



## **Studienarbeit/Masterarbeit: MD Simulationsstudien zu den Transportkoeffizienten von HFO/HCFO-Kältemitteln**

Als alternative Kältemittel für verschiedene technische Anwendungen werden u.a. ungesättigte fluorierte Kohlenwasserstoffe, so genannte Hydrofluoroolefine (HFO) diskutiert, die aufgrund ihrer kurzen Lebensdauer in der Atmosphäre einen deutlich reduzierten GWP-Wert (GWP = Global Warming Potential) aufweisen. Unlängst wurden auch chlorierte HFO-Komponenten, sogenannte Hydrochloro-fluoroolefine (HCFO) als neue 'low-GWP' Arbeitsfluide vorgeschlagen.

Um die Eignung dieser vielfältigen neuartigen Arbeitsmittel in technischen Anwendungen beurteilen zu können, sind Kenntnisse der relevanten thermophysikalischen Stoffdaten erforderlich, aber vor allen Dingen auch von Modellierungsansätze, um die Stoffeigenschaften in Systemsimulationen abbilden zu können. Während es bereits hochgenaue Zustandsgleichungen gibt, mit denen das Phasenverhalten und die thermischen Eigenschaften von HFO- und HCFO-Komponenten beschrieben werden können, existieren bisher kaum Ansätze zur Beschreibung ihrer Transportkoeffizienten. Am Institut für Technische Thermodynamik und Thermische Verfahrenstechnik der Universität Stuttgart wurde ein neuartiger Ansatz zur Beschreibung von Transportkoeffizienten auf Basis der Entropieskalierung entwickelt, der in einer Kooperation mit dem IfT auch auf HFO- und HCFO-Komponenten angewendet werden soll. Für die Parametrierung der Ansätze wird jedoch eine große Anzahl von experimentellen Daten für die Transportgrößen über einen weiten Zustandsbereich benötigt. Da nur wenige experimentelle Daten vorliegen, sollen diese durch molekulare Simulationsergebnisse ergänzt werden.

Im Rahmen der studentischen Arbeit sollen MD Simulationen sowohl in der Gas- als auch in der Flüssigphase von HFO- und HCFO-Komponenten durchgeführt werden, um Viskositäten und Diffusionskoeffizienten über einen weiten Zustandsbereich zu ermittelt. Dabei soll auch untersucht werden, in wie weit die Simulationsergebnisse durch die Systemgröße in der MD-Simulation beeinflusst werden. Als Komponenten sollen die etablierten HFO-Kältemittel R-1234yf und R-1234ze(E) und die neu eingeführten HCFO-Komponenten 1233xf und 1224yd(Z) berücksichtigt werden. Die Simulationsergebnisse sollen mit verfügbaren Messdaten verglichen werden.

Betreuer: PD Dr.-Ing. Gabriele Raabe