

Karsten Müller

# Zielführende Weiterentwicklung von Energietechnologien

Nutzung von Stoffdatenscreening zur  
Optimierung von thermochemischen  
Prozessen



Springer Vieweg

---

# Zielführende Weiterentwicklung von Energietechnologien

---

Karsten Müller

# Zielführende Weiterentwicklung von Energietechnologien

Nutzung von Stoffdatenscreening zur  
Optimierung von thermochemischen  
Prozessen

 Springer Vieweg

Karsten Müller  
Lehrstuhl für Thermische  
Verfahrenstechnik  
Friedrich-Alexander-Universität  
Erlangen-Nürnberg  
Erlangen, Deutschland

Habilitation Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen, Deutschland,  
2018

ISBN 978-3-658-23598-7      ISBN 978-3-658-23599-4 (eBook)  
<https://doi.org/10.1007/978-3-658-23599-4>

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

Springer Vieweg

© Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH, ein Teil von Springer Nature 2018

Das Werk einschließlich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung, die nicht ausdrücklich vom Urheberrechtsgesetz zugelassen ist, bedarf der vorherigen Zustimmung des Verlags. Das gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Bearbeitungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen.

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in diesem Werk berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, dass solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Der Verlag, die Autoren und die Herausgeber gehen davon aus, dass die Angaben und Informationen in diesem Werk zum Zeitpunkt der Veröffentlichung vollständig und korrekt sind. Weder der Verlag noch die Autoren oder die Herausgeber übernehmen, ausdrücklich oder implizit, Gewähr für den Inhalt des Werkes, etwaige Fehler oder Äußerungen. Der Verlag bleibt im Hinblick auf geografische Zuordnungen und Gebietsbezeichnungen in veröffentlichten Karten und Institutionsadressen neutral.

Springer Vieweg ist ein Imprint der eingetragenen Gesellschaft Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH und ist ein Teil von Springer Nature

Die Anschrift der Gesellschaft ist: Abraham-Lincoln-Str. 46, 65189 Wiesbaden, Germany

## Danksagungen

Mein Dank gebührt an erster Stelle Prof. Wolfgang Arlt. Dieser Dank betrifft nicht nur das Vertrauen, das er in mich gesetzt hat, als er mir die Leitung der Arbeitsgruppe Energie übertrug, sondern auch die wissenschaftlichen Freiräume, die er mir überließ. Die Möglichkeiten, die er mir während meiner ganzen Zeit an seinem Lehrstuhl eingeräumt hat, gehen weit über das übliche Maß hinaus. Diese Arbeit und die darin enthaltenen Ergebnisse wären niemals möglich gewesen ohne die mehr als großzügige Bereitstellung nicht nur von personellen und finanziellen Mitteln, sondern auch von Rat und Anregung.

Meinen herzlichen Dank möchte ich meinen Fachmentoren Prof. Jürgen Karl und Prof. Stefan Will aussprechen. Sie haben beide meine Arbeit durch vielfältige Anregungen bereichert und Anstöße für neue Forschungsarbeiten gegeben. Darüber hinaus möchte ich mich bei Prof. Stephan Kabelac und Prof. Robert Schlögl bedanken, die als externe Gutachter meine Habilitationsschrift geprüft haben.

Besonderer Dank gebührt den Doktoranden, die ich in meiner Arbeitsgruppe begleiten durfte: Patrick Adametz, Rabya Aslam, Andrea Baumgärtner, Michael Beck, André Fikrt, Armin Fischer, Axel Haupt, Christoph Krieger, Tobias Kohler, Benjamin Müller, Jonas Obermeier, Daniel Siebert und Katharina Stark. Ohne ihren Einsatz wäre diese Arbeit niemals möglich gewesen. Auch allen anderen (ehemaligen und aktiven) Mitgliedern des Lehrstuhls für Thermische Verfahrenstechnik sei an dieser Stelle für viele kleine und große Beiträge, Hilfen und einfach eine gute Zeit gedankt.

Ein eigener Dank soll allen Studenten zukommen, deren Abschlussarbeiten ich während meiner Zeit als Habilitand betreuen durfte: Johannes Albert, Kevin Busch, Pia Herrmann, Moritz Hafner, Lars Hübner, Jorge Luis Juárez Peña, Steffen Lauterbach, Christoph Kliemann, Julian Klier, Guorui Ren, Timo Rüde, Felix Uhrig, Tobias Weidlich und Martin Westermeyer. Die Betreuung dieser Arbeiten hat mir nicht nur viel Freude gemacht, sondern hat auch viele wertvolle Ergebnisse hervorgebracht.

