgewichtes, Aufnahme der Messgrößen) wurden solange wiederholt, bis der maximale Versuchsdruck (ca. 5 MPa) oder die vorgegebene maximale Konzentration des Versuchsgases erreicht war.

3.4 Auswertung der Versuche

Aus dem Einfüllvorgang sind die Massen von Salz $m_{S,B}$, organischer Komponente $m_{O,B}$ und Wasser $m_{W,B}$ bekannt. Daraus ergibt sich die Molalität des Salzes und der Molanteil (salzfrei) der organischen Komponente der in die Zelle eingefüllten Flüssigkeit:

$$\bar{m}_{S,B} = \frac{1000 \cdot \tilde{m}_{S,B}}{M_S \cdot (\tilde{m}_{W,B} + \tilde{m}_{O,B})} \quad (3.2)$$

$$x_{O,B} = \frac{\frac{\tilde{m}_{O,B}}{M_O}}{\frac{\tilde{m}_{O,B}}{M_O} + \frac{\tilde{m}_{W,B}}{M_W}} \quad (3.3)$$

Aus der Masse der in die Zelle eingefüllten Lösung \tilde{m}_{Lsg} und den in den Vorlagenbehälter eingewogenen Massen erhält man die in die Zelle eingefüllten Massen von Wasser und organischer Komponente.

$$\tilde{m}_W = \frac{\tilde{m}_{W,B} \cdot \tilde{m}_{Lsg}}{(\tilde{m}_{W,B} + \tilde{m}_{O,B} + \tilde{m}_{S,B})} \quad (3.4)$$

$$\tilde{m}_O = \frac{\tilde{m}_{O,B} \cdot \tilde{m}_{Lsg}}{(\tilde{m}_{W,B} + \tilde{m}_{O,B} + \tilde{m}_{S,B})} \quad (3.5)$$

Die eingefüllte Masse eines Gases $\tilde{m}_{i,ein}$ ($i = \text{NH}_3, \text{CO}_2$) wurde gravimetrisch bestimmt. Dazu wurde eine Waage (Typ PM2000MC, Fa. Mettler-Toledo, Gießen) mit einem Messbereich bis 2000 g (Fehler ± 0.002 g) verwendet. Damit sind die Mengen aller in die Zelle eingefüllten Stoffe bekannt. Um die Verteilung auf die gasförmige und flüssige Phase zu ermitteln, sind die gaschromatographischen Analysen auszuwerten. Aus den „Peakflächen“ F_j wurden mit Hilfe der Kalibrierkurven die Molanteile der Komponenten in der Gasphase bestimmt (vgl. Gleichung 3.1). Aus diesen Molanteilen und aus den Messgrößen für Temperatur und Druck wurde die molare Dichte der Gasphase (ρ''') in der Zelle mit der nach dem 2. Koeffizienten abgebrochenen Virialgleichung berechnet. Die dazu erforderlichen 2. Virialkoeffizienten wurden nach der Methode von Hayden und O'Connell (1975) berechnet. Detaillierte Angaben zu den zweiten Virialkoeffizienten sind in den Tabellen A1.15 bis A1.17 im Anhang A1.15 zusammengestellt. Die Massendichte der Komponente i in der Gasphase $\tilde{\rho}_i'''$ beträgt:

$$\tilde{\rho}_i''' = \rho'''(T, p, y_i) \cdot y_i \cdot M_i \quad (3.6)$$

Das Volumen der Gasphase V''' ist aus der Tauchstabmessung und den Kalibriermessungen bekannt. Die Masse der Komponente i in der Gasphase beträgt:

$$\tilde{m}_i''' = V''' \cdot \tilde{\rho}_i''' , \quad (3.7)$$

Aus einer Bilanz erhält man die Masse der Komponente i in der flüssigen Phase:

$$\tilde{m}_i'' = \tilde{m}_{i,ein} - \tilde{m}_i''' \quad (3.8)$$

Die pauschale Molalität eines in der flüssigen Phase gelösten Gases i beträgt:

$$\bar{m}_i = \frac{m_i'' \cdot 1000}{M_i \cdot (m_W'' + m_O'')} \quad (3.9)$$

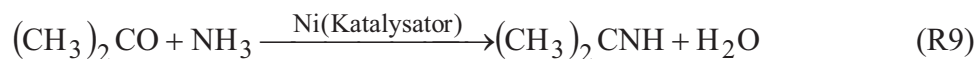
Die durch die gaschromatographischen Analysen ausgeschleusten Massen werden bei der Bilanzierung berücksichtigt, sie werden aus den Dichten der Komponenten im Gasprobenventil und dem Volumen des Gasprobenentnahmesystems ($V_{GPV} = 3.1 \text{ cm}^3$) bestimmt.

Damit sind alle Größen des Phasengleichgewichts bekannt: Temperatur, Druck, die pauschalen Molalitäten der Komponenten in der flüssigen Phase und die Molenbrüche der Komponenten in der Gasphase. Für den Partialdruck einer Komponente erhält man somit:

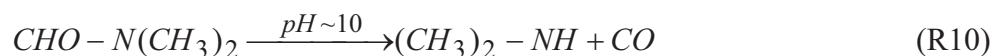
$$p_i = y_i \cdot p \quad (3.10)$$

3.5 Untersuchte Systeme

In der vorliegenden Arbeit wurden experimentelle Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen, organischen, zum Teil salzhaltigen Lösungsmittelgemischen sowie zur simultanen Löslichkeit von Ammoniak und Kohlendioxid in diesen Lösungsmittelgemischen durchgeführt. Als organische Komponente wurde Methanol bzw. Phenol verwendet. Mit Methanol konnten Messungen über den gesamten Konzentrations- und Temperaturbereich (also von reinem Wasser bis zu reinem Methanol) von 40 bis 120 °C durchgeführt werden. Bei Phenol konnte nur die Löslichkeit von Ammoniak auf der wasserreichen Seite außerhalb der Mischungslücke vermessen werden. Bei der simultanen Lösung von Ammoniak und Kohlendioxid in wässrigen, phenolhaltigen Lösungen kam es schon nach den ersten Zugaben von Kohlendioxid zum Auftreten einer zweiten flüssigen Phase. Mit der verwendeten Versuchsanlage ist es nicht möglich, solche Mehrphasengleichgewichte zu vermessen, da keine Möglichkeit besteht, die flüssigen Phasen zu quantifizieren und zu analysieren. Ursprünglich waren auch Messungen mit den organischen Lösungsmitteln Aceton und Dimethylformamid (DMF) vorgesehen. Auf die Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in acetonhaltigen, wässrigen Lösungen musste verzichtet werden, weil Ammoniak mit Aceton zu Imin reagieren kann, wobei Nickel (aus dem Edelstahl der Versuchszelle) als Katalysator wirkt.



Dimethylformamid ist nur im neutralen pH-Bereich stabil. Bei der Zugabe von (basischem) Ammoniak zu wässrigen Dimethylformamidlösungen wurde ein Zerfall von DMF zu Dimethylamin beobachtet (R10).



Deshalb musste auf Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak (sowie von Ammoniak und Kohlendioxid) in DMF-haltigen Lösungsmittelgemischen verzichtet werden.

Ein Überblick über die experimentellen Untersuchungen ist in den Tabellen 3.3 bis 3.7 zusammengestellt. Zur Löslichkeit von Ammoniak in phenolhaltigen Systemen wurden 98 Messpunkte und in methanolhaltigen Systemen 244 Messpunkte aufgenommen. Zur simultanen Löslichkeit von Ammoniak und Kohlendioxid wurden 368 Punkte in methanolhaltigen Systemen vermessen. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen werden in den folgenden Abschnitten vorgestellt.

Tabelle 3.3: System Ammoniak + Phenol + Wasser: untersuchter Zustandsbereich

T K	\bar{m}_{Phenol} mol/kg H ₂ O	$\bar{m}_{\text{NH}_3, \text{max}}$ mol/kg H ₂ O	p_{max} MPa	N -
313.15	2.0	20.0	0.132	11
	6.0	20.4	0.096	11
353.15	1.0	12.0	0.258	20
	2.0	20.0	0.510	10
	3.0	12.1	0.210	16
	6.0	19.2	0.353	10
393.15	2.0	19.8	1.192	10
	6.0	20.4	0.951	10

Tabelle 3.4: System Ammoniak + Methanol + Wasser: untersuchter Zustandsbereich

T K	x_{Methanol} mol% LM	$\bar{m}_{\text{NH}_3, \text{max}}$ mol/kg LM	p_{max} MPa	N -
313.15	0.05	12.03	0.066	10
	0.25	11.96	0.086	10
	0.50	11.92	0.114	10
	0.75	6.05	0.074	5
	1.00	12.52	0.188	9
353.15	0.05	11.00	0.250	10
	0.25	11.97	0.340	15
	0.50	11.94	0.418	15
	0.75	11.74	0.502	10
	0.95	11.92	0.587	10
	1.00	13.02	0.648	16
393.15	0.00	11.98	0.772	9
	0.05	11.85	0.859	8
	0.25	11.71	0.974	12
	0.50	11.58	1.174	10
	0.75	11.99	1.424	10
	0.95	11.65	1.544	11
	1.00	12.18	1.633	8

Tabelle 3.5: System Kohlendioxid + Ammoniak + Methanol + Wasser: untersuchter Zustandsbereich

T K	x_{Methanol} mol% LM	\bar{m}_{NH_3} mol/kg LM	$\bar{m}_{\text{CO}_2, \text{max}}$ mol/kg LM	p_{max} MPa	N -
313.15	0.05	6.03	5.97	0.702	10
		12.03	11.46	0.636	11
	0.25	6.06	6.15	0.699	10
		11.96	10.82	0.625	11
	0.50	6.05	6.21	0.672	9
		11.92	11.91	0.696	10
0.75	6.05	6.99	0.626	9	
353.15	0.05	5.50	3.86	0.667	10
		11.00	6.81	0.650	9
	0.25	5.81	3.59	0.662	6
		11.97	6.57	0.615	6
	0.50	6.07	3.25	0.685	6
		11.94	6.02	0.633	6
	0.75	5.94	2.64	0.664	7
		11.74	5.60	0.675	10
	0.95	6.01	2.25	0.674	7
		11.92	5.23	0.674	10
	1.00	6.30	2.37	0.690	7
		11.91	11.06	5.338	13
393.15	0.00	5.92	4.09	3.633	5
		11.96	7.40	4.276	7
	0.05	6.15	4.17	4.975	9
		11.86	7.22	5.096	9
	0.25	5.94	3.90	5.161	8
		11.71	6.65	5.101	10
	0.50	6.05	3.60	5.075	8
		11.58	6.06	5.130	9
	0.75	5.74	3.34	5.004	8
		11.99	6.07	5.070	9
	0.95	5.80	4.17	5.182	6
		11.65	6.70	5.500	8
	1.00	5.77	3.82	5.012	8
		12.05	7.17	5.016	10

Tabelle 3.6: System Ammoniak + Methanol + Wasser + Salz: untersuchter Zustandsbereich

Salz	T K	x_{Methanol} mol% LM	\bar{m}_{Salz} mol/kg LM	$\bar{m}_{\text{NH}_3, \text{max}}$ mol/kg LM	p_{max} MPa	N -
NaCl	353.15	0.25	2.00	5.94	0.206	6
		0.50	0.73	6.03	0.253	6
		0.75	0.25	5.87	0.301	6
	393.15	0.25	0.99	6.29	0.683	5
			2.02	6.42	0.692	4
		0.50	1.01	6.07	0.798	7
	0.75	0.37	5.84	0.925	6	
Na ₂ SO ₄	353.15	0.05	0.88	5.93	0.177	6
		0.25	0.15	5.98	0.2036	6
	393.15	0.05	1.00	6.66	0.606	5
		0.25	0.15	5.84	0.676	5

Tabelle 3.7: System Kohlendioxid + Ammoniak + Methanol + Wasser + Salz: untersuchter Zustandsbereich

Salz	T K	x_{Methanol} mol% LM	\bar{m}_{Salz} mol/kg LM	\bar{m}_{NH_3} mol/kg LM	$\bar{m}_{\text{CO}_2, \text{max}}$ mol/kg LM	p_{max} MPa	N -
NaCl	353.15	0.25	2.00	5.94	3.95	0.666	7
		0.50	0.73	6.03	3.30	0.651	8
		0.75	0.25	5.87	2.74	0.681	7
	393.15	0.25	0.99	6.29	4.38	5.571	7
			2.02	6.42	4.56	5.521	7
		0.50	1.01	6.07	4.44	5.254	8
	0.75	0.37	5.84	4.68	5.451	10	
Na ₂ SO ₄	353.15	0.05	0.88	5.93	4.92	0.692	7
		0.25	0.15	5.98	3.79	0.680	7
	393.15	0.05	1.00	6.66	4.82	5.358	10
		0.25	0.15	5.84	4.14	5.863	9

3.6 Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in organisch-wässrigen Lösungen

3.6.1 Löslichkeit von Ammoniak in Wasser

In der Literatur sind eine Vielzahl von Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in Wasser bekannt (z. B. Clifford, 1933; Kurz, 1994; Müller, 1983; Wilson, 1924; Wucherer, 1932). Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden zur Überprüfung der Genauigkeit der neu entwickelten Versuchsanlage einige Messungen bei 120 °C durchgeführt.

3.6.1.1 Ergebnisse

Die Messergebnisse sind im Anhang in der Tabelle A 6.1 zusammengestellt. Jeder Zustandspunkt wurde mehrfach vermessen. In der Tabelle A 6.1 sind die Messergebnisse als Mittelwerte (mit den experimentellen Unsicherheiten) angegeben. Die Streuung der experimentellen Ergebnisse der einzelnen Analysen liegt in der Regel innerhalb der in der Tabelle A 6.1 angegebenen Ungenauigkeiten. Dies ist beispielhaft in der Tabelle 3.8 anhand der Ergebnisse eines typischen Messpunktes bei ca. 393 K und 0.47 MPa belegt.

Bei der Bestimmung der Temperatur und der Partialdrücke wurden alle Analysen zur Mittelwertbildung verwendet. Der Gesamtdruck wurde vor der ersten Analyse ermittelt, da es durch die Probenentnahme zu einem (kleinen) Druckabfall kommt. Auch bei den Untersuchungen an ternären und höheren Systemen lag die Streubreite der Einzelergebnisse in der Regel im Rahmen der Messgenauigkeit, so dass in den Tabellen im Anhang nur die Mittelwerte angegeben werden.

Tabelle 3.8: Löslichkeit von Ammoniak in Wasser bei 393 K und ca. 0.47 MPa: Vergleich der Ergebnisse der einzelnen Untersuchungen mit den Mittelwerten

T	\bar{m}_{NH_3}	$10^* p_{\text{NH}_3}$	$10^* p_{\text{H}_2\text{O}}$	$10^* p$
K	mol/kg	MPa	MPa	MPa
393.03	5.9300	3.050	1.646	4.699
393.02	5.9300	3.042	1.651	4.697
393.01	5.9306	3.014	1.678	4.695
393.01	5.9302	3.024	1.667	4.694
393.02	5.9301	3.021	1.670	4.694
Mittelwerte*				
393.02	5.9302	3.030	1.662	4.696
	±0.003	±0.044	±0.035	±0.05

*Die angegebenen Spannen entsprechen den Schätzwerten für die experimentellen Unsicherheiten.

In der Abbildung 3.3 sind für die Versuche bei 393 K die Messwerte für den Gesamt- und die Partialdrücke über der pauschalen Ammoniakmolalität aufgetragen. Man erkennt einen fast linearen Verlauf sowohl des Gesamtdruckes als auch des Partialdruckes von Ammoniak, d. h. ein Verhalten entsprechend dem Henry'schen Gesetz. Der Partialdruck vom Wasser nimmt mit steigender Ammoniakkonzentration leicht ab.

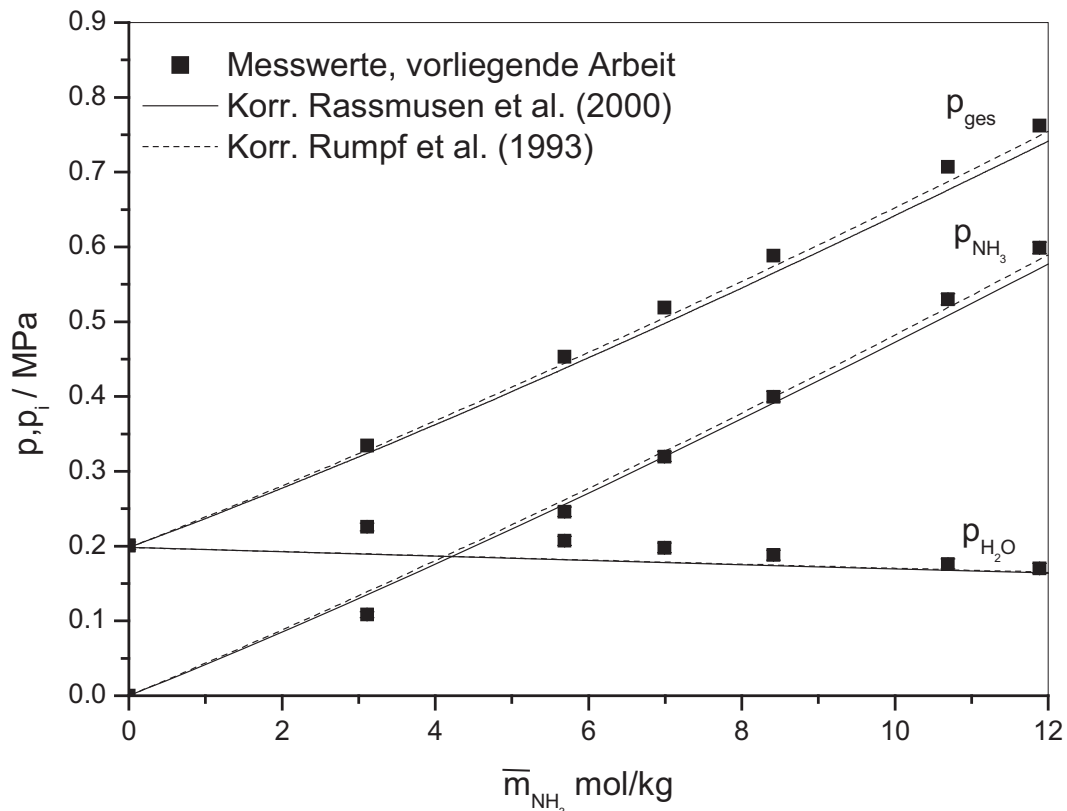


Abbildung 3.3: Löslichkeit von Ammoniak in Wasser bei 393 K. Gesamt- und Partialdrücke in Abhängigkeit von der pauschalen Ammoniakmolalität

3.6.2 Löslichkeit von Ammoniak in Methanol + Wasser - Gemischen

Die Löslichkeit von Ammoniak in Methanol + Wasser - Gemischen wurde bei 313, 353 und 393 K bei Methanolkonzentrationen von 5, 25, 50, 75, 95 und 100 mol% in der Ausgangslösung und bei Gesamtdrücken bis maximal 1,6 MPa bestimmt. Die maximale Ammoniakmolalität lag im Allgemeinen bei ca. 12 mol/kg Lösungsmittelgemisch. Bei den Untersuchungen bei 313 K und 75 mol% Methanol lag die maximale Ammoniakmolalität nur bei 6 mol/kg Lösungsmittelgemisch. Bei 95 mol% Methanol und 313 K wurden keine Messungen durchgeführt. Bei 313 K und 353 K lag die maximale Ammoniakmolalität in reinem Methanol bei etwa 14 mol/kg Methanol. Für das System Ammoniak + Methanol

wurden von J. Xia auch Untersuchungen in einer anderen Apparatur (Xia (1998)) bei 313, 353 und 393 K und Ammoniakmolalitäten von bis zu 66 mol/kg durchgeführt. Der maximale Druck betrug dabei 4.2 MPa.

3.6.2.1 Ergebnisse

Die Messergebnisse sind im Anhang in den Tabellen A 6.2 (Messwerte vorliegende Arbeit) und A 6.3 (Messwerte von Xia) zusammengestellt. In der Abbildung 3.4 ist der Gesamtdruck über der Ammoniakmolalität bei 353 K und verschiedenen Methanolkonzentrationen im Vergleich zum Druckverlauf beim Lösen von Ammoniak in reinem Wasser (berechnet mit einer Korrelation von Rumpf (1993)) aufgetragen. Aus dem Verlauf der Messwerte ist ersichtlich, dass sich Ammoniak in Wasser besser als in Methanol löst. Mit steigender Methanolkonzentration steigt bei festgehaltener Ammoniakmolalität der Gesamtdruck. Bei höheren Methanolkonzentrationen ist der Druckanstieg bei Zugabe von Ammoniak größer als bei niedrigen Methanolkonzentrationen. So steigt z. B. der Druck bei der Zugabe von 12 mol Ammoniak zu einem Kilogramm reinem Wasser lediglich um 0.2 MPa, bei Zugabe zu einem Kilogramm reinem Methanol jedoch um über 0.6 MPa. In der Abbildung 3.5 ist der Gesamtdruck über der pauschalen Ammoniakmolalität aufgetragen. Dargestellt sind Ergebnisse bei einem Methanolgehalt von 50 mol% und 313, 353 und 393 K. Man erkennt, dass mit steigender Temperatur die Löslichkeit von Ammoniak abnimmt. Bei Zugabe von 12 mol Ammoniak zu einem Kilogramm Lösungsmittelgemisch steigt bei 313 K der Druck um 0.1 MPa, bei 393 K dagegen um über 0.5 MPa.

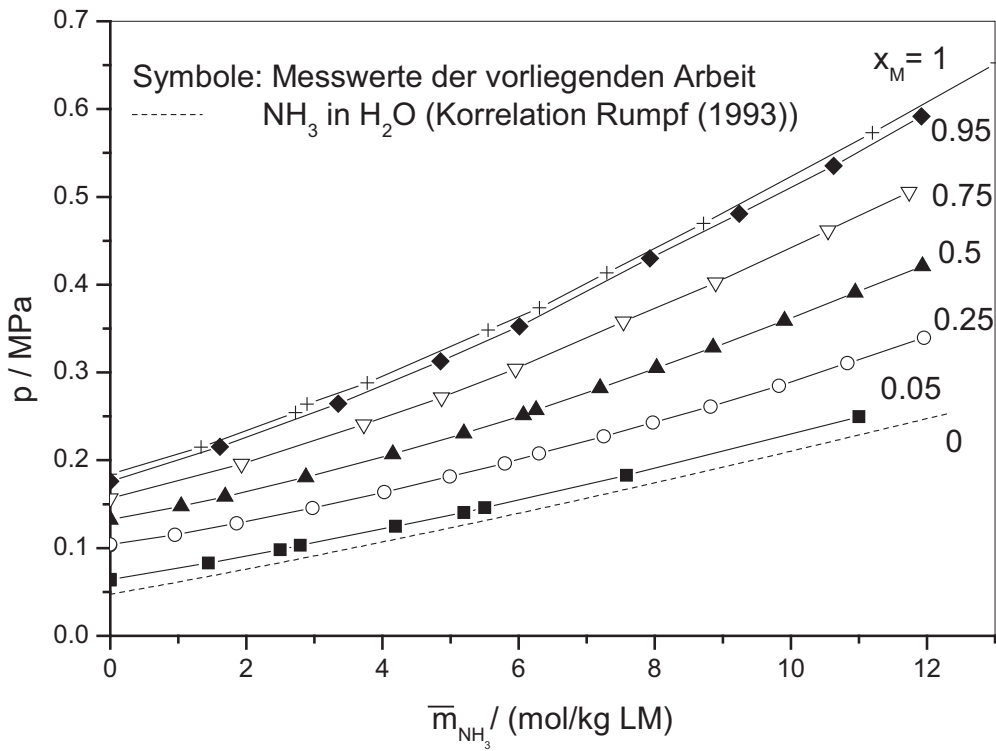


Abbildung 3.4: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 353.15 K

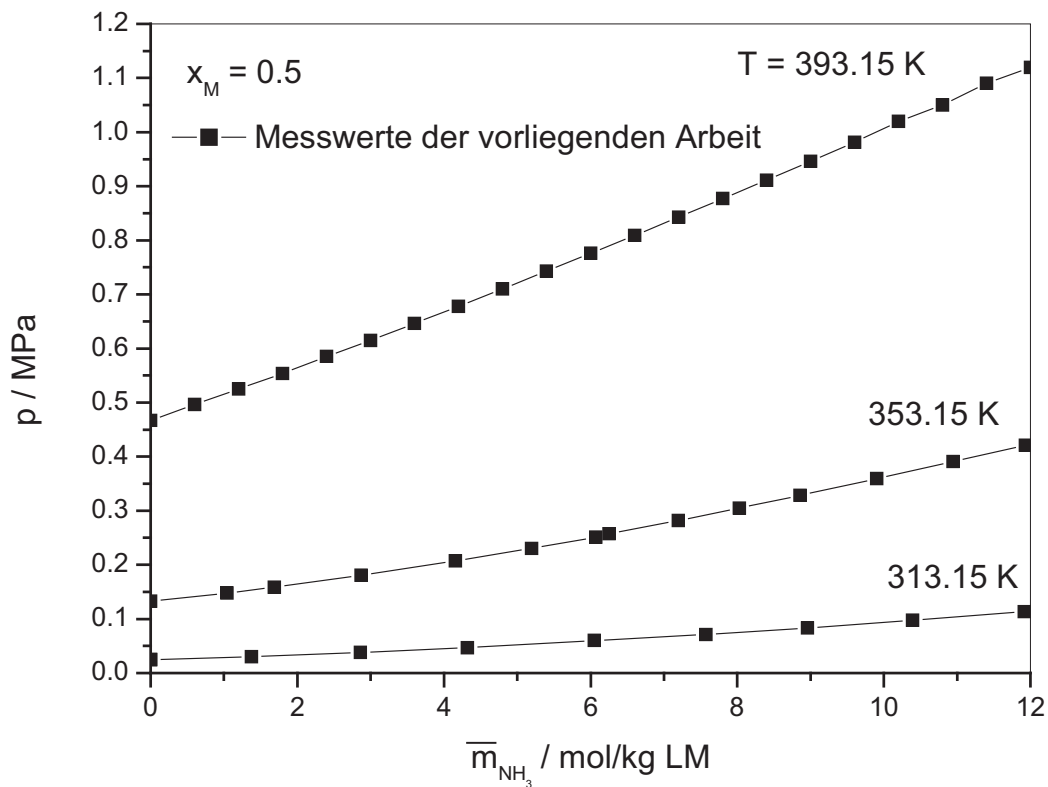


Abbildung 3.5: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei einem Methanolgehalt von 50 mol% in der Ausgangslösung

3.6.3 Löslichkeit von Ammoniak in Methanol + Wasser + Salz - Lösungen

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden auch einige Messreihen zur Bestimmung der Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen, salzhaltigen Methanollösungen bei 353 und 393 K durchgeführt. Als Salze wurden Natriumchlorid und Natriumsulfat verwendet. Die Methanolkonzentration (im salzfreien Lösungsmittel) lag bei Natriumchlorid bei 25, 50 und 75 mol%, bei Natriumsulfat bei 5 und 25 mol%. Die Molalität der Salze in der Ausgangslösung lag bei Natriumchlorid zwischen 0.25 und 2 mol/kg salzfreies Lösungsmittelgemisch, bei Natriumsulfat zwischen 0.15 und 1 mol/kg salzfreies Lösungsmittelgemisch. Die maximale Ammoniakmolalität betrug jeweils etwa 6 mol/kg salzfreies Lösungsmittelgemisch (vgl. Tabelle 3.6).

3.6.3.1 Ergebnisse

Mit zunehmendem Methanolgehalt nimmt die Löslichkeit von Natriumchlorid und Natriumsulfat in der flüssigen Mischung ab. So lässt sich in reinem Methanol praktisch kein Natriumsulfat lösen. Natriumchlorid ist etwas besser als Natriumsulfat in Methanol löslich (vgl. Abb. 3.6). In der Literatur findet man Messwerte für die Löslichkeit von Natriumchlorid

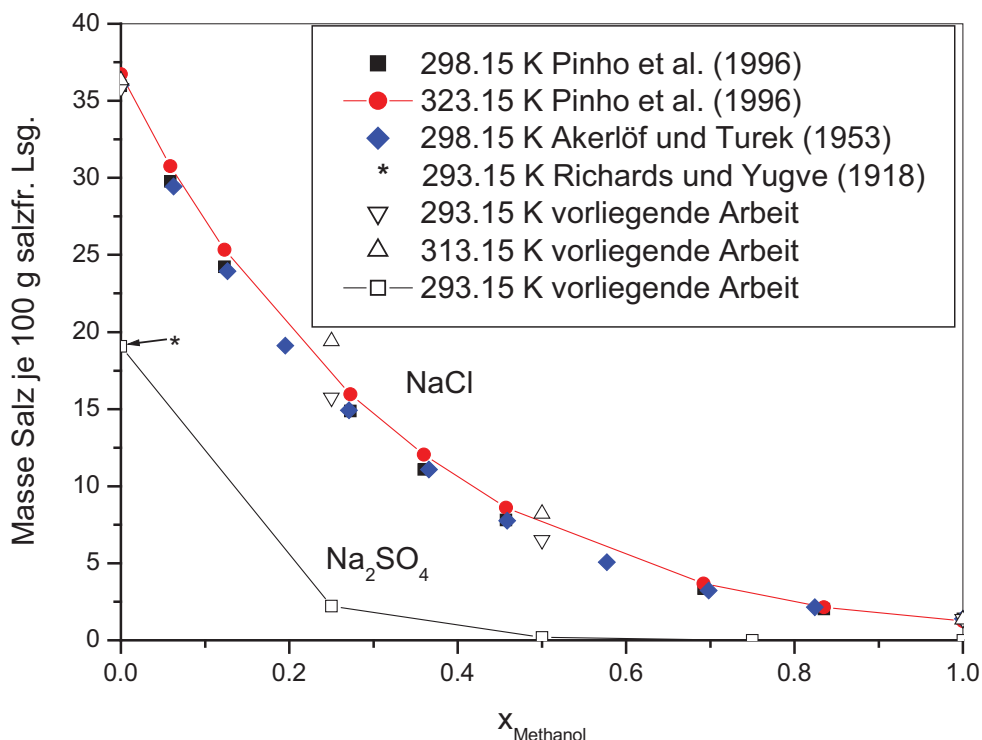


Abbildung 3.6: Löslichkeit von NaCl und Na_2SO_4 in wässrigen Methanollösungen

in Methanol + Wasser - Gemischen (z. B. Pinho et al. (1996), Akerlöf und Turek (1953)). Für die Löslichkeit von Natriumsulfat in diesem Lösungsmittelgemisch sind keine Messwerte in der Literatur bekannt. Deshalb wurde diese Löslichkeit bestimmt. Dazu wurde in ein thermostatisiertes Rührgefäß schrittweise solange Salz eingewogen, bis sich das zugegebene Salz nicht mehr löste. Diese Grenze wurde visuell beobachtet. Um das experimentelle Ergebnis zu bestätigen, wurde nach dem Salzausfall noch einmal salzfreie Lösung zugefüllt, bis sich das Salz wieder vollständig löste. Es wurden auch einige Versuche mit anderen Salzen (z. B. Natriumhydrogencarbonat und Ammoniumcarbamat) durchgeführt. Bei diesen Salzen wurde in einem thermostatisierten Rührbehälter eine gesättigte Lösung hergestellt, aus der flüssigen Phase eine Probe entnommen und mittels Titration der Salzgehalt bestimmt. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen sind im Anhang A 10 in den Tabellen A 10.1 und A 10.2 zusammengestellt.

Durch die Zugabe der Salze wurde die Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen, methanolhaltigen Lösungen fast nicht verändert. Das liegt auch an den geringen Salzkonzentrationen von maximal 2 mol/kg Lösungsmittelgemisch (wegen der geringen Löslichkeit der Salze in methanolhaltigen wässrigen Lösungen). Die Abbildung 3.7 zeigt als Beispiel den Druck beim Lösen von Ammoniak in einer wässrigen Lösung mit 25 mol% Methanol bei 393 K und einer Natriumchloridkonzentration von ca. 1 bzw. ca. 2 mol/kg Lösungsmittelgemisch sowie einer Natriumsulfatkonzentration von 0.15 mol/kg

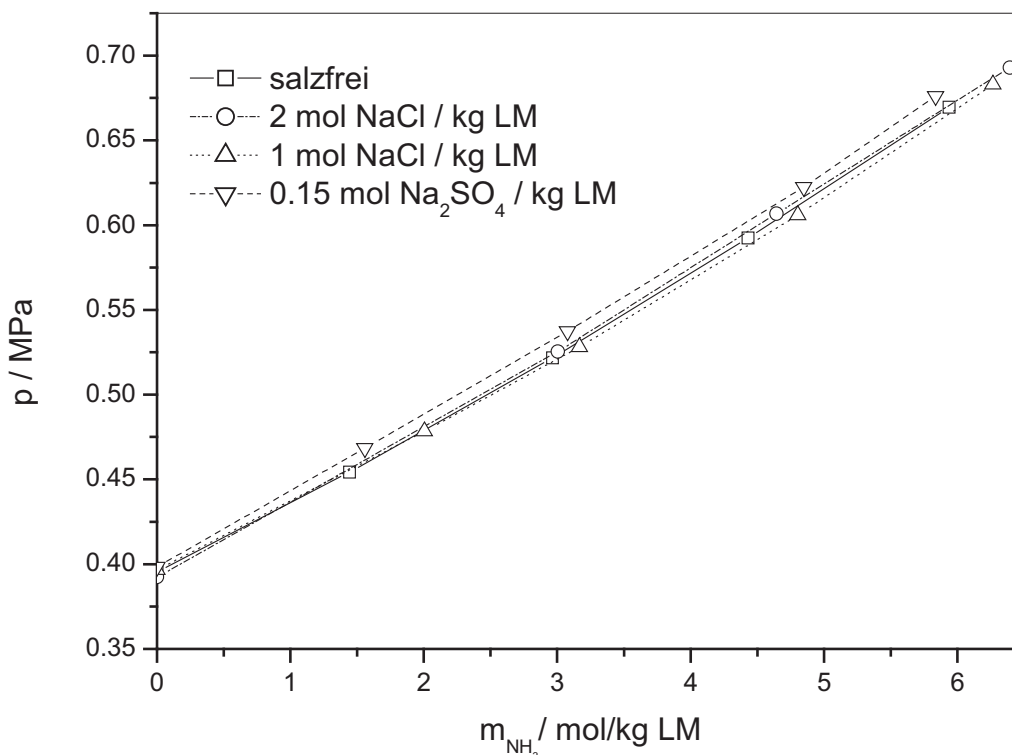


Abbildung 3.7: Löslichkeit von Ammoniak in Methanol + Wasser + Salz - Lösungen bei 393 K und 25 mol% Methanol (im salzfreien Lösungsmittelgemisch)

Lösungsmittelgemisch. Lediglich bei der Messreihe mit Natriumsulfat weicht der Druck von den Ergebnissen für die salzfreie Lösung soweit ab, dass die experimentelle Unsicherheit der Druckmessung überschritten wird.

3.6.4 Löslichkeit von Ammoniak in Phenol + Wasser - Gemischen

Die Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Phenollösungen mit Phenolmolalitäten von 2 und 6 mol/kg Wasser wurde bei Temperaturen von 313, 353 und 393 K bis zu einer Ammoniakmolalität von ca. 20 mol/kg Wasser gemessen. Der Druck lag bei maximal 1 MPa. Bei 353 K wurde auch die Löslichkeit in wässrigen Lösungen von 1 und 3 mol Phenol je kg Wasser untersucht. Phenol ist bei Temperaturen bis etwa 340 K nicht vollständig mit Wasser mischbar. Es weist (vgl. Abbildung 3.8) eine Mischungslücke auf. Die Untersuchungen wurden auf die wasserreiche Seite außerhalb der Mischungslücke beschränkt.

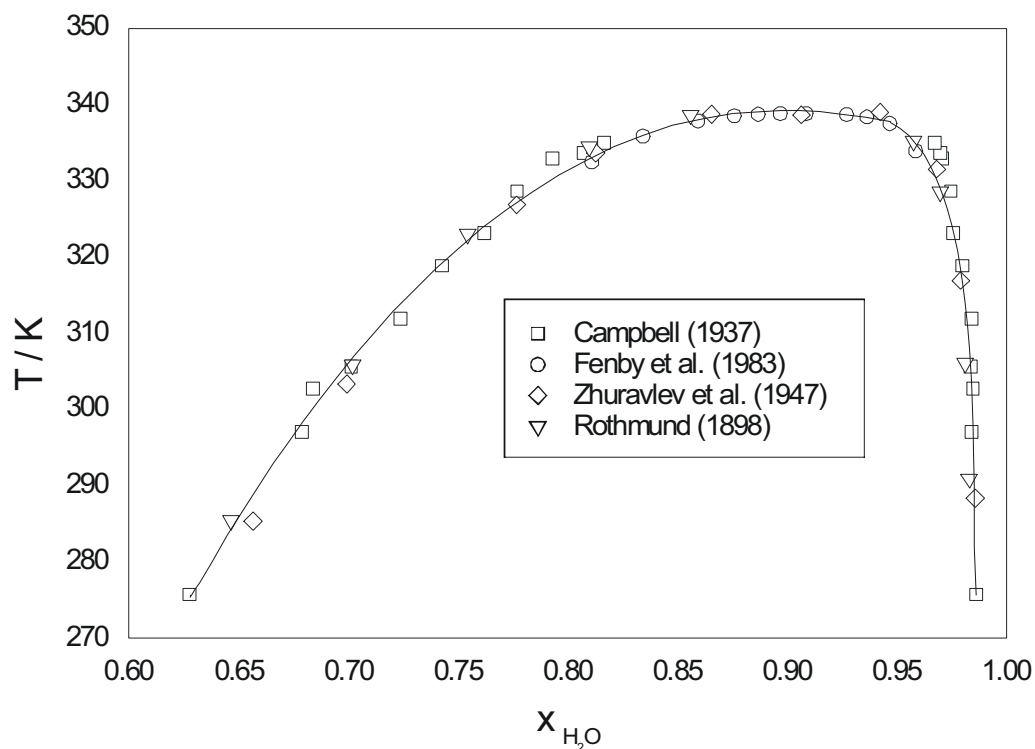


Abbildung 3.8: Experimentelle Ergebnisse für das Flüssig-Flüssig-Gleichgewicht im System Phenol + Wasser

3.6.4.1 Ergebnisse

Beim Lösen von Ammoniak in phenolhaltigen, wässrigen Lösungen zeigt sich bei geringen Phenolmolalitäten (bis 2 mol/kg Wasser) etwa der gleiche Druckverlauf wie beim Lösen von Ammoniak in reinem Wasser. Bei höheren Phenolgehalten kann man einen geringeren Druckanstieg als beim Lösen in Wasser beobachten, d. h. Ammoniak löst sich besser in einer phenolhaltigen Lösung als in reinem Wasser (vgl. Abb. 3.9). Betrachtet man das Lösungsverhalten von Ammoniak bei einer konstanten Phenolkonzentration und verschiedenen Temperaturen (Abb. 3.10) so erkennt man, dass mit zunehmender Temperatur die Löslichkeit von Ammoniak in der phenolhaltigen Lösung abnimmt. So steigt der Druck beim Lösen von ca. 20 mol Ammoniak je kg Wasser bei 313 K in einer 6 molalen wässrigen Phenollösung um weniger als 0.1 MPa, bei 353.15 K um über 0.2 MPa und bei 393.15 K um

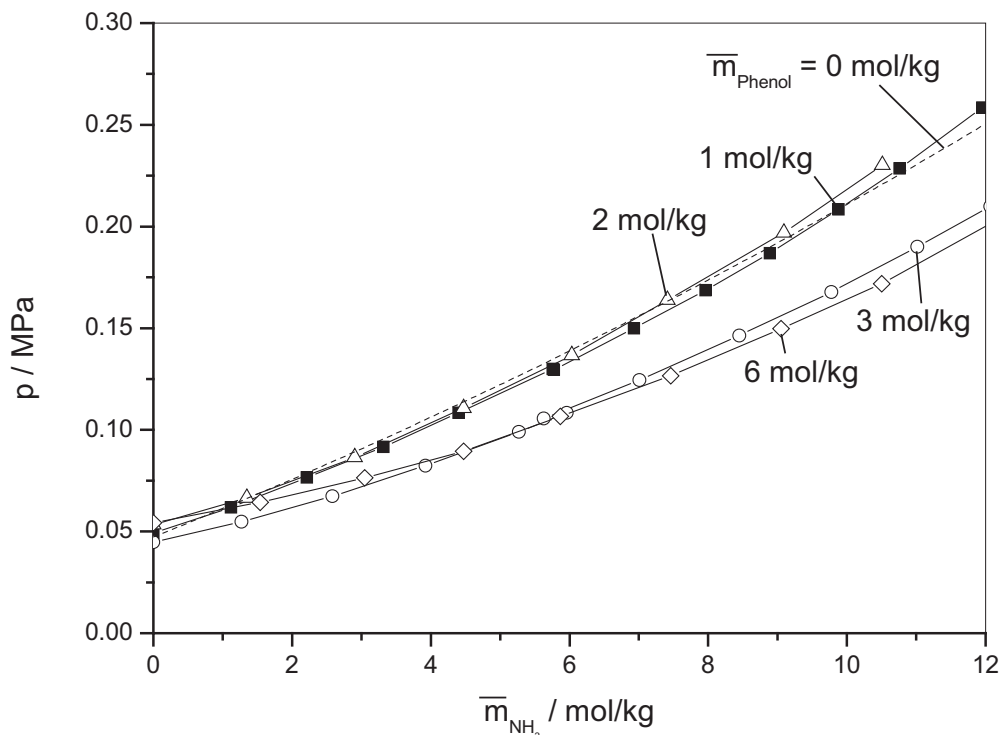


Abbildung 3.9: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Phenollösungen bei 353 K (im Vergleich zur Löslichkeit von Ammoniak in reinem Wasser, die mit einer Korrelation von Rumpf berechnet wurde)

0.8 MPa. Die Zugabe von Ammoniak zu Phenol + Wasser - Lösungen verkleinert die Mischungslücke. Bei 313 K und 6 mol Phenol je kg Wasser wird vor der Zugabe von Ammoniak ein Flüssig-Flüssig-Phasenzерfall beobachtet. Mit der ersten Zugabe von Ammoniak verschwindet die zweite flüssige Phase. Phenol hat einen sehr geringen

Dampfdruck (bei 353 K: etwa 1.9 kPa, bei 393 K ca. 12.8 kPa). Deswegen ist es schwierig, Phenol gaschromatographisch in der Gasphase verlässlich zu detektieren. Die Messergebnisse (Partialdrücke) von Phenol sind nur als Trend zu werten, da die Auswertung eines Phenolpeaks mit großen Ungenauigkeiten behaftet ist. In der Tabelle A 6.6 im Anhang A 6 sind die Messergebnisse für das System Phenol + Wasser + Ammoniak zusammengefasst.

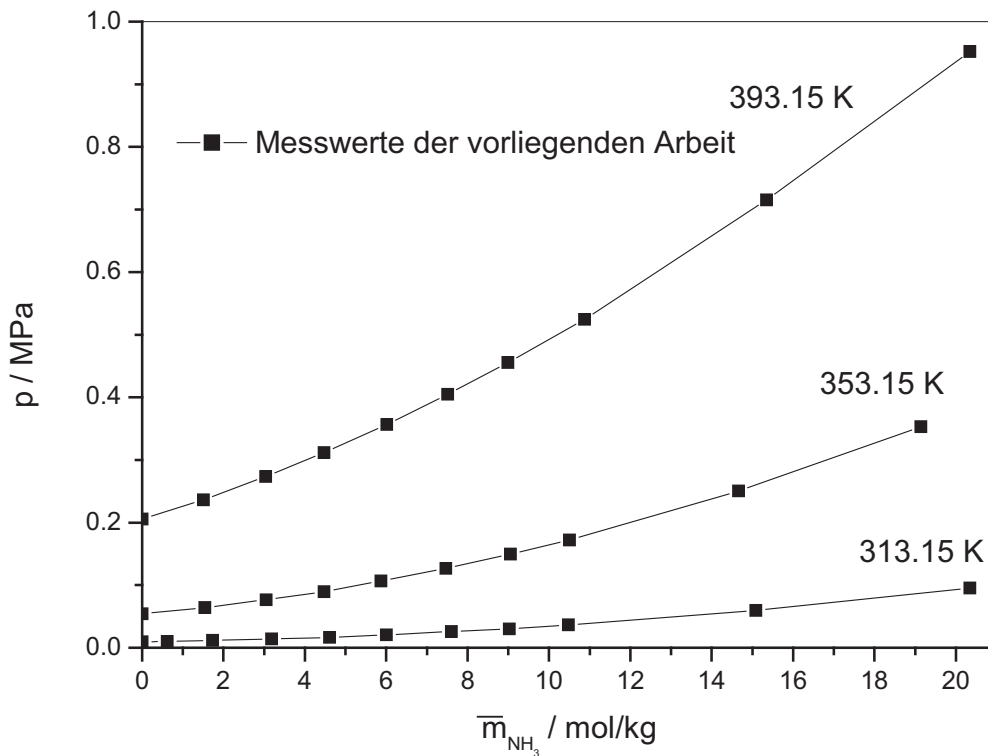


Abbildung 3.10: Löslichkeit von Ammoniak in einer 6 molalen wässrigen Phenollösung

3.7 Untersuchungen zur simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in organisch-wässrigen salzhaltigen Lösungen

In der vorliegenden Arbeit wurde auch die simultane Löslichkeit von Ammoniak und Kohlendioxid in wässrig- organischen, salzhaltigen Lösungen bestimmt. Da Kohlendioxid eine schwache Säure und Ammoniak eine schwache Base ist, kommt es in der flüssigen Phase zu chemischen Reaktionen.

3.7.1 Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser

Die simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in reinem Wasser wurde in früheren Arbeiten der Arbeitsgruppe (Müller, 1983; Göppert, 1985; Kurz, 1994) im Bereich von 40 bis 200 °C untersucht. Die in der vorliegenden Arbeit durchgeführten Messungen dienten nur zur Überprüfung der Genauigkeit der mit der neuen Versuchsanlage erhaltenen Ergebnisse.

3.7.1.1 Ergebnisse

Es wurden zwei Versuchsreihen (bei 6 und 12 mol NH₃/kg H₂O) zur Bestimmung der simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 393 K durchgeführt. Der maximale Druck betrug bei diesen Messungen 4.3 MPa. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen sind in der Tabelle A 7.1 im Anhang 7 zusammengestellt. Bei der Zugabe von Kohlendioxid zu einer wässrigen ammoniakalischen Lösung sinkt der Gesamtdruck zunächst ab. Erst wenn molekular gelöstes Ammoniak weitgehend durch Kohlendioxid in ionische nichtflüchtige Spezies umgewandelt ist, steigt der Gesamtdruck an. Die Abbildung 3.11 zeigt die experimentellen Ergebnisse der vorliegenden Arbeit. Ergänzend sind auch die Gesamtdrucke eingetragen, die eine von Lichtfers (2000) angegebene Korrelation liefert, der die früheren Ergebnisse der Arbeitsgruppe zugrunde liegen. Man erkennt eine gute Übereinstimmung zwischen den neuen experimentellen Daten und der Korrelation.

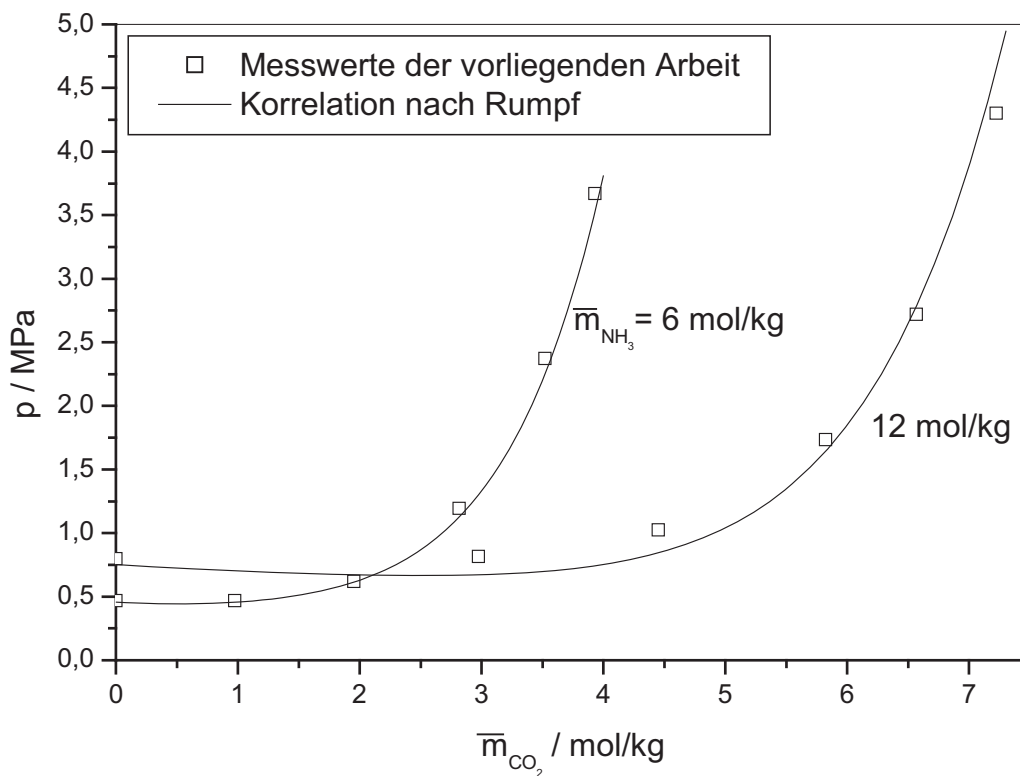


Abb.3.11: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid in wässrigen ammoniakalischen Lösungen bei 393 K (exp. Ergebnisse im Vergleich mit dem Pitzer-Modell von Lichtfers (2000))

3.7.2 Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid in Ammoniak + Methanol + Wasser-Gemischen

Die simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol + Wasser-Gemischen wurde bei 313, 353 und 393 K bestimmt. Die Methanolkonzentration in der wässrigen Ausgangslösung betrug 5, 25, 50, 75, 95 und 100 mol%. Die Molalität von Ammoniak betrug 6 bzw. 12 mol/kg Lösungsmittelgemisch. Der Gesamtdruck betrug maximal 5.5 MPa. Bei 313 K wurden die Untersuchungen bis 75 mol% Methanol und einer Ammoniakmolalität von 6 mol Ammoniak je Kilogramm Lösungsmittelgemisch durchgeführt. Bei höheren Methanolkonzentrationen und 313 K wurden keine Messungen durchgeführt, da sich sehr lange Einstellzeiten für das Gleichgewicht ergaben.

3.7.2.1 Ergebnisse

Die Messergebnisse sind im Anhang in der Tabelle A 7.2 zusammengestellt. Die dort angegebenen Zusammensetzungen der Gasphase (Partialdrücke) sind aus Mehrfachanalysen berechnete Mittelwerte. Die Ungenauigkeiten der einzelnen Analysen der Gasphase liegen in der Regel innerhalb der angegebenen Fehlergrenzen. In der Abbildung 3.12 sind beispielhaft für 393 K und eine pauschale Ammoniakmolalität von 12 mol je Kilogramm Lösungsmittelgemisch die Messwerte für den Gesamtdruck über der pauschalen Kohlendioxidmolalität aufgetragen.

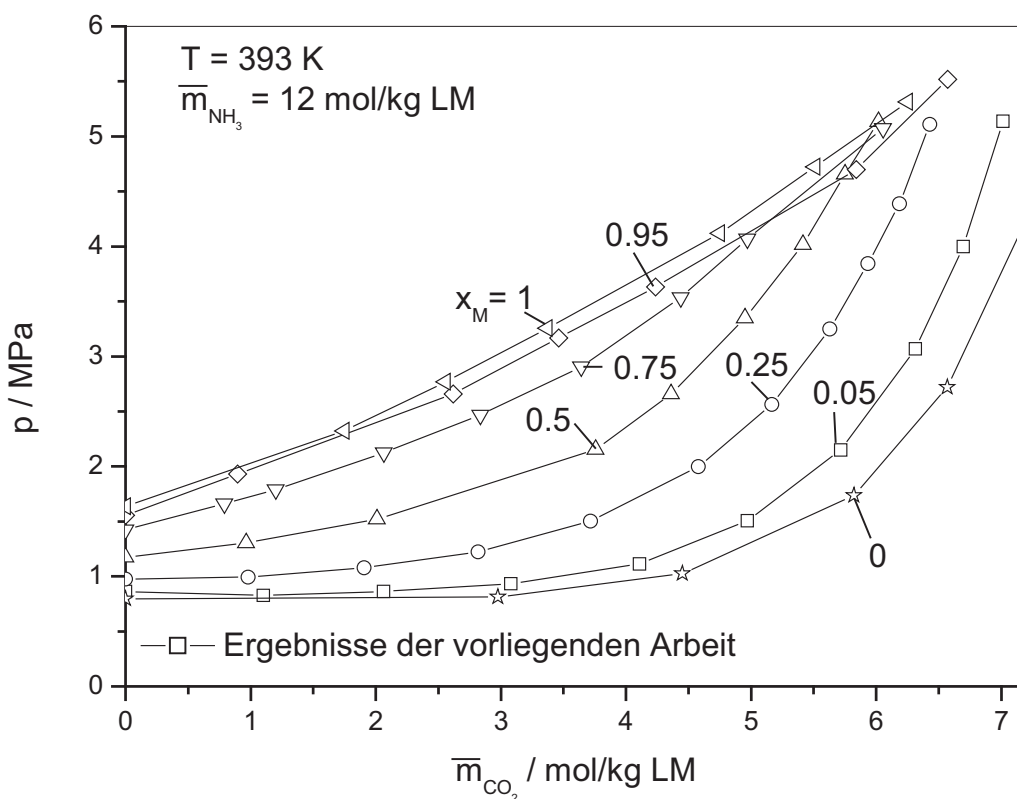


Abb.3.12: Gesamtdruck zum Lösen von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol-Wasser-Gemischen bei 393 K und 12 mol NH_3 /kg LM

Man erkennt insbesondere bei geringen Methanolkonzentrationen den beim simultanen Lösen von Kohlendioxid und Ammoniak in einer wässrigen Lösung typischen Druckverlauf. Der Gesamtdruck steigt in solchen Lösungen erst stark an, wenn molekular gelöster Ammoniak zu ionischen nichtflüchtigen Spezies umgewandelt ist. Bei hohen Methanolkonzentrationen haben die chemischen Reaktionen nur noch einen geringen Einfluss. Man beobachtet einen Verlauf des Gesamtdruckes in Abhängigkeit der Konzentration des in der flüssigen Phase gelösten Gases, wie es für das „physikalische“ Lösen von Gasen in einer Flüssigkeit typisch

ist. Die „chemischen“ Effekte beim simultanen Lösen von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Methanollösungen erkennt man deutlich, wenn man die Partialdrücke von Kohlendioxid und Ammoniak betrachtet. Dazu zeigt die Abb. 3.13 ein typisches Beispiel. Der Partialdruck von Ammoniak sinkt nahezu proportional zur stöchiometrischen Molalität von Kohlendioxid in der flüssigen Phase. Der Partialdruck von Kohlendioxid steigt dabei geringer an als beim „physikalischen“ Lösen zu erwarten wäre. Die Partialdrücke von Methanol und Wasser bleiben nahezu konstant.

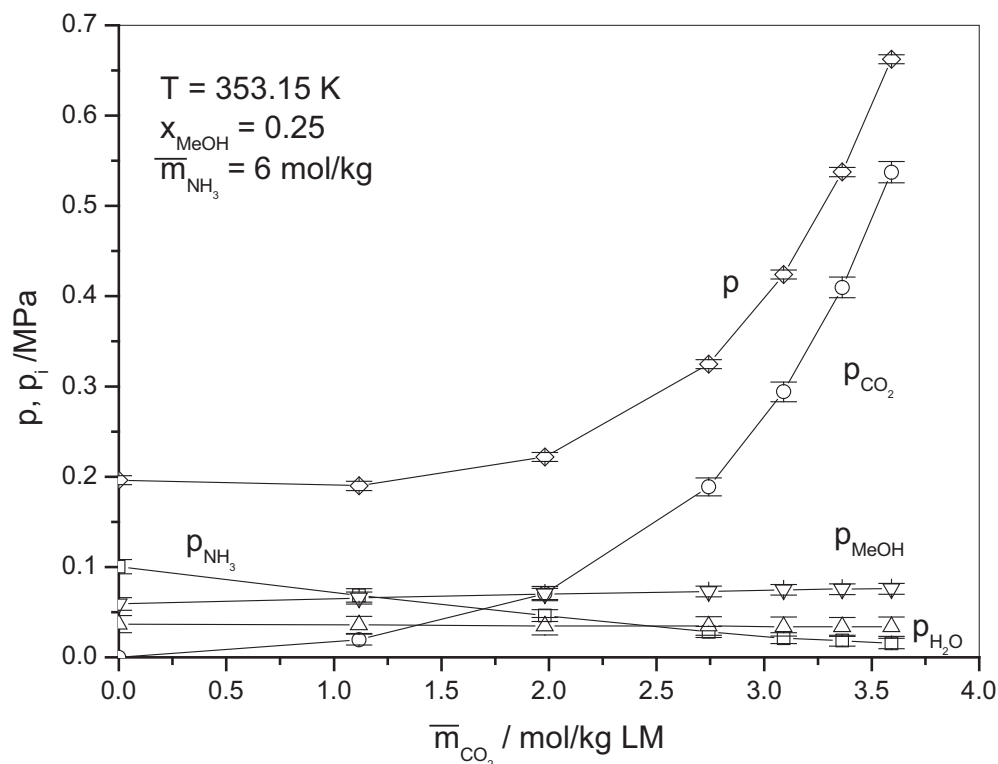


Abb.3.13: Gesamt- und Partialdrücke beim simultanen Lösen von Kohlendioxid und Ammoniak in einer Methanol + Wasser-Lösung bei 353 K

3.7.3 Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol + Wasser + Salz-Lösungen

Neben der simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in salzfreien Methanol + Wasser-Gemischen wurde auch die simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in salzhaltigen Methanol + Wasser-Lösungen untersucht. Diese Untersuchungen wurden auf 353 K und 393 K beschränkt. Als Salze wurden wiederum Natriumsulfat und Natriumchlorid verwendet. Die Konzentration von Natriumsulfat betrug bis zu einem Mol je Kilogramm Lösungsmittelgemisch (in wässrigen Lösungen mit 5 und 25 mol% Methanol). Die

Konzentration von Natriumchlorid betrug bis zu 2 mol/kg Lösungsmittelgemisch (in wässrigen Lösungen mit 25, 50 und 75 mol% Methanol). Die Ammoniakmolalität betrug jeweils etwa 6 mol/kg Lösungsmittelgemisch. Der maximale Druck betrug ca. 5 MPa.

3.7.3.1 Ergebnisse

Die Messergebnisse sind im Anhang A 7 in den Tabellen A 7.3 und A 7.4 zusammengestellt. Beim simultanen Lösen von Kohlendioxid und Ammoniak in diesen Lösungsmittelgemischen wird ein Einsalzen beobachtet, d. h. bei Zugabe von Natriumchlorid bei sonst identischen stöchiometrischen Konzentrationen ist der Druck über der salzhaltigen Lösung geringer als über der salzfreien Lösung. Die Abb. 3.14 zeigt dazu ein typisches Beispiel. Dabei ist der Gesamtdruck über der pauschalen Kohlendioxidmolalität bei 393 K, 25 mol% Methanol und 6 mol/kg Lösungsmittelgemisch Ammoniak aufgetragen, für die salzfreie Lösung und für die Lösungen mit 1 bzw. 2 mol Natriumchlorid je kg Lösungsmittel.

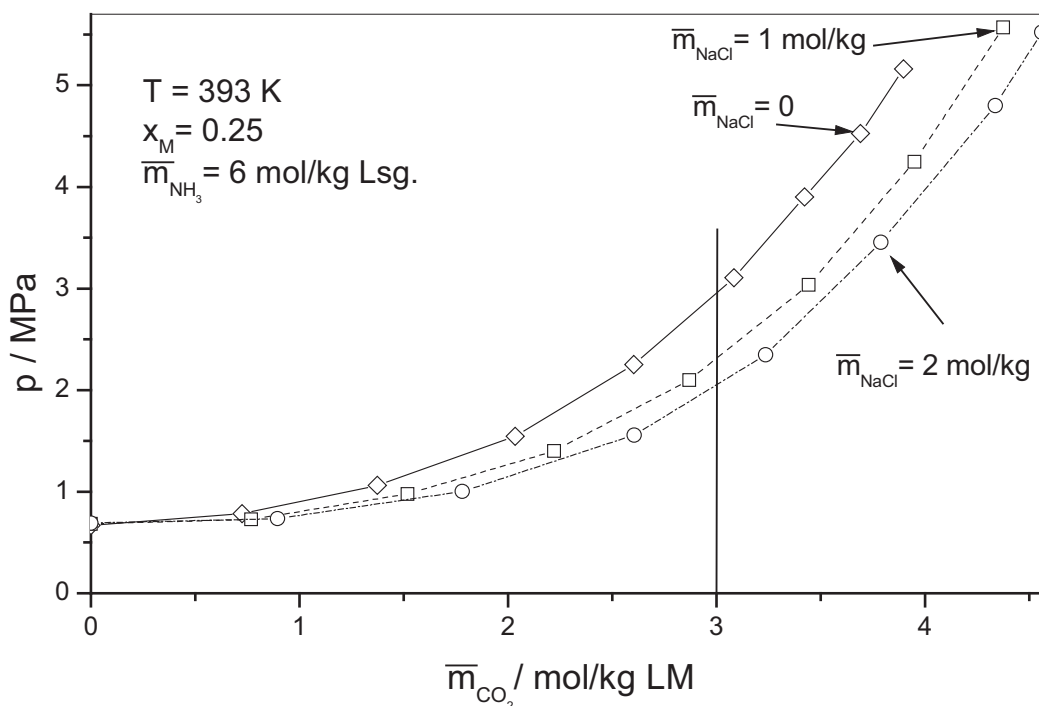


Abb. 3.14: Gesamtdruck zum Lösen von Kohlendioxid in wässriger, ammoniakalischer Methanollösung (25 mol% Methanol und 6 mol/kg LM Ammoniak) bei 393 K: Einfluss von Natriumchlorid

Zum Lösen von 3 mol Kohlendioxid in einem Kilogramm Lösungsmittelgemisch, das 6 mol Ammoniak je Kilogramm Lösungsmittelgemisch enthält, ist bei 393 K ein Druck von ca. 3 MPa erforderlich. Durch Zugabe von 1 bzw. 2 mol Natriumchlorid pro Kilogramm Lösungsmittelgemisch sinkt der zum Lösen erforderliche Gesamtdruck auf 2.3 bzw. 2 MPa.

3.8 Modellierung

3.8.1 Modellierung des Phasengleichgewichts für die Systeme Methanol + Wasser, Ammoniak + Methanol + Wasser und Kohlendioxid + Methanol + Wasser

Zum Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht des binären Systems Wasser + Methanol sind in der Literatur experimentelle Angaben in großer Anzahl bekannt (z. B. Albert et al. (1996), Bao et al. (1995), Bredig et al. (1927), Broul et al. (1969), Butler et al. (1933), Dulitskaya (1945), Grisworld et al. (1952), Hall et al. (1979), Kooner et al. (1980), Kurihara et al. (1995), McGlashan et al. (1976), Ratcliff et al. (1969), Reamer et al. (1952) und Schroeder (1958)). Bei der Anpassung der beiden binären, temperaturabhängigen Wechselwirkungsparameter des UNIQUAC-Modells zeigte sich, dass es viele Parameterpaare gibt, die die experimentellen Daten beschreiben.

Die Löslichkeit von Ammoniak in Wasser wurde von Rumpf unter Verwendung des G^E -Ansatzes von Pitzer modelliert (vgl. Kap. 3.6.1) An diese Korrelation von Rumpf wurden die beiden binären, temperaturabhängigen Wechselwirkungsparameter des UNIQUAC-Modells angepasst.

Für das Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht des Systems Ammoniak + Methanol wurde für den interessierenden Temperatur- und Konzentrationsbereich nur eine Literaturangabe (Inomata et al. (1988)) gefunden. Zur Anpassung der beiden UNIQUAC-Parameter wurden nur Messwerte der vorliegenden Arbeit verwendet.

Mit dem so ermittelten Parametersatz kann die Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Methanollösungen vorhergesagt werden. Bei einem Vergleich der Mess- mit den Rechenwerten zeigte sich eine gute Übereinstimmung auf der wasserreichen Seite (Methanolkonzentration in Wasser unter ca. 50 Molprozent) bei mäßigen Ammoniakkonzentrationen in der flüssigen Phase (unter ca. 8 mol NH_3 /kg Lösungsmittelgemisch). Außerhalb dieses Bereiches ergaben sich größere Abweichungen zwischen Rechen- und Messwerten. In der parallel laufenden Arbeit zur Beschreibung der Löslichkeit von Kohlendioxid in wässrigen Methanollösungen (Dissertation Jödecke (2003)) zeigte sich ebenfalls, dass eine alleinige Anpassung der Wechselwirkungsparameter des UNIQUAC-Modells an binäre experimentelle Daten bei der Vorhersage der Löslichkeit von Kohlendioxid in der Lösungsmittelmischung kein zufriedenstellendes Ergebnis liefert. Dies resultiert u. a. daher, dass die binären Parameter aus den binären Daten allein nicht zuverlässig bestimmt werden können. Es gibt mehrere, zum Teil stark unterschiedliche Parameterkombinationen, die die jeweils der Anpassung zugrunde gelegten Messwerte zuverlässig beschreiben, jedoch

bei einer Verwendung zur Vorhersage der Eigenschaften mehrkomponentiger Gemische teilweise große Differenzen liefern. Dieser Befund ist - für andere Mischungen - seit längerem bekannt. Zur Verbesserung der Beschreibung der experimentellen Daten wurde deshalb eine simultane Anpassung aller UNIQUAC-Wechselwirkungsparameter durchgeführt. Dabei wurden - um konsistent mit der Arbeit von Jödecke zu bleiben - auch experimentelle Daten zur Löslichkeit von Kohlendioxid in Wasser, in Methanol und in wässrigen Lösungen von Methanol in die Anpassung einbezogen. Die so erhaltenen UNIQUAC-Parameter sind in der Tabelle A 1.8 im Anhang A 1 zusammengestellt. Die Abbildungen 3.11 bis 3.13 zeigen typische Beispiele für einen Vergleich zwischen Mess- und Rechenwerten für das Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht des binären Systems Methanol + Wasser (Abb. 3.11) bzw. die Löslichkeit von Ammoniak (Abb. 3.12) sowie von Kohlendioxid (Abb. 3.13) bei 353 K in wässrigen Lösungen von Methanol. Weitere Vergleiche sind im Anhang A 3 in den Abbildungen A 3.1 bis A 3.8 (Methanol + Wasser) und in den Abbildungen A 3.9 bis A 3.28 (Löslichkeit von Ammoniak in Wasser, wässrigen Methanollösungen und Methanol) sowie in der Dissertation von Jödecke (Löslichkeit von Kohlendioxid in wässrigen Methanollösungen) zu finden. Für die Messwerte der vorliegenden Arbeit ist ein tabellarischer Vergleich zu den Rechenwerten in der Tabelle A 8.1 zusammengestellt.

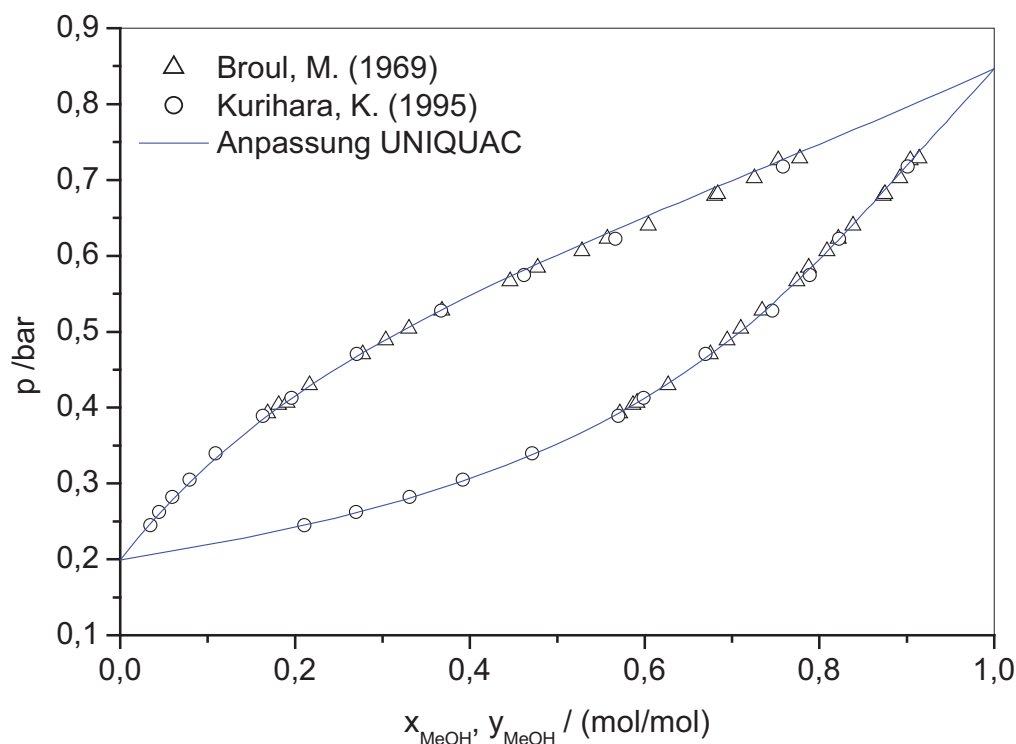


Abb. 3.11: Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht des Systems Methanol + Wasser bei 333 K; Vergleich von Mess- mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC- Modells (Parameter aus Tabelle A 1.8)

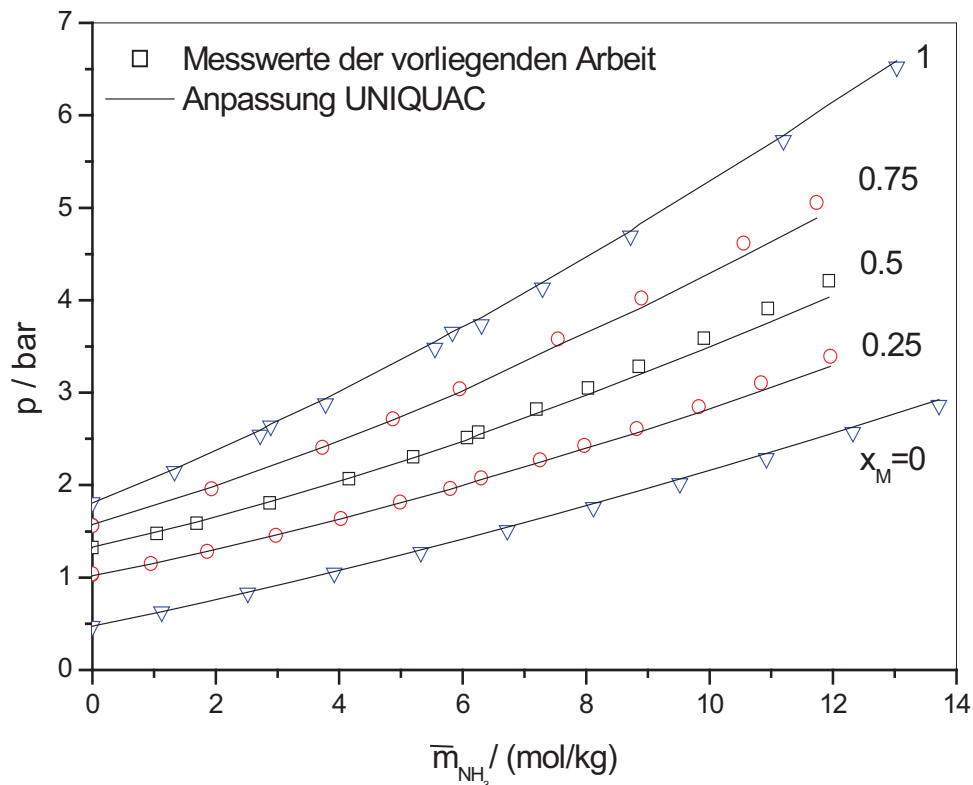


Abb. 3.12: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 353.15 K: Vergleich von Messwerten der vorliegenden Arbeit mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells (Parameter aus Tabelle A 1.8)

Bei der Anpassung der Wechselwirkungsparameter wurden für die Löslichkeit von Ammoniak in Wasser, Methanol und in wässrigen Methanollösungen insgesamt 234 Messwerte bei 313, 353 und 393 K berücksichtigt. Die mittlere relative Abweichung des berechneten vom gemessenen Gesamtdruck (bei Vorgabe der Temperatur und der Zusammensetzung der flüssigen Phase) beträgt 1.8 %, die maximale relative Abweichung 8.7 % und die Standardabweichung 1.6 %.

Der der Anpassung zugrunde gelegte Datensatz enthält 320 Messwerte des Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichts des binären Systems Methanol + Wasser. Die bei Vorgabe von Temperatur und Zusammensetzung der flüssigen Phase berechneten Gesamtdrucke weichen im Mittel um 1.6 % (max. 16 %) von den Messwerten ab, die Standardabweichung beträgt 1.6 %. Die maximale relative Abweichung tritt zu einem Messwert von McGlasham et al. (1976) bei 308 K und $x_M = 0.0553$ mol/mol auf.

Der Druckverlauf beim Lösen von Kohlendioxid in Wasser, in Methanol und in Mischungen aus Wasser und Methanol wird durch das UNIQUAC-Modell in einem weiten Bereich sehr gut wiedergegeben. Ein detaillierter Vergleich wurde von Jödecke (2003) durchgeführt. Teile

dieses Vergleichs sind im Anhang A 3 in den Abbildungen A 3.29 und A 3.30 (für 313.15 und 393.15 K) dargestellt.

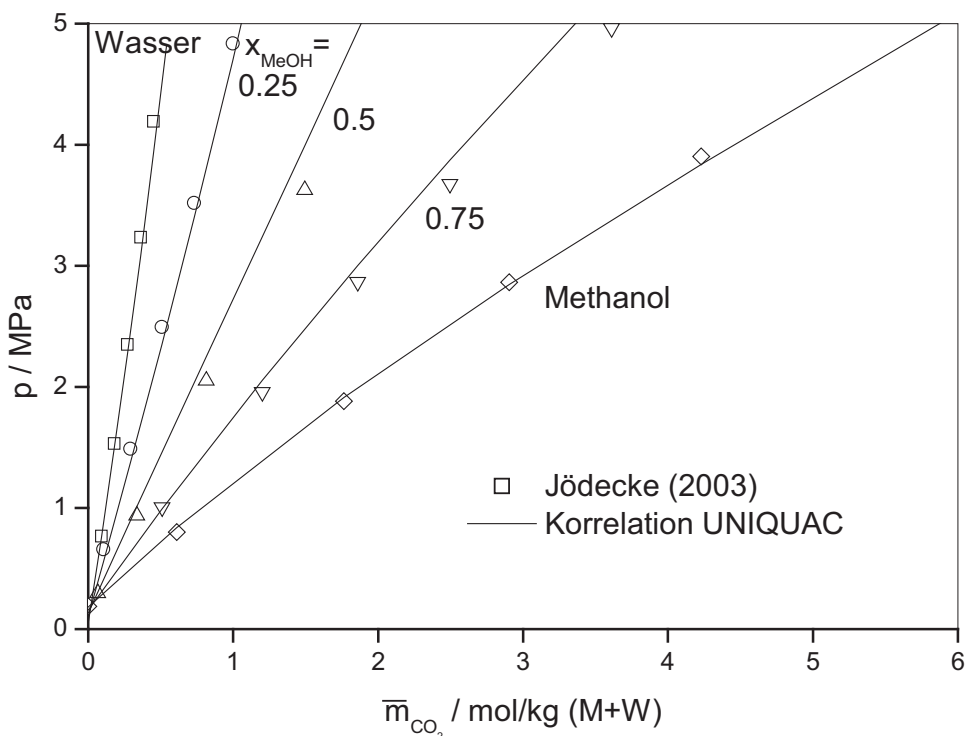


Abb. 3.13: Löslichkeit von Kohlendioxid in wässrigen Lösungen von Methanol bei 353.15 K: Vergleich experimenteller Daten von Jödecke (2003) mit Rechenwerten unter Verwendung des UNQUAC- Modells (Parameter aus Tabelle A 1.8)

3.8.2 Modellierung der simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser

Die vorliegende Arbeit ist eine Weiterführung früherer Arbeiten von Müller (1983), Göppert (1985) und Kurz (1994) zur simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser. In der vorliegenden Arbeit wurde auch untersucht, ob die experimentellen Ergebnisse dieser Arbeiten mit dem hier entwickelten, auf dem UNQUAC- Ansatz zur Beschreibung der Gibbs'schen Exzessenergie in wässrigen Lösungen beruhenden Modell für das Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht beschrieben werden können.

Thomsen und Rasmussen (1999) haben ein, dem in Kapitel 2.3 beschriebenen Elektrolyt-UNQUAC-Ansatz ähnliches Modell entwickelt und damit auch die simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser im Temperaturbereich von 20 bis 100 °C, bei Ammoniakmolalitäten bis zu 40 mol/kg und einem maximalen Druck von 7 MPa korreliert. Thomsen und Rasmussen haben allerdings nicht nur diese Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichte, sondern auch die Löslichkeit von Salzen in Wasser in ihre Betrachtungen

einbezogen. Um eine gute Korrelation zu erreichen, wurden nicht nur die Wechselwirkungsparameter, sondern auch Größen- und Formparameter in einer simultanen Anpassung an eine große Datenbasis (VLE + SLE) bestimmt. Die dabei erhaltenen Oberflächen- und Volumenparameter weichen deutlich von den üblicherweise verwendeten Zahlenwerten ab. Damit ist es Thomsen und Rasmussen gelungen, die Messwerte von Göppert (1984) und Kurz (1994) zur simultanen Löslichkeit von Ammoniak und Kohlendioxid in Wasser gut zu beschreiben. Die Abbildungen 3.14 und 3.15 zeigen typische Beispiele für die Qualität der Wiedergabe des Gesamtdruckes und der Partialdrücke (Rechenwerte unter Vorgabe der Temperatur und der pauschalen Zusammensetzung der flüssigen Phase). Die Abbildungen 3.14a und 3.15a zeigen einen ähnlichen Vergleich, wobei die Berechnungen mit einem auf dem Pitzer-Ansatz zur Beschreibung der Gibbs'schen Exzessenergie der wässrigen Phase beruhenden Modell erfolgten (Lichtfers (2000)). Beim Vergleich der Abbildungen 3.14 und 3.15 mit den Abbildungen 3.14a und 3.15a erkennt man, dass beide Modelle die simultane Löslichkeit von Ammoniak und Kohlendioxid in Wasser etwa gleich gut beschreiben. Die Verwendung des UNIQUAC-Ansatzes ermöglicht - im Prinzip - eine vergleichsweise einfache Erweiterung auf wässrig-organische Lösungsmittelgemische. Es ist jedoch nicht gelungen, den von Thomsen und Rasmussen angegebenen Parametersatz so zu erweitern, dass auch die simultane Löslichkeit von Ammoniak und Kohlendioxid in wässrigen Lösungen von Methanol zuverlässig beschrieben werden kann.

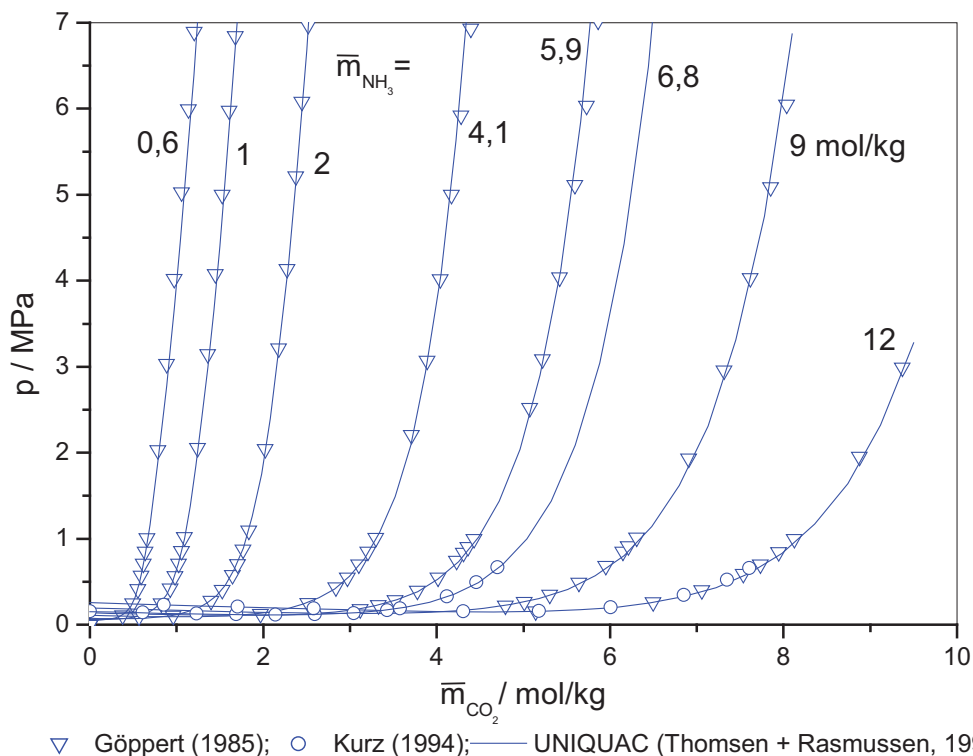


Abb. 3.14: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 353.15 K: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Extended UNIQUAC-Modells nach Thomsen und Rasmussen (1999)

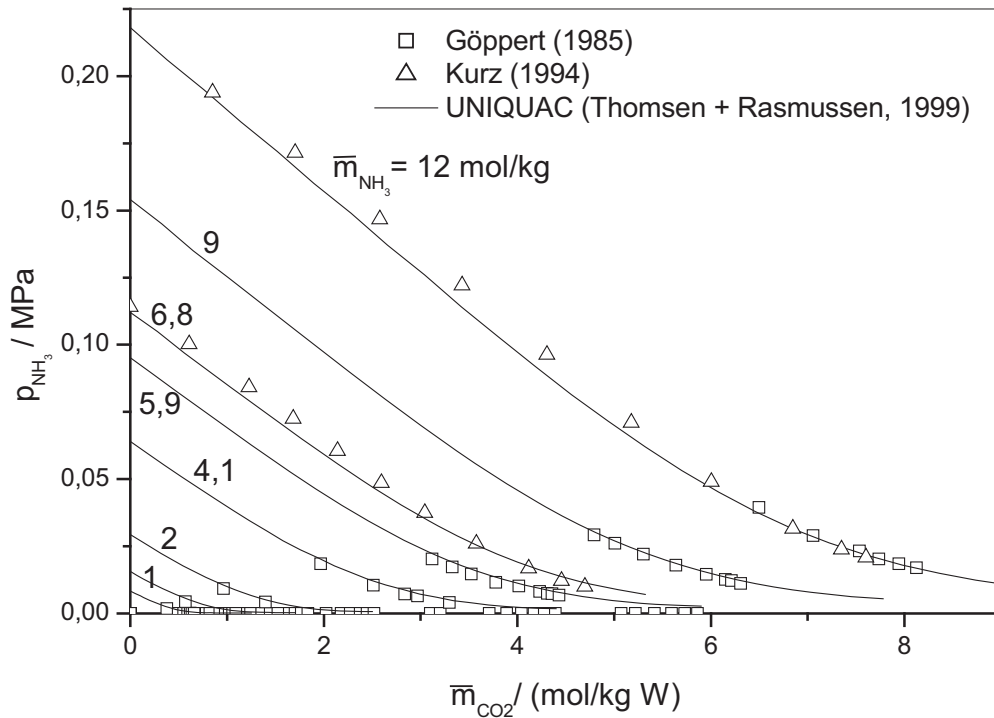


Abb. 3.15: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 353.15 K: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Extended UNIQUAC-Modells nach Thomsen und Rasmussen (1999)

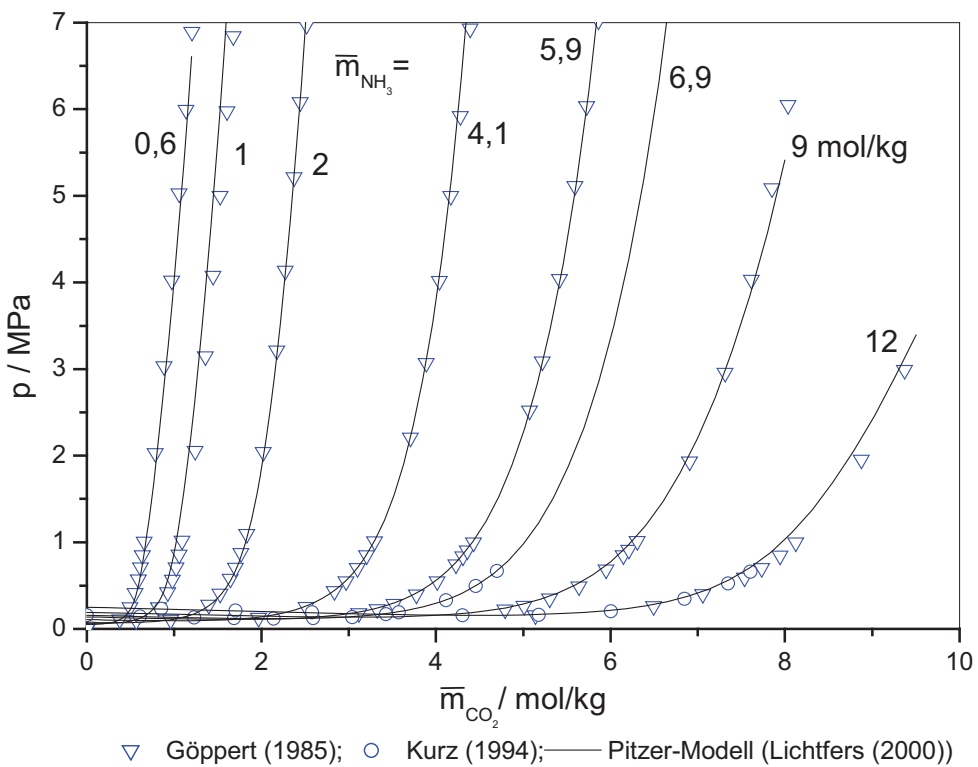


Abb. 3.14a: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 353.15 K: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells nach Lichtfers (2000)

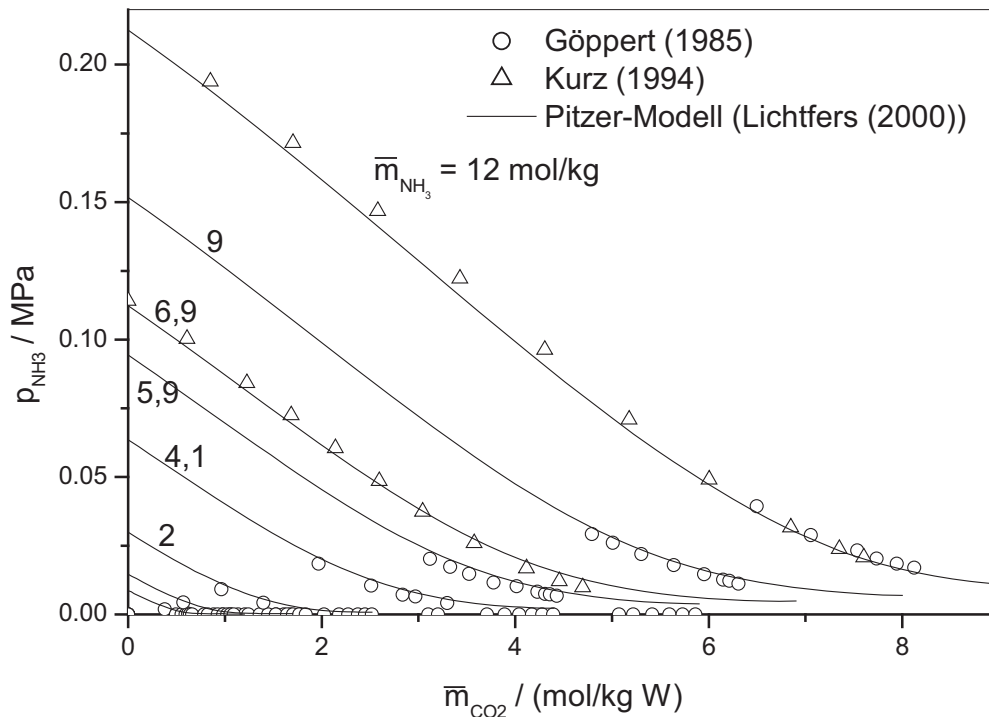


Abb. 3.15a: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 353.15 K: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells nach Lichtfers (2000)

Deshalb wurde in der vorliegenden Arbeit das im Kapitel 2.3 beschriebene Elektrolyt-UNIQUAC-Modell zunächst auf seine Tauglichkeit zur Korrelation der Messwerte für die simultane Löslichkeit von Ammoniak und Kohlendioxid in Wasser untersucht. In diesem Modell stehen nur binäre Wechselwirkungsparameter zur Anpassung zur Verfügung. Zur Beschreibung des Systems wurden 22 binäre Wechselwirkungsparameter (davon 20 temperaturabhängig) an Messwerte des Gesamtdrucks angepasst. Zur Anpassung der Wechselwirkungsparameter wurden 415 Messwertsätze aus Arbeiten von Müller (1983), Göppert (1985) und Kurz (1994) im Temperaturbereich zwischen 40 und 200 °C verwendet. Die Wechselwirkungsparameter sind in der Tabelle A 1.9 im Anhang A 1.11 zusammengestellt. Die Abbildung 3.16 zeigt einen Vergleich von Ergebnissen dieses Elektrolyt-UNIQUAC-Modells mit Messwerten für den Gesamtdruck von Göppert (1985) und Kurz (1994) einerseits und der Korrelation von Thomsen und Rasmussen (1999) andererseits. Die Unterschiede zwischen den Ergebnissen der beiden Modelle dürfen als „unwesentlich“ bezeichnet werden. Die (bei Vorgabe der Temperatur und der pauschalen Konzentration in der flüssigen Phase) mit dem Elektrolyt-UNIQUAC-Modell berechneten Gesamtdrucke weichen im Mittel um 3.6 % von den Messwerten ab. Die Standardabweichung beträgt 3.8 %. Die maximale Abweichung beträgt 26 %. Sie wird bei geringen

Ammoniakmolalitäten und hohen Drücken beobachtet – in einem Zustandsbereich, in dem die Änderung des Gesamtdruckes mit der Konzentration von Kohlendioxid sehr groß ist. Dem maximalen Fehler im Druck (ca. 26 %) entspricht dabei eine experimentelle Unsicherheit in der Molalität von Kohlendioxid von etwa 8 %.

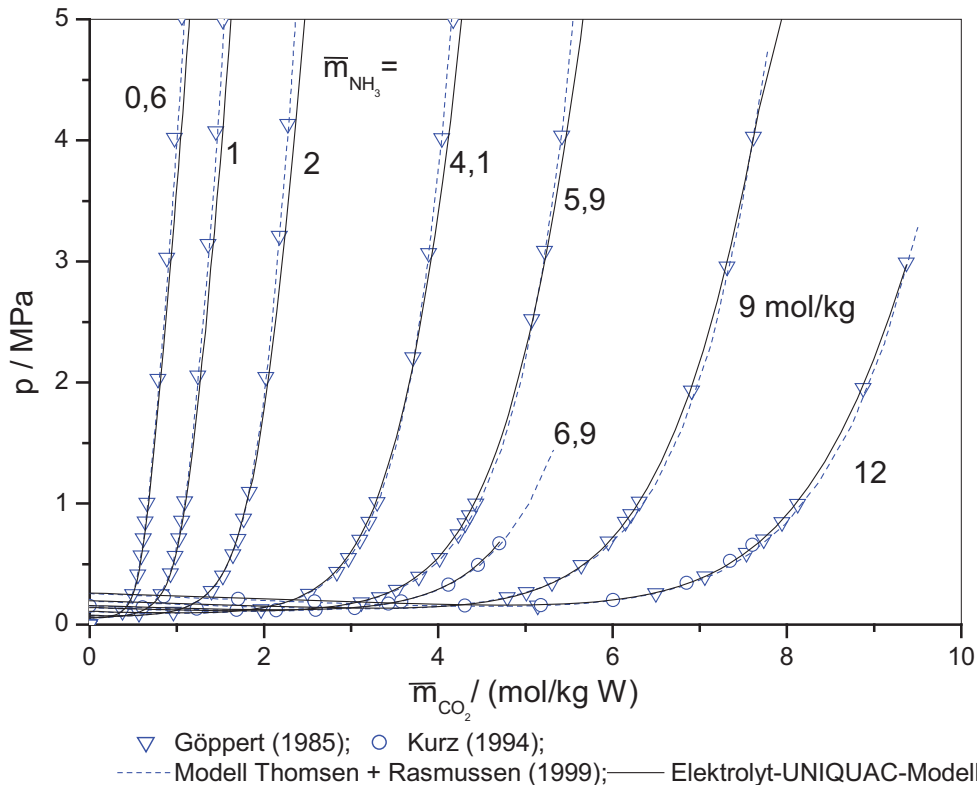


Abb.3.16: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 353.15 K: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Extended UNIQUAC – Modells nach Thomsen und Rasmussen (1999) und des Elektrolyte-UNIQUAC-Modells

Wie im Anhang A 4 in den Abbildungen A 4.1 bis A 4.31 gezeigt ist, ist die Wiedergabe der experimentellen Ergebnisse mit dem Elektrolyte-UNIQUAC-Modell nicht wesentlich verschieden von der Wiedergabe mit dem Pitzer-Modell von Lichtfers (2000). In einigen der Abbildungen A 4.1 bis A 4.31 wird bei den Rechenwerten ein „Knick“ im Druckverlauf beobachtet. Eine solche Unstetigkeit in der Steigung des Druckverlaufs resultiert aus dem Übergang von einem Dampf-Flüssigkeit-Gleichgewicht zu einem Dampf-Flüssigkeit-Feststoff Gleichgewicht. Die feste Phase besteht dabei aus Ammoniumhydrogencarbonat. Ein tabellarischer Vergleich zwischen den experimentellen Ergebnissen und den Rechenwerten ist in der Tabelle A 8.2 zusammengestellt.

