

## 9. Vorlesung „Grundlagen der Produktgestaltung“

Inhalt und Termine, WS 2008/2009

### Kapitel 1 Einführung

- 21.10. 1. Einführung  
28.10. 2. Beispiel „Intelligentes Herbizid“, Miniprojekt „Produkt-Analyse“

### Kapitel 2 Grundlegende Prinzipien

- 04.11. 3. Film „Produkt-Gestaltung“  
11.11. 4. Film „Produkt-Gestaltung“  
18.11. 5. Film „Produkt-Gestaltung“, Grenzflächen, Benetzung, Kapillardruck,  
25.11. 6. Innovationsmanagement  
02.12. 7. Rollenspiel  
09.12. 8. Konzeptuelle Produktgestaltung

### Kapitel 3 Beispiel „Kristallisation“

- 16.12. 9. **Thermodynamisches Gleichgewicht** ←  
13.01. 10. Kristallographie, Habitus  
20.01. 11. Keimbildung, Wachstum, Partikelgrößenverteilung  
27.01. 12. Auslegung und Betrieb von Kristallisatoren,

### Kapitel 4 Beispiel „Kolloidale Systeme“

- 03.02. 13. Eigenschaften und Anwendungen von kolloidalen Systemen, Stabilität  
10.02. 14 Wechselwirkungen, DLVO-Theorie, Aggregation

login: *student* pwd: *materialien\_tvt*

1

## Results of the role play - questions and answers

• *Development Managers to Marketing Managers*: What is our **budget**?  
capacity: 10 % of our current production capacity in regular yogurth should be switched to probiotic (simple guess: appr. 200 t/day)  
cost: The price of the probiotic product can be higher than that of regular yogurth. Therefore, the production costs may be 20 % higher than for the production of regular yogurth.

• *Development Managers to Industrial Researchers*: How about **technology**?  
fermentation: a new fermentation line has to be built, to produce the probiotic bacteria.  
coating: A coating process is needed to protect the bacteria during their passage of the stomach.  
The rest of the process is unchanged. The existing equipment can be used.

• *Industrial Researchers to Academic Researchers*: How about **cooperation**?  
contract about: exclusive licence – finances - publication in journals:  
licencing of the bacteria and the technology of their preparation (coating)  
long-term research cooperation  
publication only after some period of time (i.e. 3 years)

2

## Produktspezifikation

„Nowadays,  
chemical products are not sold for what they are,  
but for what they do!“

... dementsprechend werden Produkte spezifiziert.

Eine Produktspezifikation ist die detaillierte Beschreibung des Produktes, anhand der festgestellt werden kann, ob das gekaufte Produkt den Kunden-Anforderungen entspricht.

### Produkt Datenblatt:

- Produktname
- Beschreibung
- Spezifikation
- Hinweise zur Anwendung, Verwendung
- Gefahrenhinweise
- rechtliche Bestimmungen

## Beispiele für Produktspezifikation (1)

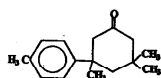
Aus: Industrial Chemicals, 1994  
G. Agam

80

Chapter 5

### THE TYPICAL SPECIFICATION OF AN INDUSTRIAL CHEMICAL

How does a modern scientific paper characterize a chemical? We randomly chose an example of the following cyclohexanone derivative:



Characterization of this material appears in the *Journal of Organic Chemistry* as follows [2]:

3,3,5-Trimethyl-5-(4-methylphenyl)cyclohexanone:

- mp 64–65° (hexane).
- IR (nujol) 3050, 3010, 2950, 2850, 1700, 1500, 1280, 810  $\text{cm}^{-1}$ .
- NMR ( $\text{CCl}_4$ ) 7.4–7.0 (q, 4H), 3.3–1.7 (m, 6H), 2.3 (s, 3H), 1.3 (s, 3H), 1.1 (s, 3H), 0.4 (s, 3H) ppm.
- MS m/e 248 [M+NH], 231 (M+1), 230, 215, 132.
- Anal. Calcd: C 83.43; H 9.63. Found: C 83.23; H 9.78.

You can study a thousand-and-one technical data sheets for simple or complex commercial materials. You will probably not find in any of them MS, IR, NMR data or even an elementary analysis of carbon or hydrogen.

Let us glance at the different specifications for different grades of the “simple” material sodium hydroxide (Table 5.1) [3]:

TABLE 5.1 TYPICAL SPECIFICATIONS FOR VARIOUS GRADES OF SODIUM HYDROXIDE (wt. %)

	Technical	NF	FCC	Reagent	Electronic
assay (NaOH)	94.0 min	95.0 min	95.0 min	97.0 min	98.0 min
$\text{Na}_2\text{CO}_3$		3.0 max	3.0 max	1.0 max	0.4 max
heavy metals (as Pb)		0.003 max	0.003 max		
heavy metals (as Ag)				0.002 max	0.001 max
lead (Pb)			0.001 max		
mercury (Hg)			0.00001 max	0.00001 max	0.00001 max
arsenic (As)			0.0003 max		
potassium (K)		to pass test		0.02 max	0.01 max
iron (Fe)				0.001 max	0.0003 max
nickel (Ni)				0.001 max	0.0005 max
ammonium hydroxide ppt				0.02 max	0.02 max
chloride (Cl)				0.005 max	0.001 max
sulfate ( $\text{SO}_4$ )				0.003 max	0.0005 max
phosphate ( $\text{PO}_4$ )				0.001 max	0.0002 max
nitrogen compounds (N)				0.001 max	0.0003 max

aus: Agam G.: Industrial Chemicals

## Beispiele für Produktspezifikation (2)

Spezifikationen für Gemische	Häufigkeit
Specific Gravity	*****
Appearance	*****
Solubility	*****
Color	*****
Flash Point	*****
Assay	*****
Viscosity	*****
Boiling Point Range	*****
Moisture	*****
Refractive Index	*****
Melting Point/Range	*****
Freezing Point/Range	*****
Vapour Pressure	*****
pH	*****
Impurities (specific)	*****
Bulk Density	*****
Particle Size	****
Impurities (ion)	***
...	