Nicht vergessen will ich an dieser Stelle meine Kooperationspartner an der Universität Erlangen, an anderen Forschungseinrichtungen und in der Industrie. Ganz besonders möchte ich in diesem Zusammenhang Prof. Peter Wasserscheid hervorheben. Die Zusammenarbeit mit ihm in zahllosen Projekten war stets eine Bereicherung. Allen Menschen, die mir in meiner wissenschaftlichen Laufbahn begegnet sind, mit denen ich kooperiert habe, die mich gefördert haben, von denen ich Dinge gelernt habe, denen ich etwas beibringen durfte oder mit denen ich einfach nur eine gute Zeit hatte, will ich meinen herzlichen Dank für alles sagen.

## **Vorwort**

Die chemische Thermodynamik kann essentiell zum Verständnis von Prozessen beitragen. Dabei erlaubt sie es nicht nur, Zusammenhänge in komplexen Systemen zu verstehen, sondern (und das ist vielleicht ihre größte Stärke) sie ermöglicht es, Aussagen über Prozesse zu machen, die noch gar nicht realisiert wurden. Das vorliegende Buch versucht zu illustrieren, wie sie eingesetzt werden kann, um Prozessentwicklung effizient und zielgerichtet durchzuführen. Es entstand im Rahmen meiner Habilitation als Leiter der Arbeitsgruppe Energie des Lehrstuhls für Thermische Verfahrenstechnik der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg.

Neben der Beschreibung von Ansätzen versucht das Buch vor allem anhand von Beispielen zu demonstrieren, wie bei der Entwicklung von Prozessen vorgegangen werden kann. Der Schwerpunkt liegt dabei auf Energieprozessen, mit einem besonderen Fokus auf der Speicherung von Energie. Ein großer Teil der beschriebenen Methoden lässt sich analog auf andere Anwendungen übertragen. Das Buch soll eine Hilfestellung geben, um Forschung und Entwicklung von Prozessen, bei denen chemische Stoffe eine Rolle spielen, sinnvoll voranzutreiben.

Karsten Müller, Juli 2018

## Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung .....	1
1.1	Kontext .....	1
1.2	Zielsetzung .....	2
2	Grundlagen .....	7
2.1	Wirkungsgrade und Energiedichte .....	7
2.2	Identifikation von Arbeitsstoffen .....	10
2.3	Nicht-stoffliche Verbesserungen an Energieprozessen.....	13
3	Eigenschaften von Arbeitsstoffen.....	17
3.1	Typen von Vorhersagemethoden .....	17
3.2	Entwicklung von Vorhersagemethoden .....	21
3.2.1	Auswahl und Aufteilung der Daten.....	22
3.2.2	Aufstellung des Modells.....	24
3.2.3	Anpassung der Parameter und Validierung des Modells .....	26
3.3	Beispiele .....	31
3.3.1	Wärmekapazität .....	31
3.3.2	Mischungviskosität .....	36
4	Identifikation von Potentialen .....	41
4.1	Potential der einzelnen Parameter .....	42
4.1.1	Beispiel 1: Thermische Energiespeicherung durch Adsorption .....	45
4.1.2	Beispiel 2: Liquid Organic Hydrogen Carrier .....	49
4.1.3	Beispiel 3: Absorptionswärmepumpe.....	51
4.2	Berücksichtigung von Transportgrößen .....	53
4.3	Abhängigkeiten zwischen Stoffgrößen .....	58
4.4	Weitere Zielgrößen und Konflikte zwischen Zielgrößen.....	61
4.5	Vergleich mit bestehenden Ansätzen .....	63

