

**Abschlußbericht
für das Forschungsvorhaben**

"Aufbau einer Datenfaktenbank für Reinstoffdaten"

BMBF - FKZ 08 G35 27 9

Prof. Dr. J. Gmehling
Lehrstuhl für Technische Chemie
Universität Oldenburg
Postfach 2503, 26111 Oldenburg
Telefon: 0441/7983831
Telefax: 0441/7983330
Email: gmehling@tech.chem.uni-oldenburg.de

Oldenburg, 15. 12. 1998

Abschlußbericht

Aufbau einer Datenfaktenbank für Reinstoffdaten

	30.7.98
Gmehling, Jürgen	15.12.98
Prof. Dr. J. Gmehling Lehrstuhl für Technische Chemie Universität Oldenburg Postfach 2503 26111 Oldenburg	08 G35 27 40 10 6 22

Zum Ende des Projekts "Datenfaktenbank Reinstoffdaten" stehen ca. 90 000 Datensätze mit zusammen mehr als 570 000 Datenreihen aus ca. 10 000 Referenzen in computergerechter Form gespeichert zur Verfügung. Die Arbeiten wurden in Zusammenarbeit mit Gruppen in Prag, Berlin, Tallinn und Minsk durchgeführt.

Zusätzlich zur Sammlung der Daten wurden verschiedene Korrelationsmethoden implementiert und zum Test der Daten eingesetzt. Mehr als 8000 Parametersätze für verschiedene Gleichungen und Methoden wurden angepaßt.

Durch die konsequente Erfassung der Molekülstrukturen und die Entwicklung von Programmen zur Eingabe, Speicherung und Zerlegung dieser Strukturen stehen erstmals eine Vielzahl von Gruppenbeitragsmethoden aus der Literatur auch dem ungeübten Benutzer zur Verfügung.

Durch die einfache Möglichkeit der Datenabschätzung ohne langwierige und fehlerbehaftete manuelle Strukturzerlegung wurde ein umfangreicher Test der publizierten Methoden möglich. Dieser Test diente vordringlich der Überprüfung der eingegebenen Daten.

Unter Verwendung der automatischen Strukturzerlegung wurden Programme zur Entwicklung neuer Gruppenbeitragsmethoden entwickelt und erste Abschätzmethoden fertiggestellt.

Die Arbeiten werden mit privatwirtschaftlicher Förderung fortgesetzt.

Datenfaktenbank, Reinstoffdaten, Gruppenbeitragsmethoden, Molekülstrukturen,
Stoffdatenkorrelation

Final Report

Development of a Factual Data Base for Pure Component Properties

Gmehling, Jürgen	08 G35 27
	15.12.98
Prof. Dr. J. Gmehling Lehrstuhl für Technische Chemie Universität Oldenburg Postfach 2503 26111 Oldenburg	40
	10
	6
	22

With the end of the pure component property data base project approx. 90 000 data sets containing more than 570 000 table lines from approx. 10 000 references are available in electronic form. The work was performed in cooperation with groups in Prague, Berlin, Tallinn and Minsk.

In addition to collecting experimental data different correlation methods were implemented and used to test the correctness and consistency of the data. More than 8000 parameter sets were regressed for different correlation equations and physical properties.

By storing the molecular structures of more than 12000 components and developing programs for input, storage and fragmentation of these structures a large number of group contribution methods from literature are readily available also for the untrained user.

With this simple possibility to estimate properties using group contribution methods and the availability of a large database, a broad test of published group contribution methods can be performed. These methods were used for an extensive test of the stored data.

Programs for the development of group contribution methods were implemented and the first predictive methods were developed.

The work will be continued with the help of private funding.