3.8.3 Modellierung der Phasengleichgewichte für das System Kohlendioxid + Ammoniak + Methanol + Wasser

In der Literatur sind keine experimentellen Angaben zum Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht der Systeme Kohlendioxid + Ammoniak + Methanol und Kohlendioxid + Ammoniak + Methanol + Wasser bekannt. Zur simultanen Anpassung von (acht) zusätzlichen binären, temperaturabhängigen Wechselwirkungsparametern wurden die in der vorliegenden Arbeit ermittelten Messwerte verwendet. Zur Wiedergabe der Messwerte wurden die Wechselwirkungsparameter zwischen Methanol einerseits und Ammonium-, Hydrogencarbonat- und Carbamationen andererseits angepasst. Im Bereich bis etwas 75 mol% Methanol im Lösungsmittelgemisch (Methanol und Wasser) spielen die chemischen Reaktionen zwischen Ammoniak und Kohlendioxid eine wichtige Rolle (vgl. z. B. Abb. 3.17).

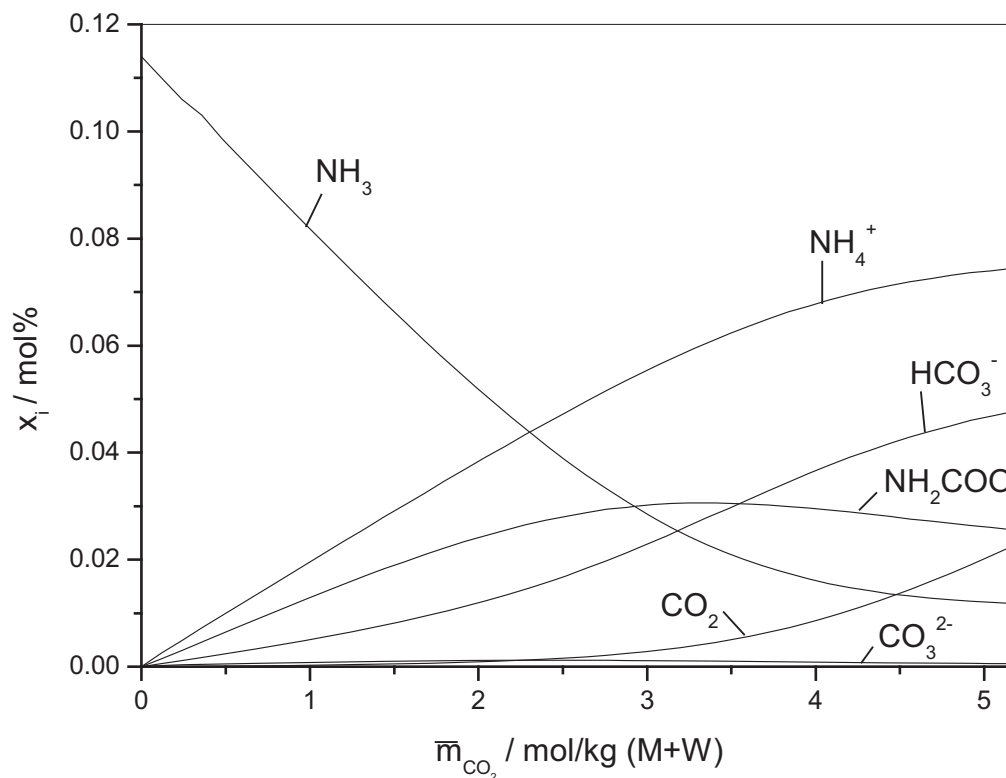


Abb 3.17: Flüssige Phase des Systems Kohlendioxid + Ammoniak + Methanol + Wasser bei 353 K: Rechenwerte für die Speziesverteilung für 25 mol% Methanol im gasfreien Lösungsmittelgemisch und 6 mol NH_3 pro kg Lösung (Vorhersage des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells)

Im Bereich höherer Methanolkonzentrationen spielen die chemischen Reaktionen nur noch eine geringe Rolle (vgl. Abb. 3.18). Dort treten molekularer Ammoniak und molekulares Kohlendioxid gleichzeitig in größeren Mengen auf. An die experimentellen Ergebnisse in

diesem Bereich wurden die Wechselwirkungsparameter zwischen Ammoniak und Kohlendioxid angepasst. Die Wechselwirkungsparameter sind in der Tabelle A 1.10 im Anhang A 1.12 zusammengestellt.

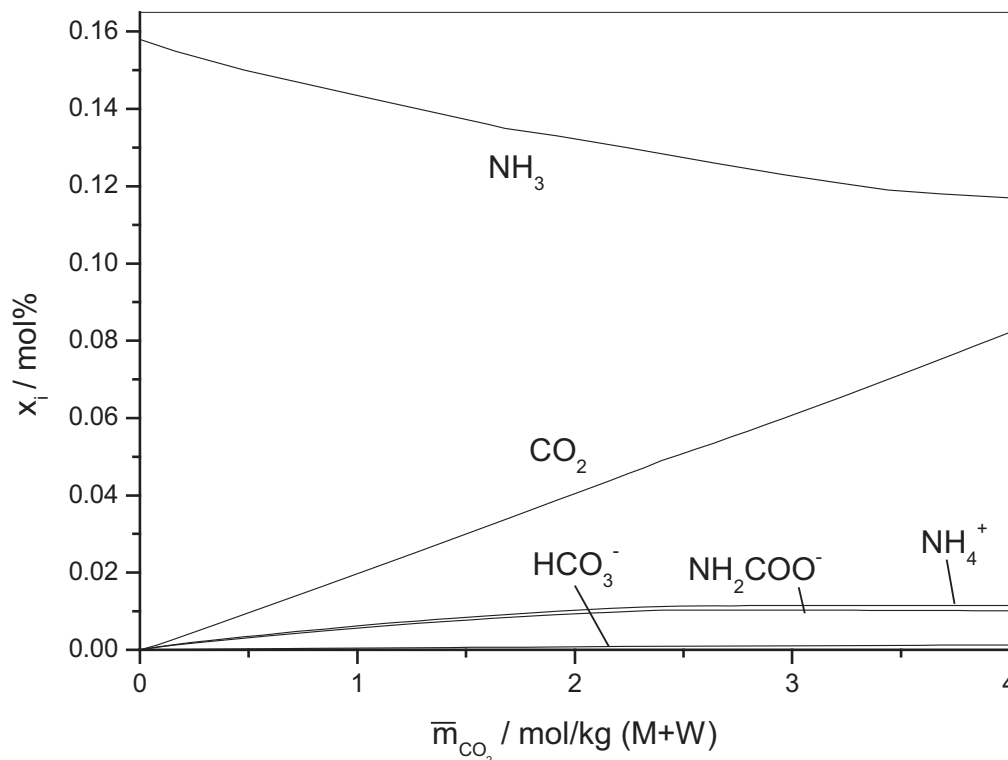


Abb 3.18: Flüssige Phase des Systems Kohlendioxid + Ammoniak + Methanol + Wasser bei 353 K: Rechenwerte für die Speziesverteilung für 95 mol% Methanol im gasfreien Lösungsmittelgemisch und 6 mol NH_3 pro kg Lösung (Vorhersagen des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells)

Mit dem so parametrisierten Modell wird das Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht beim simultanen Lösen von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol + Wasser Gemischen im ganzen Konzentrationsbereich von reinem Wasser bis zu reinem Methanol gut wiedergegeben. Bei der Bestimmung der Wechselwirkungsparameter wurden 171 Messwerte für das Dampf- Flüssigkeits- Gleichgewicht des Systems Kohlendioxid + Ammoniak + Methanol + Wasser im Bereich zwischen 313 und 393 K und bei Drücken bis zu 5 MPa berücksichtigt. Dabei wurden nur die Ergebnisse jener Messungen berücksichtigt, bei denen kein Salzausfall beobachtet wurde. Die mittlere Abweichung zwischen Rechenwerten (unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells) und den experimentellen Ergebnissen für den Gesamtdruck (bei Vorgabe der Temperatur und der pauschalen Zusammensetzung der flüssigen Phase) beträgt 4.2 %, die Standardabweichung 3.5 % und der maximale Fehler 18 %. Der maximale Fehler tritt bei einer Temperatur von 353 K und einem gasfreien

Methanolgehalt des Lösungsmittelgemisches von 25 mol% auf. Da es nur wenige Messwerte gibt, bei denen beim Vergleich eine derart große Abweichung auftritt, wird vermutet, dass das Gleichgewicht bei diesen Messungen nicht eingestellt war.

Ein typisches Beispiel für den Vergleich ist am Beispiel des Gesamtdrucks (über der stöchiometrischen Molalität des in der flüssigen Phase gelösten Kohlendioxids) in der Abb. 3.19 für 353 K für eine Ammoniakmolalität von 6 mol/kg Lösungsmittel für verschiedene Methanolkonzentrationen gezeigt. Der grafische Vergleich zwischen allen Messwerten der vorliegenden Arbeit und dem Elektrolyt-UNIQUAC-Modell ist im Anhang A 4 in den Abb. A 4.32 bis A 4.60 zusammengestellt. Ein tabellarischer Vergleich zwischen den experimentelle Ergebnissen der vorliegenden Arbeit und den Rechenwerten ist im Anhang A 8 in der Tabelle A 8.3 zusammengestellt.

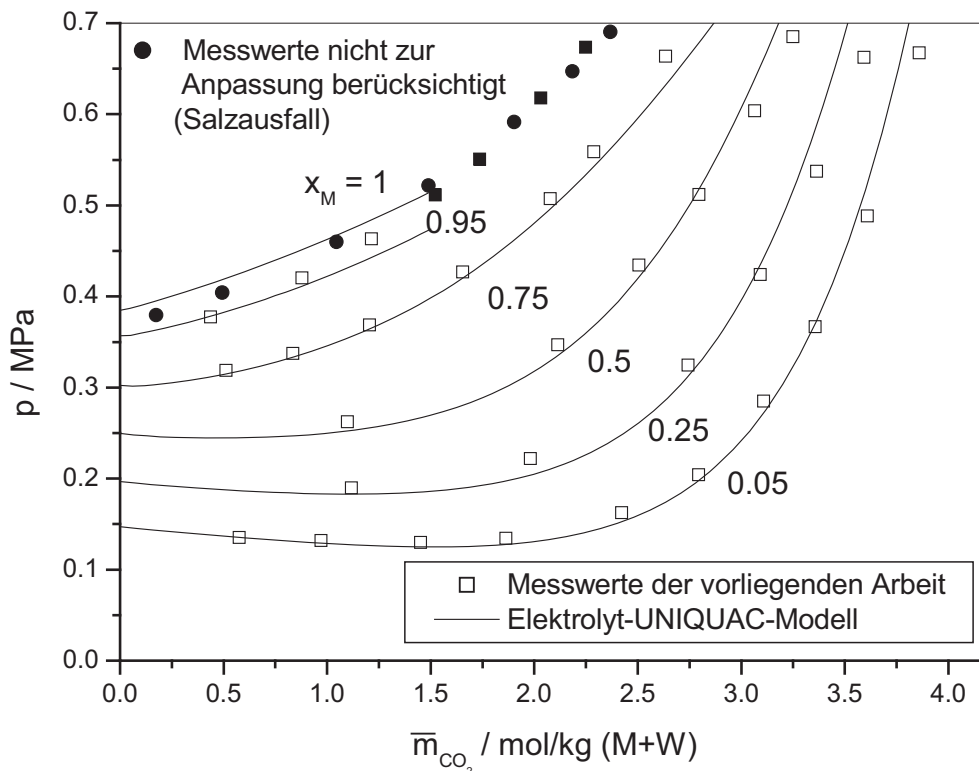


Abb. 3.19: Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht beim simultanen Lösen von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol + Wasser Mischungen bei 353 K und $\bar{m}_{\text{NH}_3} = 6 \text{ mol/kg(M+W)}$: Vergleich von Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC-Modell) mit Messwerten der vorliegenden Arbeit

3.8.4 Modellierung des Phasengleichgewichts für Systeme Wasser + Salz

Das Elektrolyt-UNIQUAC-Modell ist in der Lage, die Löslichkeit von Ammoniak und Kohlendioxid in wässrigen Lösungen von Methanol zu beschreiben. Im nächsten Schritt wurde das Modell zur Beschreibung des Einflusses von im Lösungsmittelgemisch gelösten Salzen erweitert. Dazu wird hier zunächst das Modell für den Fall beschrieben, dass nur das Dampf–Flüssigkeits-Gleichgewicht des binären Systems Salz + Wasser interessiert. Hierzu wurde der osmotische Koeffizient Φ ausgewertet:

$$\Phi = \frac{\ln(a_{W,real})}{\ln(a_{W,ideal})} \quad (3.1)$$

In der Literatur sind zahlreiche experimentelle Angaben für den osmotischen Koeffizienten des Systems Wasser + Natriumchlorid bei 298 K bekannt. Diese Messwerte können mit Hilfe des G^E -Ansatzes von Pitzer (vgl. Rumpf (1993)) sehr gut beschrieben werden. Anstelle von Messwerten wurden deshalb Rechenwerte des Pitzer-Modells zum Vergleich herangezogen.

Die Abbildung 3.20 zeigt ein typisches Beispiel der so erhaltenen Ergebnisse. Dabei wurden nur die UNIQUAC–Wechselwirkungsparameter zwischen Wasser, Na^+ und Cl^- bestimmt, während die Größen- und Formparameter nach Abrams und Prausnitz (1975) mit Ionenradien von Marcus (1997) berechnet wurden (vgl. Anhang A 1.9 Tabelle A 1.7). Die Rechenwerte weichen systematisch von den Messwerten ab. Im Bereich niedriger Salzkonzentrationen sind die berechneten osmotischen Koeffizienten zu groß, bei höheren Salzkonzentrationen zu gering. Einen ähnlichen Befund erhält man, wie die Abb. 3.20 zeigt, auch bei Verwendung des Ansatzes von Thomsen und Rasmussen. Diese Mängel der Kombination eines Debye-Hückel-Terms mit der UNIQUAC-Gleichung schon im vergleichsweise einfachen binären Randsystem Wasser + Salz führten dazu, dass diese Modelle nicht zur Beschreibung des Dampf–Flüssigkeit-Gleichgewichts beim Lösen von Ammoniak und Kohlendioxid in salzhaltigen wässrigen (auch methanolhaltigen) Lösungen eingesetzt wurden.

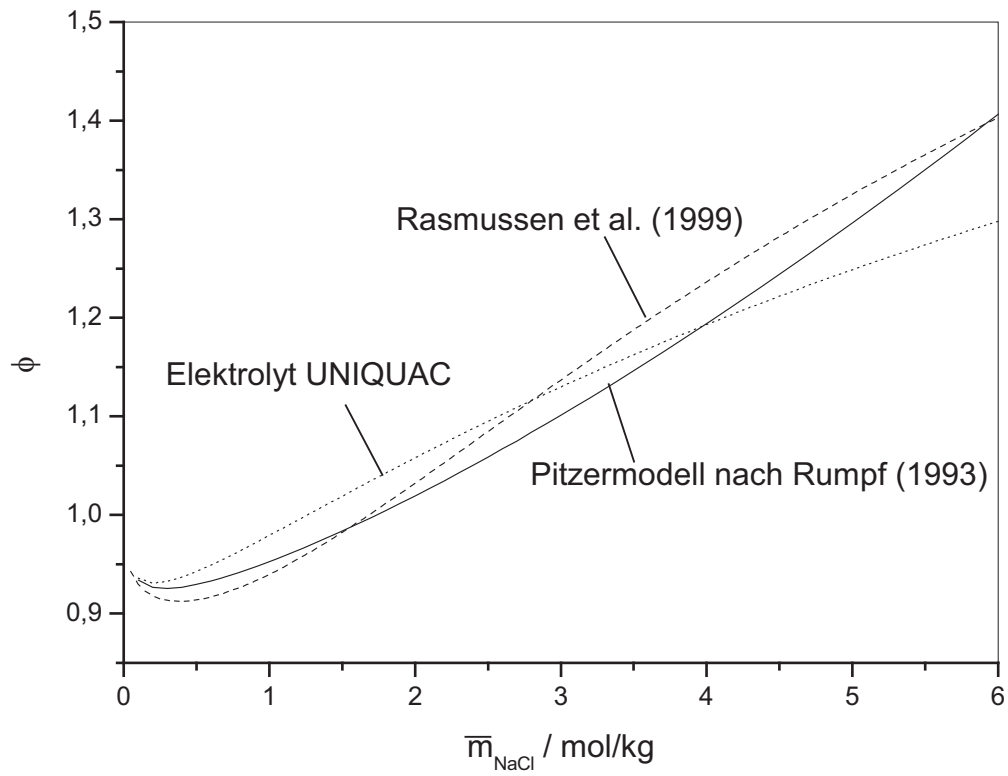


Abb. 3.20: System Wasser + Natriumchlorid: Osmotischer Koeffizient bei 298.15 K

3.9 Modellierung mit dem Modell von Pitzer

In den vorangegangenen Arbeiten hat sich das Modell von Pitzer zur Beschreibung von Gaslöslichkeiten in wässrigen Elektrolytlösungen bewährt. Die weiteren Untersuchungen wurden deshalb auf die Verwendung dieses Ansatzes zur Beschreibung der Gibbs'schen Energie der flüssigen Mischungen beschränkt. Damit muss Methanol als „gelöster“ Stoff (und nicht als Lösungsmittelkomponente) betrachtet werden. Dadurch wird der Bereich der Methanolkonzentration beschränkt. Mit dem G^E -Ansatz nach Pitzer konnte auch in früheren Arbeiten der Einfluss zusätzlicher Salze auf die simultane Löslichkeit von Ammoniak und Kohlendioxid in Wasser quantitativ vorhergesagt werden. Der Ansatz ist u. a. in der Dissertation von Sing (1998) ausführlich beschrieben. In der hier vorliegenden Arbeit wird dieser Ansatz zur Vorhersage des Drucks zum Lösen von Ammoniak bzw. von Ammoniak und Kohlendioxid in wässriger Methanollösung (mit 5 mol% Methanol) sowohl ohne gelöstes Salz als auch mit gelöstem Natriumsulfat, verwendet. Darüber hinaus wird mit diesem Modell die Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Phenol beschrieben.

3.9.1 Modellierung des Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichts methanolhaltiger Systeme mit dem Modell von Pitzer

In der parallel laufenden Arbeit von Jödecke (2003) wurde das Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht des Systems Kohlendioxid + Methanol + Wasser + Salz für Methanolkonzentrationen von 5 und 10 mol% mit dem Modell von Pitzer beschrieben. Dabei wurde auch das System Methanol + Wasser betrachtet. Aus Literaturdaten zum Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht wurde die Henrykonstante von Methanol in Wasser sowie ein binärer und ein ternärer Parameter des Modells von Pitzer für Wechselwirkungen zwischen Methanolkolekülen in wässriger Lösung bestimmt. Die Parameter sind in der Tabelle A 1.13 im Anhang A 1.13 zusammengestellt. Unter Verwendung dieser und der von Lichtfers (2000) für die Systeme des Typs Kohlendioxid + Ammoniak + Wasser + Salz angegebener Parameter wurde für einen Methanolgehalt von 5 mol% die Löslichkeit von Ammoniak im Lösungsmittelgemisch Methanol + Wasser sowie die simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak im Lösungsmittelgemisch Methanol + Wasser vorhergesagt. Die Abbildungen 3.21 und 3.22 zeigen typische Beispiele für den Vergleich von Rechen- mit Messwerten für den Druck beim Lösen von Ammoniak, bzw. Ammoniak und Kohlendioxid in Methanol + Wasser- Mischungen bei 313 K. Weitere Vergleiche zwischen den Vorhersagen und den Messwerten (für 353 und 393 K) werden in den Abbildungen 5.1 bis 5.8 im Anhang A5 gezeigt.

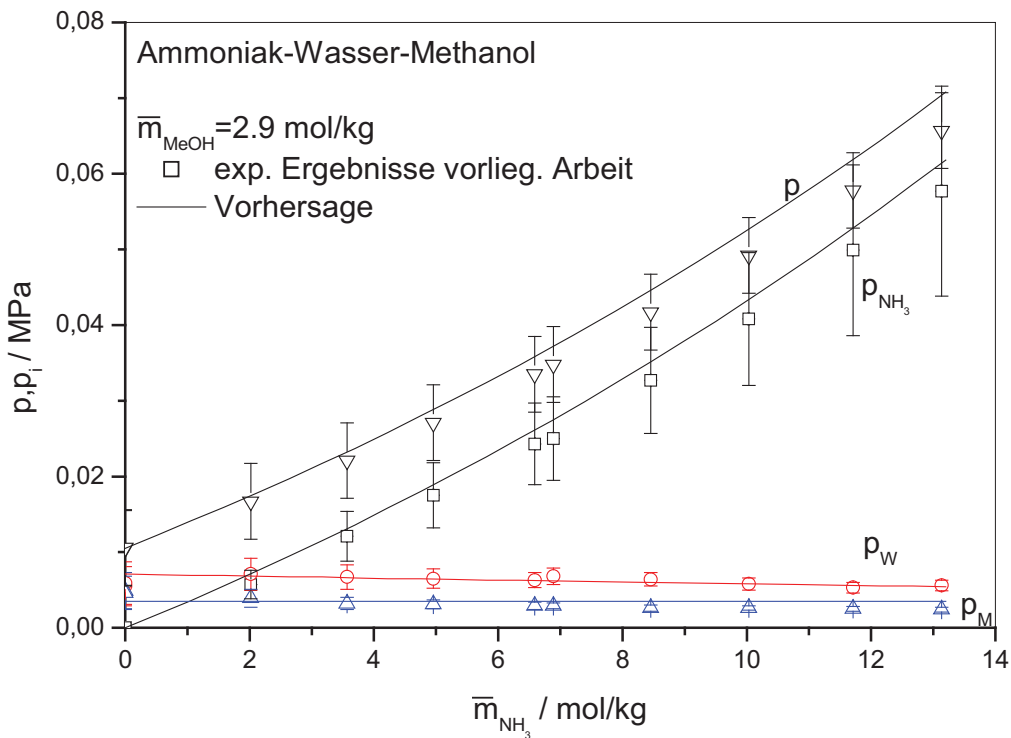


Abb. 3.21: Löslichkeit von Ammoniak in einem Lösungsmittelgemisch aus Methanol und Wasser ($x_M = 5 \text{ mol\%}$, $\bar{m}_{\text{NH}_3} = 2.9 \text{ mol/kg H}_2\text{O}$) bei 313 K:

Experimentelle Ergebnisse und Vorhersagen unter Verwendung des Ansatzes von Pitzer zur Beschreibung der Gibbs'schen Exzessenergie der flüssigen Phase

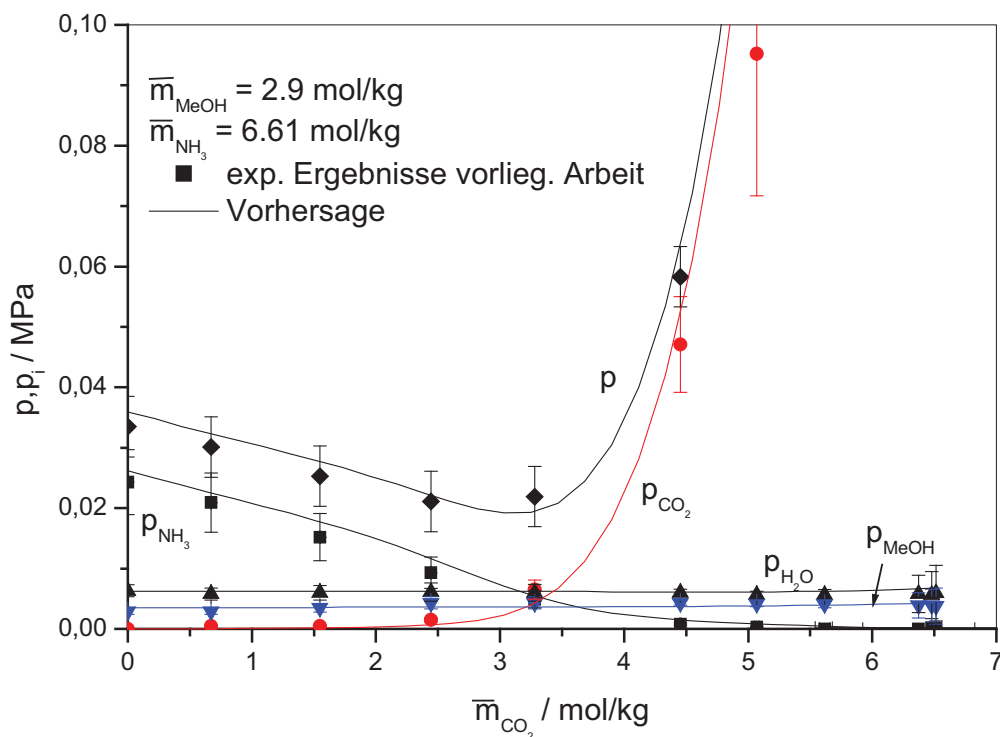


Abb. 3.22: Simultane Löslichkeit von Ammoniak und Kohlendioxid in einem Lösungsmittelgemisch aus Methanol und Wasser ($x_M = 5 \text{ mol\%}$, $\bar{m}_{\text{NH}_3} = 2.9 \text{ mol/kg H}_2\text{O}$) bei 313 K: Experimentelle Ergebnisse und Vorhersagen unter Verwendung des Ansatzes von Pitzer zur Beschreibung der Gibbs'schen Exzessenergie der flüssigen Phase

Die Vorhersagen für das Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht in diesen Systemen wurden mit 64 experimentellen Werten verglichen. Die mittlere relative Abweichung der Rechenwerte von den Messwerten beträgt für den Gesamtdruck 11.9 %, die Standardabweichung beträgt 7.7 %. Die größten Abweichungen treten bei hohen Temperaturen (393 K) und hohen Ammoniakmolalitäten beim simultanen Lösen von Ammoniak und Kohlendioxid auf. Dort wird der experimentell ermittelte Druck von dem Modell systematisch unterschätzt. Der tabellarische Vergleich der Rechenwerte für das Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht mit den experimentellen Ergebnissen ist in den Tabellen A 9.1 bis A 9.4 im Anhang A 9 zusammengestellt.

Beim Übergang auf salzhaltige Lösungsmittelgemische werden für den Ansatz von Pitzer Wechselwirkungsparameter zwischen den Salzionen (Kation \leftrightarrow Anion), sowie zwischen Salzionen und allen in der flüssigen Lösung vorhandenen gelösten Stoffen benötigt. In der vorliegenden Arbeit wurde der Ansatz nach Pitzer nur für eine wässrige Methanollösung (mit $x_M = 0.05$ mol/mol) mit Natriumsulfat ($m_{\text{Na}_2\text{SO}_4} \approx 1$ mol/kg Wasser) bei 353 und 393 K verwendet. Die Wechselwirkungsparameter zwischen Na^+ und SO_4^{2-} und alle im methanolfreien System vorhandenen Wechselwirkungsparameter wurden von Lichtfers (2000) übernommen (vgl. Anhang A 1.13). Die Wechselwirkungen zwischen Methanol und Wasser werden durch die Henrykonstante von Methanol in Wasser sowie einen binären und einen ternären Wechselwirkungsparameter (Jödecke (2003)) berücksichtigt. Die Wechselwirkungen zwischen Natriumsulfat und Methanol wurden mit einem binären Parameter zwischen SO_4^{2-} und CH_3OH erfasst. Dieser Parameter wurde von Jödecke (2003) an experimentelle Ergebnisse zum Einfluss von Na_2SO_4 auf das Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht des binären Systems Wasser + Methanol angepasst und für die hier interessierenden Berechnungen übernommen. Alle weiteren Wechselwirkungsparameter zwischen Natriumsulfat und den anderen gelösten Spezies wurden vernachlässigt. Die (nicht vernachlässigten) Wechselwirkungsparameter sind in der Tabelle A1.13 im Anhang A1.13 zusammengestellt. Mit diesem so vereinfachten Modell wurde die Löslichkeit von Ammoniak in einem Lösungsmittelgemisch aus 95 mol/mol Wasser und 5 mol/mol Methanol, das zusätzlich 0.92 mol Na_2SO_4 je Kilogramm Wasser enthält, vorhergesagt. Bei den Berechnungen wurde - wie üblich - die Temperatur und die stöchiometrische Zusammensetzung der flüssigen Phase vorgegeben und die Partialdrücke sowie der Gesamtdruck berechnet. Die Abb. 3.23 zeigt den Vergleich zwischen den Rechen- und den Messwerten für 353 K. Der entsprechende Vergleich für 393 K ist im Anhang A 5 in der Abb.

A 5.9 gezeigt. Aus der Abb. 3.23 erkennt man (beim Vergleich der Löslichkeit von Ammoniak in der salzhaltigen und in der salzfreien Lösung), dass Ammoniak durch Natriumsulfat „ausgesalzen“ wird. Das Rechenmodell sagt den Aussalzeffekt qualitativ richtig voraus, überschätzt ihn jedoch.

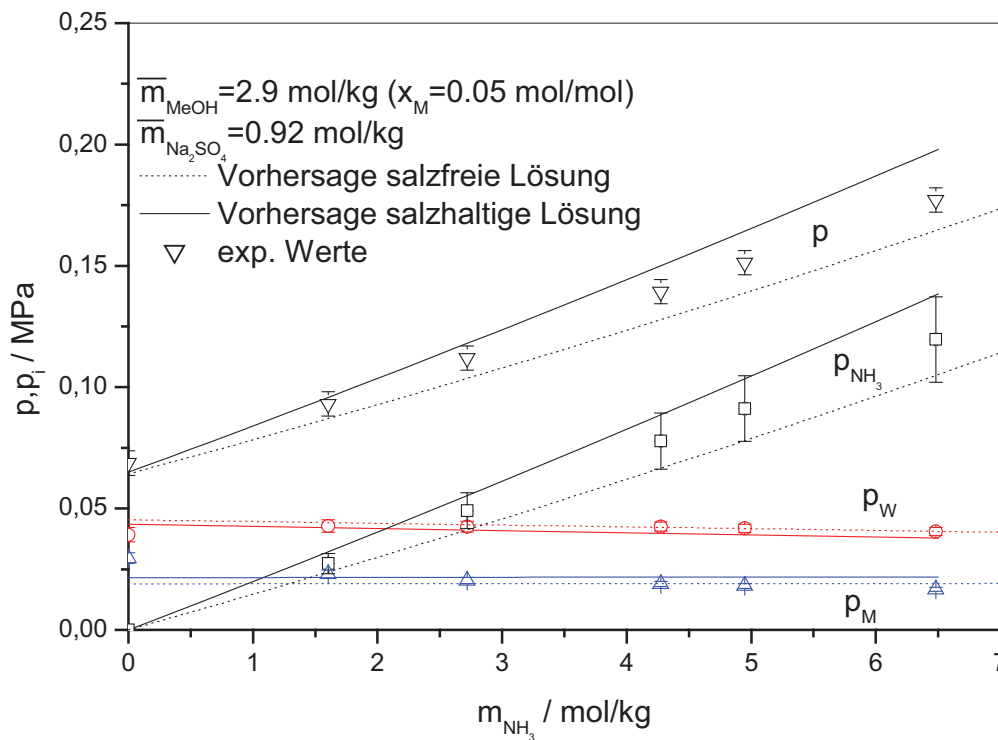


Abb. 3.23: Löslichkeit von Ammoniak in einem Lösungsmittelgemisch aus Methanol, Wasser und Na_2SO_4 ($x_M = 5 \text{ mol}\%$, $\bar{m}_{\text{NH}_3} = 2.88 \text{ mol/kg H}_2\text{O}$) bei 353.15 K:
 Experimentelle Ergebnisse und Vorhersagen unter Verwendung des Ansatzes von Pitzer zur Beschreibung der Gibbs'schen Exzessenergie der flüssigen Phase

Bei der Vorhersage des Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichts beim simultanen Lösen von Kohlendioxid und Ammoniak in Natriumsulfat + Methanol + Wasser beobachtet man eine vergleichbar gute Übereinstimmung. Dies zeigt die Abb. 3.24 am Beispiel einer isothermen Messreihe bei 353 K für eine wässrige Methanollösung ($x_M = 0.05 \text{ mol/mol}$) mit Natriumsulfat ($m_{\text{Na}_2\text{SO}_4} = 0.92 \text{ mol/kg Wasser}$) und Ammoniak ($m_{\text{NH}_3} = 6.56 \text{ mol/kg Wasser}$). Der entsprechende Vergleich für 393 K ist im Anhang A 5 in der Abb. A 5.10 gezeigt. Die Vorhersagen der Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichte in den Systemen Ammoniak + Methanol + Wasser + Natriumsulfat und Kohlendioxid + Ammoniak + Methanol + Wasser + Natriumsulfat wurden mit 25 experimentell bestimmten Werten für den Gesamtdruck verglichen. Dabei beträgt die mittleren relative Abweichung der Rechenwerte

von den Messwerten 11.3 %, die Standardabweichung beträgt 8 %. Die größten Abweichungen werden im Bereich hoher Kohlendioxidkonzentrationen beobachtet, wo der Gesamtdruck mit zunehmenden Kohlendioxidkonzentration sehr steil ansteigt. Die berechneten Gesamtdrücke weichen in diesem Bereich deutlich von den experimentellen Ergebnissen ab. Das beim methanolfreien System berechnete „Einsalzen“ wird vom Rechenmodell nur im mittleren Bereich der Kohlendioxidmolalität vorhergesagt. In den anderen Bereichen liegen die Rechenwerte für den Druck über der natriumsulfathaltigen Lösung über den Rechenwerten für die salzfreie Lösung.

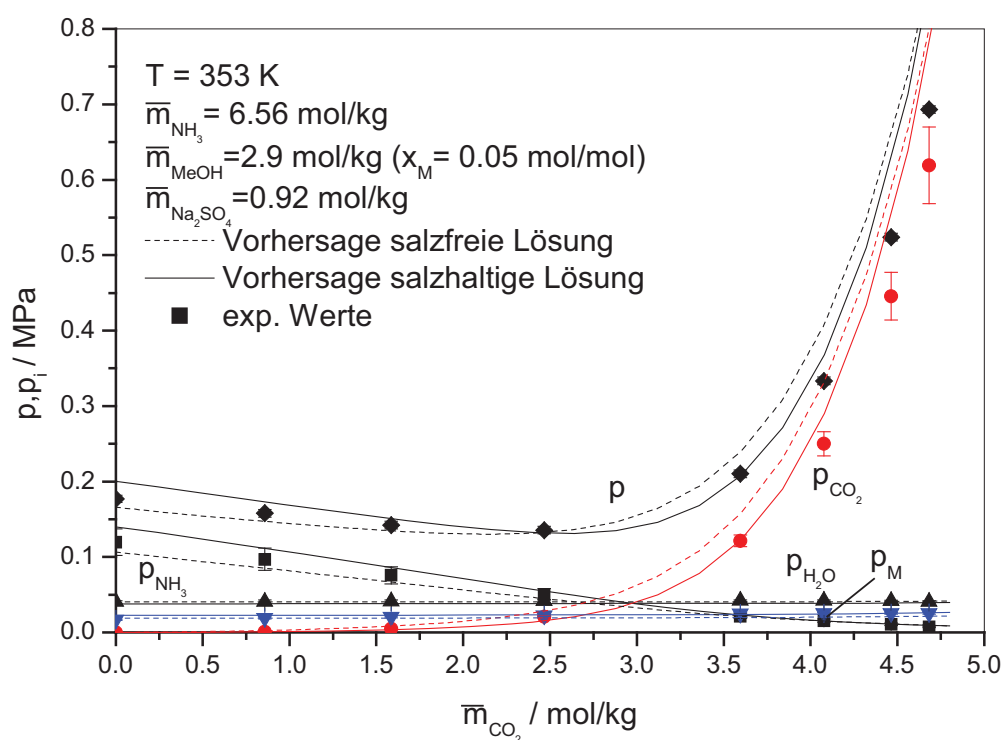


Abb. 3.24: Simultane Löslichkeit von Ammoniak und Kohlendioxid in einer wässrigen Lösung von Methanol mit Natriumsulfat bei 353.15 K: experimentelle Ergebnisse im Vergleich mit Rechenwerten des Pitzer-Modells

3.9.2 Modellierung des Dampf–Flüssigkeits-Gleichgewichts und Flüssig-flüssig-Gleichgewichts phenolhaltiger Systeme mit dem Modell nach Pitzer

Die Modellierung des Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichts des Systems Phenol + Wasser wird durch eine Mischungslücke im flüssigen Gebiet bei Temperaturen unter ca. 343 K sowie durch ein Azeotrop erschwert. In der Literatur (Tsonopoulos (1976)) wird Phenol als schwache Säure behandelt.



Die Gleichgewichtskonstante für diese Reaktion wurde von Tsonopoulos (1976) übernommen (vgl. Anhang A1.14). Für die Beschreibung der Eigenschaften der flüssigen Phase wird der G^E -Ansatz von Pitzer verwendet. Für Wasser wurde als Referenzzustand die reine Flüssigkeit verwendet. Als Referenzzustand für Phenol wurde die ideale 1 molare Lösung in Wasser verwendet ($m_{\text{Phenol}} = 1$ mol je kg Wasser bei der Zusammensetzung; $m_{\text{Phenol}} = 0$ in Wasser für die Wechselwirkungen). Für das System Phenol + Wasser wurde ein binärer und ein ternärer Wechselwirkungsparameter an Literaturwerte für das Flüssig-flüssig-Gleichgewicht (Campbell (1937), Fenby et al. (1983), Rothmund (1898) und Zhuravlev et al. (1947)) angepasst. Die Henrykonstante für das Lösen von Phenol in Wasser wurde von Jödecke (2003) übernommen (siehe Anhang A 1.14). Mit diesen Wechselwirkungsparametern kann die Mischungslücke prinzipiell beschrieben werden. Das Modell liefert jedoch deutlich zu hohe Löslichkeiten von Phenol in Wasser (z. B. bei 330 K ca. 3 mol/kg H_2O statt ca. 1.7 mol/kg H_2O) und eine deutliche Überschätzung der kritischen Temperatur. Die Literaturwerte geben diese bei ca. 340 K an, mit dem Modell wird der kritische Punkt bei ca. 353 K berechnet. Dadurch gibt es bei der Wiedergabe der Binodalkurve deutliche Abweichungen zwischen Rechen- und Messwerten bei Temperaturen größer als 320 K. Die Abbildung 3.25 zeigt einen grafischen Vergleich zwischen Rechen- und Messwerten für das Flüssig-flüssig-Gleichgewicht. Die Wechselwirkungsparameter sind in der Tabelle A 1.14 im Anhang A 1.14 zusammengestellt.

Zur Berechnung des Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichts beim Lösen von Ammoniak im Lösungsmittelgemisch aus Phenol + Wasser werden für die Wechselwirkungen zwischen Phenolmolekülen die im letzten Abschnitt beschriebenen Wechselwirkungsparameter sowie die Henry'sche Konstante von Phenol in Wasser übernommen. Für die Wechselwirkungen zwischen Ammoniak und Wasser werden die Wechselwirkungsparameter sowie die Henrykonstante für das Lösen von Ammoniak in Wasser von Lichtfers (2000) übernommen

(vgl. Anhang A 1.13). Mit diesen Wechselwirkungsparametern erhält man bei der Vorhersage der Druckverläufe beim Lösen von Ammoniak in wässrigen Phenollösungen eine mittlere Abweichung zwischen Rechen- und Messwerten für den Gesamtdruck von 7.2 %. Zur Verbesserung der Wiedergabe des Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichts beim Lösen von Ammoniak in Phenol + Wasser wurde bei Temperaturen von 353.15 bis 393.15 K (d. h. oberhalb der Mischungslücke im System Wasser + Phenol) ein binärer Wechselwirkungsparameter zwischen Phenol und Ammoniak an die experimentellen Ergebnisse der vorliegenden Arbeit angepasst. Zur Anpassung des Wechselwirkungsparameters wurden 41 experimentelle Werte der vorliegenden Arbeit berücksichtigt. Dieser Parameter ist in Anhang A 1.14 in Tabelle A 1.14 angegeben. Mit diesen Parametern erhält man eine sehr gute Übereinstimmung der berechneten mit den

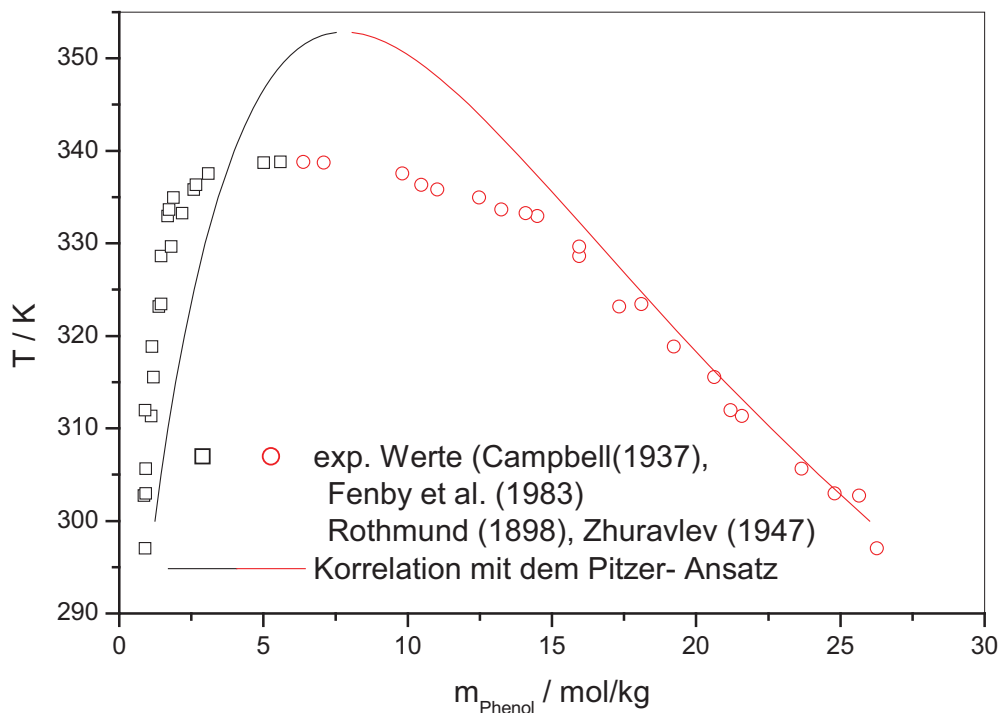


Abb. 3.25: Flüssig-flüssig-Gleichgewicht des Systems Phenol + Wasser: Vergleich experimentellen Ergebnisse mit der Korrelation mit dem G^E -Ansatzes nach Pitzer

experimentell bestimmten Drücken. Ein typisches Beispiel für einen Vergleich zwischen Mess- und Rechenwerten für den Druckverlauf beim Lösen von Ammoniak bei 393 K in einer wässrigen Phenollösung ($m_{\text{Phénol}} = 2 \text{ mol/kg}$ Wasser) ist in der Abb. 3.26 gezeigt. Weitere Vergleiche zwischen berechneten und experimentell bestimmten Druckverläufen im System Ammoniak + Phenol + Wasser sind im Anhang A 5 in den Abbildungen A 5.11 bis A 5.15 gezeigt. Die mittlere relative Abweichung der Rechenwerte von den Messwerten für den

Gesamtdruck liegt bei 4.1 %. Die Standardabweichung beträgt 3.2 %. Der tabellarische Vergleich zwischen Rechen- und Messwerten ist im Anhang A 9 in der Tabelle A 9.5 zusammengestellt. Die Partialdrücke von Ammoniak und Wasser werden gut wiedergegeben. Beim Partialdruck von Phenol gibt es deutliche Abweichungen, die eventuell auch auf Messunsicherheiten zurückzuführen sind.

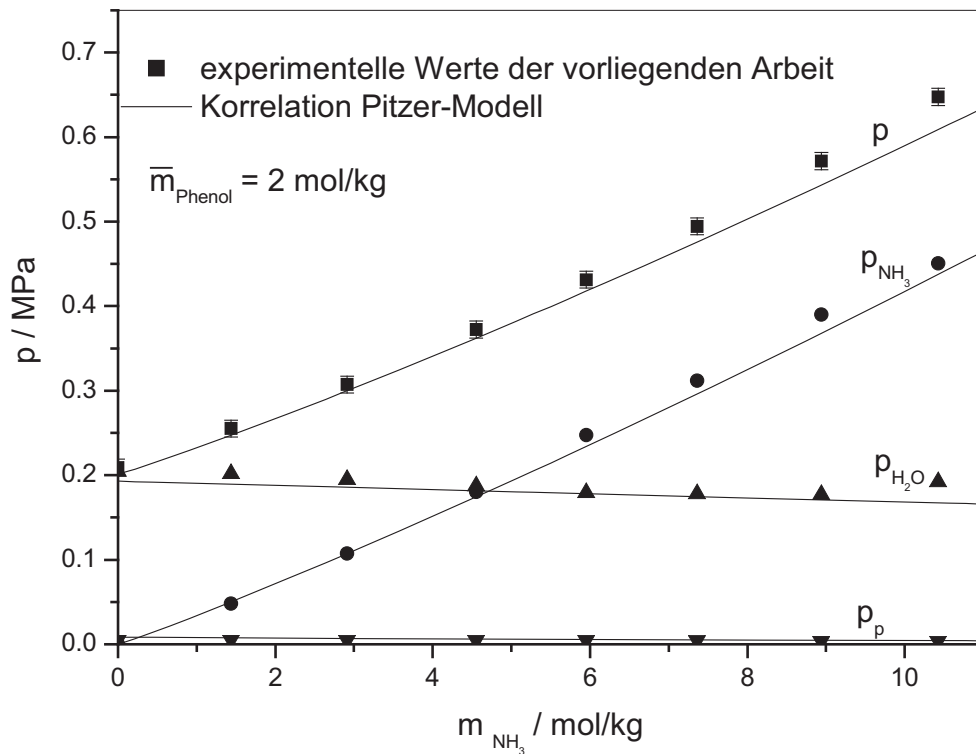


Abb. 3.26: Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht des Systems Ammoniak + Phenol + Wasser bei 393 K: Messwerte der vorliegenden Arbeit im Vergleich mit Rechenwerten unter Verwendung des G^E - Ansatzes von Pitzer

4 Zusammenfassung

Die Phasengleichgewichte beim Lösen von Ammoniak und Kohlendioxid in wässrigen, auch salzhaltigen Lösungen sind schon in mehreren Arbeiten (Müller (1983), Göppert (1985), Kurz (1995)) untersucht wurden. Dabei sind auch thermodynamische Modelle zur Beschreibung der Phasengleichgewichte entwickelt und erprobt werden, mit denen es möglich ist, den Druckverlauf beim Lösen von Ammoniak und Kohlendioxid in wässrigen Lösungen sehr gut wiederzugeben. Um dies zu ermöglichen, werden auch die chemischen Reaktionen in der flüssigen Phase und damit auch die Bildung ionischer, nichtflüchtiger Spezies berücksichtigt. In der vorliegenden Arbeit wurden diese Vorarbeiten auf Untersuchungen ausgedehnt, in denen die flüssige Phase auch organische Lösungsmittel enthält. Dazu wurde zunächst das Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht bei der Lösung von Ammoniak und Kohlendioxid in wässrigen, organischen und salzhaltigen Lösungsmittelgemischen vermessen. Die Untersuchungen wurden mit zwei Phasengleichgewichtsapparaturen durchgeführt, die nach der analytischen Methode arbeiten. Eine der Anlagen wurde in der vorliegenden Arbeit vervollständigt und in Betrieb genommen. In diesen Anlagen werden das organisch-wässrige Lösungsmittelgemisch sowie die Gase Ammoniak und Kohlendioxid in eine thermostatisierte Versuchszelle eingewogen. Nach Einstellung des Dampf-Flüssigkeits-(Feststoff-) Gleichgewichts werden Druck, Temperatur, Volumen der Phasen und Zusammensetzung der Gasphase bestimmt. Die Analyse der Gasphase erfolgt durch Gaschromatographie.

Die experimentellen Untersuchungen wurden im Temperaturbereich von 313 bis 393 K durchgeführt. Dabei wurde das Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichts beim Lösen von Ammoniak in wässrigen, salzhaltigen Methanollösungen und wässrigen Phenollösungen untersucht. In den wässrigen Phenollösungen lagen die Phenolmolalitäten zwischen 1 und 6 mol/kg Wasser. Die maximale Ammoniakmolalität betrug ca. 20 mol/kg Wasser. Bei den Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in Methanol + Wasser - Gemischen lag die Methanolkonzentration in der Ausgangslösung zwischen 5 und 95 mol%. Außerdem wurde die Löslichkeit von Ammoniak in reinem Methanol bestimmt. Die maximale Ammoniakkonzentration betrug 14 mol /kg Lösungsmittelgemisch (Methanol + Wasser). Auch der Einfluss der Salze Natriumchlorid und Natriumsulfat auf die Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Methanollösungen wurde untersucht. Die Konzentrationen lagen zwischen 0.15 und 2 mol/kg Lösungsmittelgemisch (Methanol + Wasser), die maximale Ammoniakkonzentration betrug 6 mol/kg Lösungsmittelgemisch. Zusätzlich zu diesen Untersuchungen wurde die Löslichkeitsgrenze einiger Salze im Lösungsmittelgemisch von

Methanol und Wasser in weiteren Experimenten ermittelt. Dabei wurde entweder optisch beobachtet, ab welcher Konzentration Salzausfall auftritt oder mit Hilfe der Säure-Base-Titration die Konzentration des gelösten Salzes in der flüssigen Phase einer übersättigten Lösung bestimmt.

Auch für das simultane Lösen von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen, salzhaltigen Methanollösungen wurden Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichtsdaten ermittelt. Bei methanolhaltigen Lösungsmittelgemischen wurde das Phasengleichgewicht über den gesamten Konzentrationsbereich (von reinem Wasser bis zu reinem Methanol) gemessen. Die Ammoniakkonzentration betrug dabei jeweils 6 und 12 mol je Kilogramm Lösungsmittelgemisch (Methanol + Wasser). Als maximaler Gesamtdruck wurde - je nach verwendeter Anlage - 0.7 MPa bzw. 5 MPa erreicht. Weiterhin wurde die simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen, salzhaltigen Methanollösungen bei Temperaturen von 353 und 393 K untersucht. Dabei wurden wiederum die Salze Natriumchlorid und Natriumsulfat bei etwa den Salzkonzentrationen, die auch bei den Untersuchungen zur Löslichkeit vom Ammoniak in wässrig-salzhaltigen Methanollösungen verwendet wurden, eingestellt. Es wurden insgesamt über 700 Phasengleichgewichtspunkte vermessen.

Der Druckverlauf beim Lösen von Ammoniak in wässrigen Phenol- und Methanollösungen ist mit steigender Ammoniakmolalität näherungsweise linear, wobei sich Ammoniak in wässrigen Phenollösungen besser, in wässrigen Methanollösungen schlechter löst als in reinem Wasser. Den größten Druckanstieg erhält man bei der Zugabe von Ammoniak zu reinem Methanol. Beim simultanen Lösen von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Methanollösungen erhält man bei geringen Methanolkonzentrationen den typischen Druckverlauf wie beim simultanen Lösen von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen, der durch die chemischen Reaktionen zwischen den beiden Gasen in der flüssigen Phase gekennzeichnet ist. Bei hohen Methanolkonzentrationen ist der Ablauf der chemischen Reaktionen wegen Wassermangels stark gehemmt. Man erhält hier einen nahezu linearen Druckanstieg mit steigender Kohlendioxidkonzentration, der aber wegen der besseren Löslichkeit von Kohlendioxid in Methanol im Gegensatz zu Wasser relativ flach verläuft.

Mit der so erhaltenen Datenbasis und Literaturdaten (für die binären wässrig-organischen Randsysteme) war die Ausgangslage für die theoretischen Arbeiten geschaffen. Bei den theoretischen Arbeiten wurden die Eigenschaften der flüssigen Phase mit dem Ansatz von Pitzer für die Gibbs'sche Exzessenergie berechnet. Dieser Ansatz wurde auf organische Komponenten (Methanol und Phenol) erweitert. Wechselwirkungsparameter des Ansatzes

wurden für die Systeme Methanol + Wasser, Kohlendioxid + Methanol und Natriumsulfat + Methanol an experimentelle Ergebnisse zum Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht angepasst. Mit dem erweiterten Pitzer-Modell kann das Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht beim Lösen von Ammoniak und beim simultanen Lösen von Ammoniak und Kohlendioxid in wässrigen Methanollösungen ($x_M = 5 \text{ mol\%}$) auch mit Natriumsulfat ($m_{\text{Na}_2\text{SO}_4} = 1 \text{ mol/kg}$) gut wiedergegeben werden. Zur Beschreibung des Flüssig-flüssig-Gleichgewichts im System Phenol + Wasser wurden zwei Wechselwirkungsparameter angepasst. Zur Beschreibung der Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Phenollösungen wurde ein binärer Wechselwirkungsparameter (zwischen Phenol und Ammoniak) angepasst. Damit können die experimentellen Ergebnisse zum Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht des Systems Ammoniak + Phenol + Wasser gut beschrieben werden.

Weiterhin wurde ein – von Pérez-Salado entwickeltes – Elektrolyt-UNIQUAC-Modell zur Korrelation eines Teils der neu bestimmten Phasengleichgewichtsdaten verwendet. Dieses Modell besteht aus einem Debye-Hückel-Term und dem UNIQUAC-Ansatz. Es wurden 40 binäre, meist temperaturabhängige Wechselwirkungsparameter an binäre, ternäre und quaternäre Systeme angepasst. Mit diesem Modell ist es möglich, die Löslichkeit von Ammoniak und Kohlendioxid, einzeln und simultan, über den gesamten Konzentrationsbereich vom reinem Wasser bis zum reinen Methanol im hier betrachteten Temperatur- und Konzentrationsbereich gut zu beschreiben, jedoch gelingt es nicht, den Einfluss von gelösten Salzen richtig vorherzusagen. Daraus ergeben sich Anregungen für weiterführende Arbeiten.

5 Literatur

Abrams, D. S.; Prausnitz J. M.: Statistical Thermodynamics of Liquid Mixtures: A New Expression for the Excess Gibbs Energy of Partly or Completely Miscible Systems; *AIChE J.* (1975) 21, 116-128

Akerlof, G.; Turck, H. E.: Solubility of some strong, highly soluble electrolytes in methyl alcohol and hydrogen peroxide-water mixtures at 25°C; *J. Am. Chem. Soc.* (1935), 1916-1920

Albert, M.; Hahnenstein I.; Hasse, H.; Maurer, G.: Vapor-Liquid Equilibrium of Formaldehyde Mixtures: New Experimental Data and Model Revision, *AIChE-J.* 42 (6) (1996) 1741-1752

Bao, Z.; Liu, M.; Yang, J.; Wang, N.: Measurement and correlation of moderate pressure vapor-liquid equilibrium data for methanol-water binary system. *Huagong Xuebao (Chinese Edition)* (1995), 46, 230-233

Beutier, D.; Renon, H.: Representation of ammonia-hydrogen sulfide-water, ammonia-carbon dioxide-water and ammonia-sulfur dioxide-water vapor-liquid-equilibriums; *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.* (1978) 17, 220-230

Bredig, G.; Bayer, R. The vapor pressure of the system methanol-water. *Z. physik. Chem.* (1927) 1-14

Broul, M.; Hlavaty, K.; Linek, J.: Liquid-vapor equilibrium in systems of electrolytic components. V. The system $\text{CH}_3\text{OH-H}_2\text{O-LiCl}$ at 60°C, *Collection of Czechoslovak Chemical Communications* (1969) 34, 3428-3435

Butler, J. A. V.; Thomson, D. W.; MacLennan, W. H.: The free energy of the normal aliphatic alcohols in aqueous solution. I. The partial vapor pressures of aqueous solutions of methanol and propyl and butyl alcohols. II. The solubilities of some normal aliphatic alcohols in water. III. The theory of binary solutions, and its application to aqueous alcoholic solutions. *J. Chem. Soc.* (1933), 674-686

Campbell, A. N.; Campbell J. R.: Sewage treatment, purification and disposal; *J. Inst. Engrs. Australia*, (1937) 9, 116-126

Clifford, I. J.; Hunter, E.: The system ammonia-water at temperatures up to 150 °C and at pressures up to 20 atmospheres; *J. Phys. Chem.*, (1933), 101-118

Dulitskaya, K. A.; Vapor pressure of binary systems. I. *J. Gen. Chem. (U.S.S.R.)* (1945), 15 9-21

Edwards, T. J.; Maurer, G.; Newman, J. M.; Prausnitz, J. M.: Thermodynamics of aqueous solutions containing volatile weak electrolytes; *AIChE-J.*, 24 (1978), 101-118

Fenby, D. V.; Khurma, J. R.; Kooner, Z. S.; Smith, R. F.: Deuterium isotope effects in liquid-liquid phase diagrams: water + phenol and water + 2-methylpropanoic acid systems.; *Australian Journal of Chemistry* (1983) Vol. 36, 215-221

Fratscher, W.; Heat and Mass Transfer By H. D. Baehr und K. Stefan Chemische Technik Leipzig (1996)

Gmehling, J.; Onken, U.; Arlt, W.; Grenzheuser, P.; Weidlich, U.; Kolbe, B.: Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection, DECHEMA Chemistry Data Series, Vol I, 13 Bände, Frankfurt (ab 1977)

Griswold, J.; Wong, S. Y.: Phase-equilibria in the acetone-methanol-water system from 100°C into the critical region. Chem. Eng. Progress Symposium Ser. (1952), 48

Göppert, U.; Experimentelle Untersuchungen des Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichtes des Systems Kohlendioxid-Ammoniak-Wasser bei Temperaturen zwischen 60 und 120 °C und Drücken bis zu 70 bar; Dissertation, Universität Karlsruhe (1985)

Hall, D. J.; Mash, C. J.; Pemberton, R. C.; Vapor-liquid equilibrium for the systems water + methanol, water + ethanol, methanol + ethanol and water + methanol + ethanol. NPL Report Chem. (United Kingdom, National Physical Laboratory, Division of Chemical Standards) (1979), 95, 32 pp.

Hirata, M.; Ohe, S.; Nagahama, K.: Computer Aided Data Book of Vapor-Liquid Equilibria. (1975), 933 pp.

Kooner, Z. S.; Phutela, R. C.; Fenby, D. V.; Determination of the equilibrium constants of water-methanol deuterium exchange reactions from vapor pressure measurements. Australian Journal of Chemistry (1980), 33(1), 9-13

Kurihara, K.; Minoura, T.; Takeda, K.; Kojima, K.; Isothermal Vapor-Liquid Equilibria for Methanol + Ethanol + Water, Methanol + Water, and Ethanol + Water. J. Chem. Eng. Data (1995), 40(3), 679-684

Kurz, F., Rumpf, B., Sing, R., Maurer, G.; Vapor-liquid and vapor-liquid-solid equilibria in the system ammonia-carbon dioxide-sodium chloride-water at temperatures from 313 to 393 K and pressures up to 3 MPa; Ind. Eng. Chem. Res., 35 (1996), 3795-3802

Kurz, F.; Untersuchungen zur simultanen Lösung von Ammoniak und Kohlendioxid in Wasser und salzhaltigen wässrigen Lösungen; Dissertation, Universität Kaiserslautern (1994)

Hayden, V. J.; O'Connell, J. P.; A generalized method for predicting second virial coefficients; Ind. Eng. Chem. Proc., 14 (1975), 209-216

Inomata, H.; Ikawa, N.; Arai, K.; Saito, S.; Vapor-liquid equilibria for the ammonia-methanol-water system; J. Chem. Eng. Data, Vol. 33 (1988) 26-29

Jödecke, M.; Untersuchungen zur Löslichkeit von Kohlendioxid in wässrig-organisch-salzhaltigen Lösungsmittelgemischen, Dissertation Universität Kaiserslautern (2003)

Lichtfers, U.; Spektroskopische Untersuchungen zur Ermittlung der Speziesverteilung im System Ammoniak-Kohlendioxid-Wasser, Dissertation, Universität Kaiserslautern (2000)

- Linke, W. F.; Solubilities of Inorganic and Metal-Organic Compounds; J. Americ. Chem. Society (1958) Volume 1 und 2
- Marcus, Y.; Ion properties; Marcel Dekker Inc., New York (1997)
- McGlashan, M. L.; Williamson, A. G.; Isothermal liquid-vapor equilibria for system methanol-water. J. Chem. Eng. Data (1976), 21(2) 196-199
- Müller, G.; Experimentelle Untersuchung des Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichtes im System Ammoniak-Kohlendioxid-Wasser zwischen 100 und 200°C bei Drücken bis 90 bar; Dissertation, Universität Kaiserslautern (1983)
- Pérez-Salado, Á.; Bestimmung chemischer Gleichgewichtskonstanten von Dissoziationsreaktionen in wässrigen Lösungen aus Messungen der elektromotorischen Kraft, Dissertation, Universität Kaiserslautern (1997)
- Pérez-Salado, Á.; Persönliche Mitteilungen (2002)
- Pinho P., Macedo A.; Representation of salt solubility in mixed solvents: a comparison of thermodynamic models; Fluid Phase Equilibria 116, (1996) 209-216
- Ratcliff, G. A.; Chao, K. C.; Prediction of thermodynamic properties of polar mixtures by a group solution model. Canadian Journal of Chemical Engineering (1969) 49, 148-153
- Reamer, H. H.; Sage, B. H.; Lacey, W. N.; Phase equilibria in hydrocarbon systems. n-Butane-water system in the two-phase region. Ind. Eng. Chem. (1952) 44, 609-615
- Reid, R. C.; Prausnitz, J. M.; Poling B. E.; The Properties of Gases and liquids (1987) 741 pp.
- Reid, R. C.; Prausnitz, J. M.; Sherwood, T. K.; The Properties of Gases and Liquids, McGraw Hill Book Comp., New York (1977)
- Rothmund, V.; Liquid-liquid equilibria for the system phenol-water; Z. Phys. Chem. Leipzig, Vol. 26, (1898), 433 pp.
- Rumpf, B.; Untersuchungen zur Löslichkeit reagierender Gase in Wasser und salzhaltigen wässrigen Lösungen; Dissertation, Universität Kaiserslautern (1997)
- Rumpf, B.; Maurer, G.; Solubility of ammonia in aqueous solutions of sodium sulfate and ammonium sulfate at temperatures from 333.15 K to 433.15 K and Pressures up to 3 MPa; Ind. Eng. Chem. Res., 32 (1993 a), 1780-1789
- Rumpf, B.; Maurer, G.; An experimental and theoretical investigation on the solubility of carbon dioxide in aqueous solutions of strong electrolytes; Ber. Bunsenges. Phys. Chem., 97 (1993 b), 85-97
- Saul, A.; Wagner, W.; International equations for saturation properties of ordinary water substance; J. Phys. Chem. Ref. Data (1987); 16, 893-901
- Sing, R.; Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak und sauren Gasen in Wasser und wässrigen Lösungen starker Elektrolyte, Dissertation, Universität Kaiserslautern (1998)

Tsonopoulos, C.; Coulson, D. M.; Inman, L. B.; Ionization Constants of Water Pollutants, J. Chem. Eng. Data, Vol. 21(2), (1976) 190-193

Wilson, T. A.; Properties of aqua ammonia Part I; Refrig. Eng., 10 (1924), 248-252

Wucherer, J.; Messung von Druck, Temperatur und Zusammensetzung der flüssigen und dampfförmigen Phase von Ammoniak-Wasser-Gemischen im Sättigungszustand; Z. Gesamte Kälte-Ind., 39 (1932), 97-140

Xia, J.; Untersuchungen zur Löslichkeit von Gasen in salzhaltigen, wässrigen Lösungen, Dissertation, Universität Kaiserslautern (1998)

Zhuravlev, E. F.; Bychkova, M. N.; Systems with an upper ternary critical point. I. Two-layer separation in the systems: phenol-m-phenylenediamine-water and phenol-m-phenylenediamine-benzene.; J. Gen. Chem. (U.S.S.R.) (1947) 1577-1582

Anhang

A 1 Ergänzung zur Modellierung

A 1.1 Berechnung der im Debye-Hückel-Term verwendeten Größen

Im Debye- Hückel- Term A_x werden die vom Lösungsmittel abhängigen Größen Dichte d und Molmasse M aus den entsprechenden Eigenschaften der reinen Lösungsmittelkomponenten und der Zusammensetzung des Lösungsmittels berechnet. Im Folgenden werden die Beschreibungen für den Sonderfall des binären Lösungsmittelgemisches Wasser + Methanol angegeben.

M ist die Molmasse des Lösungsmittelgemisches in der Dimension kmol/kg.

$$M = \tilde{x}_W M_W + \tilde{x}_M M_M \quad (\text{A1.1})$$

$$\tilde{x}_W = \frac{n_W}{n_W + n_M} \quad \tilde{x}_M = 1 - \tilde{x}_W \quad (\text{A1.2})$$

Die spezifische Dichte $\tilde{\rho}$ der Mischung wird unter Verwendung des Exzessvolumens berechnet:

$$\tilde{\rho} = \frac{M}{v} \quad (\text{A1.3})$$

$$v = \tilde{x}_W v_{W,\text{rein}} + \tilde{x}_M v_{M,\text{rein}} \quad (\text{A1.4})$$

v_i = molare Volumina

Als Dielektrizitätskonstante ε der Mischung wird die Dielektrizitätskonstante von reinem Wasser ε_W verwendet, die in Anhang A 1.2 beschrieben ist.

A 1.2 Dielektrizitätskonstante von Wasser

Für die Dielektrizitätskonstante von reinem Wasser eine von Bradley und Pitzer (1979) angegebene Gleichung verwendet:

$$\varepsilon_W = U_1 \cdot \exp\left[U_2 \cdot (T / K) + U_3 \cdot (T / K)^2\right] + C \cdot \ln\left(\frac{B + (p / \text{bar})}{B + 1000}\right) \quad (\text{A1.5})$$

$$\text{mit} \quad C = U_4 + \frac{U_5}{U_6 + (T / K)} \quad (\text{A1.6})$$

$$\text{und} \quad B = U_7 + \frac{U_8}{(T / K)} + U_9 \cdot (T / K) \quad (\text{A1.7})$$

mit den Koeffizienten U_1 bis U_9 :

$$\begin{aligned} U_1 &= 3.4279 \cdot 10^2 & U_4 &= -2.0525 & U_7 &= -8.0325 \cdot 10^3 \\ U_2 &= -5.0866 \cdot 10^{-3} & U_5 &= 3.1159 \cdot 10^3 & U_8 &= 4.2142 \cdot 10^6 \\ U_3 &= 9.4690 \cdot 10^{-7} & U_6 &= -1.8289 \cdot 10^2 & U_9 &= 2.1417 \end{aligned}$$

A 1.3 Dampfdruck und Siededichte von reinem Wasser

Zur Berechnung des Dampfdruckes und der Siededichte von reinem Wasser werden die Beziehungen von Saul und Wagner (1987) verwendet:

$$\ln \left(\frac{p_{\text{W}}^{\text{s}}}{p_{\text{c}}} \right) = \frac{T_{\text{c}}}{T} \cdot \left(a_1 \cdot \theta + a_2 \cdot \theta^{1.5} + a_3 \cdot \theta^3 + a_4 \cdot \theta^{3.5} + a_5 \cdot \theta^4 + a_6 \cdot \theta^{7.5} \right) \text{ und} \quad (\text{A1.8})$$

$$\frac{\rho_{\text{W}}^{\text{s}}}{\rho_{\text{c}}} = 1 + b_1 \cdot \theta^{(1/3)} + b_2 \cdot \theta^{(2/3)} + b_3 \cdot \theta^{(5/3)} + b_4 \cdot \theta^{(16/3)} + b_5 \cdot \theta^{(43/3)} + b_6 \cdot \theta^{(110/3)} \quad (\text{A1.9})$$

θ ist die reduzierte Temperaturdifferenz zur kritischen Temperatur: $\theta = 1 - \frac{T}{T_{\text{c}}}$.

Die Koeffizienten a_1 bis a_6 und b_1 bis b_6 sind in Tabelle A1.1 aufgeführt.

Tabelle A1.1: In den Gleichungen A1.8 und A1.9 verwendete Koeffizienten:

Koeff.	1	2	3	4	5	6
a_i	-7.85823	1.83991	-11.7811	22.6705	-15.9393	1.77516
b_i	1.99206	1.10123	-0.512506	-1.75263	-45.4485	-6.75615 · 10 ⁵

Für Wasser werden folgende kritische Daten verwendet:

$$T_{\text{c}} = 647.14 \text{ K}, \quad p_{\text{c}} = 22.064 \text{ MPa} \text{ und } \rho_{\text{c}} = 322.0 \text{ kg/m}^3 \quad .$$

A 1.4 Dampfdruck und Siededichte von reinem Methanol

Zur Berechnung des Dampfdruckes von reinem Methanol werden Angaben von Reid, Prausnitz und Poling (1988) verwendet:

$$\ln\left(\frac{p_M^S}{p_c}\right) = \frac{T_c}{T} \left(c_1 \cdot \theta + c_2 \cdot \theta^{1.5} + c_3 \cdot \theta^3 + c_4 \cdot \theta^6 \right) \quad (\text{A1.10})$$

θ ist die reduzierte Temperaturdifferenz zur kritischen Temperatur: $\theta = 1 - \frac{T}{T_c}$.

Die Siededichte wurde mit einer eigenen Korrelation basierend auf den Daten von Fratscher (1993) ermittelt.

$$\ln\left(\frac{\rho_M}{\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}}\right) = d_1 + \frac{d_2}{(T/K)} + d_3 \cdot \ln\left(\frac{T}{K}\right) + d_4 \cdot \left(\frac{T}{K}\right) + d_5 \cdot \left(\frac{T}{K}\right)^2 \quad (\text{A1.11})$$

Tabelle A 1.2: In den Gleichungen A1.10 und A.1.11 verwendete Koeffizienten:

Koeff.	1	2	3	4	5
c_i	-8.54796	0.76982	-3.1085	1.54481	-
d_i	11.4317	116.848	-1.33226	0.0117186	-1.18958*10 ⁻⁵

Für Methanol werden folgende kritische Daten verwendet:

$$T_c = 512.6 \text{ K}, \quad p_c = 8.09 \text{ MPa} \text{ und } \rho_c = 118.0 \text{ kg/m}^3.$$

A 1.5 Henry-Konstanten

Die Henry'sche Konstante für die Löslichkeit von Ammoniak bzw. Kohlendioxid in Wasser mit der Molalität als Konzentrationsmaß (und dem entsprechenden Referenzzustand) wurden von Rumpf (1992) übernommen:

$$\ln\left(\frac{H_{i,w}^{(m)}(T)}{\text{bar} \cdot \text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}}\right) = \frac{A_i}{(T/K)} + B_i \cdot \ln(T/K) + C_i \cdot (T/K) + D_i + \frac{E_i}{(T/K)^2} \quad (\text{A1.12})$$

Die Konstanten der Gleichung (A1.12) sind in der Tabelle A 1.3 angegeben.

Tabelle A 1.3: Koeffizienten zur Bestimmung der Henry Konstanten nach Rumpf (1992):

Gas	A_i	B_i	$10^2 \cdot C_i$	D_i	E_i
NH ₃	-1 879.02	0	0	6.23446	-355134.1
CO ₂	-9624.41	-28.7488	1.44074	195.179	0

Die Umrechnung auf die in der vorliegenden Arbeit benötigte Henry'sche Konstante $H_i^{(x)}$ erfolgt mit der Gleichung A 1.13:

$$H_i^{(x)} = H_{i,w}^{(m)} \cdot \frac{1000}{M_w} \quad (\text{A1.13})$$

A 1.6 Partielle molare Volumina

Das partielle molare Volumen von Ammoniak bzw. Kohlendioxid in unendlicher Verdünnung in Wasser wird mit der Methode von Brelvi und O'Connell (1972) berechnet. Dazu wurden die sogenannten charakteristischen Molvolumina v_i^+ der Gase benötigt. Diese wurden von Edwards et al. (1978) übernommen. Sie sind in der Tabelle A1.4 angegeben.

Tabelle A 1.4: Charakteristische Molvolumina für die Methode von Brelvi und O'Connell (1972) nach Edwards et. al. (1978)

Gas i	$v_i^+ / (\text{cm}^3 / \text{mol})$
NH ₃	65.2
CO ₂	80.0

A 1.7 Thermodynamische Gleichgewichtskonstanten

Zur Beschreibung des Einflusses der Temperatur auf die Gleichgewichtskonstante einer chemischen Reaktion wurde die Gleichung A1.14 verwendet. Die in der Molalitätsskala berechneten Gleichgewichtskonstanten wurden mit Gleichung A1.15 in die Molenbruchskala umgerechnet. Für die in der vorliegenden Arbeit interessierenden Reaktionen wurden die Angaben von Lichtfers (2000) übernommen. Sie sind in der Tabelle A1.5 zusammengestellt.

$$\ln K_R^{(m)} = \frac{A_R}{T/K} + B_R \cdot \ln(T/K) + C_R \cdot (T/K) + D_R + \frac{E_R}{(T/K)^2} \quad (\text{A1.14})$$

$$K_R^{(x)} = K_R^{(m)} \cdot \left(\frac{M_w}{1000} \right)^U \quad (\text{A1.15})$$

Tabelle A1.5: Koeffizienten zur Beschreibung der Temperaturabhängigkeit der thermodynamischen Gleichgewichtskonstanten

Reaktion	A_R	B_R	C_R	D_R	E_R	U
$\text{NH}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{NH}_4^+ + \text{OH}^-$	33110.5	110.718	-0.14596	-686.514	$-2.034 \cdot 10^6$	1
$\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HCO}_3^- + \text{H}^+$	68359.6	188.444	-0.2064	-1203.01	$-4.713 \cdot 10^6$	1
$\text{HCO}_3^- \rightleftharpoons \text{CO}_3^{2-} + \text{H}^+$	-7230.6	-30.651	0.01315	175.36	$-3.728 \cdot 10^5$	1
$\text{NH}_3 + \text{HCO}_3^- \rightleftharpoons \text{NH}_2\text{COO}^- + \text{H}_2\text{O}$	1507.39	0	0	-4.8518	0	-1
$\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{OH}^-$	-13445.9	-22.4773	0	140.932	0	2

A 1.8 Bestimmung des Löslichkeitsproduktes

Für die Löslichkeit von Ammoniumhydrogencarbonat in Wasser wurde die von Lichtfers (2000) angegebene Beziehung für das Löslichkeitsprodukt übernommen:

$$\ln K_{\text{NH}_4\text{HCO}_3}^{(m)} = 7.47671 - \frac{2094.92}{T/K} \quad (\text{A1.16})$$

Für das Löslichkeitprodukt von Ammoniumcarbamat in Wasser wurden die Angaben von Lichtfers (2000) übernommen:

$$\ln K_{\text{NH}_2\text{COONH}_4}^{(m)} = 5.00625 - \frac{1465.2507}{T/K} + 0.55433279 \cdot \ln(T/K) \quad (\text{A1.17})$$

In der vorliegenden Arbeit wurden die Löslichkeitsprodukte in der Molenbruchskala benötigt. Die Gleichung für die Umrechnung lautet:

$$K_i^{(x)} = K_i^{(m)} \cdot \left(\frac{M_w}{1000} \right)^2 \quad (\text{A1.18})$$

A 1.9 Volumen- und Oberflächenparameter im UNIQUAC-Modell

Die Volumen- und Oberflächenparameter für Wasser, Methanol, Ammoniak und Kohlendioxid wurden von Reid et al. (1977) bzw. Gmehling (1977) übernommen. Sie sind in Tabelle A1.6 zusammengestellt.

Tabelle A 1.6: Volumen- und Oberflächenparameter im UNIQUAC-Modell

Stoff	r_i	q_i
Methanol	1.43111	1.432
Wasser	0.92	1.40
Ammoniak	0.90969	0.98
Kohlendioxid	1.29862	1.292

Für ionische Spezies werden die Volumen- und Oberflächenparameter aus den von Marcus (1997) angegebenen Ionenradien mit von Abrams et al. (1975) angegebenen Gleichungen (A 1.19 und A 1.20) berechnet. Lediglich der Ionenradius des Carbamations wurde - da keine Literaturangaben zur Verfügung standen - aus dem Aufbau des Ions abgeschätzt. In der Tabelle A 1.7 sind die Ionenradien angegeben.

$$r_i = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r_{ai}^3 \cdot \frac{6.023 \cdot 10^{-7}}{15.17} \quad (\text{A1.19})$$

$$q_i = 4 \cdot \pi \cdot r_{ai}^2 \cdot \frac{6.023 \cdot 10^{-6}}{2.5} \quad (\text{A1.20})$$

Tabelle A 1.7: Ionenradien zur Berechnung von r_i und q_i

Ion	$r_{a,i} / 10^{-12}\text{m}$
H^+	30
OH^-	133
NH_4^+	148
HCO_3^-	156
CO_3^{2-}	178
NH_2COO^-	230
Na^+	102
Cl^-	181
SO_4^{2-}	230

A 1.10 Wechselwirkungsparameter des UNIQUAC Modells für die Systeme Methanol + Wasser, Ammoniak + Wasser, Ammoniak + Methanol und Ammoniak + Methanol + Wasser sowie Kohlendioxid + Wasser, Kohlendioxid + Methanol und Kohlendioxid + Methanol + Wasser

Die UNIQUAC Wechselwirkungsparameter zur Beschreibung des Gas-Flüssigkeits-Gleichgewichts der nicht reagierenden Systeme wurden an experimentelle Ergebnisse der vorliegenden Arbeit, der Arbeit von Jödecke (Dissertation (2003)) und an Literaturangaben von Albert et al. (1996), Bao et al. (1995), Bredig et al. (1927), Broul et al. (1969), Butler et al. (1933), Dulitskaya (1945), Grisworld et al. (1952), Hall et al. (1979), Kooner et al. (1980), Kurihara et al. (1995), McGlashan et al. (1976), Ratcliff et al. (1969), Reamer et al. (1952), Kurz et al. (1995) und Rumpf et al. (1993) simultan angepasst. Die Wechselwirkungsparameter, die nach Gleichung A1.21 berechnet werden, sind in der Tabelle A 1.8 zusammengestellt.

$$\Psi_{kl} = \exp\left(a_{kl} + \frac{b_{kl}}{T/K}\right) \quad (\text{A1.21})$$

Tabelle A 1.8: UNIQUAC Wechselwirkungsparameter zur Beschreibung des Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichts der nicht reagierenden binären und ternären Systeme für den Temperaturbereich von 298.15 bis 393.15 K

Stoffe i,j	a	b	j,i	a	b
H ₂ O + Methanol	-2.13375	790.08082		1.81344	-728.69338
H ₂ O + NH ₃	0.86943	479.46288		-0.40462	361.76812
H ₂ O + CO ₂	-1.93687	361.45349		-2.44102	-592.32806
Methanol + NH ₃	0.90767	429.12860		0.31916	-11.47889
Methanol + CO ₂	-1.55078	51.42028		0.31329	130.79987

A 1.11 Wechselwirkungsparameter des UNIQUAC-Modells für das System Kohlendioxid + Ammoniak + Wasser

Die UNIQUAC Wechselwirkungsparameter wurden an die experimentellen Ergebnisse für das Gas-Flüssigkeits-Gleichgewicht des Systems Ammoniak + Kohlendioxid + Wasser von Göppert (1985), Kurz (1995) und Müller (1983) unter Verwendung der im Absatz A 1.10 bestimmten UNIQUAC Wechselwirkungsparameter simultan angepasst (siehe Kap. 3.8.2).

Die Wechselwirkungsparameter wurden nach Gleichung A1.21 berechnet und sind in Tabelle A1.9 zusammengestellt.

$$\Psi_{kl} = \exp\left(a_{kl} + \frac{b_{kl}}{T/K}\right) \quad (\text{A1.21})$$

Tab. A 1.9: UNIQUAC Wechselwirkungsparameter für das System Kohlendioxid + Ammoniak + Wasser für den Temperaturbereich von 313.15 bis 473.14 K

i-j	a	b	j-i	a	b
H ₂ O + NH ₄ ⁺	4.07805	-445.16635		3.15273	-606.20558
H ₂ O + HCO ₃ ⁻	8.44183	-1019.41301		0.99958	-726.75180
H ₂ O + NH ₂ COO ⁻	6.69020	616.72510		1.01089	62.55983
NH ₃ + NH ₄ ⁺	-18.01331	-17774.68075		15.30127	-5804.26602
NH ₃ + HCO ₃	2.39944	1246.11384		-22752.82054	132.57350
NH ₃ + NH ₂ COO	-31.90919	1478.42383		4.58343	-1295.61869
CO ₂ + NH ₄ ⁺	-83.06407	-		-584.84827	-
CO ₂ + HCO ₃	-712.89250	2343.71563		-27.33439	-969.58062
CO ₂ + NH ₂ COO	-702.78335	2543.77246		-13.07216	4854.08360
NH ₄ ⁺ + HCO ₃	2.80924	-87.35136		5.26438	80.92796
NH ₄ ⁺ + NH ₂ COO	11.94126	-410.01318		7.23257	-494.51090

A 1.12 Wechselwirkungsparameter des UNIQUAC-Modells für das System Kohlendioxid + Ammoniak + Methanol + Wasser

Die UNIQUAC Wechselwirkungsparameter wurden an experimentelle Ergebnisse der vorliegenden Arbeit für das Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht im System Kohlendioxid + Ammoniak + Methanol + Wasser angepasst. Sie werden entsprechend Gleichung A1.21 berechnet. In der Tabelle A1.10 sind die so ermittelten (zusätzlichen) UNIQUAC Wechselwirkungsparameter zusammengestellt.

Tab. A 1.10: UNIQUAC Wechselwirkungsparameter für das System Kohlendioxid + Ammoniak + Methanol + Wasser (zusätzliche Parameter zu den Angaben aus der Tab. A 1.9) für den Temperaturbereich von 313.15 bis 393.15 K

Stoffe i-j	a	b	j-i	a	b
Methanol + NH ₄ ⁺	-113.80308	-3911.45635		1.91222	-1239.05941
Methanol + HCO ₃	-106.61651	134.07865		-99.71641	-2699.50820
Methanol + NH ₂ COO	14.43344	-2463.30656		-0.05459	6.79159
NH ₃ + CO ₂	-19.42391	7719.36493		10.90495	-3911.32265

A 1.13 Parameter des G^E- Ansatzes nach Pitzer für Wechselwirkungen mit Methanol

Zur Beschreibung der Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichte mit dem G^E- Ansatz von Pitzer wurden für die methanolfreien wässrigen Systeme die Wechselwirkungsparameter von Lichtfers (2000) übernommen. Die Wechselwirkungsparameter zwischen Ammoniak und Wasser werden mit Gleichung A 1.22 berechnet. Die Koeffizienten sind in der Tabelle A 1.11 zusammengestellt.

$$f(T) = a + \frac{b}{T/K} + c \cdot \ln(T/K) \quad (\text{A1.22})$$

Tab. A 1.11: Koeffizienten zur Berechnung der Wechselwirkungsparameter für das Pitzer-Modell im System NH₃ + H₂O

Parameter	a	b	c
$\beta_{NH_3, NH_3}^{(0)}$	-0.0197	9.864	-
τ_{NH_3, NH_3, NH_3}	$5.539 \cdot 10^{-3}$	-0.1739	$-8.61 \cdot 10^{-4}$

Die Wechselwirkungsparameter im System Natriumsulfat + Wasser werden nach folgenden Gleichungen berechnet:

$$\begin{aligned} \beta_{Na^+, SO_4^{2-}}^{(0)} = & \beta^{(0)}(T_R) - A \cdot \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_R} \right) + q_1 \cdot (T^2 - (T_R)^2) + q_2 \cdot (T - T_R) + q_3 \cdot \ln\left(\frac{T}{T_R}\right) \\ & - q_4 \cdot \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_R} \right) + q_5 \cdot \left(\frac{1}{T - 263} - \frac{1}{T_R - 263} \right) \end{aligned} \quad (\text{A1.23})$$

mit:

$$A = T_R^2 \cdot \left(\frac{\partial \beta^{(0)}}{\partial T} \right)_{T=T_R} - 2 \cdot q_1 \cdot T_R^3 - q_2 \cdot T_R^2 - q_3 \cdot T_R + 526 \cdot q_4 \cdot \left(\frac{1}{T_R - 263} + \frac{263}{2 \cdot (T_R - 263)^2} \right) \quad (\text{A1.24})$$

$$\begin{aligned}
\beta_{Na^+, SO_4^{2-}}^{(1)} &= \beta^{(1)}(T_R) - A \cdot \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_R} \right) + q_5 \cdot (T^2 - (T_R)^2) + q_6 \cdot (T - T_R) + q_7 \cdot \ln \left(\frac{T}{T_R} \right) \\
&\quad - q_8 \cdot \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_R} \right) + q_8 \cdot \left(\frac{1}{T - 263} - \frac{1}{T_R - 263} \right) \\
&\quad - 680 \cdot q_9 \cdot \left(\frac{1}{(T - 680) \cdot T} + \frac{1}{(T_R - 680) \cdot T_R} \right)
\end{aligned} \tag{A1.25}$$

mit:

$$\begin{aligned}
B &= T_R^2 \cdot \left(\frac{\partial \beta^{(1)}}{\partial T} \right)_{T=T_R} - 2 \cdot q_5 \cdot T_R^3 - q_6 \cdot T_R^2 - q_7 \cdot T_R + 526 \cdot q_8 \cdot \left(\frac{1}{T_R - 263} + \frac{263}{2 \cdot (T_R - 263)^2} \right) \\
&\quad - 1360 \cdot q_9 \cdot \left(\frac{680}{2 \cdot (T_R - 680)^2} - \frac{1}{680 - T_R} \right)
\end{aligned} \tag{A.1.26}$$

Die zur Berechnung der Wechselwirkungsparameter benötigten Konstanten:

$$\beta^{(0)}(T_R) = 0.01869 \qquad \left(\frac{\partial \beta^{(0)}}{\partial T} \right)_{T=T_R} = 0.002349$$

$$\beta^{(1)}(T_R) = 1.0994 \qquad \left(\frac{\partial \beta^{(1)}}{\partial T} \right)_{T=T_R} = 0.005958$$

$$q_1 = -1.03611 \cdot 10^{-5}$$

$$q_6 = 5.76552 \cdot 10^{-1}$$

$$q_2 = 3.00299 \cdot 10^{-2}$$

$$q_7 = -1.88769 \cdot 10^2$$

$$q_3 = -1.43441 \cdot 10^1$$

$$q_8 = -2.05974 \cdot 10^{-1}$$

$$q_4 = -6.66894 \cdot 10^{-1}$$

$$q_9 = 1.46744 \cdot 10^3$$

$$q_5 = -3.23550 \cdot 10^{-4}$$

$$T_R = 298.15 \text{ K}$$

Die für das System Ammoniak + Kohlendioxid + Wasser benötigten Wechselwirkungsparameter werden nach Gleichung A 1.27 berechnet. Die erforderlichen Konstanten sind in der Tabelle A 1.12 zusammengestellt.

$$f(T) = A + \frac{B}{(T/K)} + C \cdot (T/K) \tag{A1.27}$$

Tab. A 1.12: Wechselwirkungsparameter für $\text{NH}_3 + \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$

Parameter	A	B	C
$\beta_{\text{CO}_2, \text{HCO}_3^-}^{(0)}$	-10.7878	1880.32	0.0156
$\beta_{\text{NH}_3, \text{HCO}_3^-}^{(0)}$	-0.220	-	-
$\beta_{\text{NH}_3, \text{CO}_3^{2-}}^{(0)}$	0.2719	-80.6147	-
$\beta_{\text{NH}_3, \text{NH}_2\text{COO}^-}^{(0)}$	0.0405	-	-
$\beta_{\text{NH}_4^+, \text{HCO}_3^-}^{(0)}$	0.0467	-12.8310	-
$\beta_{\text{NH}_4^+, \text{CO}_3^{2-}}^{(0)}$	-0.3564	107.7518	-
$\beta_{\text{NH}_4^+, \text{NH}_2\text{COO}^-}^{(0)}$	0.0321	3.5624	-
$\beta_{\text{NH}_4^+, \text{CO}_3^{2-}}^{(1)}$	-4.2073	1765.1379	-
$\tau_{\text{CO}_2, \text{NH}_4^+, \text{HCO}_3^-}$	-0.0024	-	-
$\tau_{\text{NH}_3, \text{NH}_4^+, \text{NH}_2\text{COO}^-}$	-0.0007	-	-
$\tau_{\text{NH}_4^+, \text{NH}_4^+, \text{NH}_2\text{COO}^-}$	-0.0011	-	-

Für die Beschreibung des Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichts der Systeme Methanol + Wasser, Methanol + Wasser + Kohlendioxid und Methanol + Wasser + Natriumsulfat wurden von Jödecke (2003) Wechselwirkungsparameter an eigene experimentelle Ergebnisse und Literaturangaben (Albert et al. (1996), Bao et al. (1995), Bredig et al. (1927), Broul et al. (1969), Butler et al (1933), Dulitskaya (1945), Grisworld et al. (1952), Hall et al. (1979), Kooner et al. (1980), Kurihara et al. (1995), McGlashan et al. (1976), Ratcliff et al. (1969) und Reamer et al. (1952)) angepasst. Der Einfluss der Temperatur auf die Wechselwirkungsparameter wird mit der Gleichung A 1.28 beschrieben. Die Wechselwirkungsparameter sind in der Tabelle A 1.13 zusammengestellt.

$$f(T) = a + \frac{b}{(T/K)} \quad (\text{A1.28})$$

Tabelle A 1.13: Zusätzliche Wechselwirkungsparameter des Pitzer-Modells für wässrige Lösungen mit Methanol als gelöster Stoff im Temperaturbereich von 313 bis 393 K

Parameter	a	b
$\beta_{\text{MeOH,MeOH}}$	-0.158950	34.5982
$\tau_{\text{MeOH,MeOH,MeOH}}$	0.00343905	-0.799440
$\beta_{\text{CO}_2,\text{MeOH}}$	-0.123558	30.3965
$\beta_{\text{SO}_4^{2-},\text{MeOH}}$	0.2653945	-68.82564

A 1.14 Wechselwirkungsparameter, Henrykonstanten und Reaktionskonstanten für das Pitzer-Modell mit Phenol

Die Reaktionskonstante für die Dissoziation von Phenol wird von Tsonopoulos (1976) übernommen:

$$K_9^{(m)} = \frac{-11669.94}{(T/K)} - 27.7262 \cdot \ln(T/K) + 174.1328 \quad (\text{A1.29})$$

Die Henrykonstante für das Lösen von Phenol in Wasser wurde von Jödecke (2003) übernommen:

$$\ln \left(\frac{H_{\text{Phenol}}^{(m)}(T)}{\text{bar} \cdot \text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}} \right) = 10.658 - \frac{5267.049}{(T/K)} \quad (\text{A1.30})$$

Ein binärer und ein ternärer Wechselwirkungsparameter wurden für das System Phenol + Wasser an experimentelle Literaturwerte für das Flüssig-flüssig-Gleichgewicht (Campbell (1937), Fenby et al. (1983), Rothmund (1898) und Zhuravlev et al. (1947)) angepasst. Dabei wurde – da die phenolreiche Phase noch viel Wasser enthält – angenommen, dass das Pitzer-Modell (mit reiner Flüssigkeit als Referenzzustand für Wasser und in Wasser unendlich verdünntem Phenol als Referenzzustand für Phenol) – bei Verwendung der Molalität als Konzentrationskala – beide Phasen beschreiben kann. Zur Beschreibung der Eigenschaften des flüssigen Systems Ammoniak + Phenol + Wasser wurde zusätzlich ein binärer Wechselwirkungsparameter an experimentell bestimmte Löslichkeiten von Ammoniak in wässrigen Phenollösungen angepasst. Die Zahlenwerte für die Parameter sind in Tabelle A 1.14 zusammengestellt.

$$f(T) = a + \frac{b}{(T/K)} \quad (\text{A1.28})$$

Tabelle A1.14: Wechselwirkungsparameter des Pitzer-Modells für wässrige Lösungen von Phenol im Temperaturbereich von 313 bis 393 K

Parameter	a	b
$\beta_{\text{Phenol,Phenol}}$	0.001911516	-45.95491618
$\tau_{\text{Phenol,Phenol,Phenol}}$	0.005851731	-1.096298799
$\beta_{\text{NH}_3,\text{Phenol}}$	-0.1462562	44.99364

A 1.15 Virialkoeffizienten

Zur Berechnung der zweiten Virialkoeffizienten der reinen Gase $B_{i,i}$ wird eine von Rumpf et al. (1993) angegebenen empirischen Gleichung verwendet.

$$B_{i,i}(\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}) = a_i + b_i \cdot \left(\frac{c_i}{T/K} \right)^{d_i} \quad (\text{A1.31})$$

Die Parameter zur Berechnung der zweiten Virialkoeffizienten der reinen Gase Kohlendioxid, Ammoniak, Wasser und Methanol sind in der Tabelle A1.15 zusammengestellt.

