

Inhalt

Inhalt	I
Symbolverzeichnis	VI
Lateinische Symbole	VI
Griechische Symbole	IX
Indizes	IX
Abkürzungen	XI
Abstract	XIV
Kurzfassung	XVI
Kapitel 1 Einleitung	1
Kapitel 2 Stand des Wissens	5
2.1. Integrierte reaktive Trennverfahren	5
2.1.1. Multifunktionale Reaktoren.....	5
2.1.2. Phasenmodell.....	7
2.1.3. Freiheitsgrade reaktiver Trennprozesse	9
2.1.4. Reaktionsraumkonzept	10
2.1.5. Produktbereiche nicht-reaktiver und reaktiver Trennungen	14
2.1.6. Betriebsfenster	21

2.2. Ausgewählte Aspekte der chemischen Verfahrenstechnik.....	22
2.2.1. Reaktionstechnik	23
2.2.1.1. Reaktionstechnische Kennzahlen	23
2.2.1.2. Reaktionskinetik.....	24
2.2.1.3. Ideale Reaktoren.....	25
2.2.2. Adsorption und reaktive Chromatographie	27
2.2.2.1. Prinzip von Adsorption und Desorption	27
2.2.2.2. Adsorptionsgleichgewicht – linearer Modellansatz.....	28
2.2.2.3. Prinzip der Reaktivchromatographie	28
2.2.2.4. Moving-Bed Prozesse.....	29
2.2.3. Flüssig-Flüssig-Gleichgewichte bei der Extraktion.....	31
2.2.4. Numerische Optimierung	33
2.3. Methoden der Prozesssynthese	34
Kapitel 3 Verteilung von Funktionalitäten	40
3.1. Allgemeiner Teil	40
3.1.1. Begriff der Funktionalität	40
3.1.2. Integrationsgrade und räumliche Struktur	43
3.2. Funktionalitätenverteilung in der reaktiven Chromatographie – Design idealer Stoffsysteme	45
3.2.1. Beschreibung des Simulationsmodells	46
3.2.1.1. Modellierung einer Einzelsäule und Verknüpfung zum TMBR.....	47
3.2.2. Vorgehensweise bei den Simulationsstudien.....	50
3.2.3. Auswertung der Simulationsstudien.....	53
3.2.3.1. Reaktionstyp $A \rightleftharpoons B+C$	53
3.2.3.2. Reaktionstyp $A+B \rightleftharpoons C+D$	61
3.2.3.3. Reaktionstyp $A+B \rightleftharpoons C$	69
3.2.4. Eignung chromatographischer Reaktoren für verschiedene Reaktionen.....	72
3.3. Funktionalitätenverteilung in der reaktiven Rektifikation – Design realer Stoffsysteme.....	75
3.3.1. Herstellung von Methylacetat durch reaktive Rektifikation.....	77
3.3.1.1. Thermodynamik des MeAc-Systems.....	77

3.3.1.2. Prozessdesign und Simulation des MeAc-Systems	78
3.3.2. Herstellung von Ethylacetat durch reaktive Rektifikation.....	82
3.3.2.1. Thermodynamik des EtAc-Systems	82
3.3.2.2. Prozessdesign und Simulation des EtAc-Systems	84
3.3.3. Herstellung von Propylacetat durch reaktive Rektifikation.....	88
3.3.3.1. Thermodynamik des PrAc-Systems	89
3.3.3.2. Prozessdesign und Simulation des PrAc-Systems	91
3.3.4. Herstellung von Butylacetat durch reaktive Rektifikation	93
3.3.4.1. Thermodynamik des BuAc-Systems	94
3.3.4.2. Prozessdesign und Simulation des BuAc-Systems.....	96
3.4. Funktionalitätenverteilung in einem partiell integrierten Verfahren - Designoptimierung mit mathematischen Algorithmen.....	100
3.4.1. Thermodynamik des MTBE-Systems.....	102
3.4.2. Prozessdesign des MTBE-Systems.....	103
3.4.3. Beschreibung des Optimierungsmodells	105
3.4.3.1. Modellierungskonzept	105
3.4.3.2. Zielfunktion.....	106
3.4.3.3. Berechnungsmethode	106
3.4.4. Numerische Untersuchungen.....	107
3.4.4.1. Ein externer Reaktor.....	107
3.4.4.2. Mehrere externe Reaktoren	115
3.4.4.3. Veränderte Reaktionskinetik	117
3.4.5. Regeln für die Prozesssynthese reaktiver Rektifikationsprozesse.....	120
3.5. Schlussfolgerungen für die Prozesssynthese.....	121
Kapitel 4 Produktbereiche bei reaktiven Extraktionen.....	126
4.1. Untersuchte Reaktionssysteme.....	126
4.2. Beschreibung des Simulationsmodells und graphische Darstellung	127
4.3. Auswertung der Simulationsstudien.....	130
4.3.1. Reaktionstyp A \rightleftharpoons B mit inerter Komponente.....	130
4.3.1.1. Mischungslücke zwischen Edukt und Produkt.....	130