Factual Database, Pure Component Properties, Group Contribution Methods,
Molecular Structure, Physical Property Correlation

INHALTSVERZEICHNIS

1. FORMALANGABEN	3
1.1 Förderkennzeichen	3
1.2 Thema des Vorhabens	3
1.3 Zuwendungsempfänger	3
1.4 Ausführende Stelle	3
1.5 Projektleiter	3
1.6 Bewilligungszeitraum (einschließlich Verlängerung)	3
1.7 Berichtszeitraum (einschließlich Verlängerung)	3
2. KURZDARSTELLUNG	4
2.1 Aufgabenstellung	4
2.2 Voraussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde	5
2.3 Planung und Ablauf des Vorhabens	5
2.4 Wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde	5
2.5 Zusammenarbeit	6
3. EINGEHENDE DARSTELLUNG	7
3.1 Ergebnisse	7
3.1.1 Detaillierte Darstellung des Inhalts der Datenbank und der Arbeitsleistung der einzelnen Kooperationspartner und Auftragnehmer	8
3.1.1.1 Stand der Arbeiten in Oldenburg	9
3.1.1.2 Stand der Arbeiten in Prag	10
3.1.1.3 Stand der Arbeiten in Berlin	11
3.1.1.4 Stand der Arbeiten in Tallinn	12
3.1.1.5 Stand der Arbeiten in Minsk	13
3.1.1.6 Beitrag der DDBST GmbH	14
3.1.2 Datenbankstruktur	14
3.1.3 Inhalt der Datenbank	14
3.1.4 Test und Korrelation der Daten	14
3.1.4.1 Test und Korrelation der Sättigungsdampfdrücke	15
3.1.4.2 Test und Korrelation der Viskositätsdaten	16
3.1.4.3 Test und Korrelation der kritischen Daten	17
3.1.4.4 Test und Korrelation der Flüssigdichten	19
3.1.4.5 Test und Korrelation der Wärmekapazitäten	21
3.1.4.6 Test und Korrelation der Entropien, Enthalpien, ...	23
3.1.4.7 Test und Korrelation der thermodynamischen Bildungsgrößen	24
3.1.4.8 Test und Korrelation der Wärmeleitfähigkeiten	25
3.1.4.9 Test und Korrelation der Oberflächenspannungen	26
3.1.5 Methoden und Programme zur Strukturverarbeitung	27
3.1.7 Entwicklung eigener Abschätzmethode	30

3.1.7.1	Abschätzung von Normalsiedepunkten nach Cordes und Rarey	30
3.1.7.2	Abschätzung von Flüssigkeitswärmekapazitäten nach Becker und Aufderhaar	32
3.2	Nutzen der Datenbank und der erstellten Programme	35
3.3	Fortschritt bei anderen Stellen	36
3.4	Erfolge und geplante Veröffentlichungen	36
4.	KURZGEFAßTER ERFOLGSKONTROLLBERICHT	37
4.1	Beitrag des Ergebnisses zu den förderpolitischen Zielen des Förderprogramms	37
4.2	Wissenschaftlicher Erfolg des Vorhabens	37
4.2.1	Nebenergebnisse und Erfahrungen	38
4.3	Einhaltung des Finanzierungs- und Zeitplans	38
4.4	Verwertbarkeit der Ergebnisse	38
4.5	Arbeiten, die zu keiner Lösung führten	39
5.	KURZFASSUNG DES SCHLUßBERICHTS	39
6.	ANLAGE	

Abschlußbericht
für das Forschungsvorhaben
"Aufbau einer Datenfaktenbank für Reinstoffdaten"

1. Formalangaben

1.1 Förderkennzeichen

FKZ 08 G35 27 9

1.2 Thema des Vorhabens

Aufbau einer Datenfaktenbank Reinstoffdaten

1.3 Zuwendungsempfänger

Lehrstuhl für Technische Chemie
Universität Oldenburg
Postfach 2503, 26111 Oldenburg
Telefon: 0441/7983831
Telefax: 0441/7983330