Tabelle A1.15: Parameter zur Berechnung der zweiten Virialkoeffizienten $B_{i,i}$ der reinen Gase

i	a_i	b_i	c_i	d_i
CH ₃ OH	-59.649	-103.781	513.2	5.7
H ₂ O	-553.527	-39.287	647.3	4.277
NH ₃	4.059	-117.713	405.6	2.537
CO ₂	65.702	-184.854	304.16	1.36

Die zweiten gemischten Virialkoeffizienten werden mit der Methode von Hayden und O'Connell (1975) abgeschätzt. Dazu müssen die kritischen Daten (Temperatur $T_{c,i}$ und Druck $p_{c,i}$), die Dipolmomente μ_i , die mittleren Trägheitsradien $R_{D,i}$, die kritischen Realfaktoren $z_{c,i}$ und die Assoziationsparameter η_{ij} bekannt sein. Diese Daten sind in den Tabellen A1.16 und A1.17 zusammengestellt.

Tabelle A1.16: Reinstoffparameter zur Abschätzung der zweiten gemischten Virialkoeffizienten nach der Methode von Hayden und O'Connell (1975)

i	$T_{c,i}/K$	$p_{c,i}/atm$	$\mu_i/Debye$	$R_{D,i}/\text{Å}$	$z_{c,i}$
CH ₃ OH	513.2	78.5	1.66	1.536	1.63
H ₂ O	647.3	218.4	1.83	0.615	1.7
NH ₃	405.6	111.3	1.447	0.8533	0.0
CO ₂	241.0	53.096	0.00	0.9918	0.16

Tabelle A1.17: Assoziationsparameter $\eta_{i,j}$ zur Abschätzung der zweiten gemischten Virialkoeffizienten nach der Methode von Hayden und O'Connell (1975)

i \ j	CH ₃ OH	H ₂ O	NH ₃	CO ₂
CH ₃ OH	1.63	0.0	0.0	0.32
H ₂ O	0.0	1.7	0.2	0.3
NH ₃	0.0	0.2	0.0	0.2
CO ₂	0.32	0.3	0.2	0.16

A 2 Berechnung der Unsicherheiten der experimentellen Untersuchungen

Die Unsicherheiten der Ergebnisse der einzelnen experimentellen Untersuchungen werden mit dem Fehlerfortpflanzungsgesetz erfasst.

$$\Delta F_i = \frac{\delta F}{\delta x_i} \Delta x_i \quad (\text{A2.1})$$

Dabei ist F die interessierende Größe, z. B. die Molalität, und mit x sind die fehlerbehafteten Größen, z. B. die eingewogene Masse eines Stoffes, bezeichnet, aus denen F bestimmt wird. Δx ist die experimentelle Unsicherheit, mit der die Größe bestimmt wird. Den Gesamtfehler erhält man als Wurzel der Summe der Quadrate der Einzelfehler.

$$\Delta F_G = \sqrt{\sum_i \Delta F_i^2} \quad (\text{A2.2})$$

In der vorliegenden Arbeit werden zusammen mit den Messwerten zwei Fehlerarten angegeben: der Fehler in der Zusammensetzung der Lösung und der Fehler an einer explizit aufgenommenen Messgröße. Der erste Fehler resultiert aus den Unsicherheiten beim Einwiegen der Stoffe sowie durch Verluste beim Umfüllen vom Vorlagenbehälter in die Zelle. Der Fehler der Masse eines Salzes wird mit 0.08 g, der von Methanol mit 0.4 g und der von Wassers mit 0.1 g abgeschätzt. Beim Befüllen der Messzelle wird der Fehler der Gesamtmasse der Lösung zu 0.2 g angenommen. Beim Füllen der Gase Ammoniak und Kohlendioxid beträgt für jede Füllung der Fehler der Masse 0.04 g. Diese Unsicherheiten werden für jede Füllung addiert. Die anderen Fehler ergeben sich aus den Unsicherheiten bei den Analysen und Messungen an der Versuchsanlage. Für die Temperaturmessung wird eine Unsicherheit von ± 0.1 K angenommen. Der Fehler bei der Bestimmung des Gesamtdruckes beträgt ± 5 kPa im Bereich bis 1 MPa und bei höheren Drücken ± 10 kPa. Der Fehler bei der Bestimmung des Volumens der Gasphase beträgt ± 5 cm³. Die Unsicherheiten bei der Analyse der Gasphase mit dem Gaschromatographen resultieren aus den Unsicherheiten der Kalibrierungen und den Abweichungen der Flächenverhältnisse bei Mehrfachanalysen. Die Abweichungen durch die Unsicherheiten der Kalibrierfaktoren sind in der Tabelle A 2.1 zusammengestellt. Die mittleren Abweichungen der Flächenverhältnisse bei den Analysen wurde aus den Analysereihen berechnet. Für das Flächenverhältnis Wasser/Ammoniak ergibt sich eine Abweichung von 0.2 %, für Wasser/Kohlendioxid 0.08 %, für Wasser/Methanol und Methanol/Ammoniak jeweils 0.5 % sowie für Methanol/Kohlendioxid 0.04 %.

Tab. A 2.1: Unsicherheiten der Kalibrierfaktoren der gaschromatographischen Analyse

Temperatur	H ₂ O + NH ₃	H ₂ O + CO ₂	H ₂ O + CH ₃ OH	CH ₃ OH + NH ₃	CH ₃ OH + CO ₂
K	%	%	%	%	%
313	4	5	4	6	2
353	6	2	4	3	2
393	4	2	5	5	5

Mit diesen Angaben wird der Fehler im Molanteil eines Stoffes in der Gasphase berechnet. Zum Beispiel erhält man für das binäre System Wasser/Methanol als Unsicherheit im Molanteil:

$$\Delta F_{1a} = \left(\frac{\frac{F_W}{F_M}}{1 + \alpha_3 \frac{F_W}{F_M}} - \frac{\alpha_3 \left(\frac{F_W}{F_M} \right)^2}{\left(1 + \alpha_3 \frac{F_W}{F_M} \right)^2} \right) \cdot \Delta \alpha_3 \quad (\text{A2.3})$$

$$\Delta F_{1b} = \left(\frac{\frac{F_W}{F_M}}{1 + \alpha_3 \frac{F_W}{F_M}} - \frac{\alpha_3^2 \left(\frac{F_W}{F_M} \right)}{\left(1 + \alpha_3 \frac{F_W}{F_M} \right)^2} \right) \cdot \Delta \left(\frac{F_W}{F_M} \right) \quad (\text{A2.4})$$

F_i sind jeweils die durch Gaschromatographie ermittelten Flächen, α_i der Kalibrierfaktor sowie $\Delta\alpha$ und ΔF die Unsicherheiten dieser Größen. Diese beiden Ergebnisse ΔF_{1n} werden mit Gleichung A 2.2 addiert und man erhält die Unsicherheit der Molanteile (ΔF_{y_i}) in der Gasphase. Zusammen mit dem Fehler des Gesamtdruckes ergibt sich der Fehler der Partialdrücke zu:

$$\frac{\Delta p_i}{p_i} = \frac{\Delta y_i}{y_i} + \frac{\Delta p}{p} \quad (\text{A2.5})$$

Die Unsicherheit der stöchiometrischen Molalitäten erhält man nach dem Fehlerfortpflanzungsgesetz (A 2.1). Als fehlerbehaftete Messgrößen gehen in die Berechnung die eingefüllten Massen der einzelnen Komponenten, deren Molanteile in der Gasphase sowie die Unsicherheit bei der Bestimmung des Volumens der Gasphase ein. Die so ermittelten Messunsicherheiten sind in den Tabellen im Anhang A 6 zusammen mit den jeweiligen Messgrößen angegeben.

Weiterhin werden bei der Modellierung der Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichte Standardabweichungen für die Abweichungen zwischen Mess- und Rechenwerten angegeben. Diese wurden nach folgender Vorschrift berechnet:

$$\sigma = \sqrt{\frac{n \sum x^2 - (\sum x)^2}{n(n-1)}} \quad (\text{A2.6})$$

A 3 Vergleich experimenteller und Literaturdaten mit dem UNIQUAC Modell nicht reagierender Systeme

Die Abbildungen A 3.1 bis A 3.8 zeigen Messwerte für die Siede- und Taulinien des Systems Methanol + Wasser bei Temperaturen von 25 bis 150 °C im Vergleich mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells.

In den Abbildungen A 3.9 bis A 3.11 sind die experimentellen Ergebnisse für den Gesamtdruck und die Partialdrücke beim Lösen von Ammoniak in Wasser mit Rechenwerten verglichen. Als „experimentelle“ Ergebnisse werden dabei u. a. auch Resultate bezeichnet, die mit Hilfe einer Korrelation von Rumpf et al. (1993) unter Verwendung des G^E - Ansatzes von Pitzer berechnet wurden. Diese Korrelation gibt die in der Literatur bekannten Messwerte (Clifford (1933), Kurz (1994), Müller (1983), Wilson (1924) und Wucherer (1932)) sehr gut wieder.

Experimentelle Ergebnisse der vorliegenden Arbeit für die Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol ($x_{\text{MeOH}} = 0.05$ bis 0.95 mol/mol) bzw. in reinem Methanol (bei Temperaturen von 40, 80 und 120 °C) sind in den Abbildungen A 3.12 bis A 3.27 mit Rechenwerten verglichen.

Von Xia (1999) wurde die Löslichkeit von Ammoniak in Methanol experimentell ermittelt. Ein Vergleich dieser Messwerte mit den Rechenwerten der vorliegenden Arbeit ist in der Abbildung A 3.28 gezeigt. Die Rechenwerte stimmen mit den (nicht zur Parameterbestimmung verwendeten) Messwerten von Xia im gesamten untersuchten Zustandsbereich ($40 \leq t/^\circ\text{C} \leq 120$, $m_{\text{NH}_3} < 20$ mol/kg) im Rahmen der experimentellen Unsicherheit der experimentellen Angaben überein.

Die Abbildungen A 3.29 und A 3.30 zeigen (einen Teil der) experimentellen Ergebnisse Jödecke (2003) und Xia (1999) zur Löslichkeit von Kohlendioxid in wässrigen Lösungen von Methanol. Diese Abbildungen sollen (ergänzend zur Abb. 3.13) die Qualität der Korrelation zeigen. Ein detaillierter Vergleich wird von Jödecke (2003) gegeben.

A 4 Vergleich experimenteller und Literaturdaten mit dem UNIQUAC-Modell reagierender Systeme

Die experimentellen Ergebnisse von Göppert (1985), Kurz (1995) und Müller (1983) für das Phasengleichgewicht bei der Lösung von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser werden in den Abbildungen A 4.1 bis A 4.31 mit Ergebnissen der Korrelation von Lichtfers (2000) bzw. der Korrelation mit dem Elektrolyt-UNIQUAC-Modell verglichen.

Die Druckverläufe im System Kohlendioxid + Ammoniak + Methanol + Wasser bei Temperaturen von 40, 80 und 120 °C werden in den Abbildungen A 4.32 bis A 4.60 gezeigt. In den Diagrammen sind die Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen der vorliegenden Arbeit der Korrelation mit dem UNIQUAC-Modell gegenübergestellt.

A 5 Vergleich experimenteller und Literaturdaten mit dem Pitzer-Modell

Die Abbildungen A 5.1 bis A 5.10 zeigen Vorhersagen mit dem Pitzer-Modell für die Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol sowie für die Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol mit bzw. ohne Natriumsulfat bei 40, 80 und 120 °C im Vergleich mit den experimentellen Werten aus der vorliegenden Arbeit.

Die Abbildungen A 5.11 bis A 5.15 zeigen einen Vergleich von Ergebnissen der Korrelation mit dem Pitzer-Modell für die Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Phenol bei 40, 80 und 120 °C und den der Korrelation zugrunde liegenden experimentellen Messwerten der vorliegenden Arbeit.

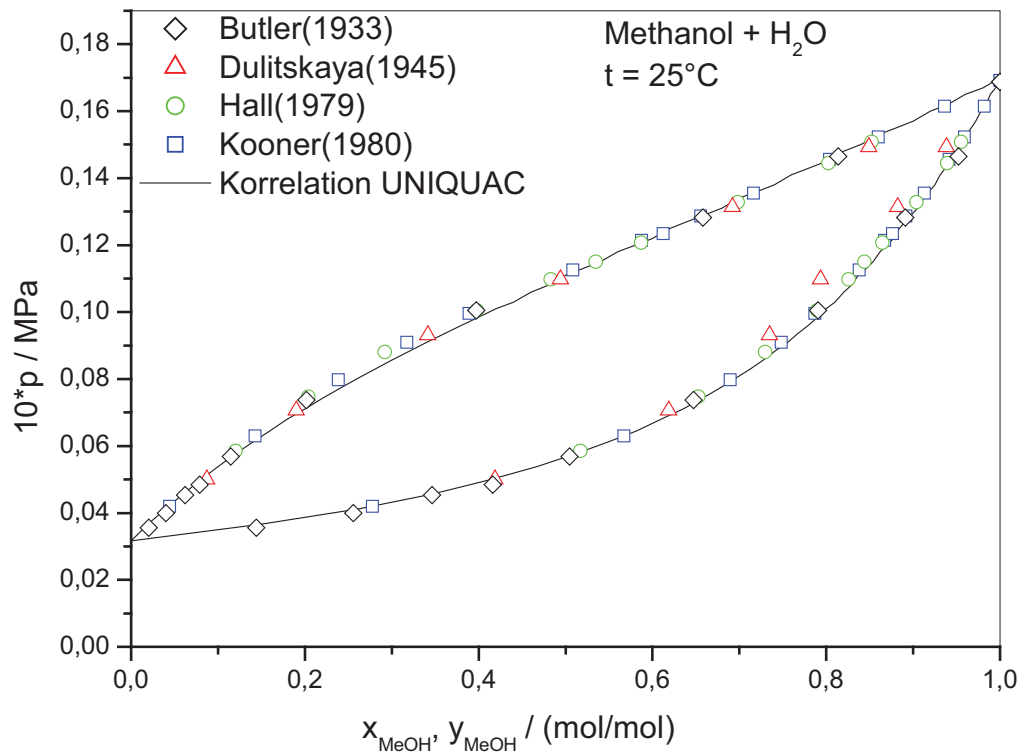


Abb. A 3.1: Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht des Systems Methanol + Wasser bei 25 °C; Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

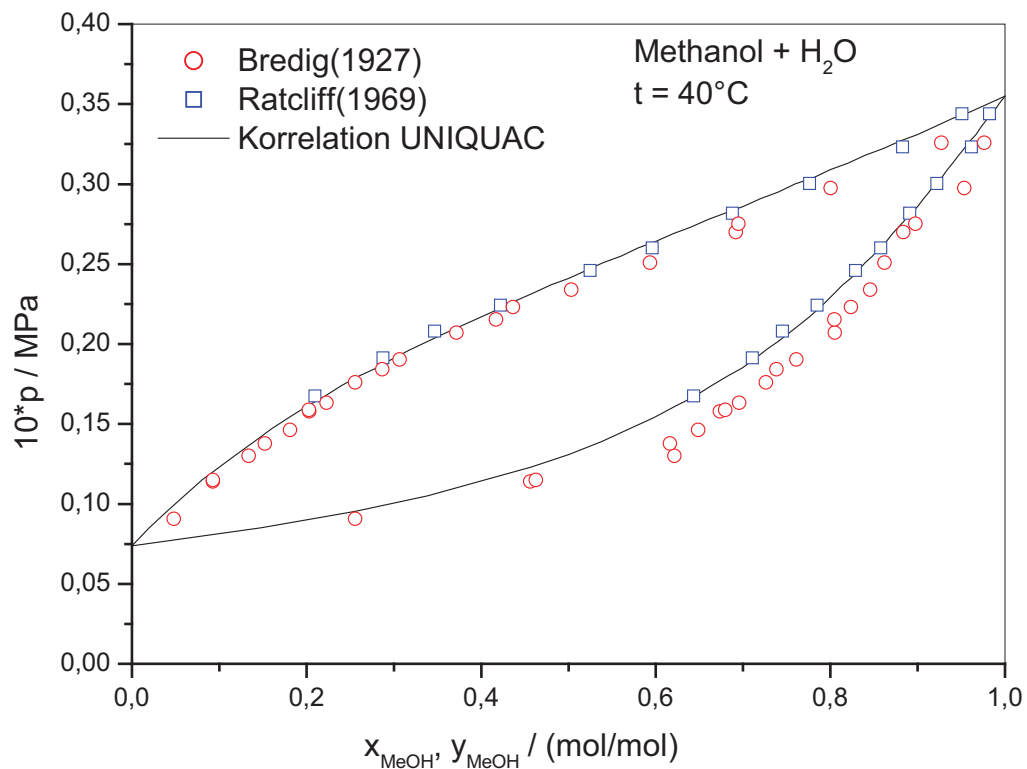


Abb. A 3.2: Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht des Systems Methanol + Wasser bei 40 °C; Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

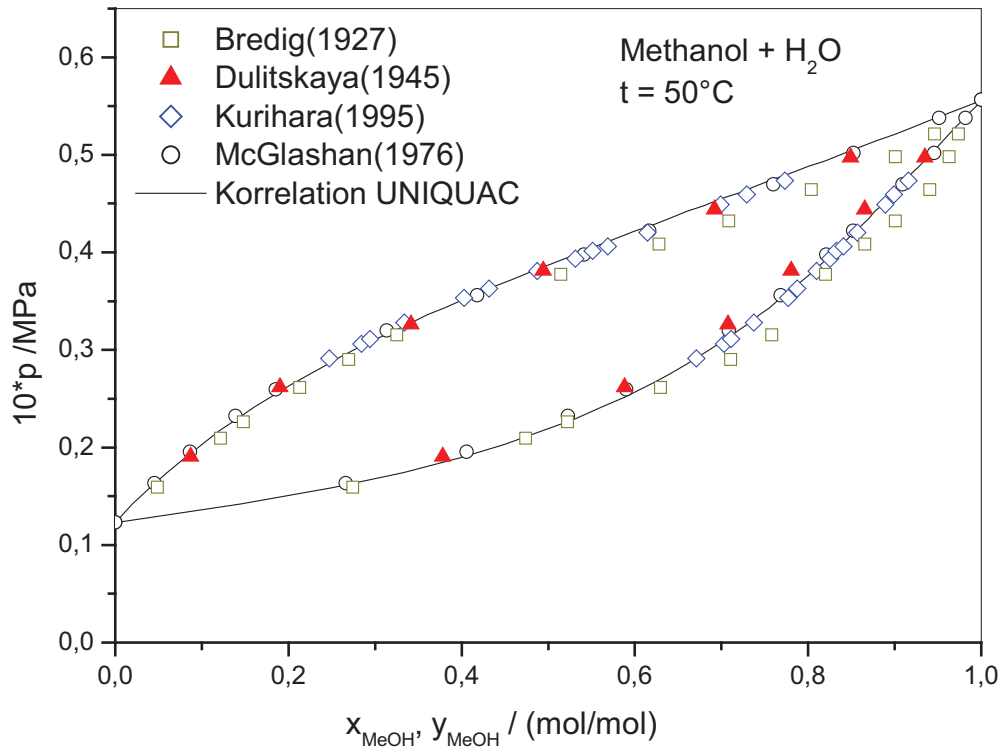


Abb. A 3.3: Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht des Systems Methanol + Wasser bei 50 °C; Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

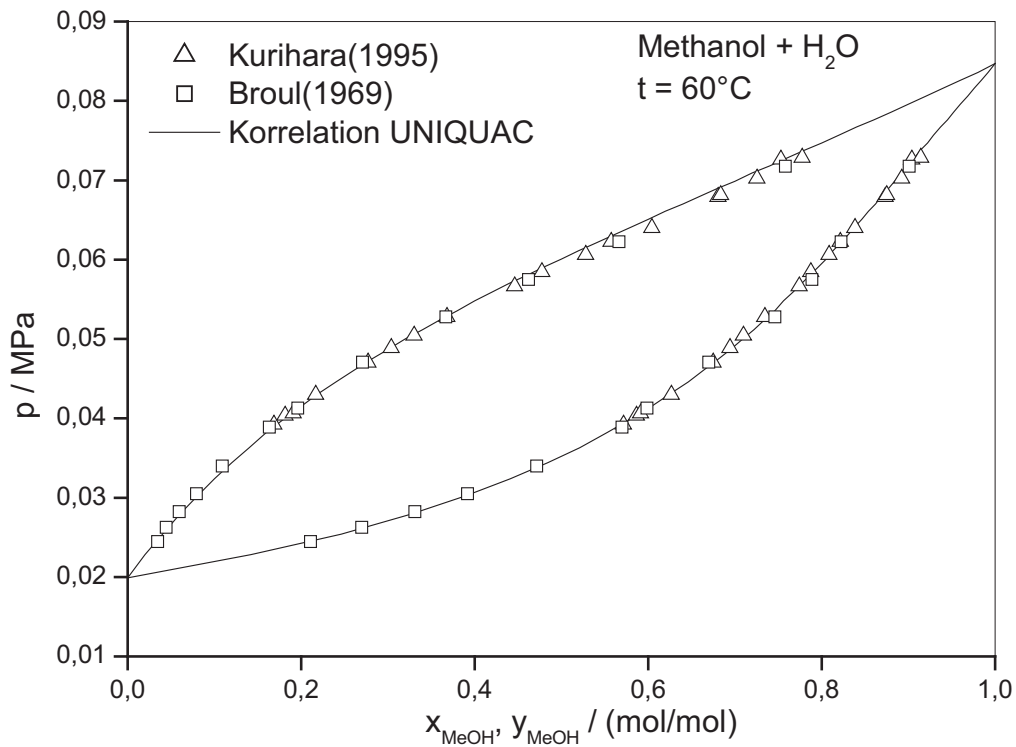


Abb. A 3.4: Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht des Systems Methanol + Wasser bei 60 °C; Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

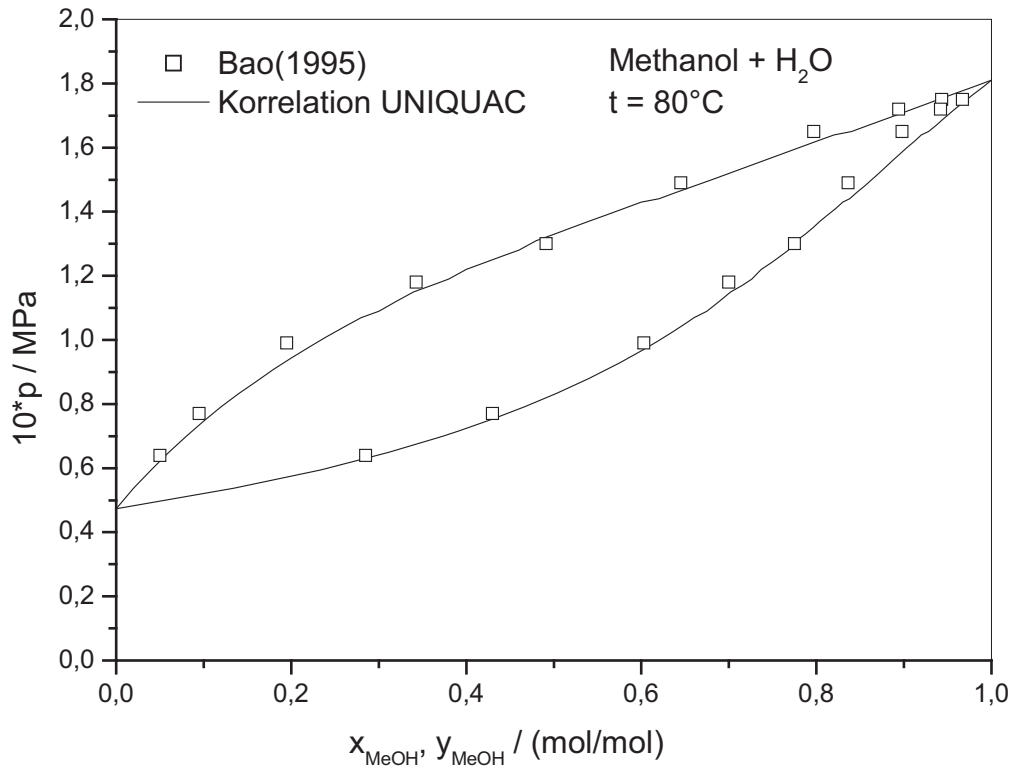


Abb. A 3.5: Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht des Systems Methanol + Wasser bei 80 °C; Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

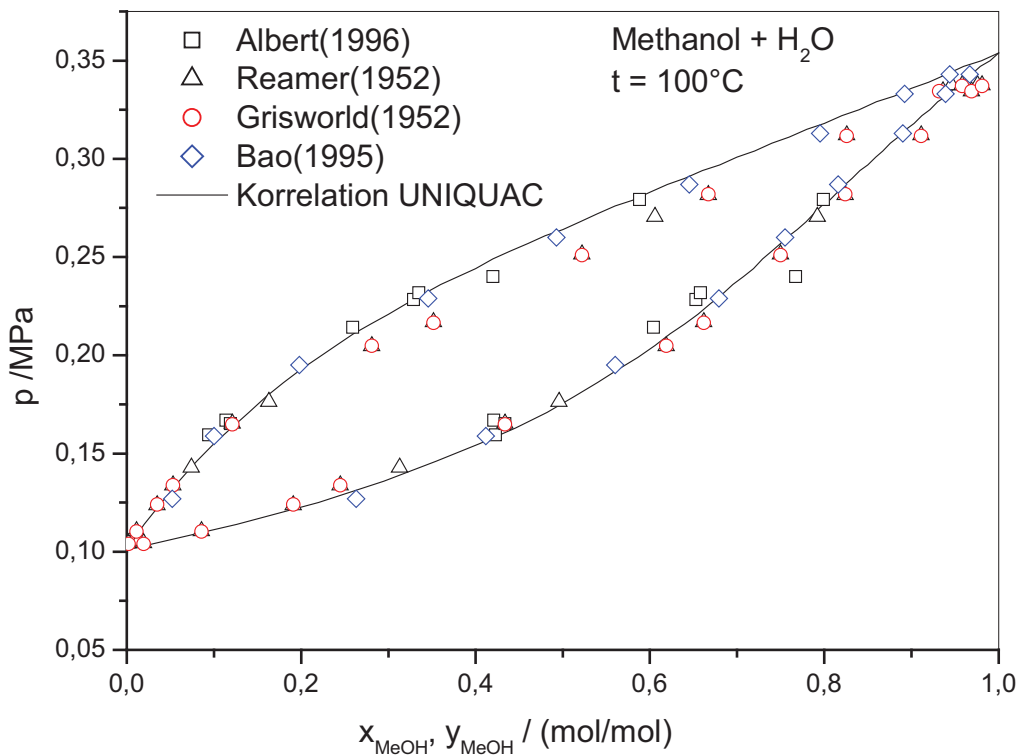


Abb. A 3.6: Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht des Systems Methanol + Wasser bei 100 °C; Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

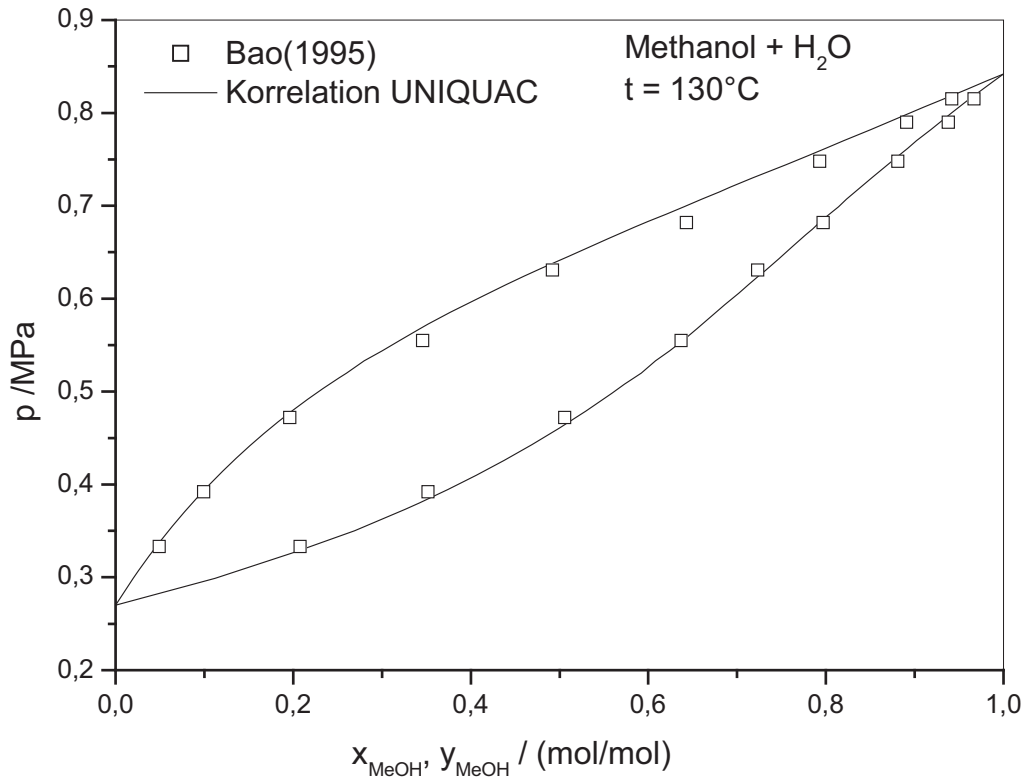


Abb. A 3.7: Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht des Systems Methanol + Wasser bei 130 °C; Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

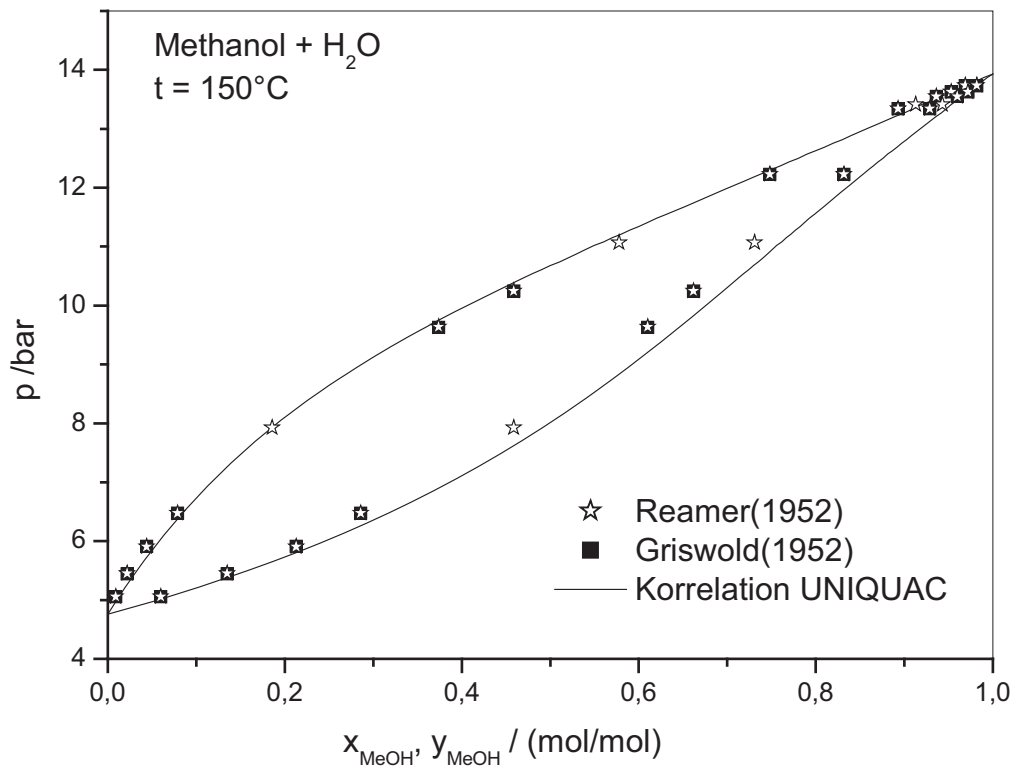


Abb. A 3.8: Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht des Systems Methanol + Wasser bei 150 °C; Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

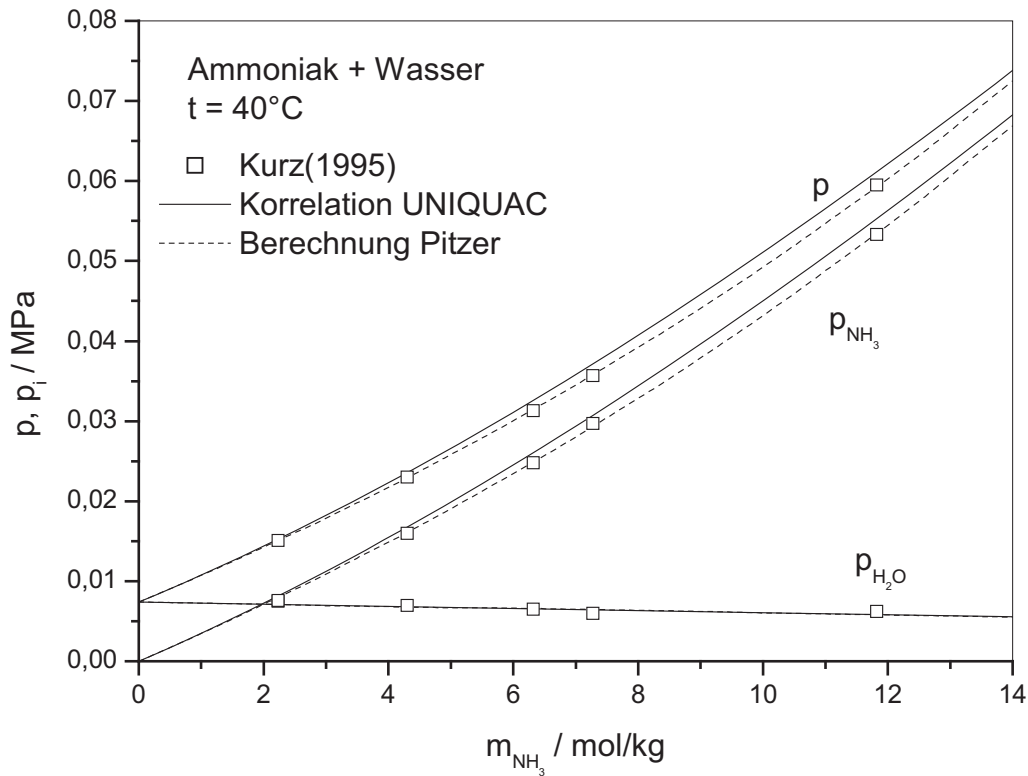


Abb. A 3.9: Löslichkeit von Ammoniak in Wasser bei 40 °C: Vergleich experimenteller Daten (Kurz (1995)) mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells und des Pitzer-Modells nach Rumpf et al. (1993)

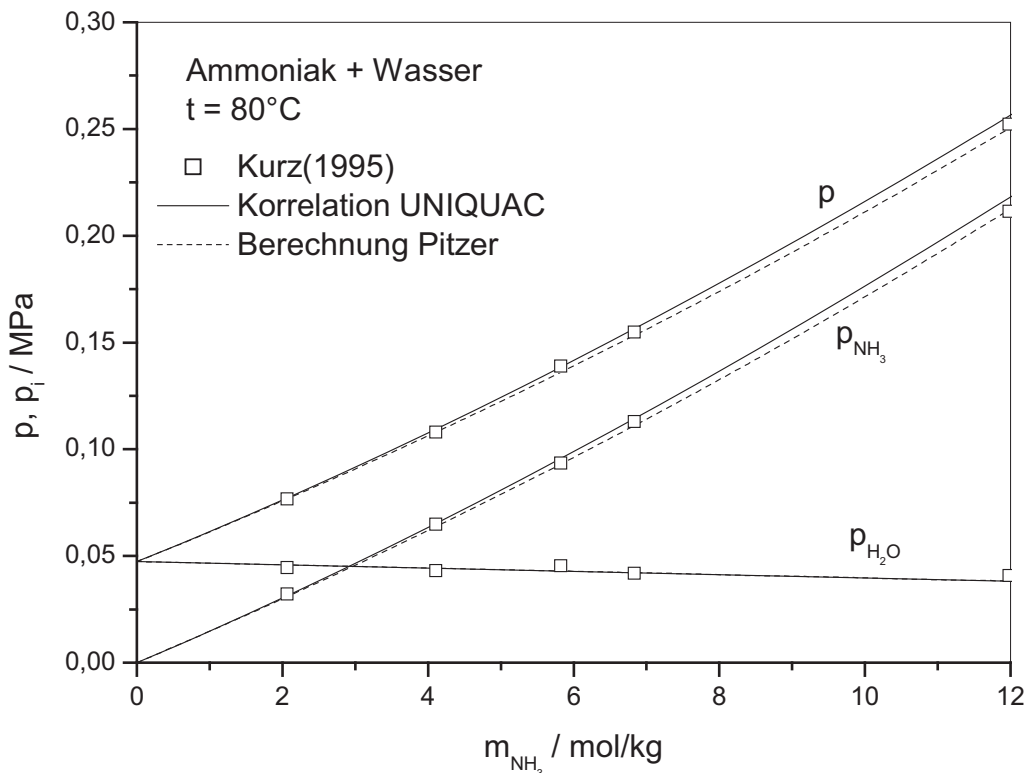


Abb. A 3.10: Löslichkeit von Ammoniak in Wasser bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten (Kurz (1995)) mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells und des Pitzer-Modells nach Rumpf et al. (1993)

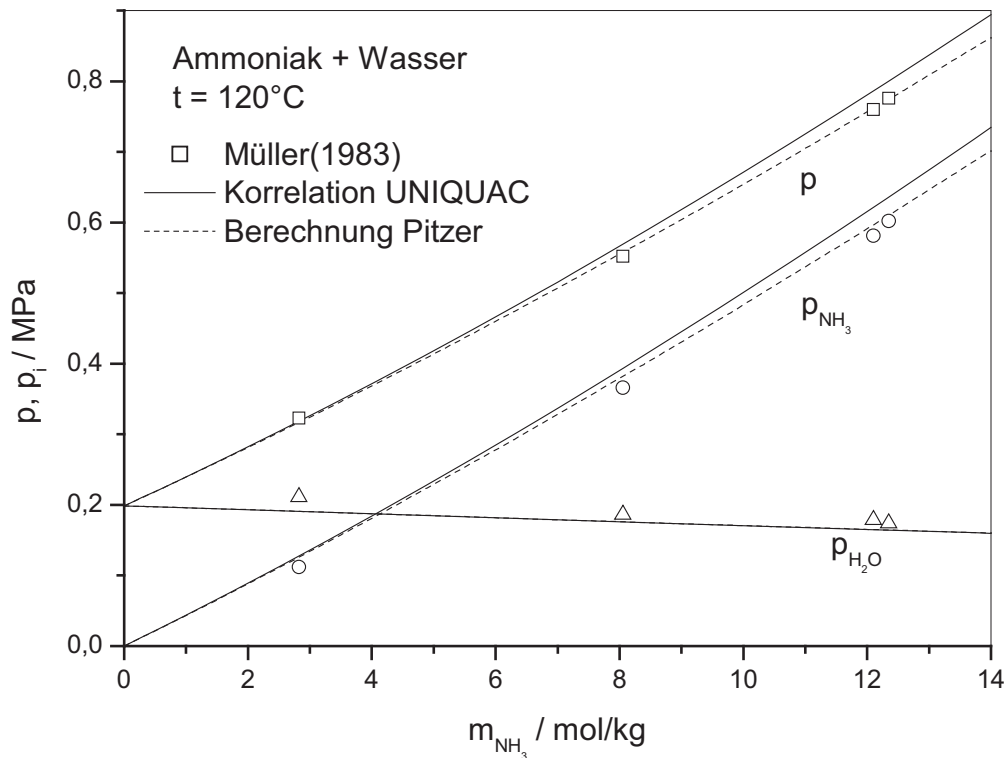


Abb. A 3.11: Löslichkeit von Ammoniak in Wasser bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten (Kurz (1995)) mit Rechenwerten unter Verwendung des UNQUAC-Modells und des Pitzer-Modells nach Rumpf et al. (1993)

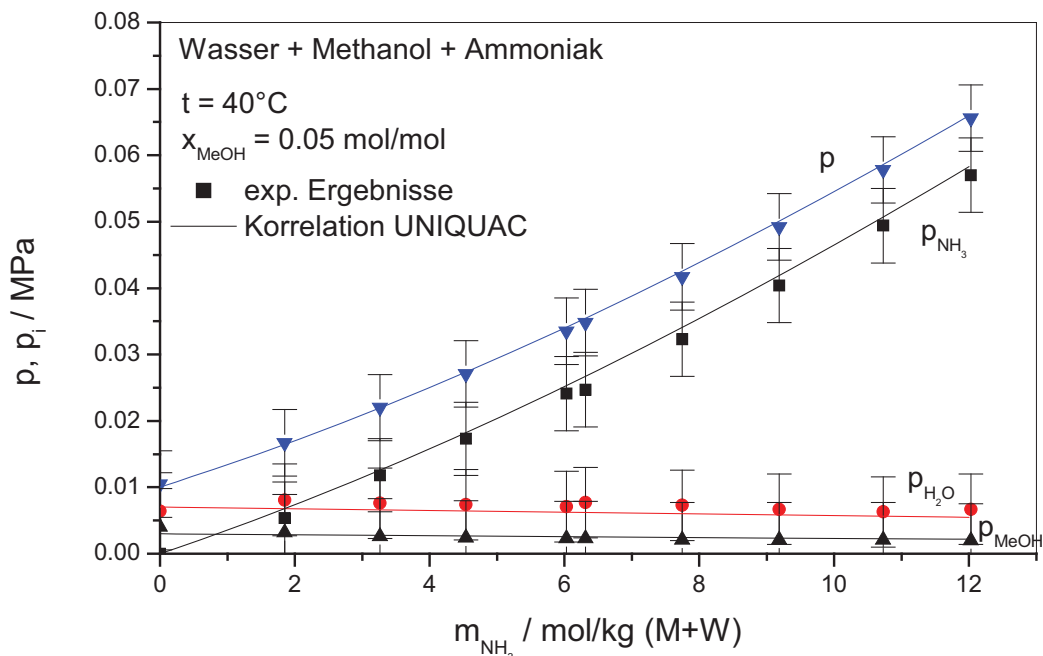


Abb. A 3.12: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 40 °C: Vergleich experimenteller Daten der vorliegenden Arbeit mit Rechenwerten unter Verwendung des UNQUAC-Modells

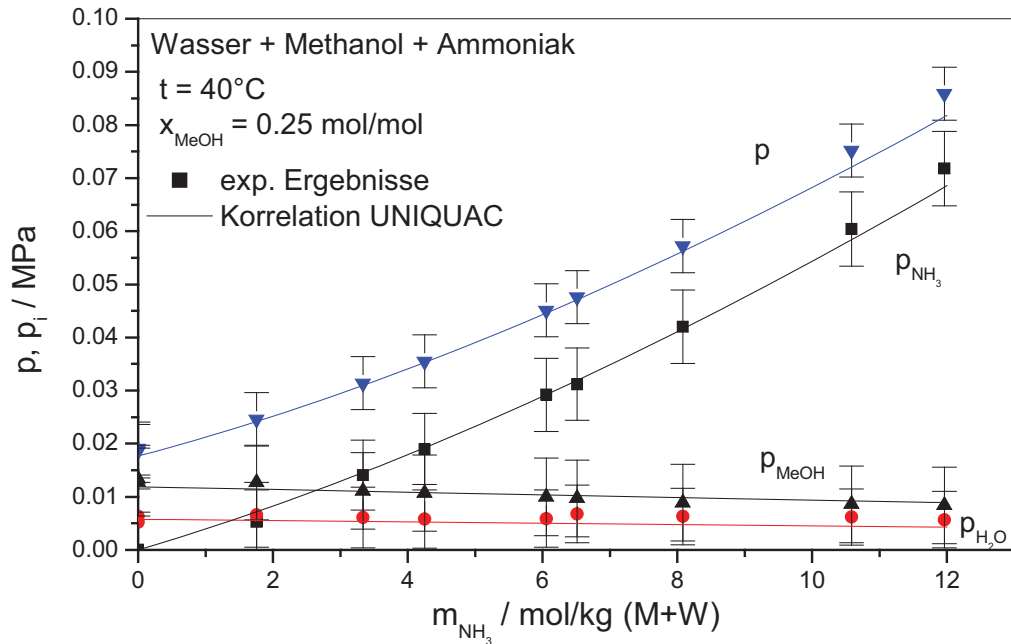


Abb. A 3.13: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 40 °C: Vergleich experimenteller Daten der vorliegenden Arbeit mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

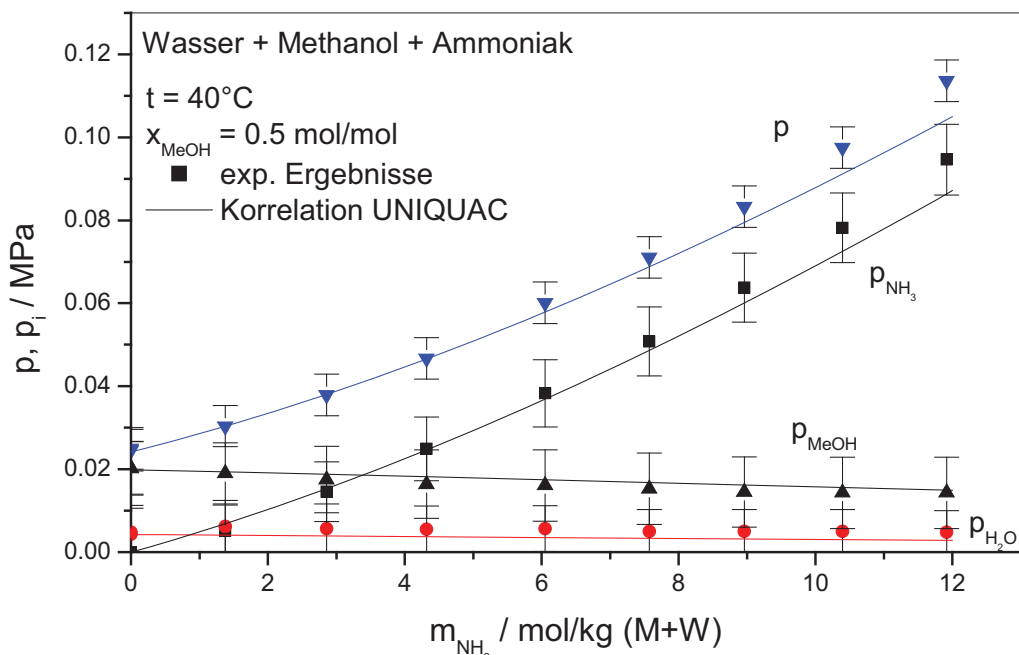


Abb. A 3.14: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 40 °C: Vergleich experimenteller Daten der vorliegenden Arbeit mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

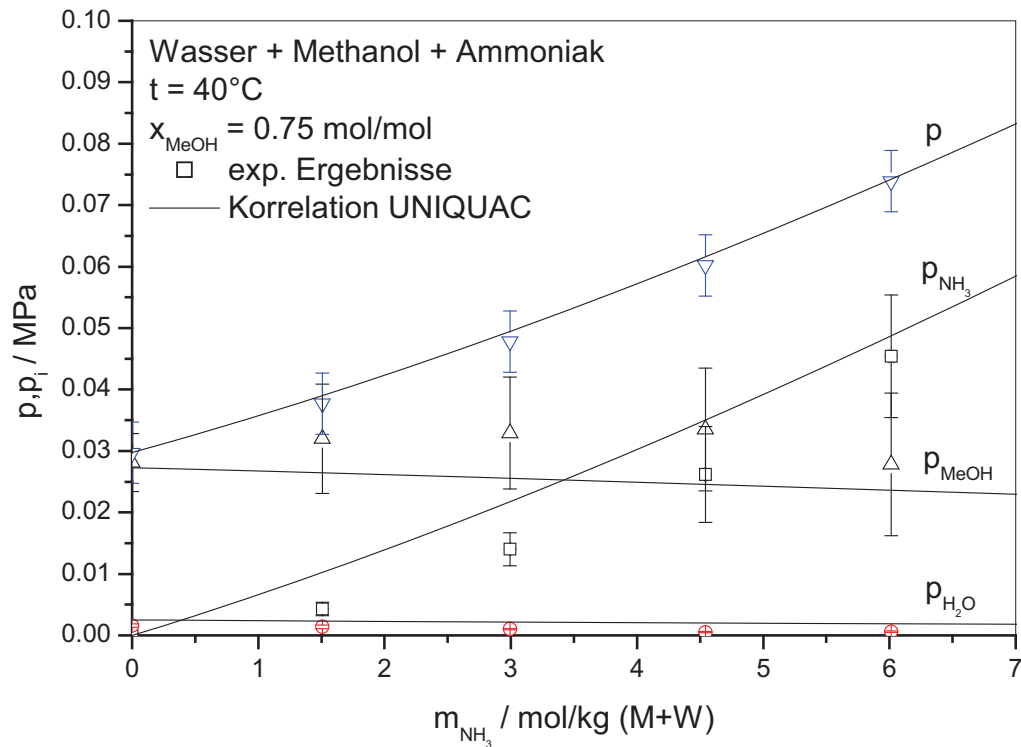


Abb. A 3.15: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 40 °C: Vergleich experimenteller Daten der vorliegenden Arbeit mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

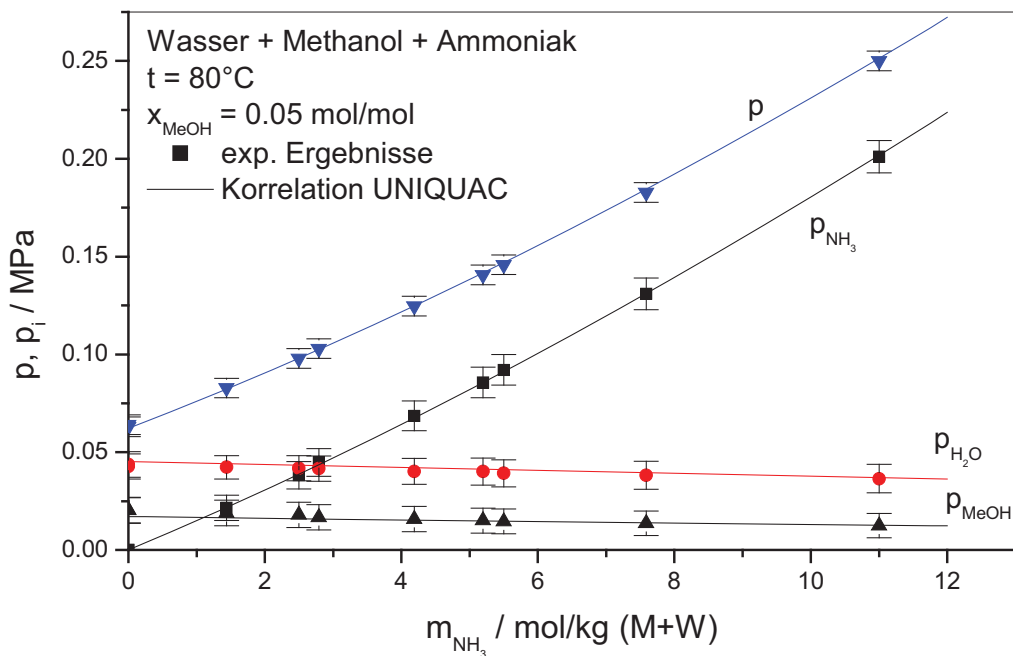


Abb. A 3.16: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten der vorliegenden Arbeit mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

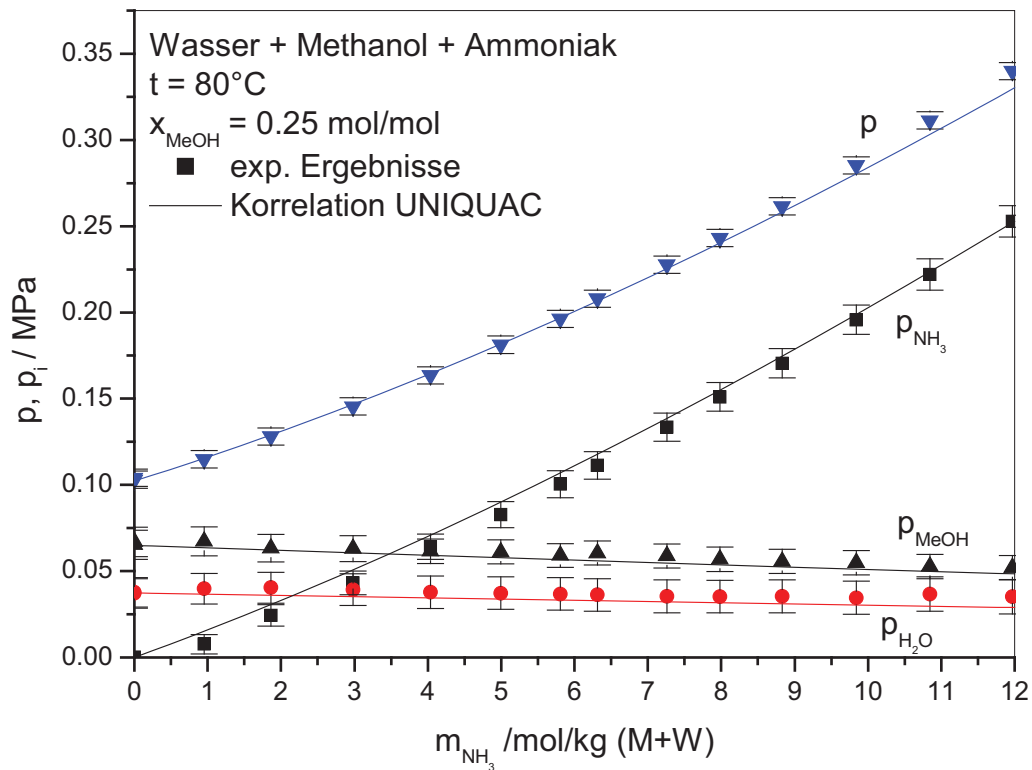


Abb. A 3.17: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 80°C : Vergleich experimenteller Daten der vorliegenden Arbeit mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

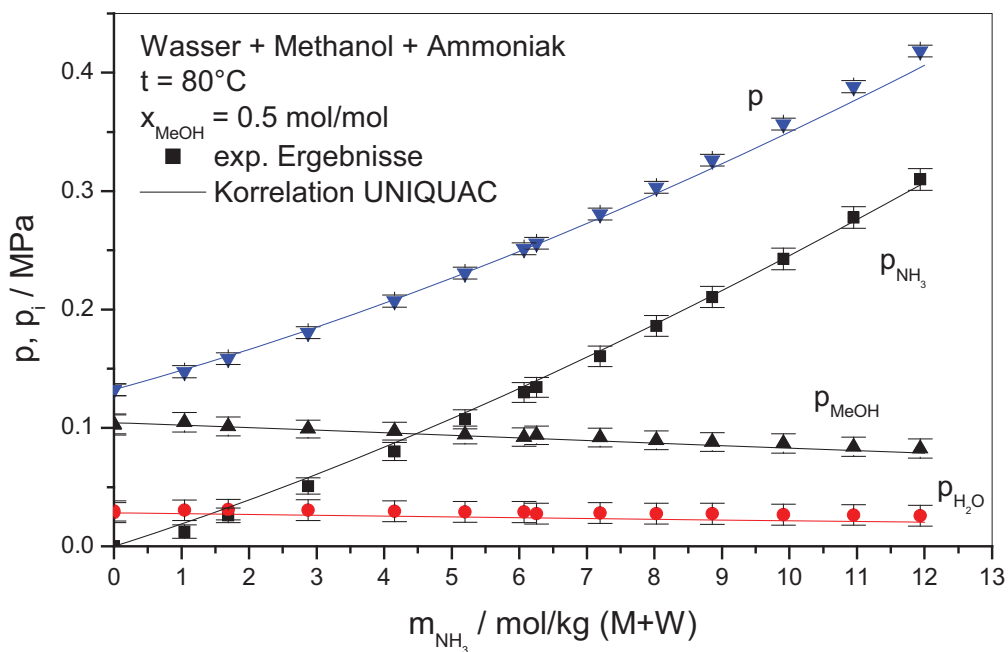


Abb. A 3.18: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 80°C : Vergleich experimenteller Daten der vorliegenden Arbeit mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

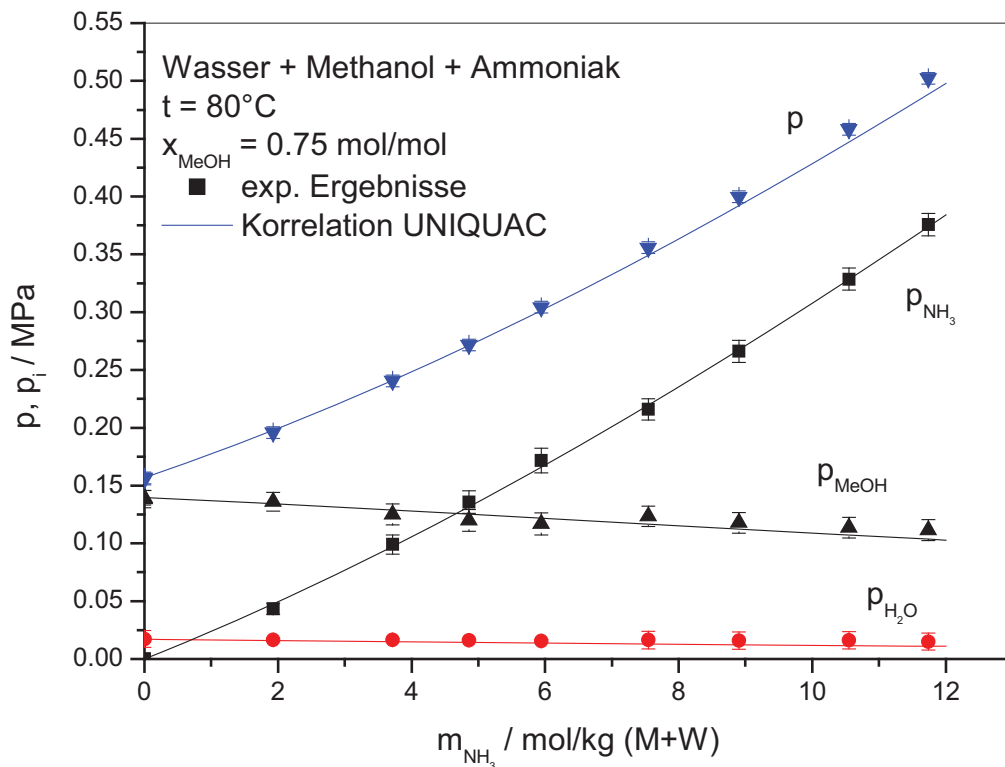


Abb. A 3.19: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 80°C : Vergleich experimenteller Daten der vorliegenden Arbeit mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

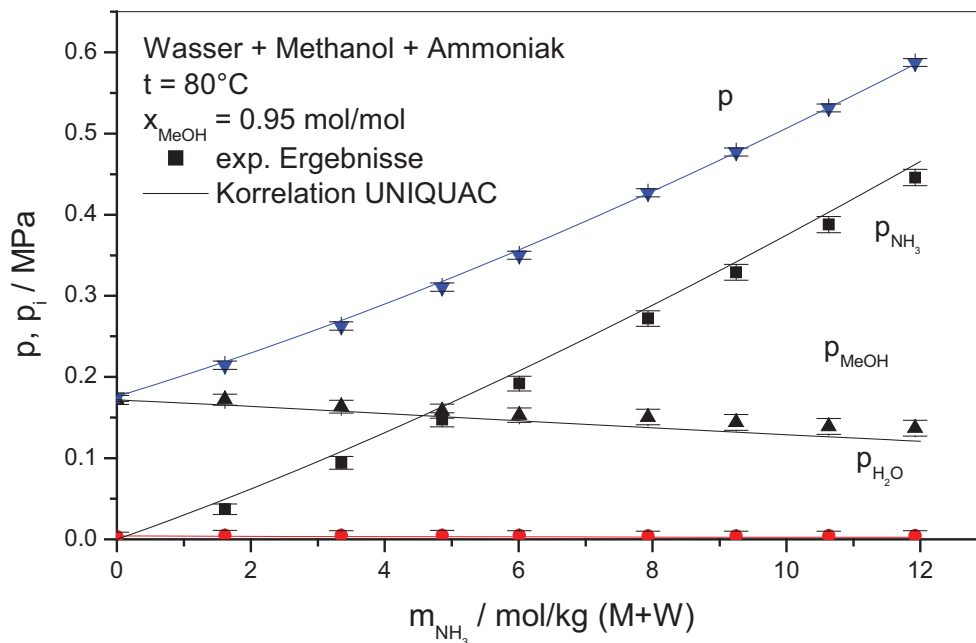


Abb. A 3.20: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 80°C : Vergleich experimenteller Daten der vorliegenden Arbeit mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

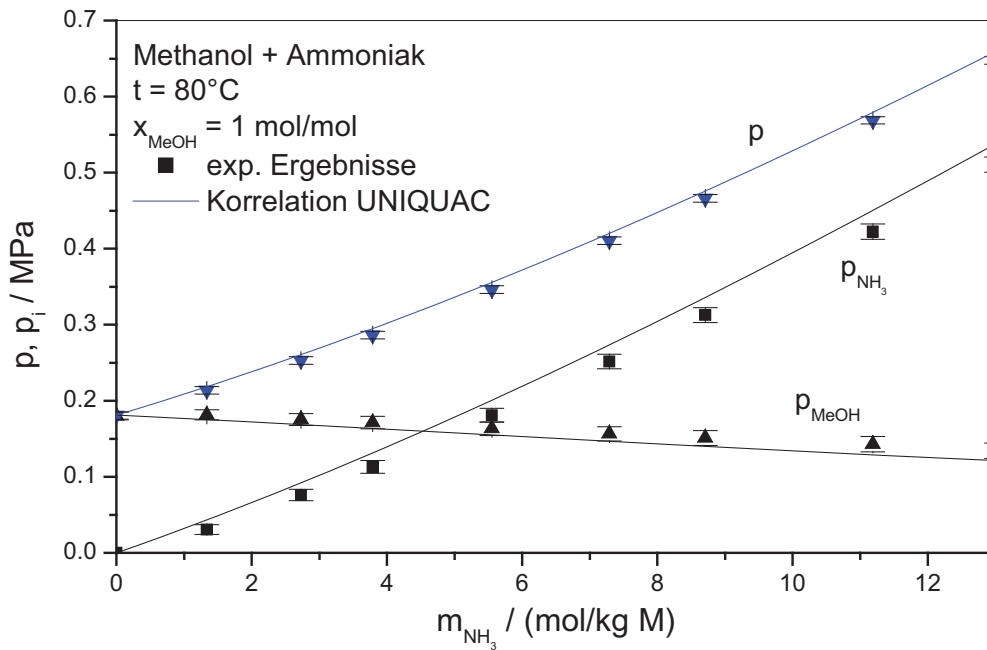


Abb. A 3.21: Löslichkeit von Ammoniak in Methanol bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten der vorliegenden Arbeit mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

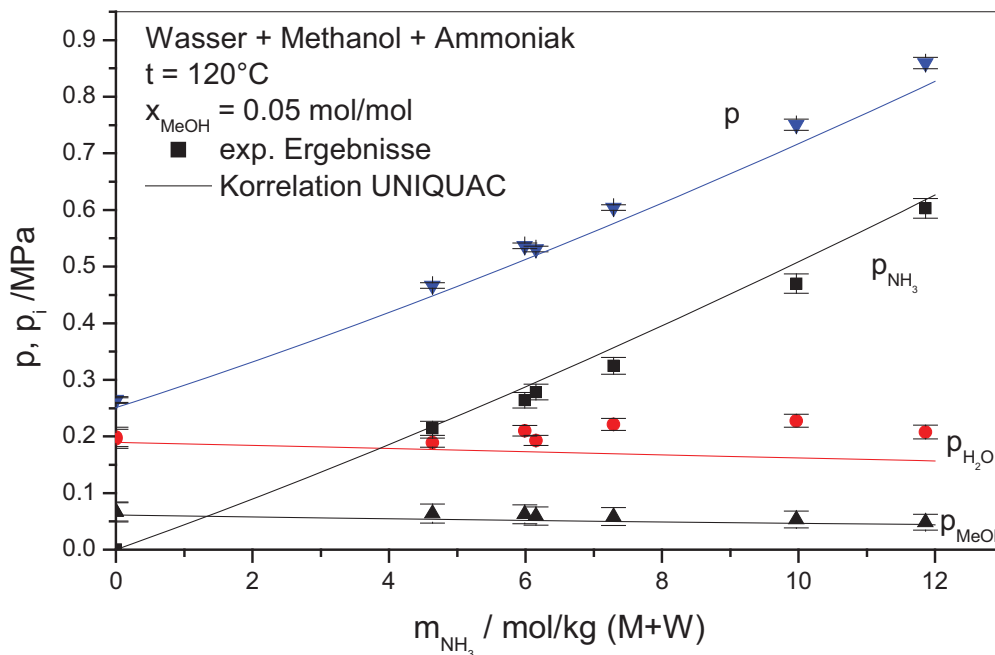


Abb. A 3.22: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten der vorliegenden Arbeit mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

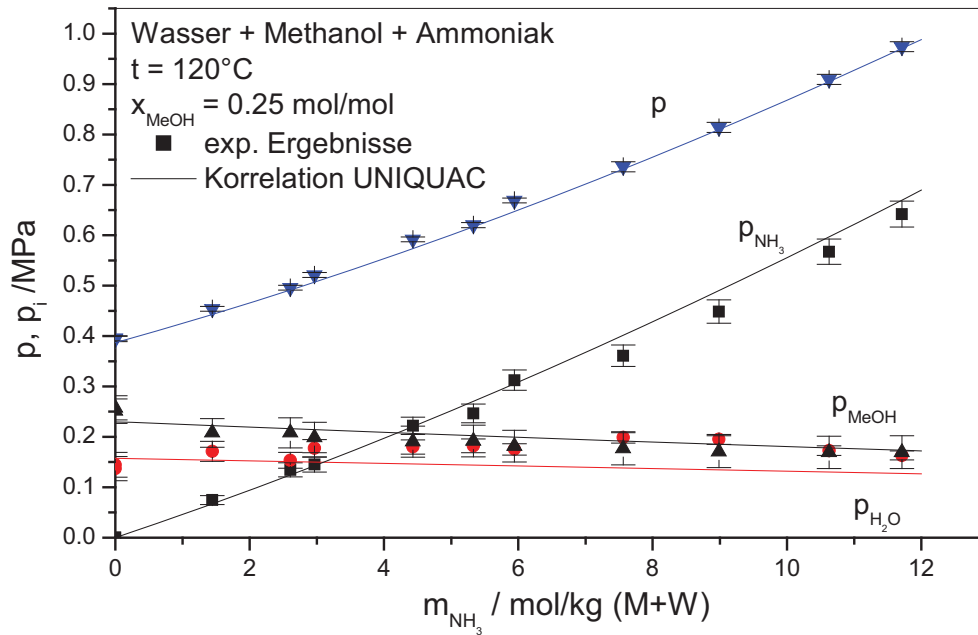


Abb. A 3.23: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten der vorliegenden Arbeit mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

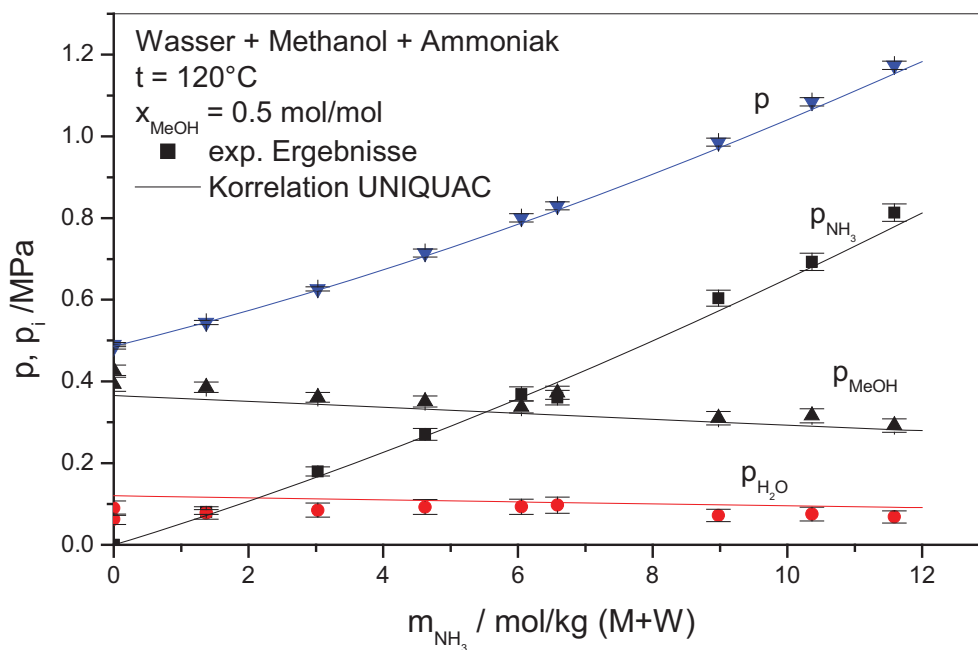


Abb. A 3.24: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten der vorliegenden Arbeit mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

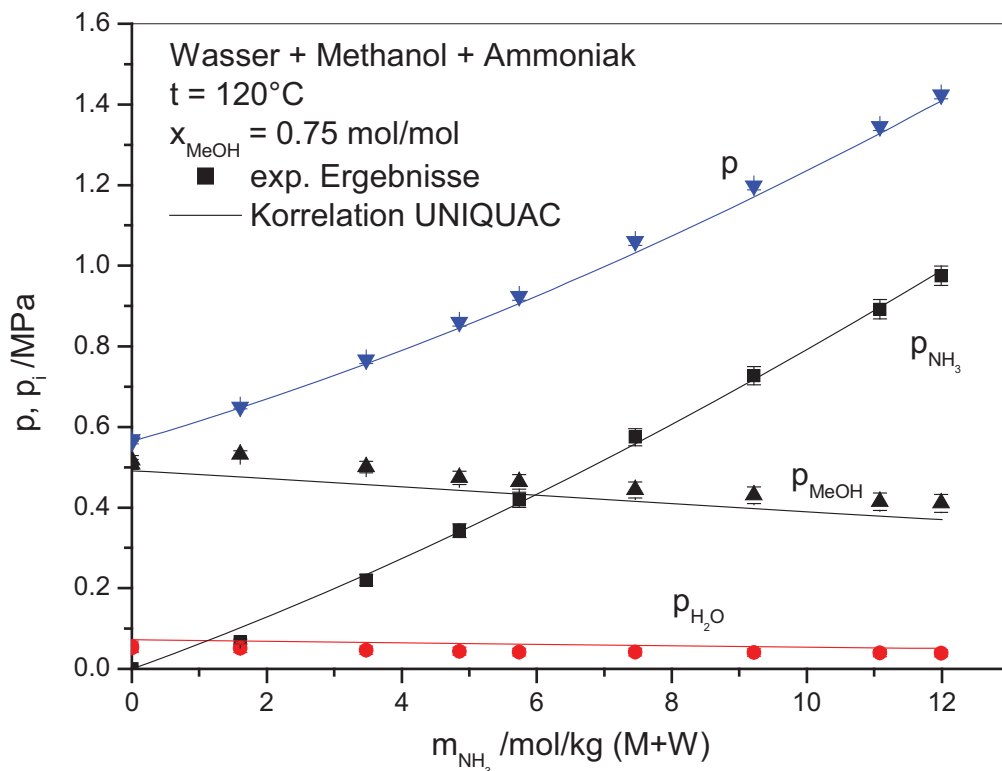


Abb. A 3.25: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 120°C : Vergleich experimenteller Daten der vorliegenden Arbeit mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

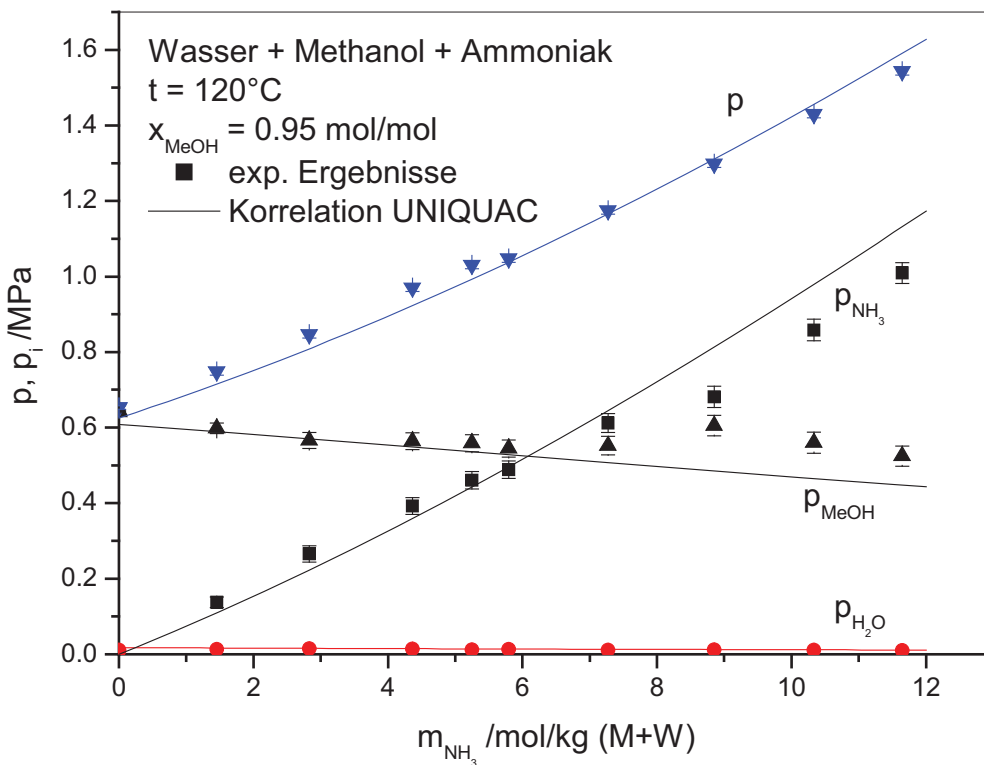


Abb. A 3.26: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 120°C : Vergleich experimenteller Daten der vorliegenden Arbeit mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

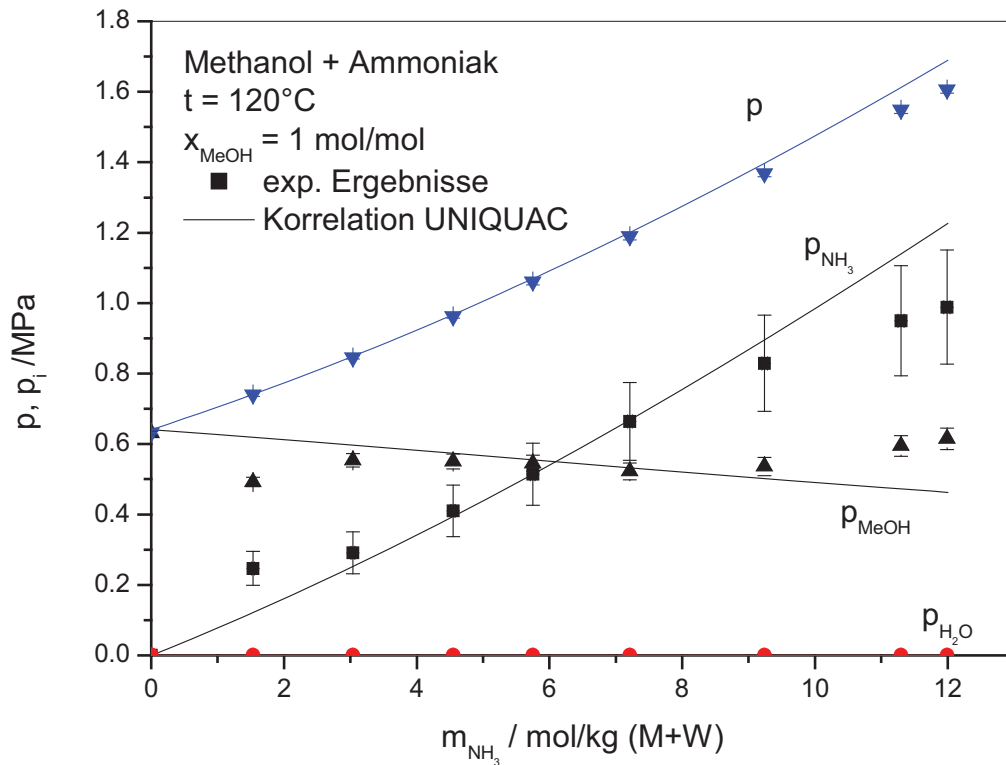


Abb. A 3.27: Löslichkeit von Ammoniak in Methanol bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten der vorliegenden Arbeit mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

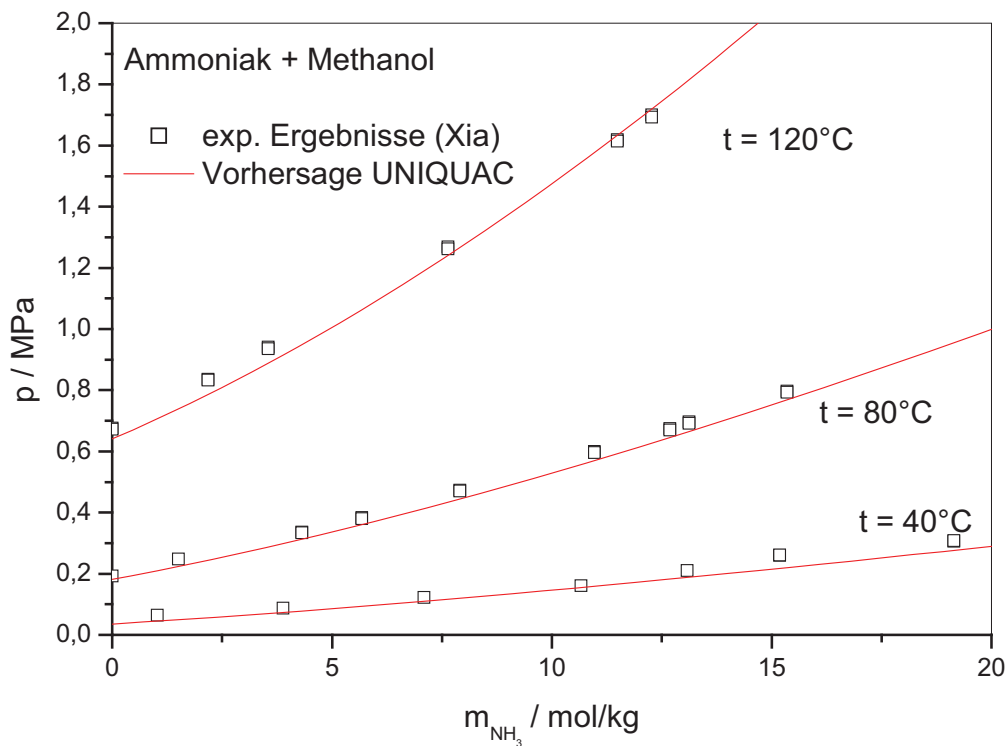


Abb. A 3.28: Löslichkeit von Ammoniak in Methanol: Vergleich experimenteller Daten Xia (1999) mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

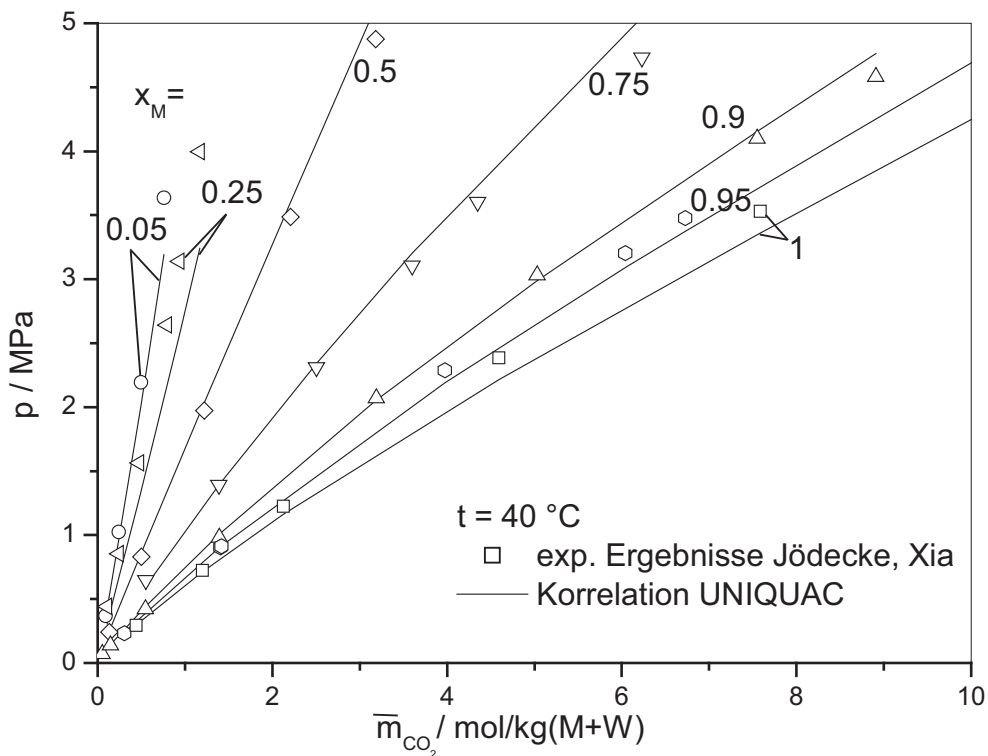


Abb. A 3.29: Löslichkeit von Kohlendioxid in wässrigen Lösungen von Methanol bei $40 \text{ }^\circ\text{C}$: Vergleich experimenteller Daten (Jödecke (2003), Xia (1999)) mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

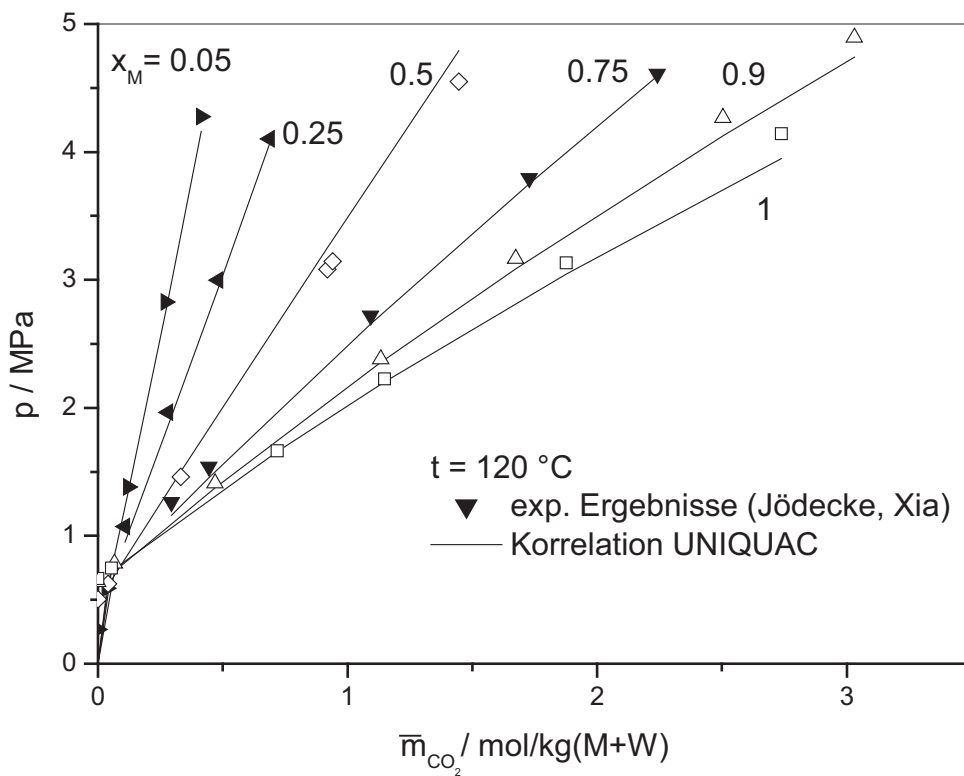


Abb. A 3.30: Löslichkeit von Kohlendioxid in wässrigen Lösungen von Methanol bei $120 \text{ }^\circ\text{C}$: Vergleich experimenteller Daten (Jödecke (2003), Xia (1999)) mit Rechenwerten unter Verwendung des UNIQUAC-Modells

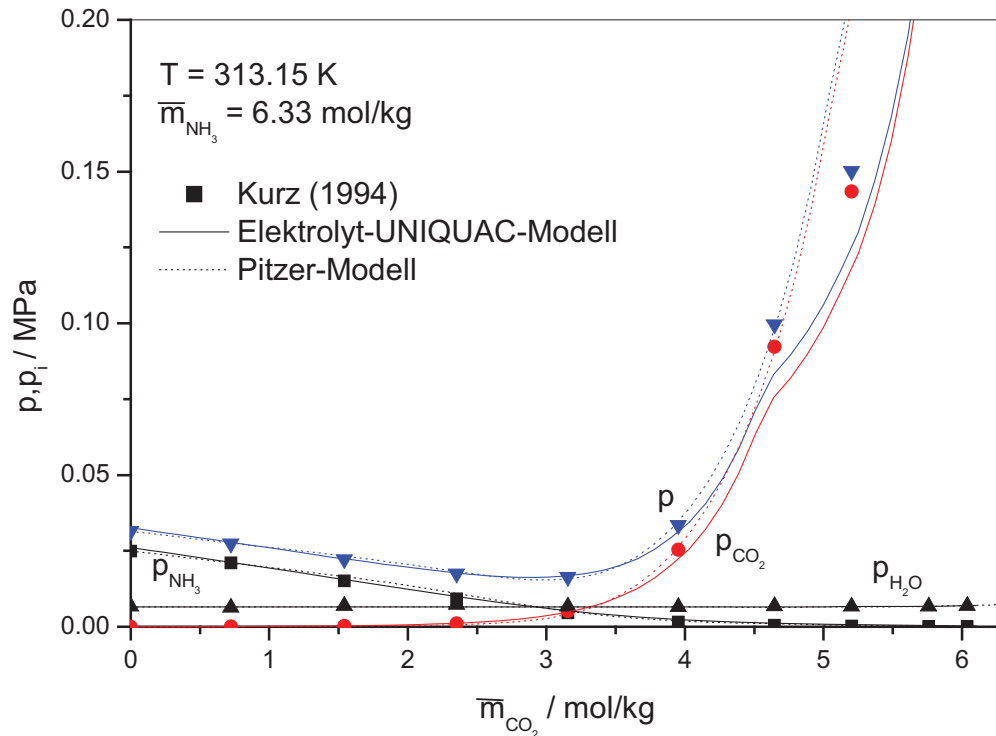


Abb. A 4.1: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 40 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

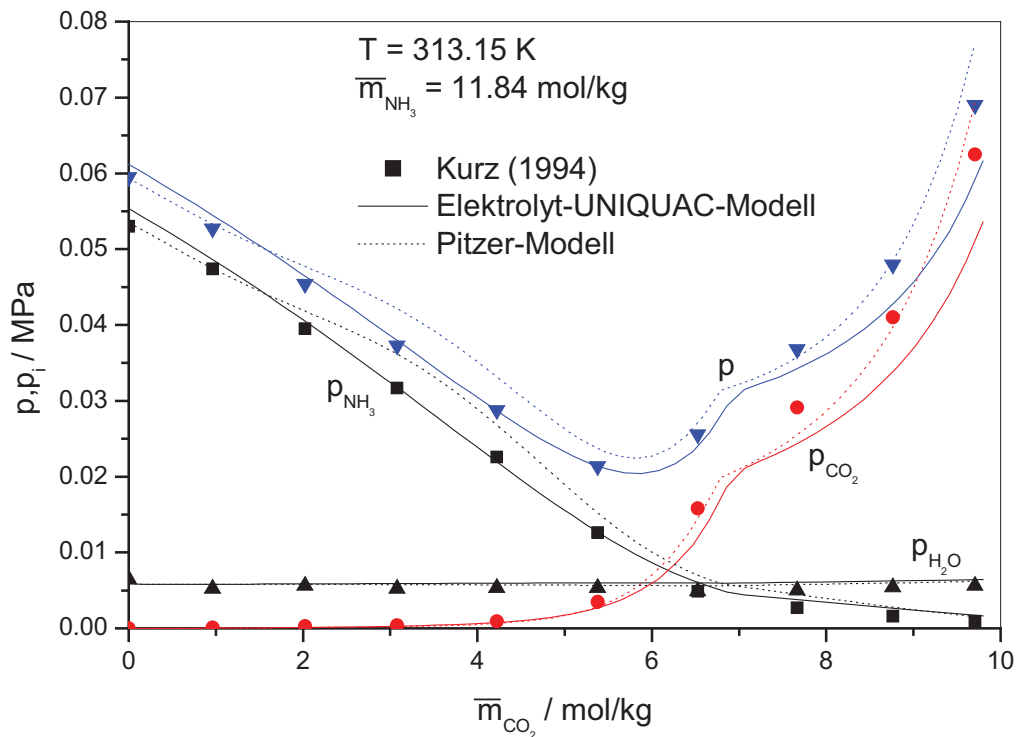


Abb. A 4.2: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 40 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

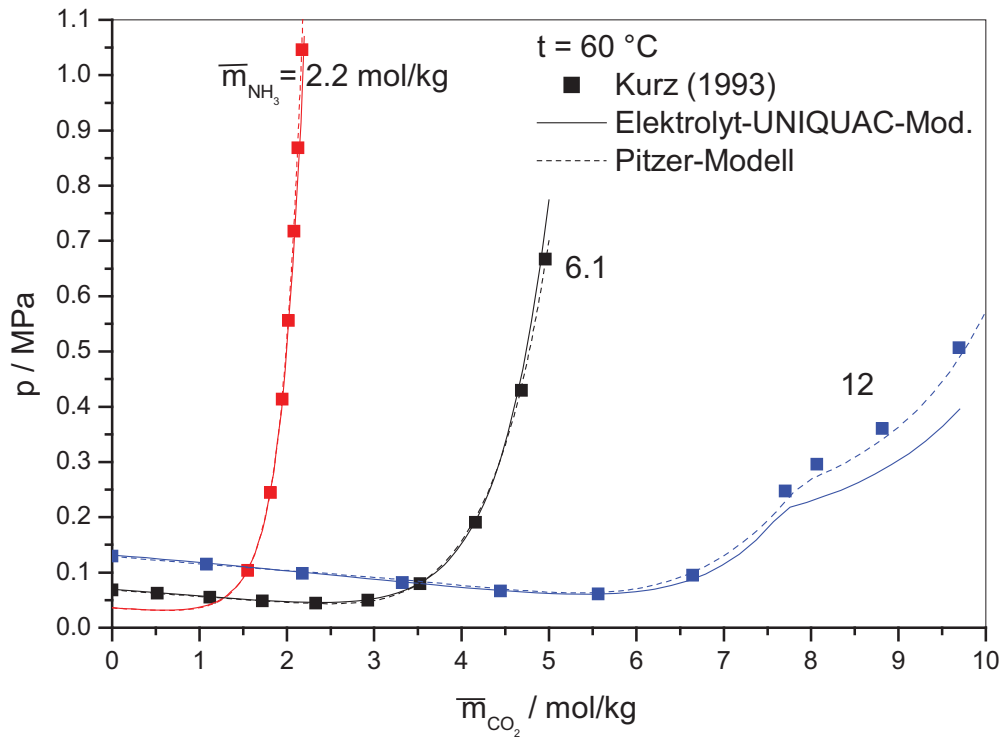


Abb. A 4.3: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 40 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

