

# Inhaltsverzeichnis

<b>1.</b>	<b>Grundlagen der „Technischen Chemie“ .....</b>	<b>1</b>
1.1	„Technische Chemie“ als Lehrfach und als wissenschaftliche Disziplin .....	1
1.2	Die wirtschaftlichen Grundlagen der chemischen Produktion .....	3
1.2.1	Der Erlös .....	5
1.2.2	Die Herstellkosten .....	5
1.3	Chemische Industriezweige .....	7
1.4	Die Produkte der chemischen Industrie und der chemischen Prozeßindustrie .....	11
<b>2.</b>	<b>Die Aufgaben der Chemischen Reaktionstechnik .....</b>	<b>14</b>
2.1	Den Erlös beeinflussende Faktoren .....	15
2.2	Der Produktionsumfang (production scale) als Kostenfaktor .....	16
2.2.1	Einfluß der Anlagengröße auf die Kosten .....	16
2.2.2	Einfluß der Kapazitätsauslastung auf die Kosten .....	18
2.3	Die Standortfrage .....	20
2.4	Gesichtspunkte zur Rohstoffwahl .....	22
2.4.1	Rohstoffe für die Schwefelsäureproduktion .....	23
2.4.2	Ethylen verdrängt Acetylen als Rohstoff .....	24
2.4.3	Veränderte Rohstoffbasis für einige Weichmacher- und Polymerprodukte .....	26
2.5	Chemische Reaktionstechnik entscheidet die Verfahrenswahl .....	28
2.5.1	Alternativverfahren für die Herstellung von Ethylenoxid .....	29
2.5.2	Kreislaufführung von Zwischenproduktbildnern .....	30
2.5.3	Art der Energiezuführung als Verfahrenskriterium .....	31
<b>3.</b>	<b>Wirtschaftlich optimale Prozeßführung .....</b>	<b>34</b>
3.1	Allgemeines zur Optimierung eines chemischen Prozesses .....	34
3.2	Gesichtspunkte zur Optimierung eines chemischen Gesamtprozesses .....	36
3.3	Minimierung der Gesamtkosten einer einzelnen Verfahrensstufe bei unterschiedlicher Abhängigkeit einzelner Kostenarten von einer Prozeßvariablen .....	38
3.4	Einfluß der Variablen in der chemischen Prozeßstufe auf die Kosten .....	42
3.4.1	Reaktionstechnische Grundbegriffe .....	42
3.4.2	Der Umsatz als Prozeßvariable bei der Kostenminimierung .....	49
3.4.3	Variation der Prozeßführung mittels der Anzahl der aufeinanderfolgenden Reaktionsstufen .....	51