1.4 Ausführende Stelle

Lehrstuhl Technische Chemie

1.5 Projektleiter

Prof. Dr. Jürgen Gmehling

1.6 Bewilligungszeitraum (einschließlich Verlängerung)

1. 7. 1995 - 31. 7. 1998

1.7 Berichtszeitraum (einschließlich Verlängerung)

1. 7. 1995 - 31. 7. 1998

2. Kurzdarstellung

2.1 Aufgabenstellung

Reinstoffdaten sind in allen Bereichen des Chemieingenieurwesens für die Auslegung der verschiedensten Anlagen sowie für die Beurteilung vieler Problemstellungen in Zusammenhang mit den verschiedenen Chemikalien von besonderer Bedeutung. Zuverlässige Reinstoffdaten stellen weiterhin die Grundvoraussetzung bei der Darstellung von Gemischeigenschaften dar.

Im Zuge zunehmender Bedeutung von Spezialchemikalien, der Entwicklung neuer Technologien und der Bearbeitung von Umweltschutzfragestellungen werden immer häufiger Informationen über Komponenten benötigt, für die bisher nur wenig oder keine experimentellen Daten vorliegen. Messungen sind dabei in den meisten Fällen zu zeitaufwendig oder teuer, in vielen Fällen auch nur schwer durchzuführen, da viele Stoffe nicht schnell oder hinreichend rein verfügbar oder besonders giftig bzw. krebserregend sind bzw. sich im Verlauf der Messung zersetzen.

Die heute verfügbaren Sammlungen für Datenkorrelationen (ESDU, PPDS, DIPPR, DETHERM, INFO THERM, TRC etc.) beschränken sich weitgehend auf die Erfassung von einigen hundert bis tausend häufig verwendeten Chemikalien und beinhalten nicht oder nur in geringem Maße experimentelle Daten. Weiterhin wurde in diesen Datensammlungen die russische, ostasiatische, ... Literatur zum Teil vollends vernachlässigt und bei der Anpassung der Korrelationsparameter nicht sorgfältig genug gearbeitet.

Nachdem im Vorgängerprojekt (08 G35 26 8) eine umfangreiche Datenbank aufgebaut wurde, sollte diese nun in diesem Projekt weiter vervollständigt werden (Literaturbeschaffung, Übersetzung, Auswertung, Dateneingabe). Dabei sollten die eingegebenen Daten mit Hilfe verschiedener Methoden auf Richtigkeit und innere Konsistenz überprüft werden.

Nach dem Aufbau der Datenbank sollen an die gespeicherten Reinstoffdaten mit Hilfe sinnvoller thermodynamischer Modelle und Verwendung des benötigten mathematischen Rüstzeugs Parameter angepaßt werden, so daß zuverlässige Interpolationen und Extrapolationen durchgeführt werden können. Bei der Anpassung soll dabei insbesondere auf eine konsistente Darstellung Wert gelegt werden.

In der Praxis besteht aus diesen Gründen ein großer Bedarf an einer möglichst vollständigen Datensammlung experimenteller Reinstoffdaten sowie an einem Programmpaket, mit Hilfe dessen Berechnungen unter Verwendung der verschiedenen Methoden leicht durchgeführt werden können. Dabei wird die Information über die Molekülstruktur direkt aus einer geeigneten Kodierung übernommen, welche entweder in einer Datenbank vorliegt oder in einfacher Weise durch grafische Eingabe der Strukturformel erhalten werden kann. Es sollten Modelle zur Berechnung von Reinstoffdaten aus Molekülstrukturen mit Hilfe der in der ersten Projekthälfte erstellten Programme bereitgestellt werden.

Die erstellten Datenbanken und Abschätzmethoden sollten unter einer modernen Oberfläche (Windows) unter Berücksichtigung der Qualitätsabschätzung verbunden werden.

Ziel des Projektes war es damit, ein System zu entwickeln, welches die weltweit verfügbaren experimentellen Daten mit von Fachleuten erarbeiteten Korrelationen und verschiedensten Methoden der Stoffdatenabschätzung verbindet und den Anwendern online oder als Inhouse-Version zur Verfügung gestellt werden kann.