---

5	Wasserstoffspeicherung in LOHCs .....	67
5.1	Historischer Abriss der LOHC-Forschung.....	67
5.2	Prinzip der Energiespeicherung in LOHCs.....	70
5.3	Konzepte für den Einsatz von LOHCs.....	73
5.4	Thermodynamische Aspekte von LOHC-Materialien .....	75
5.5	Anforderungen an LOHCs .....	85
5.6	Identifikation neuer LOHC-Materialien.....	90
5.6.1	Betrachtung eines Einzelparameters.....	90
5.6.2	Screening im Multiparameterraum.....	91
6	Thermische Energiespeicherung .....	99
6.1	Überblick über thermische Energiespeicher .....	99
6.2	Screening von Stoffsystemen für thermochemische Energiespeicher .....	108
6.3	Chemische Wärmepumpen .....	113
6.4	Sorptionsenergiespeicher .....	118
6.4.1	Temperaturunabhängige Beschreibung der Adsorption.....	119
6.4.2	Temperaturunabhängige Beschreibung von Typ V-Sorptionssystemen	121
6.4.3	Modellierung des kompletten Sorptionsspeichers.....	123
7	Genauigkeit von Aussagen .....	127
7.1	Ansätze zur Abschätzung von Unsicherheiten.....	128
7.2	Unsicherheiten bei der Berechnung von Reaktionsgleichgewichten .....	133
7.3	Unsicherheiten bei Prozesssimulationen.....	140
8	Abschließende Diskussion.....	145
	Literaturverzeichnis .....	149



## Symbol- und Abkürzungsverzeichnis

Symbol	Bedeutung	Einheit
<b>Lateinische Buchstaben:</b>		
A	Parameter	<i>variabel</i>
B	Parameter	<i>variabel</i>
C	Parameter	<i>variabel</i>
$c_p$	Molare, isobare Wärmekapazität	$\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$
$E$	Energie	J bzw. kJ
$E^0$	Spannung bei offenem Stromkreis	V
F	Faraday-Konstante	$\text{C mol}^{-1}$
$\Delta^{\text{adsF}}$	Freie Adsorptionsenthalpie	$\text{kJ mol}^{-1}$
g	Molare Freie Enthalpie	$\text{kJ mol}^{-1}$
$\Delta^{\text{Rg}^+}$	Freie Reaktionsenthalpie bei Standardbedingungen	$\text{kJ mol}^{-1}$
h	Molare Enthalpie	$\text{kJ mol}^{-1}$
$\Delta^{\text{LVh}}$	Verdampfungsenthalpie	$\text{kJ mol}^{-1}$
$\Delta^{\text{PCh}}$	Enthalpieänderung bei einem Phasenwechsel	$\text{kJ mol}^{-1}$
$\Delta^{\text{Rh}^+}$	Reaktionsenthalpie bei Standardbedingungen	$\text{kJ mol}^{-1}$
$i$	Index zur allgemeinen Bezeichnung für konkreten Stoff oder Parameter	-
K	Gleichgewichtskonstante	-
L	Charakteristische Länge	m
M	Molare Masse	$\text{g mol}^{-1}$
n	Anzahl	-
$n$	Exponent	-
Nu	Nußelt-Zahl	-
$P_i$	Partialdruck der Komponente i	Pa
$P_{0i}^{\text{LV}}$	Dampfdruck der reinen Komponente i	Pa
Pr	Prandtl-Zahl	-

$q_s$	(Sättigungs-)Beladung	-
$Q^2$	kreuzvalidiertes Bestimmtheitsmaß	-
$R$	Allgemeine Gaskonstante	$\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$
$R^2$	Bestimmtheitsmaß	-
$Re$	Reynolds-Zahl	-
$s$	Molare Entropie	$\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$
$SD_{grav.}$	Massenbezogene Wasserstoffspeicherdichte	$\text{g g}^{-1}$
$T$	Temperatur	K
$v$	Molares Volumen	$\text{m}^3 \text{mol}^{-1}$
$W$	Adsorptionsvolumen	$\text{cm}^3 \text{kg}^{-1}$
$x$	Molenbruch	-
$X$	Platzhalter für physikalische Größe	<i>variabel</i>
$Y$	Platzhalter für physikalische Größe	<i>variabel</i>
$z$	Anzahl der übertragenen Elektronen	-

### Griechische Buchstaben:

$\alpha$	Wärmeübergangskoeffizient	$\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$
$\alpha$	thermischer Ausdehnungskoeffizient	$\text{K}^{-1}$
$\delta_p$	Kohäsive Energiedichte	$\text{J cm}^{-3}$
$\eta$	Wirkungsgrad	%
$\eta$	Viskosität	$\text{Pa s}$
$\lambda$	Wärmeleitfähigkeit	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
$\mu$	Dipolmoment	D
$\rho$	Dichte	$\text{g m}^{-3}$

