

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung in die Chemische Reaktionstechnik	1
1.1	Übergeordnete Ziele der Chemischen Reaktionstechnik	2
1.1.1	Entwicklung neuer chemischer Prozesse	2
1.1.2	Optimierung bestehender chemischer Prozesse	4
1.2	Lehrinhalte der Chemischen Reaktionstechnik	4
1.2.1	Reaktionsanalyse	4
1.2.2	Reaktorauslegung	6
1.3	Bedeutung der Chemischen Reaktionstechnik	6
	Literatur	7
2	Begriffe und Definitionen der Chemischen Reaktionstechnik	9
2.1	Allgemeine Definition von Reaktionssystemen	9
2.2	Allgemeine Definition von Reaktoren	12
2.3	Quantitative Beschreibung von Reaktionen mit lokalen Größen	13
2.4	Quantitative Beschreibung von Reaktionen mit integralen Größen	17
2.4.1	Umsatzgrad, Ausbeute und Selektivität	18
2.4.2	Atomeffizienz und E-Faktor	24
2.4.3	Produktionshöhe und Kapazität	25
2.4.4	Raum-Zeit-Ausbeute	26
	Literatur	33
3	Reaktionsanalyse	35
3.1	Stöchiometrie chemischer Reaktionen	36
3.1.1	Zielsetzung und Grundlagen	37
3.1.2	Bestimmung der Schlüsselkomponenten	39
3.1.3	Bestimmung der Schlüsselreaktionen	42
3.1.4	Praktische Relevanz	47
3.2	Thermodynamik	48
3.2.1	Erster Hauptsatz der Thermodynamik	49
3.2.2	Zweiter Hauptsatz der Thermodynamik	65

3.3	Mikrokinetik	90
3.3.1	Homogene Fluidreaktionen	92
3.3.2	Heterogen katalysierte Reaktionen	95
3.3.3	Homogen katalysierte Reaktionen	105
3.3.4	Biokatalysierte Reaktionen	108
3.3.5	Kettenreaktionen	114
	Literatur	117
4	Grundlagen der Wärmeübertragung	119
4.1	Mechanismen des Wärmetransports	120
4.1.1	Wärmeleitung	120
4.1.2	Konvektion	122
4.1.3	Wärmestrahlung	123
4.2	Wärmeübergang	125
4.3	Wärmedurchgang	129
4.4	Auslegung von Wärmeübertragern	131
	Literatur	134
5	Grundlagen der Reaktormodellierung	135
5.1	Grundlagen der Bilanzierung	136
5.2	Die allgemeine Stoffbilanz	138
5.3	Die allgemeine Energiebilanz	147
5.4	Ideale Reaktoren	155
5.4.1	Diskontinuierlicher idealer Rührkesselreaktor	157
5.4.2	Kontinuierlicher idealer Rührkesselreaktor	181
5.4.3	Halbkontinuierlicher idealer Rührkesselreaktor	210
5.4.4	Idealer Strömungsrohrreaktor	218
5.5	Vergleich idealer Reaktoren	233
5.5.1	Diskontinuierlicher idealer Rührkesselreaktor und idealer Strömungsrohrreaktor	234
5.5.2	Kontinuierlicher idealer Rührkesselreaktor und idealer Strömungsrohrreaktor	235
5.6	Kombination idealer Reaktoren	239
5.6.1	Serienschaltung von Rührkesselreaktoren (Rührkesselkaskade)	239
5.6.2	Parallelschaltung von Strömungsrohrreaktoren (Rohrbündelreaktor)	249
	Literatur	251
6	Verweilzeitverteilung und Bilanzierung realer Reaktoren	253
6.1	Verweilzeitsummenfunktion und Verweilzeitverteilungsfunktion	254
6.2	Experimentelle Ermittlung der Verweilzeitsummenfunktion und der Verweilzeitverteilungsfunktion	256

6.3	Verweilzeitverhalten idealer Reaktoren	260
6.3.1	Verweilzeitverhalten des idealen Strömungsrohrreaktors . . .	260
6.3.2	Verweilzeitverhalten des kontinuierlichen idealen Rührkesselreaktors	262
6.3.3	Verweilzeitverhalten einer Kaskade kontinuierlicher idealer Rührkesselreaktors	263
6.4	Verweilzeitverhalten realer Reaktoren	266
6.4.1	Verweilzeitverhalten kontinuierlicher realer Rührkesselreaktors	266
6.4.2	Verweilzeitverhalten realer Strömungsrohrreaktors	267
6.5	Bilanzierung realer Reaktoren	281
6.5.1	Berechnung des Umsatzgrades mit dem Dispersionsmodell . . .	281
6.5.2	Berechnung des Umsatzgrades mit dem Zellenmodell	284
6.5.3	Mikrovermischung und Makrovermischung (Segregation) . . .	286
6.5.4	Berechnung des Umsatzgrades für vollständige Segregation	288
	Literatur	292
7	Reaktionstechnik einphasiger komplexer Reaktionen	295
7.1	Gleichgewichtsreaktionen	297
7.1.1	Monomolekulare Gleichgewichtsreaktion	297
7.1.2	Bimolekulare Gleichgewichtsreaktion	313
7.2	Folgereaktionen	323
7.2.1	1,1-Folgereaktion	325
7.2.2	2,1- bzw. 1,2-Folgereaktion	336
7.3	Parallelreaktionen	341
7.3.1	1,1-Parallelreaktion	342
7.3.2	2,1- bzw. 1,2-Parallelreaktion	345
7.4	Komplexe Reaktionen mit mehr als zwei Teilreaktionen	349
7.4.1	Irreversible Folge- und Parallelreaktion als Hauptnebenreaktionen	350
7.4.2	Reversible Folge- und Parallelreaktion als Hauptnebenreaktionen	354
	Literatur	355
8	Reaktionstechnik mehrphasiger Reaktionen	357
8.1	Grundlagen der chemischen Reaktionen in mehrphasigen Systemen	358
8.1.1	Makrokinetik	358
8.1.2	Reaktormodellierung	364