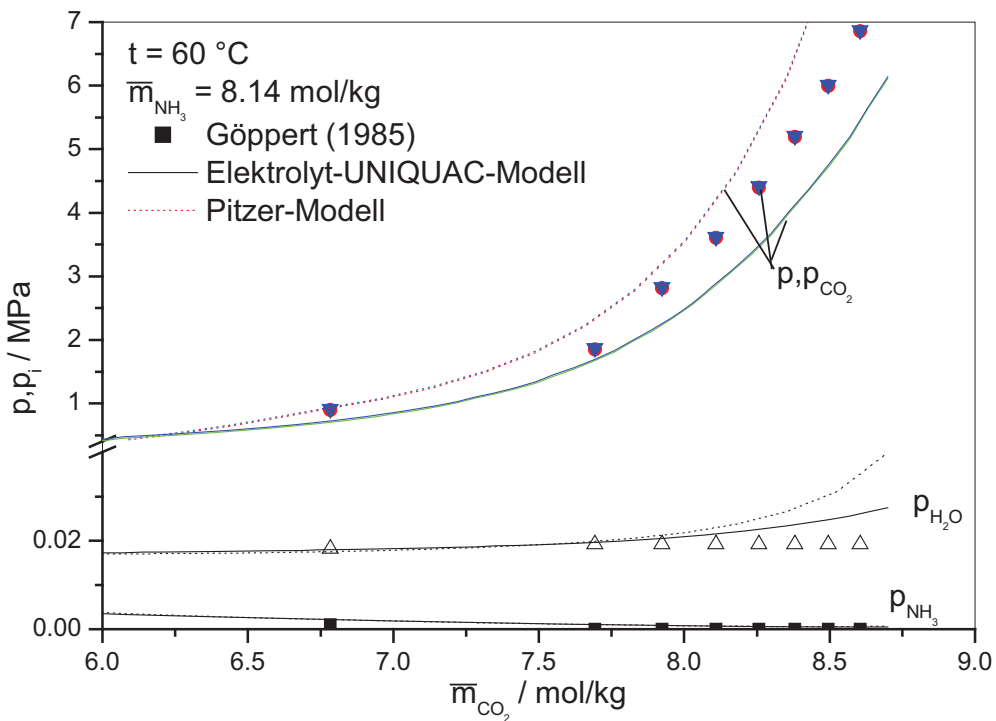


Abb. A 4.4: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 60 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

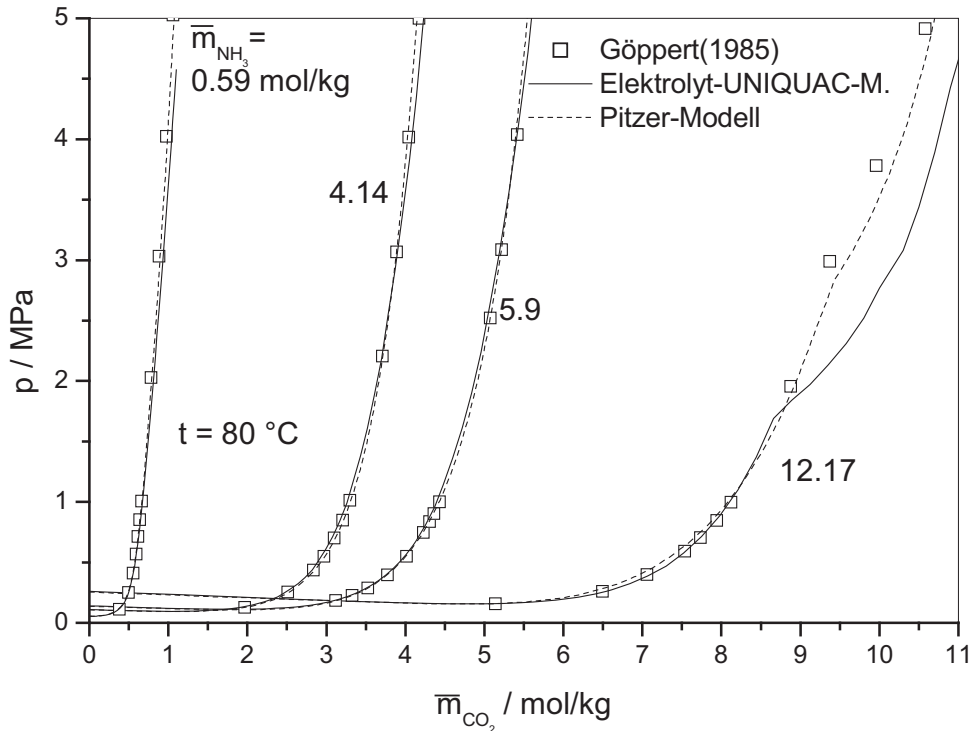


Abb. A 4.5: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

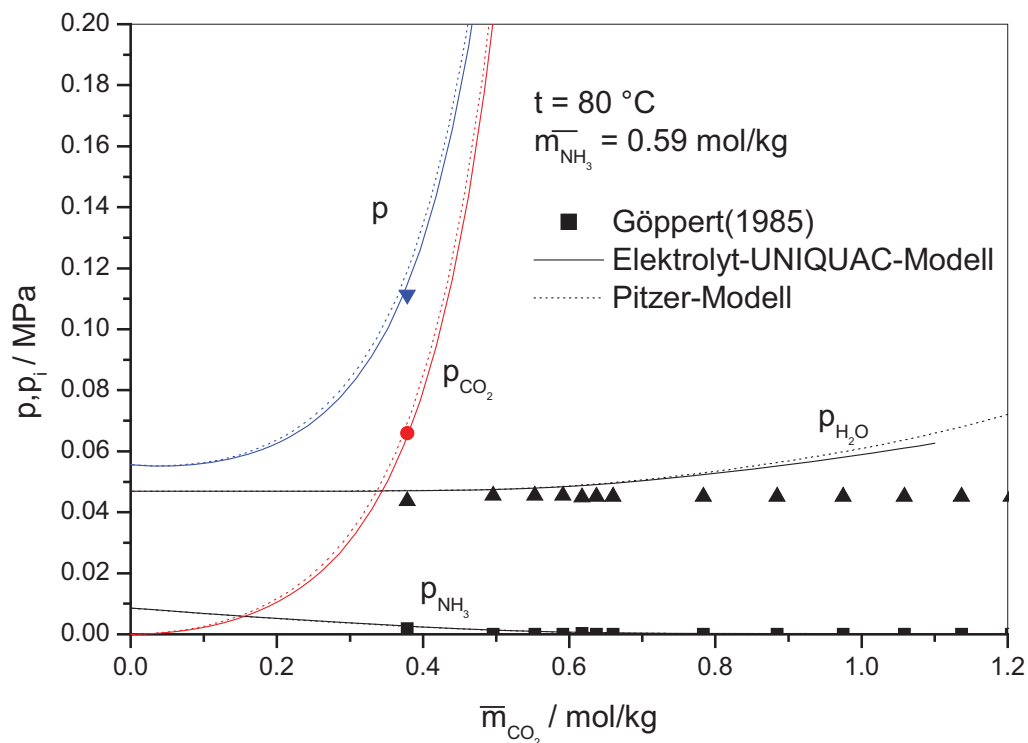


Abb. A 4.6: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

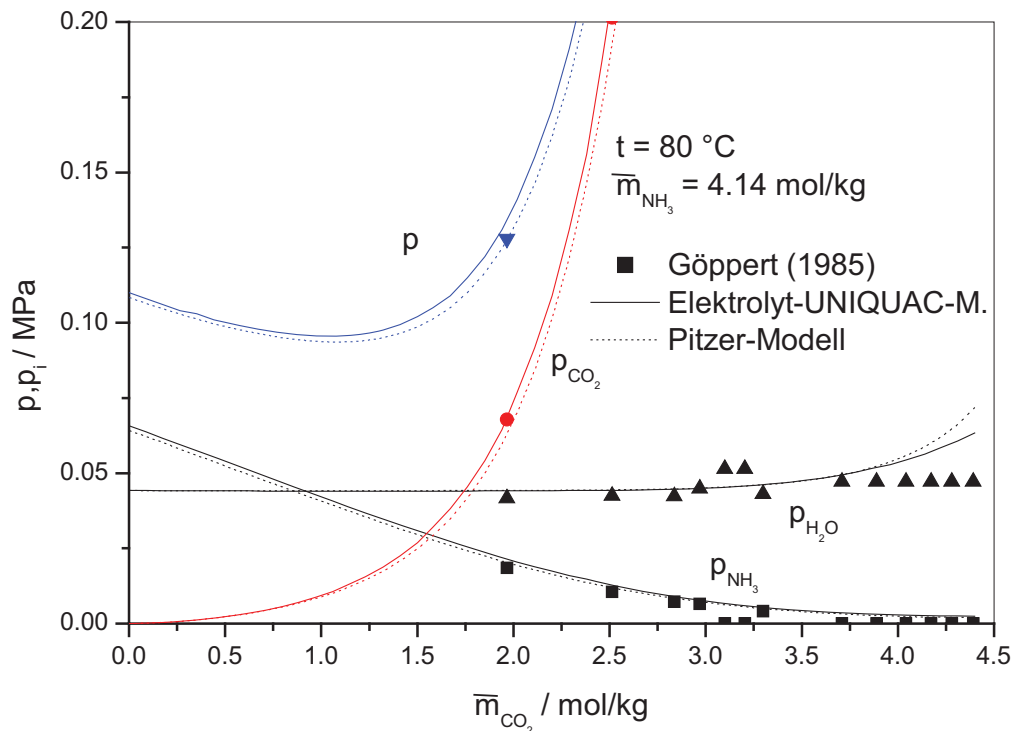


Abb. A 4.7: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

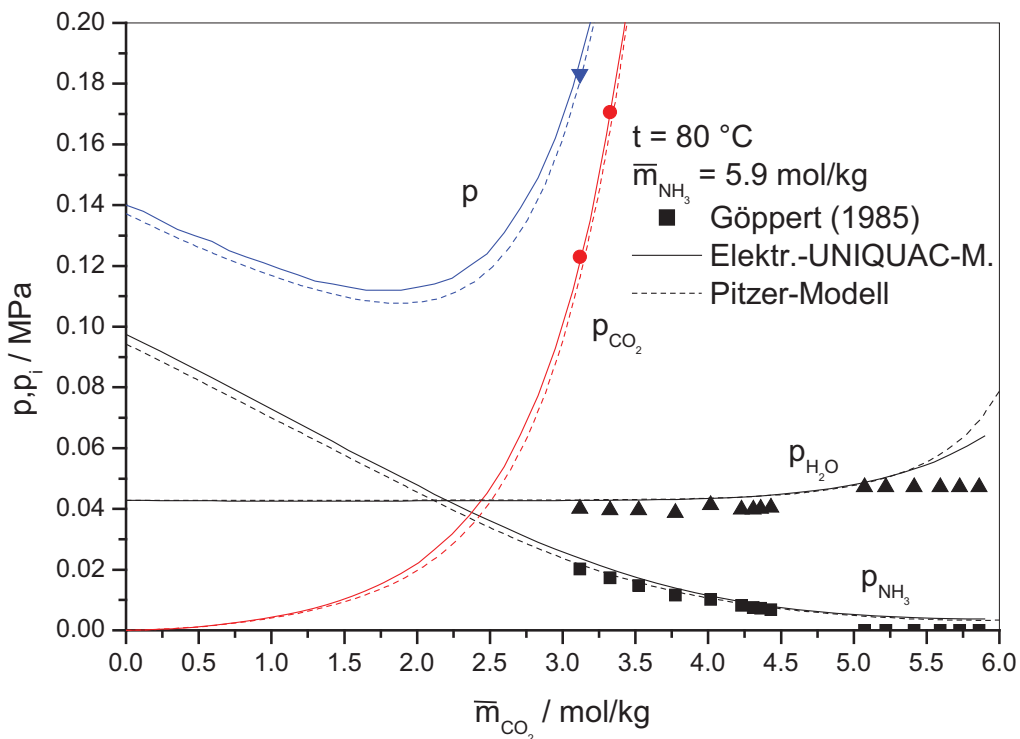


Abb. A 4.8: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

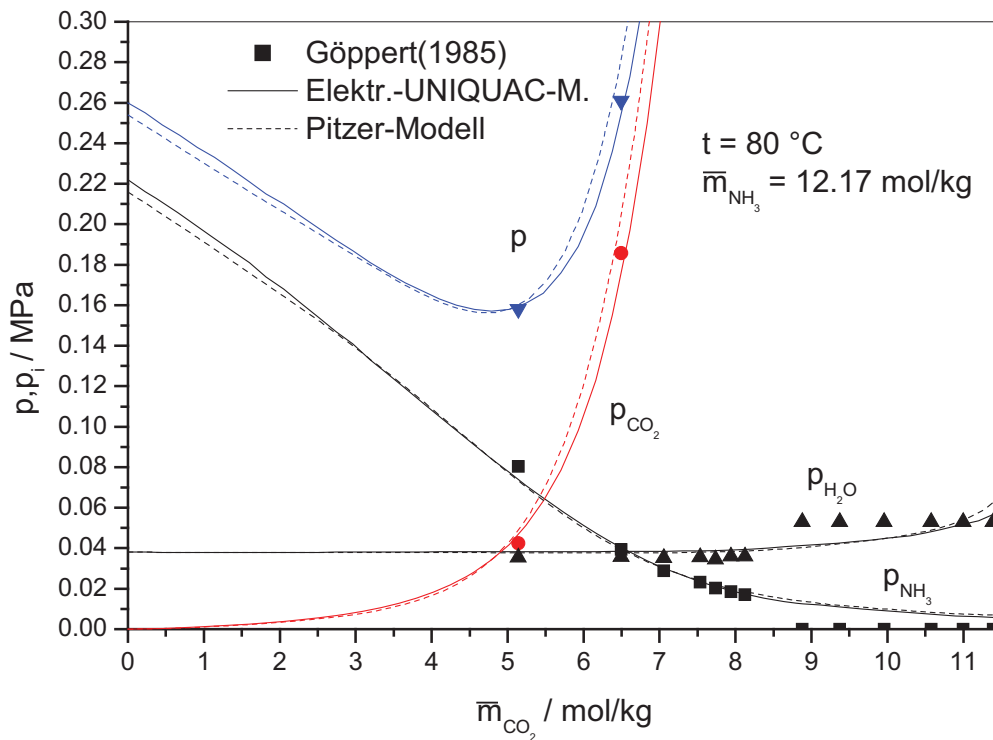


Abb. A 4.9: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

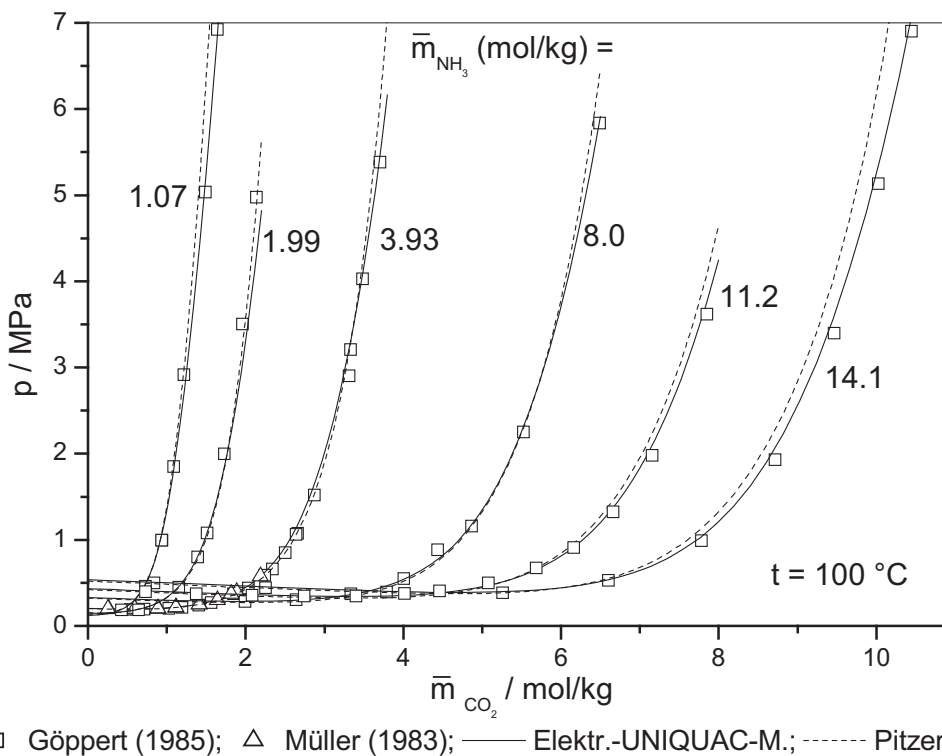


Abb. A 4.10: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 100 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

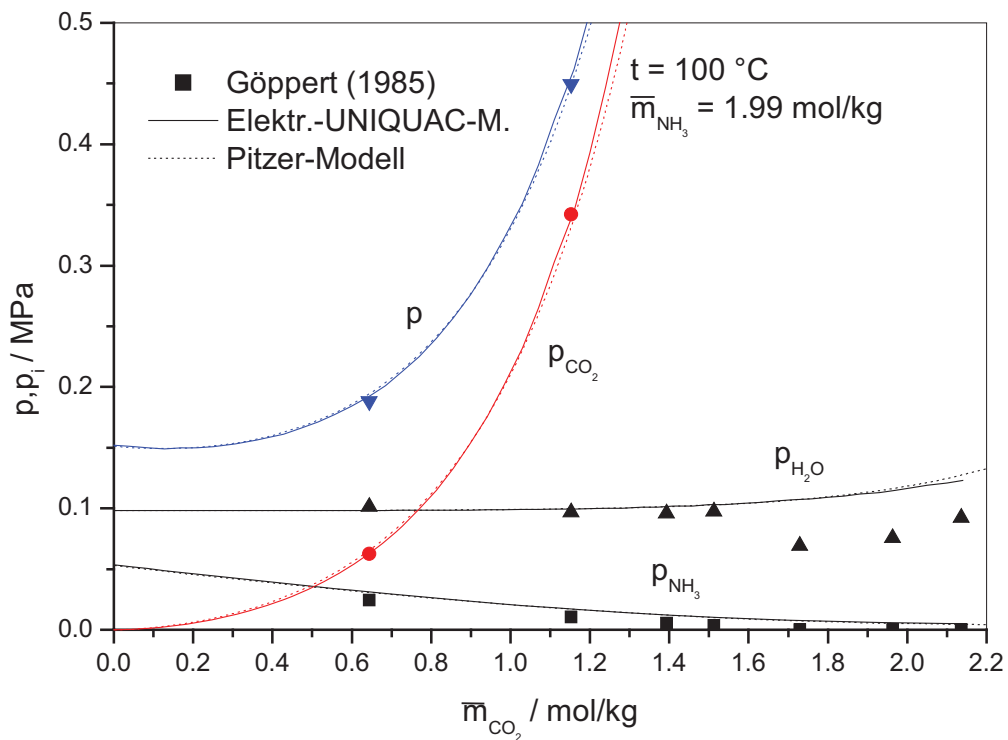


Abb. A 4.11: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 100 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

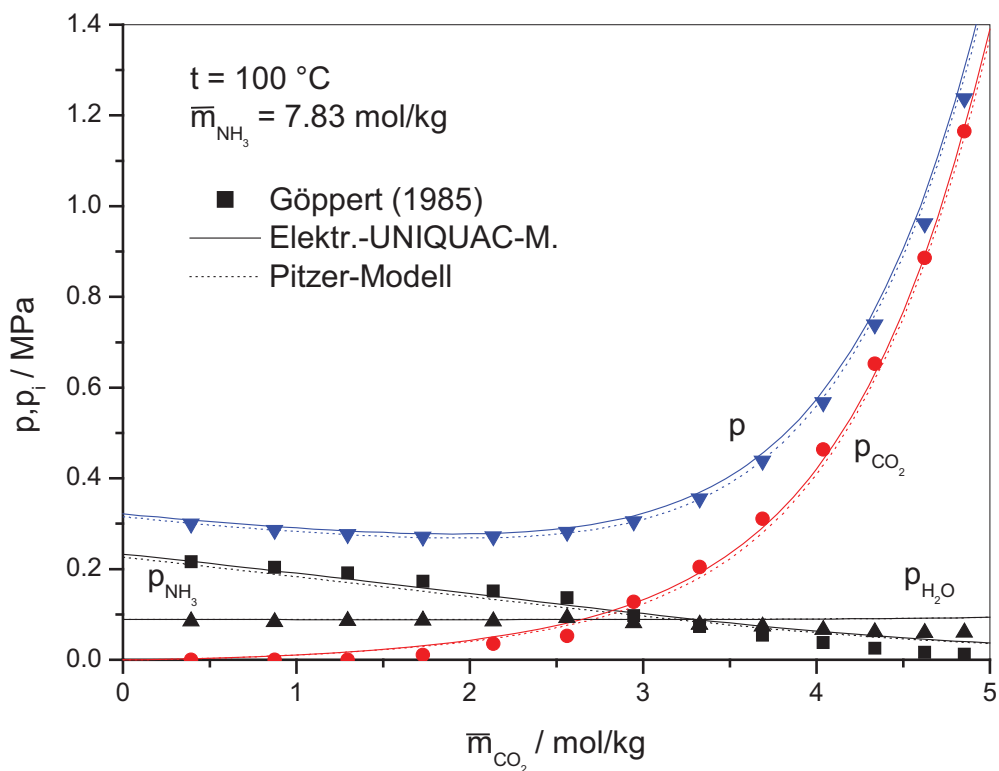


Abb. A 4.12: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 100 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

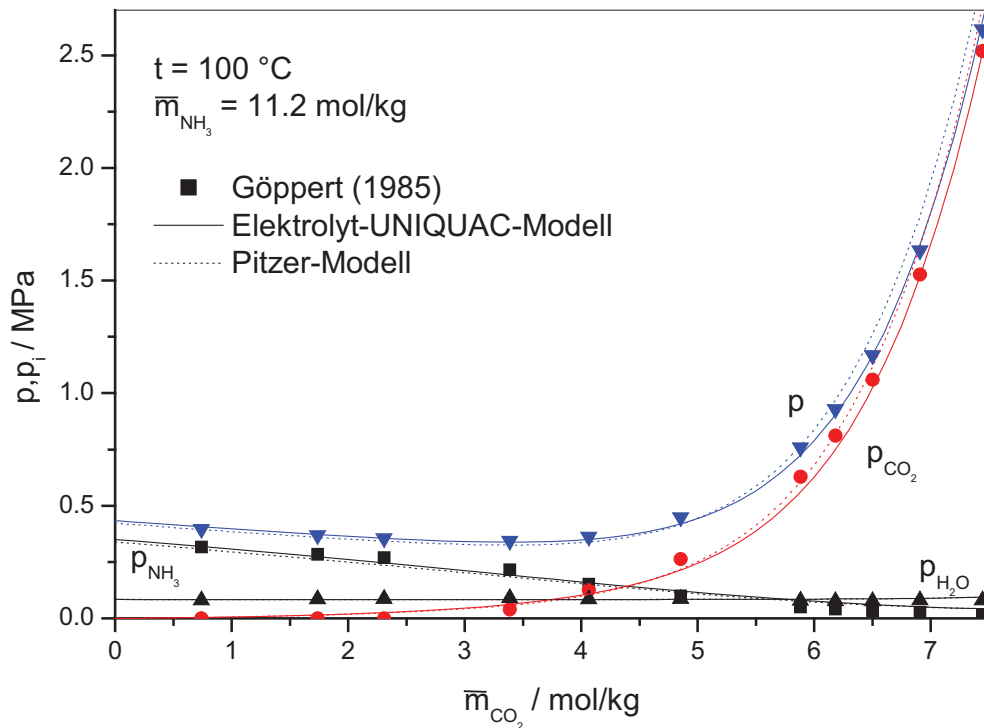


Abb. A 4.13: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 100 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

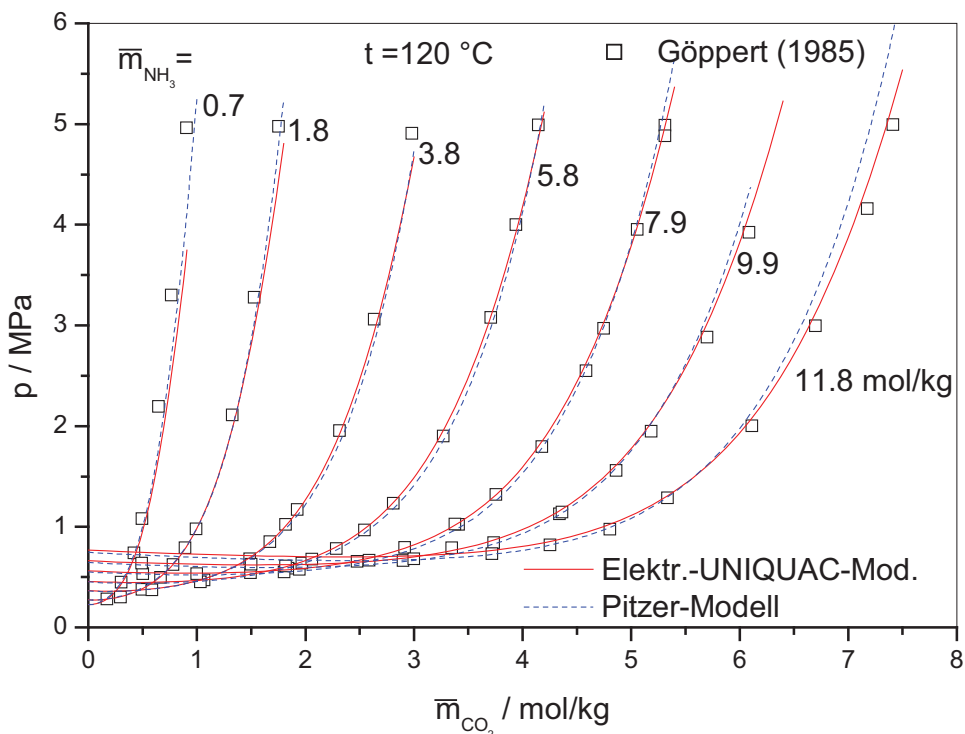


Abb. A 4.14: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

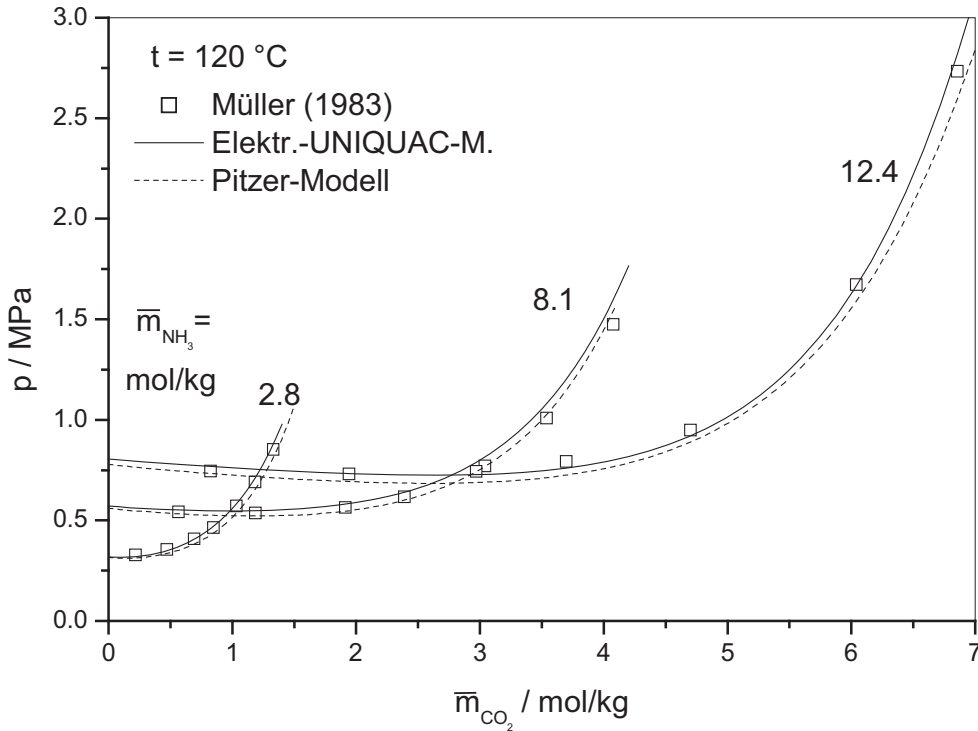


Abb. A 4.15: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

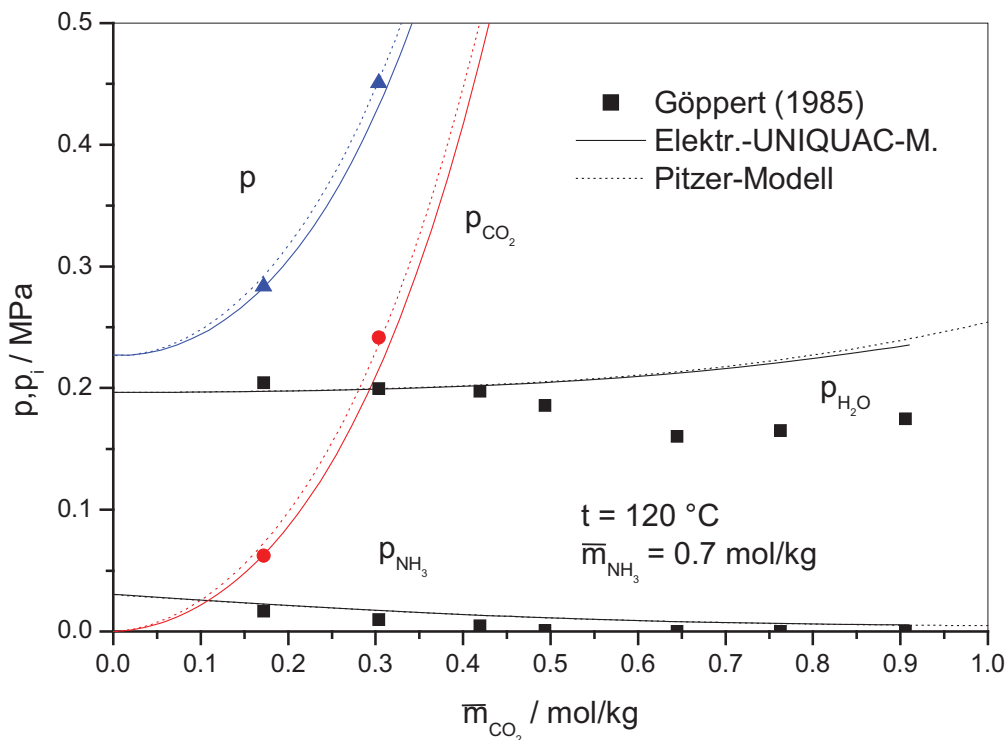


Abb. A 4.16: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

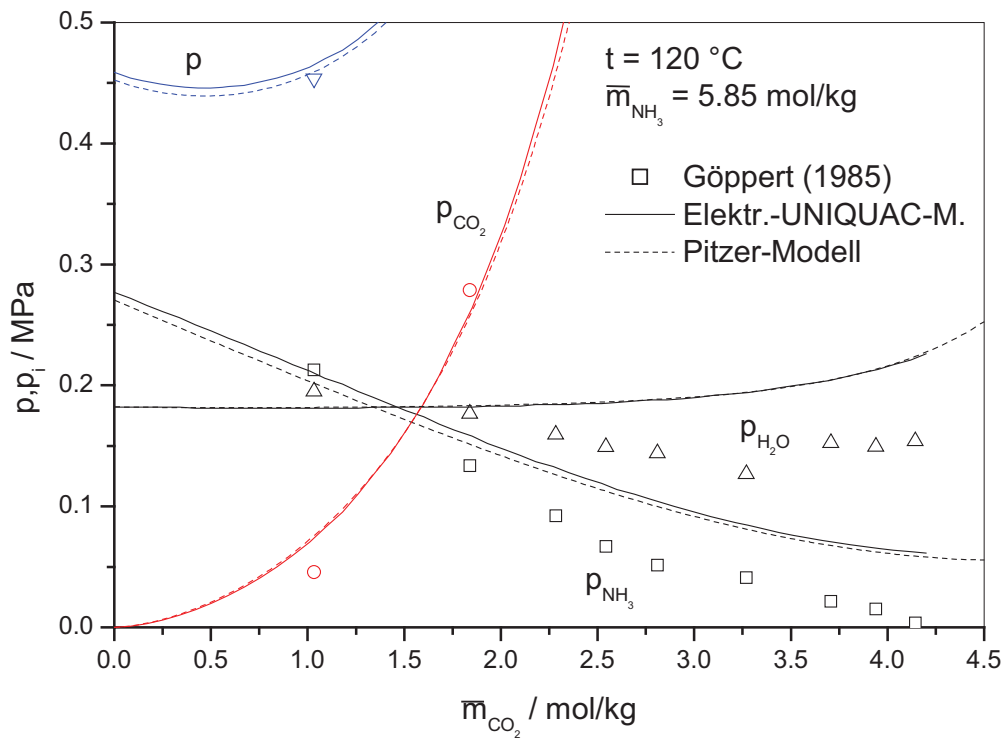


Abb. A 4.17: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

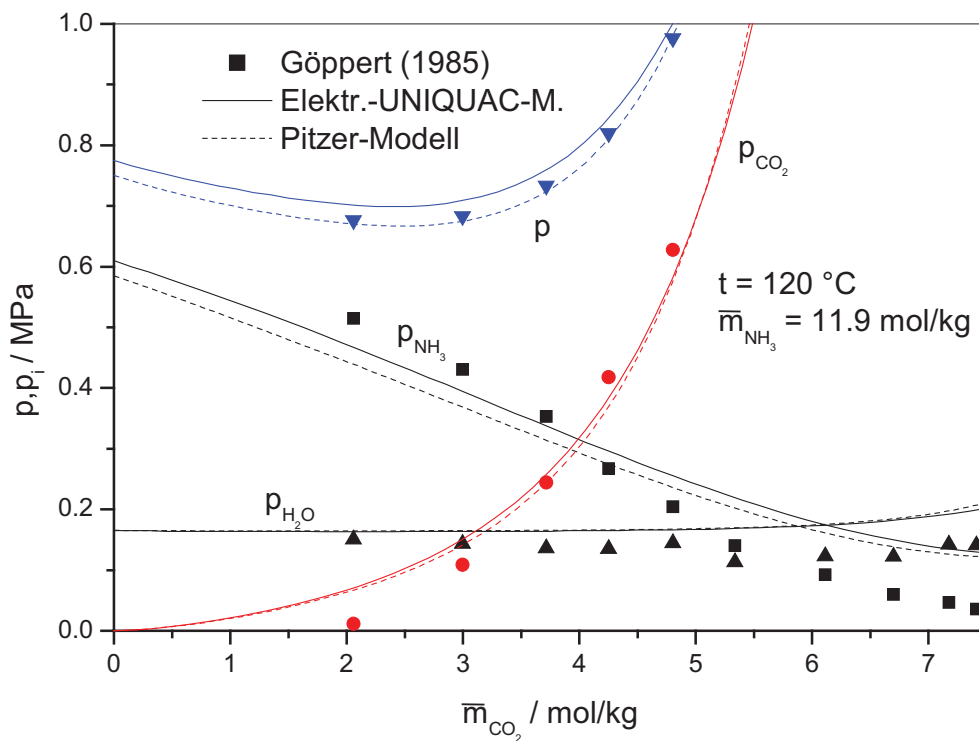


Abb. A 4.18: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

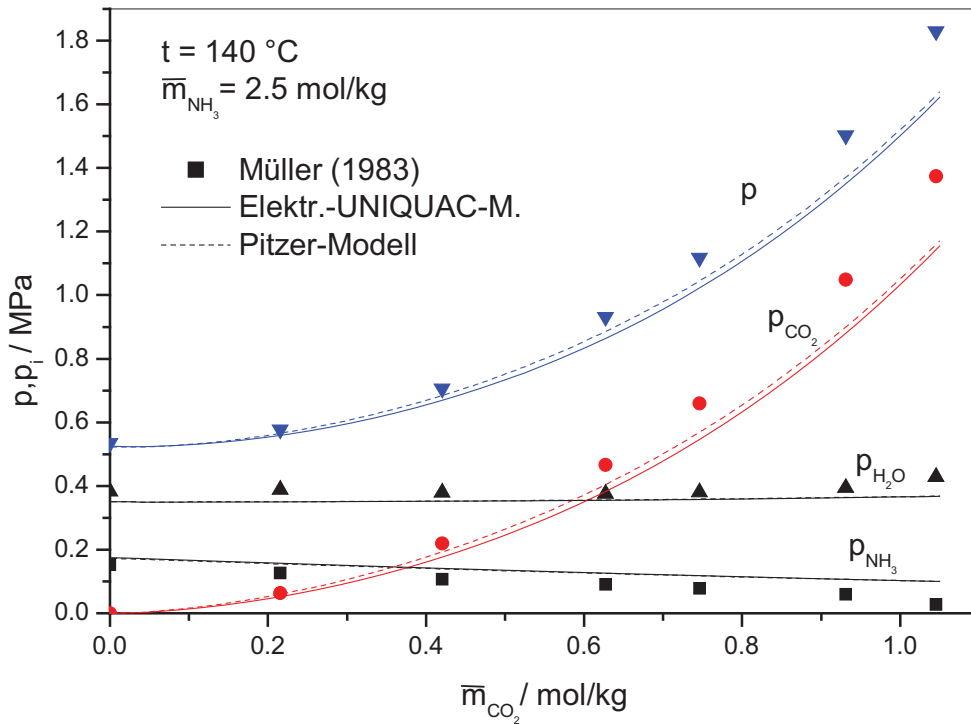


Abb. A 4.19: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 140 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

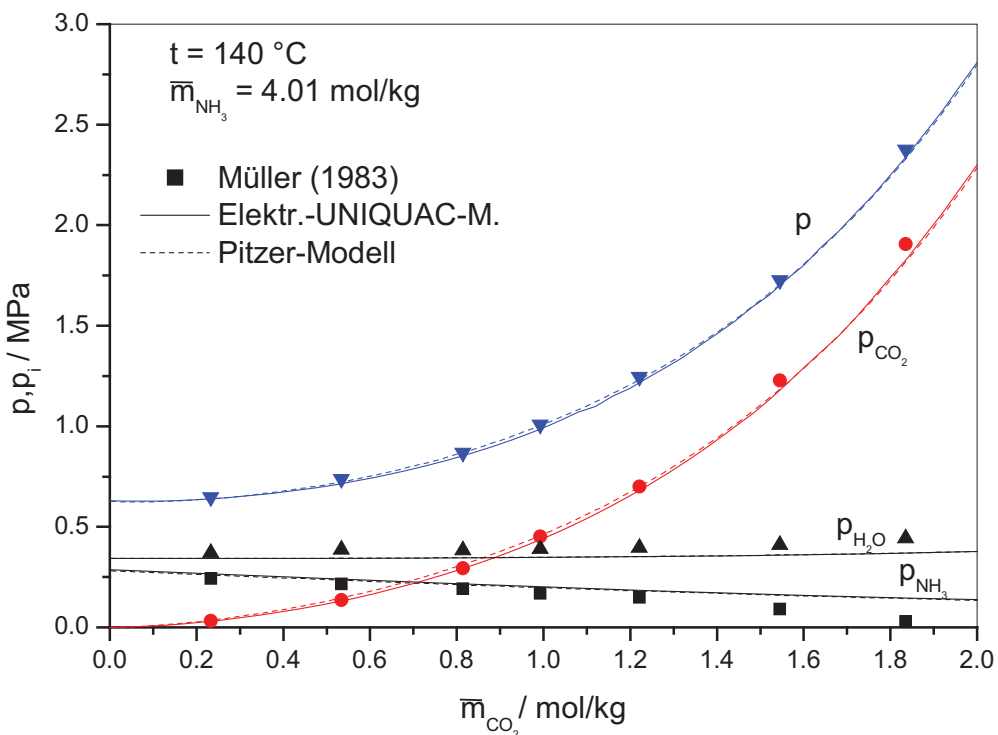


Abb. A 4.20: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 140 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

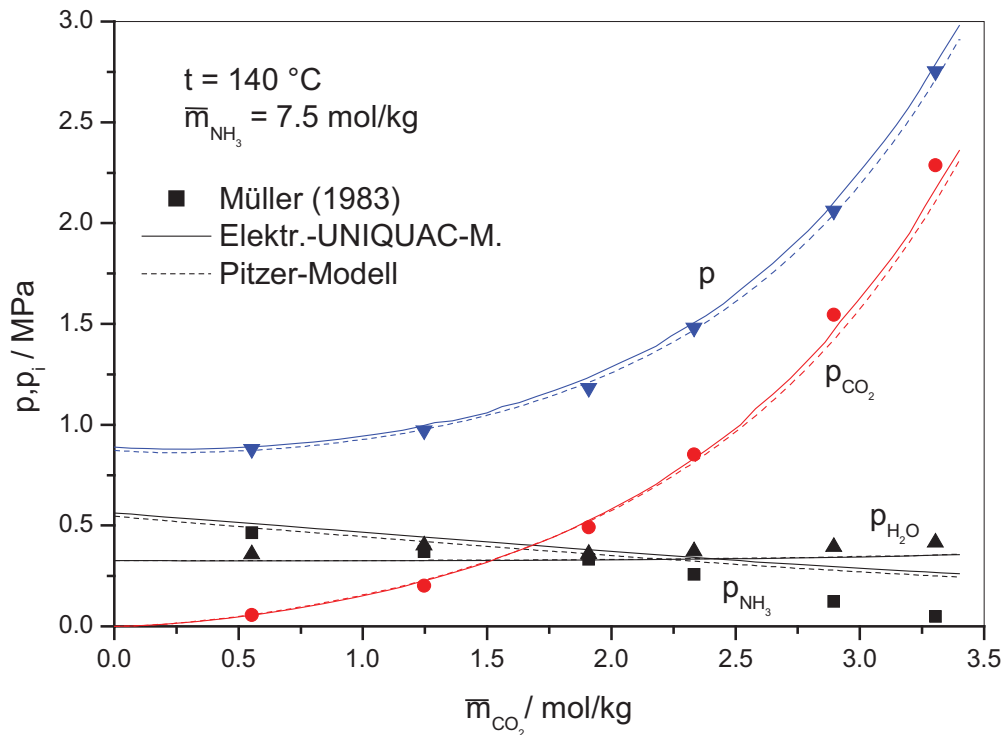


Abb. A 4.21: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 140 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

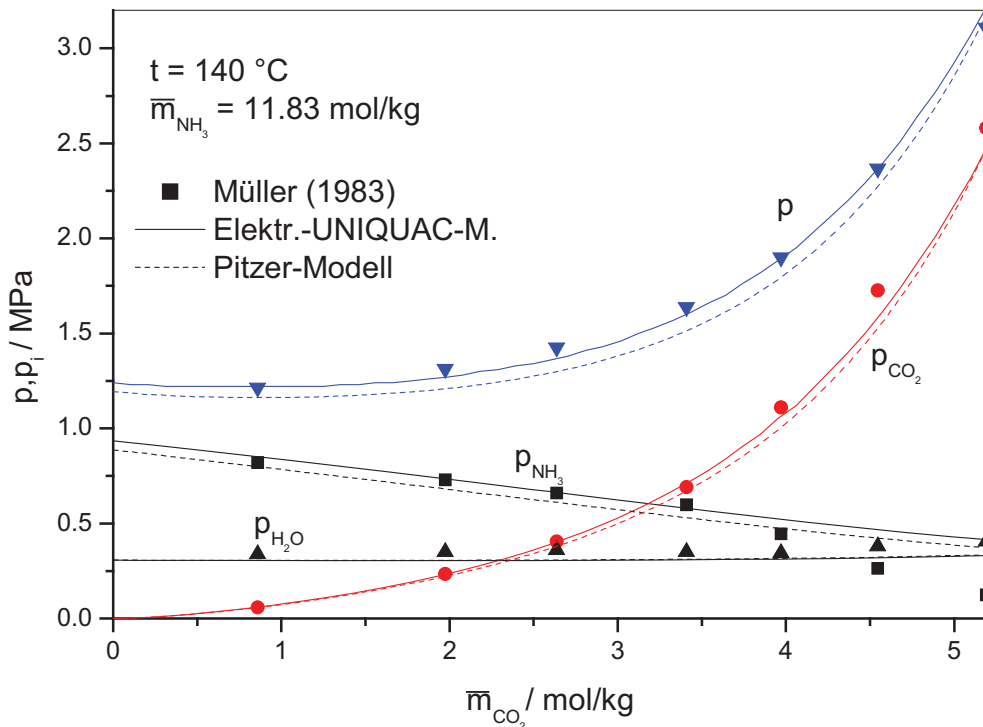


Abb. A 4.22: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 140 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

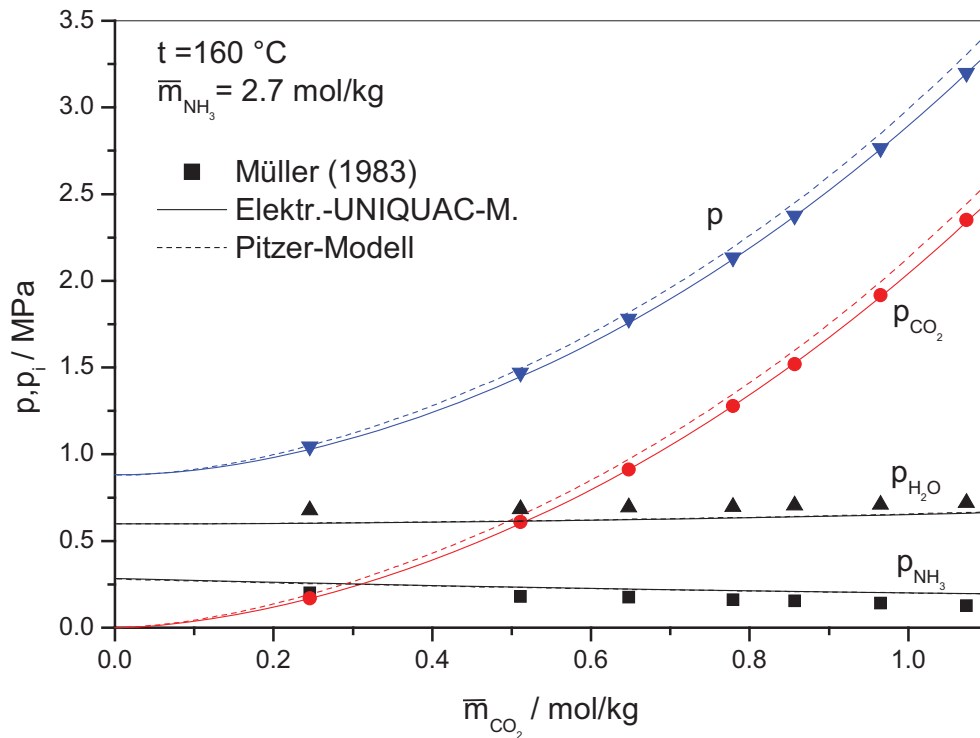


Abb. A 4.23: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 160 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

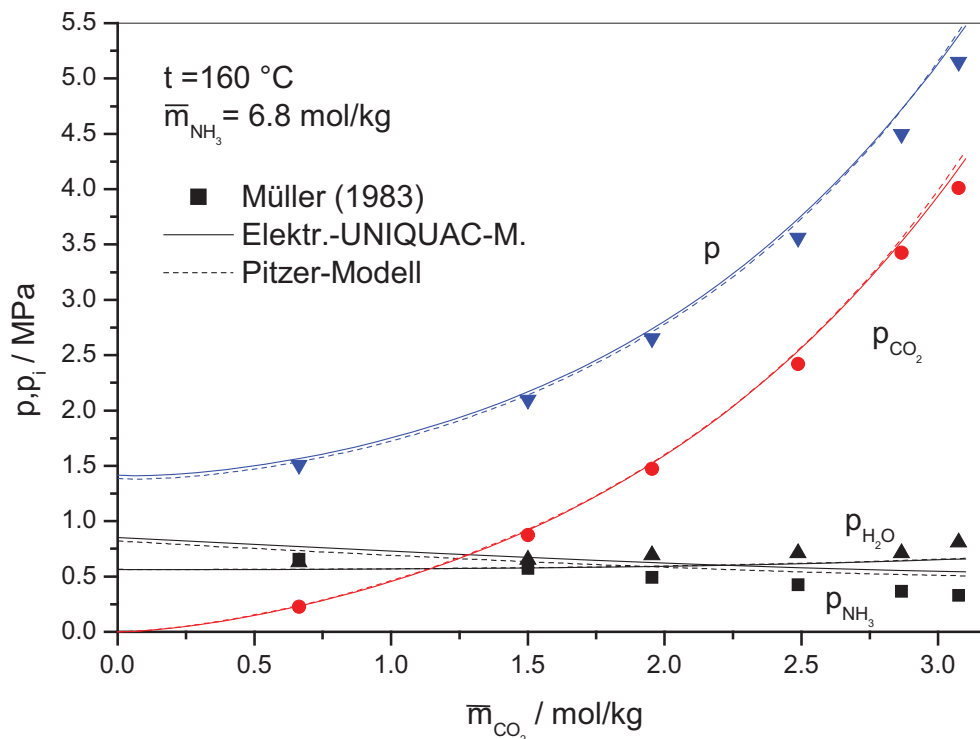


Abb. A 4.24: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 160 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

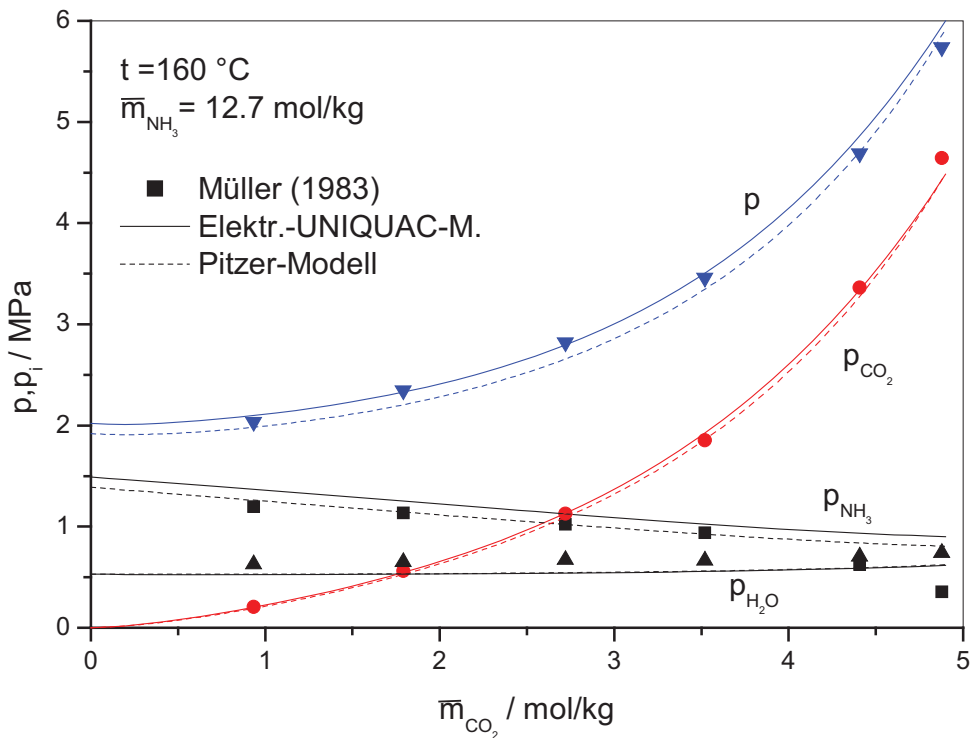


Abb. A 4.25: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 160 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

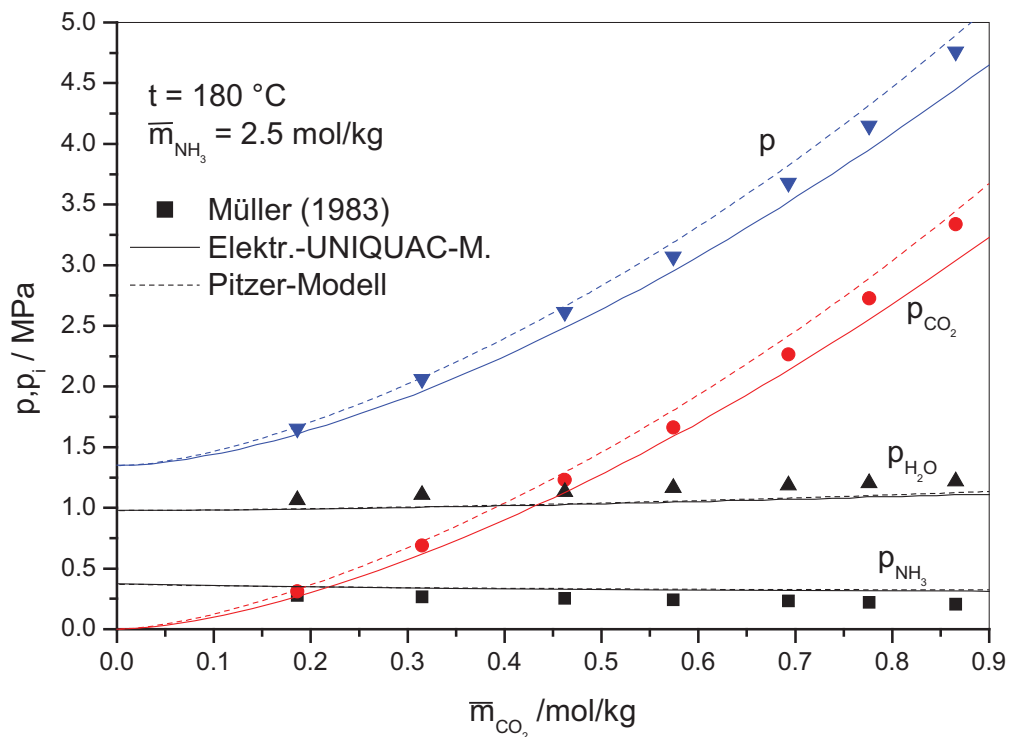


Abb. A 4.26: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 180 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

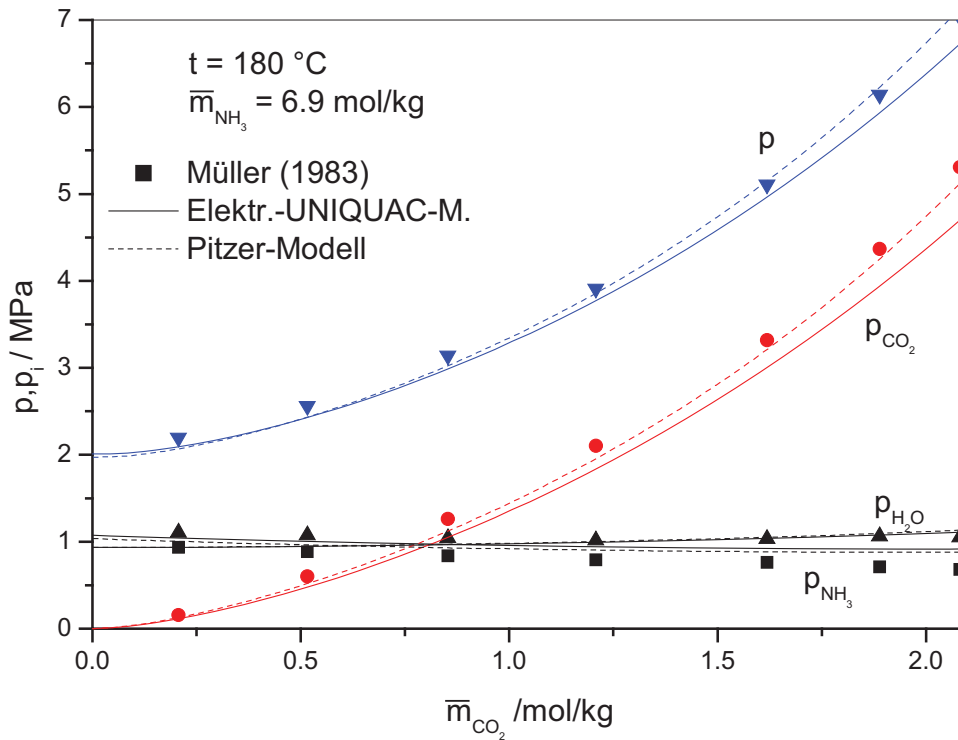


Abb. A 4.27: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 180 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

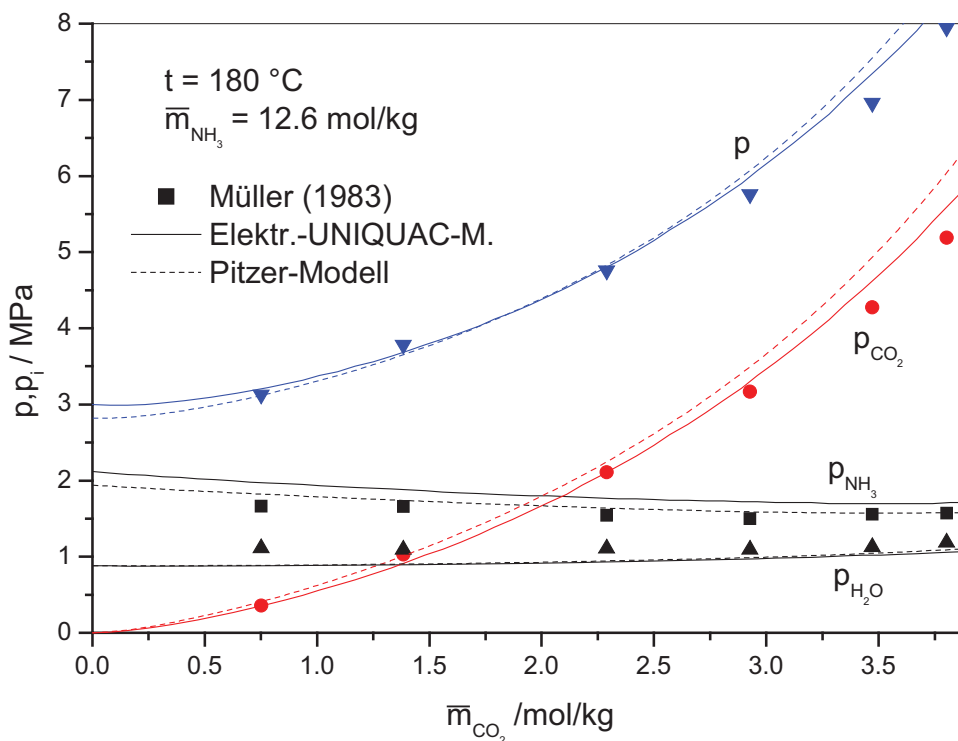


Abb. A 4.28: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 180 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

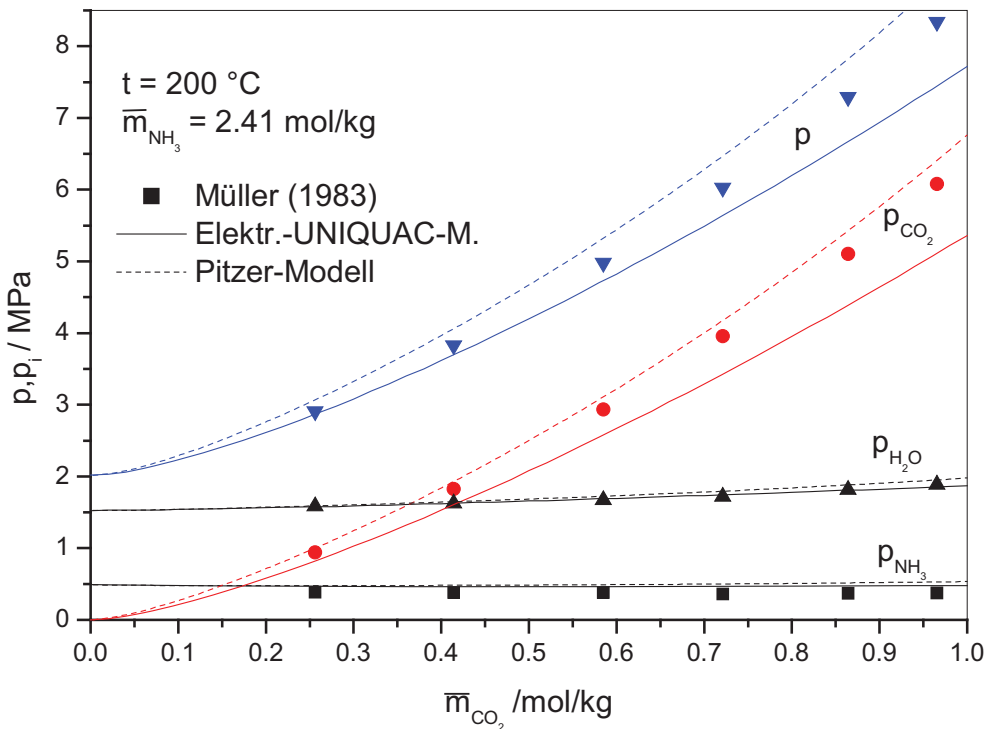


Abb. A 4.29: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 200 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

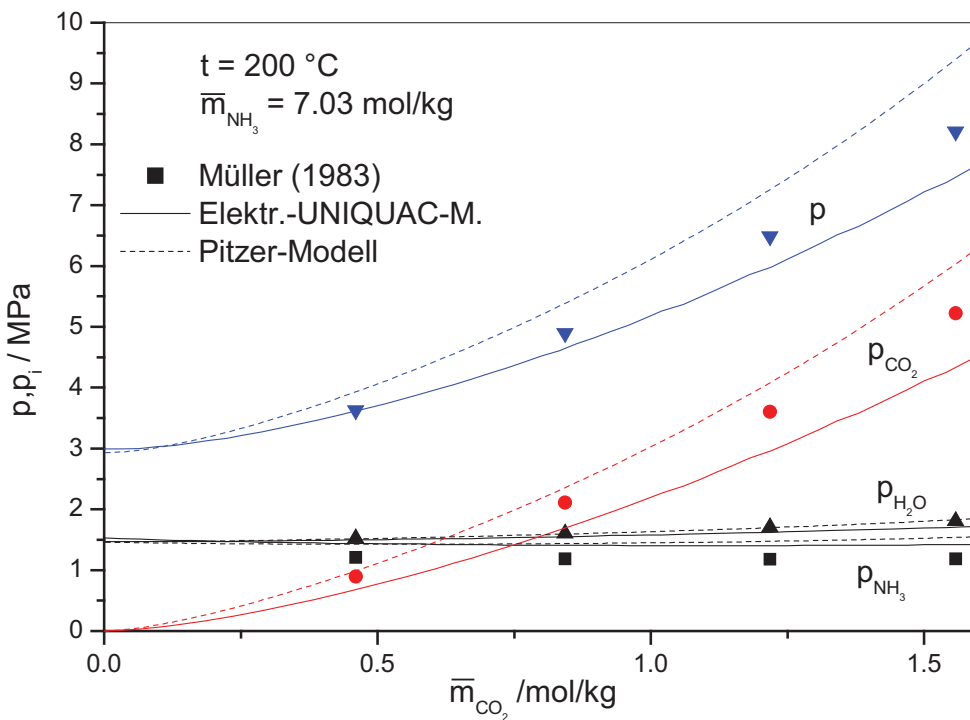


Abb. A 4.30: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 200 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

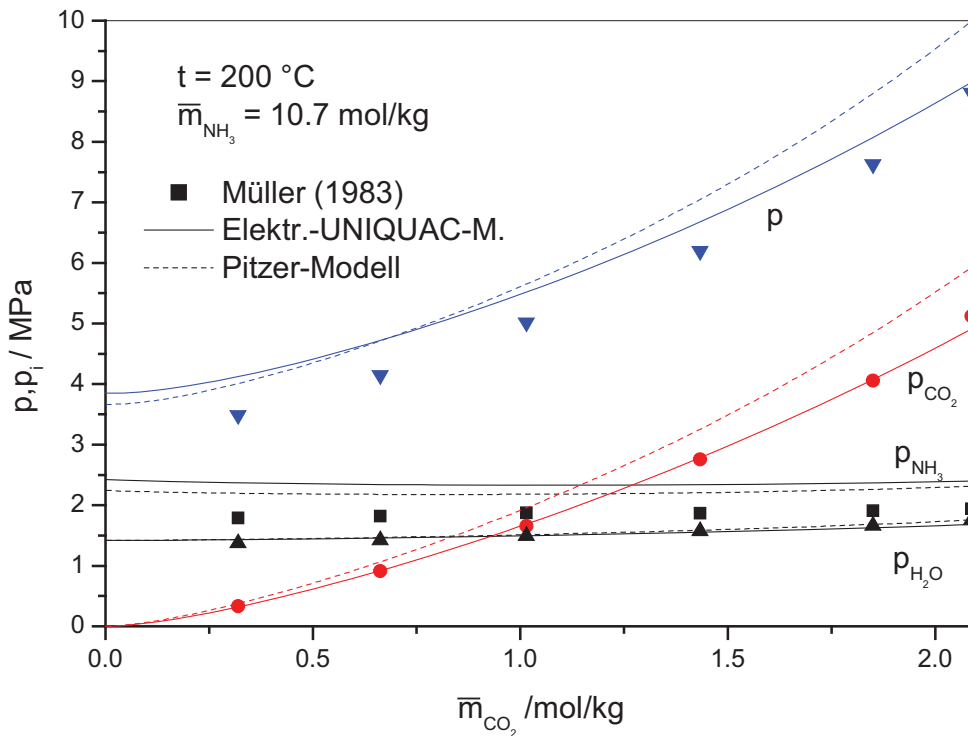


Abb. A 4.31: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser bei 200 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells von Lichtfers (2000) und des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

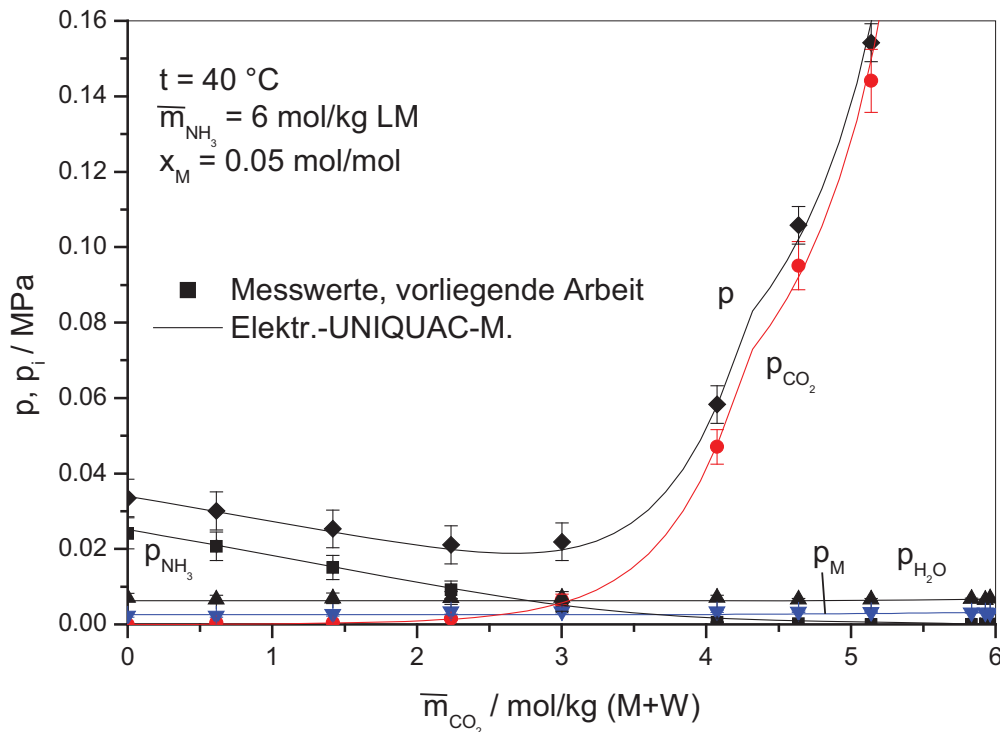


Abb. A 4.32: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 40 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

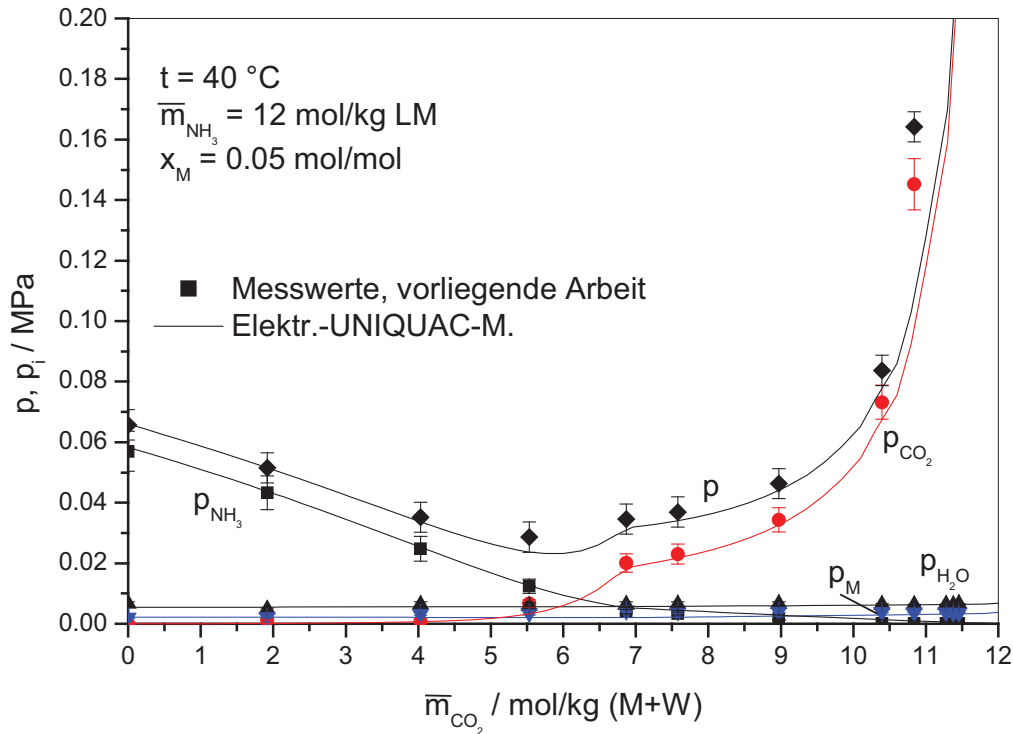


Abb. A 4.33: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 40 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

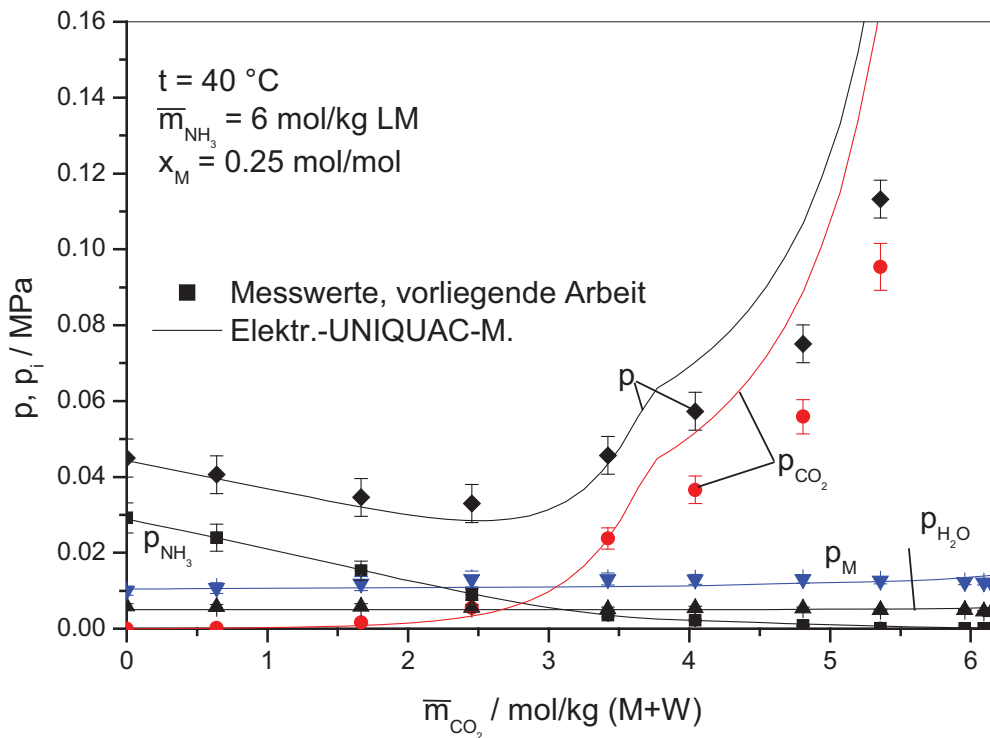


Abb. A 4.34: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 40 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

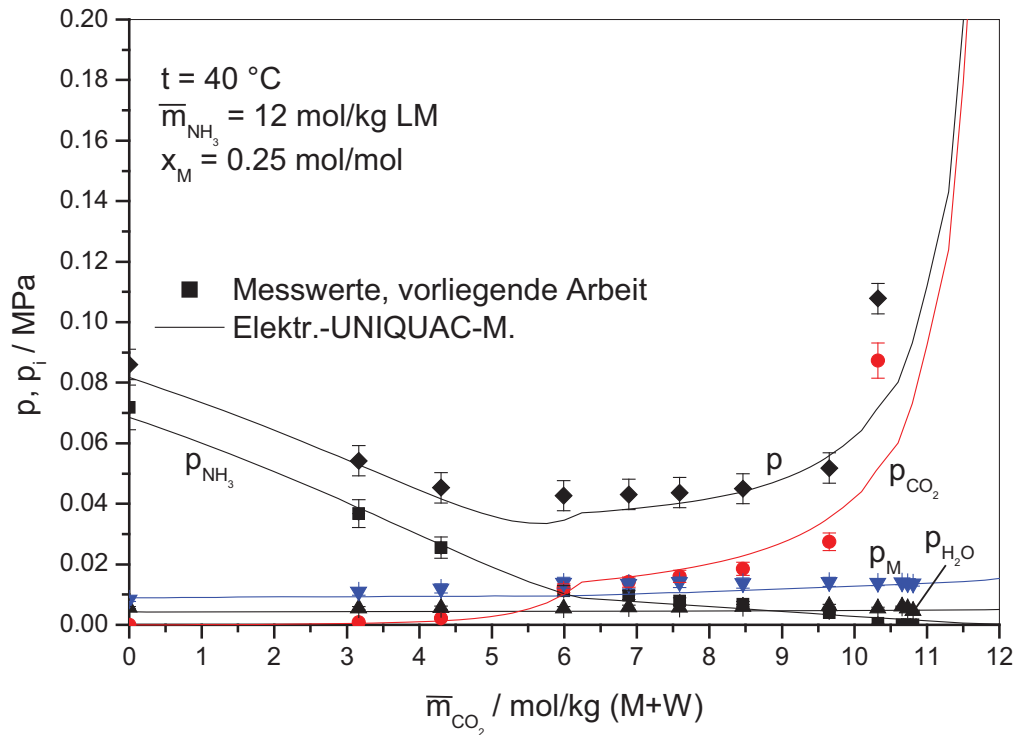


Abb. A 4.35: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 40 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNQUAC-Modells

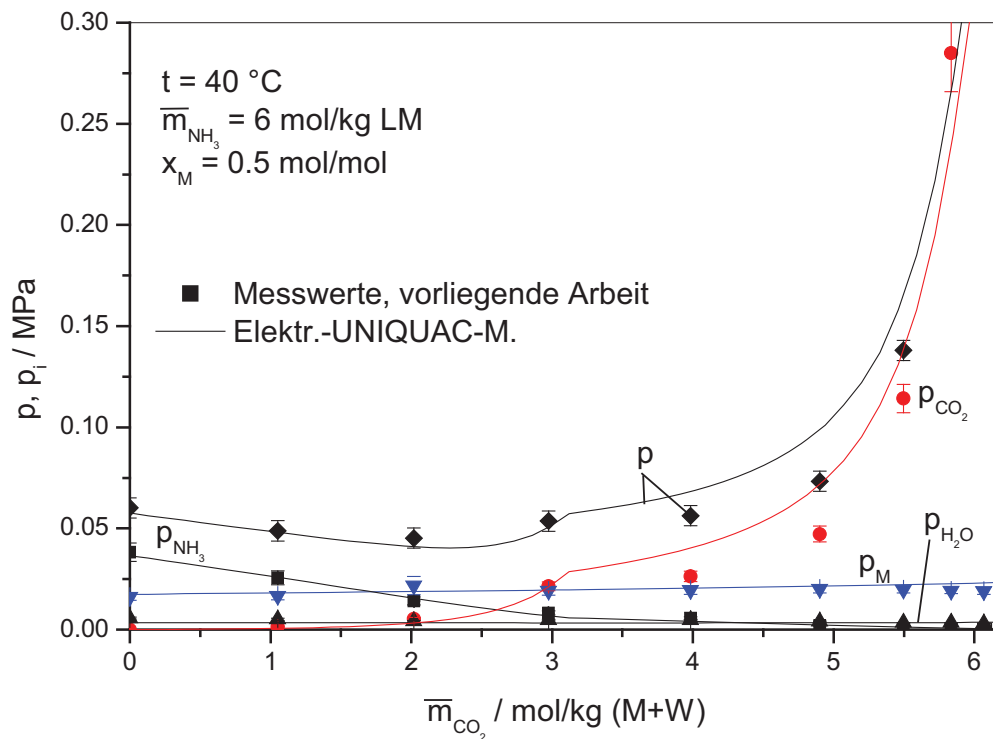


Abb. A 4.36: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 40 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNQUAC-Modells

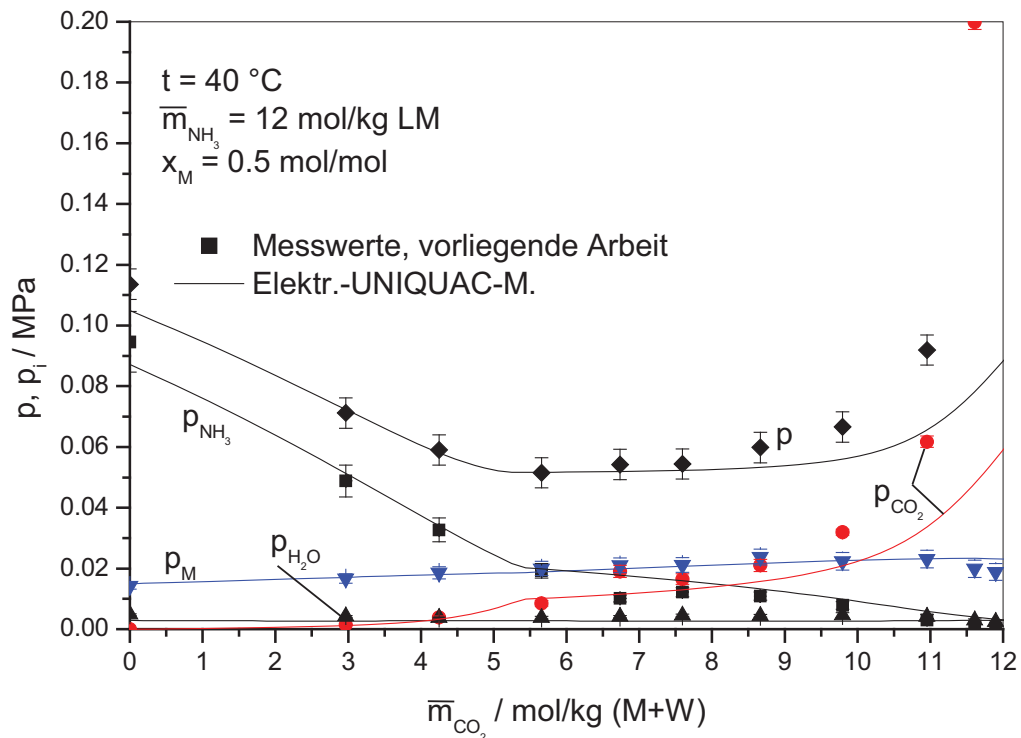


Abb. A 4.37: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 40 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

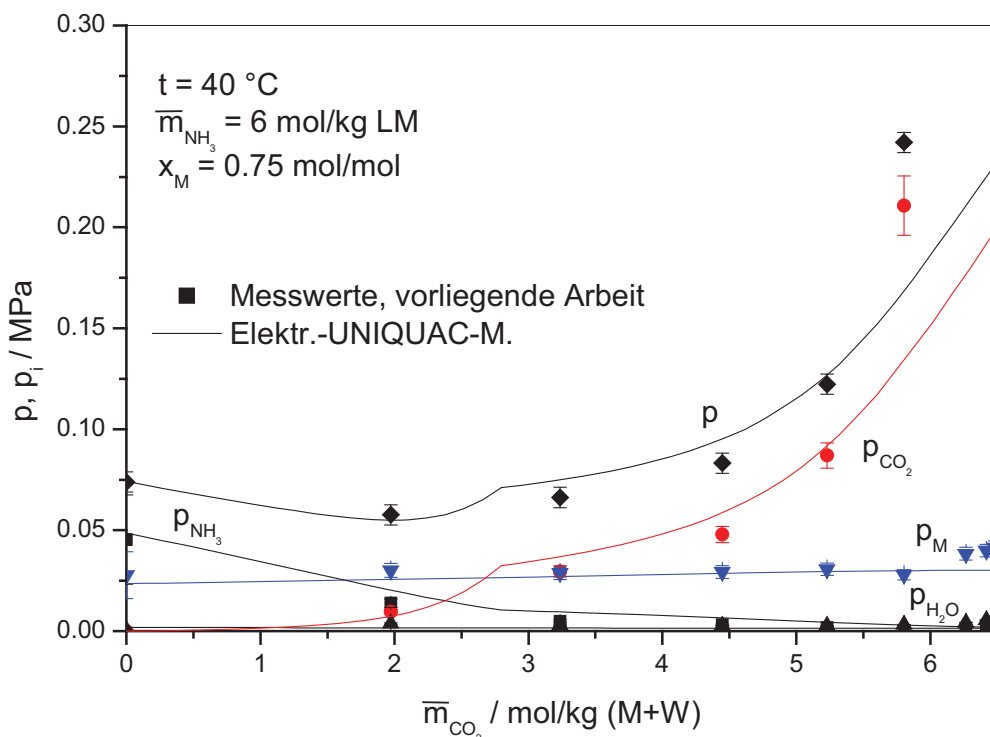


Abb. A 4.38: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 40 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