5

## Beispiele für Produktspezifikation (3)

Spezifikationen für Erdölprodukte	Produkttyp
Acidity, Total (mg KOH)	Turbine fuel, lubricating oils
Aniline Point	Diesel fuel, lubricating oils
Aromatics	Turbine fuel, lubricating oils
Ash	Diesel Fuel
Bromine Number	Various
Caloric Value	Fuels
Carbon Residue	Diesel fuel, lubricating oils
Cetane No.	Diesel fuel
Cloud Point	Diesel fuel
Color	Wax
Cone Penetration	Lubrication grease, wax
Copper Strip Corrosion	Gasoline, turbine fuel, diesel fuel
Distillation Range	Gasoline, Kerosine, Turbine fuel, wax
Dropping point	Lubricating grease
...	...

6



## Erzeugung fester Produkte

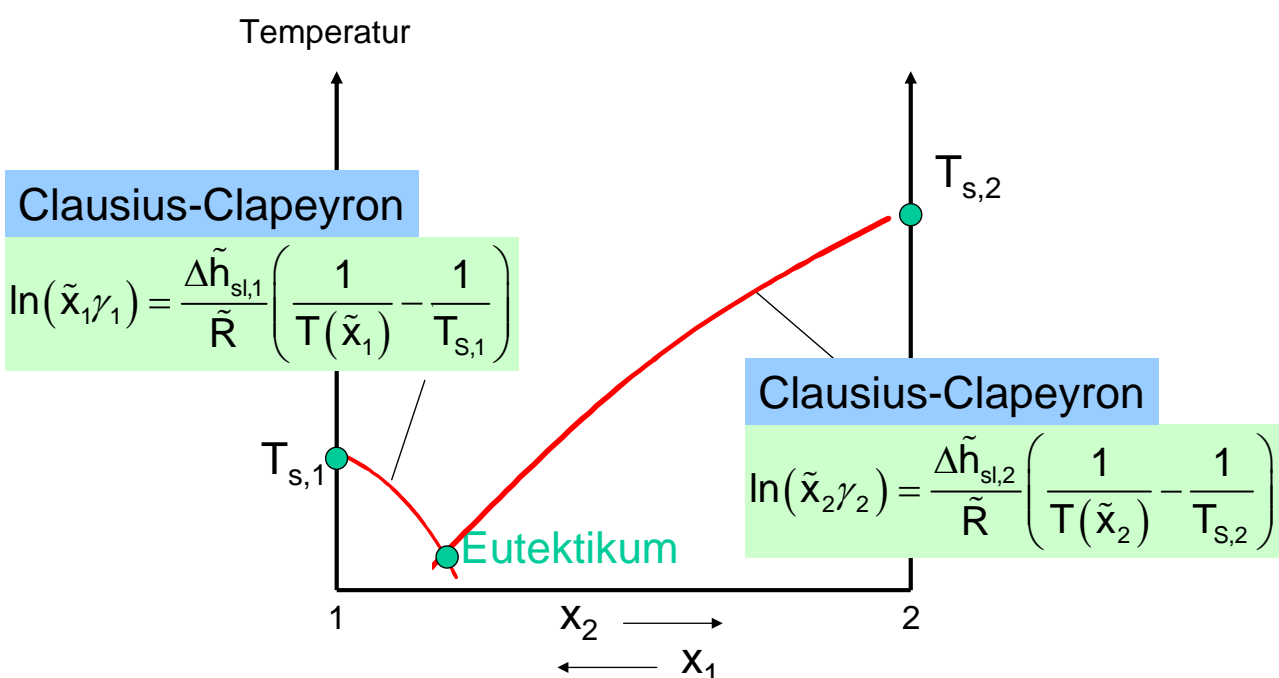
Mindestens 60 Prozent der Produkte der Prozessindustrie sind Feste Produkte (Kristalle, Gläser, Polymerisate, Agglomerate, Pulver, Stränglinge, Chips, Pastillen, ...).

Feste Produkte können aus der Gas- oder Flüssigphase aufgrund von

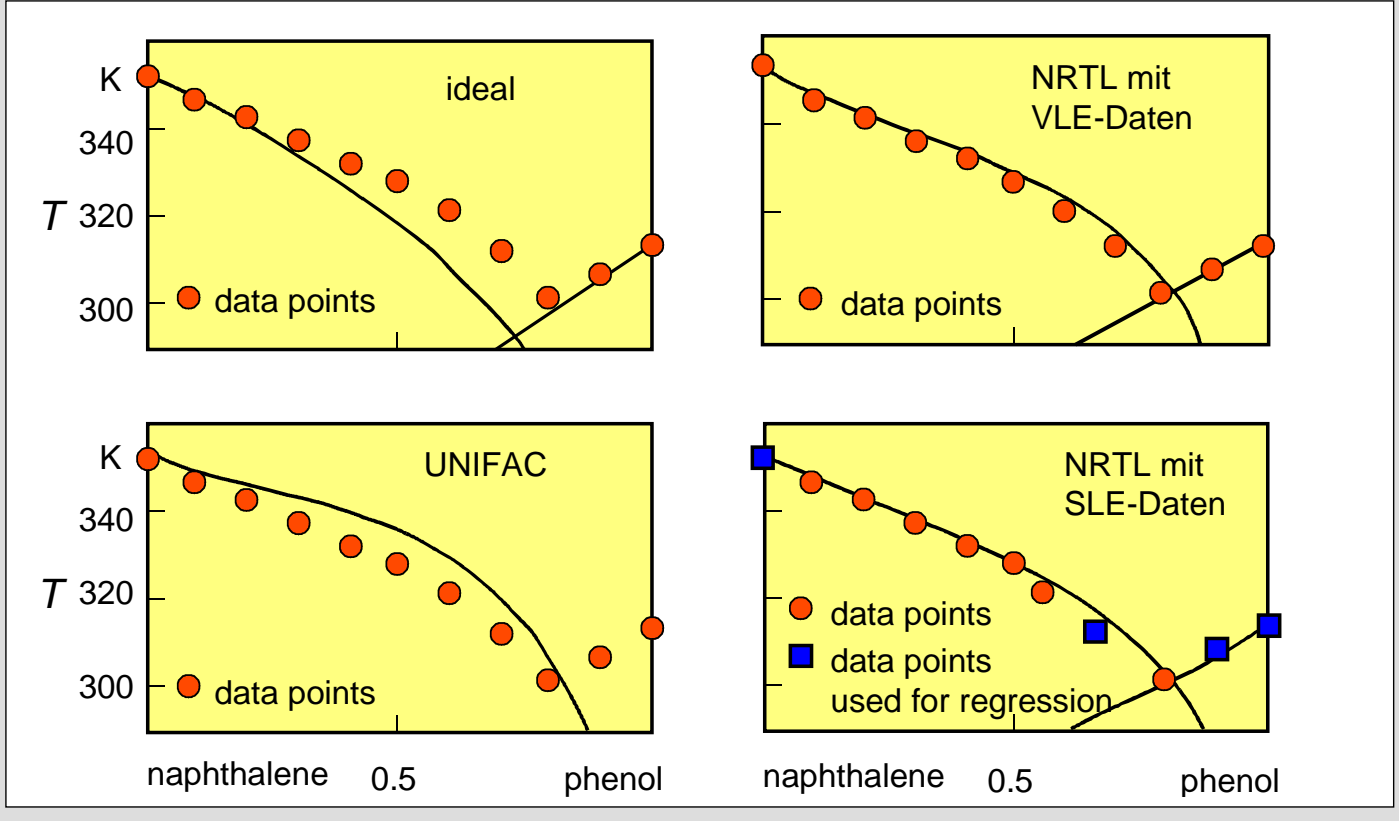
- glasartiger Erstarrung
- kristalliner Erstarrung
- Polymerisation (*hier nicht behandelt*)