4.3.1.2.	Mischungslücke zwischen reaktiver Komponente und Lösungsmittel.....	132
4.3.1.3.	Kombinierte Mischungslücken.....	133
4.3.1.4.	Heuristische Regeln für den Reaktionstyp $A \rightleftharpoons B$ mit inerter Komponente	135
4.3.2.	Reaktionstyp $A + B \rightleftharpoons 2C$ ohne inerte Komponente	136
4.3.2.1.	Mischungslücke zwischen den Edukten	136
4.3.2.2.	Mischungslücke zwischen Edukt und Produkt	138
4.3.2.3.	Kombinierte Mischungslücken.....	138
4.3.2.4.	Heuristische Regeln für den Reaktionstyp $A + B \rightleftharpoons 2C$ ohne inerte Komponente	139
4.3.3.	Reaktionstyp $2C \rightleftharpoons A + B$ mit inerter Komponente.....	140
4.3.3.1.	Mischungslücke zwischen den Produkten	141
4.3.3.2.	Mischungslücke zwischen Edukt und Produkt	143
4.3.3.3.	Mischungslücken zwischen den Produkten und Edukt und Produkt.....	145
4.3.3.4.	Mischungslücken zwischen dem Edukt und den Produkten.....	147
4.3.3.5.	Heuristische Regeln für den Reaktionstyp $2C \rightleftharpoons A + B$ mit inerter Komponente	148
4.3.4.	Allgemeine heuristische Regeln der Reaktivextraktion.....	149
Kapitel 5	Generische Prozesssynthesemethodik	150
5.1.	Vorgehensweise bei der Prozesssynthese integrierter reaktiver Trennverfahren	151
5.1.1.	Zieldefinition	151
5.1.2.	Thermodynamische Analyse	151
5.1.3.	Untersuchung der reaktiven Phase.....	153
5.1.4.	Identifizierung potenzieller Vorteile einer Integration	153
5.1.5.	Auswahl des Trennverfahrens	154
5.1.6.	Prüfung der Ausschlusskriterien.....	156
5.1.7.	Abschätzung der Produktbereiche bei vollständiger Integration	156
5.1.8.	Maßnahmen zur Gewährleistung der Produktqualität	157
5.1.9.	Verteilung von Funktionalitäten	157
5.1.10.	Nutzung des Designvorschlags für die Prozessoptimierung	158
5.2.	Anwendung der Prozesssynthesemethodik auf verschiedene Beispiele	159
5.2.1.	Beispiel 1: Umsatzsteigerung durch Verteilung von Funktionalitäten	160
5.2.2.	Beispiel 2: Selektivitätssteuerung durch Verteilung von Funktionalitäten.....	168
5.2.3.	Beispiel 3: Katalysator-Recycling durch Verteilung von Funktionalitäten	182

Kapitel 6 Fazit und Ausblick	191
Kapitel 7 Anhang	193
Anhang A Transformierte Koordinaten.....	193
Anhang B Reaktive Chromatographie	194
B.1 Bilanzgleichungen des differenziellen Volumenelements im TMBR-Modell.....	194
B.2 Fluid-Differentialgleichungen für die reaktive Chromatographie	195
B.3 Herleitung der dimensionslosen Reaktionsgeschwindigkeit $\Phi(X)$	198
B.4 Molmassen der idealen Systeme bei der reaktiven Chromatographie	200
B.5 Maximale Reinheiten für den Reaktionstyp $A \rightleftharpoons B+C$	201
B.6 Maximale Produktivitäten für den Reaktionstyp $A+B \rightleftharpoons C+D$	202
B.7 Umsatz-Reinheits-Diagramme für verschiedene Fälle	202
Anhang C Reaktive Rektifikation	226
C.1 Chemische Gleichgewichtskonstanten für die reaktive Rektifikation	226
C.2 Antoine Konstanten für die reaktive Rektifikation	226
C.3 NRTL-Parameter für die reaktive Rektifikation	227
C.4 Simulationsergebnisse der vier Veresterungsprozesse.....	230
C.5 Reaktionskinetik und Wilson-Ansatz für das MTBE-Beispiel	232
C.6 Verfahrenstechnische Beschränkungen bei der mathematischen Optimierung	234
Anhang D Reaktive Extraktion	237
D.1 Bezugssysteme bei den Dreistoffgemischen.....	237
D.2 Bezugssysteme bei den Vierstoffgemischen.....	237
D.3 Untersuchte Mischungslücken	238
D.4 UNIQUAC-Gleichung für die reaktive Extraktion	240
D.5 UNIQUAC-Parameter für die reaktive Extraktion	241
Literatur	243