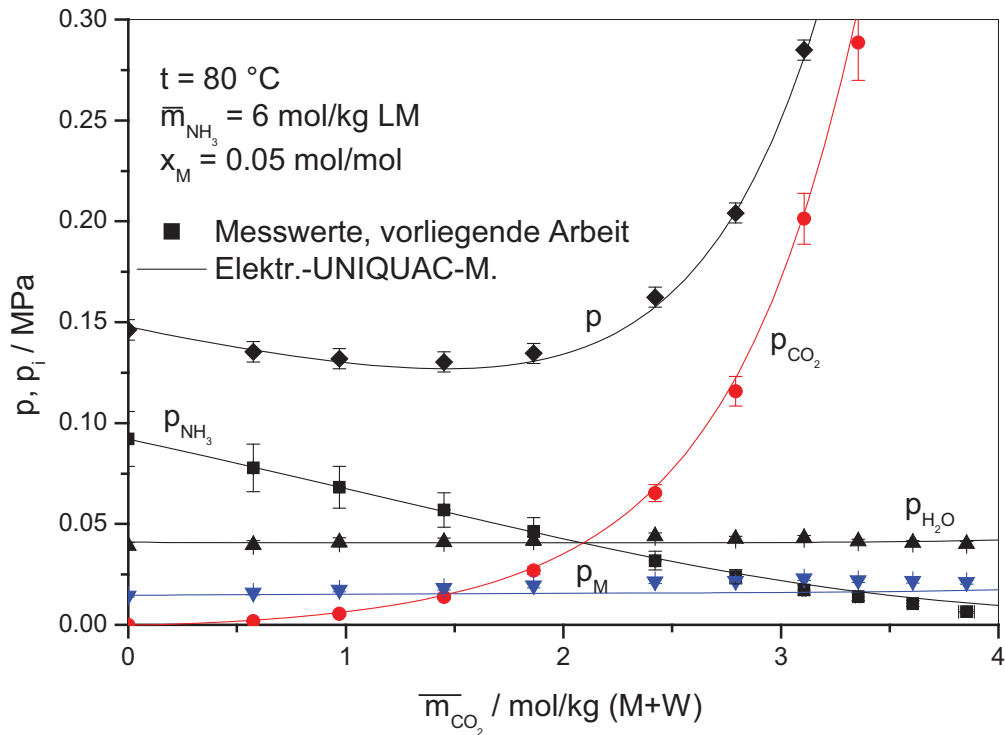


Abb. A 4.39: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

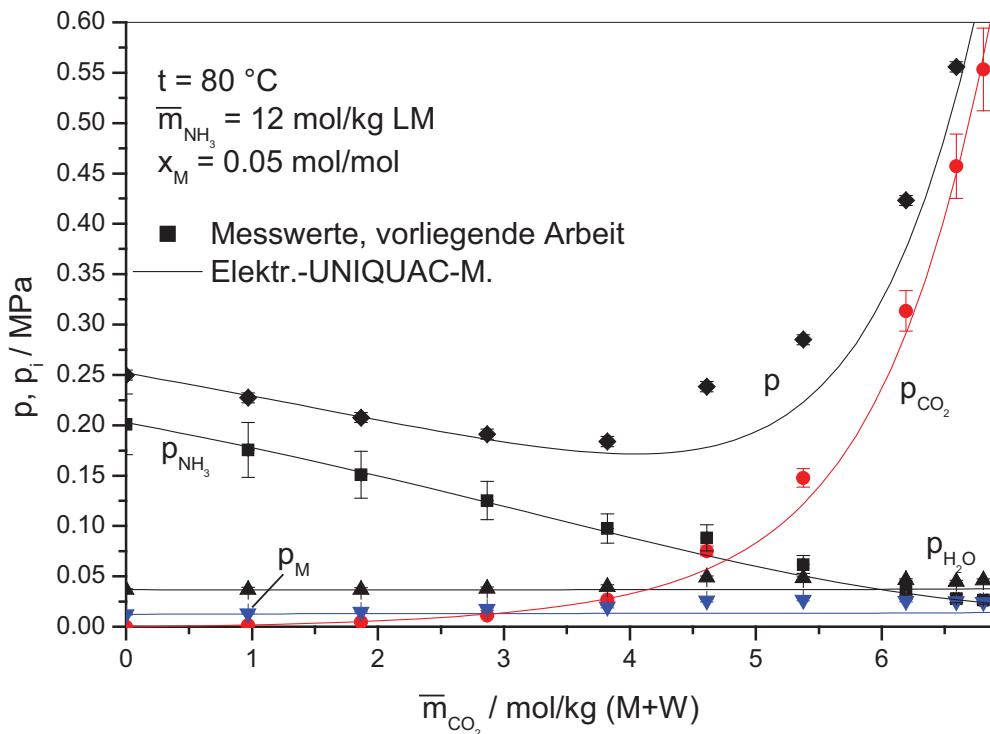


Abb. A 4.40: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

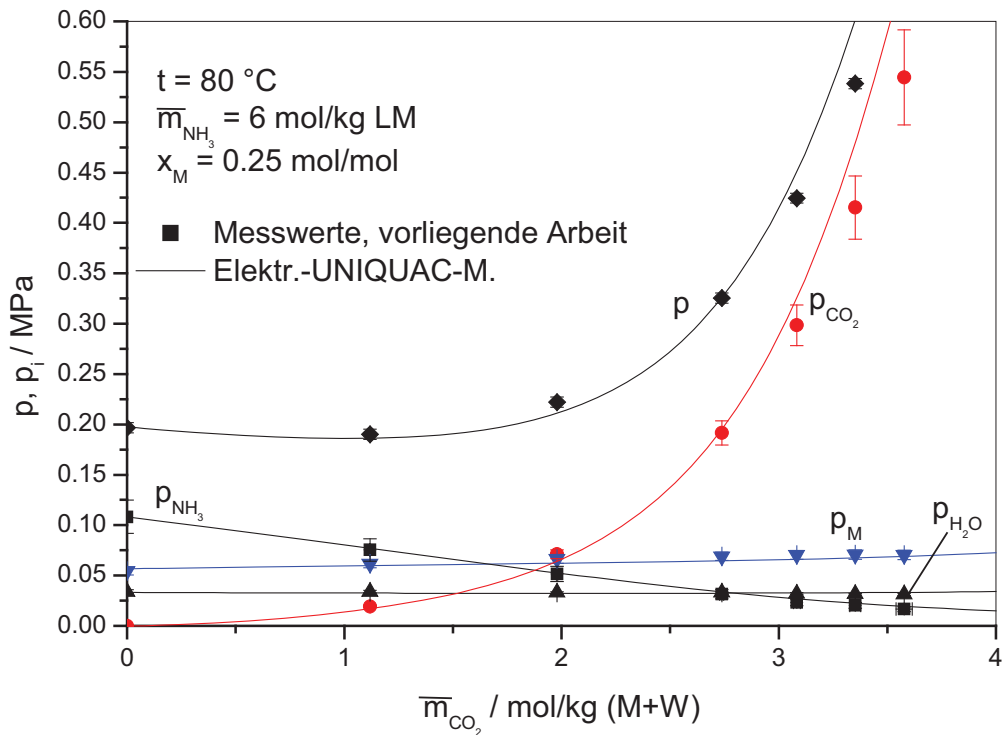


Abb. A 4.41: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

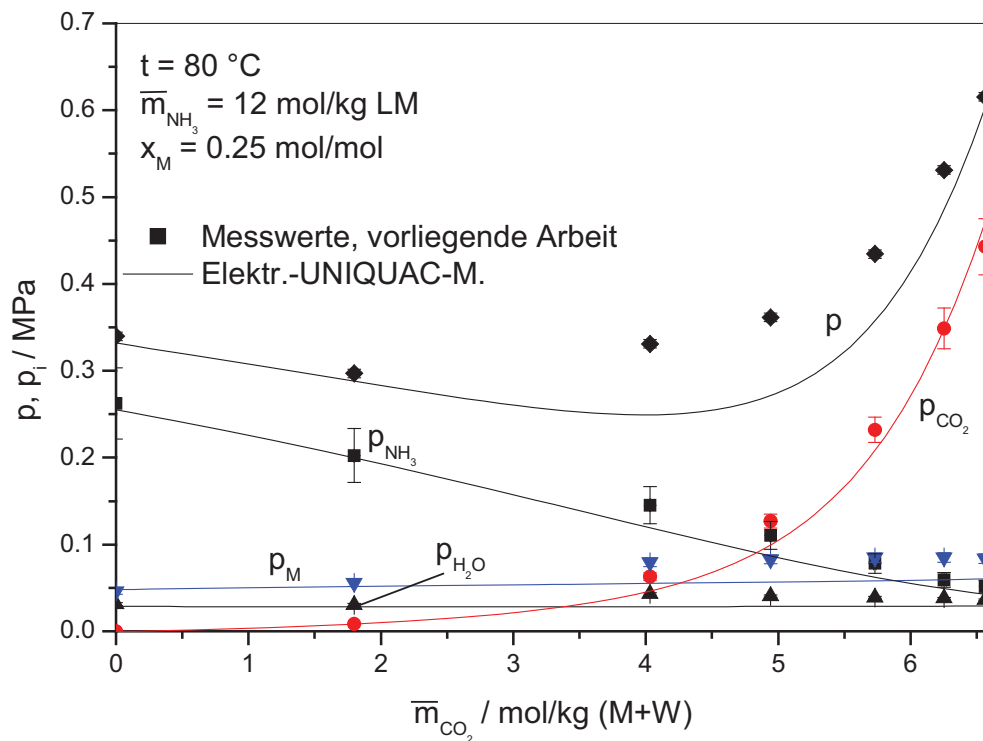


Abb. A 4.42: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

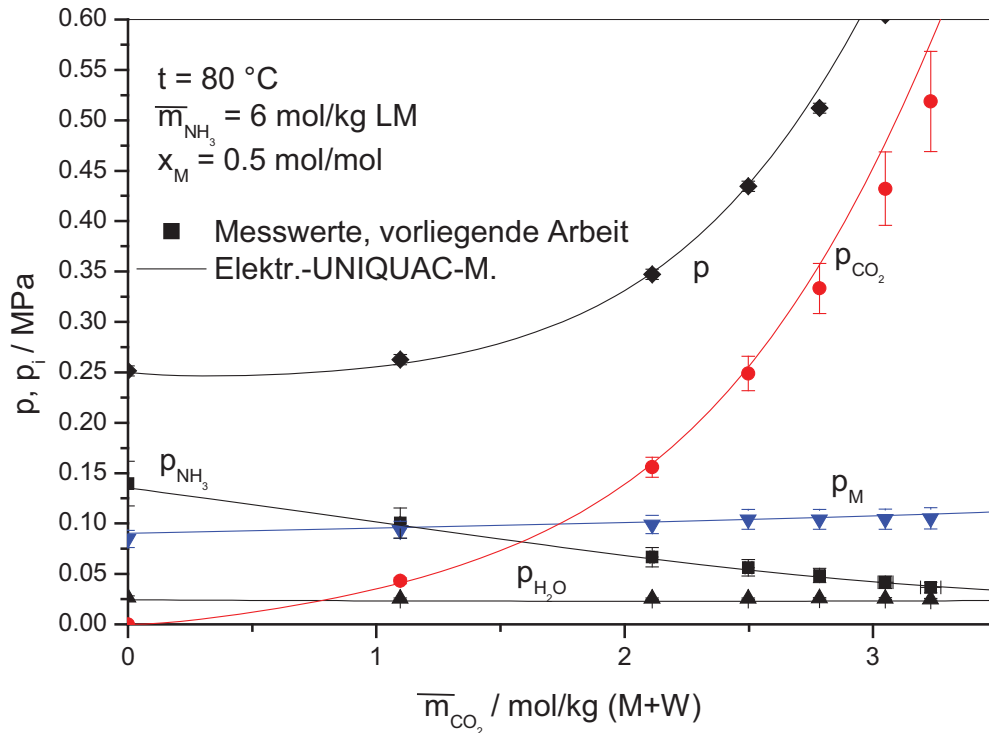


Abb. A 4.43: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

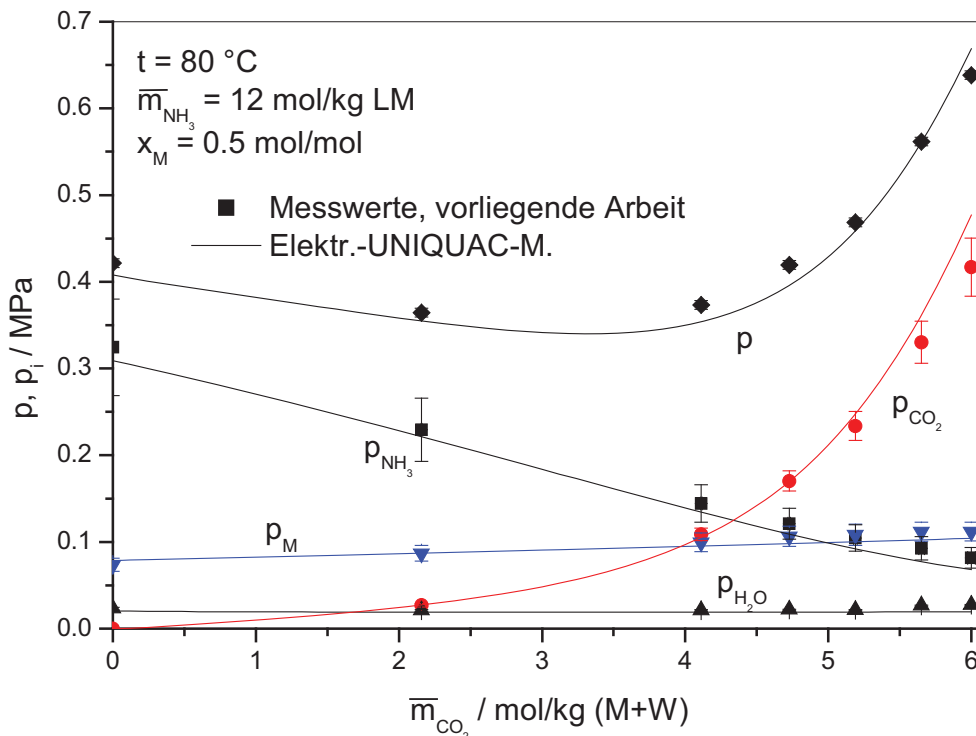


Abb. A 4.44: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

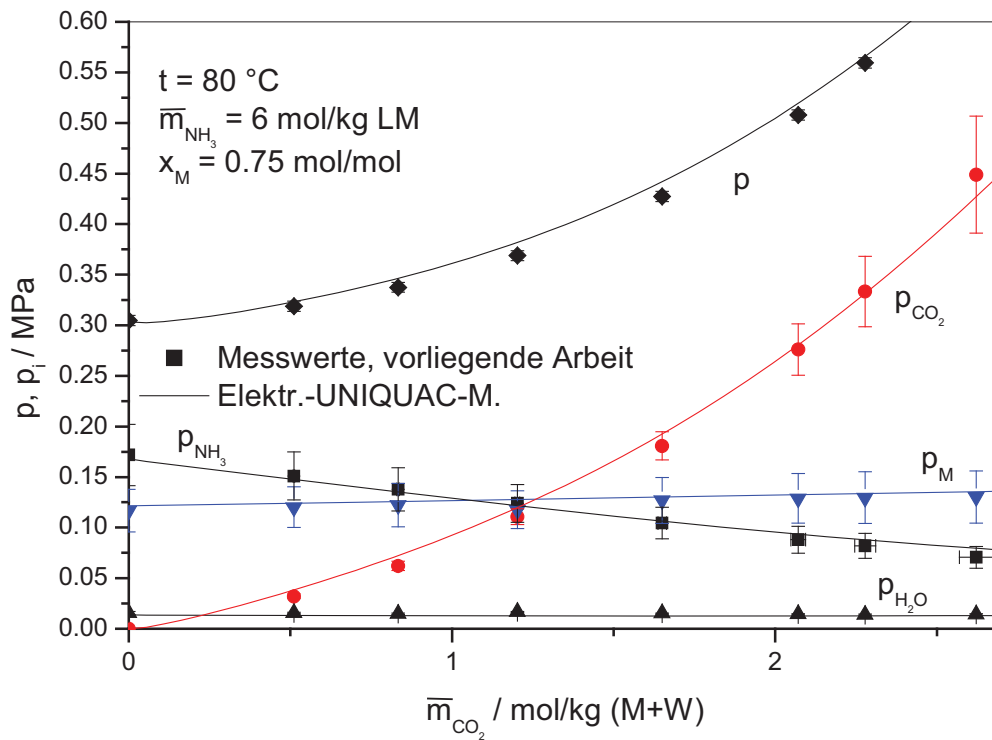


Abb. A 4.45: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

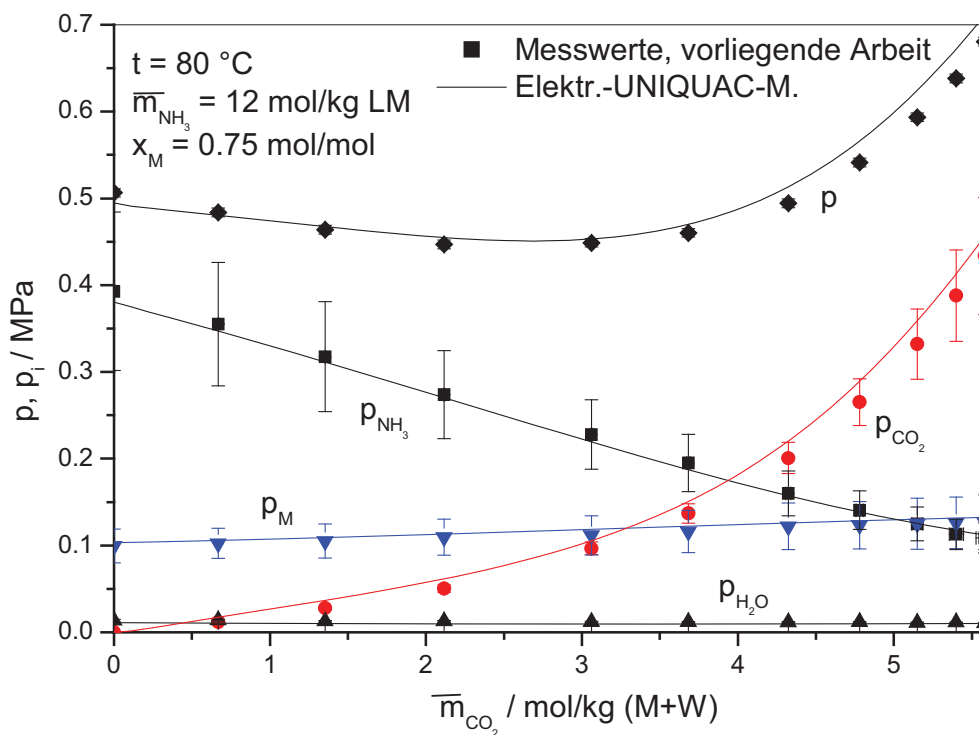


Abb. A 4.46: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

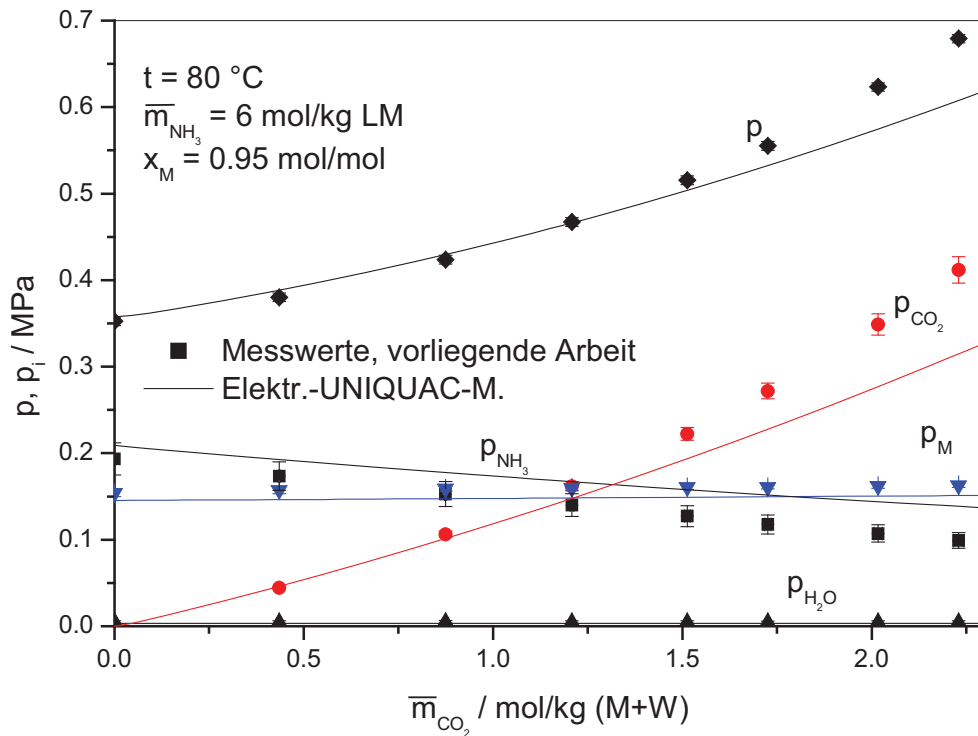


Abb. A 4.47: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

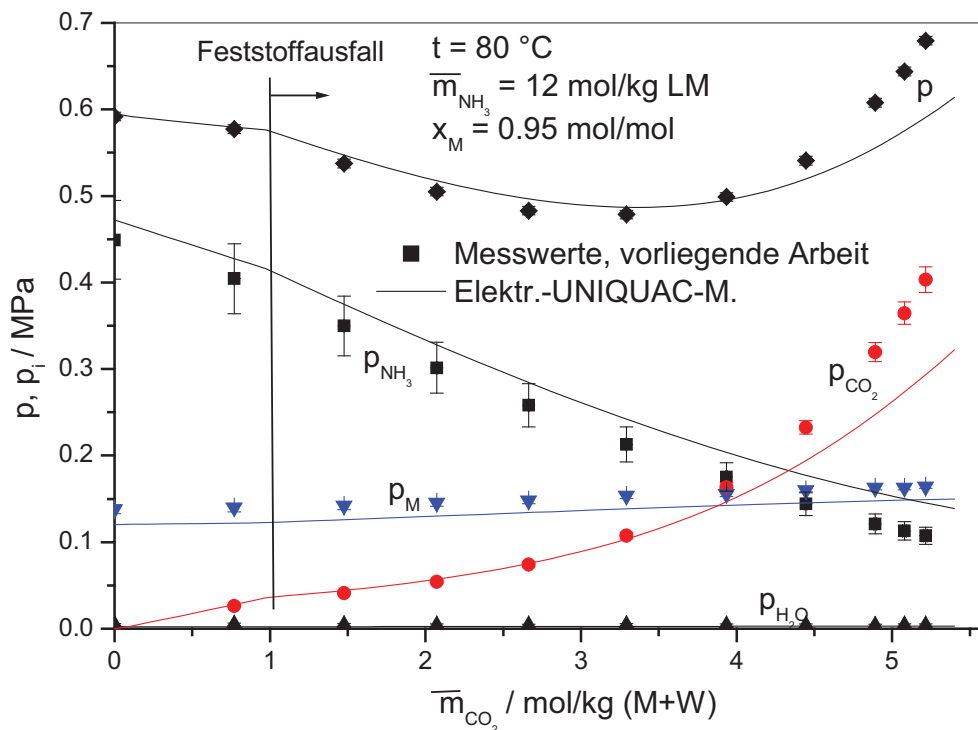


Abb. A 4.48: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

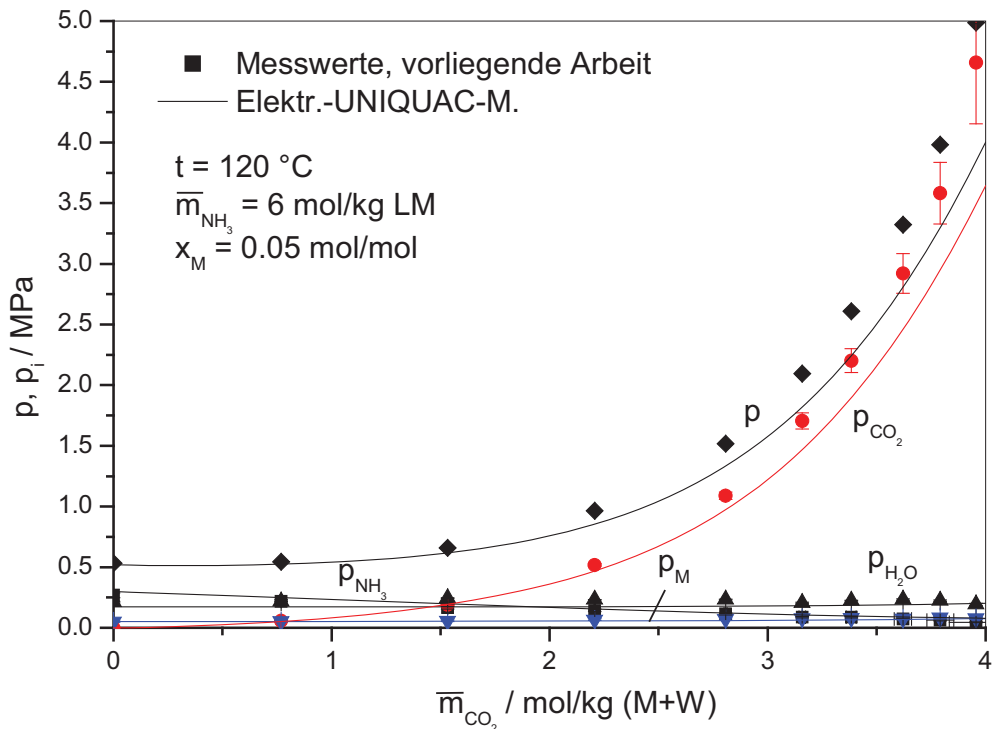


Abb. A 4.49: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

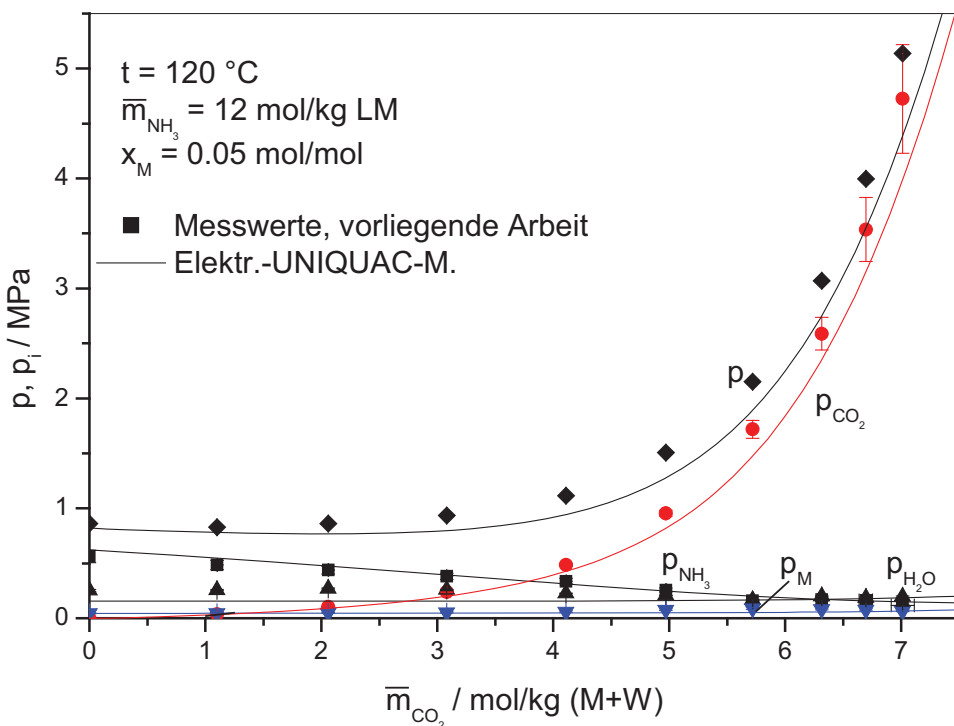


Abb. A 4.50: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

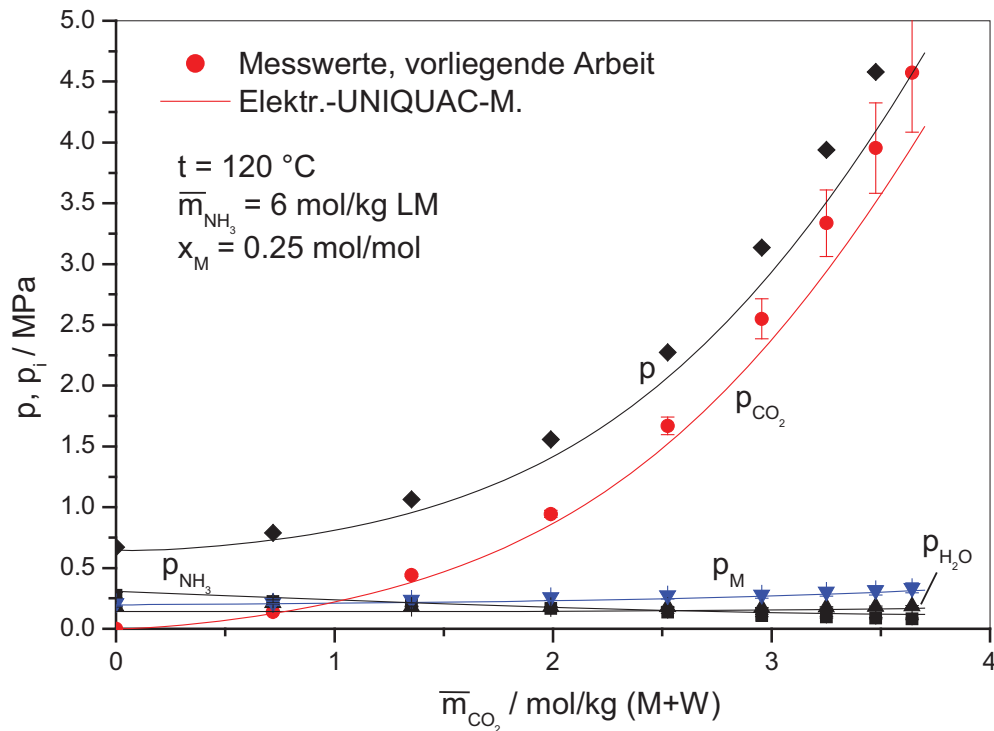


Abb. A 4.51: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

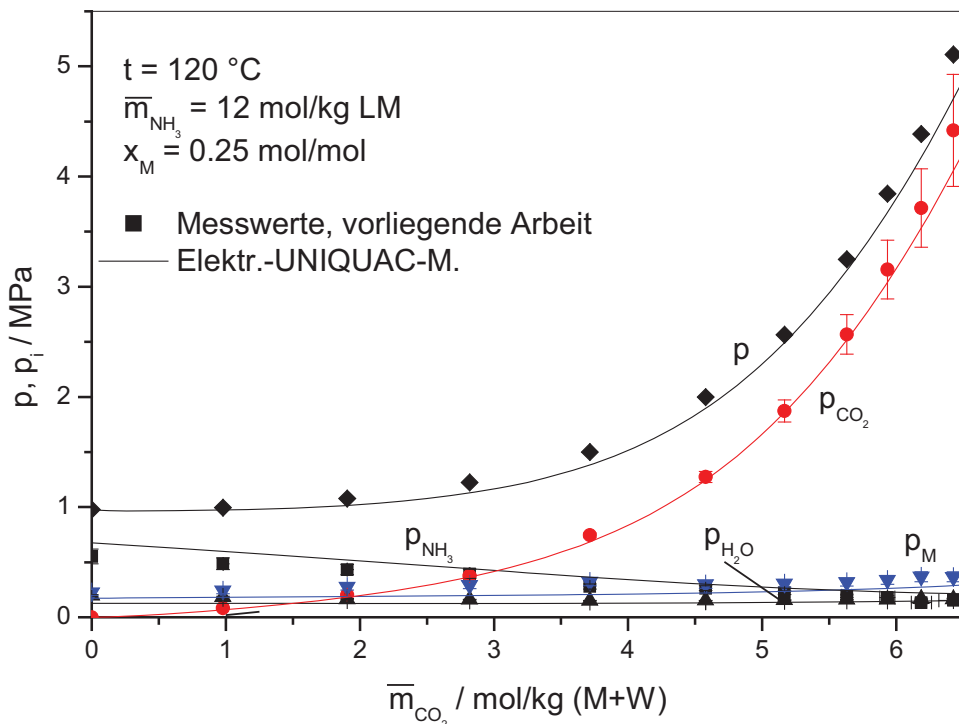


Abb. A 4.52: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

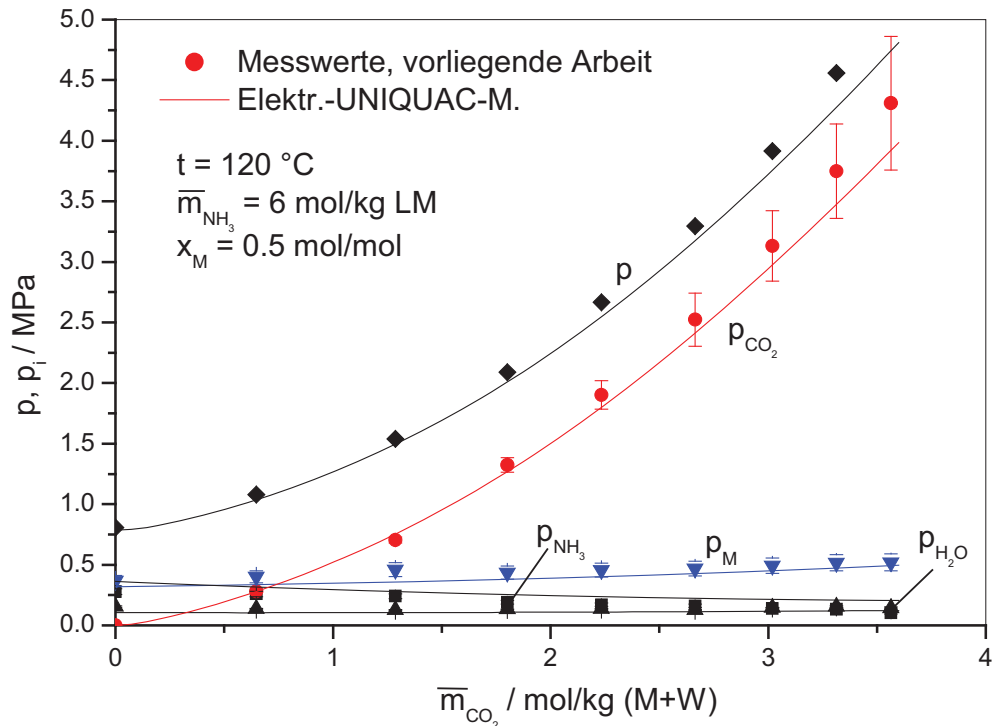


Abb. A 4.53: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

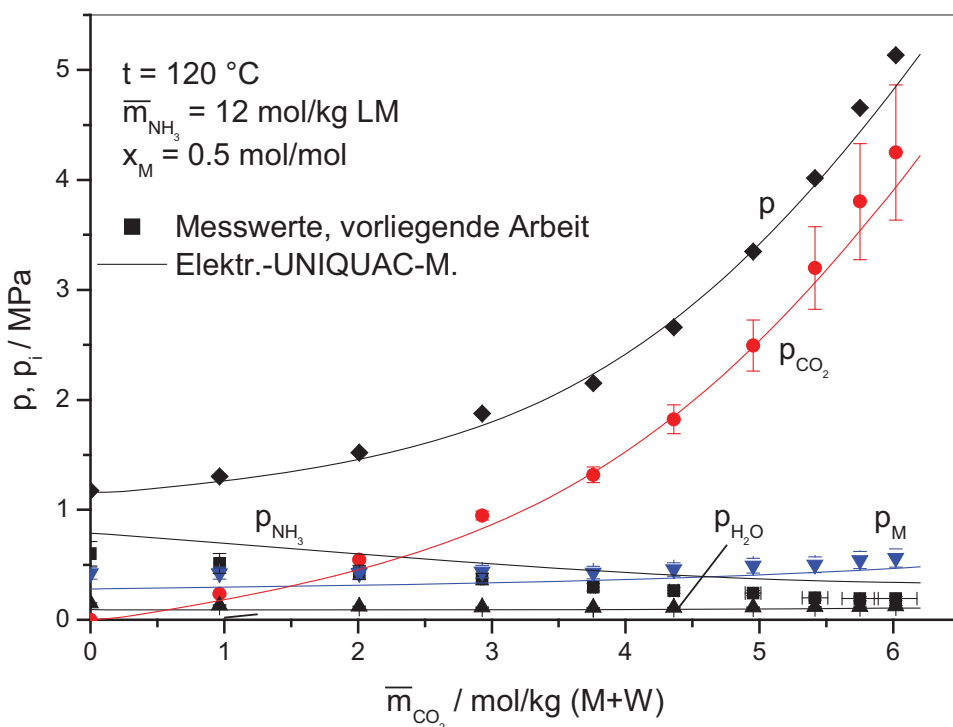


Abb. A 4.54: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

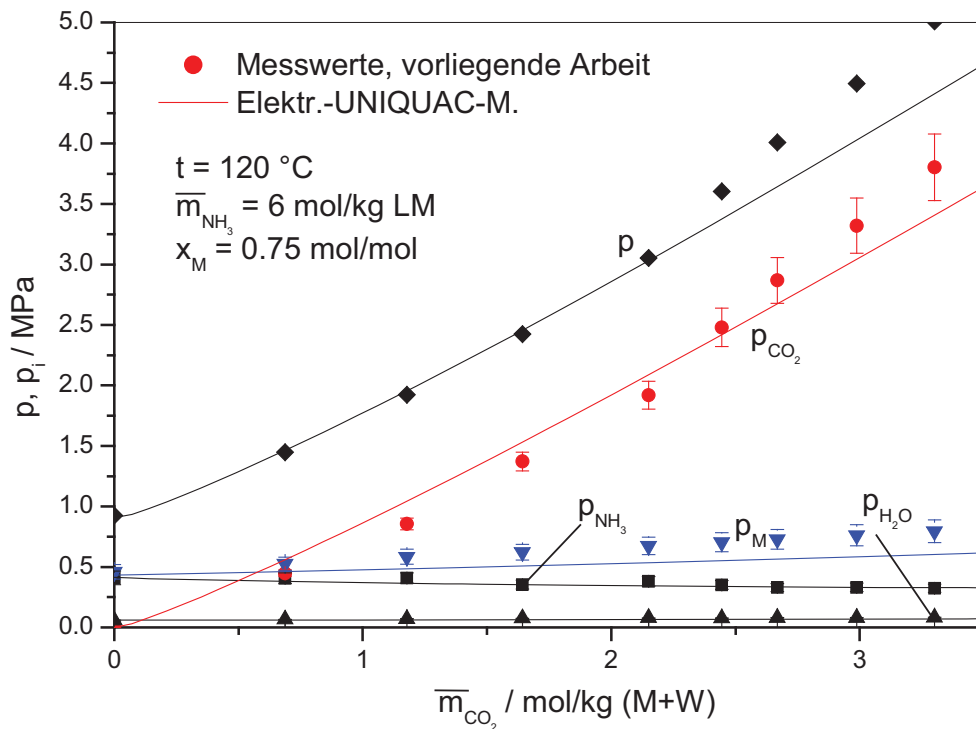


Abb. A 4.55: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

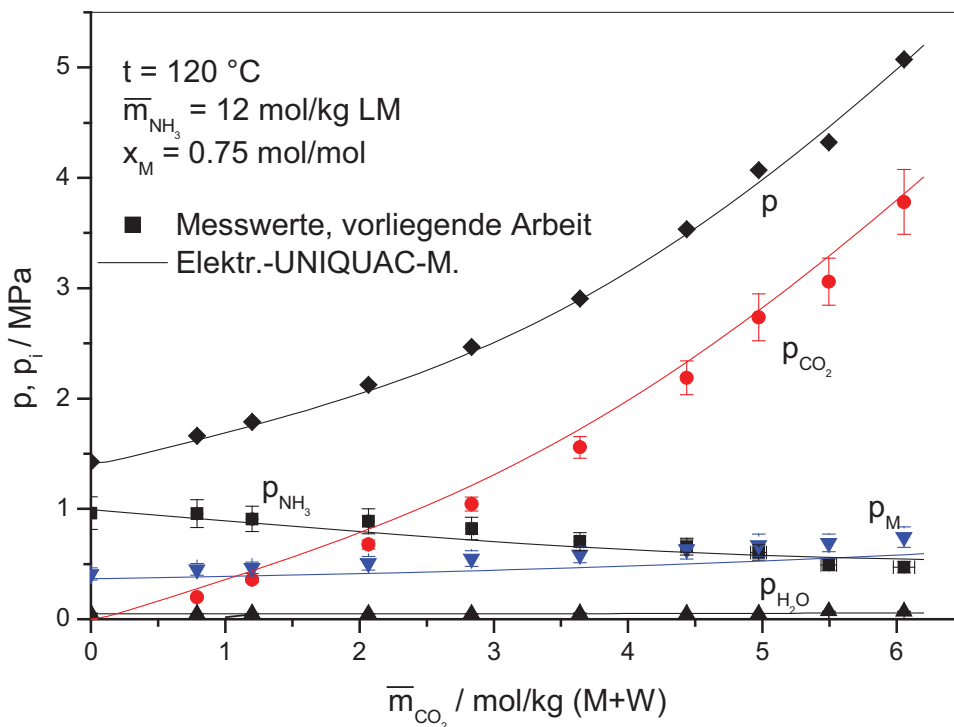


Abb. A 4.56: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

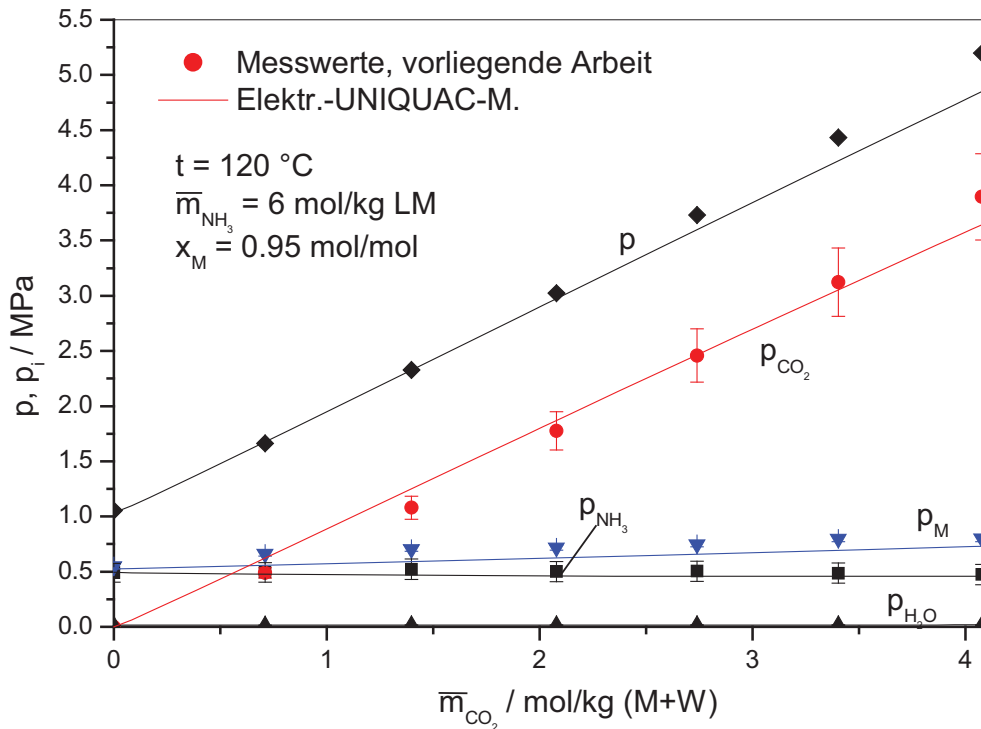


Abb. A 4.57: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

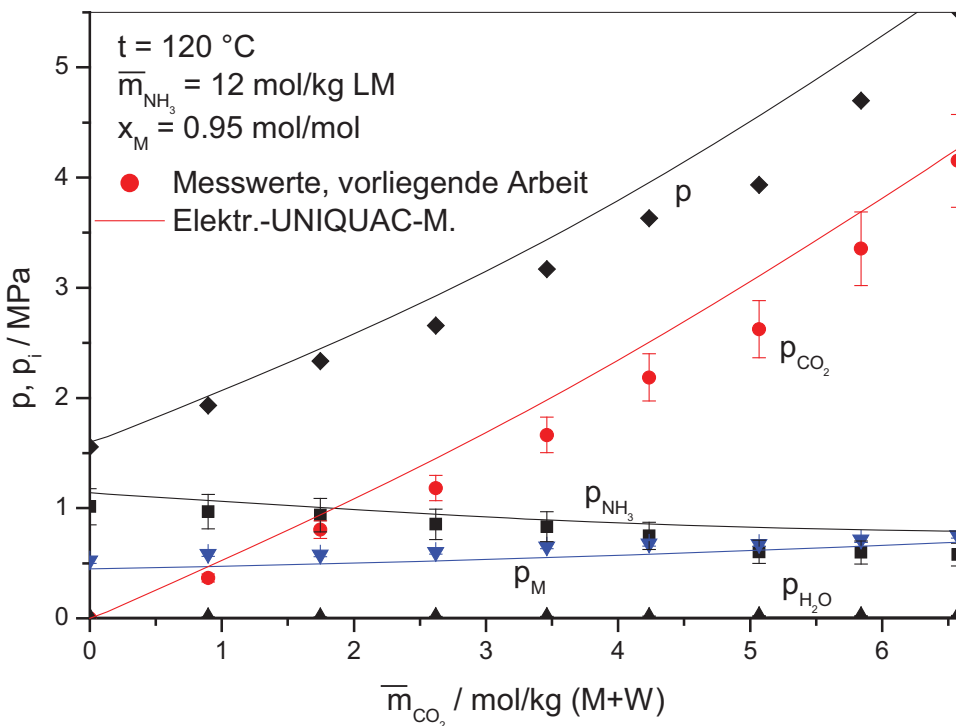


Abb. A 4.58: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

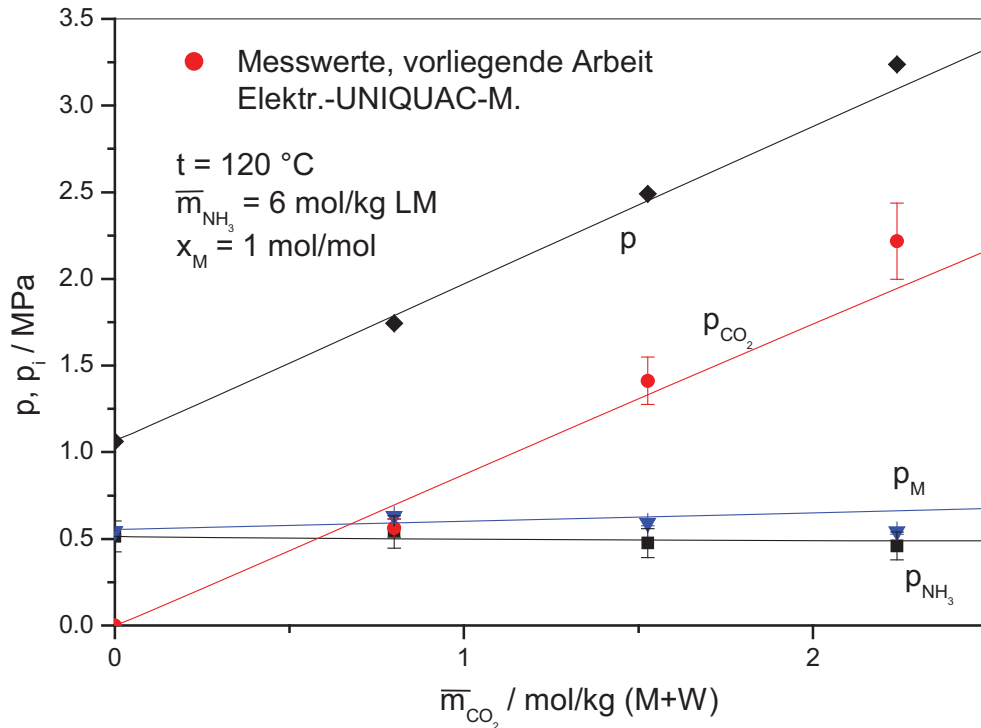


Abb. A 4.59: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

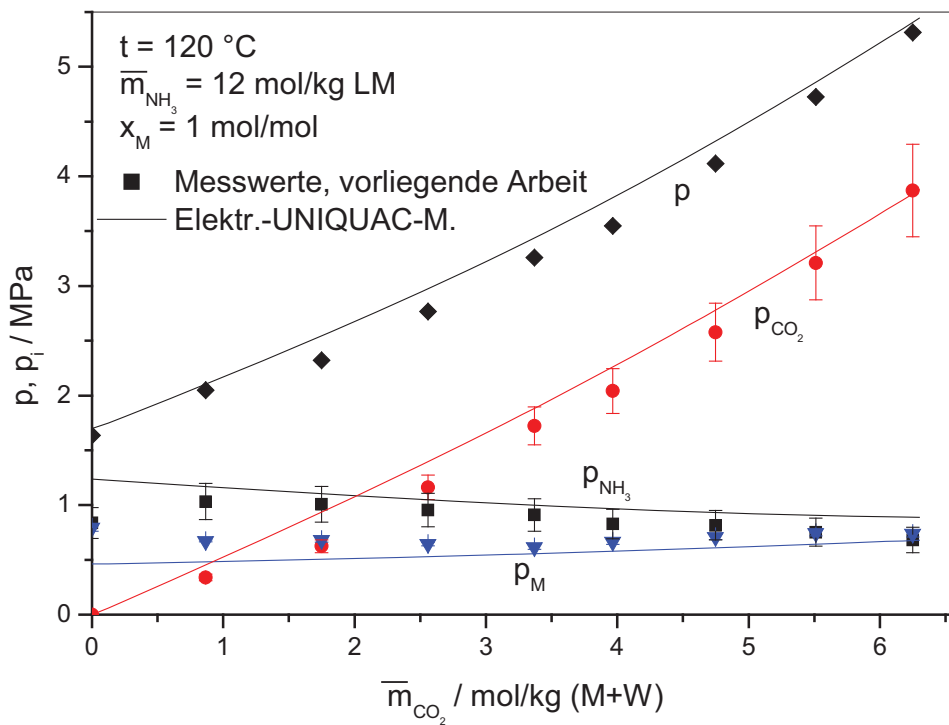


Abb. A 4.60: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Elektrolyt-UNIQUAC-Modells

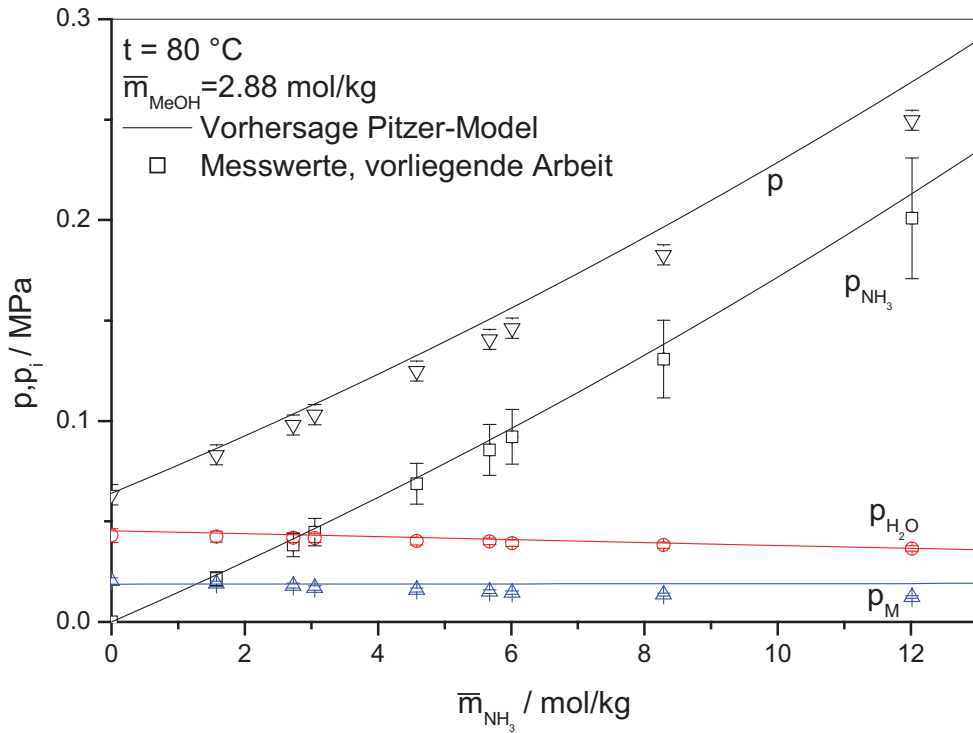


Abb. A 5.1: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells

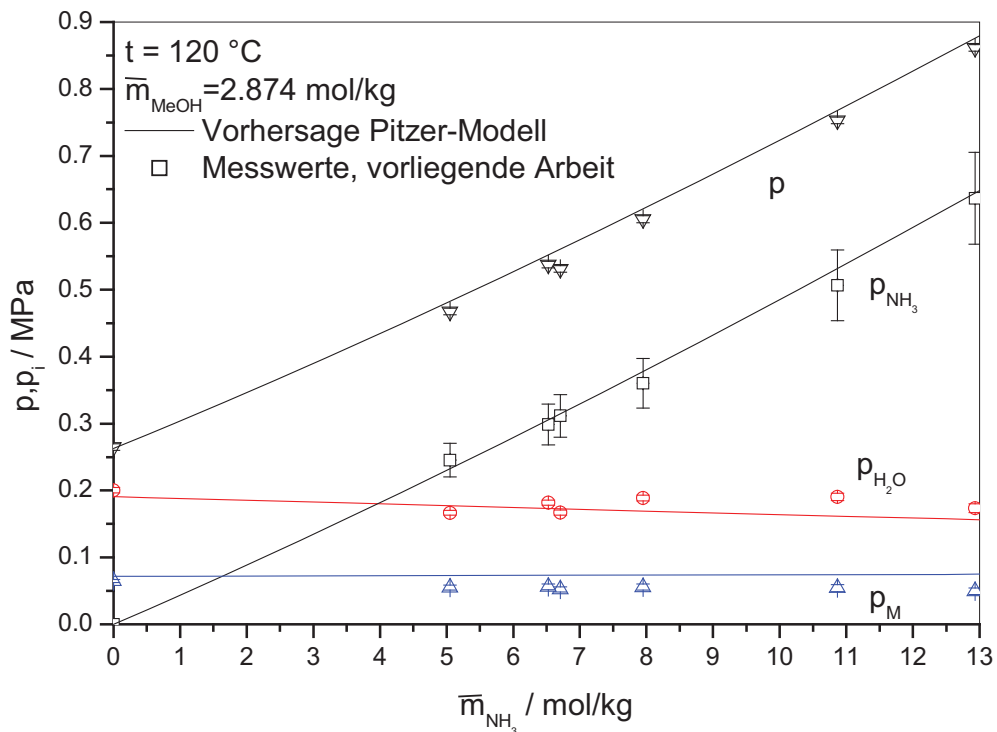


Abb. A 5.2: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells

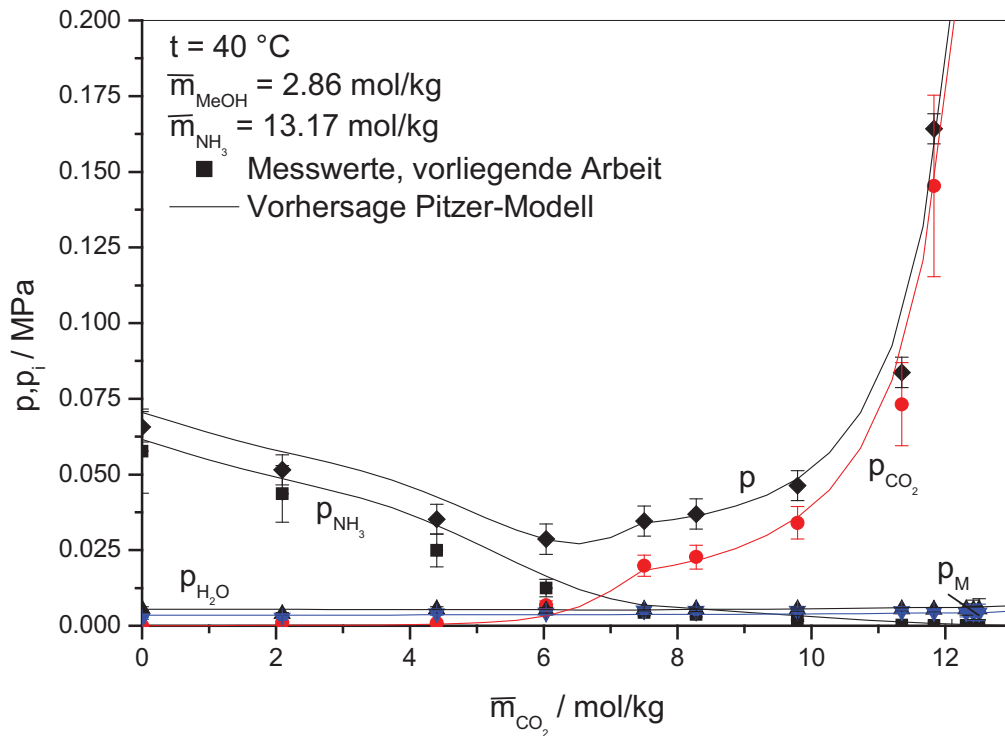


Abb. A 5.3: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 40 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells

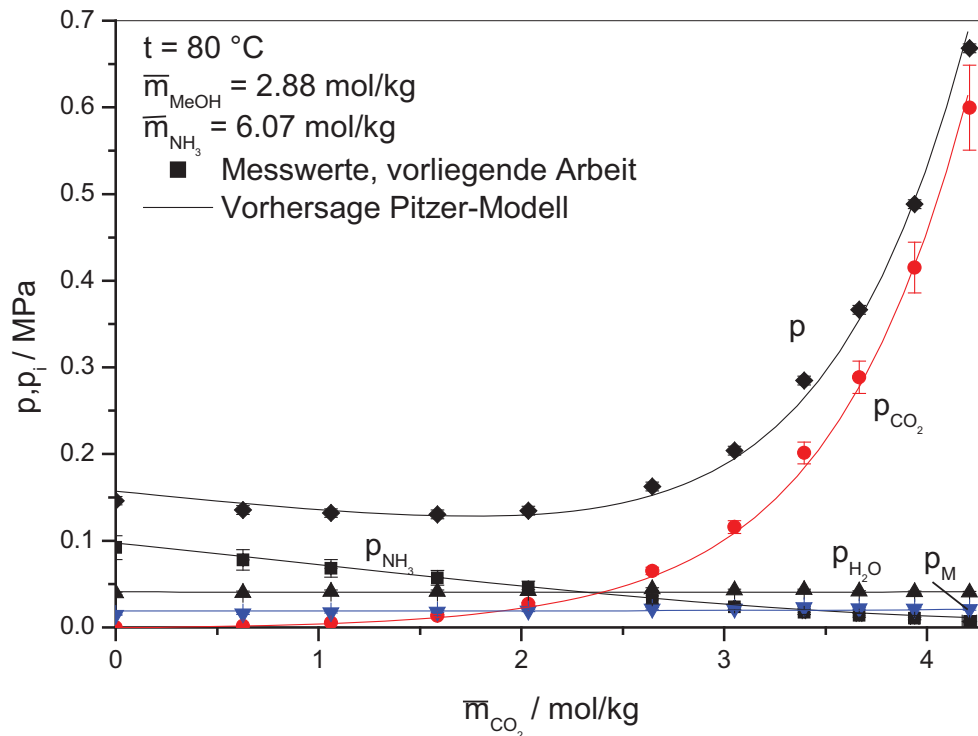


Abb. A 5.4: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells

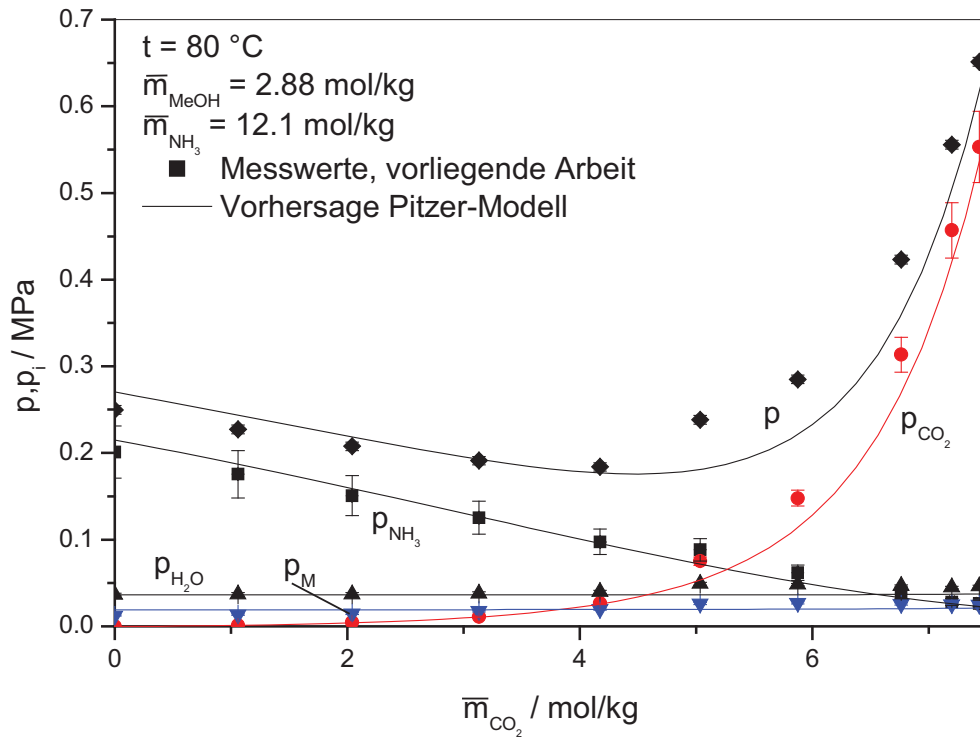


Abb. A 5.5: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 80 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells

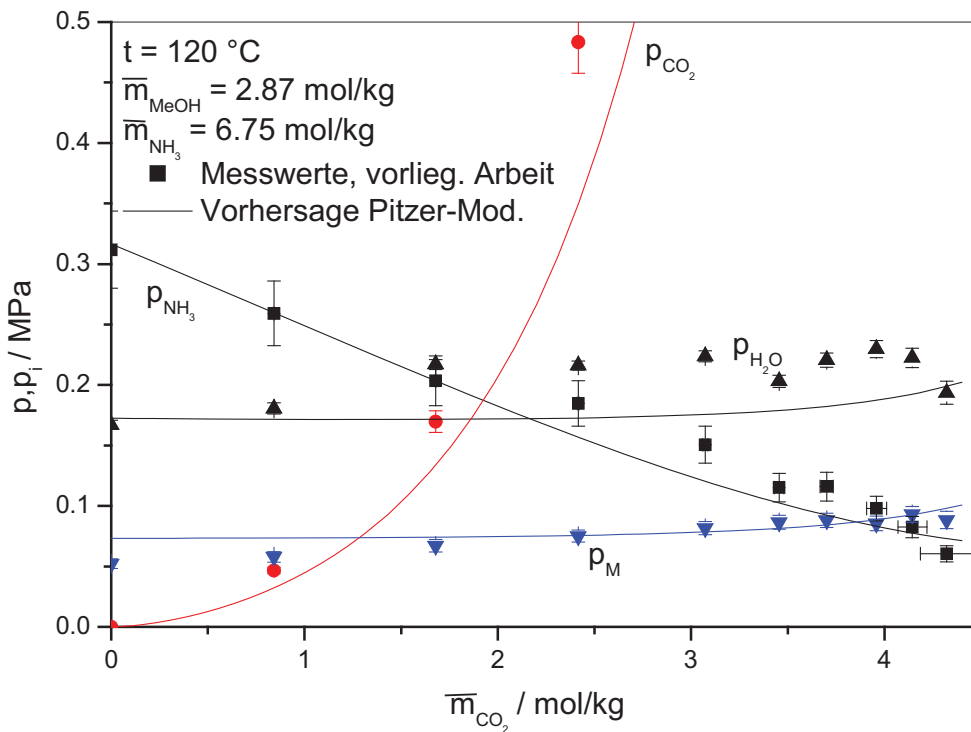


Abb. A 5.6: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells

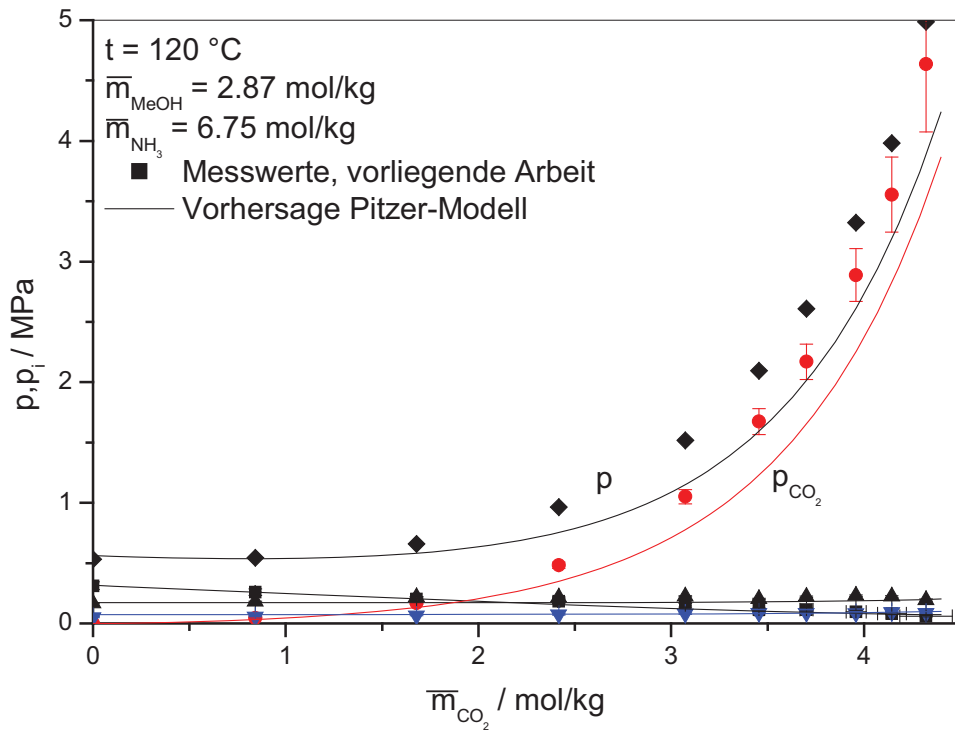


Abb. A 5.7: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells

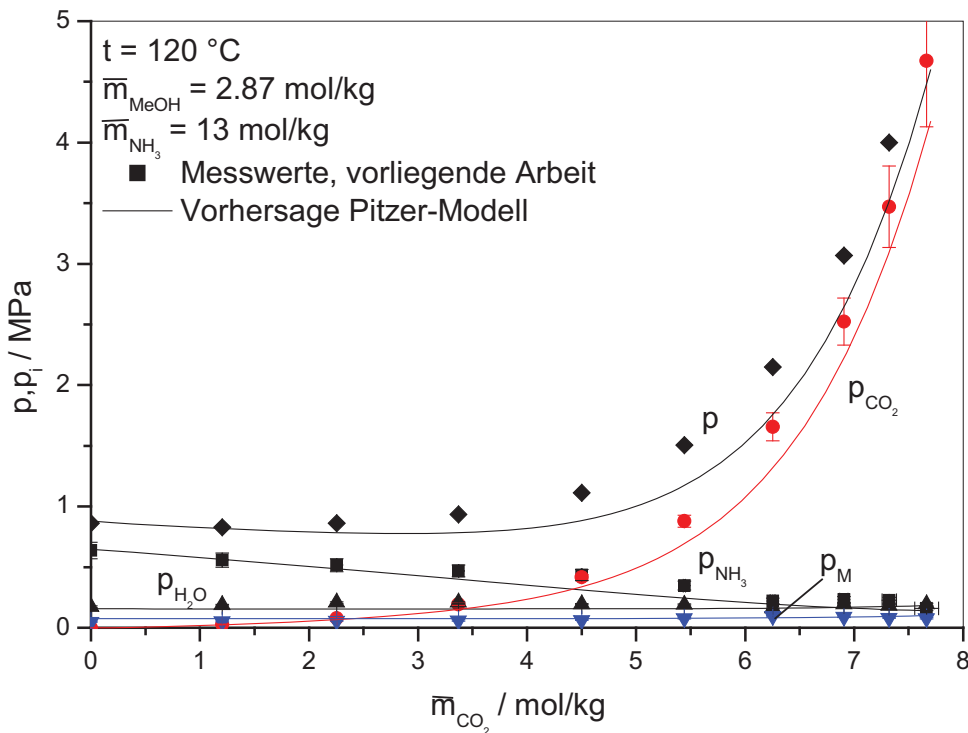


Abb. A 5.8: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells

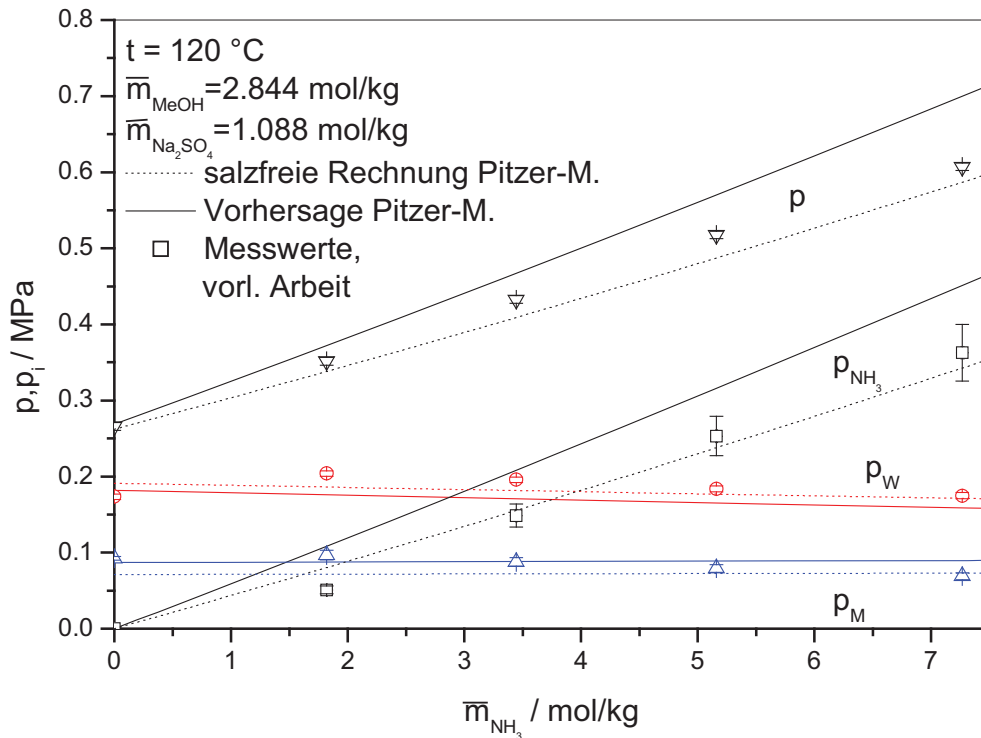


Abb. A 5.9: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen, salzhaltigen Lösungen von Methanol bei 120 °C: Vergleich experimenteller Daten mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells

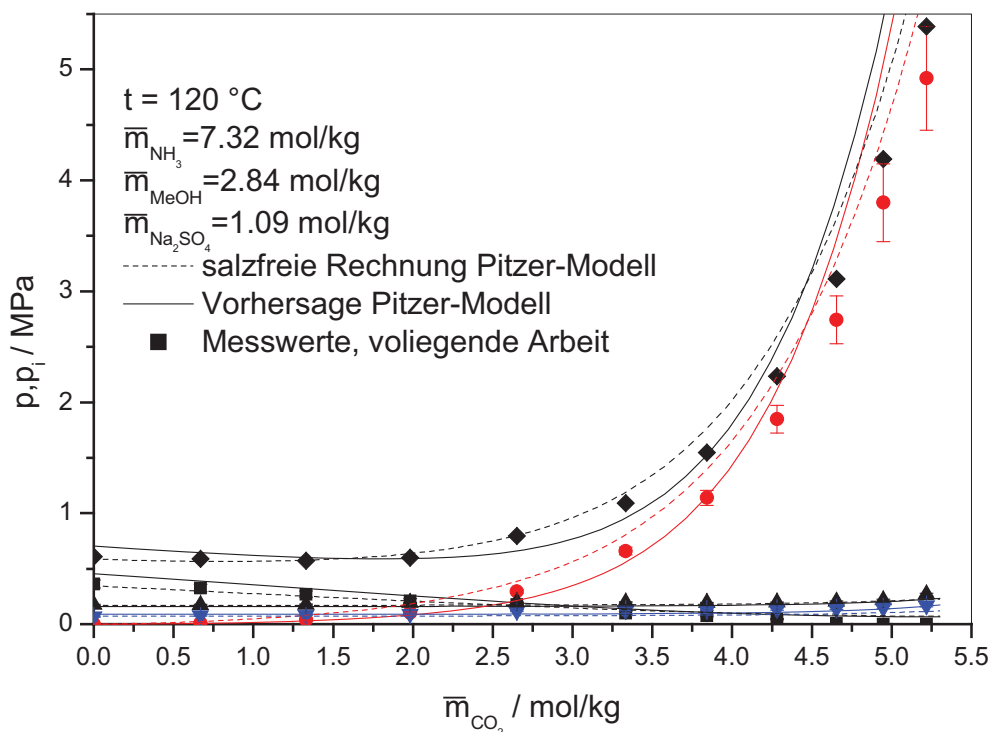


Abb. A 5.10: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in einer wässrigen Lösung von Methanol mit Natriumsulfat bei 120 °C: experimentelle Ergebnisse im Vergleich mit Rechenwerten des Pitzer-Modells

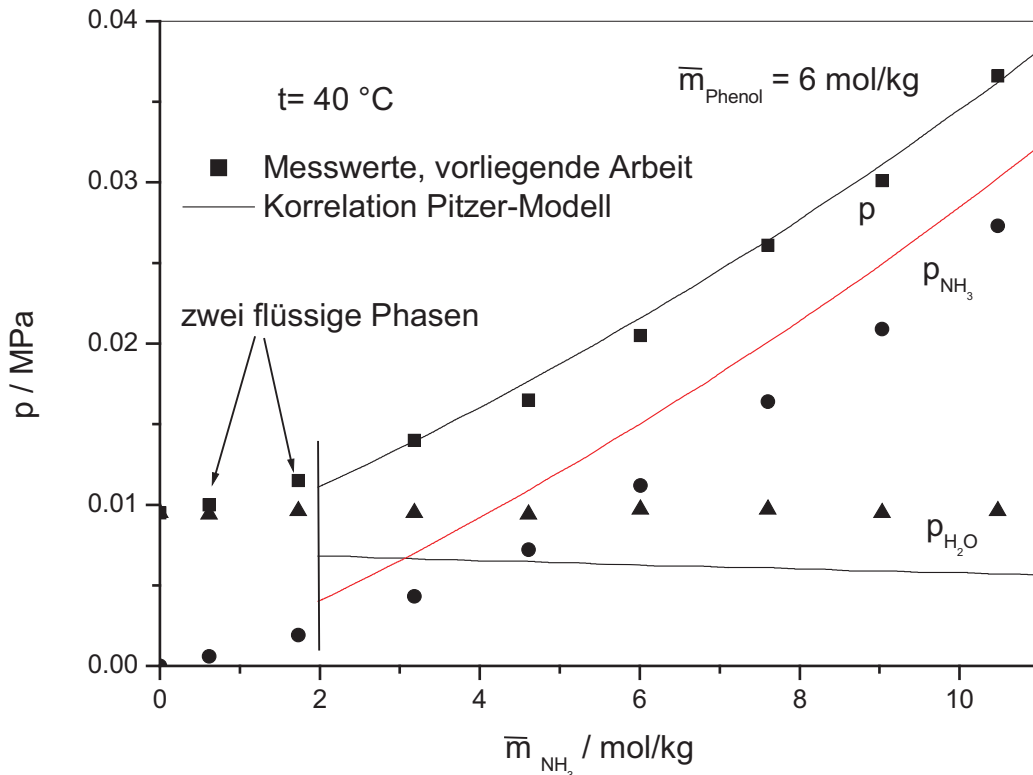


Abb. A 5.11: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Phenol bei 40 °C : Vergleich experimenteller Ergebnisse mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells

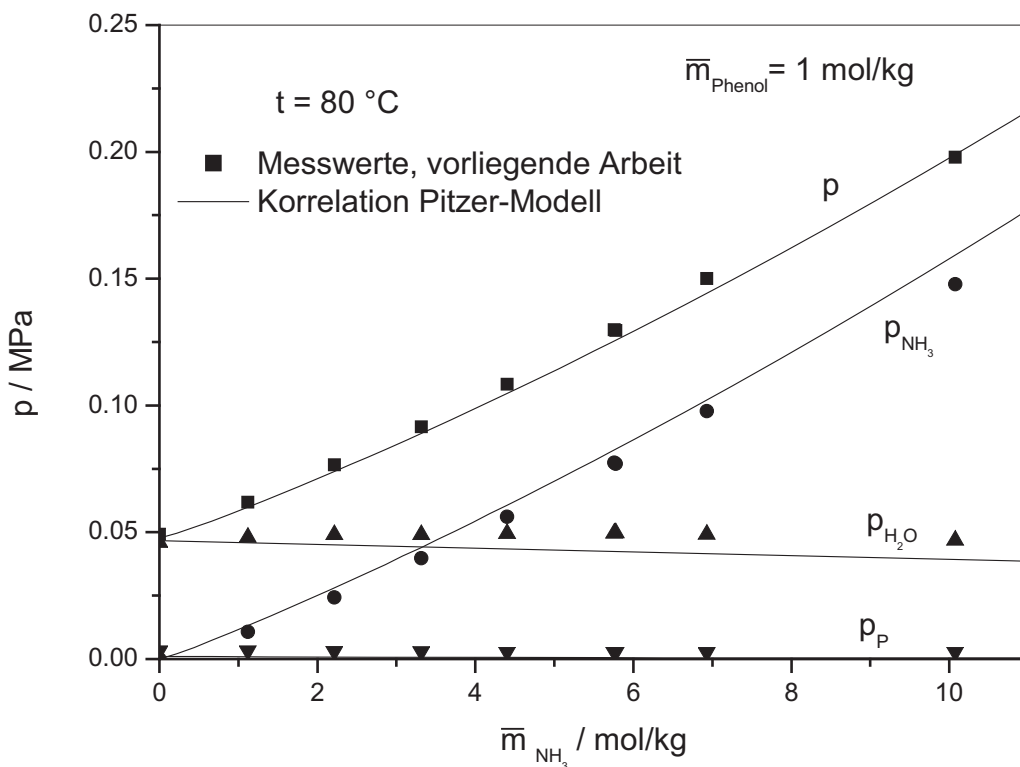


Abb. A 5.12: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Phenol bei 80 °C : Vergleich experimenteller Ergebnisse mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells

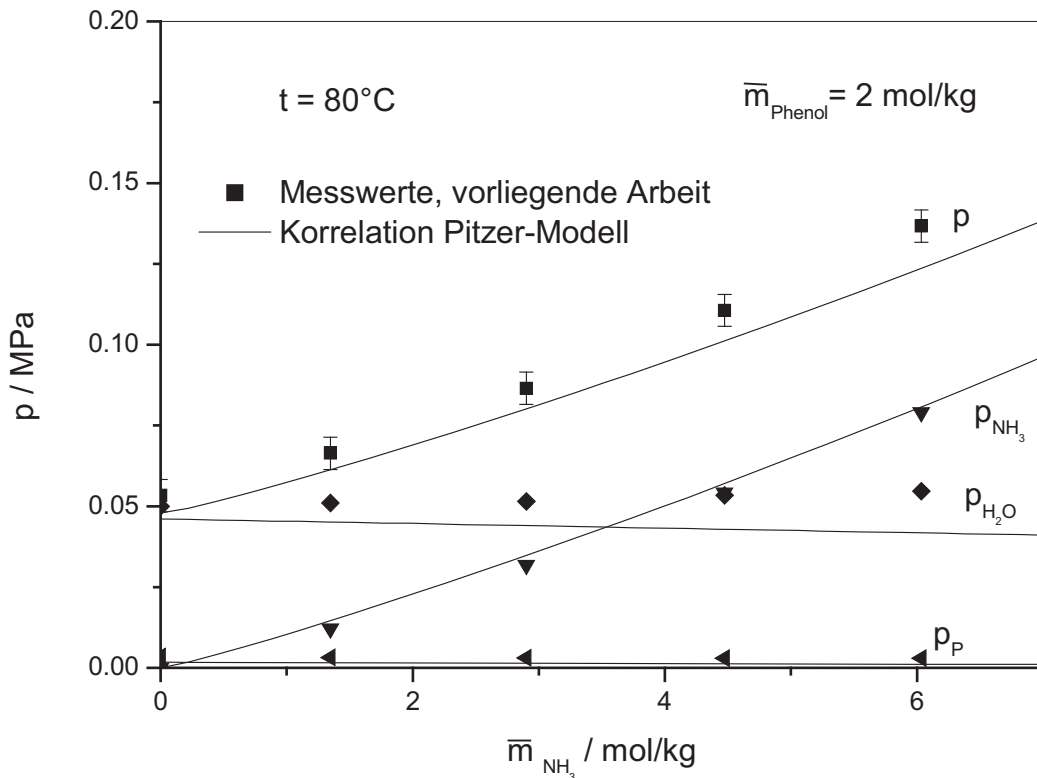


Abb. A 5.13: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Phenol bei 80 °C: Vergleich experimenteller Ergebnisse mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells

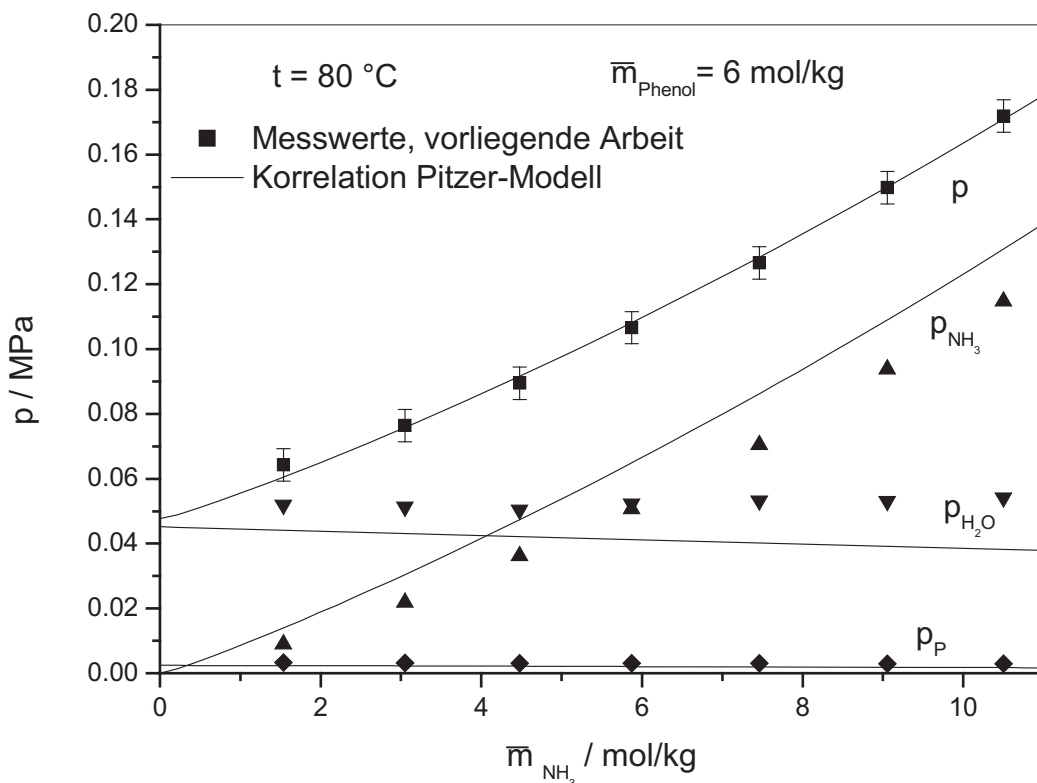


Abb. A 5.14: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Phenol bei 80 °C: Vergleich experimenteller Ergebnisse mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells

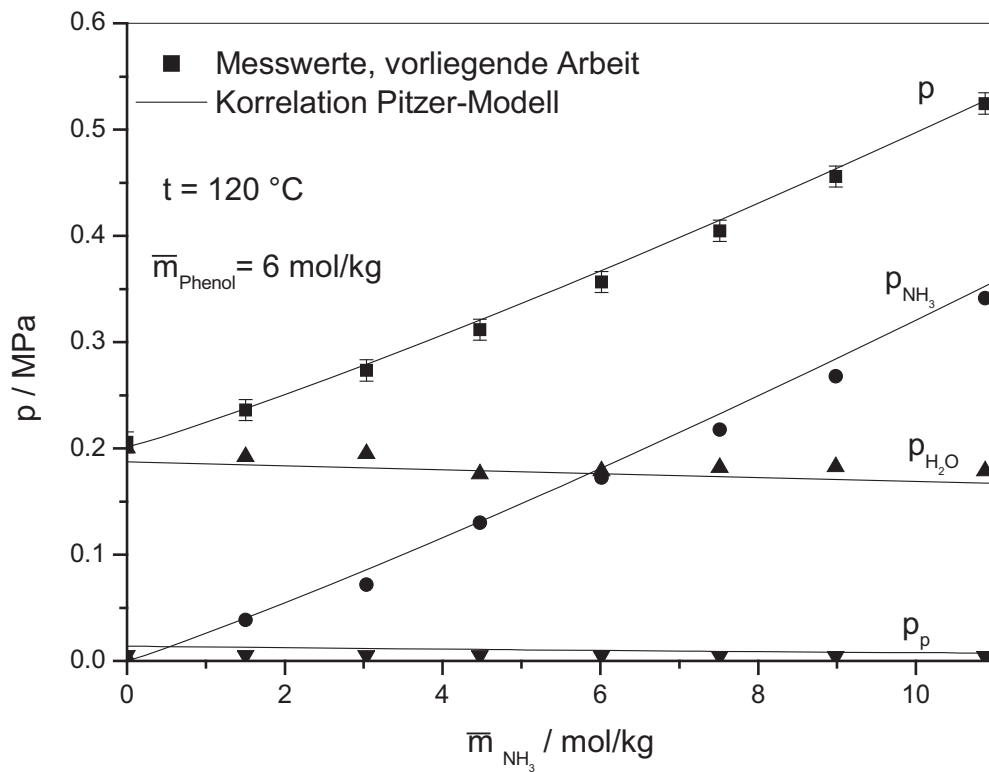


Abb. A 5.15: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Phenol bei 120 °C: Vergleich experimenteller Ergebnisse mit Rechenwerten unter Verwendung des Pitzer-Modells

A 6 Löslichkeit von Ammoniak in organisch- wässrig-salzhaltigen Lösungsmittelgemischen: Tabellen der experimentellen Ergebnisse

Tabelle A 6.1: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in Wasser

T K	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta\bar{m}_{\text{NH}_3}$ mol/kg	$10 \cdot p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
393.01	0	-	-	-	2.023	0.050	2.023	0.050
393.01	2.804	0.003	1.619	0.035	1.630	0.035	3.248	0.050
393.02	5.930	0.003	3.030	0.044	1.662	0.035	4.696	0.050
392.86	0	-	-	-	2.007	0.050	2.009	0.050
393.16	3.111	0.003	1.086	0.040	2.256	0.050	3.343	0.050
393.08	5.689	0.003	2.459	0.062	2.070	0.060	4.533	0.050
393.19	6.992	0.003	3.198	0.068	1.979	0.064	5.188	0.050
393.14	8.415	0.003	3.997	0.072	1.880	0.066	5.886	0.050
393.09	10.693	0.003	5.301	0.076	1.761	0.067	7.069	0.050
393.08	11.884	0.003	5.988	0.077	1.704	0.067	7.623	0.050

Tabelle A 6.2: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol

T K	x_M	Δx_M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta \bar{m}_{NH_3}$ mol/kg	$10 \cdot p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot p_M$ MPa	$10 \cdot \Delta p_M$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
313.16	0.050	0.002	0	-	-	-	0.064	0.031	0.040	0.019	0.105	0.050
313.13	0.050	0.002	1.849	0.004	0.054	0.017	0.081	0.024	0.032	0.010	0.167	0.050
313.14	0.050	0.002	3.263	0.004	0.118	0.029	0.076	0.017	0.026	0.006	0.221	0.050
313.15	0.050	0.002	4.537	0.004	0.173	0.035	0.074	0.014	0.024	0.005	0.271	0.050
313.12	0.050	0.002	6.031	0.004	0.241	0.041	0.071	0.011	0.023	0.004	0.335	0.050
313.17	0.049	0.002	0	-	-	-	0.068	0.032	0.037	0.018	0.106	0.050
313.17	0.049	0.002	6.312	0.004	0.247	0.041	0.077	0.011	0.023	0.003	0.348	0.050
313.20	0.049	0.002	7.745	0.004	0.323	0.047	0.073	0.009	0.021	0.003	0.417	0.050
313.21	0.049	0.002	9.188	0.005	0.404	0.053	0.067	0.007	0.021	0.002	0.492	0.050
313.16	0.049	0.002	10.725	0.005	0.494	0.060	0.063	0.006	0.021	0.002	0.578	0.050
313.14	0.049	0.002	12.030	0.005	0.570	0.066	0.067	0.006	0.020	0.002	0.657	0.050
313.22	0.248	0.009	0	-	-	-	0.052	0.014	0.134	0.037	0.187	0.050
313.14	0.248	0.009	1.756	0.004	0.053	0.012	0.066	0.014	0.127	0.027	0.246	0.050
313.11	0.248	0.009	3.337	0.004	0.141	0.026	0.061	0.010	0.111	0.019	0.315	0.050
313.10	0.248	0.009	4.252	0.004	0.190	0.031	0.058	0.008	0.107	0.016	0.356	0.050
313.07	0.248	0.009	6.056	0.004	0.292	0.040	0.059	0.007	0.100	0.012	0.450	0.050
313.54	0.245	0.009	0	-	-	-	0.063	0.016	0.128	0.034	0.195	0.050
313.16	0.245	0.009	6.515	0.005	0.312	0.042	0.068	0.007	0.097	0.011	0.476	0.050
313.06	0.245	0.009	8.082	0.005	0.420	0.051	0.063	0.006	0.089	0.009	0.571	0.050
313.16	0.245	0.009	10.586	0.006	0.604	0.065	0.062	0.005	0.086	0.007	0.752	0.050
313.13	0.245	0.009	11.961	0.006	0.718	0.074	0.057	0.004	0.084	0.007	0.860	0.050
313.15	0.498	0.022	0	-	-	-	0.048	0.010	0.202	0.042	0.254	0.050
313.23	0.498	0.022	1.376	0.004	0.052	0.010	0.062	0.010	0.190	0.033	0.304	0.050
313.13	0.498	0.022	2.860	0.004	0.146	0.023	0.057	0.008	0.175	0.026	0.380	0.050
313.13	0.498	0.022	4.319	0.005	0.249	0.034	0.055	0.006	0.164	0.020	0.467	0.050
313.76	0.498	0.022	6.050	0.005	0.383	0.045	0.057	0.005	0.161	0.016	0.602	0.050

Tabelle A 6.2: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol (Fortsetzung)

T K	x_M	Δx_M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta \bar{m}_{\text{NH}_3}$ mol/kg	$10 \cdot p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot p_M$ MPa	$10 \cdot \Delta p_M$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
313.14	0.497	0.022	0	-	-	-	0.043	0.009	0.203	0.043	0.247	0.050
313.07	0.497	0.022	7.574	0.006	0.508	0.055	0.050	0.004	0.153	0.014	0.712	0.050
313.04	0.497	0.022	8.959	0.006	0.638	0.067	0.050	0.003	0.145	0.012	0.833	0.050
313.10	0.497	0.022	10.395	0.007	0.782	0.081	0.050	0.003	0.143	0.011	0.975	0.050
313.12	0.497	0.022	11.916	0.009	0.946	0.100	0.048	0.003	0.143	0.011	1.136	0.050
313.15	0.735	0.037	0	-	-	-	0.016	0.003	0.281	0.047	0.297	0.050
313.10	0.735	0.037	1.509	0.004	0.043	0.011	0.014	0.003	0.320	0.089	0.377	0.050
313.13	0.735	0.037	2.995	0.005	0.140	0.027	0.010	0.001	0.329	0.091	0.478	0.050
313.13	0.735	0.037	4.541	0.008	0.262	0.078	0.005	0.001	0.335	0.190	0.602	0.050
313.14	0.735	0.037	6.015	0.019	0.454	0.221	0.006	0.001	0.278	0.116	0.739	0.050

Tabelle A6.2: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol (Fortsetzung)

T K	x_M	Δx_M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta \bar{m}_{NH_3}$ mol/kg	$10 \cdot p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot p_M$ MPa	$10 \cdot \Delta p_M$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
353.10	0.049	0.002	0	-	-	-	0.439	0.034	0.206	0.016	0.645	0.050
353.06	0.049	0.002	1.441	0.005	0.216	0.034	0.424	0.027	0.190	0.014	0.831	0.050
353.18	0.049	0.002	2.792	0.006	0.447	0.068	0.417	0.022	0.168	0.011	1.032	0.050
353.14	0.049	0.002	4.192	0.008	0.687	0.102	0.402	0.019	0.159	0.010	1.249	0.050
353.03	0.050	0.002	5.502	0.010	0.921	0.136	0.392	0.016	0.146	0.008	1.462	0.050
353.02	0.049	0.002	0	-	-	-	0.430	0.034	0.203	0.016	0.633	0.050
353.02	0.049	0.002	2.499	0.006	0.383	0.058	0.419	0.024	0.180	0.012	0.981	0.050
353.06	0.049	0.002	5.197	0.010	0.856	0.127	0.401	0.017	0.150	0.009	1.407	0.050
353.09	0.049	0.002	7.587	0.014	1.308	0.193	0.382	0.015	0.136	0.007	1.827	0.050
353.08	0.049	0.002	10.998	0.021	2.009	0.300	0.365	0.014	0.124	0.007	2.497	0.050
353.02	0.248	0.011	0	-	-	-	0.378	0.019	0.654	0.032	1.031	0.050
353.00	0.248	0.011	0.950	0.004	0.089	0.014	0.395	0.022	0.666	0.047	1.151	0.050
353.05	0.248	0.011	1.860	0.005	0.277	0.043	0.391	0.025	0.614	0.049	1.283	0.050
353.06	0.248	0.011	2.975	0.007	0.482	0.075	0.373	0.023	0.602	0.048	1.458	0.050
353.06	0.248	0.011	4.029	0.009	0.705	0.109	0.355	0.021	0.577	0.045	1.638	0.050
353.11	0.248	0.011	4.990	0.012	0.900	0.138	0.346	0.020	0.569	0.044	1.817	0.050
353.04	0.248	0.011	5.799	0.013	1.082	0.165	0.339	0.019	0.544	0.041	1.966	0.050
353.16	0.248	0.011	0	-	-	-	0.372	0.018	0.672	0.033	1.046	0.050
353.18	0.248	0.011	6.304	0.015	1.193	0.182	0.331	0.018	0.554	0.042	2.079	0.050
353.15	0.248	0.011	7.251	0.017	1.420	0.217	0.321	0.017	0.534	0.040	2.277	0.050
353.12	0.248	0.011	7.971	0.019	1.596	0.244	0.319	0.017	0.514	0.038	2.430	0.050
353.03	0.248	0.011	8.818	0.021	1.795	0.275	0.318	0.017	0.500	0.036	2.613	0.050
353.03	0.248	0.011	9.827	0.024	2.049	0.316	0.309	0.016	0.491	0.036	2.851	0.050
353.10	0.248	0.011	10.831	0.027	2.314	0.357	0.326	0.017	0.469	0.033	3.112	0.050
353.13	0.248	0.011	11.955	0.030	2.623	0.410	0.312	0.017	0.460	0.033	3.397	0.050

Tabelle A 6.2: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol (Fortsetzung)

T K	x _M	Δx _M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	Δ \bar{m}_{NH_3} mol/kg	10 · p _{NH₃} MPa	10 · Δp _{NH₃} MPa	10 · p _{H₂O} MPa	10 · Δp _{H₂O} MPa	10 · p _M MPa	10 · Δp _M MPa	10 · p MPa	10 · Δp MPa
353.23	0.491	0.024	0	-	-	-	0.299	0.012	1.025	0.039	1.326	0.050
353.30	0.491	0.024	1.040	0.005	0.143	0.024	0.300	0.025	1.032	0.120	1.476	0.050
353.26	0.491	0.024	1.685	0.006	0.298	0.050	0.301	0.027	0.986	0.116	1.586	0.050
353.25	0.491	0.024	2.866	0.009	0.568	0.093	0.292	0.024	0.946	0.106	1.806	0.050
353.19	0.491	0.024	4.147	0.013	0.880	0.141	0.278	0.021	0.913	0.098	2.074	0.050
353.17	0.491	0.024	5.186	0.016	1.164	0.185	0.270	0.019	0.872	0.090	2.307	0.050
353.14	0.491	0.024	6.058	0.019	1.397	0.222	0.266	0.018	0.848	0.086	2.513	0.050
353.20	0.499	0.025	0	-	-	-	0.286	0.012	1.037	0.039	1.322	0.050
353.13	0.499	0.025	6.244	0.020	1.452	0.232	0.256	0.018	0.867	0.091	2.575	0.050
353.19	0.499	0.025	7.184	0.023	1.722	0.274	0.259	0.017	0.841	0.085	2.822	0.050
353.19	0.499	0.025	8.015	0.026	1.983	0.318	0.251	0.016	0.815	0.082	3.050	0.050
353.19	0.499	0.025	8.842	0.029	2.235	0.361	0.249	0.016	0.799	0.080	3.284	0.050
353.17	0.499	0.025	9.890	0.034	2.565	0.422	0.242	0.016	0.783	0.079	3.591	0.050
353.14	0.499	0.025	10.927	0.038	2.918	0.489	0.237	0.016	0.754	0.076	3.913	0.050
353.12	0.499	0.025	11.914	0.043	3.244	0.557	0.231	0.016	0.738	0.076	4.214	0.050
353.18	0.750	0.039	0	-	-	-	0.172	0.006	1.394	0.045	1.567	0.050
353.10	0.750	0.039	1.925	0.009	0.433	0.085	0.166	0.023	1.360	0.300	1.963	0.050
353.11	0.750	0.039	3.717	0.017	0.990	0.173	0.166	0.017	1.250	0.232	2.410	0.050
353.06	0.750	0.039	4.854	0.022	1.357	0.235	0.161	0.015	1.200	0.218	2.718	0.050
353.04	0.750	0.039	5.937	0.028	1.718	0.302	0.156	0.014	1.168	0.211	3.047	0.050
353.22	0.751	0.038	0	-	-	-	0.174	0.006	1.388	0.045	1.561	0.050
353.34	0.751	0.038	7.524	0.038	2.306	0.425	0.150	0.014	1.125	0.206	3.586	0.050
353.16	0.751	0.038	8.877	0.049	2.817	0.553	0.144	0.014	1.065	0.196	4.032	0.050
353.20	0.751	0.038	10.526	0.063	3.451	0.721	0.146	0.015	1.019	0.183	4.616	0.050
353.17	0.751	0.038	11.711	0.078	3.929	0.911	0.134	0.016	0.996	0.195	5.064	0.050

Tabelle A 6.2: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol (Fortsetzung)

T K	x_M	Δx_M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta \bar{m}_{NH_3}$ mol/kg	$10 \cdot p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot p_M$ MPa	$10 \cdot \Delta p_M$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
353.10	0.946	0.067	0	-	-	-	0.035	0.001	1.724	0.049	1.760	0.050
353.12	0.946	0.067	1.613	0.006	0.374	0.036	0.052	0.018	1.730	0.045	2.160	0.050
353.03	0.946	0.067	3.348	0.010	0.948	0.090	0.049	0.017	1.646	0.043	2.645	0.050
353.09	0.946	0.067	4.850	0.014	1.484	0.142	0.052	0.016	1.591	0.044	3.130	0.050
353.08	0.946	0.067	6.002	0.018	1.933	0.187	0.049	0.016	1.542	0.045	3.524	0.050
353.12	0.959	0.069	0	-	-	-	0.026	0.001	1.748	0.049	1.773	0.050
353.20	0.959	0.069	7.921	0.025	2.739	0.268	0.044	0.015	1.516	0.048	4.313	0.050
353.17	0.959	0.069	9.234	0.030	3.312	0.328	0.044	0.015	1.451	0.049	4.809	0.050
353.04	0.959	0.069	10.617	0.035	3.908	0.392	0.045	0.014	1.402	0.050	5.356	0.050
353.18	0.959	0.069	11.906	0.040	4.492	0.455	0.046	0.014	1.379	0.051	5.918	0.050
353.12	1.000	0.083	0	-	-	-	0.006	0.018	1.807	0.053	1.810	0.050
353.09	1.000	0.083	1.334	0.006	0.308	0.029	0.017	0.019	1.824	0.047	2.151	0.050
353.07	1.000	0.083	2.726	0.008	0.763	0.073	0.019	0.018	1.763	0.044	2.544	0.050
353.10	1.000	0.083	3.782	0.011	1.137	0.108	0.021	0.017	1.722	0.044	2.880	0.050
353.11	1.000	0.083	5.546	0.017	1.822	0.176	0.019	0.017	1.644	0.047	3.485	0.050
353.11	1.000	0.083	7.280	0.023	2.535	0.247	0.026	0.016	1.575	0.049	4.137	0.050
353.11	1.000	0.083	8.695	0.028	3.150	0.310	0.025	0.015	1.521	0.050	4.697	0.050
353.11	1.000	0.083	11.170	0.038	4.255	0.428	0.036	0.015	1.438	0.052	5.730	0.050
353.11	1.000	0.083	12.998	0.046	5.143	0.529	0.028	0.014	1.354	0.052	6.527	0.050
353.06	1.000	0.083	0	-	-	-	0.005	0.018	1.805	0.053	1.810	0.050
353.04	1.000	0.083	6.292	0.017	2.100	0.177	0.019	0.021	1.616	0.048	3.735	0.050

Tabelle A 6.2: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol (Fortsetzung)