entstehen.

## Kristallisation: binäres Phasendiagramm

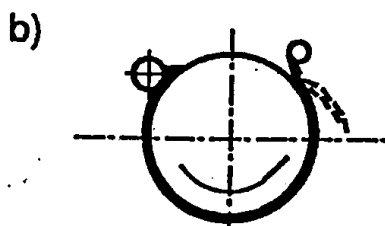
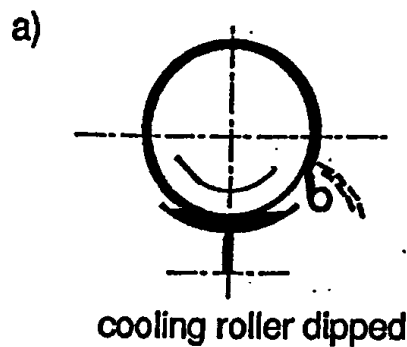


# Berechnung eines Phasendiagramms (Eck, 1996)

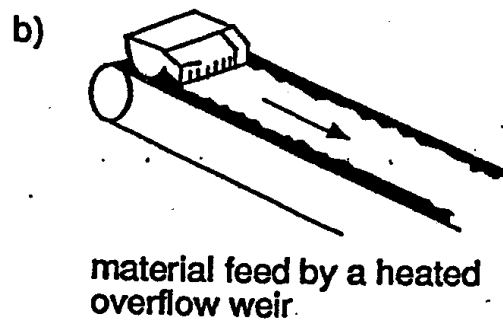
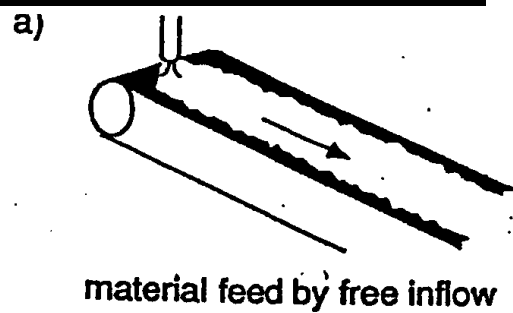