## Abkürzungen

AAE	mittlere Absolutabweichung (von englisch: <i>absolute average error</i> )
AAPE	mittlere, relative Absolutabweichung (von englisch: <i>absolute average percentage error</i> )
Ads	Adsorption
CAMD	Rechnergestütztes Molekulardesign (von englisch: <i>computer-aided molecular design</i> )
CEPU	kombinierte Unsicherheit von Experiment und Vorhersage (von englisch: <i>combined experimental and predictive uncertainty</i> )
CHP	Chemische Wärmepumpe (von englisch: <i>chemical heat pump</i> )
COP	Leistungszahl (von englisch: <i>coefficient of performance</i> )
CV	Kreuzvalidierung (von englisch: <i>cross validation</i> )
DBT	Dibenzyltoluol
DoE	Department of Energy (US-amerikanisches Energieministerium)
Ex	Exergie
HHV	Oberer Heizwert / Brennwert (von englisch: <i>Higher Heating Value</i> )
IL	Ionische Flüssigkeit (von englisch: <i>Ionic Liquid</i> )
LHV	Unterer Heizwert (von englisch: <i>Lower Heating Value</i> )
LMO	Leave-Many-Out

---

LOH	Flüssiges Organisches Hydrid (von englisch: <i>Liquid Organic Hydride</i> )
LOHC	Flüssiger Organischer Wasserstoffträger (von englisch: <i>Liquid Organic Hydrogen Carrier</i> )
LOO	Leave-One-Out
MOF	Metal Organic Framework
ORC	Organic Rankine Cycle
PCM	Speichermaterial in einem thermischen Energiespeicher auf Basis von latenter Wärme (von englisch: <i>phase change material</i> )
PEM	Polymer-Elektrolyt-Membran
QSAR	Quantitative Structure-Activity Relationship
QSPR	Quantitative Structure-Property Relationship
RMSD	mittlere quadratisch Abweichung (von englisch: <i>root mean square deviation</i> )
SNG	Synthetisches Methan (von englisch: <i>synthetic natural gas</i> )
TAM	Time average model
TES	Thermischer Energiespeicher
TSM	Time slice model
UNIFAC	<b>U</b> niversal <b>Q</b> uasiche <b>M</b> ical <b>F</b> unctional <b>G</b> roup <b>A</b> ctivity <b>C</b> oefficients

## Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1-1: Vorgeschlagene Vorgehensweise zur Verbesserung von Prozessen mit Blick auf die eingesetzten Stoffe .....	3
Abbildung 2-1: Mögliche Ziehungen von Bilanzräumen um Energiespeicher.....	8
Abbildung 2-2: Veranschaulichung der Wärmeintegration mit Hilfe der Pinch-Analyse.....	14
Abbildung 2-3: Veranschaulichung der Kategorisierung von Maßnahmen eines Energieeinsparungsportfolios nach Drumm et al. [31] .....	16
Abbildung 3-1: Prinzip der Gruppeneinteilung für Gruppenbeitragsmethoden verschiedener Ordnungen am Beispiel Ethanol.....	19
Abbildung 3-2: Grundschemata der Vorgehensweise bei der Entwicklung von Vorhersagemethoden.....	21
Abbildung 3-3: Grundschemata einer Kreuzvalidierung.....	25
Abbildung 3-4: Beschriebene Möglichkeiten zur Gruppeneinteilung am Beispiel 1-Ethyl-3-Methylimidazolium Ethylsulfat.....	33
Abbildung 3-5: Paritätendiagramm für a) die Erweiterung der logarithmischen Mischungsregel nach Grunberg und Nissan sowie Parameterschätzung durch die Gruppenbeitragsmethode und b) die logarithmische Mischungsregel (jeweils bei 298,15 K) .....	39
Abbildung 4-1: Mögliche Steigerungen des Wirkungsgrads $\eta_i^*$ bei einem offenen Sorptionsenergiespeicher (optimierte Stoffdaten: schwarz; verbesserte Apparate: grau).....	47
Abbildung 4-2: Mögliche Steigerungen der spezifischen Energiedichte bei einem offenen Sorptionsenergiespeicher (optimierte Stoffdaten: schwarz; verbesserte Apparate: grau).....	48
Abbildung 4-3: Mögliche Steigerungen des Wirkungsgrads $\eta_i^*$ eines LOHC-Prozesses (optimierte Stoffdaten: schwarz; verbesserte Apparate: grau).....	50