T K	x _M	Δx _M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	Δ \bar{m}_{NH_3} mol/kg	10 · pNH ₃ MPa	10 · ΔpNH ₃ MPa	10 · p _{H₂O} MPa	10 · Δp _{H₂O} MPa	10 · p _M MPa	10 · Δp _M MPa	10 · p MPa	10 · Δp MPa
393.12	0.049	0.002	0	-	-	-	2.115	0.046	0.535	0.025	2.650	0.050
393.15	0.049	0.002	4.628	0.004	2.089	0.151	2.042	0.049	0.540	0.059	4.675	0.050
393.13	0.049	0.002	6.146	0.005	2.678	0.202	2.122	0.057	0.510	0.056	5.311	0.050
393.24	0.049	0.002	0.000	0.000	0	0	2.099	0.046	0.535	0.025	2.635	0.050
393.33	0.049	0.002	5.978	0.005	2.563	0.188	2.274	0.056	0.530	0.058	5.375	0.050
393.26	0.049	0.002	7.281	0.006	3.121	0.235	2.426	0.064	0.500	0.055	6.054	0.050
393.26	0.049	0.002	9.955	0.008	4.442	0.373	2.600	0.081	0.471	0.052	7.532	0.050
393.10	0.049	0.002	11.847	0.011	5.614	0.562	2.531	0.097	0.453	0.052	8.613	0.050
393.22	0.246	0.009	0	-	-	-	1.456	0.052	2.500	0.058	3.955	0.050
393.14	0.246	0.009	1.444	0.003	0.683	0.048	1.634	0.037	2.223	0.249	4.543	0.050
393.17	0.246	0.009	2.965	0.004	1.326	0.094	1.698	0.040	2.190	0.245	5.216	0.050
393.18	0.246	0.009	4.431	0.005	1.982	0.145	1.803	0.045	2.134	0.239	5.924	0.050
393.17	0.246	0.009	5.938	0.006	2.762	0.219	1.824	0.052	2.107	0.237	6.696	0.050
393.13	0.250	0.010	0	-	-	-	1.198	0.047	2.737	0.057	3.922	0.050
393.09	0.250	0.010	2.603	0.004	1.209	0.086	1.485	0.038	2.265	0.257	4.959	0.050
393.07	0.250	0.010	5.330	0.005	2.207	0.164	1.828	0.047	2.171	0.243	6.211	0.050
393.20	0.250	0.010	7.558	0.007	3.212	0.257	2.077	0.059	2.075	0.233	7.371	0.050
393.12	0.250	0.010	8.983	0.008	3.962	0.347	2.122	0.068	2.057	0.232	8.148	0.050
393.13	0.250	0.010	10.623	0.011	4.931	0.525	1.995	0.076	2.169	0.250	9.100	0.050
393.15	0.250	0.010	11.708	0.013	5.528	0.662	1.970	0.082	2.250	0.262	9.762	0.050
393.15	0.494	0.022	0	-	-	-	0.892	0.040	4.010	0.057	4.914	0.050
393.08	0.494	0.022	1.376	0.004	0.616	0.047	1.128	0.043	3.703	0.474	5.446	0.050
393.11	0.494	0.022	3.039	0.005	1.358	0.104	1.287	0.044	3.623	0.447	6.269	0.050
393.18	0.494	0.022	4.643	0.006	2.039	0.162	1.455	0.047	3.653	0.441	7.153	0.050
393.09	0.494	0.022	6.075	0.008	2.783	0.242	1.539	0.052	3.682	0.442	8.082	0.050

Tabelle A 6.2: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol (Fortsetzung)

T K	x_M	Δx_M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta \bar{m}_{NH_3}$ mol/kg	$10 \cdot \rho_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta \rho_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot \rho_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot \Delta \rho_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot p_M$ MPa	$10 \cdot \Delta p_M$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
393.13	0.498	0.023	0	-	-	-	1.236	0.056	3.596	0.462	4.842	0.050
393.19	0.498	0.023	6.611	0.007	2.713	0.231	1.579	0.053	4.007	0.486	8.300	0.050
392.76	0.498	0.023	9.020	0.017	4.476	0.615	1.393	0.059	3.988	0.503	9.835	0.050
392.69	0.498	0.023	10.412	0.020	5.145	0.760	1.509	0.067	4.190	0.528	10.869	0.100
392.81	0.498	0.023	11.643	0.027	6.008	1.105	1.493	0.071	4.237	0.541	11.739	0.100
393.25	0.750	0.039	0	-	-	-	0.739	0.021	4.893	0.048	5.646	0.050
393.30	0.750	0.039	1.605	0.005	0.647	0.098	0.674	0.075	5.180	0.767	6.502	0.050
393.34	0.750	0.039	3.469	0.011	2.135	0.305	0.622	0.063	4.916	0.698	7.673	0.050
393.23	0.750	0.039	4.851	0.015	3.335	0.454	0.590	0.053	4.676	0.627	8.601	0.050
393.27	0.750	0.039	5.737	0.018	4.094	0.555	0.564	0.049	4.589	0.612	9.247	0.050
393.40	0.747	0.039	0	-	-	-	0.688	0.019	5.008	0.048	5.670	0.050
393.05	0.747	0.039	7.454	0.023	5.632	0.766	0.566	0.047	4.407	0.567	10.609	0.100
393.09	0.747	0.039	9.212	0.028	7.142	1.003	0.554	0.047	4.289	0.553	11.990	0.100
392.92	0.747	0.039	11.076	0.034	8.783	1.305	0.537	0.047	4.138	0.544	13.450	0.100
392.99	0.747	0.039	11.985	0.037	9.612	1.481	0.526	0.048	4.106	0.551	14.251	0.100
393.03	0.946	0.063	0	-	-	-	0.111	0.004	6.221	0.049	6.330	0.050
393.05	0.946	0.063	1.452	0.010	1.329	0.301	0.128	0.032	5.797	0.129	7.255	0.050
393.11	0.946	0.063	2.826	0.016	2.578	0.569	0.144	0.031	5.488	0.192	8.220	0.050
393.09	0.946	0.063	4.357	0.020	3.805	0.693	0.136	0.030	5.471	0.200	9.401	0.050
393.11	0.946	0.063	5.786	0.023	4.917	0.851	0.136	0.031	5.478	0.222	10.537	0.100
393.13	0.953	0.070	0	-	-	-	0.084	0.003	6.255	0.049	6.333	0.050
393.09	0.953	0.070	5.244	0.030	4.467	0.784	0.113	0.030	5.415	0.213	9.899	0.100
393.13	0.953	0.070	7.258	0.037	6.154	1.037	0.112	0.031	5.551	0.240	11.848	0.100
393.09	0.953	0.070	8.836	0.039	6.846	1.151	0.124	0.034	6.077	0.264	13.049	0.100
393.13	0.953	0.070	10.314	0.046	8.620	1.419	0.112	0.031	5.626	0.268	14.370	0.100
392.98	0.953	0.070	11.626	0.051	10.130	1.653	0.103	0.029	5.265	0.268	15.560	0.100

Tabelle A 6.2: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Lösungen von Methanol (Fortsetzung)

T K	x_M	Δx_M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta \bar{m}_{\text{NH}_3}$ mol/kg	$10 \cdot p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot p_M$ MPa	$10 \cdot \Delta p_M$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
392.99	1.000	0.000	0	-	-	-	0.017	0.001	6.314	0.050	6.325	0.050
393.09	1.000	0.000	1.533	0.022	2.469	0.486	0.008	0.027	4.925	0.138	7.404	0.050
393.06	1.000	0.000	3.039	0.026	2.912	0.591	0.011	0.030	5.534	0.194	8.461	0.050
393.07	1.000	0.000	4.547	0.031	4.102	0.734	0.011	0.030	5.504	0.208	9.625	0.050
393.04	1.000	0.000	5.748	0.036	5.139	0.883	0.011	0.030	5.455	0.227	10.617	0.100
393.00	1.000	0.000	0	-	-	-	0.015	0.001	6.353	0.050	6.368	0.050
393.12	1.000	0.000	7.211	0.037	6.638	1.106	0.012	0.028	5.224	0.238	11.898	0.100
393.06	1.000	0.000	9.243	0.042	8.293	1.364	0.011	0.029	5.361	0.259	13.689	0.100
393.07	1.000	0.000	11.300	0.045	9.498	1.560	0.013	0.032	5.946	0.289	15.490	0.100
392.94	1.000	0.000	11.989	0.046	9.886	1.623	0.010	0.033	6.149	0.300	16.061	0.100

Tabelle A 6.3: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in Methanol:
von Xia (1999) (Gaslöslichkeitsapparat)

T K	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	10 · p MPa	T K	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	10 · p MPa	T K	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	10 · p MPa
313.742	1.0224	0.645	354.363	0	1.926	394.998	0	6.756
313.746	3.8855	0.865	354.376	1.5064	2.476	394.998	0	6.719
313.743	7.0865	1.225	354.378	4.3126	3.366	394.978	2.1816	8.356
313.751	10.6641	1.605	354.378	4.3126	3.342	394.978	2.1816	8.327
313.744	13.0814	2.106	354.374	5.6763	3.836	394.992	3.5475	9.406
313.757	15.1801	2.596	354.374	5.6763	3.799	394.992	3.5475	9.360
313.757	15.1801	2.607	354.373	7.9075	4.726	394.993	7.6343	12.686
313.750	19.1408	3.056	354.373	7.9075	4.702	394.993	7.6343	12.629
313.750	19.1408	3.089	354.370	10.9678	5.996	395.000	11.4861	16.187
313.748	23.6344	4.096	354.370	10.9678	5.959	395.000	11.4861	16.138
313.748	23.6344	4.107	354.373	12.6832	6.746	394.996	12.2726	16.997
313.750	26.6399	4.616	354.373	12.6832	6.698	394.996	12.2726	16.924
313.750	26.6399	4.602	354.369	13.1238	6.966	395.004	15.9368	20.307
313.743	35.3384	5.966	354.369	13.1238	6.920	395.004	15.9368	20.223
313.743	35.3384	5.952	354.376	15.3497	7.966	394.986	24.9347	27.913
313.746	43.6569	6.976	354.376	15.3497	7.929	395.005	34.5383	35.091
313.746	43.6569	6.999	354.376	20.2279	10.206	394.994	46.6306	42.260
313.752	48.3169	7.596	354.376	20.2279	10.160			
313.752	48.3169	7.605	354.367	23.7492	11.666			
313.757	60.0048	8.746	354.367	23.7492	11.620			
313.757	60.0048	8.746	354.378	30.3640	14.236			
313.747	66.3537	9.116	354.378	30.3640	14.190			
313.747	66.3537	9.139	354.373	41.1808	18.037			
			354.373	41.1808	17.965			

Tabelle A 6.4: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen, methanol- und natriumchloridhaltigen Lösungen

T K	\bar{m}_{NaCl} mol/kg	$\Delta\bar{m}_{\text{NaCl}}$ mol/kg	x_M	Δx_M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta\bar{m}_{\text{NH}_3}$ mol/kg	$10 \cdot p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot p_M$ MPa	$10 \cdot \Delta p_M$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
353.03	2.005	0.001	0.246	0.009	0	-	-	-	0.316	0.016	0.747	0.035	1.064	0.050
353.11	2.005	0.001	0.246	0.009	1.358	0.005	0.186	0.029	0.344	0.024	0.725	0.065	1.257	0.050
353.04	2.005	0.001	0.246	0.009	2.417	0.007	0.403	0.064	0.339	0.024	0.674	0.060	1.417	0.050
353.15	2.004	0.001	0.246	0.009	3.713	0.010	0.706	0.111	0.299	0.020	0.641	0.058	1.647	0.050
353.09	2.004	0.001	0.246	0.009	4.800	0.012	0.903	0.139	0.326	0.020	0.612	0.050	1.842	0.050
353.06	2.004	0.001	0.246	0.009	5.939	0.015	1.155	0.178	0.315	0.018	0.588	0.047	2.059	0.050
353.09	0.733	0.001	0.500	0.023	0	-	-	-	0.257	0.011	1.062	0.040	1.320	0.050
353.07	0.733	0.001	0.500	0.023	1.215	0.005	0.169	0.029	0.276	0.026	1.067	0.137	1.516	0.050
353.12	0.733	0.001	0.500	0.023	2.522	0.008	0.477	0.080	0.268	0.024	1.008	0.126	1.756	0.050
353.12	0.733	0.001	0.500	0.023	3.652	0.012	0.765	0.125	0.264	0.021	0.952	0.110	1.981	0.050
353.10	0.733	0.001	0.500	0.023	4.864	0.016	1.083	0.174	0.250	0.019	0.915	0.102	2.249	0.050
353.16	0.733	0.001	0.500	0.023	6.030	0.020	1.386	0.222	0.254	0.018	0.893	0.096	2.534	0.050
353.05	0.255	0.001	0.747	0.038	0	-	-	-	0.178	0.007	1.367	0.044	1.546	0.050
353.06	0.255	0.001	0.747	0.038	1.657	0.008	0.369	0.072	0.192	0.025	1.320	0.260	1.882	0.050
353.05	0.255	0.001	0.747	0.038	2.876	0.013	0.739	0.132	0.175	0.019	1.255	0.232	2.169	0.050
353.07	0.255	0.001	0.747	0.038	3.983	0.018	1.070	0.186	0.167	0.016	1.225	0.223	2.463	0.050
353.06	0.255	0.001	0.747	0.038	4.975	0.022	1.396	0.240	0.170	0.015	1.171	0.199	2.737	0.050
353.08	0.255	0.001	0.747	0.038	5.869	0.027	1.703	0.297	0.158	0.014	1.146	0.202	3.007	0.050

Tabelle A 6.4: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen, methanol- und natriumchloridhaltigen Lösungen (Fortsetzung)

T K	\bar{m}_{NaCl} mol/kg	$\Delta\bar{m}_{\text{NaCl}}$ mol/kg	x_M	Δx_M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta\bar{m}_{\text{NH}_3}$ mol/kg	$10 \cdot p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot p_M$ MPa	$10 \cdot \Delta p_M$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
392.57	2.024	0.001	0.246	0.009	0	-	-	0.817	0.022	0.817	3.106	0.044	3.924	0.050
392.61	2.022	0.001	0.247	0.009	3.004	0.006	1.589	1.154	0.054	1.154	2.504	0.213	5.254	0.050
392.63	2.022	0.001	0.247	0.009	4.645	0.008	2.406	1.251	0.056	1.251	2.393	0.196	6.068	0.050
392.67	2.022	0.001	0.247	0.009	6.394	0.011	3.295	1.319	0.057	1.319	2.305	0.185	6.930	0.050
393.18	0.999	0.001	0.245	0.010	0	-	-	0.987	0.026	0.987	2.978	0.044	3.967	0.050
393.23	0.998	0.001	0.245	0.010	2.005	0.003	0.990	1.225	0.052	1.225	2.567	0.211	4.784	0.050
393.01	0.998	0.001	0.245	0.010	3.166	0.006	1.652	1.184	0.054	1.184	2.436	0.203	5.281	0.050
393.00	0.998	0.001	0.245	0.010	4.803	0.008	2.444	1.304	0.056	1.304	2.305	0.184	6.058	0.050
393.20	0.998	0.001	0.245	0.010	6.267	0.010	3.194	1.406	0.058	1.406	2.230	0.174	6.830	0.050
393.06	1.013	0.002	0.497	0.026	0	-	-	0.793	0.022	0.793	4.197	0.047	4.996	0.050
393.04	1.012	0.002	0.497	0.026	1.534	0.004	0.756	0.876	0.066	0.876	4.070	0.503	5.699	0.050
392.98	1.012	0.002	0.497	0.026	3.054	0.008	1.795	0.880	0.065	0.880	3.810	0.454	6.488	0.050
393.02	1.012	0.002	0.497	0.026	4.715	0.012	2.773	0.965	0.064	0.965	3.698	0.406	7.432	0.050
392.97	1.011	0.002	0.498	0.026	6.036	0.015	3.744	0.944	0.060	0.944	3.547	0.383	8.241	0.050
393.25	1.006	0.002	0.498	0.026	0	-	-	0.818	0.023	0.818	3.697	0.046	4.530	0.050
393.27	1.006	0.002	0.498	0.026	4.465	0.009	2.135	0.978	0.066	0.978	3.732	0.412	6.826	0.050
393.26	1.005	0.002	0.498	0.026	6.065	0.014	3.504	0.919	0.061	0.919	3.686	0.411	8.106	0.050
393.36	0.370	0.002	0.762	0.046	0	-	-	0.571	0.017	0.571	5.114	0.048	5.685	0.050
393.13	0.371	0.002	0.762	0.046	1.401	0.002	0.328	0.603	0.072	0.603	5.524	1.111	6.456	0.050
393.35	0.370	0.002	0.762	0.046	3.294	0.010	1.619	0.585	0.070	0.585	5.323	1.069	7.536	0.050
393.23	0.370	0.002	0.762	0.046	4.472	0.015	2.616	0.544	0.058	0.544	5.117	1.012	8.276	0.050
393.31	0.370	0.002	0.762	0.046	5.846	0.020	3.763	0.514	0.052	0.514	4.976	0.985	9.267	0.050
393.24	0.356	0.002	0.735	0.044	0	-	-	0.626	0.018	0.626	4.952	0.048	5.575	0.050
393.27	0.356	0.002	0.735	0.044	6.730	0.022	4.523	0.554	0.052	0.554	4.718	0.844	9.807	0.050

Tabelle A 6.5: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen, methanol- und natriumsulfathaltigen Lösungen

T K	$\bar{m}_{\text{Na}_2\text{SO}_4}$ mol/kg	$\Delta\bar{m}_{\text{Na}_2\text{SO}_4}$ mol/kg	x_M	Δx_M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta\bar{m}_{\text{NH}_3}$ mol/kg	$10 \cdot p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot p_M$ MPa	$10 \cdot \Delta p_M$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
353.21	0.878	0.001	0.049	0.002	0	-	-	-	0.392	0.029	0.295	0.022	0.687	0.050
353.14	0.877	0.001	0.049	0.002	1.468	0.005	0.273	0.042	0.428	0.026	0.230	0.016	0.931	0.050
353.14	0.877	0.001	0.049	0.002	2.490	0.007	0.491	0.074	0.425	0.022	0.203	0.013	1.120	0.050
353.20	0.877	0.001	0.049	0.002	3.914	0.009	0.778	0.116	0.425	0.019	0.189	0.011	1.393	0.050
353.15	0.877	0.001	0.049	0.002	4.530	0.011	0.912	0.135	0.418	0.018	0.181	0.010	1.513	0.050
353.10	0.877	0.001	0.049	0.002	5.934	0.014	1.197	0.176	0.405	0.016	0.167	0.009	1.771	0.050
353.08	0.152	0.001	0.248	0.010	0	-	-	-	0.325	0.016	0.724	0.035	1.050	0.050
353.08	0.152	0.001	0.248	0.010	1.352	0.005	0.197	0.031	0.376	0.024	0.661	0.055	1.235	0.050
353.10	0.152	0.001	0.248	0.010	2.436	0.006	0.415	0.064	0.372	0.024	0.618	0.051	1.406	0.050
353.10	0.152	0.001	0.248	0.010	3.564	0.008	0.632	0.097	0.371	0.022	0.586	0.046	1.590	0.050
353.09	0.152	0.001	0.248	0.010	4.798	0.011	0.877	0.134	0.369	0.021	0.562	0.042	1.809	0.050
353.07	0.152	0.001	0.248	0.010	5.982	0.013	1.143	0.174	0.362	0.019	0.531	0.038	2.037	0.050
393.17	0.998	0.001	0.048	0.002	0	-	-	-	1.734	0.037	0.925	0.025	2.659	0.050
393.24	0.999	0.001	0.048	0.002	1.670	0.002	0.509	0.051	2.040	0.036	0.968	0.062	3.514	0.050
393.28	0.998	0.001	0.048	0.002	3.160	0.005	1.487	0.151	1.957	0.038	0.876	0.056	4.325	0.050
393.33	0.998	0.001	0.048	0.002	4.734	0.008	2.532	0.258	1.840	0.039	0.791	0.051	5.175	0.050
393.18	0.998	0.001	0.048	0.002	6.665	0.011	3.626	0.372	1.747	0.041	0.690	0.046	6.070	0.050
393.24	0.151	0.001	0.249	0.009	0	-	-	-	1.386	0.033	2.598	0.043	3.984	0.050
393.28	0.151	0.001	0.248	0.009	1.558	0.001	0.270	0.027	1.535	0.033	2.878	0.206	4.685	0.050
393.33	0.151	0.001	0.249	0.009	3.076	0.004	1.064	0.112	1.612	0.056	2.696	0.203	5.375	0.050
393.28	0.151	0.001	0.249	0.009	4.849	0.007	2.080	0.221	1.665	0.062	2.474	0.186	6.225	0.050
393.29	0.151	0.001	0.249	0.009	5.837	0.009	2.738	0.293	1.604	0.062	2.414	0.184	6.761	0.050

Tabelle A 6.6: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Phenollösungen

T K	\bar{m}_{Phenol} mol/kg	$\Delta\bar{m}$ mol/kg	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta\bar{m}$ mol/kg	$10 \cdot p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot p_{\text{p}}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{p}}$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
352.89	0.996	0.004	0	-	-	-	0.459	0.047	0.032	0.003	0.492	0.050
352.87	0.996	0.004	1.118	0.001	0.107	0.009	0.480	0.039	0.032	0.003	0.619	0.050
352.97	0.996	0.004	2.213	0.001	0.243	0.017	0.491	0.033	0.031	0.002	0.765	0.050
352.96	0.996	0.004	3.316	0.002	0.397	0.024	0.491	0.028	0.029	0.002	0.916	0.050
352.97	0.996	0.004	4.401	0.002	0.561	0.028	0.495	0.025	0.028	0.001	1.084	0.050
352.97	0.996	0.004	5.758	0.003	0.775	0.032	0.496	0.023	0.028	0.001	1.299	0.050
352.94	1.006	0.004	0	-	-	-	0.464	0.047	0.031	0.003	0.495	0.050
352.96	1.006	0.004	5.776	0.001	0.770	0.032	0.498	0.023	0.028	0.001	1.296	0.050
352.96	1.006	0.004	6.930	0.001	0.978	0.035	0.492	0.021	0.027	0.001	1.500	0.050
352.96	1.006	0.004	7.962	0.002	1.170	0.037	0.491	0.020	0.027	0.001	1.687	0.050
352.96	1.006	0.004	8.891	0.002	1.351	0.039	0.491	0.020	0.027	0.001	1.868	0.050
352.96	1.006	0.004	9.879	0.003	1.565	0.041	0.491	0.019	0.027	0.001	2.084	0.050
352.95	1.006	0.004	10.763	0.003	1.762	0.042	0.496	0.019	0.026	0.001	2.285	0.050
352.95	1.006	0.004	11.954	0.004	2.054	0.043	0.497	0.019	0.026	0.001	2.585	0.050
352.86	1.000	0.004	0	-	-	-	0.349	0.045	0.035	0.005	0.384	0.050
352.81	1.000	0.004	10.074	0.001	1.478	0.040	0.468	0.019	0.028	0.001	1.979	0.050
352.81	1.000	0.004	11.998	0.001	1.897	0.043	0.465	0.018	0.028	0.001	2.390	0.050
352.93	3.019	0.005	0	-	-	-	0.422	0.046	0.035	0.004	0.457	0.050
352.90	3.019	0.005	2.627	0.001	0.194	0.015	0.458	0.034	0.032	0.002	0.684	0.050
352.90	3.019	0.005	3.003	0.001	0.228	0.017	0.466	0.033	0.031	0.002	0.726	0.050
352.67	3.002	0.005	0	-	-	-	0.412	0.046	0.034	0.004	0.447	0.050
352.66	3.002	0.005	1.271	0.001	0.075	0.007	0.439	0.040	0.033	0.003	0.548	0.050
352.65	3.002	0.005	2.583	0.001	0.189	0.015	0.453	0.034	0.032	0.002	0.674	0.050
352.69	3.002	0.005	3.923	0.002	0.328	0.022	0.467	0.029	0.029	0.002	0.823	0.050
352.70	3.002	0.005	5.273	0.003	0.492	0.027	0.470	0.026	0.030	0.001	0.990	0.050
352.70	3.002	0.005	5.960	0.003	0.583	0.029	0.470	0.024	0.030	0.001	1.084	0.050

Tabelle A 6.6: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Phenollösungen (Fortsetzung)

T K	\bar{m}_{Phenol} mol/kg	$\Delta \bar{m}$ mol/kg	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta \bar{m}$ mol/kg	$10 \cdot p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot p_{\text{PP}}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{PP}}$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
353.03	2.994	0.005	0	-	-	-	0.420	0.046	0.035	0.004	0.455	0.050
353.01	2.995	0.005	5.630	0.001	0.544	0.028	0.480	0.025	0.031	0.001	1.055	0.050
353.00	2.995	0.005	7.007	0.001	0.737	0.032	0.478	0.023	0.030	0.001	1.244	0.050
353.01	2.994	0.005	8.449	0.002	0.966	0.035	0.470	0.021	0.029	0.001	1.464	0.050
352.99	2.994	0.005	9.774	0.003	1.182	0.038	0.467	0.020	0.029	0.001	1.677	0.050
352.99	2.994	0.005	11.016	0.003	1.406	0.040	0.466	0.019	0.028	0.001	1.900	0.050
353.01	2.994	0.005	12.065	0.004	1.604	0.041	0.465	0.019	0.029	0.001	2.099	0.050
353.15	2.009	0.005	0	-	-	-	0.499	0.047	0.034	0.003	0.533	0.050
353.05	2.009	0.005	1.347	0.001	0.121	0.010	0.510	0.039	0.032	0.002	0.664	0.050
353.06	2.009	0.005	2.901	0.001	0.318	0.020	0.515	0.031	0.031	0.002	0.865	0.050
353.13	2.009	0.005	4.472	0.002	0.542	0.027	0.534	0.027	0.030	0.001	1.106	0.050
353.17	2.009	0.005	6.034	0.002	0.790	0.032	0.547	0.024	0.030	0.001	1.367	0.050
353.18	2.009	0.005	7.413	0.003	1.052	0.035	0.557	0.023	0.029	0.001	1.638	0.050
353.14	2.009	0.005	9.092	0.004	1.387	0.039	0.559	0.022	0.029	0.001	1.970	0.050
353.13	2.009	0.005	10.513	0.004	1.707	0.041	0.566	0.021	0.028	0.001	2.302	0.050
353.12	2.009	0.005	17.379	0.005	3.596	0.047	0.576	0.021	0.028	0.000	4.201	0.050
353.10	2.009	0.005	20.003	0.005	4.497	0.049	0.575	0.022	0.028	0.000	5.105	0.050
353.07	6.012	0.006	0	-	-	-	0.514	0.047	0.034	0.003	0.543	0.050
353.09	6.012	0.006	1.538	0.001	0.090	0.008	0.520	0.041	0.033	0.003	0.643	0.050
353.10	6.012	0.006	3.050	0.002	0.218	0.023	0.514	0.034	0.032	0.002	0.764	0.050
353.08	6.012	0.006	4.476	0.002	0.362	0.022	0.504	0.029	0.031	0.002	0.895	0.050
353.12	6.012	0.006	5.870	0.003	0.506	0.026	0.523	0.027	0.031	0.001	1.066	0.050
353.13	6.012	0.006	7.461	0.004	0.704	0.031	0.532	0.025	0.031	0.001	1.266	0.050
353.13	6.013	0.006	9.053	0.005	0.937	0.034	0.531	0.023	0.030	0.001	1.498	0.050
353.13	6.013	0.006	10.501	0.005	1.147	0.037	0.542	0.022	0.030	0.001	1.719	0.050
353.11	6.013	0.006	14.657	0.006	1.935	0.042	0.539	0.020	0.029	0.001	2.503	0.050
353.12	6.013	0.006	19.145	0.007	2.951	0.046	0.545	0.020	0.032	0.000	3.528	0.050

Tabelle A 6.6: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Phenollösungen (Fortsetzung)

T K	\bar{m}_{Phenol} mol/kg	$\Delta \bar{m}$ mol/kg	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta \bar{m}$ mol/kg	$10 \cdot p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot p_{\text{pp}}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{pp}}$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
314.24	1.984	0.005	0	-	-	-	0.085	0.050	0	0	0.085	0.050
313.15	1.984	0.005	0.249	0.001	0.000	0.000	0.085	0.050	0	0	0.085	0.050
313.15	1.984	0.005	1.600	0.001	0.028	0.012	0.087	0.038	0	0	0.115	0.050
313.16	1.985	0.005	3.853	0.002	0.099	0.025	0.097	0.025	0	0	0.195	0.050
313.18	1.985	0.005	5.200	0.002	0.151	0.030	0.099	0.020	0	0	0.251	0.050
313.14	1.985	0.005	6.212	0.003	0.196	0.033	0.100	0.017	0	0	0.296	0.050
313.12	1.985	0.005	7.636	0.003	0.247	0.034	0.118	0.016	0	0	0.366	0.050
313.16	1.985	0.005	9.035	0.004	0.338	0.039	0.098	0.011	0	0	0.436	0.050
313.14	1.985	0.005	10.564	0.004	0.428	0.041	0.097	0.010	0	0	0.526	0.050
313.15	1.985	0.005	14.905	0.005	0.749	0.044	0.097	0.006	0	0	0.846	0.050
313.13	1.985	0.005	19.942	0.006	1.224	0.047	0.093	0.004	0	0	1.317	0.050
313.17	5.999	0.006	0	-	-	-	0.095	0.050	0	0	0.095	0.050
313.42	5.999	0.006	0.618	0.001	0.006	0.003	0.094	0.047	0	0	0.100	0.050
313.15	5.999	0.006	1.733	0.002	0.019	0.008	0.096	0.042	0	0	0.115	0.050
313.07	5.999	0.006	3.185	0.002	0.043	0.016	0.095	0.034	0	0	0.140	0.050
313.12	5.999	0.006	4.611	0.003	0.072	0.022	0.094	0.028	0	0	0.165	0.050
313.13	5.999	0.006	6.009	0.004	0.112	0.027	0.097	0.023	0	0	0.205	0.050
313.07	5.999	0.006	7.606	0.004	0.164	0.032	0.097	0.019	0	0	0.261	0.050
313.14	5.999	0.006	9.030	0.005	0.209	0.034	0.095	0.016	0	0	0.301	0.050
313.14	5.999	0.006	10.476	0.006	0.273	0.037	0.096	0.013	0	0	0.366	0.050
313.13	5.999	0.006	15.083	0.007	0.503	0.042	0.096	0.008	0	0	0.596	0.050
313.15	5.999	0.006	20.347	0.007	0.867	0.045	0.089	0.005	0	0	0.956	0.050

Tabelle A 6.6: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Phenollösungen (Fortsetzung)

T K	\bar{m}_{Phenol} mol/kg	$\Delta \bar{m}$ mol/kg	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta \bar{m}$ mol/kg	$10 \cdot p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot p_{\text{pp}}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{pp}}$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
393.08	2.021	0.005	0	-	-	-	2.043	0.049	0.052	0.001	2.091	0.050
393.16	2.021	0.005	1.437	0.001	0.483	0.016	2.017	0.042	0.051	0.001	2.552	0.050
393.12	2.021	0.005	2.911	0.001	1.075	0.029	1.948	0.039	0.050	0.001	3.072	0.050
393.14	2.021	0.005	4.556	0.002	1.800	0.038	1.874	0.039	0.047	0.001	3.723	0.050
393.09	2.021	0.005	5.951	0.002	2.472	0.044	1.792	0.040	0.047	0.001	4.313	0.050
393.10	2.021	0.005	7.362	0.003	3.120	0.048	1.779	0.041	0.045	0.000	4.944	0.050
393.14	2.021	0.005	8.943	0.004	3.898	0.052	1.773	0.042	0.037	0.000	5.715	0.050
393.22	2.022	0.005	10.424	0.004	4.504	0.056	1.923	0.046	0.039	0.000	6.475	0.050
393.18	2.022	0.005	14.886	0.005	6.541	0.067	2.342	0.057	0.037	0.000	8.933	0.050
393.27	2.022	0.005	19.719	0.005	9.111	0.103	2.775	0.072	0.036	0.000	11.926	0.100
393.30	5.994	0.006	0	-	-	-	2.003	0.049	0.053	0.001	2.056	0.050
393.30	5.994	0.006	1.504	0.001	0.386	0.013	1.922	0.042	0.052	0.001	2.361	0.050
393.22	5.996	0.006	3.035	0.002	0.719	0.022	1.952	0.040	0.051	0.001	2.734	0.050
393.22	5.996	0.006	4.475	0.003	1.300	0.032	1.761	0.037	0.049	0.001	3.116	0.050
393.14	5.996	0.006	6.014	0.004	1.724	0.037	1.787	0.038	0.048	0.001	3.565	0.050
393.14	5.997	0.006	7.514	0.005	2.176	0.042	1.820	0.039	0.046	0.001	4.047	0.050
393.14	5.998	0.006	8.986	0.005	2.680	0.046	1.826	0.040	0.043	0.000	4.558	0.050
393.16	5.999	0.006	10.875	0.006	3.412	0.050	1.789	0.042	0.042	0.000	5.245	0.050
393.13	5.999	0.006	15.348	0.007	5.186	0.058	1.910	0.047	0.040	0.000	7.156	0.050
393.14	6.001	0.006	20.346	0.008	7.082	0.069	2.390	0.059	0.038	0.000	9.521	0.050

A 7 Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrig-salzhaltigen Methanollösungen: Tabellen der experimentellen Ergebnisse

Tabelle A 7.1: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser

T K	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta\bar{m}_{\text{NH}_3}$ mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$\Delta\bar{m}_{\text{CO}_2}$ mol/kg	$10 \cdot p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot p_{\text{CO}_2}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{CO}_2}$ MPa	$10 \cdot p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
393.02	5.930	0.003	0	-	3.030	0.044	-	-	1.662	0.035	4.696	0.050
393.07	5.947	0.005	0.975	0.001	2.357	0.143	0.779	0.017	1.551	0.023	4.693	0.050
393.09	5.970	0.004	1.952	0.002	1.440	0.097	3.004	0.091	1.726	0.043	6.185	0.050
393.06	5.985	0.004	2.818	0.011	0.927	0.072	8.759	0.424	2.188	0.094	11.938	0.100
393.02	5.992	0.004	3.518	0.069	0.580	0.073	21.277	2.538	1.687	0.181	23.725	0.100
393.08	5.995	0.004	3.930	0.206	0.441	0.090	34.544	7.468	1.419	0.275	36.692	0.100
393.08	11.884	0.003	0	-	5.988	0.077	-	-	1.704	0.067	7.623	0.050
393.04	11.882	0.013	1.018	0.001	5.968	0.614	0.197	0.011	1.844	0.042	8.004	0.050
393.07	11.883	0.013	2.002	0.001	5.818	0.603	0.710	0.040	2.081	0.055	8.617	0.050
392.91	11.928	0.003	0	-	6.199	0.078	-	-	1.757	0.069	7.971	0.050
392.96	11.958	0.010	2.976	0.002	4.609	0.485	1.532	0.092	2.027	0.068	8.147	0.050
392.96	11.989	0.008	4.452	0.008	3.069	0.348	5.037	0.374	2.112	0.115	10.237	0.100
392.91	12.017	0.006	5.823	0.032	1.603	0.229	13.640	1.595	2.026	0.208	17.361	0.100
393.00	12.030	0.005	6.568	0.078	0.968	0.170	24.032	3.832	2.026	0.293	27.206	0.100
392.91	12.036	0.004	7.222	0.176	0.654	0.142	40.008	8.473	2.034	0.389	43.023	0.100

Tabelle A 7.2: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol + Wasser-Gemischen

T K	x _M	Δx _M	m̄ _{NH₃} mol/kg	Δm̄ _{NH₃} mol/kg	m̄ _{CO₂} mol/kg	Δm̄ _{CO₂} mol/kg	10 · p _{NH₃} MPa	10 · Δp _{NH₃} MPa	10 · p _{CO₂} MPa	10 · Δp _{CO₂} MPa	10 · p _{H₂O} MPa	10 · Δp _{H₂O} MPa	10 · p _M MPa	10 · Δp _M MPa	10 · p MPa	10 · Δp MPa
313.12	0.050	0.002	6.031	0.004	0	-	0.241	0.041	-	-	0.071	0.011	0.023	0.004	0.335	0.050
313.12	0.050	0.002	6.034	0.004	0.614	0.001	0.207	0.038	0.005	0.001	0.066	0.011	0.023	0.004	0.301	0.050
313.11	0.050	0.002	6.038	0.004	1.418	0.001	0.151	0.032	0.005	0.001	0.069	0.014	0.028	0.006	0.253	0.050
313.10	0.050	0.002	6.043	0.004	2.236	0.001	0.092	0.023	0.015	0.004	0.070	0.017	0.035	0.008	0.211	0.050
313.10	0.050	0.002	6.047	0.004	3.002	0.001	0.046	0.011	0.065	0.015	0.071	0.016	0.035	0.008	0.219	0.050
313.12	0.050	0.002	6.050	0.004	4.076	0.002	0.006	0.001	0.471	0.046	0.071	0.006	0.035	0.003	0.583	0.050
313.12	0.050	0.002	6.050	0.004	4.638	0.004	0.002	0.000	0.951	0.064	0.066	0.003	0.034	0.002	1.058	0.050
313.12	0.050	0.002	6.050	0.004	5.140	0.006	0.000	0.000	1.441	0.084	0.066	0.003	0.033	0.002	1.542	0.050
313.14	0.050	0.002	6.050	0.004	5.833	0.023	0.000	0.000	4.766	0.291	0.068	0.002	0.032	0.002	4.871	0.050
313.12	0.050	0.002	6.050	0.004	5.929	0.035	0.001	0.000	6.305	0.441	0.065	0.002	0.032	0.002	6.411	0.050
313.10	0.050	0.002	6.050	0.004	5.963	0.039	0.001	0.000	6.918	0.496	0.069	0.002	0.031	0.002	7.029	0.050
313.14	0.049	0.002	12.030	0.005	0	-	0.570	0.066	-	-	0.067	0.006	0.020	0.002	0.657	0.050
313.14	0.049	0.002	12.040	0.005	1.920	0.001	0.433	0.056	0.012	0.001	0.047	0.005	0.023	0.003	0.515	0.050
313.13	0.049	0.002	12.054	0.004	4.032	0.001	0.248	0.041	0.008	0.001	0.063	0.009	0.033	0.005	0.352	0.050
313.11	0.049	0.002	12.063	0.004	5.530	0.001	0.124	0.024	0.067	0.012	0.059	0.010	0.035	0.006	0.286	0.050
313.12	0.049	0.002	12.070	0.004	6.870	0.001	0.040	0.007	0.201	0.030	0.063	0.009	0.043	0.006	0.346	0.050
313.12	0.049	0.002	12.070	0.004	7.581	0.001	0.034	0.005	0.230	0.033	0.064	0.009	0.041	0.006	0.369	0.050
313.12	0.049	0.002	12.072	0.004	8.970	0.001	0.013	0.002	0.343	0.040	0.065	0.007	0.041	0.005	0.463	0.050
313.12	0.049	0.002	12.072	0.004	10.394	0.003	0.001	0.000	0.732	0.056	0.063	0.004	0.039	0.003	0.837	0.050
313.11	0.049	0.002	12.072	0.004	10.839	0.005	0.000	0.000	1.452	0.085	0.062	0.002	0.038	0.002	1.642	0.050
313.12	0.049	0.002	12.072	0.004	11.279	0.015	0.000	0.000	3.637	0.211	0.063	0.002	0.037	0.002	3.760	0.050
313.13	0.049	0.002	12.072	0.004	11.379	0.030	0.000	0.000	5.891	0.409	0.062	0.002	0.036	0.002	6.003	0.050
313.11	0.049	0.002	12.072	0.004	11.454	0.033	0.000	0.000	6.264	0.441	0.065	0.002	0.036	0.002	6.376	0.050
313.07	0.248	0.009	6.056	0.004	0	-	0.292	0.040	-	-	0.059	0.007	0.100	0.012	0.450	0.050
313.10	0.248	0.009	6.060	0.004	0.640	0.001	0.240	0.036	0.002	0.000	0.057	0.007	0.107	0.014	0.406	0.050
313.17	0.248	0.009	6.067	0.004	1.665	0.001	0.153	0.025	0.016	0.002	0.058	0.008	0.119	0.018	0.346	0.050
313.12	0.248	0.009	6.073	0.004	2.453	0.001	0.090	0.015	0.055	0.009	0.055	0.008	0.131	0.021	0.330	0.050

Tabelle A 7.2: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol + Wasser-Gemischen (Fortsetzung)

T K	x_M	Δx_M	\bar{n}_{NH_3} mol/kg	$\Delta \bar{n}_{NH_3}$ mol/kg	\bar{n}_{CO_2} mol/kg	$\Delta \bar{n}_{CO_2}$ mol/kg	$10 \cdot p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot p_{CO_2}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{CO_2}$ MPa	$10 \cdot p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot p_M$ MPa	$10 \cdot \Delta p_M$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
313.18	0.248	0.009	6.077	0.004	3.421	0.001	0.036	0.005	0.238	0.028	0.051	0.006	0.131	0.016	0.457	0.050
313.12	0.248	0.009	6.078	0.004	4.041	0.002	0.022	0.003	0.366	0.036	0.054	0.005	0.130	0.013	0.573	0.050
313.11	0.248	0.009	6.080	0.004	4.808	0.002	0.008	0.001	0.559	0.045	0.053	0.004	0.131	0.011	0.751	0.050
313.14	0.248	0.009	6.080	0.004	5.357	0.004	0.001	0.000	0.954	0.062	0.049	0.002	0.127	0.009	1.132	0.050
313.11	0.248	0.009	6.080	0.004	5.957	0.017	0.000	0.000	3.439	0.212	0.049	0.001	0.123	0.007	3.615	0.050
313.12	0.248	0.009	6.080	0.004	6.093	0.038	0.000	0.000	5.563	0.457	0.045	0.002	0.122	0.007	5.737	0.050
313.08	0.248	0.009	6.080	0.004	6.146	0.055	0.000	0.000	6.830	0.644	0.044	0.002	0.120	0.008	7.003	0.050
313.13	0.245	0.009	11.961	0.006	0	-	0.718	0.074	-	-	0.057	0.004	0.084	0.007	0.860	0.050
313.13	0.245	0.009	11.989	0.005	3.162	0.001	0.368	0.046	0.008	0.001	0.055	0.005	0.110	0.012	0.542	0.050
313.10	0.245	0.009	11.999	0.004	4.300	0.001	0.255	0.035	0.022	0.003	0.056	0.006	0.120	0.015	0.453	0.050
313.18	0.245	0.009	12.010	0.004	5.990	0.001	0.113	0.016	0.121	0.015	0.054	0.006	0.139	0.018	0.427	0.050
313.15	0.245	0.009	12.011	0.004	6.888	0.001	0.098	0.014	0.141	0.017	0.058	0.007	0.135	0.017	0.431	0.050
313.17	0.245	0.009	12.013	0.004	7.592	0.001	0.079	0.011	0.160	0.020	0.057	0.007	0.141	0.018	0.437	0.050
313.10	0.245	0.009	12.014	0.004	8.461	0.001	0.068	0.009	0.185	0.022	0.059	0.007	0.138	0.017	0.450	0.050
313.17	0.245	0.009	12.016	0.004	9.655	0.001	0.040	0.005	0.274	0.029	0.062	0.006	0.142	0.015	0.518	0.050
313.23	0.245	0.009	12.019	0.004	10.325	0.003	0.005	0.000	0.873	0.058	0.055	0.003	0.139	0.010	1.078	0.050
313.12	0.245	0.009	12.019	0.004	10.660	0.014	0.000	0.000	3.227	0.184	0.060	0.002	0.140	0.007	3.437	0.050
313.16	0.245	0.009	12.019	0.004	10.733	0.035	0.000	0.000	5.924	0.442	0.054	0.002	0.138	0.008	6.133	0.050
313.08	0.245	0.009	12.019	0.004	10.810	0.041	0.000	0.000	6.069	0.514	0.046	0.002	0.137	0.009	6.266	0.050
313.76	0.498	0.022	6.050	0.005	0	-	0.383	0.045	-	-	0.057	0.005	0.161	0.016	0.602	0.050
313.01	0.498	0.022	6.062	0.005	1.051	0.001	0.256	0.034	0.014	0.002	0.051	0.005	0.166	0.019	0.488	0.050
313.12	0.498	0.022	6.073	0.004	2.019	0.001	0.141	0.020	0.053	0.007	0.041	0.005	0.218	0.045	0.452	0.050
313.06	0.498	0.022	6.078	0.004	2.974	0.001	0.082	0.010	0.214	0.022	0.047	0.004	0.192	0.021	0.536	0.050
313.09	0.498	0.022	6.080	0.004	3.984	0.001	0.056	0.007	0.263	0.026	0.047	0.004	0.196	0.021	0.563	0.050
313.10	0.498	0.022	6.083	0.004	4.901	0.002	0.020	0.002	0.472	0.039	0.039	0.003	0.202	0.020	0.733	0.050
313.11	0.498	0.022	6.085	0.004	5.496	0.005	0.001	0.000	1.142	0.070	0.034	0.001	0.198	0.016	1.380	0.050
313.11	0.498	0.022	6.085	0.004	5.836	0.017	0.000	0.000	2.850	0.191	0.034	0.001	0.193	0.015	3.082	0.050

Tabelle A 7.2: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol + Wasser-Gemischen (Fortsetzung)

T K	x _M	Δx _M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	Δ \bar{m}_{NH_3} mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	Δ \bar{m}_{CO_2} mol/kg	10 · p _{NH₃} MPa	10 · Δp _{NH₃} MPa	10 · p _{CO₂} MPa	10 · Δp _{CO₂} MPa	10 · p _{H₂O} MPa	10 · Δp _{H₂O} MPa	10 · p _M MPa	10 · Δp _M MPa	10 · p MPa	10 · Δp MPa
313.02	0.498	0.022	6.085	0.004	6.068	0.044	0.000	0.000	4.969	0.488	0.031	0.001	0.191	0.017	5.198	0.050
313.17	0.498	0.022	6.085	0.004	6.199	0.076	0.000	0.000	6.501	0.829	0.030	0.002	0.191	0.018	6.732	0.050
313.12	0.497	0.022	11.916	0.009	0	-	0.100	-	-	-	0.048	0.003	0.143	0.011	1.136	0.050
313.12	0.497	0.022	11.955	0.005	2.969	0.001	0.053	0.014	0.014	0.001	0.042	0.003	0.167	0.016	0.712	0.050
313.06	0.497	0.022	11.969	0.005	4.249	0.001	0.039	0.039	0.039	0.004	0.037	0.003	0.186	0.020	0.590	0.050
313.07	0.497	0.022	11.980	0.004	5.658	0.001	0.024	0.085	0.085	0.009	0.038	0.004	0.200	0.024	0.515	0.050
313.10	0.497	0.022	11.988	0.004	6.737	0.001	0.012	0.190	0.190	0.020	0.041	0.004	0.210	0.024	0.542	0.050
313.11	0.497	0.022	11.987	0.004	7.596	0.001	0.015	0.165	0.165	0.017	0.045	0.004	0.212	0.024	0.544	0.050
313.11	0.497	0.022	11.989	0.004	8.662	0.001	0.013	0.210	0.210	0.020	0.044	0.004	0.238	0.026	0.598	0.050
313.14	0.735	0.037	6.015	0.019	0	-	0.221	-	-	-	0.006	0.001	0.278	0.116	0.739	0.050
313.15	0.735	0.037	6.042	0.004	1.973	0.001	0.021	0.097	0.097	0.010	0.038	0.003	0.301	0.034	0.576	0.050
313.13	0.735	0.037	6.049	0.004	3.236	0.002	0.049	0.296	0.296	0.028	0.029	0.002	0.288	0.032	0.662	0.050
313.12	0.735	0.037	6.051	0.004	3.917	0.003	0.025	0.663	0.663	0.051	0.030	0.002	0.281	0.027	1.001	0.050
313.12	0.735	0.037	6.050	0.004	4.447	0.003	0.032	0.479	0.479	0.040	0.027	0.002	0.293	0.031	0.832	0.050
313.12	0.735	0.037	6.052	0.004	5.228	0.004	0.019	0.870	0.870	0.063	0.027	0.001	0.306	0.031	1.223	0.050
313.11	0.735	0.037	6.053	0.004	5.803	0.012	0.000	2.107	2.107	0.147	0.032	0.001	0.279	0.025	2.421	0.050
313.11	0.735	0.037	6.055	0.004	6.265	0.028	0.000	4.392	4.392	0.340	0.042	0.001	0.383	0.032	4.822	0.050
313.04	0.735	0.037	6.055	0.004	6.418	0.033	0.000	5.321	5.321	0.406	0.054	0.002	0.399	0.030	5.779	0.050
313.03	0.735	0.037	6.055	0.004	6.482	0.039	0.000	5.795	5.795	0.472	0.049	0.002	0.413	0.033	6.263	0.050

Tabelle A 7.2: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol + Wasser-Gemischen (Fortsetzung)

T K	x_M	Δx_M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta \bar{m}_{NH_3}$ mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$\Delta \bar{m}_{CO_2}$ mol/kg	$10 \cdot p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot p_{CO_2}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{CO_2}$ MPa	$10 \cdot p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot p_M$ MPa	$10 \cdot \Delta p_M$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
353.03	0.050	0.002	5.502	0.010	0	-	0.921	0.136	-	-	0.392	0.016	0.146	0.008	1.462	0.050
353.02	0.049	0.002	5.512	0.009	0.575	0.001	0.778	0.118	0.019	0.001	0.396	0.022	0.159	0.011	1.353	0.050
353.06	0.049	0.002	5.519	0.008	0.971	0.001	0.682	0.103	0.055	0.004	0.409	0.022	0.174	0.011	1.319	0.050
353.07	0.049	0.002	5.527	0.007	1.452	0.001	0.570	0.085	0.137	0.010	0.410	0.020	0.184	0.012	1.303	0.050
353.04	0.049	0.002	5.535	0.006	1.863	0.001	0.463	0.069	0.269	0.019	0.418	0.019	0.195	0.012	1.345	0.050
353.07	0.049	0.002	5.546	0.005	2.422	0.003	0.318	0.046	0.653	0.042	0.439	0.016	0.216	0.011	1.624	0.050
353.07	0.049	0.002	5.552	0.005	2.793	0.005	0.239	0.035	1.158	0.073	0.426	0.013	0.217	0.011	2.041	0.050
353.08	0.049	0.002	5.557	0.004	3.107	0.009	0.173	0.025	2.013	0.126	0.430	0.012	0.231	0.011	2.849	0.050
353.09	0.049	0.002	5.559	0.004	3.355	0.013	0.139	0.020	2.886	0.187	0.414	0.011	0.222	0.011	3.665	0.050
353.07	0.049	0.002	5.561	0.004	3.606	0.021	0.105	0.015	4.151	0.293	0.406	0.012	0.217	0.011	4.884	0.050
353.08	0.049	0.002	5.564	0.004	3.853	0.036	0.066	0.010	5.997	0.489	0.400	0.014	0.212	0.011	6.683	0.050
353.08	0.049	0.002	10.998	0.021	0	-	2.009	0.300	-	-	0.365	0.014	0.124	0.007	2.497	0.050
353.10	0.049	0.002	11.014	0.019	0.969	0.001	1.756	0.273	0.014	0.001	0.368	0.022	0.136	0.010	2.273	0.050
353.08	0.049	0.002	11.031	0.016	1.867	0.001	1.508	0.232	0.048	0.004	0.368	0.021	0.147	0.010	2.076	0.050
353.09	0.049	0.002	11.049	0.013	2.868	0.001	1.252	0.190	0.111	0.008	0.376	0.020	0.176	0.012	1.911	0.050
353.08	0.049	0.002	11.068	0.011	3.821	0.001	0.975	0.146	0.267	0.019	0.397	0.019	0.199	0.012	1.839	0.050
353.08	0.049	0.002	11.077	0.010	4.610	0.003	0.883	0.129	0.752	0.049	0.489	0.017	0.262	0.014	2.384	0.050
353.08	0.049	0.002	11.095	0.007	5.378	0.006	0.617	0.089	1.478	0.091	0.483	0.013	0.270	0.013	2.850	0.050
353.09	0.049	0.002	11.111	0.005	6.191	0.013	0.370	0.053	3.136	0.201	0.465	0.012	0.258	0.012	4.232	0.050
353.08	0.049	0.002	11.117	0.005	6.592	0.022	0.281	0.041	4.570	0.320	0.448	0.013	0.253	0.012	5.557	0.050
353.07	0.049	0.002	11.118	0.005	6.808	0.028	0.264	0.038	5.532	0.409	0.460	0.014	0.248	0.012	6.513	0.050
353.04	0.248	0.011	5.799	0.013	0	-	1.082	0.165	-	-	0.339	0.019	0.544	0.041	1.966	0.050
353.07	0.248	0.011	5.826	0.010	1.118	0.001	0.753	0.111	0.193	0.013	0.338	0.013	0.616	0.041	1.901	0.050
353.07	0.248	0.011	5.845	0.007	1.980	0.003	0.515	0.075	0.711	0.044	0.329	0.010	0.664	0.042	2.221	0.050
353.07	0.248	0.011	5.861	0.005	2.738	0.009	0.314	0.045	1.916	0.120	0.329	0.008	0.691	0.043	3.253	0.050
353.07	0.248	0.011	5.867	0.005	3.084	0.016	0.233	0.033	2.984	0.202	0.321	0.008	0.704	0.045	4.246	0.050
353.11	0.248	0.011	5.869	0.005	3.353	0.025	0.203	0.029	4.152	0.315	0.315	0.009	0.706	0.047	5.383	0.050
353.07	0.248	0.011	5.872	0.005	3.578	0.037	0.166	0.024	5.444	0.472	0.313	0.011	0.703	0.048	6.635	0.050

Tabelle A 7.2: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol + Wasser-Gemischen (Fortsetzung)

T K	x _M	Δx _M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta\bar{m}_{\text{NH}_3}$ mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$\Delta\bar{m}_{\text{CO}_2}$ mol/kg	10 · p _{NH₃} MPa	10 · Δp _{NH₃} MPa	10 · p _{CO₂} MPa	10 · Δp _{CO₂} MPa	10 · p _{H₂O} MPa	10 · Δp _{H₂O} MPa	10 · p _M MPa	10 · Δp _M MPa	10 · p MPa	10 · Δp MPa
353.13	0.248	0.011	11.955	0.030	0	-	2.623	0.410	-	-	0.312	0.017	0.460	0.033	3.397	0.050
353.14	0.248	0.011	12.000	0.023	1.798	0.001	2.025	0.312	0.085	0.006	0.304	0.016	0.559	0.042	2.969	0.050
353.11	0.248	0.011	12.049	0.016	4.033	0.003	1.453	0.213	0.630	0.041	0.431	0.015	0.796	0.051	3.311	0.050
353.06	0.248	0.011	12.075	0.012	4.944	0.006	1.104	0.160	1.270	0.079	0.407	0.012	0.829	0.052	3.616	0.050
353.09	0.248	0.011	12.099	0.009	5.730	0.010	0.781	0.112	2.321	0.145	0.391	0.009	0.849	0.054	4.345	0.050
353.07	0.248	0.011	12.112	0.007	6.254	0.017	0.593	0.085	3.489	0.234	0.379	0.009	0.851	0.055	5.313	0.050
353.06	0.248	0.011	12.117	0.007	6.563	0.024	0.516	0.074	4.430	0.324	0.364	0.010	0.839	0.056	6.155	0.050
353.14	0.491	0.024	6.058	0.019	0	-	1.397	0.222	-	-	0.266	0.018	0.848	0.086	2.513	0.050
353.15	0.491	0.024	6.092	0.013	1.096	0.002	1.004	0.148	0.432	0.028	0.253	0.009	0.937	0.086	2.626	0.050
353.10	0.491	0.024	6.120	0.009	2.110	0.008	0.667	0.096	1.559	0.100	0.253	0.007	0.990	0.091	3.471	0.050
353.17	0.491	0.024	6.130	0.008	2.498	0.014	0.561	0.081	2.488	0.170	0.254	0.007	1.041	0.099	4.346	0.050
353.16	0.491	0.024	6.136	0.007	2.785	0.021	0.484	0.070	3.332	0.248	0.259	0.007	1.042	0.098	5.121	0.050
353.16	0.491	0.024	6.141	0.007	3.050	0.030	0.417	0.061	4.322	0.365	0.255	0.008	1.043	0.101	6.043	0.050
353.16	0.491	0.024	6.146	0.006	3.232	0.041	0.365	0.053	5.187	0.497	0.247	0.009	1.051	0.106	6.855	0.050
353.12	0.499	0.025	11.914	0.043	0	-	3.244	0.557	-	-	0.231	0.016	0.738	0.076	4.214	0.050
353.07	0.499	0.025	11.989	0.029	2.157	0.002	2.293	0.365	0.269	0.020	0.211	0.011	0.869	0.091	3.644	0.050
353.08	0.499	0.025	12.058	0.017	4.113	0.006	1.442	0.215	1.086	0.072	0.211	0.007	0.995	0.108	3.734	0.050
353.05	0.499	0.025	12.078	0.014	4.727	0.009	1.210	0.178	1.703	0.115	0.218	0.007	1.064	0.118	4.194	0.050
353.06	0.499	0.025	12.091	0.013	5.189	0.013	1.045	0.153	2.338	0.166	0.216	0.006	1.084	0.122	4.684	0.050
353.11	0.499	0.025	12.101	0.011	5.652	0.019	0.928	0.135	3.303	0.244	0.265	0.007	1.119	0.110	5.618	0.050
353.07	0.499	0.025	12.110	0.010	6.001	0.026	0.818	0.119	4.168	0.334	0.273	0.008	1.119	0.108	6.384	0.050
353.04	0.750	0.019	5.937	0.028	0	-	1.718	0.302	-	-	0.156	0.014	1.168	0.211	3.047	0.050
353.12	0.750	0.019	5.956	0.022	0.511	0.002	1.510	0.237	0.320	0.024	0.157	0.008	1.202	0.202	3.189	0.050
353.04	0.750	0.019	5.967	0.020	0.833	0.004	1.380	0.214	0.622	0.045	0.150	0.007	1.222	0.214	3.375	0.050
353.03	0.750	0.019	5.979	0.018	1.202	0.007	1.239	0.187	1.108	0.078	0.166	0.006	1.177	0.187	3.688	0.050
353.04	0.750	0.019	5.997	0.015	1.650	0.013	1.043	0.156	1.808	0.139	0.151	0.006	1.268	0.226	4.273	0.050
353.10	0.750	0.019	6.012	0.013	2.071	0.023	0.880	0.131	2.760	0.253	0.144	0.005	1.289	0.244	5.078	0.050
353.12	0.750	0.019	6.017	0.012	2.278	0.032	0.821	0.123	3.333	0.349	0.139	0.005	1.296	0.255	5.594	0.050
353.09	0.750	0.019	6.027	0.011	2.622	0.053	0.707	0.107	4.489	0.577	0.141	0.006	1.303	0.257	6.646	0.050

Tabelle A 7.2: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol + Wasser-Gemischen (Fortsetzung)

T K	x_M	Δx_M	\bar{n}_{NH_3} mol/kg	$\Delta \bar{n}_{NH_3}$ mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$\Delta \bar{m}_{CO_2}$ mol/kg	$10 \cdot p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot p_{CO_2}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{CO_2}$ MPa	$10 \cdot p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot p_M$ MPa	$10 \cdot \Delta p_M$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
353.17	0.751	0.018	11.711	0.078	0	-	3.929	0.911	-	-	0.134	0.016	0.996	0.195	5.064	0.050
353.13	0.751	0.018	11.741	0.061	0.669	0.001	3.552	0.711	0.118	0.011	0.140	0.010	1.023	0.174	4.837	0.050
353.10	0.751	0.018	11.772	0.055	1.354	0.002	3.176	0.631	0.278	0.024	0.126	0.009	1.051	0.197	4.638	0.050
353.13	0.751	0.018	11.809	0.044	2.117	0.004	2.738	0.507	0.504	0.041	0.128	0.008	1.096	0.207	4.468	0.050
353.02	0.751	0.018	11.848	0.035	3.062	0.007	2.279	0.400	0.967	0.076	0.120	0.006	1.118	0.223	4.488	0.050
353.05	0.751	0.018	11.876	0.029	3.682	0.010	1.952	0.329	1.370	0.111	0.117	0.005	1.161	0.244	4.602	0.050
353.06	0.751	0.018	11.908	0.023	4.324	0.016	1.599	0.258	2.008	0.180	0.116	0.005	1.220	0.269	4.943	0.050
353.02	0.751	0.018	11.924	0.020	4.781	0.023	1.406	0.222	2.652	0.270	0.117	0.005	1.234	0.273	5.413	0.050
353.07	0.751	0.018	11.938	0.018	5.151	0.035	1.248	0.196	3.321	0.405	0.112	0.005	1.251	0.294	5.935	0.050
353.09	0.751	0.018	11.948	0.016	5.401	0.046	1.128	0.177	3.879	0.528	0.113	0.005	1.260	0.296	6.382	0.050
353.10	0.751	0.018	11.952	0.016	5.584	0.058	1.087	0.173	4.336	0.676	0.107	0.006	1.268	0.316	6.806	0.050
353.08	0.946	0.017	6.002	0.018	0	-	1.933	0.187	-	-	0.049	0.016	1.542	0.045	3.524	0.050
353.09	0.946	0.017	6.020	0.016	0.435	0.002	1.736	0.166	0.444	0.016	0.047	0.016	1.574	0.040	3.802	0.050
353.11	0.946	0.017	6.039	0.014	0.874	0.003	1.528	0.144	1.064	0.036	0.052	0.016	1.590	0.033	4.236	0.050
353.08	0.946	0.017	6.050	0.013	1.208	0.005	1.399	0.131	1.617	0.053	0.048	0.016	1.601	0.029	4.672	0.050
353.08	0.946	0.017	6.062	0.012	1.513	0.007	1.272	0.119	2.224	0.073	0.046	0.016	1.608	0.026	5.155	0.050
353.06	0.946	0.017	6.070	0.011	1.725	0.008	1.176	0.110	2.718	0.091	0.045	0.016	1.610	0.025	5.553	0.050
353.14	0.946	0.017	6.080	0.011	2.017	0.011	1.072	0.100	3.488	0.122	0.045	0.017	1.621	0.024	6.232	0.050
353.13	0.946	0.017	6.087	0.010	2.229	0.014	0.992	0.092	4.119	0.152	0.046	0.017	1.630	0.024	6.791	0.050
353.18	0.959	0.017	11.906	0.040	0	-	4.492	0.455	-	-	0.046	0.014	1.379	0.051	5.918	0.050
353.17	0.959	0.017	11.941	0.036	0.771	0.001	4.044	0.404	0.264	0.011	0.048	0.014	1.400	0.048	5.774	0.050
353.19	0.959	0.017	11.986	0.031	1.476	0.002	3.499	0.345	0.410	0.017	0.044	0.015	1.420	0.045	5.374	0.050
353.08	0.959	0.017	12.027	0.026	2.073	0.002	3.015	0.294	0.541	0.021	0.038	0.015	1.457	0.043	5.051	0.050
353.02	0.959	0.017	12.064	0.023	2.663	0.003	2.583	0.249	0.742	0.028	0.036	0.015	1.482	0.040	4.831	0.050
353.09	0.959	0.017	12.104	0.019	3.292	0.003	2.129	0.203	1.074	0.038	0.044	0.016	1.537	0.036	4.785	0.050
353.09	0.959	0.017	12.138	0.016	3.936	0.005	1.753	0.165	1.635	0.055	0.038	0.016	1.557	0.031	4.988	0.050
353.07	0.959	0.017	12.166	0.013	4.446	0.007	1.444	0.135	2.325	0.077	0.039	0.016	1.598	0.027	5.409	0.050
353.09	0.959	0.017	12.188	0.011	4.891	0.010	1.211	0.113	3.197	0.110	0.035	0.017	1.630	0.024	6.077	0.050
353.05	0.959	0.017	12.195	0.011	5.079	0.012	1.131	0.105	3.644	0.129	0.037	0.017	1.629	0.024	6.436	0.050
353.13	0.959	0.017	12.200	0.010	5.215	0.013	1.073	0.100	4.035	0.148	0.039	0.017	1.643	0.024	6.794	0.050

Tabelle A 7.2: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol + Wasser-Gemischen (Fortsetzung)

T K	x_M	Δx_M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta \bar{m}_{NH_3}$ mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$\Delta \bar{m}_{CO_2}$ mol/kg	$10 \cdot p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot p_{CO_2}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{CO_2}$ MPa	$10 \cdot p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot p_M$ MPa	$10 \cdot \Delta p_M$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
353.04	1.000	0.005	6.292	0.017	0	-	2.100	0.177	-	-	0.019	0.021	1.616	0.048	3.735	0.050
353.06	1.000	0.005	6.299	0.018	0.173	0.001	2.017	0.194	0.153	0.006	0.023	0.017	1.628	0.046	3.821	0.050
353.03	1.000	0.005	6.312	0.017	0.492	0.002	1.867	0.178	0.535	0.019	0.027	0.017	1.642	0.041	4.071	0.050
353.06	1.000	0.005	6.335	0.015	1.039	0.004	1.611	0.152	1.337	0.045	0.022	0.017	1.665	0.033	4.634	0.050
353.07	1.000	0.005	6.351	0.013	1.481	0.006	1.428	0.134	2.132	0.070	0.021	0.017	1.675	0.028	5.260	0.050
353.12	1.000	0.005	6.370	0.012	1.890	0.009	1.223	0.114	3.025	0.102	0.025	0.017	1.686	0.025	5.963	0.050
353.12	1.000	0.005	6.380	0.011	2.168	0.012	1.108	0.103	3.691	0.130	0.022	0.017	1.699	0.025	6.525	0.050
353.12	1.000	0.005	6.388	0.010	2.348	0.014	1.025	0.095	4.202	0.154	0.023	0.017	1.707	0.025	6.960	0.050
353.22	1.000	0.005	11.913	0.026	0	-	4.683	0.762	-	-	0.006	0.008	1.518	0.088	6.211	0.050
353.16	1.000	0.005	11.937	0.022	1.071	0.002	3.873	0.625	0.413	0.043	0.006	0.008	1.547	0.080	5.841	0.050
353.28	1.000	0.005	11.964	0.018	2.004	0.003	3.066	0.496	0.658	0.067	0.006	0.009	1.631	0.075	5.364	0.050
353.26	1.000	0.005	11.993	0.014	2.981	0.004	2.243	0.368	1.106	0.109	0.005	0.009	1.697	0.065	5.053	0.050
353.27	1.000	0.005	12.015	0.011	3.781	0.006	1.630	0.277	1.861	0.180	0.006	0.010	1.759	0.056	5.258	0.050
353.23	1.000	0.005	12.034	0.008	4.598	0.011	1.095	0.206	3.241	0.312	0.006	0.010	1.787	0.054	6.134	0.050
353.25	1.000	0.005	12.048	0.007	5.417	0.020	0.705	0.161	5.692	0.559	0.006	0.010	1.807	0.061	8.228	0.050
353.23	1.000	0.005	12.059	0.005	6.163	0.032	0.401	0.092	9.131	0.926	0.006	0.010	1.814	0.071	11.402	0.100
353.22	1.000	0.005	12.063	0.005	6.924	0.049	0.305	0.070	13.691	1.443	0.005	0.010	1.860	0.079	15.943	0.100
353.26	1.000	0.005	12.067	0.004	7.621	0.071	0.219	0.051	18.778	2.068	0.006	0.011	1.946	0.088	21.064	0.100
353.26	1.000	0.005	12.071	0.004	8.407	0.100	0.144	0.033	25.290	2.945	0.008	0.011	2.065	0.101	27.665	0.100
353.26	1.000	0.005	12.075	0.004	9.193	0.136	0.074	0.017	32.300	4.001	0.011	0.012	2.165	0.114	34.756	0.100
353.26	1.000	0.005	12.080	0.004	9.976	0.177	0.000	0.000	39.863	5.244	0.011	0.012	2.290	0.129	42.408	0.100
353.27	1.000	0.005	12.085	0.004	11.056	0.232	0.000	0.000	50.678	6.898	0.011	0.015	2.695	0.157	53.700	0.100

Tabelle A 7.2: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol + Wasser-Gemischen (Fortsetzung)

T K	x_M	Δx_M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta \bar{m}_{NH_3}$ mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$\Delta \bar{m}_{CO_2}$ mol/kg	$10 \cdot p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot p_{CO_2}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{CO_2}$ MPa	$10 \cdot p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot p_M$ MPa	$10 \cdot \Delta p_M$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
393.13	0.049	0.002	6.146	0.005	0	-	2.678	0.202	-	-	2.122	0.057	0.510	0.056	5.311	0.050
393.23	0.049	0.002	6.157	0.004	0.769	0.001	2.168	0.152	0.560	0.013	2.169	0.037	0.545	0.059	5.450	0.050
393.14	0.049	0.002	6.169	0.004	1.533	0.001	1.649	0.111	1.910	0.040	2.441	0.030	0.571	0.061	6.576	0.050
393.22	0.049	0.002	6.174	0.003	2.207	0.003	1.434	0.096	5.175	0.109	2.313	0.022	0.673	0.072	9.634	0.050
393.13	0.049	0.002	6.180	0.003	2.807	0.007	1.145	0.077	10.883	0.296	2.317	0.027	0.726	0.078	15.161	0.100
393.16	0.049	0.002	6.186	0.003	3.159	0.015	0.868	0.059	17.049	0.667	2.069	0.032	0.799	0.086	20.964	0.100
393.23	0.049	0.002	6.186	0.003	3.384	0.023	0.874	0.060	22.021	0.995	2.239	0.041	0.805	0.087	26.097	0.100
393.22	0.049	0.002	6.189	0.003	3.621	0.039	0.739	0.052	29.195	1.640	2.321	0.053	0.752	0.082	33.210	0.100
393.15	0.049	0.002	6.192	0.003	3.792	0.061	0.624	0.045	35.822	2.541	2.241	0.065	0.844	0.094	39.814	0.100
393.22	0.049	0.002	6.195	0.003	3.956	0.123	0.456	0.036	46.591	5.068	1.945	0.086	0.792	0.093	49.889	0.100
393.10	0.049	0.002	11.847	0.011	0	-	5.614	0.562	-	-	2.531	0.097	0.453	0.052	8.613	0.050
393.15	0.049	0.002	11.859	0.008	1.102	0.001	4.845	0.414	0.379	0.011	2.575	0.064	0.463	0.051	8.272	0.050
393.27	0.049	0.002	11.868	0.007	2.061	0.001	4.379	0.345	1.045	0.028	2.707	0.055	0.486	0.053	8.618	0.050
393.18	0.049	0.002	11.877	0.006	3.081	0.001	3.818	0.288	2.397	0.057	2.582	0.042	0.519	0.056	9.342	0.050
393.21	0.049	0.002	11.885	0.006	4.110	0.002	3.363	0.253	4.870	0.117	2.265	0.034	0.609	0.066	11.129	0.100
393.30	0.049	0.002	11.900	0.004	4.971	0.005	2.566	0.182	9.544	0.259	2.082	0.025	0.769	0.083	15.051	0.100
393.20	0.049	0.002	11.918	0.004	5.718	0.016	1.608	0.113	17.176	0.812	1.647	0.030	0.906	0.099	21.504	0.100
393.29	0.049	0.002	11.917	0.004	6.314	0.029	1.692	0.120	25.887	1.496	1.983	0.045	0.845	0.093	30.689	0.100
393.19	0.049	0.002	11.916	0.004	6.695	0.058	1.622	0.122	35.353	2.907	1.863	0.063	0.767	0.086	39.984	0.100
393.25	0.049	0.002	11.925	0.003	7.012	0.099	1.180	0.094	47.239	4.929	1.958	0.086	0.681	0.079	51.359	0.100
393.17	0.246	0.009	5.938	0.006	0	-	2.762	0.219	-	-	1.824	0.052	2.107	0.237	6.696	0.050
393.20	0.246	0.009	5.952	0.005	0.718	0.001	2.222	0.159	1.396	0.035	2.101	0.039	2.141	0.236	7.875	0.050
393.13	0.246	0.009	5.958	0.005	1.352	0.003	2.005	0.142	4.399	0.113	1.817	0.031	2.400	0.266	10.649	0.100
393.15	0.246	0.009	5.968	0.004	1.990	0.007	1.662	0.114	9.440	0.283	1.779	0.025	2.610	0.290	15.581	0.100
393.16	0.246	0.009	5.976	0.004	2.525	0.019	1.351	0.093	16.687	0.726	1.771	0.030	2.748	0.307	22.725	0.100
393.18	0.246	0.009	5.983	0.004	2.955	0.045	1.087	0.077	25.490	1.644	1.724	0.043	2.823	0.321	31.339	0.100
393.16	0.246	0.009	5.988	0.004	3.251	0.076	0.955	0.070	33.360	2.740	1.754	0.057	3.044	0.353	39.383	0.100
393.25	0.246	0.009	5.991	0.003	3.477	0.104	0.885	0.067	39.535	3.725	1.801	0.068	3.161	0.372	45.786	0.100
393.12	0.246	0.009	5.993	0.003	3.644	0.138	0.824	0.065	45.733	4.889	1.834	0.079	3.364	0.404	52.180	0.100

Tabelle A 7.2: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol + Wasser-Gemischen (Fortsetzung)

T K	x_M	Δx_M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta \bar{m}_{NH_3}$ mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$\Delta \bar{m}_{CO_2}$ mol/kg	$10 \cdot p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot p_{CO_2}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{CO_2}$ MPa	$10 \cdot p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot p_M$ MPa	$10 \cdot \Delta p_M$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
393.15	0.250	0.010	11.708	0.013	0	-	5.528	0.662	-	-	1.970	0.082	2.250	0.262	9.762	0.050
393.12	0.250	0.010	11.719	0.011	0.979	0.001	4.863	0.535	0.821	0.028	1.836	0.054	2.418	0.274	9.949	0.050
393.21	0.250	0.010	11.730	0.010	1.905	0.001	4.323	0.471	2.014	0.065	1.638	0.045	2.769	0.317	10.769	0.100
393.14	0.250	0.010	11.738	0.009	2.818	0.002	3.937	0.403	3.764	0.111	1.588	0.036	2.915	0.333	12.250	0.100
393.14	0.250	0.010	11.762	0.006	3.716	0.005	2.808	0.234	7.432	0.227	1.501	0.026	3.227	0.371	15.011	0.100
393.23	0.250	0.010	11.764	0.005	4.579	0.010	2.639	0.213	12.732	0.508	1.520	0.025	2.980	0.340	19.974	0.100
393.11	0.250	0.010	11.773	0.005	5.165	0.021	2.229	0.168	18.721	0.993	1.562	0.031	3.073	0.351	25.646	0.100
393.13	0.250	0.010	11.779	0.004	5.630	0.037	1.954	0.146	25.680	1.795	1.590	0.042	3.191	0.370	32.490	0.100
393.08	0.250	0.010	11.784	0.004	5.933	0.056	1.811	0.138	31.563	2.659	1.604	0.052	3.403	0.402	38.443	0.100
393.10	0.250	0.010	11.797	0.004	6.187	0.076	1.330	0.104	37.130	3.560	1.666	0.062	3.677	0.442	43.866	0.100
393.15	0.250	0.010	11.792	0.004	6.427	0.109	1.525	0.124	44.184	5.083	1.644	0.075	3.673	0.452	51.089	0.100
393.09	0.494	0.022	6.075	0.008	0	-	2.783	0.242	-	-	1.539	0.052	3.682	0.442	8.082	0.050
393.07	0.494	0.022	6.081	0.007	0.648	0.003	2.585	0.223	2.800	0.090	1.365	0.036	4.008	0.490	10.789	0.100
393.19	0.494	0.022	6.088	0.007	1.287	0.007	2.408	0.204	7.053	0.245	1.274	0.028	4.599	0.585	15.401	0.100
393.11	0.494	0.022	6.102	0.005	1.801	0.018	1.906	0.144	13.242	0.610	1.331	0.026	4.357	0.539	20.874	0.100
393.12	0.494	0.022	6.109	0.005	2.233	0.035	1.705	0.127	19.017	1.169	1.348	0.031	4.559	0.571	26.677	0.100
393.14	0.494	0.022	6.112	0.005	2.665	0.067	1.616	0.128	25.230	2.191	1.269	0.040	4.688	0.614	32.940	0.100
393.07	0.494	0.022	6.121	0.005	3.019	0.089	1.381	0.105	31.321	2.897	1.445	0.051	4.923	0.632	39.153	0.100
393.21	0.494	0.022	6.124	0.005	3.314	0.120	1.318	0.103	37.476	3.899	1.536	0.061	5.177	0.671	45.576	0.100
393.08	0.494	0.022	6.133	0.004	3.564	0.170	1.024	0.086	43.094	5.510	1.435	0.072	5.201	0.703	50.799	0.100
392.81	0.498	0.023	11.643	0.027	0	-	6.008	1.105	-	-	1.493	0.071	4.237	0.541	11.739	0.100
392.96	0.498	0.023	11.661	0.022	0.964	0.003	5.113	0.895	2.373	0.103	1.305	0.052	4.233	0.543	13.030	0.100
393.32	0.498	0.023	11.680	0.017	2.009	0.005	4.301	0.651	5.444	0.202	1.210	0.034	4.256	0.543	15.191	0.100
393.34	0.498	0.023	11.694	0.013	2.927	0.010	3.709	0.501	9.485	0.405	1.137	0.026	4.387	0.569	18.763	0.100
393.25	0.498	0.023	11.712	0.009	3.758	0.018	2.951	0.328	13.174	0.716	1.082	0.024	4.293	0.560	21.524	0.100
393.28	0.498	0.023	11.722	0.007	4.359	0.033	2.647	0.267	18.238	1.301	1.096	0.029	4.576	0.611	26.597	0.100
393.29	0.498	0.023	11.730	0.007	4.952	0.059	2.436	0.233	24.931	2.324	1.129	0.038	4.927	0.676	33.480	0.100
393.26	0.498	0.023	11.743	0.006	5.415	0.096	1.981	0.178	31.988	3.750	1.150	0.051	5.007	0.701	40.154	0.100
393.29	0.498	0.023	11.749	0.006	5.752	0.136	1.913	0.178	38.029	5.265	1.158	0.061	5.435	0.796	46.567	0.100
393.30	0.498	0.023	11.751	0.006	6.018	0.159	1.942	0.182	42.495	6.141	1.239	0.069	5.621	0.820	51.349	0.100

Tabelle A 7.2: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol + Wasser-Gemischen (Fortsetzung)

T K	x_M	Δx_M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta \bar{m}_{NH_3}$ mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$\Delta \bar{m}_{CO_2}$ mol/kg	$10 \cdot p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot p_{CO_2}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{CO_2}$ MPa	$10 \cdot p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot p_M$ MPa	$10 \cdot \Delta p_M$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
393.27	0.750	0.019	5.737	0.018	0	-	4.094	0.555	-	-	0.564	0.049	4.589	0.612	9.247	0.050
393.15	0.750	0.019	5.741	0.014	0.687	0.008	4.062	0.430	4.482	0.253	0.650	0.017	5.272	0.547	14.491	0.100
393.20	0.750	0.019	5.742	0.014	1.177	0.015	4.088	0.428	8.551	0.479	0.698	0.016	5.843	0.614	19.213	0.100
393.05	0.750	0.019	5.761	0.012	1.642	0.025	3.540	0.367	13.710	0.782	0.753	0.016	6.217	0.645	24.256	0.100
392.18	0.749	0.019	5.755	0.013	2.151	0.037	3.802	0.395	19.194	1.145	0.774	0.017	6.746	0.727	30.539	0.100
392.76	0.749	0.019	5.766	0.012	2.445	0.050	3.509	0.365	24.803	1.574	0.760	0.018	7.044	0.790	36.032	0.100
392.99	0.749	0.019	5.774	0.011	2.668	0.060	3.290	0.342	28.677	1.882	0.790	0.019	7.292	0.818	40.084	0.100
393.02	0.749	0.019	5.775	0.012	2.988	0.073	3.310	0.345	33.198	2.286	0.801	0.021	7.622	0.874	44.966	0.100
393.03	0.749	0.019	5.779	0.011	3.302	0.088	3.233	0.337	38.036	2.748	0.821	0.022	7.951	0.925	50.089	0.100
392.99	0.747	0.019	11.985	0.037	0	-	9.612	1.481	-	-	0.526	0.048	4.106	0.551	14.251	0.100
393.10	0.747	0.019	11.983	0.033	0.789	0.003	9.586	1.268	2.001	0.127	0.501	0.020	4.526	0.521	16.632	0.100
393.19	0.747	0.019	11.994	0.030	1.201	0.006	9.091	1.149	3.587	0.219	0.525	0.018	4.667	0.523	17.883	0.100
393.25	0.747	0.019	11.998	0.030	2.066	0.011	8.890	1.134	6.771	0.407	0.488	0.015	5.075	0.625	21.254	0.100
393.22	0.747	0.019	12.016	0.027	2.835	0.017	8.223	1.017	10.443	0.631	0.487	0.013	5.495	0.712	24.666	0.100
393.16	0.747	0.019	12.049	0.022	3.642	0.026	7.044	0.814	15.586	0.972	0.537	0.013	5.856	0.742	29.068	0.100
393.06	0.747	0.019	12.064	0.021	4.437	0.041	6.597	0.762	21.872	1.532	0.505	0.013	6.357	0.893	35.361	0.100
393.14	0.747	0.019	12.081	0.019	4.971	0.058	6.046	0.691	27.379	2.130	0.503	0.014	6.728	0.995	40.704	0.100
393.08	0.747	0.019	12.114	0.014	5.495	0.057	4.930	0.524	30.594	2.138	0.730	0.018	6.906	0.799	43.245	0.100
392.99	0.747	0.019	12.125	0.014	6.055	0.079	4.717	0.505	37.811	2.941	0.706	0.020	7.464	0.930	50.729	0.100
393.11	0.946	0.013	5.786	0.023	0.000	0.000	4.917	0.851	-	-	0.136	0.031	5.478	0.222	10.537	0.100
393.11	0.946	0.013	5.790	0.024	0.711	0.013	4.947	0.878	4.896	0.470	0.139	0.036	6.619	0.199	16.641	0.100
393.11	0.946	0.013	5.785	0.025	1.398	0.027	5.220	0.928	10.792	1.035	0.155	0.039	7.061	0.207	23.285	0.100
393.16	0.946	0.013	5.792	0.024	2.079	0.044	5.006	0.905	17.753	1.719	0.150	0.040	7.175	0.223	30.238	0.100
393.13	0.946	0.013	5.793	0.024	2.739	0.061	5.042	0.923	24.583	2.406	0.152	0.041	7.486	0.246	37.322	0.100
393.16	0.946	0.013	5.800	0.023	3.404	0.076	4.870	0.923	31.216	3.085	0.171	0.044	7.985	0.274	44.336	0.100
393.12	0.946	0.013	5.804	0.022	4.078	0.094	4.750	0.911	38.966	3.908	0.169	0.044	7.998	0.290	51.981	0.100

Tabelle A 7.2: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol + Wasser-Gemischen (Fortsetzung)

T K	x_M	Δx_M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta \bar{m}_{NH_3}$ mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$\Delta \bar{m}_{CO_2}$ mol/kg	$10 \cdot p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot p_{CO_2}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{CO_2}$ MPa	$10 \cdot p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot p_M$ MPa	$10 \cdot \Delta p_M$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
392.98	0.953	0.010	11.626	0.051	0	-	10.130	1.653	-	-	0.103	0.029	5.265	0.268	15.560	0.100
393.14	0.953	0.010	11.640	0.049	0.896	0.011	9.677	1.565	3.657	0.365	0.096	0.032	5.862	0.237	19.322	0.100
393.15	0.953	0.010	11.645	0.047	1.745	0.025	9.361	1.504	8.051	0.788	0.102	0.032	5.775	0.205	23.335	0.100
393.18	0.953	0.010	11.670	0.043	2.620	0.036	8.542	1.382	11.820	1.149	0.123	0.033	6.023	0.198	26.576	0.100
393.14	0.953	0.010	11.680	0.043	3.460	0.051	8.307	1.357	16.641	1.618	0.131	0.036	6.530	0.210	31.679	0.100
393.04	0.953	0.010	11.706	0.039	4.235	0.067	7.480	1.243	21.857	2.137	0.147	0.037	6.782	0.221	36.302	0.100
393.10	0.953	0.010	11.751	0.033	5.069	0.081	6.035	1.036	26.231	2.586	0.208	0.038	6.746	0.227	39.334	0.100
393.11	0.953	0.010	11.756	0.033	5.840	0.104	5.977	1.040	33.545	3.347	0.206	0.040	7.143	0.251	46.978	0.100
393.04	0.953	0.010	11.767	0.032	6.573	0.130	5.776	1.027	41.520	4.197	0.216	0.042	7.553	0.277	55.202	0.100
393.04	1.000	0.005	5.748	0.036	0	-	5.139	0.883	-	-	0.011	0.030	5.455	0.227	10.617	0.100
393.09	1.000	0.005	5.743	0.038	0.800	0.022	5.392	0.931	5.625	0.541	0.012	0.034	6.334	0.195	17.431	0.100
393.20	1.000	0.005	5.767	0.033	1.526	0.054	4.754	0.831	14.120	1.367	0.009	0.032	5.931	0.185	24.915	0.100
393.34	1.000	0.005	5.771	0.031	2.240	0.085	4.590	0.797	22.176	2.194	0.009	0.030	5.447	0.187	32.380	0.100
392.92	1.000	0.005	12.116	0.049	0	-	8.371	1.418	-	-	0.012	0.072	7.944	0.339	16.361	0.100
392.85	1.000	0.005	12.033	0.055	0.866	0.011	10.324	1.631	3.388	0.312	0.000	0.091	6.730	0.079	20.493	0.100
392.91	1.000	0.005	12.037	0.055	1.749	0.020	10.081	1.620	6.237	0.596	0.022	0.070	6.811	0.195	23.215	0.100
392.81	1.000	0.005	12.048	0.052	2.558	0.038	9.540	1.528	11.611	1.116	0.016	0.063	6.443	0.160	27.667	0.100
392.82	1.000	0.005	12.057	0.050	3.370	0.058	9.096	1.468	17.221	1.723	0.027	0.056	6.163	0.207	32.580	0.100
392.92	1.000	0.005	12.088	0.046	3.965	0.069	8.268	1.356	20.407	2.055	0.047	0.060	6.655	0.222	35.481	0.100
392.91	1.000	0.005	12.095	0.046	4.748	0.090	8.160	1.352	25.787	2.647	0.046	0.064	7.082	0.244	41.175	0.100
392.90	1.000	0.005	12.119	0.043	5.511	0.114	7.527	1.272	32.099	3.375	0.052	0.068	7.456	0.270	47.238	0.100
392.97	1.000	0.005	12.141	0.039	6.251	0.142	6.823	1.172	38.701	4.230	0.094	0.067	7.370	0.286	53.141	0.100

Tabelle A 7.3: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol + Wasser + Natriumchlorid-Lösungen

T K	\bar{m}_{NaCl} mol/kg	$\Delta\bar{m}_{\text{NaCl}}$ mol/kg	x_M	Δx_M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta\bar{m}_{\text{NH}_3}$ mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$\Delta\bar{m}_{\text{CO}_2}$ mol/kg	$10 \cdot p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot p_{\text{CO}_2}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{CO}_2}$ MPa	$10 \cdot p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot p_M$ MPa	$10 \cdot \Delta p_M$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
353.16	0.733	0.001	0.500	0.023	6.030	0.020	0	-	1.386	0.222	-	-	0.254	0.018	0.893	0.096	2.534	0.050
353.12	0.733	0.001	0.500	0.023	6.045	0.016	0.502	0.001	1.214	0.182	0.075	0.005	0.248	0.011	0.916	0.087	2.454	0.050
353.14	0.733	0.001	0.500	0.023	6.061	0.014	0.991	0.002	1.025	0.152	0.269	0.018	0.246	0.010	0.957	0.092	2.497	0.050
353.13	0.733	0.001	0.500	0.023	6.075	0.012	1.485	0.003	0.863	0.126	0.603	0.039	0.245	0.008	0.986	0.095	2.698	0.050
353.12	0.733	0.001	0.500	0.023	6.089	0.010	1.986	0.006	0.704	0.102	1.159	0.074	0.240	0.007	1.018	0.100	3.124	0.050
353.12	0.733	0.001	0.500	0.023	6.106	0.008	2.552	0.013	0.516	0.074	2.257	0.155	0.234	0.006	1.044	0.106	4.053	0.050
353.12	0.733	0.001	0.500	0.023	6.112	0.007	2.892	0.022	0.440	0.064	3.264	0.253	0.232	0.007	1.043	0.108	4.984	0.050
353.12	0.733	0.001	0.500	0.023	6.117	0.007	3.130	0.032	0.386	0.056	4.165	0.368	0.226	0.007	1.050	0.112	5.833	0.050
353.11	0.733	0.001	0.500	0.023	6.121	0.006	3.284	0.042	0.335	0.049	4.911	0.487	0.222	0.008	1.045	0.114	6.518	0.050
353.06	2.004	0.001	0.246	0.009	5.939	0.015	0	-	1.155	0.178	-	-	0.315	0.018	0.588	0.047	2.059	0.050
353.14	2.004	0.001	0.246	0.009	5.956	0.012	0.629	0.001	0.953	0.142	0.030	0.002	0.313	0.014	0.632	0.045	1.929	0.050
353.07	2.004	0.001	0.246	0.009	5.969	0.010	1.172	0.001	0.795	0.118	0.117	0.008	0.308	0.013	0.657	0.047	1.878	0.050
353.13	2.005	0.001	0.246	0.009	5.983	0.009	1.713	0.002	0.632	0.092	0.307	0.020	0.311	0.011	0.692	0.048	1.942	0.050
353.14	2.005	0.001	0.246	0.009	5.999	0.007	2.304	0.004	0.448	0.065	0.754	0.047	0.313	0.009	0.730	0.049	2.246	0.050
353.11	2.005	0.001	0.246	0.009	6.011	0.006	3.038	0.010	0.298	0.043	2.034	0.129	0.310	0.008	0.746	0.050	3.398	0.050
353.12	2.005	0.001	0.246	0.009	6.017	0.005	3.536	0.020	0.223	0.032	3.430	0.245	0.306	0.008	0.747	0.051	4.714	0.050
353.09	2.005	0.001	0.246	0.009	6.023	0.005	3.941	0.040	0.147	0.021	5.490	0.488	0.301	0.010	0.726	0.052	6.672	0.050
353.08	0.255	0.001	0.747	0.038	5.869	0.027	0	-	1.703	0.297	-	-	0.158	0.014	1.146	0.202	3.007	0.050
353.08	0.255	0.001	0.747	0.038	5.890	0.021	0.539	0.002	1.470	0.229	0.264	0.019	0.161	0.008	1.185	0.192	3.082	0.050
353.08	0.255	0.001	0.747	0.038	5.907	0.018	0.992	0.005	1.277	0.196	0.700	0.050	0.153	0.007	1.218	0.210	3.349	0.050
353.06	0.255	0.001	0.747	0.038	5.919	0.017	1.370	0.008	1.147	0.174	1.195	0.087	0.150	0.006	1.236	0.218	3.731	0.050
353.08	0.255	0.001	0.747	0.038	5.940	0.013	1.931	0.016	0.917	0.136	2.247	0.181	0.155	0.005	1.256	0.216	4.577	0.050
353.08	0.255	0.001	0.747	0.038	5.946	0.012	2.176	0.024	0.844	0.125	2.858	0.261	0.150	0.005	1.271	0.229	5.126	0.050
353.08	0.255	0.001	0.747	0.038	5.954	0.011	2.468	0.037	0.754	0.112	3.735	0.407	0.146	0.006	1.287	0.240	5.926	0.050
353.10	0.255	0.001	0.747	0.038	5.962	0.010	2.727	0.058	0.660	0.100	4.719	0.631	0.141	0.007	1.292	0.253	6.818	0.050

Tabelle A 7.3: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol + Wasser + Natriumchlorid-Lösungen (Fortsetzung)