## Erstarrung von Schmelzen

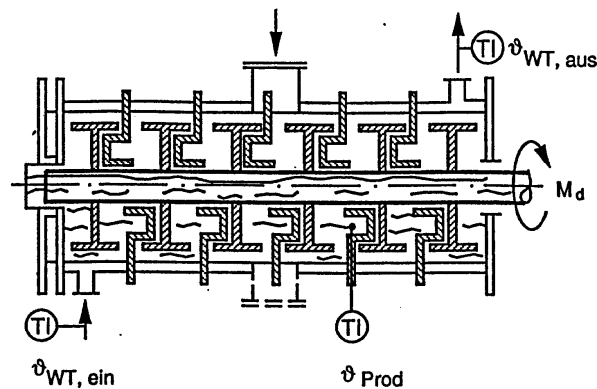
### Kühlwalzen



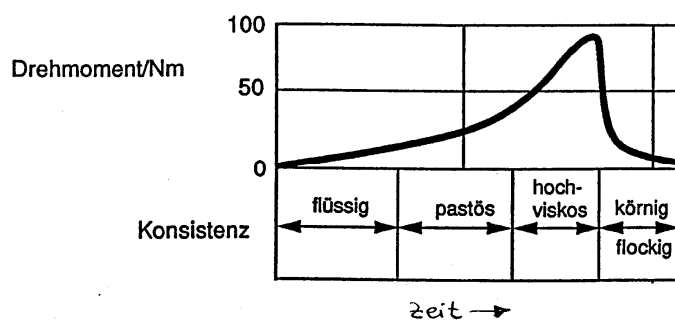
### Kühlbänder



# Erstarrung von Schmelzen im Schaufelmischer



## Versuchsablauf :



13

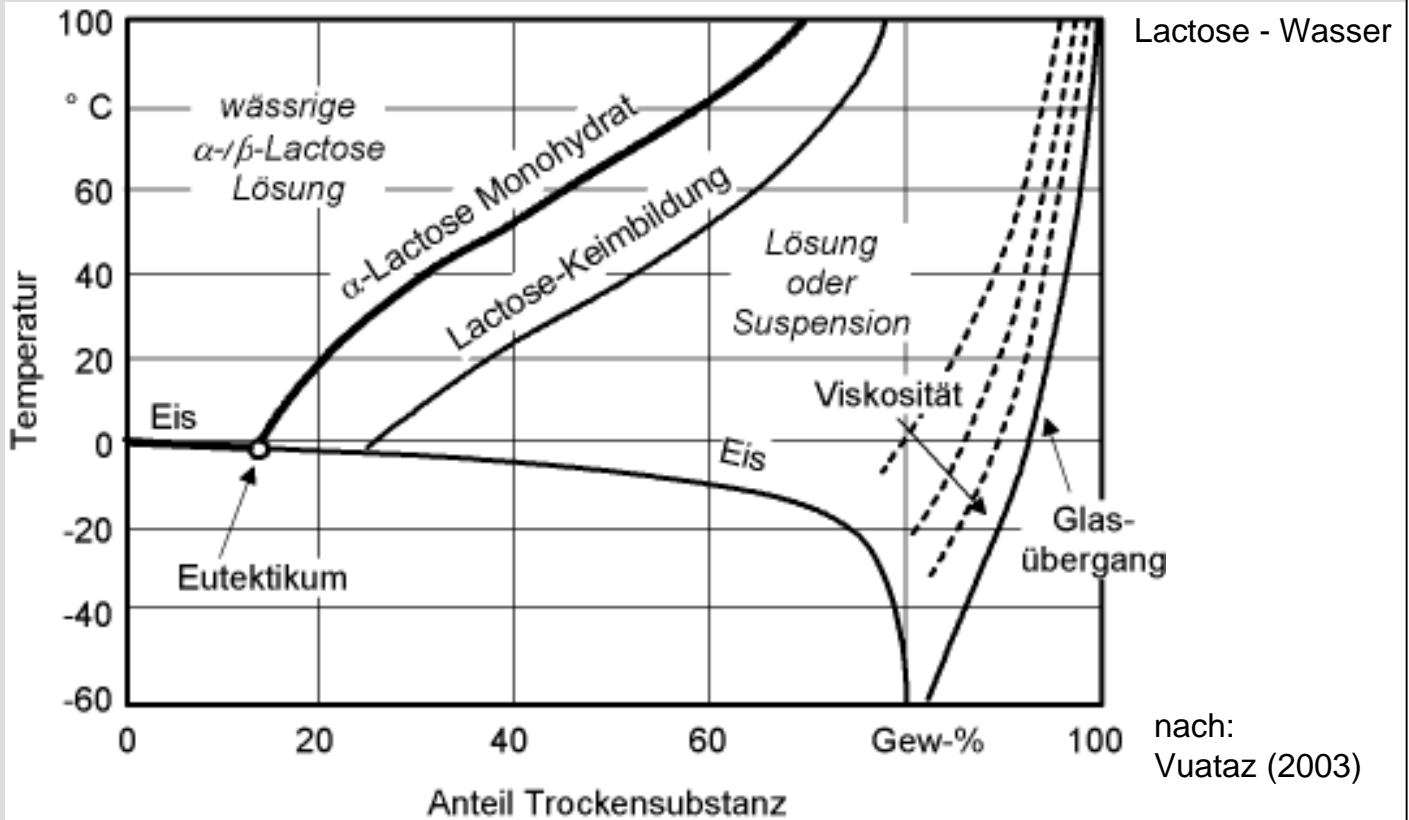
# Glasartige Erstarrung

**Kristalle** besitzen eine durchgehende Ordnung; die Bausteine der Kristalle schwingen um ihre Gleichgewichtslagen (Gitterpunkte). Kristalle lassen sich nicht plastisch verformen. Platzwechselforgänge sind sehr selten. **Flüssigkeiten** besitzen nur eine Nahordnung. Sie haben eine »Löcherstruktur«; Platzwechselforgänge sind häufig. Sie sind leicht verformbar. Eine unterkühlte Flüssigkeit hat alle Eigenschaften einer Flüssigkeit, ist aber nicht im Gleichgewichtszustand.

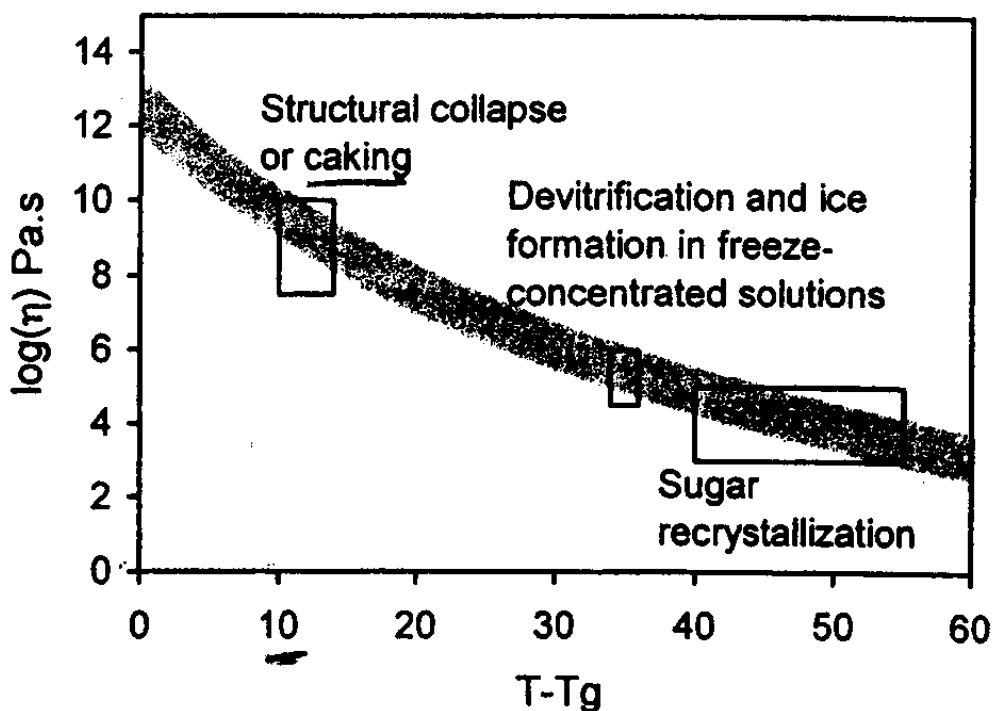
Ein Glas hat alle Eigenschaften einer Flüssigkeit außer einer: der Verformbarkeit. Nicht kristallisierbare Stoffe gehen beim Abkühlen ihrer Schmelzen in den Glaszustand über; die Übergangstemperatur nennen wir die Glastemperatur  $T_g$ . Der Ordnungszustand im Glas entspricht dem einer Flüssigkeit bei  $T_g$ . Unterhalb  $T_g$  kommen Platzwechselforgänge selten vor; die Molekeln im Glas schwingen lediglich um ihre Gleichgewichtslagen. Auch die Scherung ist stark behindert; Gläser sind extrem viskos. Wir nennen den Glaszustand den einer *eingefrorenen Flüssigkeit*.