Abbildung 4-4: Mögliche Steigerungen der Leistungszahl einer Absorptionswärmepumpe durch den Einsatz von Ionischen Flüssigkeiten (optimierte Stoffdaten: schwarz; verbesserte Apparate: grau).....	52
Abbildung 4-5: Mögliche Steigerungen des Wirkungsgrads $\eta^*$ eines LOHC-Prozesses erweitert um Transportgrößen (Transportgrößen: schwarz; restliche Parameter: grau) .....	56
Abbildung 4-6: Änderung des Wirkungsgrads $\eta_i^*$ eines LOHC-Prozesses bei Variation der Wärmekapazität relativ zum Referenzsystem Dibenzyltoluol aufgeteilt auf den Beitrag zur Wärmeübertragung und zum Energiebedarf für die Aufheizung des Trägers.....	57
Abbildung 4-7: Geschätzter Anteil der einzelnen Komponenten an den Gesamtinvestitionskosten eines LOHC-Prozesses und am Einsparpotential der Investitionskosten.....	62
Abbildung 5-1: Publikationen mit Stichworten zum Thema LOHC .....	70
Abbildung 5-2: Vereinfachtes Schema eines LOHC-Prozesses .....	70
Abbildung 5-3: Pilotanlage eines LOHC-Containersystems an der Universität Erlangen (2016).....	73
Abbildung 5-4: Freie Reaktionsenthalpie der Hydrierung bei 1 bar als Funktion der Temperatur für Benzol und Pyrrol.....	76
Abbildung 5-5: Bindungsstärke für Wasserstoff für verschiedene Stoffklassen .....	78
Abbildung 5-6: Gleichgewichtsumsatz der Dehydrierung bei 1 bar als Funktion der Temperatur für ausgewählte Vertreter verschiedener Stoffklassen (Beispielsubstanzen: Aliphatisch - Ethan; Homozyklus - Benzol; Heterozyklus - Pyrrol; Azaborin – 1,2-Dihydro-1,2-azaborin).....	79
Abbildung 5-7: Energieniveaus der Zwischenstufen bei der Hydrierung von a) Benzol und b) 1,2-Dihydro-1,2 -azaborin.....	81
Abbildung 5-8: Energieniveaus der Zwischenstufen bei der Hydrierung von Styrol .....	82
Abbildung 5-9: Gleichgewichtsumsatz der Dehydrierung von Ethylcyclohexan als Funktion der Temperatur .....	83

Abbildung 5-10: Energieniveaus der Zwischenstufen bei der Hydrierung von N-Ethylcarbazol.....	84
Abbildung 5-11: Eignung verschiedener Stoffklassen als LOHCs.....	89
Abbildung 5-12: Reihenfolge potentieller LOHC-Materialien angeordnet nach den erzielbaren Speicherwirkungsgraden (abgeschätzt für die Speicherung elektrischer Energie basierend auf Gleichung 5-11; benannt ist jeweils die dehydrierte Form).....	97
Abbildung 6-1: Grundtypen thermischer Energiespeicher .....	99
Abbildung 6-2: Schematische Darstellung der aufgenommenen Wärmemenge als Funktion der Temperatur bei Erwärmung eines PCMs von T1 auf T2 mit dazwischen stattfindender Umlagerung des Feststoffgefüges von Modifikation S1 zu Modifikation S2 und anschließendem Schmelzen des Feststoffs.....	102
Abbildung 6-3: Vereinfachtes Schema eines gekoppelten Systems aus thermischer Energiespeicherung durch Oxidation mit Wasser mit einer LOHC-basierten Energiespeicherung .....	108
Abbildung 6-4: Eingrenzung der Kandidaten beim Screening von metallischen Stoffsystemen als thermochemische Speicher durch reversible Oxidation mit Wasserdampf.....	112
Abbildung 6-5: Funktionsprinzip einer chemischen Wärmepumpe vom Typ I .....	113
Abbildung 6-6: Funktionsprinzip einer chemischen Wärmepumpe vom Typ II.....	114
Abbildung 6-7: Adsorptionsisothermen für das System Wasser auf ALPO-18 (a), transformiert mit der klassischen Potentialtheorie (b) und mit der beschriebenen Adaption der Potentialtheorie (c). .....	123
Abbildung 6-8: Nutzwirkungsgrad von offenen Sorptionsenergiespeichern als Funktion der Desorptionstemperatur; Berücksichtigt sind dabei die Energiebedarfe zur Verdampfung des Adsorptivs vor der Adsorption und die Erwärmung von Trägergasstrom und Adsorbens sowohl im Adsorptions- als auch im Desorptionsschritt; die Adsorptionswärme wird nach dem Adsorptionsschritt bei einer Temperatur von 50 °C aus dem Trägergasstrom	