T K	\bar{m}_{NaCl} mol/kg	$\Delta\bar{m}_{\text{NaCl}}$ mol/kg	x_M	Δx_M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta\bar{m}_{\text{NH}_3}$ mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$\Delta\bar{m}_{\text{CO}_2}$ mol/kg	$10 \cdot p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{NH}_3}$ MPa	$10 \cdot p_{\text{CO}_2}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{CO}_2}$ MPa	$10 \cdot p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot \Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$ MPa	$10 \cdot p_M$ MPa	$10 \cdot \Delta p_M$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
392.67	2.022	0.001	0.247	0.009	6.394	0.011	0	-	3.295	0.359	-	-	1.319	0.057	2.305	0.185	6.930	0.050
392.91	2.023	0.001	0.247	0.009	6.416	0.009	0.888	0.001	2.605	0.266	0.632	0.034	1.561	0.035	2.547	0.179	7.323	0.050
392.96	2.024	0.001	0.246	0.009	6.428	0.008	1.771	0.005	2.315	0.236	3.078	0.167	1.485	0.030	3.146	0.230	10.087	0.100
393.03	2.026	0.001	0.246	0.009	6.443	0.007	2.577	0.014	1.984	0.201	7.913	0.446	1.647	0.031	4.038	0.305	15.670	0.100
392.98	2.026	0.001	0.246	0.009	6.455	0.006	3.165	0.033	1.610	0.164	15.998	1.039	1.754	0.039	4.113	0.310	23.635	0.100
393.00	2.027	0.001	0.246	0.009	6.467	0.005	3.642	0.090	1.251	0.133	27.487	2.789	1.331	0.050	4.492	0.408	34.851	0.100
393.06	2.029	0.001	0.245	0.009	6.485	0.004	4.096	0.142	0.882	0.095	40.200	4.310	1.845	0.076	5.078	0.443	48.178	0.100
393.04	2.030	0.001	0.245	0.009	6.501	0.003	4.256	0.191	0.434	0.048	47.808	5.725	1.884	0.090	5.083	0.453	55.272	0.100
393.20	0.998	0.001	0.245	0.010	6.267	0.010	0	-	3.194	0.345	-	-	1.406	0.058	2.230	0.174	6.830	0.050
393.10	0.998	0.001	0.245	0.010	6.281	0.008	0.763	0.001	2.687	0.275	0.697	0.038	1.487	0.034	2.415	0.170	7.287	0.050
393.15	0.998	0.001	0.245	0.010	6.290	0.008	1.510	0.004	2.413	0.245	2.899	0.155	1.574	0.029	2.884	0.203	9.783	0.050
393.00	0.999	0.001	0.245	0.010	6.305	0.006	2.198	0.011	1.948	0.197	7.078	0.393	1.675	0.031	3.291	0.235	14.039	0.100
392.98	0.999	0.001	0.245	0.010	6.319	0.005	2.812	0.025	1.506	0.153	14.117	0.887	1.720	0.037	3.658	0.269	21.073	0.100
393.13	1.000	0.001	0.244	0.010	6.330	0.005	3.333	0.048	1.228	0.126	23.061	1.653	1.999	0.052	4.083	0.303	30.459	0.100
392.92	1.001	0.001	0.244	0.010	6.343	0.004	3.761	0.095	0.865	0.091	35.068	3.209	2.024	0.070	4.523	0.359	42.625	0.100
393.10	1.001	0.001	0.244	0.010	6.354	0.004	4.091	0.162	0.630	0.068	48.064	5.360	2.097	0.092	4.922	0.417	55.813	0.100
393.26	1.005	0.002	0.498	0.026	6.065	0.014	0	-	3.504	0.423	-	-	0.919	0.061	3.686	0.411	8.106	0.050
393.55	1.007	0.002	0.498	0.026	6.110	0.008	1.858	0.018	2.321	0.238	8.525	0.540	1.030	0.023	4.816	0.484	16.741	0.100
393.48	1.007	0.002	0.498	0.026	6.124	0.007	2.508	0.040	1.987	0.205	15.378	1.173	1.152	0.030	5.211	0.519	23.834	0.100
393.50	1.008	0.002	0.497	0.026	6.141	0.006	3.091	0.074	1.604	0.168	23.599	2.122	1.345	0.043	5.716	0.560	32.418	0.100
393.56	1.009	0.002	0.497	0.026	6.167	0.004	3.633	0.112	0.985	0.104	32.752	3.182	1.681	0.061	6.199	0.578	41.853	0.100
393.49	1.011	0.002	0.497	0.026	6.179	0.004	4.139	0.146	0.987	0.104	41.895	4.044	2.175	0.079	7.484	0.678	52.808	0.100
393.27	0.356	0.002	0.735	0.044	6.730	0.022	0	-	4.523	0.635	-	-	0.554	0.052	4.718	0.844	9.807	0.050
393.26	0.356	0.002	0.735	0.044	6.744	0.016	0.704	0.007	4.157	0.455	2.989	0.193	0.607	0.022	5.248	0.833	13.029	0.100
393.28	0.356	0.002	0.735	0.044	6.754	0.015	1.476	0.023	3.936	0.423	8.441	0.666	0.625	0.020	5.731	0.949	18.807	0.100
393.27	0.357	0.002	0.735	0.044	6.761	0.014	2.117	0.048	3.809	0.409	14.023	1.383	0.693	0.024	6.149	0.993	24.780	0.100
393.31	0.357	0.002	0.735	0.044	6.773	0.014	2.743	0.083	3.528	0.383	20.313	2.359	0.806	0.032	6.667	1.026	31.468	0.100
393.27	0.357	0.002	0.735	0.044	6.783	0.013	3.412	0.114	3.460	0.375	27.076	3.223	1.051	0.043	7.683	1.081	39.472	0.100
393.28	0.358	0.002	0.735	0.044	6.811	0.011	4.074	0.148	2.898	0.315	33.803	4.123	1.289	0.055	8.621	1.146	46.865	0.100
393.26	0.358	0.002	0.735	0.044	6.829	0.010	4.592	0.219	2.532	0.286	41.418	6.057	1.260	0.067	9.302	1.355	54.789	0.100

Tabelle A 7.4: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol + Wasser + Natriumsulfat-Lösungen

T K	\bar{m}_S mol/kg	$\Delta\bar{m}_S$ mol/kg	x_M	Δx_M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta\bar{m}_{NH_3}$ mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$\Delta\bar{m}_{CO_2}$ mol/kg	$10 \cdot p_{NH_3}$ MPa	$10 \Delta p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot p_{CO_2}$ MPa	$10 \Delta p_{CO_2}$ MPa	$10 \cdot p_{H_2O}$ MPa	$10 \Delta p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot p_M$ MPa	$10 \cdot \Delta p_M$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
353.10	0.877	0.001	0.049	0.002	5.934	0.014	0	-	1.197	0.176	-	-	0.405	0.016	0.167	0.009	1.771	0.050
353.11	0.877	0.001	0.049	0.002	5.951	0.011	0.784	0.001	0.969	0.147	0.010	0.001	0.408	0.022	0.192	0.013	1.580	0.050
353.07	0.877	0.001	0.049	0.002	5.967	0.009	1.452	0.001	0.759	0.114	0.049	0.004	0.409	0.021	0.206	0.013	1.424	0.050
353.09	0.877	0.001	0.049	0.002	5.986	0.007	2.259	0.001	0.504	0.075	0.207	0.015	0.417	0.019	0.228	0.014	1.356	0.050
353.09	0.877	0.001	0.049	0.002	6.008	0.005	3.293	0.005	0.215	0.031	1.214	0.076	0.420	0.012	0.253	0.013	2.103	0.050
353.09	0.877	0.001	0.049	0.002	6.012	0.004	3.733	0.012	0.157	0.023	2.499	0.159	0.420	0.011	0.254	0.012	3.334	0.050
353.08	0.878	0.001	0.049	0.002	6.015	0.004	4.087	0.024	0.108	0.016	4.456	0.318	0.415	0.012	0.255	0.013	5.240	0.050
353.11	0.878	0.001	0.049	0.002	6.018	0.004	4.287	0.038	0.073	0.011	6.190	0.508	0.406	0.014	0.254	0.013	6.931	0.050
353.07	0.152	0.001	0.248	0.010	5.982	0.013	0	-	1.143	0.174	-	-	0.362	0.019	0.531	0.038	2.037	0.050
353.08	0.152	0.001	0.248	0.010	6.000	0.011	0.800	0.001	0.909	0.135	0.070	0.005	0.358	0.015	0.590	0.039	1.927	0.050
353.10	0.152	0.001	0.248	0.010	6.011	0.009	1.358	0.001	0.757	0.111	0.212	0.014	0.355	0.014	0.619	0.040	1.946	0.050
353.10	0.152	0.001	0.248	0.010	6.023	0.007	1.921	0.002	0.593	0.086	0.492	0.031	0.358	0.012	0.654	0.041	2.098	0.050
353.10	0.152	0.001	0.248	0.010	6.034	0.006	2.401	0.004	0.450	0.065	0.957	0.059	0.356	0.010	0.685	0.042	2.450	0.050
353.10	0.152	0.001	0.248	0.010	6.042	0.005	2.901	0.008	0.350	0.050	1.812	0.112	0.356	0.009	0.701	0.042	3.222	0.050
353.08	0.152	0.001	0.248	0.010	6.051	0.005	3.557	0.022	0.228	0.033	4.137	0.301	0.347	0.010	0.721	0.046	5.439	0.050
353.18	0.152	0.001	0.248	0.010	6.055	0.004	3.779	0.035	0.168	0.024	5.592	0.474	0.335	0.011	0.708	0.047	6.813	0.050
393.18	0.998	0.001	0.048	0.002	6.665	0.011	0	-	3.626	0.372	-	-	1.747	0.041	0.690	0.046	6.070	0.050
393.13	0.998	0.001	0.048	0.002	6.673	0.010	0.613	0.000	3.265	0.340	0.086	0.005	1.733	0.051	0.786	0.053	5.880	0.050
393.20	0.998	0.001	0.048	0.002	6.688	0.008	1.220	0.001	2.708	0.279	0.384	0.022	1.777	0.046	0.856	0.057	5.735	0.050
393.18	0.998	0.001	0.048	0.002	6.706	0.007	1.818	0.002	2.088	0.212	1.039	0.056	1.919	0.039	0.927	0.060	5.985	0.050
393.19	0.999	0.001	0.048	0.002	6.717	0.006	2.432	0.004	1.746	0.176	2.964	0.156	2.004	0.033	1.210	0.077	7.936	0.050
393.22	0.999	0.001	0.048	0.002	6.737	0.004	3.059	0.010	1.014	0.103	6.598	0.362	1.976	0.038	1.274	0.082	10.898	0.100
393.29	0.999	0.001	0.048	0.002	6.744	0.004	3.524	0.019	0.754	0.077	11.394	0.670	1.934	0.042	1.307	0.086	15.455	0.100
393.23	0.999	0.001	0.048	0.002	6.753	0.003	3.929	0.035	0.442	0.045	18.473	1.239	1.947	0.051	1.360	0.092	22.333	0.100
393.23	0.999	0.001	0.048	0.002	6.765	0.003	4.271	0.062	0.075	0.008	27.438	2.168	2.026	0.065	1.433	0.100	31.138	0.100
393.21	0.999	0.001	0.048	0.002	6.768	0.003	4.540	0.102	0.000	0.000	38.004	3.510	2.167	0.083	1.509	0.110	41.918	0.100
393.29	1.000	0.001	0.048	0.002	6.772	0.003	4.791	0.141	0.000	0.000	49.223	4.714	2.677	0.107	1.683	0.124	53.874	0.100

Tabelle A 7.4: Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen zur simultanen Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Methanol + Wasser + Natriumsulfat-Lösungen (Fortsetzung)

T K	\bar{m}_S mol/kg	$\Delta\bar{m}_S$ mol/kg	x_M	Δx_M	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$\Delta\bar{m}_{NH_3}$ mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$\Delta\bar{m}_{CO_2}$ mol/kg	$10 \cdot p_{NH_3}$ MPa	$10 \Delta p_{NH_3}$ MPa	$10 \cdot p_{CO_2}$ MPa	$10 \Delta p_{CO_2}$ MPa	$10 \cdot p_{H_2O}$ MPa	$10 \Delta p_{H_2O}$ MPa	$10 \cdot p_M$ MPa	$10 \cdot \Delta p_M$ MPa	$10 \cdot p$ MPa	$10 \cdot \Delta p$ MPa
393.29	0.151	0.001	0.249	0.009	5.837	0.009	0	-	2.738	0.293	-	-	1.604	0.062	2.414	0.184	6.761	0.050
393.25	0.151	0.001	0.249	0.009	5.849	0.008	0.621	0.001	2.344	0.239	0.816	0.044	1.619	0.034	2.664	0.186	7.436	0.050
393.28	0.151	0.001	0.248	0.009	5.861	0.007	1.194	0.005	1.994	0.202	2.812	0.150	1.627	0.029	3.071	0.217	9.542	0.050
393.10	0.151	0.001	0.248	0.009	5.875	0.006	1.727	0.010	1.531	0.155	5.823	0.319	1.655	0.030	3.246	0.232	12.298	0.100
393.14	0.151	0.001	0.248	0.009	5.886	0.005	2.231	0.019	1.223	0.124	10.258	0.603	1.643	0.033	3.436	0.250	16.631	0.100
393.03	0.151	0.001	0.248	0.009	5.894	0.005	2.684	0.033	0.990	0.101	16.016	1.047	1.740	0.040	3.640	0.268	22.493	0.100
393.13	0.151	0.001	0.248	0.009	5.907	0.004	3.078	0.056	0.636	0.066	23.399	1.783	1.798	0.051	3.893	0.296	29.882	0.100
393.03	0.151	0.001	0.248	0.009	5.924	0.003	3.419	0.095	0.164	0.017	32.134	2.969	1.797	0.065	4.162	0.334	38.451	0.100
393.15	0.151	0.001	0.248	0.009	5.933	0.003	3.730	0.142	0.000	0.000	41.332	4.362	1.924	0.081	4.564	0.382	48.076	0.100
393.09	0.151	0.001	0.247	0.009	5.939	0.003	4.030	0.206	0.000	0.000	51.401	6.157	2.030	0.098	5.195	0.459	58.931	0.100

A 8 System Kohlendioxid + Ammoniak + Methanol + Wasser: Vergleich zwischen Mess- und Rechenwerten (ELEKTROLYT-UNIQUAC-MODELL)

Tabelle A 8.1: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Methanollösungen: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (UNIQUAC-Modell, Parameter aus Tab. A 1.8)

T	x _M	m̄ _{NH₃}	P _{NH₃,exp}		P _{NH₃,cal}		ΔP _{NH₃}		P _{H₂O,exp}		P _{H₂O,cal}		ΔP _{H₂O}		P _{M,exp}		P _{M,cal}		ΔP _M		P _{exp}		P _{cal}		ΔP	
			mol%	mol/kg	bar	bar	bar	bar	%	bar	bar	bar	bar	%	bar	bar	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar
313.13	0.050	1.849	0.054	0.068	25.93	0.081	0.068	16.05	0.032	0.028	12.50	0.167	0.164	1.80												
313.14	0.050	3.263	0.118	0.126	6.78	0.076	0.066	13.16	0.026	0.027	3.85	0.221	0.219	0.90												
313.15	0.050	4.537	0.173	0.182	5.20	0.074	0.064	13.51	0.024	0.027	12.50	0.271	0.273	0.74												
313.12	0.050	6.031	0.241	0.253	4.98	0.071	0.062	12.68	0.023	0.025	8.70	0.335	0.341	1.79												
313.17	0.049	6.312	0.247	0.267	8.10	0.077	0.062	19.48	0.023	0.025	8.70	0.348	0.354	1.72												
313.20	0.049	7.745	0.323	0.341	5.57	0.073	0.061	16.44	0.021	0.024	14.29	0.417	0.426	2.16												
313.21	0.049	9.188	0.404	0.420	3.96	0.067	0.059	11.94	0.021	0.023	9.52	0.492	0.502	2.03												
313.16	0.049	10.725	0.494	0.507	2.63	0.063	0.057	9.52	0.021	0.022	4.76	0.578	0.586	1.38												
313.14	0.049	12.030	0.570	0.584	2.46	0.067	0.055	17.91	0.020	0.021	5.00	0.657	0.661	0.61												
313.14	0.248	1.756	0.053	0.072	35.85	0.066	0.056	15.15	0.127	0.114	10.24	0.246	0.241	2.03												
313.11	0.248	3.337	0.141	0.145	2.84	0.061	0.054	11.48	0.111	0.110	0.90	0.315	0.309	1.90												
313.10	0.248	4.252	0.190	0.192	1.05	0.058	0.052	10.34	0.107	0.107	0.00	0.356	0.352	1.12												
313.07	0.248	6.056	0.292	0.291	0.34	0.059	0.050	15.25	0.100	0.103	3.00	0.450	0.444	1.33												
313.16	0.245	6.515	0.312	0.318	1.92	0.068	0.050	26.47	0.097	0.101	4.12	0.476	0.469	1.47												
313.06	0.245	8.082	0.420	0.413	1.67	0.063	0.048	23.81	0.089	0.096	7.87	0.571	0.557	2.45												
313.16	0.245	10.586	0.604	0.582	3.64	0.062	0.045	27.42	0.086	0.091	5.81	0.752	0.718	4.52												
313.13	0.245	11.961	0.718	0.679	5.43	0.057	0.043	24.56	0.084	0.088	4.76	0.860	0.810	5.81												
313.23	0.498	1.376	0.052	0.069	32.69	0.062	0.041	33.87	0.190	0.194	2.11	0.304	0.304	0.00												
313.13	0.498	2.860	0.146	0.153	4.79	0.057	0.039	31.58	0.175	0.187	6.86	0.380	0.379	0.26												
313.13	0.498	4.319	0.249	0.246	1.20	0.055	0.037	32.73	0.164	0.181	10.37	0.467	0.465	0.43												
313.76	0.498	6.050	0.383	0.377	1.57	0.057	0.037	35.09	0.161	0.179	11.18	0.602	0.593	1.50												
313.07	0.497	7.574	0.508	0.483	4.92	0.050	0.034	32.00	0.153	0.166	8.50	0.712	0.683	4.07												
313.04	0.497	8.959	0.638	0.596	6.58	0.050	0.032	36.00	0.145	0.160	10.34	0.833	0.788	5.40												
313.10	0.497	10.395	0.782	0.721	7.80	0.050	0.031	38.00	0.143	0.155	8.39	0.975	0.907	6.97												
313.12	0.497	11.916	0.946	0.860	9.09	0.048	0.029	39.58	0.143	0.149	4.20	1.136	1.037	8.71												
313.10	0.735	1.509	0.043	0.100	-	0.014	0.024	71.43	0.320	0.260	18.75	0.377	0.384	1.86												
313.13	0.735	2.995	0.140	0.213	52.14	0.010	0.023	-	0.329	0.251	23.71	0.478	0.487	1.88												
313.13	0.735	4.541	0.262	0.343	30.92	0.005	0.021	-	0.335	0.242	27.76	0.602	0.606	0.66												
313.14	0.735	6.015	0.454	0.479	5.51	0.006	0.020	-	0.278	0.232	16.55	0.739	0.731	1.08												

Tabelle A 8.1: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Methanollösungen: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (UNIQUAC-Modell, Parameter aus Tab. A 1.8) (Fortsetzung)

T	x _M	\bar{m}_{NH_3}	P _{NH₃,exp}	P _{NH₃,cal}	ΔP _{NH₃}	P _{H₂O,exp}	P _{H₂O,cal}	ΔP _{H₂O}	P _{M,exp}	P _{M,cal}	ΔPM	P _{exp}	P _{cal}	Δp
K	mol%	mol/kg	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%
353.06	0.049	1.441	0.216	0.217	0.46	0.424	0.440	3.77	0.190	0.162	14.74	0.831	0.819	1.44
353.18	0.049	2.792	0.447	0.436	2.46	0.417	0.432	3.60	0.168	0.157	6.55	1.032	1.025	0.68
353.14	0.049	4.192	0.687	0.675	1.75	0.402	0.420	4.48	0.159	0.151	5.03	1.249	1.246	0.24
353.03	0.050	5.502	0.921	0.909	1.30	0.392	0.408	4.08	0.146	0.145	0.68	1.462	1.462	0.00
353.02	0.049	2.499	0.383	0.386	0.78	0.419	0.431	2.86	0.180	0.157	12.78	0.981	0.974	0.71
353.06	0.049	5.197	0.856	0.854	0.23	0.401	0.411	2.49	0.150	0.146	2.67	1.407	1.411	0.28
353.09	0.049	7.587	1.308	1.309	0.08	0.382	0.394	3.14	0.136	0.137	0.74	1.827	1.839	0.66
353.08	0.049	10.998	2.009	2.013	0.20	0.365	0.369	1.10	0.124	0.125	0.81	2.497	2.506	0.36
353.00	0.248	0.950	0.089	0.151	69.66	0.395	0.365	7.59	0.666	0.628	5.71	1.151	1.144	0.61
353.05	0.248	1.860	0.277	0.305	10.11	0.391	0.360	7.93	0.614	0.616	0.33	1.283	1.281	0.16
353.06	0.248	2.975	0.482	0.505	4.77	0.373	0.352	5.63	0.602	0.601	0.17	1.458	1.457	0.07
353.06	0.248	4.029	0.705	0.705	0.00	0.355	0.345	2.82	0.577	0.586	1.56	1.638	1.635	0.18
353.11	0.248	4.990	0.900	0.897	0.33	0.346	0.338	2.31	0.569	0.573	0.70	1.817	1.809	0.44
353.04	0.248	5.799	1.082	1.063	1.76	0.339	0.332	2.06	0.544	0.561	3.13	1.966	1.955	0.56
353.18	0.248	6.304	1.193	1.175	1.51	0.331	0.330	0.30	0.554	0.557	0.54	2.079	2.062	0.82
353.15	0.248	7.251	1.420	1.382	2.68	0.321	0.323	0.62	0.534	0.543	1.69	2.277	2.248	1.27
353.12	0.248	7.971	1.596	1.543	3.32	0.319	0.317	0.63	0.514	0.533	3.70	2.430	2.394	1.48
353.03	0.248	8.818	1.795	1.735	3.34	0.318	0.310	2.52	0.500	0.520	4.00	2.613	2.566	1.80
353.03	0.248	9.827	2.049	1.976	3.56	0.309	0.303	1.94	0.491	0.507	3.26	2.851	2.786	2.28
353.10	0.248	10.831	2.314	2.226	3.80	0.326	0.297	8.90	0.469	0.496	5.76	3.112	3.019	2.99
353.13	0.248	11.955	2.623	2.513	4.19	0.312	0.290	7.05	0.460	0.482	4.78	3.397	3.285	3.30
353.30	0.491	1.040	0.143	0.195	36.36	0.300	0.281	6.33	1.032	1.015	1.65	1.476	1.491	1.02
353.26	0.491	1.685	0.298	0.324	8.72	0.301	0.276	8.31	0.986	1.001	1.52	1.586	1.601	0.95
353.25	0.491	2.866	0.568	0.575	1.23	0.292	0.267	8.56	0.946	0.976	3.17	1.806	1.818	0.66
353.19	0.491	4.147	0.880	0.867	1.48	0.278	0.258	7.19	0.913	0.946	3.61	2.074	2.071	0.14
353.17	0.491	5.186	1.164	1.118	3.95	0.270	0.250	7.41	0.872	0.923	5.85	2.307	2.291	0.69
353.14	0.491	6.058	1.397	1.338	4.22	0.266	0.244	8.27	0.848	0.903	6.49	2.513	2.485	1.11
353.13	0.499	6.244	1.452	1.395	3.93	0.256	0.240	6.25	0.867	0.908	4.73	2.575	2.543	1.24
353.19	0.499	7.184	1.722	1.649	4.24	0.259	0.234	9.65	0.841	0.890	5.83	2.822	2.772	1.77
353.19	0.499	8.015	1.983	1.878	5.30	0.251	0.229	8.76	0.815	0.871	6.87	3.050	2.979	2.33

Tabelle A 8.1: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Methanollösungen: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (UNIQUAC-Modell, Parameter aus Tab. A 1.8) (Fortsetzung)

T	x_M	\bar{m}_{NH_3}	$P_{NH_3,exp}$	$P_{NH_3,cal}$	ΔP_{NH_3}	$P_{H_2O,exp}$	$P_{H_2O,cal}$	ΔP_{H_2O}	$P_{M,exp}$	$P_{M,cal}$	ΔP_M	P_{exp}	P_{cal}	Δp
K	mol%	mol/kg	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%
353.19	0.499	8.842	2.235	2.114	5.41	0.249	0.223	10.44	0.799	0.854	6.88	3.284	3.191	2.83
353.17	0.499	9.890	2.565	2.421	5.61	0.242	0.217	10.33	0.783	0.830	6.00	3.591	3.468	3.43
353.14	0.499	10.927	2.918	2.733	6.34	0.237	0.210	11.39	0.754	0.808	7.16	3.913	3.751	4.14
353.12	0.499	11.914	3.244	3.039	6.32	0.231	0.204	11.69	0.738	0.787	6.64	4.214	4.030	4.37
353.10	0.750	1.925	0.433	0.473	9.24	0.166	0.159	4.22	1.360	1.341	1.40	1.963	1.973	0.51
353.11	0.750	3.717	0.990	0.972	1.82	0.166	0.149	10.24	1.250	1.287	2.96	2.410	2.407	0.12
353.06	0.750	4.854	1.357	1.312	3.32	0.161	0.143	11.18	1.200	1.248	4.00	2.718	2.703	0.55
353.04	0.750	5.937	1.718	1.653	3.78	0.156	0.137	12.18	1.168	1.213	3.85	3.047	3.003	1.44
353.34	0.751	7.524	2.306	2.201	4.55	0.150	0.130	13.33	1.125	1.176	4.53	3.586	3.507	2.20
353.16	0.751	8.877	2.817	2.668	5.29	0.144	0.123	14.58	1.065	1.125	5.63	4.032	3.916	2.88
353.20	0.751	10.526	3.451	3.280	4.96	0.146	0.116	20.55	1.019	1.076	5.59	4.616	4.472	3.12
353.17	0.751	11.711	3.929	3.733	4.99	0.134	0.111	17.16	0.996	1.039	4.32	5.064	4.882	3.59
353.12	0.946	1.613	0.374	0.491	31.28	0.052	0.041	21.15	1.730	1.647	4.80	2.160	2.178	0.83
353.03	0.946	3.348	0.948	1.072	13.08	0.049	0.038	22.45	1.646	1.567	4.80	2.645	2.677	1.21
353.09	0.946	4.850	1.484	1.619	9.10	0.052	0.035	32.69	1.591	1.504	5.47	3.130	3.158	0.89
353.08	0.946	6.002	1.933	2.060	6.57	0.049	0.033	32.65	1.542	1.453	5.77	3.524	3.546	0.62
353.20	0.959	7.921	2.739	2.884	5.29	0.044	0.023	47.73	1.516	1.390	8.31	4.313	4.297	0.37
353.17	0.959	9.234	3.312	3.446	4.05	0.044	0.022	50.00	1.451	1.332	8.20	4.809	4.800	0.19
353.04	0.959	10.617	3.908	4.049	3.61	0.045	0.021	53.33	1.402	1.268	9.56	5.356	5.338	0.34
353.18	0.959	11.906	4.492	4.656	3.65	0.046	0.019	58.70	1.379	1.223	11.31	5.918	5.898	0.34
353.09	1.000	1.334	0.308	0.430	39.61	0.017	0.001	-	1.824	1.747	4.22	2.151	2.177	1.21
353.07	1.000	2.726	0.763	0.915	19.92	0.019	0.001	-	1.763	1.680	4.71	2.544	2.596	2.04
353.10	1.000	3.782	1.137	1.307	14.95	0.021	0.001	-	1.722	1.631	5.28	2.880	2.938	2.01
353.11	1.000	5.546	1.822	2.001	9.82	0.019	0.001	-	1.644	1.545	6.02	3.485	3.547	1.78
353.11	1.000	7.280	2.535	2.726	7.53	0.026	0.001	-	1.575	1.462	7.17	4.137	4.189	1.26
353.11	1.000	8.695	3.150	3.345	6.19	0.025	0.001	-	1.521	1.397	8.15	4.697	4.742	0.96
353.11	1.000	11.170	4.255	4.485	5.41	0.036	0.000	-	1.438	1.287	10.50	5.730	5.772	0.73
353.11	1.000	12.998	5.143	5.367	4.36	0.028	0.000	-	1.354	1.211	10.56	6.527	6.578	0.78
353.04	1.000	6.292	2.100	2.304	9.71	0.019	0.001	-	1.616	1.506	6.81	3.735	3.810	2.01
393.15	0.049	4.628	2.089	2.170	3.88	2.042	1.771	13.27	0.540	0.527	2.41	4.675	4.468	4.43

Tabelle A 8.1: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Methanollösungen: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (UNIQUAC-Modell, Parameter aus Tab. A 1.8) (Fortsetzung)

T	x _M	\bar{m}_{NH_3}	P _{NH₃,exp}	P _{NH₃,cal}	ΔP _{NH₃}	P _{H₂O,exp}	P _{H₂O,cal}	ΔP _{H₂O}	P _{M,exp}	P _{M,cal}	ΔP _M	P _{exp}	P _{cal}	Δp
K	mol%	mol/kg	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%
393.13	0.049	6.146	2.678	2.952	10.23	2.122	1.727	18.61	0.510	0.505	0.98	5.311	5.184	2.39
393.33	0.049	5.978	2.563	2.877	12.25	2.274	1.743	23.35	0.530	0.511	3.58	5.375	5.130	4.56
393.26	0.049	7.281	3.121	3.569	14.35	2.426	1.703	29.80	0.500	0.492	1.60	6.054	5.763	4.81
393.26	0.049	9.955	4.442	5.070	14.14	2.600	1.630	37.31	0.471	0.458	2.76	7.532	7.157	4.98
393.10	0.049	11.847	5.614	6.163	9.78	2.531	1.571	37.93	0.453	0.434	4.19	8.613	8.168	5.17
393.14	0.246	1.444	0.683	0.667	2.34	1.634	1.544	5.51	2.223	2.196	1.21	4.543	4.407	2.99
393.17	0.246	2.965	1.326	1.424	7.39	1.698	1.507	11.25	2.190	2.119	3.24	5.216	5.050	3.18
393.18	0.246	4.431	1.982	2.202	11.10	1.803	1.470	18.47	2.134	2.046	4.12	5.924	5.718	3.48
393.17	0.246	5.938	2.762	3.048	10.35	1.824	1.430	21.60	2.107	1.972	6.41	6.696	6.450	3.67
393.09	0.250	2.603	1.209	1.239	2.48	1.485	1.507	1.48	2.265	2.158	4.72	4.959	4.903	1.13
393.07	0.250	5.330	2.207	2.700	22.34	1.828	1.435	21.50	2.171	2.019	7.00	6.211	6.154	0.92
393.20	0.250	7.558	3.212	4.018	25.09	2.077	1.384	33.37	2.075	1.920	7.47	7.371	7.321	0.68
393.12	0.250	8.983	3.962	4.897	23.60	2.122	1.344	36.66	2.057	1.850	10.06	8.148	8.090	0.71
393.13	0.250	10.623	4.931	5.962	20.91	1.995	1.303	34.69	2.169	1.778	18.03	9.100	9.043	0.63
393.15	0.250	11.708	5.528	6.695	21.11	1.970	1.277	35.18	2.250	1.733	22.98	9.762	9.705	0.58
393.08	0.494	1.376	0.616	0.717	16.40	1.128	1.174	4.08	3.703	3.525	4.81	5.446	5.415	0.57
393.11	0.494	3.039	1.358	1.666	22.68	1.287	1.134	11.89	3.623	3.407	5.96	6.269	6.206	1.00
393.18	0.494	4.643	2.039	2.664	30.65	1.455	1.097	24.60	3.653	3.296	9.77	7.153	7.056	1.36
393.09	0.494	6.075	2.783	3.607	29.61	1.539	1.058	31.25	3.682	3.183	13.55	8.082	7.848	2.90
393.19	0.498	6.611	2.713	3.997	47.33	1.579	1.042	34.01	4.007	3.171	20.86	8.300	8.209	1.10
392.76	0.498	9.020	4.476	5.702	27.39	1.393	0.971	30.29	3.988	2.962	25.73	9.835	9.634	2.04
392.69	0.498	10.412	5.145	6.762	31.43	1.509	0.937	37.91	4.190	2.860	31.74	10.869	10.558	2.86
392.81	0.498	11.643	6.008	7.765	29.24	1.493	0.913	38.85	4.237	2.786	34.25	11.739	11.464	2.34
393.30	0.750	1.605	0.647	1.021	57.81	0.674	0.698	3.56	5.180	4.779	7.74	6.502	6.498	0.06
393.34	0.750	3.469	2.135	2.343	9.74	0.622	0.661	6.27	4.916	4.595	6.53	7.673	7.599	0.96
393.23	0.750	4.851	3.335	3.402	2.01	0.590	0.632	7.12	4.676	4.437	5.11	8.601	8.471	1.51
393.27	0.750	5.737	4.094	4.123	0.71	0.564	0.616	9.22	4.589	4.349	5.23	9.247	9.088	1.72
393.05	0.747	7.454	5.632	5.552	1.42	0.566	0.586	3.53	4.407	4.132	6.24	10.609	10.270	3.20
393.09	0.747	9.212	7.142	7.146	0.06	0.554	0.556	0.36	4.289	3.957	7.74	11.990	11.659	2.76
392.92	0.747	11.076	8.783	8.899	1.32	0.537	0.522	2.79	4.138	3.755	9.26	13.450	13.176	2.04

Tabelle A 8.1: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Methanollösungen: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (UNIQUAC-Modell, Parameter aus Tab. A 1.8) (Fortsetzung)

T	x_M	\bar{m}_{NH_3}	$P_{NH_3,exp}$		$P_{NH_3,cal}$		ΔP_{NH_3}	$P_{H_2O,exp}$		$P_{H_2O,cal}$		ΔP_{H_2O}	$P_{M,exp}$		$P_{M,cal}$		ΔP_M	P_{cal}		Δp	
			bar	bar	bar	bar		bar	bar	bar	bar		bar	bar	bar	bar		bar	bar	bar	bar
392.99	0.747	11.985	9.612	9.815	2.11	0.526	0.509	3.23	4.106	3.675	10.50	14.251	14.000	1.76							
393.05	0.946	1.452	1.329	1.087	18.21	0.128	0.175	36.72	5.797	5.854	0.98	7.255	7.116	1.92							
393.11	0.946	2.826	2.578	2.214	14.12	0.144	0.167	15.97	5.488	5.677	3.44	8.220	8.058	1.97							
393.09	0.946	4.357	3.805	3.570	6.18	0.136	0.158	16.18	5.471	5.458	0.24	9.401	9.186	2.29							
393.11	0.946	5.786	4.917	4.928	0.22	0.136	0.150	10.29	5.478	5.258	4.02	10.537	10.336	1.91							
393.09	0.953	5.244	4.467	4.427	0.90	0.113	0.135	19.47	5.415	5.365	0.92	9.899	9.927	0.28							
393.13	0.953	7.258	6.154	6.447	4.76	0.112	0.126	12.50	5.551	5.083	8.43	11.848	11.656	1.62							
393.09	0.953	8.836	6.846	8.124	18.67	0.124	0.119	4.03	6.077	4.857	20.08	13.049	13.099	0.38							
393.13	0.953	10.314	8.620	9.784	13.50	0.112	0.112	0.00	5.626	4.662	17.13	14.370	14.558	1.31							
392.98	0.953	11.626	10.130	11.276	11.31	0.103	0.107	3.88	5.265	4.471	15.08	15.560	15.853	1.88							
393.09	1.000	1.533	2.469	1.210	50.99	0.008	0.003	-	4.925	6.177	25.42	7.404	7.390	0.19							
393.06	1.000	3.039	2.912	2.514	13.67	0.011	0.003	-	5.534	5.947	7.46	8.461	8.465	0.05							
393.07	1.000	4.547	4.102	3.931	4.17	0.011	0.003	-	5.504	5.717	3.87	9.625	9.650	0.26							
393.04	1.000	5.748	5.139	5.126	0.25	0.011	0.003	-	5.455	5.526	1.30	10.617	10.655	0.36							
393.12	1.000	7.211	6.638	6.673	0.53	0.012	0.003	-	5.224	5.314	1.72	11.898	11.989	0.76							
393.06	1.000	9.243	8.293	8.931	7.69	0.011	0.003	-	5.361	5.001	6.72	13.689	13.934	1.79							
393.07	1.000	11.300	9.498	11.372	19.73	0.013	0.002	-	5.946	4.709	20.80	15.490	16.083	3.83							
392.94	1.000	11.989	9.886	12.187	23.28	0.010	0.002	-	6.149	4.597	25.24	16.061	16.786	4.51							

Tabelle A 8.2: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC- Modell, Parameter aus Tabelle A 1.9)

T	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$p_{\text{NH}_3, \text{exp}}$		$p_{\text{NH}_3, \text{cal}}$		Δp_{NH_3}		$p_{\text{CO}_2, \text{exp}}$		$p_{\text{CO}_2, \text{cal}}$		Δp_{CO_2}		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{exp}}$		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{cal}}$		$\Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$		p_{cal}		Δp			
			bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar
313.16	6.320	0.722	0.210	0.212	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.063	0.063	0.065	0.065	0.000	0.000	0.065	0.065	0.000	0.000	3.17	3.17	0.274	0.278	0.278	1.46	1.46
313.16	6.324	1.542	0.151	0.156	0.003	0.004	0.003	0.004	0.003	0.069	0.069	0.065	0.065	33.33	33.33	0.065	0.065	5.80	5.80	5.80	5.80	0.223	0.225	0.225	0.90	0.90
313.15	6.328	2.353	0.092	0.101	0.011	0.013	0.011	0.013	0.011	0.072	0.072	0.066	0.066	18.18	18.18	0.066	0.066	8.33	8.33	8.33	8.33	0.175	0.180	0.180	2.86	2.86
313.17	6.331	3.156	0.046	0.055	0.052	0.054	0.052	0.054	0.052	0.067	0.067	0.066	0.066	3.85	3.85	0.066	0.066	1.49	1.49	1.49	1.49	0.165	0.174	0.174	5.45	5.45
313.15	6.333	3.954	0.016	0.026	0.254	0.229	0.254	0.229	0.254	0.065	0.065	0.065	0.065	9.84	9.84	0.065	0.065	0.00	0.00	0.00	0.00	0.335	0.320	0.320	4.48	4.48
313.10	11.825	0.965	0.474	0.484	0.001	0.000	0.001	0.000	0.001	0.052	0.052	0.058	0.058	-	-	0.052	0.058	11.54	11.54	11.54	11.54	0.527	0.543	0.543	3.04	3.04
313.10	11.828	2.024	0.395	0.404	0.003	0.001	0.003	0.001	0.003	0.056	0.056	0.058	0.058	66.67	66.67	0.056	0.058	3.57	3.57	3.57	3.57	0.454	0.464	0.464	2.20	2.20
313.09	11.831	3.080	0.317	0.318	0.004	0.003	0.004	0.003	0.004	0.052	0.052	0.059	0.059	25.00	25.00	0.052	0.059	13.46	13.46	13.46	13.46	0.373	0.380	0.380	1.88	1.88
313.10	11.834	4.224	0.226	0.221	0.009	0.009	0.009	0.009	0.009	0.053	0.053	0.059	0.059	0.00	0.00	0.053	0.059	11.32	11.32	11.32	11.32	0.288	0.290	0.290	0.69	0.69
313.09	11.838	5.379	0.126	0.130	0.035	0.031	0.035	0.031	0.035	0.167	0.167	0.178	0.178	11.43	11.43	0.167	0.178	6.59	6.59	6.59	6.59	0.623	0.634	0.634	1.77	1.77
333.17	6.030	0.517	0.454	0.453	0.002	0.003	0.002	0.003	0.002	0.168	0.168	0.178	0.178	50.00	50.00	0.168	0.178	5.95	5.95	5.95	5.95	0.550	0.561	0.561	2.00	2.00
333.14	6.036	1.120	0.373	0.371	0.009	0.011	0.009	0.011	0.009	0.178	0.178	0.178	0.178	22.22	22.22	0.178	0.178	0.00	0.00	0.00	0.00	0.483	0.498	0.498	3.11	3.11
333.12	6.042	1.720	0.280	0.289	0.025	0.031	0.025	0.031	0.025	0.179	0.179	0.178	0.178	24.00	24.00	0.179	0.178	0.56	0.56	0.56	0.56	0.446	0.468	0.468	4.93	4.93
333.14	6.048	2.329	0.197	0.209	0.070	0.081	0.070	0.081	0.070	0.176	0.176	0.178	0.178	15.71	15.71	0.176	0.178	1.14	1.14	1.14	1.14	0.498	0.527	0.527	5.82	5.82
333.15	6.053	2.927	0.123	0.139	0.199	0.209	0.199	0.209	0.199	0.182	0.182	0.178	0.178	5.03	5.03	0.182	0.178	2.20	2.20	2.20	2.20	0.801	0.833	0.833	4.00	4.00
333.15	6.057	3.526	0.068	0.085	0.551	0.569	0.551	0.569	0.551	0.177	0.177	0.178	0.178	3.27	3.27	0.177	0.178	0.56	0.56	0.56	0.56	1.908	1.907	1.907	0.05	0.05
333.14	6.060	4.161	0.032	0.047	1.699	1.682	1.699	1.682	1.699	4.105	4.075	4.075	4.075	46.88	46.88	4.105	4.075	2.87	2.87	2.87	2.87	4.296	4.282	4.282	0.33	0.33
333.15	6.061	4.683	0.017	0.028	-	-	-	-	-	6.480	6.428	6.428	6.428	0.73	0.73	6.480	6.428	1.68	1.68	1.68	1.68	6.670	6.631	6.631	0.58	0.58
333.18	6.061	4.957	0.011	0.021	-	-	-	-	-	0.003	0.003	0.003	0.003	0.80	0.80	0.179	0.182	3.66	3.66	3.66	3.66	1.149	1.165	1.165	1.39	1.39
333.10	11.918	1.081	0.982	1.005	0.008	0.010	0.008	0.010	0.008	0.151	0.151	0.158	0.158	25.00	25.00	0.151	0.158	4.64	4.64	4.64	4.64	0.987	1.006	1.006	1.93	1.93
333.10	11.926	2.179	0.828	0.839	0.022	0.024	0.022	0.024	0.022	0.159	0.159	0.159	0.159	9.09	9.09	0.159	0.159	0.00	0.00	0.00	0.00	0.819	0.834	0.834	1.83	1.83
333.08	11.937	3.321	0.638	0.651	0.057	0.063	0.057	0.063	0.057	0.162	0.162	0.160	0.160	10.53	10.53	0.162	0.160	1.23	1.23	1.23	1.23	0.668	0.686	0.686	2.69	2.69
333.14	11.947	4.444	0.449	0.463	0.182	0.184	0.182	0.184	0.182	0.161	0.161	0.160	0.160	1.10	1.10	0.161	0.160	0.62	0.62	0.62	0.62	0.613	0.633	0.633	3.26	3.26
333.11	11.957	5.565	0.270	0.289	0.656	0.603	0.656	0.603	0.656	0.155	0.155	0.160	0.160	8.08	8.08	0.155	0.160	3.23	3.23	3.23	3.23	0.950	0.926	0.926	2.53	2.53
333.15	11.964	6.645	0.139	0.162	2.251	1.974	2.251	1.974	2.251	0.158	0.158	0.159	0.159	12.31	12.31	0.158	0.159	0.63	0.63	0.63	0.63	2.474	2.220	2.220	10.27	10.27
333.12	11.968	7.705	0.065	0.086	0.012	0.014	0.012	0.014	0.012	0.403	0.403	0.421	0.421	16.67	16.67	0.403	0.421	4.47	4.47	4.47	4.47	1.417	1.435	1.435	1.27	1.27
353.23	6.838	0.609	1.002	1.000	0.012	0.014	0.012	0.014	0.012	0.403	0.403	0.421	0.421	16.67	16.67	0.403	0.421	4.47	4.47	4.47	4.47	1.417	1.435	1.435	1.27	1.27

Tabelle A 8.2: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC- Modell, Parameter aus Tabelle A 1.9) (Fortsetzung)

T	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$p_{\text{NH}_3, \text{exp}}$		$p_{\text{NH}_3, \text{cal}}$		Δp_{NH_3}		$p_{\text{CO}_2, \text{exp}}$		$p_{\text{CO}_2, \text{cal}}$		Δp_{CO_2}		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{exp}}$		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{cal}}$		$\Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$		p_{cal}		Δp	
			bar	bar	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar
353.23	6.846	1.228	0.842	0.845	0.36	0.043	0.052	20.93	0.410	0.420	2.44	1.295	1.317	1.70										
353.22	6.852	1.686	0.724	0.727	0.41	0.088	0.102	15.91	0.411	0.420	2.19	1.223	1.249	2.13										
353.22	6.858	2.140	0.605	0.610	0.83	0.167	0.187	11.98	0.413	0.420	1.69	1.185	1.218	2.78										
353.23	6.870	3.043	0.374	0.393	5.08	0.587	0.609	3.75	0.412	0.421	2.18	1.373	1.422	3.57										
353.23	6.876	3.575	0.259	0.284	9.65	1.247	1.258	0.88	0.409	0.421	2.93	1.915	1.963	2.51										
353.23	6.881	4.116	0.167	0.195	16.77	2.715	2.708	0.26	0.409	0.423	3.42	3.291	3.326	1.06										
353.22	6.883	4.458	0.121	0.152	25.62	4.407	4.420	0.29	0.401	0.425	5.99	4.929	4.997	1.38										
353.23	6.884	4.698	0.099	0.127	28.28	6.196	6.225	0.47	0.407	0.429	5.41	6.702	6.781	1.18										
353.18	11.986	0.850	1.928	1.977	2.54	0.008	0.010	25.00	0.390	0.380	2.56	2.326	2.367	1.76										
353.14	11.998	1.705	1.711	1.750	2.28	0.025	0.031	24.00	0.380	0.379	0.26	2.116	2.160	2.08										
353.13	12.011	2.579	1.463	1.500	2.53	0.058	0.067	15.52	0.381	0.380	0.26	1.902	1.946	2.31										
353.17	12.024	3.430	1.216	1.245	2.38	0.117	0.130	11.11	0.377	0.381	1.06	1.710	1.756	2.69										
353.12	12.038	4.304	0.953	0.976	2.41	0.239	0.257	7.53	0.379	0.381	0.53	1.571	1.615	2.80										
353.17	12.052	5.179	0.696	0.722	3.74	0.527	0.542	2.85	0.384	0.383	0.26	1.607	1.647	2.49										
353.11	12.063	6.003	0.477	0.508	6.50	1.170	1.171	0.09	0.386	0.383	0.78	2.033	2.062	1.43										
353.12	12.073	6.847	0.303	0.338	11.55	2.771	2.747	0.87	0.381	0.384	0.79	3.455	3.468	0.38										
353.18	12.077	7.348	0.228	0.262	14.91	4.659	4.617	0.90	0.379	0.387	2.11	5.266	5.266	0.00										
353.19	12.078	7.602	0.200	0.231	15.50	6.006	5.987	0.32	0.383	0.389	1.57	6.589	6.606	0.26										
353.15	0.590	0.379	0.018	0.027	50.00	0.659	0.649	1.52	0.437	0.470	7.55	1.114	1.146	2.87										
353.15	0.590	0.496	0.000	0.014	-	2.059	2.003	2.72	0.455	0.475	4.40	2.514	2.491	0.91										
353.15	0.590	0.553	0.000	0.009	-	3.669	3.511	4.31	0.455	0.479	5.27	4.124	3.999	3.03										
353.15	0.590	0.592	0.000	0.007	-	5.240	5.015	4.29	0.455	0.484	6.37	5.695	5.506	3.32										
353.15	0.591	0.618	0.002	0.006	-	6.670	6.230	6.60	0.449	0.487	8.46	7.121	6.723	5.59										
353.15	0.591	0.637	0.000	0.005	-	8.070	7.300	9.54	0.451	0.491	8.87	8.521	7.796	8.51										
353.15	0.591	0.660	0.000	0.005	-	9.614	8.631	10.22	0.451	0.495	9.76	10.065	9.130	9.29										
353.15	0.591	0.784	0.000	0.003	-	19.838	17.324	12.67	0.451	0.523	15.96	20.289	17.850	12.02										
353.15	0.591	0.885	0.000	0.002	-	29.862	25.473	14.70	0.451	0.551	22.17	30.313	26.027	14.14										
353.15	0.591	0.975	0.000	0.002	-	39.771	33.322	16.22	0.451	0.580	28.60	40.222	33.904	15.71										

Tabelle A 8.2: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC- Modell, Parameter aus Tabelle A 1.9) (Fortsetzung)

T	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$p_{\text{NH}_3, \text{exp}}$		$p_{\text{NH}_3, \text{cal}}$		Δp_{NH_3}		$p_{\text{CO}_2, \text{exp}}$		$p_{\text{CO}_2, \text{cal}}$		Δp_{CO_2}		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{exp}}$		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{cal}}$		$\Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$		p_{cal}		Δp	
			bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar
353.15	1.087	0.569	0.044	0.062	40.91	0.495	0.503	1.62	0.442	0.465	5.20	0.981	1.030	4.99										
353.15	1.087	0.823	0.000	0.030	-	2.027	2.069	2.07	0.486	0.469	3.50	2.513	2.569	2.23										
353.15	1.087	0.926	0.000	0.021	-	3.729	3.732	0.08	0.486	0.474	2.47	4.215	4.226	0.26										
353.15	1.087	0.982	0.000	0.017	-	5.186	5.125	1.18	0.486	0.478	1.65	5.672	5.620	0.92										
353.15	1.087	1.024	0.000	0.014	-	6.634	6.469	2.49	0.486	0.482	0.82	7.120	6.965	2.18										
353.15	1.087	1.058	0.000	0.012	-	8.104	7.783	3.96	0.486	0.486	0.00	8.590	8.281	3.60										
353.15	1.087	1.091	0.000	0.011	-	9.705	9.202	5.18	0.486	0.490	0.82	10.191	9.703	4.79										
353.15	1.087	1.242	0.000	0.007	-	20.087	17.870	11.04	0.486	0.518	6.58	20.573	18.395	10.59										
353.15	1.087	1.359	0.000	0.005	-	30.963	26.411	14.70	0.486	0.547	12.55	31.449	26.963	14.26										
353.15	1.087	1.446	0.000	0.005	-	40.269	33.423	17.00	0.486	0.572	17.70	40.755	34.000	16.57										
353.15	1.087	1.529	0.000	0.004	-	49.491	40.648	17.87	0.486	0.599	23.25	49.977	41.252	17.46										
353.15	2.003	0.961	0.092	0.116	26.09	0.516	0.541	4.84	0.441	0.457	3.63	1.049	1.115	6.29										
353.15	2.006	1.399	0.042	0.057	35.71	2.285	2.365	3.50	0.446	0.461	3.36	2.773	2.884	4.00										
353.15	2.006	1.526	0.000	0.045	-	3.567	3.651	2.35	0.488	0.464	4.92	4.055	4.160	2.59										
353.15	2.006	1.644	0.000	0.035	-	5.317	5.462	2.73	0.488	0.469	3.89	5.805	5.966	2.77										
353.15	2.006	1.704	0.000	0.031	-	6.581	6.688	1.63	0.488	0.472	3.28	7.069	7.191	1.73										
353.15	2.006	1.768	0.000	0.027	-	8.261	8.289	0.34	0.488	0.477	2.25	8.749	8.792	0.49										
353.15	2.006	1.835	0.000	0.023	-	10.475	10.345	1.24	0.488	0.483	1.02	10.963	10.851	1.02										
353.15	2.006	2.024	0.000	0.016	-	19.956	18.258	8.51	0.488	0.507	3.89	20.444	18.781	8.13										
353.15	2.006	2.178	0.000	0.013	-	31.641	27.170	14.13	0.488	0.536	9.84	32.129	27.719	13.73										
353.15	2.006	2.274	0.000	0.011	-	40.859	33.711	17.49	0.488	0.559	14.55	41.347	34.281	17.09										
353.15	4.134	1.966	0.185	0.219	18.38	0.678	0.712	5.01	0.416	0.440	5.77	1.279	1.371	7.19										
353.15	4.138	2.513	0.105	0.132	25.71	2.014	2.087	3.62	0.424	0.442	4.25	2.543	2.661	4.64										
353.15	4.140	2.837	0.072	0.094	30.56	3.868	3.988	3.10	0.423	0.446	5.44	4.363	4.528	3.78										
353.15	4.140	2.969	0.065	0.082	26.15	4.987	5.185	3.97	0.449	0.448	0.22	5.501	5.715	3.89										
353.15	4.140	3.100	0.000	0.071	-	6.496	6.721	3.46	0.514	0.452	12.06	7.010	7.244	3.34										
353.15	4.140	3.204	0.000	0.063	-	7.988	8.251	3.29	0.514	0.456	11.28	8.502	8.769	3.14										
353.15	4.142	3.298	0.041	0.057	39.02	9.650	9.877	2.35	0.430	0.460	6.98	10.121	10.393	2.69										

Tabelle A 8.2: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC- Modell, Parameter aus Tabelle A 1.9) (Fortsetzung)

T	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$p_{\text{NH}_3, \text{exp}}$		$p_{\text{NH}_3, \text{cal}}$		Δp_{NH_3} %	$p_{\text{CO}_2, \text{exp}}$		$p_{\text{CO}_2, \text{cal}}$		Δp_{CO_2} %	$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{exp}}$		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{cal}}$		$\Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$ %	p_{exp}		p_{cal}		Δp %
			bar	bar	bar	bar		bar	bar	bar	bar		bar	bar	bar	bar		bar	bar	bar	bar	
353.15	4.142	3.708	0.000	0.038	-	21.607	20.905	3.25	0.471	0.490	4.03	22.078	21.433	2.92								
353.15	4.142	3.888	0.000	0.033	-	30.221	28.150	6.85	0.471	0.513	8.92	30.692	28.695	6.51								
353.15	4.142	4.042	0.000	0.030	-	39.719	35.627	10.30	0.471	0.537	14.01	40.190	36.194	9.94								
353.15	4.142	4.173	0.000	0.027	-	49.529	43.046	13.09	0.471	0.563	19.53	50.000	43.637	12.73								
353.15	5.925	3.120	0.202	0.244	20.79	1.230	1.256	2.11	0.400	0.427	6.75	1.832	1.927	5.19								
353.15	5.926	3.326	0.173	0.209	20.81	1.706	1.731	1.47	0.395	0.427	8.10	2.274	2.367	4.09								
353.15	5.928	3.523	0.147	0.179	21.77	2.323	2.354	1.33	0.396	0.428	8.08	2.866	2.962	3.35								
353.15	5.929	3.775	0.116	0.146	25.86	3.461	3.505	1.27	0.387	0.430	11.11	3.964	4.081	2.95								
353.15	5.930	4.016	0.102	0.120	17.65	4.986	5.118	2.65	0.412	0.433	5.10	5.500	5.671	3.11								
353.15	5.931	4.230	0.082	0.100	21.95	6.976	7.140	2.35	0.398	0.437	9.80	7.456	7.678	2.98								
353.15	5.932	4.308	0.075	0.094	25.33	7.893	8.059	2.10	0.398	0.439	10.30	8.366	8.593	2.71								
353.15	5.932	4.360	0.073	0.090	23.29	8.558	8.719	1.88	0.400	0.441	10.25	9.031	9.250	2.42								
353.15	5.932	4.431	0.068	0.085	25.00	9.530	9.707	1.86	0.404	0.443	9.65	10.002	10.236	2.34								
353.15	5.932	5.074	0.000	0.054	-	24.748	24.281	1.89	0.472	0.482	2.12	25.220	24.817	1.60								
353.15	5.932	5.219	0.000	0.050	-	30.401	29.311	3.59	0.472	0.496	5.08	30.873	29.857	3.29								
353.15	5.932	5.416	0.000	0.045	-	39.912	37.314	6.51	0.472	0.521	10.38	40.384	37.881	6.20								
353.15	9.019	4.794	0.292	0.334	14.38	1.587	1.566	1.32	0.372	0.404	8.60	2.251	2.304	2.35								
353.15	9.021	5.009	0.261	0.295	13.03	2.042	2.028	0.69	0.372	0.405	8.87	2.675	2.727	1.94								
353.15	9.024	5.304	0.220	0.247	12.27	2.908	2.897	0.38	0.379	0.406	7.12	3.507	3.550	1.23								
353.15	9.027	5.639	0.179	0.201	12.29	4.361	4.354	0.16	0.375	0.408	8.80	4.915	4.963	0.98								
353.15	9.029	5.951	0.146	0.166	13.70	6.330	6.343	0.21	0.373	0.411	10.19	6.849	6.920	1.04								
353.15	9.030	6.147	0.126	0.147	16.67	7.985	8.010	0.31	0.370	0.414	11.89	8.481	8.571	1.06								
353.15	9.031	6.211	0.122	0.142	16.39	8.620	8.634	0.16	0.373	0.415	11.26	9.115	9.191	0.83								
353.15	9.031	6.308	0.112	0.134	19.64	9.673	9.666	0.07	0.372	0.417	12.10	10.157	10.217	0.59								
353.15	9.031	6.908	0.000	0.097	-	18.851	18.850	0.01	0.484	0.438	9.50	19.335	19.385	0.26								
353.15	9.032	7.314	0.000	0.082	-	29.098	28.531	1.95	0.484	0.463	4.34	29.582	29.075	1.71								
353.15	9.032	7.617	0.000	0.074	-	39.829	38.034	4.51	0.484	0.490	1.24	40.313	38.597	4.26								
353.15	12.127	5.141	0.804	0.746	7.21	0.425	0.509	19.76	0.353	0.382	8.22	1.582	1.636	3.41								

Tabelle A 8.2: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC- Modell, Parameter aus Tabelle A 1.9) (Fortsetzung)

T	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$p_{\text{NH}_3, \text{exp}}$		$p_{\text{NH}_3, \text{cal}}$		Δp_{NH_3}		$p_{\text{CO}_2, \text{exp}}$		$p_{\text{CO}_2, \text{cal}}$		Δp_{CO_2}		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{exp}}$		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{cal}}$		$\Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$		p_{cal}		Δp	
			bar	bar	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar
353.15	12.154	6.497	0.394	0.394	0.414	5.08	1.858	1.841	0.91	3.361	3.259	3.03	0.351	0.383	6.98	2.610	2.638	1.07						
353.15	12.161	7.057	0.289	0.289	0.313	8.30	3.361	3.259	3.03	5.338	5.322	0.30	0.356	0.386	9.40	4.001	3.956	1.12						
353.15	12.165	7.536	0.232	0.232	0.246	6.03	6.485	6.504	0.29	7.919	7.987	0.86	0.345	0.388	8.43	5.926	5.954	0.47						
353.15	12.167	7.736	0.203	0.203	0.222	9.36	7.919	7.987	0.86	9.440	9.533	0.99	0.360	0.390	12.46	7.033	7.114	1.15						
353.15	12.168	7.942	0.185	0.185	0.201	8.65	19.021	19.164	0.75	29.368	29.009	1.22	0.359	0.393	8.33	8.464	8.578	1.35						
353.15	12.169	8.123	0.170	0.170	0.184	8.24	1.242	1.069	13.93	3.992	3.469	13.10	0.982	1.004	9.47	9.969	10.110	1.41						
353.15	12.169	8.877	0.000	0.000	0.134	-	6.886	6.494	5.69	19.021	19.164	0.75	0.529	0.412	22.12	19.550	19.709	0.81						
353.15	12.170	9.371	0.000	0.000	0.113	-	9.485	8.020	15.45	29.368	29.009	1.22	0.982	1.004	17.77	29.897	29.558	1.13						
373.15	0.950	0.438	0.070	0.070	0.121	72.86	1.242	1.069	13.93	1.242	1.069	13.93	0.992	1.017	2.24	2.294	2.193	4.40						
373.15	0.952	0.648	0.031	0.031	0.074	-	3.992	3.469	13.10	3.992	3.469	13.10	1.023	1.035	2.52	5.015	4.560	9.07						
373.15	0.926	0.755	0.016	0.016	0.051	-	6.886	6.494	5.69	6.886	6.494	5.69	1.023	1.035	1.17	7.925	7.580	4.35						
373.15	0.953	0.816	0.010	0.010	0.047	-	9.485	8.020	15.45	9.485	8.020	15.45	1.025	1.043	1.76	10.520	9.110	13.40						
373.15	0.954	0.994	0.000	0.000	0.030	-	19.173	16.984	11.42	19.173	16.984	11.42	1.292	1.096	15.17	20.465	18.110	11.51						
373.15	0.954	1.083	0.000	0.000	0.025	-	28.828	23.192	19.55	28.828	23.192	19.55	1.018	1.134	11.39	29.846	24.351	18.41						
373.15	1.019	0.380	0.109	0.109	0.152	39.45	0.695	0.644	7.34	0.695	0.644	7.34	0.997	1.000	0.30	1.801	1.796	0.28						
373.15	1.021	0.524	0.073	0.073	0.116	58.90	1.621	1.501	7.40	1.621	1.501	7.40	0.981	1.005	2.45	2.675	2.621	2.02						
373.15	1.024	0.695	0.037	0.037	0.079	-	3.945	3.640	7.73	3.945	3.640	7.73	0.984	1.016	3.25	4.966	4.736	4.63						
373.15	1.025	0.869	0.012	0.012	0.051	-	8.977	8.245	8.15	8.977	8.245	8.15	0.990	1.042	5.25	9.979	9.338	6.42						
373.15	1.026	1.028	0.000	0.000	0.035	-	19.051	15.804	17.04	19.051	15.804	17.04	0.828	1.086	31.16	19.879	16.926	14.85						
373.15	1.026	1.251	0.000	0.000	0.023	-	39.135	31.934	18.40	39.135	31.934	18.40	0.869	1.189	36.82	40.004	33.147	17.14						
373.15	1.072	0.425	0.108	0.108	0.153	41.67	0.874	0.771	11.78	0.874	0.771	11.78	0.897	0.999	11.37	1.879	1.924	2.39						
373.15	1.076	0.730	0.042	0.042	0.082	-	3.700	3.778	2.11	3.700	3.778	2.11	0.858	1.016	18.41	4.600	4.876	6.00						
373.15	1.078	0.940	0.010	0.010	0.050	-	9.052	9.637	6.46	9.052	9.637	6.46	0.876	1.049	19.75	9.938	10.736	8.03						
373.15	1.079	0.933	0.000	0.000	0.051	-	9.101	9.351	2.75	9.101	9.351	2.75	0.837	1.047	25.09	9.938	10.449	5.14						
373.15	1.079	1.088	0.000	0.000	0.036	-	17.737	17.014	4.08	17.737	17.014	4.08	0.737	1.092	48.17	18.474	18.142	1.80						
373.15	1.079	1.215	0.000	0.000	0.028	-	28.357	25.650	9.55	28.357	25.650	9.55	0.793	1.146	44.51	29.150	26.825	7.98						
373.15	1.928	0.909	0.160	0.160	0.221	38.13	1.664	1.725	3.67	1.664	1.725	3.67	0.974	0.989	1.54	2.798	2.935	4.90						
373.15	1.931	1.133	0.106	0.106	0.166	56.60	3.373	3.504	3.88	3.373	3.504	3.88	0.977	0.997	2.05	4.456	4.667	4.74						

Tabelle A 8.2: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC- Modell, Parameter aus Tabelle A 1.9) (Fortsetzung)

T	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$p_{\text{NH}_3, \text{exp}}$		$p_{\text{NH}_3, \text{cal}}$		Δp_{NH_3}		$p_{\text{CO}_2, \text{exp}}$		$p_{\text{CO}_2, \text{cal}}$		Δp_{CO_2}		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{exp}}$		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{cal}}$		$\Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$		p_{cal}		Δp	
			bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar
373.15	1.933	1.328	0.064	0.126	-	6.044	6.287	4.02	0.982	1.011	2.95	7.090	7.424	4.71										
373.15	1.935	1.459	0.041	0.105	-	8.896	9.161	2.98	0.971	1.027	5.77	9.908	10.292	3.88										
373.15	1.991	1.153	0.105	0.174	-	3.423	3.411	0.35	0.966	0.996	3.11	4.494	4.580	1.91										
373.15	1.994	1.394	0.054	0.125	-	6.989	6.898	1.30	0.958	1.013	5.74	8.001	8.036	0.44										
373.15	1.995	1.513	0.036	0.106	-	9.803	9.635	1.71	0.974	1.028	5.54	10.813	10.769	0.41										
373.15	1.997	1.729	0.000	0.079	-	19.294	16.987	11.96	0.693	1.069	54.26	19.987	18.134	9.27										
373.15	1.997	1.963	0.000	0.060	-	34.298	29.187	14.90	0.755	1.143	51.39	35.053	30.390	13.30										
373.15	1.997	2.136	0.000	0.052	-	48.863	41.256	15.57	0.921	1.223	32.79	49.784	42.531	14.57										
373.15	3.944	1.193	0.554	0.641	15.70	0.607	0.659	8.57	0.998	0.949	4.91	2.159	2.249	4.17										
373.15	3.954	1.561	0.395	0.512	29.62	1.341	1.361	1.49	0.953	0.951	0.21	2.689	2.824	5.02										
373.15	3.963	2.038	0.245	0.364	48.57	3.206	3.299	2.90	0.937	0.959	2.35	4.388	4.622	5.33										
373.15	3.968	2.340	0.157	0.286	-	5.490	5.717	4.13	0.940	0.970	3.19	6.587	6.973	5.86										
373.15	3.971	2.658	0.098	0.220	-	9.724	10.100	3.87	0.921	0.991	7.60	10.743	11.311	5.29										
373.15	3.974	2.871	0.044	0.186	-	14.316	14.573	1.80	0.828	1.013	22.34	15.188	15.773	3.85										
373.15	3.976	3.311	0.013	0.137	-	27.673	29.457	6.45	1.341	1.097	18.20	29.027	30.691	5.73										
373.15	3.931	0.535	0.880	0.889	1.02	0.000	0.120	-	1.031	0.949	7.95	1.911	1.959	2.51										
373.15	3.946	1.025	0.628	0.704	12.10	0.354	0.458	29.38	1.040	0.949	8.75	2.022	2.111	4.40										
373.15	3.956	1.408	0.446	0.566	26.91	1.004	1.010	0.60	0.966	0.950	1.66	2.416	2.526	4.55										
373.15	3.964	1.848	0.311	0.421	35.37	2.446	2.317	5.27	0.983	0.955	2.85	3.740	3.693	1.26										
373.15	3.971	2.244	0.186	0.310	-	4.761	4.787	0.55	0.920	0.966	5.00	5.867	6.063	3.34										
373.15	3.976	2.501	0.114	0.252	-	7.491	7.598	1.43	0.919	0.979	6.53	8.524	8.828	3.57										
373.15	3.976	2.642	0.100	0.224	-	9.608	9.769	1.68	0.928	0.989	6.57	10.636	10.983	3.26										
373.15	3.982	3.331	0.007	0.136	-	31.270	30.168	3.52	0.813	1.101	35.42	32.090	31.404	2.14										
373.15	3.982	3.483	0.004	0.126	-	39.465	37.593	4.74	0.829	1.146	38.24	40.298	38.865	3.56										
373.15	7.759	0.392	2.160	2.151	0.42	0.000	0.024	-	0.846	0.890	5.20	3.006	3.064	1.93										
373.15	7.768	0.874	2.035	1.953	4.03	0.000	0.092	-	0.831	0.887	6.74	2.866	2.933	2.34										
373.15	7.776	1.296	1.912	1.773	7.27	0.000	0.187	-	0.861	0.886	2.90	2.773	2.846	2.63										
373.15	7.776	1.296	1.912	1.773	7.27	0.001	0.187	-	0.860	0.886	3.02	2.773	2.846	2.63										

Tabelle A 8.2: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC- Modell, Parameter aus Tabelle A 1.9) (Fortsetzung)

T	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$p_{\text{NH}_3, \text{exp}}$		$p_{\text{NH}_3, \text{cal}}$		Δp_{NH_3}		$p_{\text{CO}_2, \text{exp}}$		$p_{\text{CO}_2, \text{cal}}$		Δp_{CO_2}		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{exp}}$		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{cal}}$		$\Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$		p_{cal}		Δp			
			bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar
373.15	7.788	1.730	1.733	1.583	8.66	0.108	0.331	206.48	0.870	0.886	1.84	2.711	2.801	3.32												
373.15	7.804	2.137	1.521	1.405	7.63	0.357	0.532	49.02	0.846	0.886	4.73	2.724	2.823	3.63												
373.15	7.813	2.562	1.367	1.218	10.90	0.532	0.852	60.15	0.925	0.887	4.11	2.824	2.957	4.71												
373.15	7.841	2.947	0.970	1.059	9.18	1.280	1.288	0.63	0.806	0.888	10.17	3.056	3.235	5.86												
373.15	7.858	3.327	0.736	0.905	22.96	2.047	1.954	4.54	0.776	0.890	14.69	3.559	3.749	5.34												
373.15	7.872	3.689	0.548	0.769	40.33	3.111	2.927	5.91	0.732	0.893	21.99	4.391	4.590	4.53												
373.15	7.884	4.040	0.379	0.649	-	4.637	4.370	5.76	0.657	0.898	36.68	5.673	5.917	4.30												
373.15	7.893	4.337	0.252	0.558	-	6.526	6.164	5.55	0.614	0.905	47.39	7.392	7.628	3.19												
373.15	7.900	4.623	0.161	0.482	-	8.861	8.608	2.86	0.597	0.915	53.27	9.619	10.004	4.00												
373.15	7.904	4.854	0.121	0.428	-	11.648	11.253	3.39	0.604	0.926	53.31	12.373	12.607	1.89												
373.15	7.978	0.685	2.106	2.103	0.14	0.000	0.058	-	0.892	0.885	0.78	2.998	3.046	1.60												
373.15	7.991	1.407	1.886	1.795	4.83	0.000	0.207	-	0.967	0.883	8.69	2.853	2.885	1.12												
373.15	8.004	1.995	1.666	1.534	7.92	0.149	0.426	-	1.038	0.883	14.93	2.853	2.842	0.39												
373.15	8.031	2.640	1.200	1.251	4.25	0.842	0.857	1.78	0.994	0.883	11.17	3.036	2.992	1.45												
373.15	8.054	3.333	0.788	0.959	21.70	2.007	1.800	10.31	0.925	0.886	4.22	3.720	3.645	2.02												
373.15	8.071	4.007	0.491	0.705	43.58	4.109	3.807	7.35	0.883	0.893	1.13	5.483	5.406	1.40												
373.15	8.080	4.436	0.330	0.570	72.73	6.625	6.217	6.16	1.881	0.902	52.05	8.836	7.689	12.98												
373.15	8.086	4.866	0.216	0.457	-	10.494	10.214	2.67	0.889	0.918	3.26	11.599	11.590	0.08												
373.15	8.093	5.524	0.096	0.336	-	21.710	21.367	1.58	0.726	0.969	33.47	22.532	22.672	0.62												
373.15	8.052	1.651	1.886	1.706	9.54	0.000	0.280	-	0.971	0.882	9.17	2.857	2.867	0.35												
373.15	8.087	2.398	1.374	1.378	0.29	0.463	0.647	39.74	1.025	0.882	13.95	2.862	2.907	1.57												
373.15	8.124	3.234	0.846	1.020	20.57	1.649	1.567	4.97	0.918	0.884	3.70	3.413	3.472	1.73												
373.15	8.144	3.921	0.547	0.754	37.84	3.427	3.322	3.06	0.891	0.890	0.11	4.865	4.966	2.08												
373.15	8.153	4.264	0.413	0.639	54.72	5.032	4.890	2.82	0.857	0.896	4.55	6.302	6.425	1.95												
373.15	8.165	4.854	0.232	0.475	-	9.472	9.603	1.38	0.832	0.914	9.86	10.536	10.993	4.34												
373.15	8.166	5.222	0.218	0.396	-	13.744	14.617	6.35	0.962	0.936	2.70	14.924	15.949	6.87												
373.15	8.171	5.484	0.143	0.352	-	18.503	19.480	5.28	0.853	0.959	12.43	19.499	20.791	6.63												
373.15	8.173	5.794	0.126	0.310	-	25.013	27.117	8.41	1.018	0.997	2.06	26.157	28.424	8.67												

Tabelle A 8.2: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC- Modell, Parameter aus Tabelle A 1.9) (Fortsetzung)

T	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$p_{\text{NH}_3, \text{exp}}$		$p_{\text{NH}_3, \text{cal}}$		Δp_{NH_3}		$p_{\text{CO}_2, \text{exp}}$		$p_{\text{CO}_2, \text{cal}}$		Δp_{CO_2}		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{exp}}$		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{cal}}$		$\Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$		p_{cal}		Δp	
			bar	bar	%	bar	bar	bar	bar	%	bar	bar	bar	bar	%	bar	bar	bar	bar	%	bar	bar	%	bar
373.15	11.018	0.742	3.168	3.134	1.07	0.000	0.041	-	0.804	0.838	4.23	3.972	4.013	1.03										
373.15	11.041	1.737	2.840	2.699	4.96	0.000	0.164	-	0.842	0.835	0.83	3.682	3.698	0.43										
373.15	11.052	2.308	2.688	2.429	9.64	0.000	0.278	-	0.866	0.835	3.58	3.554	3.543	0.31										
373.15	11.087	3.389	2.159	1.903	11.86	0.390	0.672	-	0.891	0.837	6.06	3.440	3.411	0.84										
373.15	11.129	4.066	1.518	1.579	4.02	1.256	1.154	8.12	0.845	0.838	0.83	3.619	3.572	1.30										
373.15	11.162	4.854	1.003	1.218	21.44	2.622	2.248	14.26	0.865	0.841	2.77	4.490	4.306	4.10										
373.15	11.193	5.882	0.512	0.815	59.18	6.283	5.759	8.34	0.789	0.852	7.98	7.584	7.427	2.07										
373.15	11.199	6.183	0.416	0.719	-	8.109	7.676	5.34	0.770	0.859	11.56	9.295	9.254	0.44										
373.15	11.204	6.499	0.336	0.630	-	10.592	10.393	1.88	0.764	0.869	13.74	11.692	11.892	1.71										
373.15	11.209	6.907	0.266	0.535	-	15.266	15.321	0.36	0.801	0.889	10.99	16.333	16.745	2.52										
373.15	11.215	7.444	0.164	0.444	-	25.190	25.053	0.54	0.801	0.931	16.23	26.155	26.428	1.04										
373.15	11.093	0.731	3.113	3.166	1.70	0.000	0.040	-	0.846	0.837	1.06	3.959	4.042	2.10										
373.15	11.105	1.375	2.903	2.889	0.48	0.000	0.109	-	0.830	0.835	0.60	3.733	3.833	2.68										
373.15	11.117	2.079	2.694	2.564	4.83	0.000	0.224	-	0.874	0.834	4.58	3.568	3.622	1.51										
373.15	11.126	2.743	2.554	2.241	12.26	0.000	0.395	-	0.906	0.835	7.84	3.460	3.470	0.29										
373.15	11.147	3.400	2.168	1.918	11.53	0.362	0.668	-	0.926	0.836	9.72	3.456	3.421	1.01										
373.15	11.174	4.016	1.680	1.619	3.63	1.139	1.092	4.13	0.951	0.837	11.99	3.770	3.548	5.89										
373.15	11.193	4.461	1.330	1.409	5.94	1.843	1.578	14.38	0.911	0.839	7.90	4.084	3.825	6.34										
373.15	11.214	5.078	0.934	1.134	21.41	3.168	2.693	14.99	0.871	0.842	3.33	4.973	4.669	6.11										
373.15	11.231	5.686	0.620	0.894	44.19	5.301	4.697	11.39	0.806	0.848	5.21	6.727	6.439	4.28										
373.15	11.240	6.163	0.441	0.734	66.44	7.888	7.384	6.39	0.778	0.857	10.15	9.107	8.975	1.45										
373.15	11.244	6.663	0.379	0.596	57.26	12.038	11.929	0.91	0.811	0.874	7.77	13.228	13.399	1.29										
373.15	11.253	7.158	0.200	0.494	-	18.946	18.947	0.01	0.667	0.903	35.38	19.813	20.344	2.68										
373.15	11.254	7.850	0.000	0.400	-	35.323	34.983	0.96	0.867	0.979	12.92	36.190	36.362	0.48										
373.15	13.986	0.836	4.199	4.191	0.19	0.000	0.035	-	0.801	0.794	0.87	5.000	5.020	0.40										
373.15	14.012	2.251	3.727	3.551	4.72	0.000	0.164	-	0.717	0.791	10.32	4.444	4.506	1.40										
373.15	14.038	3.791	3.245	2.756	15.07	0.000	0.460	-	0.683	0.793	16.11	3.928	4.009	2.06										
373.15	14.101	5.260	1.987	1.977	0.50	1.211	1.198	1.07	0.669	0.797	19.13	3.867	3.971	2.69										

Tabelle A 8.2: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC- Modell, Parameter aus Tabelle A 1.9) (Fortsetzung)

T	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$P_{\text{NH}_3, \text{exp}}$		$P_{\text{NH}_3, \text{cal}}$		Δp_{NH_3}		$P_{\text{CO}_2, \text{exp}}$		$P_{\text{CO}_2, \text{cal}}$		Δp_{CO_2}		$P_{\text{H}_2\text{O}, \text{exp}}$		$P_{\text{H}_2\text{O}, \text{cal}}$		$\Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$		P_{cal}		Δp	
			bar	bar	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar
373.15	14.150	6.600	0.944	1.319	39.72	3.683	3.210	12.84	0.656	0.630	0.803	0.819	22.41	5.283	5.332	0.93								
373.15	14.172	7.779	0.470	0.864	-	8.803	8.497	3.48	0.630	0.630	0.819	0.819	30.00	9.903	10.179	2.79								
373.15	14.186	8.713	0.177	0.626	-	18.394	18.556	0.88	0.719	0.719	0.855	0.855	18.92	19.290	20.038	3.88								
373.15	14.191	9.465	0.071	0.513	-	33.220	33.530	0.93	0.681	0.681	0.920	0.920	35.10	33.972	34.963	2.92								
373.15	14.036	1.700	3.906	3.826	2.05	0.000	0.103	-	0.802	0.802	0.791	0.791	1.37	4.708	4.720	0.25								
373.15	14.080	3.560	3.335	2.897	13.13	0.000	0.394	-	0.795	0.795	0.792	0.792	0.38	4.130	4.083	1.14								
373.15	14.171	5.317	2.061	1.971	4.37	1.221	1.222	0.08	0.744	0.744	0.796	0.796	6.99	4.026	3.989	0.92								
373.15	14.252	6.836	0.888	1.243	39.98	4.312	3.739	13.29	0.669	0.669	0.803	0.803	20.03	5.869	5.785	1.43								
373.15	14.278	8.191	0.496	0.764	54.03	11.715	11.523	1.64	0.727	0.727	0.828	0.828	13.89	12.938	13.114	1.36								
373.15	14.292	8.634	0.285	0.659	-	16.903	16.595	1.82	0.776	0.776	0.846	0.846	9.02	17.964	18.100	0.76								
373.15	14.299	9.282	0.184	0.547	-	27.947	27.830	0.42	0.719	0.719	0.893	0.893	24.20	28.850	29.270	1.46								
373.15	14.305	9.794	0.103	0.492	-	40.568	40.781	0.53	0.761	0.761	0.953	0.953	25.23	41.432	42.225	1.91								
393.15	0.694	0.172	0.167	0.221	32.34	0.624	0.643	3.04	2.045	2.045	1.973	1.973	3.52	2.836	2.837	0.04								
393.15	0.699	0.304	0.097	0.171	-	2.416	2.172	10.10	1.994	1.994	1.992	1.992	0.10	4.507	4.335	3.82								
393.15	0.703	0.419	0.044	0.133	-	5.385	4.691	12.89	1.974	1.974	2.019	2.019	2.28	7.403	6.844	7.55								
393.15	0.706	0.494	0.006	0.114	-	8.937	7.102	20.53	1.857	1.857	2.044	2.044	10.07	10.800	9.260	14.26								
393.15	0.707	0.645	0.000	0.082	-	20.342	14.404	29.19	1.601	1.601	2.121	2.121	32.48	21.943	16.607	24.32								
393.15	0.707	0.763	0.000	0.066	-	31.355	22.393	28.58	1.652	1.652	2.208	2.208	33.66	33.007	24.667	25.27								
393.15	0.707	0.906	0.000	0.054	-	47.875	34.442	28.06	1.748	1.748	2.346	2.346	34.21	49.623	36.842	25.76								
393.15	1.808	0.494	0.442	0.542	22.62	1.336	1.351	1.12	1.994	1.994	1.944	1.944	2.51	3.772	3.837	1.72								
393.15	1.817	0.665	0.321	0.466	45.17	2.719	2.628	3.35	1.943	1.943	1.956	1.956	0.67	4.983	5.050	1.34								
393.15	1.822	0.782	0.244	0.417	-	4.110	3.893	5.28	1.884	1.884	1.968	1.968	4.46	6.238	6.278	0.64								
393.15	1.827	0.892	0.177	0.375	-	5.882	5.470	7.00	1.841	1.841	1.983	1.983	7.71	7.900	7.829	0.90								
393.15	1.832	0.994	0.111	0.340	-	7.934	7.325	7.68	1.761	1.761	2.001	2.001	13.63	9.806	9.665	1.44								
393.15	1.839	1.327	0.013	0.246	-	19.447	17.173	11.69	1.641	1.641	2.098	2.098	27.85	21.101	19.517	7.51								
393.15	1.840	1.526	0.000	0.207	-	31.146	26.617	14.54	1.645	1.645	2.197	2.197	33.56	32.791	29.022	11.49								
393.15	1.840	1.754	0.000	0.178	-	47.913	41.252	13.90	1.852	1.852	2.363	2.363	27.59	49.765	43.792	12.00								
393.15	3.821	1.067	0.943	1.119	18.66	1.840	1.856	0.87	1.936	1.936	1.882	1.882	2.79	4.719	4.857	2.92								

Tabelle A 8.2: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC- Modell, Parameter aus Tabelle A 1.9) (Fortsetzung)

T	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$p_{\text{NH}_3, \text{exp}}$		$p_{\text{NH}_3, \text{cal}}$		Δp_{NH_3}		$p_{\text{CO}_2, \text{exp}}$		$p_{\text{CO}_2, \text{cal}}$		Δp_{CO_2}		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{exp}}$		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{cal}}$		$\Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$		p_{cal}		Δp	
			bar	bar	%	bar	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%
393.15	3.845	1.486	0.599	0.902	50.58	4.465	4.154	6.97	1.767	1.901	7.58	6.831	6.957	1.84										
393.15	3.855	1.672	0.453	0.814	-	6.336	5.759	9.11	1.721	1.914	11.21	8.510	8.488	0.26										
393.15	3.862	1.815	0.348	0.752	-	8.299	7.331	11.66	1.599	1.928	20.58	10.246	10.010	2.30										
393.15	3.866	1.925	0.300	0.705	-	9.833	8.799	10.52	1.587	1.940	22.24	11.720	11.445	2.35										
393.15	3.871	2.316	0.233	0.562	-	17.783	16.470	7.38	1.554	2.011	29.41	19.570	19.043	2.69										
393.15	3.881	2.633	0.093	0.479	-	28.979	26.240	9.45	1.545	2.106	36.31	30.617	28.825	5.85										
393.15	3.886	2.982	0.017	0.417	-	47.465	41.944	11.63	1.614	2.273	40.83	49.096	44.635	9.09										
393.15	5.729	1.034	2.128	2.052	3.57	0.457	0.793	-	1.951	1.816	6.92	4.536	4.661	2.76										
393.15	5.791	1.839	1.337	1.570	17.43	2.787	2.722	2.33	1.764	1.826	3.51	5.888	6.118	3.91										
393.15	5.822	2.284	0.923	1.320	43.01	5.306	4.865	8.31	1.594	1.842	15.56	7.823	8.026	2.59										
393.15	5.842	2.543	0.667	1.186	-	7.523	6.735	10.47	1.489	1.856	24.65	9.679	9.777	1.01										
393.15	5.854	2.810	0.515	1.056	-	10.364	9.401	9.29	1.438	1.878	30.60	12.317	12.334	0.14										
393.15	5.862	3.269	0.412	0.863	-	17.321	16.543	4.49	1.267	1.939	53.04	19.000	19.345	1.82										
393.15	5.878	3.707	0.215	0.729	-	29.062	27.533	5.26	1.524	2.041	33.92	30.801	30.303	1.62										
393.15	5.883	3.941	0.150	0.676	-	38.385	35.672	7.07	1.492	2.122	42.23	40.027	38.471	3.89										
393.15	5.893	4.145	0.036	0.643	-	48.331	44.218	8.51	1.539	2.211	43.66	49.906	47.071	5.68										
393.15	7.782	1.803	2.824	2.589	8.32	0.943	1.329	40.93	1.732	1.756	1.39	5.499	5.674	3.18										
393.15	7.936	3.413	1.002	1.600	59.68	7.860	7.000	10.94	1.352	1.791	32.47	10.214	10.391	1.73										
393.15	7.965	4.179	0.657	1.213	-	15.880	15.230	4.09	1.426	1.857	30.22	17.963	18.300	1.88										
393.15	7.990	4.748	0.363	1.008	-	27.952	26.694	4.50	1.390	1.956	40.72	29.705	29.658	0.16										
393.15	8.000	5.057	0.242	0.929	-	37.937	35.767	5.72	1.357	2.041	50.41	39.536	38.737	2.02										
393.15	8.007	5.313	0.164	0.881	-	48.312	45.236	6.37	1.385	2.135	54.15	49.861	48.253	3.22										
393.15	7.802	0.500	3.536	3.482	1.53	0.000	0.136	-	1.795	1.757	2.12	5.331	5.374	0.81										
393.15	7.820	0.998	3.317	3.164	4.61	0.299	0.432	44.48	1.707	1.753	2.69	5.323	5.348	0.47										
393.15	7.828	1.495	3.214	2.828	12.01	0.455	0.900	-	1.785	1.752	1.85	5.454	5.480	0.48										
393.15	7.874	1.944	2.682	2.539	5.33	1.293	1.524	17.87	1.798	1.754	2.45	5.773	5.817	0.76										
393.15	7.923	2.477	2.092	2.196	4.97	2.783	2.672	3.99	1.708	1.760	3.04	6.583	6.628	0.68										
393.15	7.966	2.912	1.583	1.926	21.67	4.747	4.131	12.98	1.619	1.769	9.26	7.949	7.826	1.55										

Tabelle A 8.2: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC- Modell, Parameter aus Tabelle A 1.9) (Fortsetzung)

T	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$p_{\text{NH}_3, \text{exp}}$		$p_{\text{NH}_3, \text{cal}}$		Δp_{NH_3}		$p_{\text{CO}_2, \text{exp}}$		$p_{\text{CO}_2, \text{cal}}$		Δp_{CO_2}		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{exp}}$		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{cal}}$		$\Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$		p_{cal}		Δp	
			bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar	bar
393.15	8.006	3.378	1.116	1.651	47.94	7.657	6.564	14.27	1.486	1.786	20.19	10.259	10.002	2.51										
393.15	8.032	3.755	0.805	1.448	-	11.051	9.555	13.54	1.360	1.808	32.94	13.216	12.811	3.06										
393.15	8.064	4.586	0.437	1.083	-	23.704	21.930	7.48	1.360	1.911	40.51	25.501	24.924	2.26										
393.15	8.085	5.313	0.186	0.897	-	47.160	43.547	7.66	1.496	2.115	41.38	48.842	46.558	4.68										
393.15	9.704	1.818	3.975	3.619	8.96	0.493	0.860	-	1.616	1.697	5.01	6.084	6.176	1.51										
393.15	9.781	2.901	3.066	2.860	6.72	2.086	2.318	11.12	1.501	1.702	13.39	6.653	6.880	3.41										
393.15	9.874	3.736	1.943	2.305	18.63	5.047	4.661	7.65	1.408	1.716	21.88	8.398	8.682	3.38										
393.15	9.927	4.339	1.295	1.931	49.11	8.732	7.784	10.86	1.258	1.737	38.08	11.285	11.451	1.47										
393.15	9.923	4.362	1.344	1.915	42.49	8.584	7.955	7.33	1.541	1.738	12.78	11.469	11.608	1.21										
393.15	9.953	4.862	0.993	1.637	64.85	13.252	12.314	7.08	1.350	1.770	31.11	15.595	15.722	0.81										
393.15	9.970	5.186	0.792	1.481	-	17.360	16.367	5.72	1.332	1.801	35.21	19.484	19.650	0.85										
393.15	9.993	5.700	0.514	1.279	-	26.982	25.618	5.06	1.333	1.878	40.89	28.829	28.775	0.19										
393.15	10.009	6.085	0.328	1.168	-	37.639	35.513	5.65	1.301	1.965	51.04	39.268	38.647	1.58										
393.15	9.741	0.490	4.584	4.556	0.61	0.000	0.097	-	1.797	1.702	5.29	6.381	6.355	0.41										
393.15	9.748	1.499	4.489	3.873	13.72	0.070	0.601	-	1.701	1.695	0.35	6.260	6.170	1.44										
393.15	9.764	1.969	4.291	3.542	17.46	0.458	0.991	-	1.629	1.696	4.11	6.378	6.228	2.35										
393.15	9.819	2.588	3.641	3.112	14.53	1.425	1.743	22.32	1.625	1.698	4.49	6.691	6.553	2.06										
393.15	9.920	3.347	2.440	2.605	6.76	3.830	3.283	14.28	1.648	1.705	3.46	7.918	7.593	4.10										
393.15	11.566	2.058	5.146	4.499	12.57	0.113	0.770	-	1.507	1.644	9.09	6.766	6.913	2.17										
393.15	11.637	2.997	4.305	3.812	11.45	1.091	1.616	48.12	1.435	1.645	14.63	6.831	7.074	3.56										
393.15	11.701	3.717	3.530	3.280	7.08	2.444	2.731	11.74	1.359	1.651	21.49	7.333	7.662	4.49										
393.15	11.771	4.251	2.670	2.905	8.80	4.180	4.003	4.23	1.348	1.657	22.92	8.198	8.566	4.49										
393.15	11.822	4.804	2.043	2.522	23.45	6.275	6.029	3.92	1.446	1.669	15.42	9.764	10.221	4.68										
393.15	11.874	5.335	1.401	2.186	56.03	10.345	9.013	12.88	1.133	1.689	49.07	12.879	12.887	0.06										
393.15	11.912	6.111	0.927	1.755	-	17.879	16.655	6.85	1.227	1.744	42.14	20.033	20.155	0.61										
393.15	11.939	6.700	0.599	1.509	-	28.133	26.540	5.66	1.223	1.822	48.98	29.955	29.872	0.28										
393.15	11.950	7.174	0.468	1.368	-	39.720	38.407	3.31	1.421	1.925	35.47	41.609	41.699	0.22										
393.15	11.960	7.412	0.355	1.319	-	48.195	45.892	4.78	1.407	1.993	41.65	49.957	49.204	1.51										

Tabelle A 8.2: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC- Modell, Parameter aus Tabelle A 1.9) (Fortsetzung)

T	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$p_{\text{NH}_3, \text{exp}}$		$p_{\text{NH}_3, \text{cal}}$		Δp_{NH_3}		$p_{\text{CO}_2, \text{exp}}$		$p_{\text{CO}_2, \text{cal}}$		Δp_{CO_2}		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{exp}}$		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{cal}}$		$\Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$		p_{cal}		Δp	
			bar	bar	%	bar	bar	bar	bar	%	bar	bar	bar	bar	%	bar	bar	bar	bar	%	bar	bar	%	bar
393.15	2.834	0.217	1.027	1.152	12.17	0.136	0.137	0.74	2.119	1.903	10.19	3.280	3.193	2.65										
393.15	2.835	0.471	0.880	1.007	14.43	0.575	0.579	0.70	2.095	1.905	9.07	3.550	3.491	1.66										
393.15	2.840	0.691	0.730	0.888	21.64	1.257	1.259	0.16	2.093	1.909	8.79	4.080	4.056	0.59										
393.15	2.835	0.846	0.646	0.803	24.30	1.962	1.978	0.82	2.041	1.916	6.12	4.650	4.697	1.01										
393.15	2.838	1.033	0.526	0.710	34.98	3.135	3.181	1.47	2.059	1.926	6.46	5.720	5.818	1.71										
393.15	2.840	1.185	0.456	0.639	40.13	4.409	4.533	2.81	2.045	1.938	5.23	6.910	7.110	2.89										
393.15	2.841	1.331	0.392	0.575	46.68	6.082	6.258	2.89	2.056	1.954	4.96	8.530	8.787	3.01										
393.15	8.098	0.565	3.409	3.600	5.60	0.149	0.157	5.37	1.864	1.747	6.28	5.420	5.505	1.57										
393.15	8.106	1.186	2.975	3.190	7.23	0.542	0.550	1.48	1.853	1.744	5.88	5.370	5.483	2.10										
393.15	8.113	1.914	2.397	2.686	12.06	1.314	1.379	4.95	1.929	1.746	9.49	5.640	5.811	3.03										
393.15	8.112	2.390	2.070	2.352	13.62	2.224	2.297	3.28	1.866	1.751	6.16	6.160	6.401	3.91										
393.15	8.120	3.040	1.594	1.916	20.20	4.304	4.451	3.42	1.802	1.767	1.94	7.700	8.134	5.64										
393.15	8.120	3.540	1.270	1.606	26.46	7.016	7.387	5.29	1.794	1.789	0.28	10.080	10.782	6.96										
393.15	8.125	4.076	0.899	1.320	46.83	11.954	12.729	6.48	1.887	1.831	2.97	14.740	15.880	7.73										
393.15	12.157	0.863	5.343	5.702	6.72	0.151	0.175	15.89	1.771	1.632	7.85	7.260	7.509	3.43										
393.15	12.164	2.000	4.540	4.894	7.80	0.630	0.665	5.56	1.751	1.627	7.08	6.920	7.186	3.84										
393.15	12.179	3.041	3.709	4.088	10.22	1.432	1.497	4.54	1.778	1.630	8.32	6.920	7.214	4.25										
393.15	12.183	3.766	3.151	3.509	11.36	2.412	2.520	4.48	1.747	1.636	6.35	7.310	7.666	4.87										
393.15	12.200	4.784	2.336	2.728	16.78	5.027	5.295	5.33	1.727	1.654	4.23	9.090	9.677	6.46										
393.15	12.217	5.562	1.480	2.196	48.38	9.317	9.599	3.03	1.743	1.683	3.44	12.540	13.478	7.48										
393.15	12.238	6.334	0.277	1.766	-	17.714	17.630	0.47	1.779	1.742	2.08	19.770	21.138	6.92										
393.15	12.407	0.825	5.617	5.876	4.61	0.138	0.159	15.22	1.708	1.625	4.86	7.460	7.660	2.68										
393.15	12.423	1.942	4.993	5.090	1.94	0.610	0.609	0.16	1.711	1.620	5.32	7.310	7.318	0.11										
393.15	12.421	2.971	4.226	4.285	1.40	1.436	1.357	5.50	1.778	1.622	8.77	7.440	7.265	2.35										
393.15	12.428	3.696	3.651	3.703	1.42	2.455	2.268	7.62	1.814	1.628	10.25	7.920	7.599	4.05										
393.15	12.436	4.700	2.762	2.914	5.50	4.963	4.646	6.39	1.765	1.643	6.91	9.490	9.203	3.02										
393.15	12.481	6.041	0.401	2.019	-	14.513	12.768	12.02	1.822	1.699	6.75	16.720	16.486	1.40										
393.15	12.484	6.856	0.082	1.619	-	25.116	24.318	3.18	2.132	1.787	16.18	27.330	27.725	1.45										

Tabelle A 8.2: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC- Modell, Parameter aus Tabelle A 1.9) (Fortsetzung)