14

# Glasartige Erstarrung

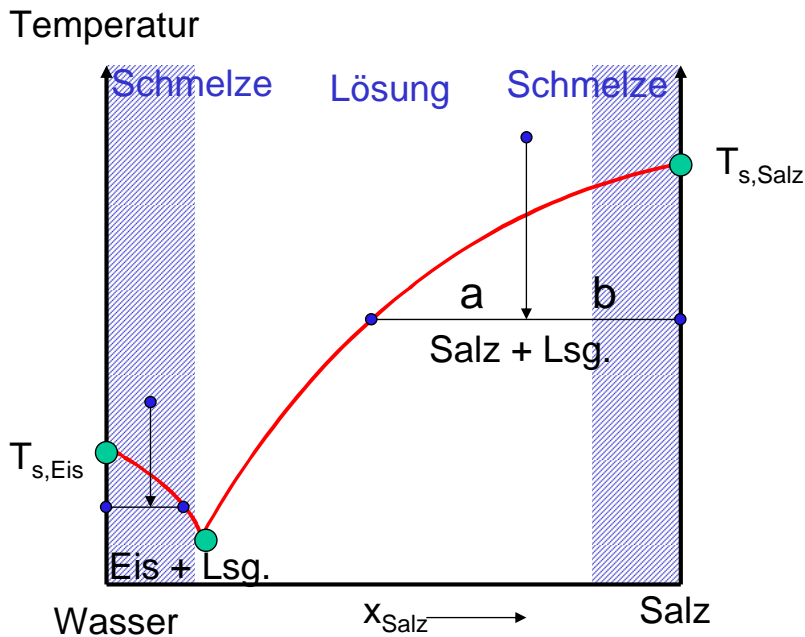


# Bedeutung der Viskosität bei glasartiger Erstarrung





# Kristallisation im Phasendiagramm



## Hebelgesetz:

$$\frac{a}{b} = \frac{\text{Menge Salzkristalle}}{\text{Menge Lösung}}$$

$$a + b = \text{Ausgangsmenge}$$

## Lösung:

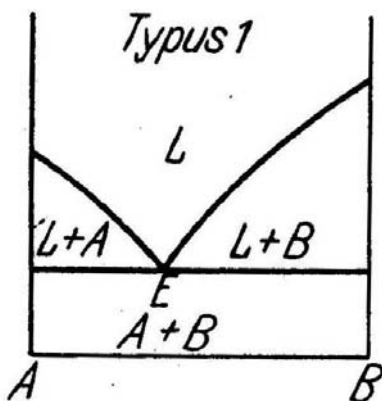
große Temperaturdifferenzen  
--> kleine Feststoffgehalte

## Schmelze:

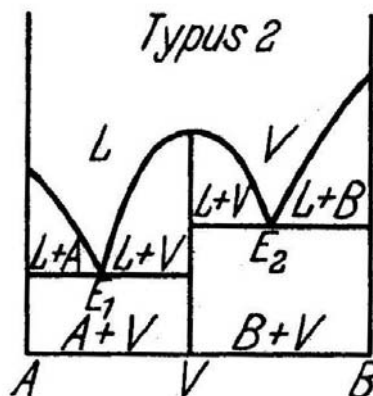
kleine Temperaturdifferenzen  
--> große Feststoffgehalte

# Phasendiagramm-Typen

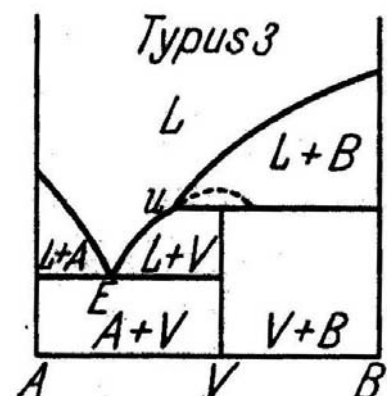
eutektisch



eutektisch mit  
Verbindungsbildung



eutektisch mit  
Verbindungsbildung  
und „verdecktem“ Maximum



aus: D'Ans-Lax

# Phasendiagramm von NaOH-Wasser

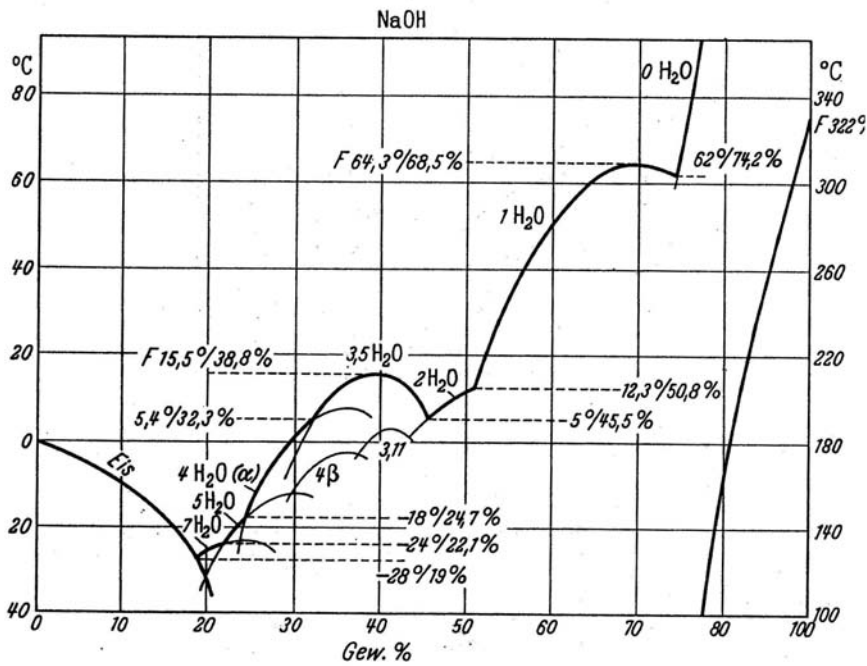
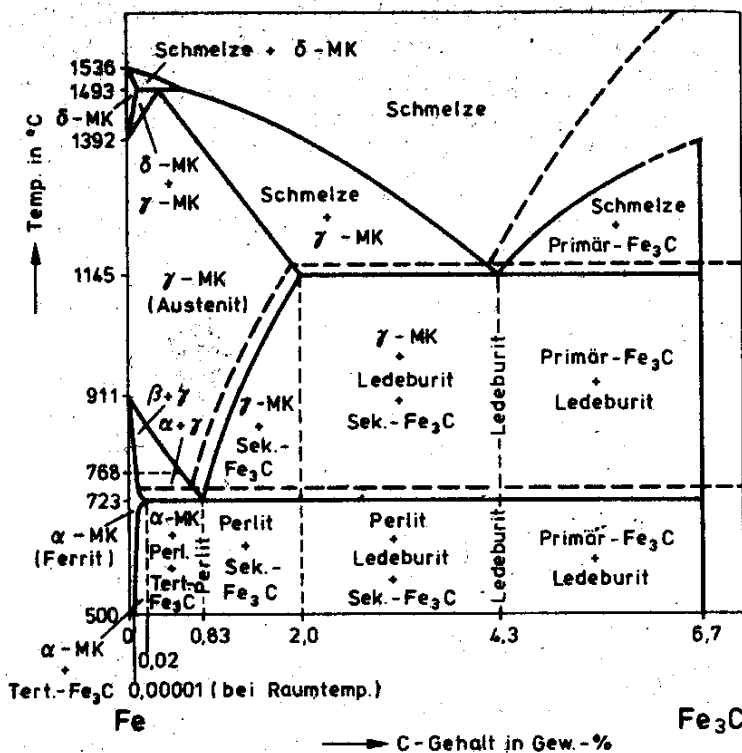