	ausgekoppelt; der Trägergasstrom wird vor der Adsorption bei 25 °C gesättigt .....	125
Abbildung 7-1:	Wahrscheinlichkeit von Werten einer normalverteilten Variable mit Erwartungswert 0 und Standardabweichung 1 (die Pfeile bezeichnen die Bereiche mit von je $\pm 1$ , $\pm 2$ bzw. $\pm 3$ Standardabweichungen und die zugehörigen Wahrscheinlichkeiten).....	130
Abbildung 7-2:	Veranschaulichung des Latin Hypercube Samplings im zweidimensionalen Parameterraum (links: gleichverteilte Werte; rechts: normalverteilte Werte).....	131
Abbildung 7-3:	Histogramm der Monte-Carlo-Studie zur Unsicherheit bei der Berechnung des Gleichgewichts der Reaktion einer stöchiometrischen Mischung aus Wasserstoff und Stickstoff zu Ammoniak ( $P = 100$ mbar und $T = 298,15$ K; Anzahl der Iterationen: 1000).....	132
Abbildung 7-4:	Unsicherheit der Berechnung des Gleichgewichtsumsatzes der Ammoniaksynthese bei 298,15 K als Funktion des Gleichgewichtsumsatzes (hierbei wurde der Druck in der Rechnung stufenweise erhöht, um den Gleichgewichtsumsatz zu erhöhen).....	133
Abbildung 7-5:	Reaktionsgleichgewicht der Dehydrierung von Methylcyclohexan bei 1 bar als Funktion der Temperatur mit Angabe der 95 %-Konfidenzintervalle .....	135
Abbildung 7-6:	Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung für den Gleichgewichtsumsatz der Dehydrierung von Methylcyclohexan bei 1 bar (links: bei 538 K; rechts bei 553 K); die Monte-Carlo-Studien basieren auf jeweils 100000 Iterationen.....	136
Abbildung 7-7:	Reaktionsgleichgewicht der Dehydrierung von Methylcyclohexan bei 1 bar als Funktion der Temperatur mit Angabe der Standardabweichung.....	137
Abbildung 7-8:	Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der logarithmierten Gleichgewichtskonstante (links) und Gleichgewichtsumsatz als Funktion der logarithmierten Gleichgewichtskonstante für die Dehydrierung von H18-DBT bei 526 K und 1 bar .....	138



---

Abbildung 7-9: Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung für den Gleichgewichtsumsatz bei der Dehydrierung von H18-DBT bei 526 K und 1 bar .....	139
Abbildung 7-10: Beiträge der Unsicherheiten der einzelnen Eingangsgrößen zur Unsicherheit der Berechnung des Gleichgewichtsumsatzes für die Dehydrierung von LOHCs bei 526 K und 1 bar.....	140
Abbildung 7-11: Beiträge zur Gesamtunsicherheit einer Wirkungsgradberechnung für einen LOHC-Prozess mit Beheizung der Dehydrierung durch einen Wasserstoffbrenner.....	142
Abbildung 8-1: Fragestellungen der Einzelschritte bei der (Weiter-)Entwicklung von Prozessen.....	147

## Tabellenverzeichnis

Tabelle 4-1:	Exponenten der Abhängigkeit des Wärmeübergangs von Stoffparametern .....	55
Tabelle 4-2:	Korrelationskoeffizienten nach Pearson zwischen Stoffgrößen für 200 zufällig ausgewählte organische Verbindungen .....	59
Tabelle 5-1:	Zusammenfassung der Anforderungen an LOHC-Materialien.....	88
Tabelle 5-2:	Linearisierungsfaktoren zur Abschätzung des Wirkungsgrads von LOHC-Materialien ausgehend vom Basisfall Dibenzyltoluol einschließlich der Gültigkeitsgrenzen (max. zulässige Abweichung: 2 %) .....	95
Tabelle 6-1:	Beispielreaktionen für die wichtigsten Reaktionstypen thermochemischer TES .....	105
Tabelle 6-2:	Übersicht über die Grundtypen thermischer Energiespeicher.....	107