T	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$p_{\text{NH}_3, \text{exp}}$		$p_{\text{NH}_3, \text{cal}}$		Δp_{NH_3}		$p_{\text{CO}_2, \text{exp}}$		$p_{\text{CO}_2, \text{cal}}$		Δp_{CO_2}		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{exp}}$		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{cal}}$		$\Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$		p_{cal}		Δp	
			bar	bar	%	bar	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%
413.15	2.498	0.215	1.266	1.568	23.85	0.636	0.523	17.77	3.878	3.500	9.75	5.780	5.591	3.27										
413.15	2.501	0.421	1.073	1.411	31.50	2.196	1.766	19.58	3.791	3.519	7.17	7.060	6.696	5.16										
413.15	2.498	0.627	0.904	1.260	39.38	4.660	3.836	17.68	3.756	3.553	5.40	9.320	8.649	7.20										
413.15	2.503	0.746	0.783	1.183	51.09	6.596	5.455	17.30	3.801	3.579	5.84	11.180	10.217	8.61										
413.15	2.505	0.931	0.601	1.070	-	10.484	8.780	16.25	3.935	3.633	7.67	15.020	13.483	10.23										
413.15	2.510	1.045	0.275	1.009	-	13.743	11.360	17.34	4.282	3.674	14.20	18.300	16.044	12.33										
413.15	4.003	0.233	2.439	2.658	8.98	0.330	0.317	3.94	3.701	3.423	7.51	6.470	6.399	1.10										
413.15	4.005	0.534	2.155	2.401	11.42	1.358	1.364	0.44	3.867	3.432	11.25	7.380	7.197	2.48										
413.15	4.012	0.815	1.918	2.174	13.35	2.943	2.989	1.56	3.819	3.454	9.56	8.680	8.616	0.74										
413.15	4.012	0.992	1.685	2.032	20.59	4.510	4.434	1.69	3.895	3.475	10.78	10.090	9.941	1.48										
413.15	4.015	1.221	1.495	1.862	24.55	7.003	6.880	1.76	3.962	3.511	11.38	12.460	12.253	1.66										
413.15	4.018	1.545	0.898	1.642	-	12.272	11.857	3.38	4.091	3.587	12.32	17.260	17.086	1.01										
413.15	4.032	1.835	0.285	1.480	-	19.056	18.200	4.49	4.419	3.686	16.59	23.760	23.366	1.66										
413.15	7.146	0.416	4.702	4.954	5.36	0.385	0.387	0.52	3.653	3.267	10.57	8.740	8.608	1.51										
413.15	7.148	1.051	4.101	4.358	6.27	1.843	1.840	0.16	3.706	3.272	11.71	9.650	9.471	1.85										
413.15	7.147	1.679	4.029	3.765	6.55	4.571	4.459	2.45	3.721	3.301	11.29	12.320	11.525	6.45										
413.15	7.161	2.078	2.701	3.410	26.25	7.884	7.063	10.41	3.935	3.334	15.27	14.520	13.807	4.91										
413.15	7.185	2.565	1.276	3.013	-	13.614	11.770	13.54	4.151	3.397	18.16	19.040	18.180	4.52										
413.15	7.200	3.169	0.422	2.585	-	23.264	21.387	8.07	4.445	3.537	20.43	28.130	27.509	2.21										
413.15	7.204	3.503	0.323	2.396	-	30.874	29.337	4.98	4.703	3.660	22.18	35.900	35.393	1.41										
413.15	7.493	0.553	4.650	5.110	9.89	0.563	0.580	3.02	3.578	3.249	9.20	8.790	8.938	1.68										
413.15	7.505	1.247	3.707	4.459	20.29	2.014	2.300	14.20	4.009	3.258	18.73	9.730	10.017	2.95										
413.15	7.505	1.909	3.312	3.827	15.55	4.921	5.290	7.50	3.596	3.292	8.45	11.830	12.409	4.89										
413.15	7.516	2.333	2.577	3.448	33.80	8.516	8.328	2.21	3.717	3.331	10.38	14.810	15.108	2.01										
413.15	7.537	2.895	1.238	2.996	-	15.452	14.527	5.99	3.940	3.416	13.30	20.630	20.940	1.50										
413.15	7.552	3.305	0.496	2.714	-	22.877	21.387	6.51	4.157	3.516	15.42	27.530	27.617	0.32										
413.15	8.113	0.617	5.226	5.561	6.41	0.592	0.620	4.73	3.432	3.218	6.24	9.250	9.400	1.62										
413.15	8.125	1.319	4.192	4.893	16.72	1.959	2.220	13.32	3.949	3.225	18.33	10.100	10.338	2.36										

Tabelle A 8.2: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC- Modell, Parameter aus Tabelle A 1.9) (Fortsetzung)

T	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$p_{\text{NH}_3, \text{exp}}$		$p_{\text{NH}_3, \text{cal}}$		Δp_{NH_3}		$p_{\text{CO}_2, \text{exp}}$		$p_{\text{CO}_2, \text{cal}}$		Δp_{CO_2}		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{exp}}$		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{cal}}$		$\Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$		p_{cal}		Δp	
			bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar
413.15	8.123	1.981	3.745	4.242	13.27	4.539	4.866	7.20	3.567	3.254	8.77	11.850	12.361	4.31										
413.15	8.136	2.452	2.753	3.807	38.29	7.847	7.820	0.34	3.590	3.290	8.36	14.190	14.917	5.12										
413.15	8.155	3.077	1.267	3.278	-	14.724	14.052	4.56	3.800	3.374	11.21	19.790	20.704	4.62										
413.15	8.163	3.408	0.641	3.032	-	20.081	18.954	5.61	3.947	3.444	12.74	24.670	25.430	3.08										
413.15	8.166	3.763	0.470	2.800	-	27.043	25.983	3.92	3.787	3.548	6.31	31.300	32.332	3.30										
413.15	11.634	0.857	7.885	8.363	6.06	0.568	0.636	11.97	3.386	3.049	9.95	11.840	12.048	1.76										
413.15	11.643	1.991	6.715	7.189	7.06	2.292	2.445	6.68	3.382	3.051	9.79	12.390	12.685	2.38										
413.15	11.653	2.660	6.008	6.463	7.57	3.965	4.209	6.15	3.378	3.066	9.24	13.350	13.738	2.91										
413.15	11.656	3.438	5.341	5.616	5.15	7.196	7.471	3.82	3.313	3.103	6.34	15.850	16.189	2.14										
413.15	11.688	3.986	3.201	5.071	58.42	12.349	10.976	11.12	3.390	3.144	7.26	18.940	19.191	1.33										
413.15	11.729	4.590	1.644	4.527	-	18.715	16.687	10.84	3.820	3.215	15.84	24.180	24.429	1.03										
413.15	11.727	5.201	0.837	4.033	-	27.499	25.776	6.27	3.864	3.340	13.56	32.200	33.149	2.95										
413.15	11.799	0.859	8.201	8.508	3.74	0.571	0.627	9.81	3.378	3.041	9.98	12.150	12.176	0.21										
413.15	11.807	1.975	7.300	7.351	0.70	2.337	2.350	0.56	3.493	3.043	12.88	13.130	12.743	2.95										
413.15	11.816	2.638	6.602	6.629	0.41	4.050	4.017	0.81	3.608	3.056	15.30	14.260	13.703	3.91										
413.15	11.820	3.410	5.982	5.783	3.33	6.900	7.066	2.41	3.507	3.090	11.89	16.390	15.938	2.76										
413.15	11.821	3.971	4.444	5.191	16.81	11.109	10.520	5.30	3.437	3.131	8.90	18.990	18.843	0.77										
413.15	11.893	4.547	2.628	4.684	78.23	17.263	15.508	10.17	3.789	3.191	15.78	23.680	23.383	1.25										
413.15	11.898	5.191	1.244	4.149	-	25.813	24.363	5.62	4.043	3.310	18.13	31.100	31.823	2.32										
433.15	2.719	0.246	2.008	2.568	27.89	1.684	1.695	0.65	6.768	6.025	10.98	10.460	10.288	1.64										
433.15	2.720	0.511	1.795	2.332	29.92	6.090	6.013	1.26	6.825	6.141	10.02	14.710	14.486	1.52										
433.15	2.720	0.648	1.746	2.227	27.55	9.124	9.174	0.55	6.950	6.225	10.43	17.820	17.626	1.09										
433.15	2.726	0.779	1.601	2.143	33.85	12.789	12.811	0.17	6.960	6.320	9.20	21.350	21.274	0.36										
433.15	2.724	0.857	1.545	2.092	35.40	15.189	15.307	0.78	7.036	6.386	9.24	23.770	23.785	0.06										
433.15	2.723	0.965	1.411	2.029	43.80	19.168	19.157	0.06	7.081	6.489	8.36	27.660	27.675	0.05										
433.15	2.722	1.073	1.280	1.974	54.22	23.520	23.502	0.08	7.200	6.607	8.24	32.000	32.083	0.26										
433.15	7.645	0.664	6.558	7.679	17.09	2.251	2.338	3.86	6.301	5.643	10.44	15.110	15.660	3.64										
433.15	7.649	1.500	5.707	6.719	17.73	8.749	9.253	5.76	6.525	5.775	11.49	20.980	21.747	3.66										

Tabelle A 8.2: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in Wasser: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC- Modell, Parameter aus Tabelle A 1.9) (Fortsetzung)

T	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	\bar{m}_{CO_2} mol/kg	$p_{\text{NH}_3, \text{exp}}$		$p_{\text{NH}_3, \text{cal}}$		Δp_{NH_3}		$p_{\text{CO}_2, \text{exp}}$		$p_{\text{CO}_2, \text{cal}}$		Δp_{CO_2}		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{exp}}$		$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{cal}}$		$\Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$		p_{cal}		Δp																																																																							
			bar	bar	%	bar	bar	bar	bar	%	bar	bar	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	%																																																																					
433.15	7.658	1.954	4.910	6.259	27.47	14.730	15.301	3.88	6.900	6.900	7.120	6.398	10.01	45.000	47.350	5.22	26.540	27.470	3.50	35.600	37.498	5.33	14.36	14.36	0.00	28.220	28.042	0.63	34.600	35.213	1.77	46.900	48.744	3.93	16.50	16.50	0.00	16.530	16.289	1.46	20.610	20.044	2.75	26.140	25.549	2.26	30.700	30.518	0.59	9.90	9.90	0.00	10.723	10.907	1.64	12.035	11.124	8.71	41.500	40.948	1.33	47.600	46.195	2.95	21.960	20.933	4.68	25.620	24.362	4.91	31.400	30.073	4.23	39.100	38.134	2.47	70.400	68.562	2.61	31.400	32.129	2.32	38.200	38.245	0.12	47.800	48.196	0.83	31.300	33.046	5.58	37.800	38.361	1.48
433.15	7.662	2.488	4.272	5.796	35.67	24.208	25.551	5.55	7.120	7.120	7.110	6.398	10.01	45.000	47.350	5.22	26.540	27.470	3.50	35.600	37.498	5.33	14.36	14.36	0.00	28.220	28.042	0.63	34.600	35.213	1.77	46.900	48.744	3.93	16.50	16.50	0.00	16.530	16.289	1.46	20.610	20.044	2.75	26.140	25.549	2.26	30.700	30.518	0.59	9.90	9.90	0.00	10.723	10.907	1.64	12.035	11.124	8.71	41.500	40.948	1.33	47.600	46.195	2.95	21.960	20.933	4.68	25.620	24.362	4.91	31.400	30.073	4.23	39.100	38.134	2.47	70.400	68.562	2.61	31.400	32.129	2.32	38.200	38.245	0.12	47.800	48.196	0.83	31.300	33.046	5.58	37.800	38.361	1.48
433.15	7.675	2.867	3.645	5.558	52.48	34.245	35.394	3.36	7.110	7.110	6.398	10.01	45.000	47.350	5.22	26.540	27.470	3.50	35.600	37.498	5.33	14.36	14.36	0.00	28.220	28.042	0.63	34.600	35.213	1.77	46.900	48.744	3.93	16.50	16.50	0.00	16.530	16.289	1.46	20.610	20.044	2.75	26.140	25.549	2.26	30.700	30.518	0.59	9.90	9.90	0.00	10.723	10.907	1.64	12.035	11.124	8.71	41.500	40.948	1.33	47.600	46.195	2.95	21.960	20.933	4.68	25.620	24.362	4.91	31.400	30.073	4.23	39.100	38.134	2.47	70.400	68.562	2.61	31.400	32.129	2.32	38.200	38.245	0.12	47.800	48.196	0.83	31.300	33.046	5.58	37.800	38.361	1.48	
433.15	12.650	0.933	11.986	13.671	14.06	2.076	2.031	2.17	6.288	6.288	5.264	5.264	16.28	20.350	20.966	3.03	30.700	30.518	0.59	9.90	9.90	0.00	10.723	10.907	1.64	12.035	11.124	8.71	41.500	40.948	1.33	47.600	46.195	2.95	21.960	20.933	4.68	25.620	24.362	4.91	31.400	30.073	4.23	39.100	38.134	2.47	70.400	68.562	2.61	31.400	32.129	2.32	38.200	38.245	0.12	47.800	48.196	0.83	31.300	33.046	5.58	37.800	38.361	1.48																														
433.15	12.646	1.791	11.359	12.498	10.03	5.609	5.506	1.84	6.501	6.501	5.304	5.304	18.41	23.470	23.307	0.69	28.220	28.042	0.63	34.600	35.213	1.77	46.900	48.744	3.93	16.50	16.50	0.00	16.530	16.289	1.46	20.610	20.044	2.75	26.140	25.549	2.26	30.700	30.518	0.59	9.90	9.90	0.00	10.723	10.907	1.64	12.035	11.124	8.71	41.500	40.948	1.33	47.600	46.195	2.95	21.960	20.933	4.68	25.620	24.362	4.91	31.400	30.073	4.23	39.100	38.134	2.47	70.400	68.562	2.61	31.400	32.129	2.32	38.200	38.245	0.12	47.800	48.196	0.83	31.300	33.046	5.58	37.800	38.361	1.48									
433.15	12.652	2.722	10.216	11.232	9.95	11.288	11.405	1.04	6.716	6.716	5.405	5.405	19.52	28.220	28.042	0.63	34.600	35.213	1.77	46.900	48.744	3.93	16.50	16.50	0.00	16.530	16.289	1.46	20.610	20.044	2.75	26.140	25.549	2.26	30.700	30.518	0.59	9.90	9.90	0.00	10.723	10.907	1.64	12.035	11.124	8.71	41.500	40.948	1.33	47.600	46.195	2.95	21.960	20.933	4.68	25.620	24.362	4.91	31.400	30.073	4.23	39.100	38.134	2.47	70.400	68.562	2.61	31.400	32.129	2.32	38.200	38.245	0.12	47.800	48.196	0.83	31.300	33.046	5.58	37.800	38.361	1.48												
433.15	12.660	3.520	9.411	10.234	8.75	18.546	19.414	4.68	6.643	6.643	5.565	5.565	16.23	34.600	35.213	1.77	46.900	48.744	3.93	16.50	16.50	0.00	16.530	16.289	1.46	20.610	20.044	2.75	26.140	25.549	2.26	30.700	30.518	0.59	9.90	9.90	0.00	10.723	10.907	1.64	12.035	11.124	8.71	41.500	40.948	1.33	47.600	46.195	2.95	21.960	20.933	4.68	25.620	24.362	4.91	31.400	30.073	4.23	39.100	38.134	2.47	70.400	68.562	2.61	31.400	32.129	2.32	38.200	38.245	0.12	47.800	48.196	0.83	31.300	33.046	5.58	37.800	38.361	1.48															
433.15	12.700	4.408	6.238	9.379	50.35	33.627	33.490	0.41	7.035	7.035	5.874	5.874	16.50	46.900	48.744	3.93	16.50	16.50	0.00	16.530	16.289	1.46	20.610	20.044	2.75	26.140	25.549	2.26	30.700	30.518	0.59	9.90	9.90	0.00	10.723	10.907	1.64	12.035	11.124	8.71	41.500	40.948	1.33	47.600	46.195	2.95	21.960	20.933	4.68	25.620	24.362	4.91	31.400	30.073	4.23	39.100	38.134	2.47	70.400	68.562	2.61	31.400	32.129	2.32	38.200	38.245	0.12	47.800	48.196	0.83	31.300	33.046	5.58	37.800	38.361	1.48																		
453.15	2.521	0.186	2.777	3.519	26.72	3.124	2.875	7.97	10.629	9.895	9.895	9.895	6.91	16.530	16.289	1.46	20.610	20.044	2.75	26.140	25.549	2.26	30.700	30.518	0.59	9.90	9.90	0.00	10.723	10.907	1.64	12.035	11.124	8.71	41.500	40.948	1.33	47.600	46.195	2.95	21.960	20.933	4.68	25.620	24.362	4.91	31.400	30.073	4.23	39.100	38.134	2.47	70.400	68.562	2.61	31.400	32.129	2.32	38.200	38.245	0.12	47.800	48.196	0.83	31.300	33.046	5.58	37.800	38.361	1.48																								
453.15	2.520	0.315	2.659	3.416	28.47	6.884	6.573	4.52	11.068	10.055	10.055	10.055	9.15	20.610	20.044	2.75	26.140	25.549	2.26	30.700	30.518	0.59	9.90	9.90	0.00	10.723	10.907	1.64	12.035	11.124	8.71	41.500	40.948	1.33	47.600	46.195	2.95	21.960	20.933	4.68	25.620	24.362	4.91	31.400	30.073	4.23	39.100	38.134	2.47	70.400	68.562	2.61	31.400	32.129	2.32	38.200	38.245	0.12	47.800	48.196	0.83	31.300	33.046	5.58	37.800	38.361	1.48																											
453.15	2.521	0.462	2.536	3.329	31.27	12.312	11.939	3.03	11.292	10.282	10.282	10.282	8.94	26.140	25.549	2.26	30.700	30.518	0.59	9.90	9.90	0.00	10.723	10.907	1.64	12.035	11.124	8.71	41.500	40.948	1.33	47.600	46.195	2.95	21.960	20.933	4.68	25.620	24.362	4.91	31.400	30.073	4.23	39.100	38.134	2.47	70.400	68.562	2.61	31.400	32.129	2.32	38.200	38.245	0.12	47.800	48.196	0.83	31.300	33.046	5.58	37.800	38.361	1.48																														
453.15	2.520	0.574	2.425	3.277	35.13	16.639	16.758	0.72	11.635	10.483	10.483	10.483	9.90	30.700	30.518	0.59	9.90	9.90	0.00	10.723	10.907	1.64	12.035	11.124	8.71	41.500	40.948	1.33	47.600	46.195	2.95	21.960	20.933	4.68	25.620	24.362	4.91	31.400	30.073	4.23	39.100	38.134	2.47	70.400	68.562	2.61	31.400	32.129	2.32	38.200	38.245	0.12	47.800	48.196	0.83	31.300	33.046	5.58	37.800	38.361	1.48																																	
453.15	2.519	0.693	2.318	3.237	39.65	22.632	22.473	0.70	11.850	10.723	10.723	10.723	9.51	36.800	36.432	1.00	20.610	20.044	2.75	26.140	25.549	2.26	30.700	30.518	0.59	9.90	9.90	0.00	10.723	10.907	1.64	12.035	11.124	8.71	41.500	40.948	1.33	47.600	46.195	2.95	21.960	20.933	4.68	25.620	24.362	4.91	31.400	30.073	4.23	39.100	38.134	2.47	70.400	68.562	2.61	31.400	32.129	2.32	38.200	38.245	0.12	47.800	48.196	0.83	31.300	33.046	5.58	37.800	38.361	1.48																								
453.15	2.523	0.776	2.200	3.222	46.45	27.265	26.819	1.64	12.035	10.907	10.907	10.907	9.37	41.500	40.948	1.33	20.610	20.044	2.75	26.140	25.549	2.26	30.700	30.518	0.59	9.90	9.90	0.00	10.723	10.907	1.64	12.035	11.124	8.71	41.500	40.948	1.33	47.600	46.195	2.95	21.960	20.933	4.68	25.620	24.362	4.91	31.400	30.073	4.23	39.100	38.134	2.47	70.400	68.562	2.61	31.400	32.129	2.32	38.200	38.245	0.12	47.800	48.196	0.83	31.300	33.046	5.58	37.800	38.361	1.48																								
453.15	2.521	0.866	2.047	3.206	56.62	33.368	31.865	4.50	12.186	11.124	11.124	11.124	8.71	47.600	46.195	2.95	21.960	20.933	4.68	25.620	24.362	4.91	31.400	30.073	4.23	39.100	38.134	2.47	70.400	68.562	2.61	31.400	32.129	2.32	38.200	38.245	0.12	47.800	48.196	0.83	31.300	33.046	5.58	37.800	38.361	1.48																																																

Tabelle A 8.3: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Methanollösungen: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC-Modell, Parameter aus Tab. A 1.9 und A 1.10)

T	x_M	\bar{m}_{NH_3}	\bar{m}_{CO_2}	$p_{NH_3, exp}$	$p_{NH_3, cal}$	Δp_{NH_3}	$p_{CO_2, exp}$	$p_{CO_2, cal}$	Δp_{CO_2}	$p_{H_2O, exp}$	$p_{H_2O, cal}$	Δp_{H_2O}	p_M, exp	p_M, cal	Δp_M	p_{exp}	p_{cal}	Δp
K	mol%	mol/kg	mol/kg	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%
313.12	0.050	6.034	0.614	0.207	0.211	2.10	0.005	0.001	-	0.066	0.062	5.76	0.023	0.026	12.53	0.301	0.300	0.30
313.11	0.050	6.039	1.418	0.151	0.155	2.83	0.005	0.004	22.65	0.069	0.062	9.76	0.028	0.026	6.80	0.253	0.248	2.17
313.10	0.050	6.043	2.236	0.092	0.099	7.51	0.015	0.015	2.05	0.070	0.062	10.80	0.035	0.026	25.11	0.212	0.203	4.31
313.10	0.050	6.047	3.002	0.046	0.054	18.15	0.065	0.060	7.22	0.071	0.062	12.05	0.035	0.026	24.84	0.217	0.203	6.26
313.12	0.050	6.050	4.076	0.006	0.019	-	0.471	0.457	3.06	0.071	0.062	12.68	0.035	0.027	24.19	0.583	0.564	3.32
313.14	0.049	12.041	1.920	0.433	0.441	1.77	0.012	0.001	-	0.047	0.055	16.57	0.023	0.022	4.62	0.515	0.519	0.72
313.13	0.049	12.055	4.032	0.248	0.258	4.19	0.008	0.008	1.15	0.063	0.056	11.45	0.033	0.022	-	0.352	0.344	2.26
313.11	0.049	12.064	5.530	0.124	0.133	7.18	0.067	0.037	-	0.059	0.056	4.48	0.035	0.022	-	0.285	0.248	12.90
313.12	0.049	12.070	6.870	0.040	0.058	-	0.201	0.199	1.13	0.063	0.056	10.89	0.043	0.021	-	0.346	0.334	3.44
313.10	0.249	6.060	0.640	0.240	0.242	0.98	0.002	0.002	24.30	0.057	0.050	13.05	0.107	0.105	1.43	0.406	0.399	1.75
313.17	0.249	6.068	1.665	0.153	0.160	4.71	0.016	0.011	-	0.058	0.050	14.49	0.119	0.109	8.05	0.346	0.330	4.54
313.12	0.249	6.073	2.453	0.090	0.098	8.93	0.055	0.040	26.48	0.055	0.049	10.07	0.131	0.111	14.94	0.330	0.299	9.28
313.19	0.249	6.078	3.421	0.036	0.042	16.27	0.238	0.244	2.46	0.051	0.049	3.15	0.131	0.114	12.88	0.456	0.449	1.49
313.13	0.246	11.990	3.162	0.368	0.387	5.25	0.008	0.007	16.22	0.055	0.043	21.64	0.110	0.096	13.02	0.542	0.533	1.70
313.10	0.246	11.999	4.300	0.255	0.267	4.86	0.022	0.018	20.32	0.056	0.044	22.08	0.120	0.098	18.60	0.453	0.426	5.91
313.18	0.246	12.011	5.990	0.113	0.111	1.35	0.121	0.118	2.41	0.054	0.044	17.99	0.139	0.101	27.52	0.426	0.375	12.07
313.01	0.499	6.062	1.051	0.256	0.264	3.00	0.014	0.010	27.73	0.051	0.033	-	0.166	0.182	9.94	0.488	0.490	0.36
313.12	0.499	6.073	2.019	0.141	0.167	18.21	0.053	0.045	15.98	0.041	0.033	19.25	0.218	0.191	12.21	0.452	0.436	3.61
313.06	0.499	6.078	2.974	0.082	0.087	5.52	0.214	0.191	10.82	0.047	0.033	-	0.192	0.196	2.15	0.536	0.506	5.55
313.12	0.497	11.956	2.969	0.488	0.506	3.73	0.014	0.012	13.18	0.042	0.027	-	0.167	0.170	1.95	0.711	0.716	0.70
313.06	0.497	11.970	4.249	0.327	0.335	2.32	0.039	0.033	15.52	0.037	0.027	25.80	0.186	0.179	3.89	0.590	0.574	2.75
313.07	0.497	11.981	5.658	0.192	0.170	11.25	0.085	0.138	-	0.038	0.028	27.18	0.200	0.186	6.83	0.515	0.522	1.44
313.15	0.736	6.049	1.980	0.196	0.249	26.96	0.086	0.075	12.29	0.035	0.018	-	0.258	0.248	3.94	0.576	0.590	2.43
353.10	0.050	11.016	0.969	1.758	1.776	1.05	0.014	0.017	24.09	0.368	0.365	0.69	0.136	0.129	4.94	2.276	2.289	0.55
353.08	0.050	11.033	1.867	1.509	1.530	1.38	0.048	0.052	8.00	0.368	0.365	0.85	0.147	0.131	10.67	2.073	2.078	0.23
353.09	0.050	11.051	2.868	1.253	1.234	1.49	0.111	0.125	12.48	0.377	0.366	2.93	0.176	0.133	24.51	1.917	1.858	3.08
353.08	0.050	11.071	3.821	0.976	0.944	3.28	0.268	0.276	3.10	0.397	0.367	7.54	0.199	0.134	-	1.839	1.721	6.41

Tabelle A 8.3: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Methanollösungen: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC-Modell, Parameter aus Tab. A 1.9 und A 1.10) (Fortsetzung)

T	x _M	\bar{m}_{NH_3}	\bar{m}_{CO_2}	p _{NH₃} _{exp}	p _{NH₃} _{cal}	Δp _{NH₃}	p _{CO₂} _{exp}	p _{CO₂} _{cal}	Δp _{CO₂}	p _{H₂O} _{exp}	p _{H₂O} _{cal}	Δp _{H₂O}	p _M _{exp}	p _M _{cal}	Δp _M	p _{exp}	p _{cal}	Δp
K	mol%	mol/kg	mol/kg	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%
353.09	0.050	11.114	6.192	0.370	0.340	8.14	3.139	2.803	10.69	0.465	0.371	20.27	0.258	0.137	-	4.233	3.651	13.74
353.08	0.050	11.119	6.595	0.281	0.275	2.13	4.572	4.316	5.61	0.448	0.372	16.88	0.253	0.139	-	5.554	5.102	8.14
353.07	0.050	11.121	6.813	0.264	0.245	7.13	5.532	5.442	1.62	0.460	0.374	18.75	0.248	0.141	-	6.504	6.202	4.64
353.02	0.050	5.513	0.575	0.778	0.772	0.77	0.019	0.023	19.83	0.396	0.406	2.53	0.159	0.149	6.34	1.352	1.350	0.17
353.06	0.050	5.520	0.971	0.682	0.675	0.97	0.055	0.061	11.68	0.408	0.406	0.49	0.174	0.151	13.31	1.319	1.294	1.92
353.07	0.050	5.529	1.452	0.569	0.556	2.27	0.137	0.147	7.60	0.410	0.406	1.03	0.184	0.153	17.01	1.300	1.262	2.92
353.04	0.050	5.536	1.863	0.462	0.456	1.36	0.269	0.284	5.39	0.417	0.405	2.80	0.195	0.154	21.04	1.344	1.299	3.38
353.07	0.050	5.547	2.423	0.318	0.329	3.56	0.653	0.677	3.62	0.439	0.406	7.52	0.216	0.156	27.76	1.626	1.568	3.57
353.07	0.050	5.553	2.794	0.239	0.255	6.85	1.159	1.216	4.93	0.426	0.406	4.58	0.217	0.158	27.34	2.041	2.036	0.26
353.08	0.050	5.558	3.108	0.173	0.202	16.59	2.016	2.015	0.07	0.430	0.408	5.20	0.231	0.160	-	2.851	2.783	2.37
353.09	0.050	5.560	3.357	0.139	0.165	18.88	2.890	3.025	4.68	0.414	0.409	1.10	0.222	0.162	27.14	3.665	3.762	2.64
353.07	0.050	5.562	3.609	0.105	0.134	27.71	4.155	4.544	9.37	0.406	0.412	1.40	0.217	0.165	24.16	4.883	5.255	7.61
353.08	0.050	5.565	3.858	0.066	0.109	-	5.997	6.752	12.59	0.400	0.416	4.04	0.212	0.169	20.34	6.674	7.447	11.58
353.07	0.248	5.833	1.118	0.686	0.762	11.10	0.195	0.168	13.81	0.361	0.325	10.03	0.657	0.594	9.65	1.899	1.849	2.65
353.07	0.248	5.851	1.981	0.463	0.522	12.72	0.707	0.635	10.17	0.346	0.323	6.56	0.701	0.616	12.14	2.218	2.096	5.49
353.07	0.248	5.865	2.743	0.283	0.335	18.52	1.889	1.933	2.31	0.347	0.324	6.57	0.729	0.639	12.34	3.248	3.231	0.51
353.07	0.248	5.871	3.091	0.211	0.267	26.43	2.941	3.224	9.62	0.340	0.326	4.20	0.747	0.653	12.57	4.239	4.469	5.44
353.11	0.248	5.873	3.364	0.185	0.223	20.40	4.096	4.781	16.73	0.337	0.328	2.53	0.755	0.669	11.45	5.374	6.001	11.67
353.07	0.248	5.876	3.593	0.154	0.192	24.52	5.373	6.526	21.45	0.338	0.331	2.17	0.759	0.683	10.07	6.623	7.731	16.72
353.14	0.249	12.014	1.798	1.926	1.977	2.64	0.089	0.086	3.79	0.338	0.282	16.47	0.622	0.518	16.65	2.976	2.863	3.79
353.09	0.249	12.111	5.735	0.711	0.623	12.39	2.314	2.068	10.61	0.417	0.287	-	0.905	0.581	-	4.347	3.559	18.13
353.07	0.249	12.123	6.262	0.540	0.491	9.02	3.461	3.449	0.34	0.405	0.289	28.72	0.909	0.593	-	5.315	4.822	9.28
353.06	0.249	12.127	6.574	0.472	0.426	9.65	4.388	4.663	6.27	0.390	0.290	25.62	0.900	0.602	-	6.151	5.982	2.75
353.15	0.492	6.103	1.097	0.917	0.980	6.82	0.437	0.413	5.47	0.270	0.232	13.96	1.002	0.960	4.16	2.625	2.585	1.51
353.10	0.492	6.129	2.114	0.603	0.649	7.67	1.551	1.586	2.28	0.268	0.229	14.68	1.047	1.015	3.10	3.470	3.479	0.26
353.17	0.492	6.137	2.505	0.507	0.541	6.69	2.466	2.553	3.55	0.269	0.230	14.65	1.102	1.042	5.49	4.344	4.366	0.50
353.16	0.492	6.143	2.795	0.438	0.470	7.37	3.299	3.565	8.08	0.274	0.230	15.96	1.105	1.061	3.99	5.117	5.327	4.10
353.16	0.492	6.148	3.064	0.380	0.414	9.03	4.276	4.778	11.74	0.271	0.231	14.58	1.111	1.080	2.75	6.038	6.504	7.72

Tabelle A 8.3: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Methanollösungen: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC-Modell, Parameter aus Tab. A 1.9 und A 1.10) (Fortsetzung)

T	x_M	\bar{m}_{NH_3}	\bar{m}_{CO_2}	$p_{NH_3, exp}$	$p_{NH_3, cal}$	Δp_{NH_3}	$p_{CO_2, exp}$	$p_{CO_2, cal}$	Δp_{CO_2}	$p_{H_2O, exp}$	$p_{H_2O, cal}$	Δp_{H_2O}	p_M, exp	p_M, cal	Δp_M	p_{exp}	p_{cal}	Δp
K	mol%	mol/kg	mol/kg	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%
353.16	0.492	6.152	3.249	0.333	0.381	14.53	5.129	5.771	12.52	0.264	0.233	11.85	1.123	1.095	2.49	6.850	7.480	9.20
353.07	0.500	12.010	2.157	2.151	2.193	1.93	0.280	0.274	2.06	0.232	0.190	18.07	0.954	0.870	8.80	3.617	3.527	2.49
353.08	0.499	12.077	4.114	1.319	1.342	1.73	1.097	1.045	4.78	0.226	0.190	16.06	1.066	0.950	10.84	3.709	3.527	4.92
353.05	0.499	12.095	4.730	1.099	1.091	0.69	1.703	1.671	1.90	0.232	0.190	17.97	1.132	0.976	13.78	4.166	3.928	5.70
353.06	0.499	12.107	5.196	0.947	0.922	2.60	2.325	2.433	4.64	0.229	0.191	16.45	1.149	0.997	13.19	4.650	4.544	2.28
353.11	0.499	12.117	5.662	0.840	0.777	7.47	3.268	3.565	9.10	0.281	0.193	-	1.185	1.022	13.78	5.574	5.557	0.30
353.07	0.499	12.125	6.016	0.740	0.684	7.60	4.113	4.694	14.13	0.290	0.194	-	1.186	1.038	12.44	6.330	6.610	4.43
353.12	0.750	5.960	0.512	1.510	1.462	3.18	0.320	0.388	21.14	0.157	0.131	16.36	1.202	1.241	3.27	3.189	3.222	1.04
353.04	0.750	5.971	0.835	1.380	1.340	2.87	0.622	0.725	16.59	0.150	0.129	13.94	1.222	1.254	2.62	3.374	3.449	2.21
353.03	0.750	5.983	1.204	1.239	1.208	2.48	1.108	1.194	7.74	0.166	0.128	23.11	1.177	1.273	8.15	3.689	3.803	3.08
353.04	0.750	6.001	1.655	1.043	1.059	1.54	1.808	1.918	6.09	0.151	0.127	15.95	1.268	1.298	2.36	4.271	4.402	3.07
353.11	0.750	6.016	2.078	0.880	0.935	6.27	2.760	2.798	1.36	0.144	0.127	11.65	1.289	1.324	2.70	5.074	5.184	2.16
353.12	0.750	6.021	2.288	0.821	0.879	7.11	3.333	3.309	0.72	0.139	0.128	8.17	1.296	1.336	3.09	5.590	5.652	1.11
353.09	0.750	6.031	2.635	0.707	0.796	12.57	4.489	4.249	5.35	0.141	0.128	9.05	1.303	1.352	3.80	6.639	6.525	1.71
353.13	0.751	11.770	0.668	3.378	3.420	1.25	0.125	0.175	-	0.155	0.104	-	1.139	1.062	6.73	4.798	4.762	0.75
353.10	0.751	11.801	1.353	3.003	3.074	2.36	0.291	0.372	28.00	0.139	0.101	27.63	1.164	1.092	6.17	4.598	4.639	0.90
353.13	0.751	11.838	2.117	2.567	2.679	4.37	0.523	0.621	18.70	0.140	0.099	29.64	1.204	1.133	5.90	4.435	4.531	2.17
353.03	0.751	11.876	3.063	2.115	2.176	2.90	0.991	1.049	5.83	0.131	0.097	26.18	1.215	1.182	2.75	4.452	4.503	1.16
353.05	0.751	11.903	3.684	1.797	1.868	3.95	1.392	1.491	7.08	0.126	0.097	23.34	1.252	1.218	2.70	4.568	4.673	2.30
353.06	0.751	11.933	4.329	1.460	1.574	7.82	2.019	2.169	7.43	0.124	0.097	21.83	1.304	1.255	3.76	4.907	5.095	3.83
353.02	0.751	11.948	4.789	1.280	1.386	8.30	2.650	2.834	6.96	0.125	0.097	22.19	1.315	1.278	2.83	5.369	5.596	4.22
353.07	0.751	11.961	5.163	1.133	1.256	10.87	3.305	3.527	6.73	0.119	0.098	17.56	1.331	1.299	2.38	5.888	6.181	4.97
353.09	0.751	11.970	5.416	1.024	1.178	15.03	3.849	4.065	5.62	0.120	0.099	17.73	1.339	1.313	1.96	6.333	6.655	5.08
353.10	0.751	11.973	5.603	0.987	1.125	13.93	4.298	4.502	4.75	0.114	0.099	12.96	1.348	1.322	1.92	6.747	7.048	4.46
353.09	0.946	6.027	0.437	1.724	1.907	10.59	0.441	0.467	5.91	0.046	0.033	29.28	1.563	1.462	6.44	3.775	3.869	2.48
353.11	0.946	6.046	0.878	1.517	1.765	16.35	1.057	1.023	3.25	0.052	0.033	-	1.579	1.473	6.70	4.205	4.293	2.10
353.08	0.946	6.057	1.215	1.389	1.660	19.54	1.606	1.488	7.38	0.048	0.033	-	1.590	1.480	6.94	4.632	4.660	0.61
353.08	0.946	6.068	1.522	1.263	1.572	24.48	2.208	1.949	11.72	0.046	0.033	28.78	1.597	1.488	6.85	5.114	5.042	1.42

Tabelle A 8.3: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Methanollösungen: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC-Modell, Parameter aus Tab. A 1.9 und A 1.10) (Fortsetzung)

T	x _M	\bar{m}_{NH_3}	\bar{m}_{CO_2}	p _{NH₃} _{exp}	p _{NH₃} _{cal}	Δp _{NH₃}	p _{CO₂} _{exp}	p _{CO₂} _{cal}	Δp _{CO₂}	p _{H₂O} _{exp}	p _{H₂O} _{cal}	Δp _{H₂O}	p _M _{exp}	p _M _{cal}	Δp _M	p _{exp}	p _{cal}	Δp
K	mol%	mol/kg	mol/kg	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%
353.06	0.946	6.076	1.737	1.167	1.513	29.66	2.698	2.287	15.24	0.045	0.033	26.96	1.598	1.492	6.64	5.508	5.325	3.33
353.14	0.946	6.085	2.032	1.064	1.440	-	3.462	2.796	19.25	0.045	0.033	26.18	1.609	1.504	6.54	6.179	5.773	6.57
353.13	0.946	6.093	2.248	0.985	1.388	-	4.087	3.177	22.27	0.045	0.033	25.76	1.618	1.509	6.75	6.735	6.107	9.33
353.17	0.959	11.957	0.772	4.014	4.279	6.61	0.262	0.372	-	0.048	0.018	-	1.390	1.233	11.26	5.714	5.903	3.30
353.06	0.999	6.307	0.174	2.003	2.245	12.06	0.152	0.168	10.41	0.022	0.001	-	1.617	1.509	6.70	3.794	3.922	3.36
353.03	0.999	6.320	0.494	1.854	2.136	15.20	0.531	0.511	3.81	0.026	0.001	-	1.630	1.512	7.22	4.041	4.159	2.93
353.06	0.999	6.342	1.045	1.599	1.965	22.92	1.327	1.168	11.97	0.022	0.001	-	1.653	1.523	7.87	4.601	4.657	1.22
353.07	0.999	6.358	1.490	1.418	1.837	29.56	2.117	1.757	16.99	0.021	0.001	-	1.663	1.531	7.92	5.219	5.126	1.77
353.12	0.999	6.376	1.903	1.214	1.730	-	3.003	2.358	21.47	0.024	0.001	-	1.674	1.542	7.90	5.915	5.631	4.80
393.23	0.050	6.163	0.771	2.234	2.470	10.56	0.520	0.527	1.39	2.031	1.719	15.36	0.655	0.534	18.50	5.439	5.250	3.47
393.14	0.050	6.174	1.542	1.696	1.961	15.62	1.834	1.979	7.92	2.338	1.719	26.48	0.702	0.551	21.45	6.570	6.210	5.47
393.21	0.050	6.178	2.230	1.484	1.531	3.17	5.026	4.902	2.46	2.230	1.743	21.85	0.841	0.575	-	9.581	8.751	8.66
393.13	0.050	6.184	2.856	1.178	1.189	0.91	10.669	10.400	2.52	2.271	1.780	21.62	0.922	0.607	-	15.041	13.976	7.08
393.16	0.050	6.189	3.234	0.888	1.025	15.40	16.798	16.140	3.92	2.027	1.829	9.77	1.012	0.641	-	20.724	19.635	5.26
393.22	0.050	6.189	3.483	0.899	0.936	4.16	21.734	21.384	1.61	2.231	1.877	15.85	1.023	0.673	-	25.887	24.871	3.93
393.22	0.050	6.191	3.751	0.762	0.858	12.59	28.941	28.495	1.54	2.287	1.941	15.11	0.950	0.718	24.40	32.940	32.012	2.82
393.15	0.050	6.193	3.959	0.697	0.807	15.84	35.305	35.121	0.52	2.336	1.999	14.41	1.099	0.760	-	39.437	38.688	1.90
393.21	0.050	6.193	4.174	0.623	0.771	23.83	46.104	43.462	5.73	2.075	2.086	0.53	0.946	0.821	13.24	49.748	47.140	5.24
393.15	0.050	11.870	1.104	5.182	5.452	5.21	0.331	0.334	0.77	2.233	1.553	-	0.513	0.459	10.58	8.259	7.798	5.58
393.28	0.050	11.877	2.066	4.705	4.751	0.97	0.944	0.924	2.14	2.403	1.558	-	0.563	0.471	16.40	8.615	7.703	10.58
393.18	0.050	11.884	3.092	4.141	3.924	5.25	2.223	2.039	8.28	2.320	1.559	-	0.624	0.479	23.25	9.308	8.001	14.04
393.20	0.050	11.891	4.133	3.680	3.093	15.95	4.570	4.377	4.23	2.109	1.576	25.26	0.741	0.491	-	11.099	9.537	14.07
393.28	0.050	11.905	5.015	2.815	2.455	12.78	9.155	8.551	6.59	2.009	1.610	19.87	0.951	0.510	-	14.931	13.126	12.09
393.20	0.050	11.920	5.794	1.740	1.977	13.63	16.785	15.591	7.11	1.612	1.657	2.76	1.144	0.539	-	21.281	19.764	7.13
393.28	0.050	11.920	6.427	1.804	1.688	6.44	25.528	25.694	0.65	1.926	1.739	9.72	1.054	0.588	-	30.312	29.708	1.99
393.18	0.050	11.919	6.852	1.758	1.541	12.35	34.891	35.279	1.11	1.838	1.813	1.37	0.993	0.636	-	39.480	39.269	0.53
393.26	0.050	11.929	7.222	1.109	1.464	-	46.964	46.118	1.80	1.910	1.913	0.14	0.976	0.699	28.35	50.959	50.194	1.50
393.19	0.248	5.953	0.725	2.491	2.559	2.72	1.401	1.295	7.59	2.043	1.410	-	1.921	2.080	8.25	7.856	7.343	6.53

Tabelle A 8.3: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Methanollösungen: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC-Modell, Parameter aus Tab. A 1.9 und A 1.10) (Fortsetzung)

T	x_M	\bar{m}_{NH_3}	\bar{m}_{CO_2}	$p_{NH_3, exp}$	$p_{NH_3, cal}$	Δp_{NH_3}	$p_{CO_2, exp}$	$p_{CO_2, cal}$	Δp_{CO_2}	$p_{H_2O, exp}$	$p_{H_2O, cal}$	Δp_{H_2O}	p_M, exp	p_M, cal	Δp_M	p_{exp}	p_{cal}	Δp
K	mol%	mol/kg	mol/kg	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%
393.13	0.248	5.958	1.373	2.245	2.125	5.35	4.405	3.978	9.70	1.813	1.414	22.02	2.148	2.180	1.49	10.612	9.696	8.63
393.15	0.248	5.967	2.035	1.831	1.737	5.14	9.499	9.079	4.42	1.787	1.442	19.28	2.344	2.328	0.67	15.461	14.587	5.66
393.16	0.248	5.976	2.604	1.417	1.474	4.00	16.922	16.487	2.57	1.736	1.491	14.09	2.427	2.519	3.80	22.502	21.971	2.36
393.18	0.247	5.982	3.084	1.143	1.314	14.97	25.664	25.561	0.40	1.711	1.558	8.97	2.534	2.754	8.69	31.052	31.187	0.44
393.15	0.247	5.986	3.423	0.974	1.233	26.58	33.654	33.572	0.24	1.723	1.618	6.12	2.672	2.969	11.11	39.023	39.391	0.94
393.23	0.247	5.988	3.690	0.929	1.191	28.25	39.662	40.966	3.29	1.797	1.681	6.45	2.858	3.187	11.52	45.246	47.026	3.93
393.12	0.247	5.991	3.897	0.841	1.160	-	45.963	47.002	2.26	1.810	1.726	4.64	2.998	3.363	12.18	51.613	53.251	3.17
393.12	0.252	11.718	0.984	5.733	5.942	3.64	0.733	0.692	5.57	1.566	1.248	20.33	1.904	1.822	4.29	9.935	9.704	2.33
393.20	0.252	11.726	1.917	5.213	5.173	0.77	1.809	1.866	3.15	1.475	1.248	15.40	2.239	1.900	15.12	10.736	10.187	5.11
393.14	0.252	11.732	2.838	4.793	4.365	8.93	3.508	3.741	6.64	1.435	1.253	12.68	2.455	1.976	19.51	12.190	11.335	7.01
393.13	0.251	11.755	3.752	3.398	3.608	6.17	7.243	7.053	2.62	1.476	1.272	13.79	2.829	2.073	26.71	14.946	14.007	6.28
393.22	0.252	11.759	4.638	3.055	2.961	3.08	12.673	13.086	3.26	1.547	1.314	15.06	2.563	2.225	13.19	19.837	19.586	1.26
393.11	0.251	11.768	5.251	2.520	2.592	2.87	18.812	19.650	4.46	1.544	1.352	12.42	2.687	2.369	11.84	25.563	25.964	1.57
393.12	0.251	11.774	5.751	2.175	2.368	8.86	25.822	27.085	4.89	1.544	1.403	9.16	2.849	2.542	10.78	32.390	33.397	3.11
393.08	0.251	11.778	6.086	2.005	2.248	12.13	31.726	33.118	4.39	1.600	1.443	9.83	3.029	2.686	11.34	38.359	39.494	2.96
393.09	0.251	11.782	6.369	1.777	2.173	22.31	37.328	39.010	4.51	1.594	1.486	6.79	3.084	2.836	8.03	43.782	45.506	3.94
393.14	0.251	11.785	6.651	1.660	2.121	27.80	44.446	45.588	2.57	1.631	1.537	5.74	3.268	3.017	7.69	51.006	52.264	2.47
393.07	0.495	6.057	0.646	3.363	3.140	6.64	3.022	2.794	7.54	0.806	1.039	28.94	3.568	3.359	5.86	10.759	10.332	3.97
393.19	0.495	6.066	1.285	3.081	2.776	9.91	7.486	7.583	1.29	0.740	1.054	-	4.027	3.588	10.90	15.334	15.000	2.18
393.11	0.495	6.086	1.799	2.299	2.528	9.95	13.975	12.644	9.53	0.769	1.070	-	3.793	3.794	0.03	20.837	20.036	3.85
393.12	0.495	6.095	2.235	2.003	2.359	17.78	19.915	17.960	9.82	0.773	1.095	-	3.939	4.014	1.89	26.629	25.428	4.51
393.14	0.495	6.098	2.677	1.895	2.226	17.47	26.174	24.248	7.36	0.721	1.129	-	4.013	4.276	6.56	32.803	31.878	2.82
393.08	0.495	6.109	3.037	1.554	2.141	-	32.484	29.829	8.17	0.820	1.157	-	4.212	4.507	7.00	39.071	37.633	3.68
393.21	0.495	6.113	3.343	1.464	2.100	-	38.756	35.134	9.35	0.869	1.193	-	4.417	4.756	7.67	45.506	43.183	5.10
393.08	0.495	6.122	3.604	1.117	2.056	-	44.406	39.600	10.82	0.809	1.216	-	4.422	4.946	11.86	50.754	47.818	5.79
392.96	0.500	11.602	0.972	7.201	6.855	4.80	2.100	1.780	15.23	0.632	0.887	-	3.090	2.958	4.27	13.023	12.481	4.16
393.32	0.500	11.626	2.021	6.121	5.929	3.13	5.146	4.746	7.76	0.626	0.895	-	3.319	3.178	4.26	15.211	14.748	3.04
393.34	0.500	11.647	2.940	5.250	5.106	2.74	9.307	8.579	7.82	0.610	0.907	-	3.551	3.383	4.74	18.718	17.974	3.97

Tabelle A 8.3: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Methanollösungen: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC-Modell, Parameter aus Tab. A 1.9 und A 1.10) (Fortsetzung)

T	x _M	\bar{m}_{NH_3}	\bar{m}_{CO_2}	p _{NH₃} _{exp}	p _{NH₃} _{cal}	Δp _{NH₃}	p _{CO₂} _{exp}	p _{CO₂} _{cal}	Δp _{CO₂}	p _{H₂O} _{exp}	p _{H₂O} _{cal}	Δp _{H₂O}	p _M _{exp}	p _M _{cal}	Δp _M	p _{exp}	p _{cal}	Δp
K	mol%	mol/kg	mol/kg	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%
393.25	0.500	11.676	3.767	3.997	4.449	11.31	13.322	13.659	2.53	0.599	0.925	-	3.582	3.606	0.67	21.499	22.639	5.30
393.28	0.499	11.690	4.371	3.476	4.062	16.86	18.616	18.830	1.15	0.612	0.950	-	3.853	3.826	0.69	26.557	27.668	4.18
393.29	0.499	11.701	4.969	3.107	3.756	20.90	25.522	25.267	1.00	0.632	0.982	-	4.161	4.093	1.63	33.423	34.098	2.02
393.26	0.499	11.719	5.436	2.402	3.574	-	32.837	31.101	5.29	0.646	1.011	-	4.241	4.336	2.23	40.126	40.022	0.26
393.30	0.499	11.724	5.785	2.299	3.474	-	38.988	36.034	7.58	0.650	1.039	-	4.597	4.552	0.97	46.534	45.099	3.08
393.30	0.499	11.726	6.059	2.309	3.407	-	43.541	40.172	7.74	0.695	1.061	-	4.752	4.738	0.30	51.297	49.378	3.74
393.15	0.751	5.753	0.668	3.757	3.814	1.51	5.467	5.391	1.40	0.434	0.612	-	4.808	4.603	4.26	14.466	14.419	0.32
393.20	0.750	5.758	1.152	3.626	3.667	1.13	9.998	10.151	1.53	0.447	0.623	-	5.110	4.833	5.42	19.181	19.275	0.49
393.05	0.750	5.776	1.620	3.031	3.540	16.79	15.477	14.928	3.55	0.465	0.633	-	5.247	5.038	3.97	24.221	24.139	0.34
392.18	0.750	5.773	2.136	3.196	3.332	4.27	21.262	20.058	5.66	0.469	0.630	-	5.588	5.171	7.47	30.516	29.191	4.34
392.76	0.750	5.782	2.442	2.899	3.352	15.63	27.026	23.787	11.98	0.453	0.655	-	5.738	5.435	5.28	36.117	33.229	8.00
392.99	0.750	5.789	2.673	2.696	3.351	24.29	30.993	26.559	14.31	0.467	0.669	-	5.892	5.609	4.80	40.049	36.188	9.64
393.02	0.750	5.790	3.006	2.695	3.318	23.11	35.647	30.415	14.68	0.471	0.684	-	6.118	5.816	4.93	44.931	40.233	10.46
393.03	0.750	5.793	3.335	2.617	3.292	25.81	40.600	34.260	15.62	0.479	0.699	-	6.345	6.025	5.04	50.041	44.277	11.52
393.10	0.748	11.999	0.778	9.344	9.069	2.95	2.569	2.734	6.44	0.352	0.494	-	4.349	3.843	11.64	16.614	16.139	2.86
393.20	0.748	12.013	1.184	8.641	8.703	0.72	4.496	4.371	2.77	0.360	0.493	-	4.373	3.945	9.78	17.870	17.512	2.00
393.25	0.748	12.024	2.041	8.143	7.889	3.12	8.176	8.124	0.64	0.323	0.495	-	4.583	4.172	8.96	21.224	20.680	2.57
393.22	0.748	12.044	2.807	7.301	7.203	1.34	12.225	12.045	1.47	0.312	0.500	-	4.810	4.397	8.58	24.648	24.145	2.04
393.16	0.748	12.075	3.615	6.056	6.575	8.58	17.670	17.023	3.66	0.334	0.509	-	4.963	4.670	5.90	29.023	28.777	0.85
393.06	0.748	12.089	4.418	5.540	6.055	9.30	24.222	22.996	5.06	0.306	0.523	-	5.263	4.985	5.28	35.331	34.560	2.18
393.14	0.748	12.104	4.961	5.001	5.813	16.23	29.867	27.746	7.10	0.300	0.537	-	5.487	5.252	4.28	40.656	39.348	3.22
393.08	0.748	12.129	5.492	4.045	5.605	-	33.096	32.603	1.49	0.433	0.550	-	5.586	5.512	1.32	43.160	44.271	2.57
392.99	0.748	12.138	6.069	3.830	5.420	-	40.481	38.290	5.41	0.414	0.567	-	5.974	5.821	2.56	50.699	50.098	1.19
393.11	0.947	5.799	0.722	4.929	4.779	3.05	4.878	6.311	29.38	0.138	0.151	9.66	6.595	5.582	15.37	16.541	16.823	1.70
393.11	0.947	5.795	1.424	5.207	4.683	10.06	10.764	12.714	18.11	0.154	0.157	1.84	7.043	5.915	16.02	23.168	23.468	1.30
393.16	0.947	5.801	2.121	4.996	4.636	7.21	17.717	19.087	7.73	0.149	0.163	9.55	7.160	6.267	12.47	30.023	30.153	0.43
393.13	0.947	5.802	2.797	5.033	4.602	8.55	24.543	25.207	2.71	0.151	0.170	12.27	7.473	6.609	11.56	37.201	36.588	1.65
393.16	0.947	5.809	3.482	4.863	4.605	5.31	31.172	31.365	0.62	0.171	0.177	3.30	7.974	6.982	12.44	44.180	43.129	2.38

Tabelle A 8.3: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Methanollösungen: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Elektrolyt-UNIQUAC-Modell, Parameter aus Tab. A 1.9 und A 1.10) (Fortsetzung)

T	x_M	\bar{m}_{NH_3}	\bar{m}_{CO_2}	$p_{NH_3, exp}$	$p_{NH_3, cal}$	Δp_{NH_3}	$p_{CO_2, exp}$	$p_{CO_2, cal}$	Δp_{CO_2}	$p_{H_2O, exp}$	$p_{H_2O, cal}$	Δp_{H_2O}	p_M, exp	p_M, cal	Δp_M	p_{exp}	p_{cal}	Δp
K	mol%	mol/kg	mol/kg	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%
393.12	0.947	5.813	4.174	4.744	4.613	2.76	38.918	37.475	3.71	0.169	0.184	8.77	7.989	7.360	7.87	51.820	49.632	4.22
393.14	0.953	11.661	0.905	9.646	10.644	10.35	3.646	4.755	-	0.096	0.104	8.47	5.844	4.699	19.59	19.232	20.203	5.05
393.15	0.953	11.664	1.764	9.336	10.017	7.29	8.030	9.541	18.81	0.102	0.105	3.11	5.760	4.940	14.24	23.228	24.603	5.92
393.18	0.953	11.687	2.649	8.522	9.433	10.69	11.793	14.751	25.08	0.123	0.107	12.93	6.009	5.224	13.06	26.447	29.515	11.60
393.14	0.953	11.698	3.504	8.291	8.910	7.46	16.609	20.150	21.32	0.130	0.110	15.75	6.518	5.525	15.24	31.548	34.694	9.97
393.04	0.953	11.722	4.295	7.467	8.503	13.87	21.820	25.435	16.57	0.147	0.112	23.77	6.770	5.819	14.04	36.204	39.870	10.13
393.09	1.000	5.774	0.842	4.929	5.025	1.95	5.845	7.264	24.28	0.008	0.000	-	6.581	5.923	9.99	17.363	18.212	4.89
393.20	1.000	5.797	1.635	4.236	4.991	17.82	14.486	14.208	1.92	0.006	0.000	-	6.085	6.318	3.83	24.813	25.517	2.84
393.34	1.000	5.797	2.410	4.100	4.978	21.41	22.571	20.976	7.07	0.006	0.000	-	5.544	6.732	21.43	32.222	32.686	1.44
392.85	0.999	12.111	0.893	10.063	11.622	15.50	3.469	4.629	-	0.000	0.002	-	6.909	4.768	-	20.441	21.022	2.84
392.91	0.999	12.115	1.799	9.777	10.977	12.27	6.377	9.560	-	0.022	0.002	-	6.975	5.018	28.06	23.150	25.557	10.40
392.81	0.999	12.121	2.651	9.210	10.356	12.45	11.820	14.324	21.19	0.016	0.002	-	6.563	5.258	19.88	27.609	29.941	8.45
392.82	0.999	12.127	3.509	8.749	9.824	12.29	17.477	19.481	11.46	0.027	0.002	-	6.255	5.552	11.24	32.508	34.859	7.23
392.92	0.999	12.154	4.133	7.826	9.539	21.89	20.739	23.505	13.34	0.048	0.002	-	6.765	5.802	14.24	35.377	38.848	9.81
392.92	0.999	12.161	4.966	7.649	9.176	19.97	26.186	29.118	11.20	0.047	0.002	-	7.192	6.143	14.59	41.075	44.440	8.19
392.90	0.999	12.182	5.790	6.924	8.914	28.74	32.587	34.924	7.17	0.052	0.003	-	7.571	6.506	14.07	47.134	50.346	6.82
392.97	0.999	12.199	6.590	6.182	8.770	-	39.238	40.914	4.27	0.096	0.003	-	7.472	6.911	7.51	52.988	56.597	6.81

A 9 Systeme Kohlendioxid + Ammoniak + Methanol + Wasser + Natriumsulfat und Ammoniak + Phenol + Wasser: Vergleich zwischen Mess- und Rechenwerten (Pitzer-Modell)

Tabelle A 9.1: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Methanollösungen: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Pitzer-Modell, Parameter aus Tab. A 1.11 bis A 1.13)

T	\bar{m}_M mol/kg	\bar{m}_{NH_3} mol/kg	$p_{NH_3}^{exp}$ bar	$p_{NH_3}^{cal}$ bar	Δp_{NH_3} %	$p_{H_2O}^{exp}$ bar	$p_{H_2O}^{cal}$ bar	Δp_{H_2O} %	p_M^{exp} bar	p_M^{cal} bar	Δp_M %	p^{exp} bar	p^{cal} bar	Δp	
														bar	%
313.16	2.899	0.000	0.000	0.000	0.00	0.055	0.071	29.09	0.049	0.035	28.57	0.105	0.106	0.95	0.95
313.13	2.895	2.020	0.057	0.072	26.32	0.071	0.068	4.23	0.039	0.035	10.26	0.167	0.175	4.79	4.79
313.14	2.896	3.566	0.121	0.131	8.26	0.067	0.066	1.49	0.032	0.035	9.38	0.221	0.232	4.98	4.98
313.15	2.896	4.958	0.175	0.189	8.00	0.065	0.064	1.54	0.031	0.035	12.90	0.271	0.288	6.27	6.27
313.12	2.896	6.591	0.243	0.261	7.41	0.063	0.062	1.59	0.029	0.035	20.69	0.335	0.358	6.87	6.87
313.17	2.863	0.000	0.000	0.000	0.00	0.059	0.071	20.34	0.046	0.035	23.91	0.106	0.105	0.94	0.94
313.17	2.861	6.890	0.250	0.276	10.40	0.068	0.062	8.82	0.029	0.035	20.69	0.348	0.372	6.90	6.90
313.20	2.861	8.455	0.327	0.352	7.65	0.064	0.060	6.25	0.026	0.035	34.62	0.417	0.447	7.19	7.19
313.21	2.861	10.030	0.408	0.434	6.37	0.058	0.058	0.00	0.026	0.035	34.62	0.492	0.528	7.32	7.32
313.16	2.861	11.708	0.499	0.528	5.81	0.053	0.056	5.66	0.025	0.035	40.00	0.578	0.619	7.09	7.09
313.14	2.861	13.133	0.577	0.614	6.41	0.056	0.054	3.57	0.024	0.035	45.83	0.657	0.703	7.00	7.00
353.10	2.901	0.000	0.000	0.000	0.00	0.439	0.453	3.19	0.206	0.188	8.74	0.645	0.641	0.62	0.62
353.06	2.885	1.575	0.216	0.233	7.87	0.424	0.441	4.01	0.190	0.187	1.58	0.831	0.862	3.73	3.73
353.18	2.887	3.051	0.447	0.466	4.25	0.417	0.432	3.60	0.168	0.189	12.50	1.032	1.087	5.33	5.33
353.14	2.887	4.579	0.687	0.717	4.37	0.402	0.420	4.48	0.159	0.189	18.87	1.249	1.326	6.16	6.16
353.03	2.888	6.011	0.921	0.961	4.34	0.392	0.408	4.08	0.146	0.189	29.45	1.462	1.558	6.57	6.57
353.02	2.893	0.000	0.000	0.000	0.00	0.430	0.452	5.12	0.203	0.187	7.88	0.633	0.639	0.95	0.95
353.02	2.878	2.730	0.383	0.413	7.83	0.419	0.432	3.10	0.180	0.187	3.89	0.981	1.032	5.20	5.20
353.06	2.881	5.677	0.856	0.904	5.61	0.401	0.411	2.49	0.150	0.189	26.00	1.407	1.503	6.82	6.82
353.09	2.882	8.287	1.308	1.379	5.43	0.382	0.392	2.62	0.136	0.190	39.71	1.827	1.961	7.33	7.33
353.08	2.883	12.014	2.009	2.126	5.82	0.365	0.365	0.00	0.124	0.191	54.03	2.497	2.682	7.41	7.41
393.12	2.872	0.000	0.000	0.000	0.00	2.004	1.909	4.74	0.646	0.715	10.68	2.650	2.624	0.98	0.98
393.15	2.872	5.042	2.456	2.321	5.50	1.667	1.772	6.30	0.549	0.729	32.79	4.675	4.822	3.14	3.14
393.13	2.872	6.697	3.117	3.139	0.71	1.670	1.726	3.35	0.523	0.732	39.96	5.311	5.597	5.39	5.39
393.24	2.873	0.000	0.000	0.000	0.00	1.990	1.916	3.72	0.644	0.718	11.49	2.635	2.634	0.04	0.04
393.33	2.873	6.514	2.986	3.061	2.51	1.819	1.742	4.23	0.562	0.737	31.14	5.375	5.540	3.07	3.07
393.26	2.873	7.935	3.602	3.780	4.94	1.889	1.700	10.01	0.556	0.738	32.73	6.054	6.218	2.71	2.71
393.26	2.873	10.853	5.065	5.321	5.05	1.905	1.623	14.80	0.542	0.746	37.64	7.532	7.690	2.10	2.10
393.10	2.873	12.915	6.368	6.428	0.94	1.735	1.563	9.91	0.495	0.747	50.91	8.613	8.738	1.45	1.45

Tabelle A 9.2: Löslichkeit von Ammoniak in wässrig-natriumsulfathaltigen Methanolösungen: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Pitzer-Modell, Parameter aus Tab. A 1.11 bis A 1.13)

T	$\bar{m}_{\text{Na}_2\text{SO}_4}$	\bar{m}_{M}	\bar{m}_{NH_3}	$p_{\text{NH}_3, \text{exp}}$	$p_{\text{NH}_3, \text{cal}}$	Δp_{NH_3}	$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{exp}}$	$p_{\text{H}_2\text{O}, \text{cal}}$	$\Delta p_{\text{H}_2\text{O}}$	$p_{\text{M}, \text{exp}}$	$p_{\text{M}, \text{cal}}$	Δp_{M}	p_{exp}	p_{cal}	Δp
K	mol/kg	mol/kg	mol/kg	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%
353.21	0.958	2.898	0.000	0.000	0.000	0.00	0.392	0.439	11.99	0.295	0.189	35.93	0.687	0.628	8.59
353.14	0.958	2.879	1.603	0.273	0.322	17.95	0.428	0.424	0.93	0.230	0.188	18.26	0.931	0.934	0.32
353.14	0.958	2.881	2.719	0.491	0.554	12.83	0.425	0.414	2.59	0.203	0.189	6.90	1.120	1.156	3.21
353.20	0.958	2.882	4.275	0.778	0.888	14.14	0.425	0.401	5.65	0.189	0.190	0.53	1.393	1.479	6.17
353.15	0.958	2.883	4.949	0.912	1.034	13.38	0.418	0.394	5.74	0.181	0.190	4.97	1.513	1.618	6.94
353.10	0.958	2.884	6.482	1.197	1.377	15.04	0.405	0.381	5.93	0.167	0.190	13.77	1.771	1.948	9.99
393.17	1.088	2.842	0.000	0.000	0.000	0.00	1.734	1.841	6.17	0.925	0.712	23.03	2.659	2.552	4.02
393.24	1.089	2.842	1.821	0.509	1.089	-	2.040	1.784	12.55	0.968	0.719	25.72	3.514	3.592	2.22
393.28	1.088	2.842	3.445	1.487	2.090	-	1.957	1.732	11.50	0.876	0.725	17.24	4.325	4.547	5.13
393.33	1.088	2.842	5.161	2.532	3.174	25.36	1.840	1.679	8.75	0.791	0.732	7.46	5.175	5.585	7.92
393.18	1.088	2.842	7.267	3.626	4.514	24.49	1.747	1.606	8.07	0.690	0.735	6.52	6.070	6.855	12.93

Tabelle A 9.3: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Methanollösungen: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Pitzer-Modell, Parameter aus Tab. A 1.11 bis A 1.13)

T	\bar{m}_M	\bar{m}_{NH_3}	\bar{m}_{CO_2}	$P_{NH_3, exp}$	$P_{NH_3, cal}$	Δp_{NH_3}	$P_{CO_2, exp}$	$P_{CO_2, cal}$	Δp_{CO_2}	$P_{H_2O, exp}$	$P_{H_2O, cal}$	Δp_{H_2O}	$P_{M, exp}$	$P_{M, cal}$	Δp_M	p_{exp}	p_{cal}	Δp
K	mol/kg	mol/kg	mol/kg	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%
313.12	2.896	6.594	0.671	0.209	0.181	13.40	0.005	0.000	100.00	0.058	0.062	6.90	0.029	0.046	-	0.301	0.289	3.99
313.11	2.896	6.598	1.549	0.152	0.126	17.11	0.005	0.003	40.00	0.060	0.063	5.00	0.035	0.046	-	0.253	0.237	6.32
313.10	2.895	6.603	2.443	0.093	0.073	21.51	0.015	0.014	6.67	0.061	0.063	3.28	0.043	0.047	9.30	0.211	0.197	6.64
313.10	2.895	6.607	3.280	0.049	0.035	28.57	0.065	0.083	27.69	0.060	0.063	5.00	0.043	0.047	9.30	0.219	0.228	4.11
313.12	2.895	6.611	4.454	0.008	0.015	-	0.471	0.519	10.19	0.060	0.061	1.67	0.043	0.037	13.95	0.583	0.632	8.40
313.12	2.895	6.611	5.068	0.003	0.008	-	0.952	1.364	-	0.056	0.061	8.93	0.042	0.038	9.52	1.058	1.471	-
313.12	2.895	6.611	5.617	0.000	0.004	-	1.443	2.494	-	0.056	0.062	10.71	0.041	0.039	4.88	1.542	2.600	-
313.14	2.895	6.611	6.374	0.000	0.001	-	4.769	8.132	-	0.058	0.068	17.24	0.039	0.043	10.26	4.871	8.243	-
313.12	2.895	6.611	6.479	0.001	0.001	0.00	6.307	10.069	-	0.056	0.068	21.43	0.039	0.044	12.82	6.411	10.182	-
313.14	2.861	13.143	2.096	0.436	0.313	28.21	0.011	0.001	-	0.039	0.056	-	0.027	0.046	-	0.515	0.416	19.22
313.13	2.860	13.159	4.401	0.249	0.166	-	0.008	0.008	0.00	0.055	0.057	3.64	0.041	0.047	14.63	0.352	0.278	21.02
313.11	2.860	13.168	6.037	0.124	0.072	-	0.068	0.057	16.18	0.051	0.057	11.76	0.043	0.048	11.63	0.286	0.234	18.18
313.12	2.859	13.175	7.499	0.043	0.069	-	0.198	0.182	8.08	0.053	0.052	1.89	0.051	0.037	27.45	0.346	0.339	2.02
313.12	2.859	13.175	8.276	0.038	0.056	-	0.227	0.216	4.85	0.054	0.053	1.85	0.049	0.037	24.49	0.369	0.364	1.36
313.12	2.859	13.177	9.792	0.018	0.033	-	0.340	0.357	5.00	0.055	0.056	1.82	0.050	0.039	22.00	0.463	0.485	4.75
313.12	2.859	13.178	11.347	0.002	0.012	-	0.732	0.905	23.63	0.054	0.059	9.26	0.048	0.041	14.58	0.837	1.018	21.62
313.11	2.859	13.178	11.832	0.000	0.008	-	1.453	1.410	2.96	0.053	0.060	13.21	0.046	0.042	8.70	1.642	1.520	7.43
313.12	2.859	13.178	12.313	0.000	0.004	-	3.638	2.495	-	0.054	0.062	14.81	0.045	0.043	4.44	3.760	2.604	-
313.13	2.859	13.178	12.421	0.000	0.004	-	5.893	2.784	-	0.053	0.062	16.98	0.043	0.043	0.00	6.003	2.983	-
313.11	2.859	13.178	12.504	0.000	0.003	-	6.265	3.300	-	0.055	0.063	14.55	0.044	0.044	0.00	6.376	3.410	-
353.02	2.887	6.022	0.628	0.778	0.713	8.35	0.019	0.016	15.79	0.396	0.405	2.27	0.159	0.262	-	1.353	1.397	3.25
353.06	2.886	6.030	1.061	0.682	0.608	10.85	0.055	0.047	14.55	0.409	0.406	0.73	0.174	0.263	-	1.319	1.324	0.38
353.07	2.885	6.038	1.586	0.570	0.485	14.91	0.137	0.127	7.30	0.410	0.406	0.98	0.184	0.265	-	1.303	1.283	1.53
353.04	2.884	6.047	2.035	0.463	0.388	16.20	0.269	0.265	1.49	0.418	0.406	2.87	0.195	0.266	-	1.345	1.325	1.49
353.07	2.883	6.058	2.646	0.318	0.274	13.84	0.653	0.697	6.74	0.439	0.406	7.52	0.216	0.269	24.54	1.624	1.646	1.35
353.07	2.882	6.064	3.051	0.239	0.211	11.72	1.158	1.308	12.95	0.426	0.407	4.46	0.217	0.273	25.81	2.041	2.198	7.69
353.08	2.881	6.069	3.393	0.173	0.167	3.47	2.013	2.213	9.94	0.430	0.407	5.35	0.231	0.278	20.35	2.849	3.065	7.58
353.09	2.882	6.072	3.665	0.139	0.138	0.72	2.886	3.342	15.80	0.414	0.409	1.21	0.222	0.283	27.48	3.665	4.172	13.83

Tabelle A 9.3: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrigen Methanollösungen: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Pitzer-Modell, Parameter aus Tab. A 1.11 bis A 1.13) (Fortsetzung)

T	\bar{m}_M	\bar{m}_{NH_3}	\bar{m}_{CO_2}	$P_{NH_3, exp}$	$P_{NH_3, cal}$	Δp_{NH_3}	$P_{CO_2, exp}$	$P_{CO_2, cal}$	Δp_{CO_2}	$P_{H_2O, exp}$	$P_{H_2O, cal}$	Δp_{H_2O}	$P_{M, exp}$	$P_{M, cal}$	Δp_M	P_{exp}	P_{cal}	Δp
K	mol/kg	mol/kg	mol/kg	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%
353.07	2.882	6.075	3.939	0.105	0.113	7.62	4.151	5.019	20.91	0.406	0.411	1.23	0.217	0.290	-	4.884	5.832	19.41
353.08	2.882	6.078	4.209	0.066	0.093	-	5.997	7.428	23.86	0.400	0.416	4.00	0.212	0.300	-	6.683	8.236	23.24
353.10	2.882	12.031	1.058	1.756	1.474	16.06	0.014	0.010	28.57	0.368	0.369	0.27	0.136	0.265	-	2.273	2.117	6.86
353.08	2.881	12.049	2.040	1.508	1.213	19.56	0.048	0.036	25.00	0.368	0.370	0.54	0.147	0.266	-	2.076	1.885	9.20
353.09	2.879	12.068	3.132	1.252	0.933	25.48	0.111	0.107	3.60	0.376	0.371	1.33	0.176	0.267	-	1.911	1.679	12.14
353.08	2.877	12.088	4.173	0.975	0.683	29.95	0.267	0.282	5.62	0.397	0.372	6.30	0.199	0.270	-	1.839	1.607	12.62
353.08	2.873	12.096	5.034	0.883	0.497	-	0.752	0.648	13.83	0.489	0.372	23.93	0.262	0.273	4.20	2.384	1.791	24.87
353.08	2.872	12.116	5.873	0.617	0.349	-	1.478	1.518	2.71	0.483	0.372	22.98	0.270	0.279	3.33	2.850	2.518	11.65
353.09	2.873	12.134	6.761	0.370	0.232	-	3.136	3.807	21.40	0.465	0.373	19.78	0.258	0.291	12.79	4.232	4.704	11.15
353.08	2.873	12.140	7.199	0.281	0.190	-	4.570	5.935	29.87	0.448	0.375	16.29	0.253	0.301	18.97	5.557	6.802	22.40
353.07	2.873	12.141	7.435	0.264	0.171	-	5.532	7.505	-	0.460	0.377	18.04	0.248	0.308	24.19	6.513	8.361	28.37
393.23	2.872	6.710	0.841	2.592	2.342	9.65	0.466	0.370	20.60	1.806	1.716	4.98	0.579	1.080	-	5.450	5.507	1.05
393.14	2.872	6.724	1.678	2.034	1.786	12.19	1.697	1.562	7.96	2.169	1.717	20.84	0.671	1.092	-	6.576	6.157	6.37
393.22	2.872	6.728	2.417	1.848	1.366	26.08	4.835	4.134	14.50	2.160	1.739	19.49	0.751	1.126	-	9.634	8.364	13.18
393.13	2.872	6.736	3.073	1.506	1.056	29.88	10.512	8.927	15.08	2.238	1.768	21.00	0.816	1.178	-	15.161	12.929	14.72
393.16	2.872	6.744	3.455	1.151	0.913	20.68	16.736	13.714	18.06	2.031	1.807	11.03	0.865	1.234	-	20.964	17.668	15.72
393.23	2.872	6.744	3.702	1.160	0.835	28.02	21.692	18.053	16.78	2.206	1.846	16.32	0.882	1.287	-	26.097	22.022	15.61
393.22	2.872	6.748	3.959	0.978	0.765	21.78	28.879	23.762	17.72	2.296	1.894	17.51	0.855	1.355	-	33.210	27.776	16.36
393.15	2.872	6.752	4.144	0.825	0.720	12.73	35.552	28.754	19.12	2.224	1.934	13.04	0.930	1.414	-	39.814	32.823	17.56
393.22	2.872	6.756	4.323	0.605	0.688	13.72	46.361	34.646	25.27	1.935	1.993	3.00	0.883	1.493	-	49.889	38.820	22.19
393.15	2.873	12.928	1.206	5.586	4.789	14.27	0.275	0.184	-	1.870	1.560	16.58	0.531	1.092	-	8.272	7.626	7.81
393.27	2.873	12.937	2.255	5.157	3.986	22.71	0.799	0.623	22.03	2.071	1.569	24.24	0.589	1.101	-	8.618	7.279	15.54
393.18	2.873	12.946	3.373	4.679	3.163	-	1.938	1.620	16.41	2.088	1.572	24.71	0.611	1.110	-	9.342	7.464	20.10
393.21	2.873	12.950	4.501	4.360	2.425	-	4.166	3.896	6.48	1.937	1.587	18.07	0.644	1.139	-	11.129	9.047	18.71
393.30	2.873	12.969	5.442	3.479	1.909	-	8.784	7.995	8.98	1.916	1.618	15.55	0.782	1.192	-	15.051	12.713	15.53
393.20	2.873	12.992	6.253	2.221	1.544	-	16.563	14.689	11.31	1.588	1.657	4.35	0.964	1.269	-	21.504	19.159	10.90
393.29	2.873	12.991	6.905	2.332	1.325	-	25.233	24.306	3.67	1.933	1.732	10.40	0.909	1.392	-	30.689	28.755	6.30
393.19	2.873	12.991	7.322	2.255	1.214	-	34.692	33.207	4.28	1.828	1.796	1.75	0.831	1.506	-	39.984	37.723	5.65
393.25	2.873	13.005	7.664	1.610	1.156	28.20	46.736	42.961	8.08	1.937	1.881	2.89	0.776	1.647	-	51.359	47.646	7.23

Tabelle A 9.4: Simultane Löslichkeit von Kohlendioxid und Ammoniak in wässrig- natriumsulfathaltigen Methanolösungen: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Pitzer-Modell, Parameter aus Tab. A 1.11 bis A 1.13)

T	$\bar{m}_{Na_2SO_4}$	\bar{m}_M	\bar{m}_{NH_3}	\bar{m}_{CO_2}	$p_{NH_3, exp}$	$p_{NH_3, cal}$	Δp_{NH_3}	$p_{CO_2, exp}$	$p_{CO_2, cal}$	Δp_{CO_2}	$p_{H_2O, exp}$	$p_{H_2O, cal}$	Δp_{H_2O}	$p_{M, exp}$	$p_{M, cal}$	Δp_M	p_{exp}	p_{cal}	Δp
K	mol/kg	mol/kg	mol/kg	mol/kg	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	%
353.11	0.958	2.882	6.501	0.857	0.969	1.097	13.21	0.010	0.009	10.00	0.408	0.382	6.37	0.192	0.190	1.04	1.580	1.679	6.27
353.07	0.958	2.881	6.517	1.586	0.759	0.844	11.20	0.049	0.043	12.24	0.409	0.383	6.36	0.206	0.190	7.77	1.424	1.460	2.53
353.09	0.958	2.879	6.538	2.467	0.504	0.549	8.93	0.207	0.192	7.25	0.417	0.385	7.67	0.228	0.191	16.23	1.356	1.316	2.95
353.09	0.958	2.877	6.561	3.596	0.215	0.250	16.28	1.214	1.300	7.08	0.420	0.385	8.33	0.253	0.195	22.92	2.103	2.130	1.28
353.09	0.958	2.877	6.566	4.077	0.157	0.169	7.64	2.499	2.957	18.33	0.420	0.386	8.10	0.254	0.200	21.26	3.334	3.712	11.34
353.08	0.958	2.877	6.570	4.464	0.108	0.123	13.89	4.456	5.591	25.47	0.415	0.389	6.27	0.255	0.207	18.82	5.240	6.310	20.42
353.11	0.958	2.876	6.573	4.682	0.073	0.104	42.47	6.190	7.903	27.67	0.406	0.393	3.20	0.254	0.213	16.14	6.931	8.613	24.27
393.13	1.088	2.842	7.276	0.669	3.265	3.904	19.57	0.086	0.066	23.26	1.733	1.603	7.50	0.786	0.733	6.74	5.880	6.306	7.24
393.20	1.088	2.842	7.292	1.330	2.708	3.283	21.23	0.384	0.302	21.35	1.777	1.608	9.51	0.856	0.735	14.14	5.735	5.928	3.37
393.18	1.088	2.842	7.311	1.982	2.088	2.662	27.49	1.039	0.845	18.67	1.919	1.611	16.05	0.927	0.737	20.50	5.985	5.855	2.17
393.19	1.088	2.842	7.321	2.651	1.746	2.045	17.12	2.964	2.131	28.10	2.004	1.620	19.16	1.210	0.746	38.35	7.936	6.542	17.57
393.22	1.088	2.842	7.342	3.333	1.014	1.488	46.75	6.598	5.325	19.29	1.976	1.644	16.80	1.274	0.768	39.72	10.898	9.224	15.36
393.29	1.088	2.842	7.350	3.841	0.754	1.141	51.33	11.394	10.737	5.77	1.934	1.687	12.77	1.307	0.806	38.33	15.455	14.370	7.02
393.23	1.088	2.842	7.359	4.282	0.442	0.905	-	18.473	19.850	7.45	1.947	1.754	9.91	1.360	0.868	36.18	22.333	23.377	4.67
393.23	1.089	2.842	7.371	4.654	0.075	0.764	-	27.438	33.699	22.82	2.026	1.871	7.65	1.433	0.973	32.10	31.138	37.307	19.81
393.21	1.089	2.842	7.374	4.946	0.000	0.694	-	38.004	51.719	-	2.167	2.040	5.86	1.509	1.126	25.38	41.918	55.579	32.59
393.29	1.089	2.842	7.376	5.219	0.000	0.676	-	49.223	78.997	-	2.677	2.342	12.51	1.683	1.412	16.10	53.874	83.428	54.86

Tabelle A 9.5: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Phenollösungen: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Pitzer-Modell, Parameter aus Tab. A 1.11, A 1.12, A 1.14)

T	m _{Phenol}	m _{NH₃}	P _{exp,NH₃}	P _{cal,NH₃}	Δp _{NH₃}	P _{exp,H₂O}	P _{cal,H₂O}	Δp _{H₂O}	P _{exp,Ph}	P _{cal,Ph}	P _{exp}	P _{cal}	Δp
K	mol/kg	mol/kg	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	bar	bar	%
313.42	5.999	0.618	0.006	0.010	66.67	0.094	0.071	24.47	0.000	0.003	0.100	0.084	16.00
313.15	5.999	1.733	0.019	0.034	78.95	0.096	0.069	28.13	0.000	0.003	0.115	0.105	8.70
313.07	5.999	3.185	0.043	0.070	62.79	0.095	0.066	30.53	0.000	0.003	0.140	0.139	0.71
313.12	5.999	4.611	0.072	0.109	51.39	0.094	0.064	31.91	0.000	0.003	0.165	0.176	6.67
313.13	5.999	6.009	0.112	0.150	33.93	0.097	0.063	35.05	0.000	0.003	0.205	0.216	5.37
313.07	5.999	7.606	0.164	0.200	21.95	0.097	0.060	38.14	0.000	0.003	0.261	0.263	0.77
313.14	5.999	9.030	0.209	0.249	19.14	0.095	0.059	37.89	0.000	0.003	0.301	0.311	3.32
313.14	5.999	10.476	0.273	0.302	10.62	0.096	0.057	40.63	0.000	0.003	0.366	0.362	1.09
352.87	0.996	1.118	0.107	0.130	21.50	0.480	0.453	5.62	0.032	0.009	0.619	0.592	4.36
352.97	0.996	2.213	0.243	0.279	14.81	0.491	0.447	8.96	0.031	0.008	0.765	0.734	4.05
352.96	0.996	3.316	0.397	0.438	10.33	0.491	0.439	10.59	0.029	0.007	0.916	0.884	3.49
352.97	0.996	4.401	0.561	0.603	7.49	0.495	0.431	12.93	0.028	0.006	1.084	1.040	4.06
352.97	0.996	5.758	0.775	0.820	5.81	0.496	0.421	15.12	0.028	0.006	1.299	1.247	4.00
352.96	1.006	5.776	0.770	0.822	6.75	0.498	0.421	15.46	0.028	0.006	1.296	1.248	3.70
352.96	1.006	6.930	0.978	1.015	3.78	0.492	0.412	16.26	0.027	0.005	1.500	1.432	4.53
352.95	1.006	10.763	1.762	1.715	2.67	0.496	0.384	22.58	0.026	0.004	2.285	2.103	7.96
353.05	2.009	1.347	0.121	0.146	20.66	0.510	0.449	11.96	0.032	0.016	0.664	0.610	8.13
353.06	2.009	2.901	0.318	0.346	8.81	0.515	0.438	14.95	0.031	0.014	0.865	0.799	7.63
353.13	2.009	4.472	0.542	0.569	4.98	0.534	0.428	19.85	0.030	0.013	1.106	1.010	8.68
353.17	2.009	6.034	0.790	0.807	2.15	0.547	0.418	23.58	0.030	0.011	1.367	1.237	9.51
353.09	6.012	1.538	0.090	0.140	55.56	0.520	0.440	15.38	0.033	0.024	0.643	0.603	6.22
353.10	6.012	3.050	0.218	0.304	39.45	0.514	0.430	16.34	0.032	0.022	0.764	0.757	0.92
353.08	6.012	4.476	0.362	0.472	30.39	0.504	0.420	16.67	0.031	0.021	0.895	0.914	2.12
353.12	6.012	5.870	0.506	0.648	28.06	0.523	0.412	21.22	0.031	0.020	1.066	1.080	1.31
353.13	6.012	7.461	0.704	0.861	22.30	0.532	0.402	24.44	0.031	0.019	1.266	1.282	1.26
353.13	6.013	9.053	0.937	1.089	16.22	0.531	0.391	26.37	0.030	0.018	1.498	1.498	0.00
353.13	6.013	10.501	1.147	1.307	13.95	0.542	0.382	29.52	0.030	0.018	1.719	1.707	0.70

Tabelle A 9.5: Löslichkeit von Ammoniak in wässrigen Phenollösungen: Vergleich von Mess- und Rechenwerten (Pitzer-Modell, Parameter aus Tab. A 1.11, A 1.12, A 1.14) (Fortsetzung)

T	m _{Phenol}	m _{NH₃}	p _{exp,NH₃}	p _{cal,NH₃}	Δp _{NH₃}	p _{exp,H₂O}	p _{cal,H₂O}	Δp _{H₂O}	p _{exp,Ph}	p _{cal,Ph}	p _{exp}	p _{cal}	Δp
K	mol/kg	mol/kg	bar	bar	%	bar	bar	%	bar	bar	bar	bar	%
393.16	2.021	1.437	0.483	0.502	3.93	2.017	1.894	6.10	0.051	0.077	2.552	2.472	3.13
393.12	2.021	2.911	1.075	1.070	0.47	1.948	1.855	4.77	0.050	0.069	3.072	2.994	2.54
393.14	2.021	4.556	1.800	1.741	3.28	1.874	1.815	3.15	0.047	0.062	3.723	3.618	2.82
393.09	2.021	5.951	2.472	2.332	5.66	1.792	1.777	0.84	0.047	0.057	4.313	4.166	3.41
393.10	2.021	7.362	3.120	2.953	5.35	1.779	1.743	2.02	0.045	0.052	4.944	4.747	3.98
393.14	2.021	8.943	3.898	3.674	5.75	1.773	1.706	3.78	0.037	0.047	5.715	5.427	5.04
393.22	2.022	10.424	4.504	4.374	2.89	1.923	1.675	12.90	0.039	0.043	6.475	6.092	5.92
393.30	5.994	1.504	0.386	0.404	4.66	1.922	1.853	3.59	0.052	0.128	2.361	2.385	1.02
393.22	5.996	3.035	0.719	0.860	19.61	1.952	1.820	6.76	0.051	0.117	2.734	2.797	2.30
393.22	5.996	4.475	1.300	1.313	1.00	1.761	1.794	1.87	0.049	0.107	3.116	3.214	3.15
393.14	5.996	6.014	1.724	1.815	5.28	1.787	1.761	1.45	0.048	0.098	3.565	3.674	3.06
393.14	5.997	7.514	2.176	2.325	6.85	1.820	1.733	4.78	0.046	0.090	4.047	4.148	2.50
393.14	5.998	8.986	2.680	2.842	6.04	1.826	1.706	6.57	0.043	0.082	4.558	4.631	1.60
393.16	5.999	10.875	3.412	3.527	3.37	1.789	1.673	6.48	0.042	0.074	5.245	5.274	0.55

A 10 Löslichkeitsgrenze von Salzen in wässrigen Methanollösungen

Für die Herstellung der wässrig-salzhaltigen Methanollösungen war es notwendig, die Löslichkeitsgrenzen der eingesetzten und entstehenden Salze zu ermitteln. Für reines Wasser sind in der Literatur (Linke 1958) die Löslichkeitsgrenzen für alle interessierenden Salze bekannt. Für das Lösungsmittelgemisch Methanol + Wasser sind nur für einige wenige Salze, wie Natriumchlorid, Natriumcarbonat, Natriumhydrogencarbonat und Ammoniumchlorid, Löslichkeitsgrenzen in der Literatur bekannt. Es wurden Untersuchungen mit zwei Methoden durchgeführt: einmal wurde Salz so lange zu thermostatisierten, wässrigen Methanollösungen eingewogen bis visuell das Überschreiten der Löslichkeitsgrenze beobachtet wurde. Zum anderen wurde eine übersättigte Salzlösung in thermostatisierten Gefäßen hergestellt und Proben aus der gesättigten flüssigen Phase mittels Titration analysiert. In den Tabellen A 10.1 und A 10.2 sind die experimentellen Ergebnisse zusammengestellt. Die Unsicherheiten werden beim visuellen Verfahren zu ± 2 Massenprozent und bei der Titration auf ± 3 Massenprozent abgeschätzt.

Tabelle A 10.1: Löslichkeitsgrenzen verschiedener Salze in wässrigen Methanollösungen: experimentelle Ergebnisse mit visuellen Verfahren

g/ 100g Lösungsmittelgemisch		$x_{\text{CH}_3\text{OH}}$ / mol%			
Salz	T/°C	0*	0.25	0.5	1
NaCl	20	35.8	15.7	6.5	1.4
	40	36.3	19.4	8.2	1.3
NH ₄ HCO ₃	20	21.7	6.2	5.7	2.1
	40	36.6	8.2	7.1	5.2
(NH ₄) ₂ SO ₄	20	75.0	12.1	1.6	0.0
	40	80.8	16.0	1.9	0.0
NH ₄ Cl	20	37.2	21.4	21.4	2.9
	40	45.8	30.8	15.6	3.5
Na ₂ CO ₃	20	22.1	3.6	0.5	0.1
	40	48.8	5.5	0.7	0.0
NaHCO ₃	20	9.6	2.7	1.1	0.5
	40	12.7	5.3	2.1	0.7
Na ₂ SO ₄	20	19.0	2.2	0.2	0.0
	40	48.1	2.7	0.2	0.0

*Die Löslichkeitsgrenzen in reinem Wasser wurden der Literatur (Linke 1958) entnommen.

Tabelle A 10.2: Löslichkeitsgrenzen verschiedener Salze in wässrigen Methanollösungen:
experimentelle Ergebnisse aus Titrationsversuchen

$x_{\text{CH}_3\text{OH}}/\text{mol}\%$	g/ 100g Lösungsmittelgemisch				
	20 °C			40 °C	
	NH_4HCO_3	NaHCO_3	$\text{NH}_2\text{COONH}_4$	NH_4HCO_3	NaHCO_3
0.00	21.8	8.2	397.6	-	14.4
0.10	15.9	4.4	256.3	12.1	7.8
0.25	9.2	2.1	83.7	-	4.2
0.40	7.9	1.3	61.0	9.9	2.9
0.50	6.0	0.6	35.1	-	1.3
0.60	4.7	-	33.6	8.1	1.2
0.75	3.0	0.3	23.2	6.4	0.5
0.90	3.1	0.4	22.0	8.3	0.7
1.00	2.8	0.2	17.4	7.7	0.5

Anhang B

B 1 Verzeichnis der Studienarbeiter

Alexander Danek (2000): Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak und Kohlendioxid in organisch-wässrigen Lösungsmittelgemischen

Albrecht Anger (2001): Untersuchungen zur Löslichkeit von Gasen in organisch-wässrigen Lösungen

Steffen Seitz (2001): Untersuchungen zur Löslichkeit von Gasen in wässrigen Lösungen von Methanol

Michael Albrecht (2002): Untersuchungen zur Löslichkeit von Ammoniak und Kohlendioxid in organisch-wässrigen, salzhaltigen Lösungen

Lebenslauf

Geburtsdatum: 19. September 1971

Geburtsort: Saalfeld

Familienstand: verheiratet

Staatsangehörigkeit: deutsch

Schul- und Ausbildung

1978-1988 16. Polytechnische Oberschule in Gera

Abschluss: Mittlere Reife

1988-1991 Berufsschule der SDAG Wismut / Gewerbliche Schule Schlema

Abschluss: Facharbeiter für Mess-, Steuer- und Regeltechnik, Allgemeine Hochschulreife

Wehrdienst

1991-1992 Grundwehrdienst bei der Bundeswehr in Hamburg, Gotha und Erfurt

Studium

1992-1997 Studium im Fach Maschinenbau und Verfahrenstechnik an der Universität Kaiserslautern mit der Vertiefungsrichtung allgemeine Verfahrenstechnik

Abschluss: Diplomingenieur

Berufliche Tätigkeit

1998-2003 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik bei Prof. Dr.-Ing. G. Maurer

Ab Juli 2003 Sachverständiger bei TÜV Energie- und Systemtechnik GmbH Baden-Württemberg in Mannheim