Abb. 3. (NaOH)

aus: D'Ans-Lax

## z.B. auch Eisen-Kohlenstoff Diagramm



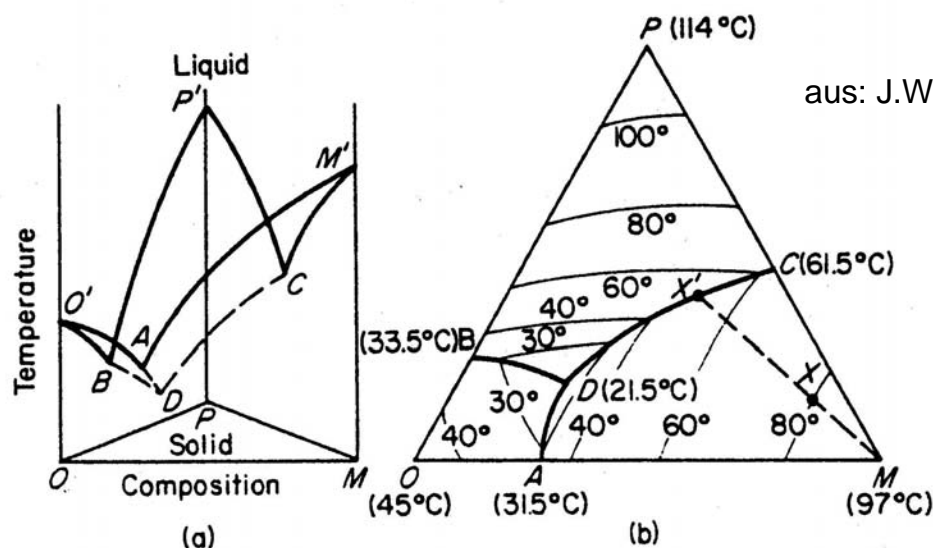
— metastabiles System

- - stabiles System

aus:

W. Dohmke „Werkstoffkunde und Werkstoffprüfung“  
Girardet Verlag, 1986

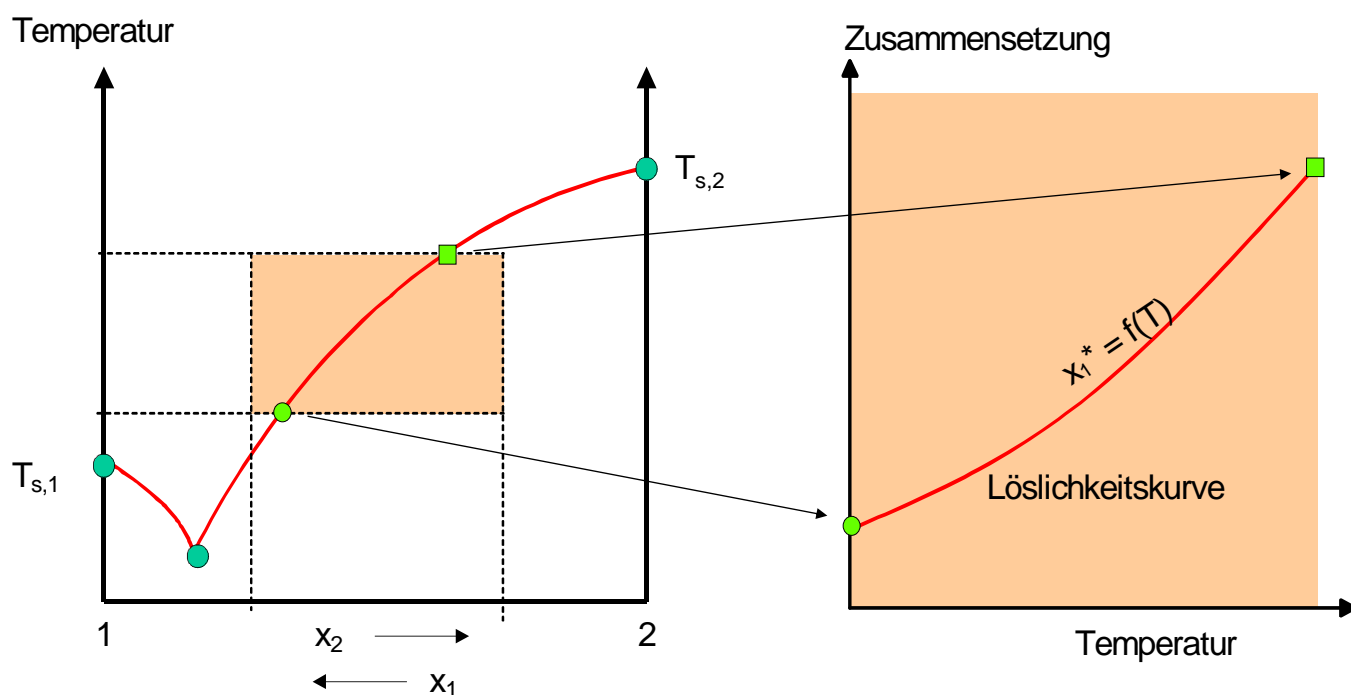
# ternäres Phasendiagramm



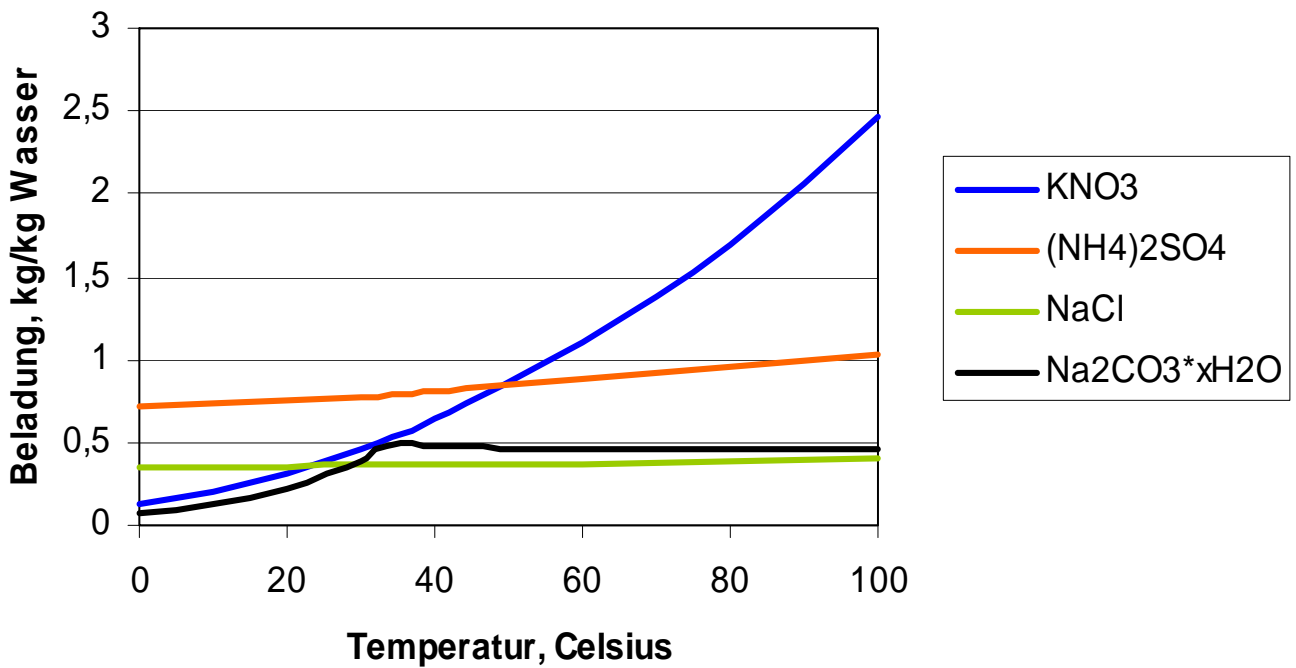
aus: J.W. Mullin, *Crystallization*, 1993

**Figure 4.20.** Eutectic formation in the three-component system o-, m- and p-nitrophenol: (a) temperature-concentration space model; (b) projection on a triangular diagram

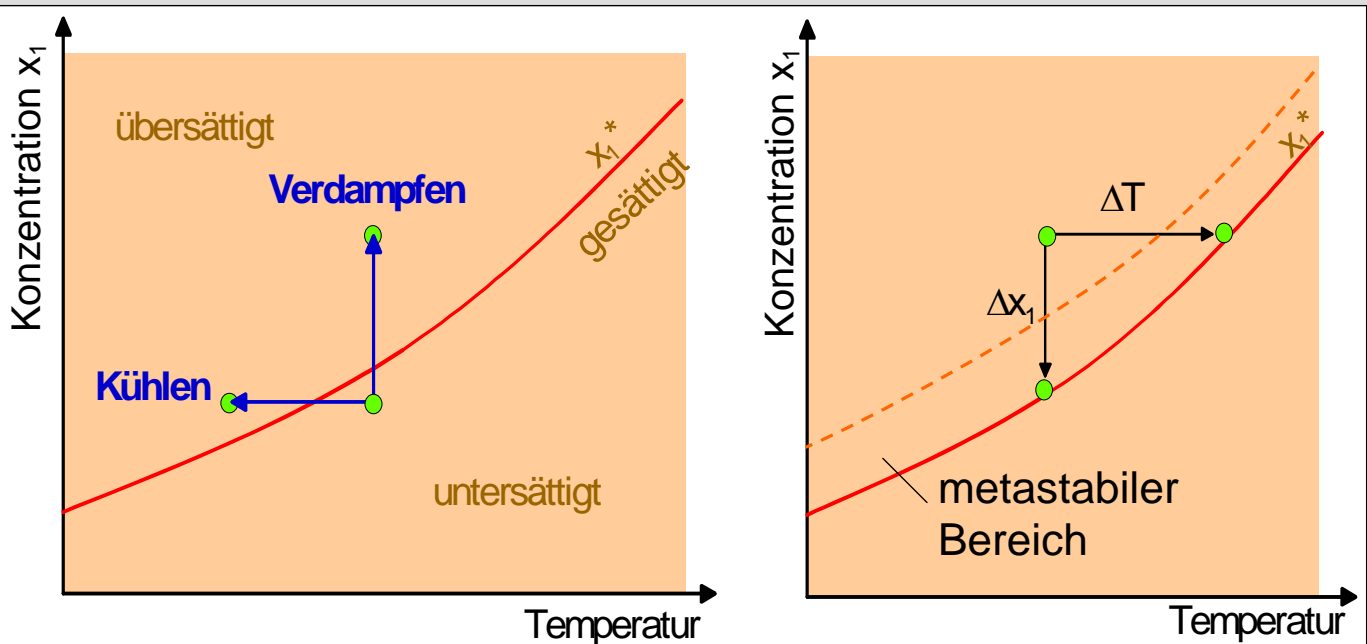
# Löslichkeitskurve



# Löslichkeit einiger Stoffsysteme



## Unterkühlung - Übersättigung - metastabiler Bereich



**metastabiler Bereich:**  
Wachstum, aber keine Keimbildung

# Konzentrationsmaße

Massenanteil	$x_i, y_i,$	kg/kg Lösung
Massenbeladung	$X_i, Y_i,$	kg/kg Lösungsmittel
Konzentration	$c_i$	kg/m <sup>3</sup> Lösung

analog:

Molanteil	$\tilde{x}_i, \tilde{y}_i$	mol/mol Lösung
Molbeladung	$\tilde{X}_i, \tilde{Y}_i$	mol/mol Lösungsmittel
Molarität	$M_i, \tilde{c}_i$	mol/l Lösung

# Übersättigungsmaße

thermo-  
dynamische  
Triebkraft

$$\Delta\mu_i = \tilde{R}T \ln\left(\frac{a_i}{a_i^*}\right)$$

$$\frac{\Delta\mu_i}{\tilde{R}T} = \ln\left(\frac{a_i}{a_i^*}\right) = \nu_i \ln S_{a,i}$$

Aktivität  $a_i$

$$a_i = \tilde{c}_i \gamma_i$$

reales  
Übersättigungs-  
verhältnis

$$S_{a,i} = \frac{a_i}{a_i^*} = \frac{\tilde{c}_i \gamma_i}{\tilde{c}_i^* \gamma_i^*} = \frac{c_i \gamma_i}{c_i^* \gamma_i^*}$$

ideales  
Übersättigungs-  
verhältnis

$$S_i = \frac{c_i}{c_i^*}$$

für  $1 < S_i < 1,1$

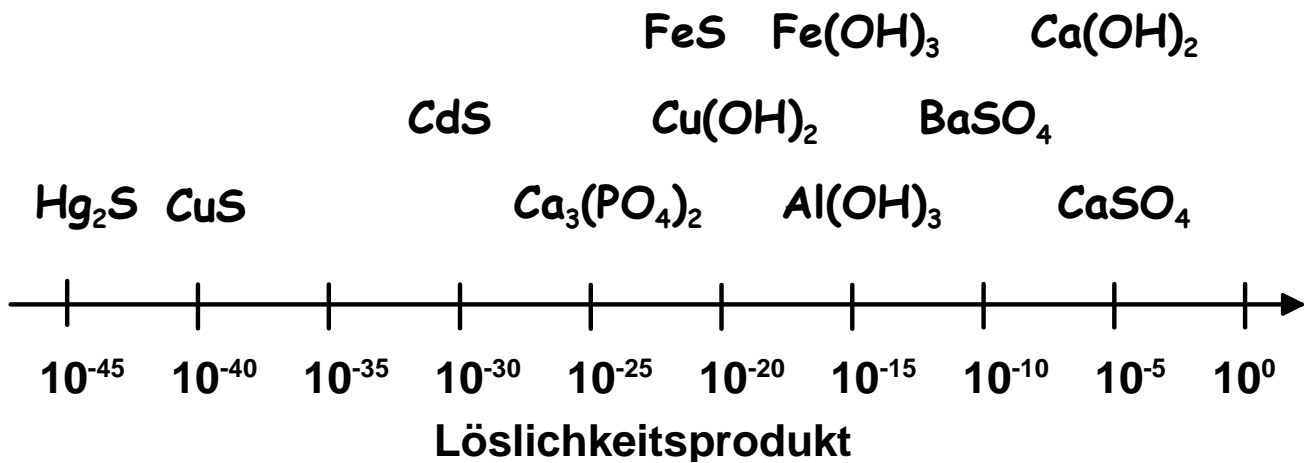
$$\ln S_i \cong S_i - 1 \cong \frac{c_i - c_i^*}{c_i^*} = \sigma_i$$

relative  
Übersättigung

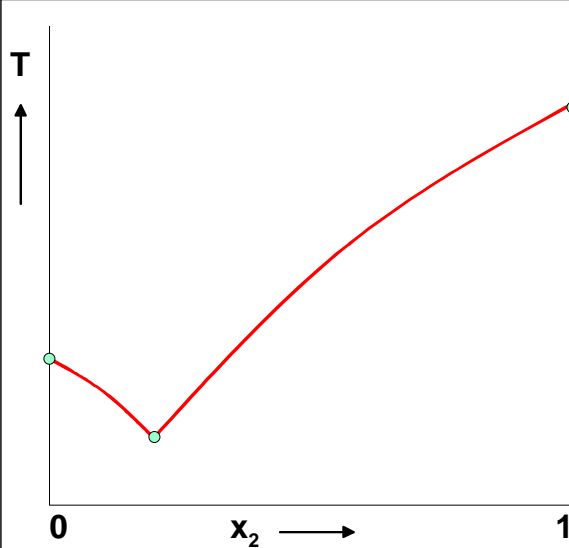
$$\sigma_i$$

# Fällung schwerlöslicher Elektrolyte

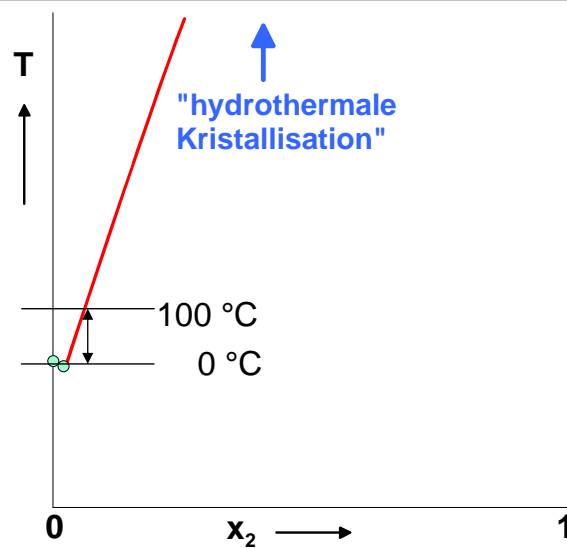
--> sehr kleine Löslichkeitsprodukte!



## Kristallisation <--> Fällung



**Kristallisation aus  
Lösungen und Schmelzen**



**Fällung schwerlöslicher  
Salze**