8.2	Heterogen katalysierte Reaktionen	368
8.2.1	Feste Katalysatoren	369
8.2.2	Kinetische Modellierung	372
8.2.3	Reaktorauslegung	418
8.3	Fluid-Fest-Reaktionen	463
8.3.1	Kinetische Modellierung	465
8.3.2	Reaktorauslegung	475
8.4	Fluid-Fluid-Reaktionen	481
8.4.1	Kinetische Modellierung	482
8.4.2	Reaktorauslegung	496
	Literatur	503
9	Mikroreaktionstechnik	509
9.1	Begriffe und Definitionen	510
9.2	Homogene und homogen katalysierte Fluidreaktionen	512
9.2.1	Fluiddynamik	512
9.2.2	Stoffbilanz	512
9.2.3	Enthalpiebilanz	516
9.2.4	Reaktorauslegung	519
9.3	Heterogen katalysierte Fluidreaktionen	521
9.3.1	Stoffbilanz	521
9.3.2	Enthalpiebilanz	526
9.3.3	Reaktorauslegung	528
9.4	Fluid-Fluid-Reaktionen	529
9.4.1	Fluiddynamik	530
9.4.2	Stoffbilanz	530
9.4.3	Enthalpiebilanz	532
9.4.4	Reaktorauslegung	532
9.5	Mikrostrukturreaktoren	532
9.5.1	Labormaßstab	532
9.5.2	Technischer Maßstab	532
	Literatur	536
10	Reaktionstechnik der Polyreaktionen	537
10.1	Begriffe und Definitionen	537
10.1.1	Einführung in die Polyreaktionen	537
10.1.2	Polymerisationsgrad und Polymerisationsgradverteilung	541
10.1.3	Klassifizierung nach Elementarreaktionen	543
10.2	Kinetik von Polyreaktionen	546
10.2.1	Kinetik der Polykondensation/Polyaddition	547
10.2.2	Kinetik der ionischen/übergangsmetallkatalysierten Polymerisation	550

10.2.3	Kinetik der radikalischen Polymerisation	556
10.2.4	Kinetik der Copolymerisation	565
10.2.5	Vergleich der verschiedenen Typen von Polyreaktionen	568
10.3	Einfluss des Reaktortyps auf die Polymerisation	569
10.3.1	Idealer Strömungsrohrreaktor/diskontinuierlicher idealer Rührkesselreaktor	569
10.3.2	Kontinuierlicher idealer Rührkesselreaktor	573
10.3.3	Halbkontinuierlicher idealer Rührkesselreaktor	576
10.3.4	Zusammenspiel von Reaktionsmechanismus und Reaktortyp	578
10.4	Polymerisationsverfahren in heterogener Phase	578
10.4.1	Suspensions-/Perlpolymerisation	579
10.4.2	Fällungs-/Dispersionspolymerisation	579
10.4.3	Emulsionspolymerisation	582
10.5	Schlussbemerkung	584
	Literatur	585
11	Elektrochemische Reaktionstechnik	589
11.1	Begriffe, Definitionen und Beispiele	590
11.1.1	Begriffe	590
11.1.2	Definitionen	593
11.1.3	Beispiele	600
11.2	Elektrochemische Thermodynamik	603
11.2.1	Erster Hauptsatz der Thermodynamik	603
11.2.2	Zweiter Hauptsatz der Thermodynamik	605
11.3	Kinetik von Elektrodenreaktionen	621
11.3.1	Mikrokinetik	621
11.3.2	Makrokinetik	650
11.4	Elektrochemische Reaktoren	662
11.4.1	Labormaßstab	665
11.4.2	Technischer Maßstab	666
11.4.3	Betriebsweisen	667
	Literatur	675
12	Mathematischer Anhang	677
12.1	Dimensionslose Kennzahlen	677
12.2	Taylor-Reihenentwicklung	681
12.3	Nullstellenbestimmung	683
12.4	Lösung von Differenzialgleichungen und Differenzialgleichungssystemen	686
12.4.1	Analytische Lösungsmöglichkeiten	686
12.4.2	Numerische Lösungsmöglichkeiten	690

12.5	Parameterschätzung	696
12.5.1	Lineare Modelle	697
12.5.2	Nichtlineare Modelle	698
12.6	Software	699
12.6.1	Kostenfreie Software	700
12.6.2	Kommerzielle Software	701
	Literatur	703
	Symbolverzeichnis	705
	Stichwortverzeichnis	729