<b>3.4.4</b>	<b>Die Reaktionstemperatur als Prozeßvariable bei der Optimierung der Reaktionsführung .....</b>	<b>53</b>
<b>3.4.5</b>	<b>Der Gesamtdruck als Prozeßvariable zur Kostenminimierung .....</b>	<b>57</b>
<b>3.4.6</b>	<b>Kostenbetrachtung bei variiertem Durchsatz .....</b>	<b>59</b>
<b>3.5</b>	<b>Technische Realisierung optimaler Reaktionsbedingungen .....</b>	<b>61</b>
<b>3.5.1</b>	<b>Technische Formen der Betriebsweise (diskontinuierlicher, kontinuierlicher und halbkontinuierlicher Betrieb) .....</b>	<b>62</b>
<b>3.5.1.1</b>	<b>Der Satz- oder Chargenbetrieb .....</b>	<b>62</b>
<b>3.5.1.2</b>	<b>Der Fließbetrieb .....</b>	<b>63</b>
<b>3.5.1.3</b>	<b>Der halbkontinuierliche Betrieb (Teilfließbetrieb) .....</b>	<b>64</b>
<b>3.5.2</b>	<b>Die Reaktandenkonzentration im Reaktor bei einphasigen Reaktionen .....</b>	<b>65</b>
<b>3.5.2.1</b>	<b>Grundtypen chemischer Reaktionsapparate .....</b>	<b>65</b>
<b>3.5.2.2</b>	<b>Reaktionsführung in kombinierten Reaktionsstufen .....</b>	<b>69</b>
<b>3.5.2.3</b>	<b>Der Konzentrationsverlauf im einphasigen Reaktionsmedium bei Teilfließbetrieb .....</b>	<b>70</b>
<b>3.5.3</b>	<b>Führung der Stoffströme in mehrphasigen Reaktionssystemen .....</b>	<b>72</b>
<b>3.5.3.1</b>	<b>Stoffstromführung in einem mehrphasigen Reaktionssystem mit nur einer strömenden Phase .....</b>	<b>72</b>
<b>3.5.3.2</b>	<b>Stofflicher Gleich- und Gegenstrom bei kontinuierlich betriebenen Mehrphasenreaktoren .....</b>	<b>75</b>
<b>3.5.4</b>	<b>Technische Reaktoren .....</b>	<b>77</b>
<b>3.5.5</b>	<b>Temperaturführung im Reaktor .....</b>	<b>81</b>
<b>3.5.5.1</b>	<b>Reaktoren mit ungelenktem Temperaturverlauf (Adiabatische Reaktionsführung) .....</b>	<b>82</b>
<b>3.5.5.2</b>	<b>Temperaturlenkung im Reaktor durch indirekten Wärmetausch .....</b>	<b>85</b>
<b>3.5.5.3</b>	<b>Möglichkeiten der Temperaturlenkung bei der heterogenen Gaskatalyse .....</b>	<b>91</b>
<b>4.</b>	<b>Physikalische und physikalisch-chemische Grundlagen der Chemischen Reaktionstechnik .....</b>	<b>95</b>
<b>4.1</b>	<b>Beziehung zwischen Zusammensetzung der Reaktionsmasse und Umsatz .....</b>	<b>95</b>
<b>4.2</b>	<b>Thermodynamik chemischer Reaktionen .....</b>	<b>99</b>
<b>4.2.1</b>	<b>Reaktionsenthalpie .....</b>	<b>99</b>
<b>4.2.1.1</b>	<b>Bildungsenthalpie .....</b>	<b>100</b>
<b>4.2.1.2</b>	<b>Verbrennungsenthalpie .....</b>	<b>101</b>
<b>4.2.1.3</b>	<b>Berechnung der Reaktionsenthalpie .....</b>	<b>101</b>
<b>4.2.2</b>	<b>Chemisches Gleichgewicht und Berechnung der Gleichgewichtskonstante .....</b>	<b>105</b>
<b>4.2.2.1</b>	<b>Freie Enthalpie und partielle molare freie Enthalpie .....</b>	<b>106</b>
<b>4.2.2.2</b>	<b>Die Gleichgewichtskonstante .....</b>	<b>110</b>
<b>4.2.2.3</b>	<b>Berechnung der Gleichgewichtskonstante <math>K_a</math> .....</b>	<b>113</b>
<b>4.2.3</b>	<b>Thermische Zustandsgleichung realer Gase .....</b>	<b>118</b>
<b>4.2.4</b>	<b>Berechnung der Fugazitäts-Koeffizienten .....</b>	<b>119</b>
<b>4.2.5</b>	<b>Berechnung des Gleichgewichtsumsatzes .....</b>	<b>123</b>

4.2.5.1	Einfluß des Druckes auf die Zusammensetzung der Reaktionsmischung im Gleichgewichtszustand .....	126
4.2.5.2	Berechnung von Simultangleichgewichten .....	127
4.2.6	Heterogene Gleichgewichte .....	129
4.2.7	Einfluß des Druckes auf die Reaktionsenthalpie .....	130
4.3	Grundlagen zur Berechnung des Wärmetransportes durch eine Trennwand .....	133
4.3.1	Wärmeleitung .....	134
4.3.2	Wärmeübergang .....	134
4.3.3	Wärmedurchgang .....	139
4.3.4	Berechnung der mittleren Temperaturdifferenz .....	141
4.3.5	Wärmestrahlung .....	142
4.4	Reaktionskinetik als Grundlage reaktionstechnischer Berechnungen .....	143
4.4.1	Geschwindigkeitsgleichung, Reaktionsordnung und Temperatur-abhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeit homogener Reaktionen .....	144
4.4.2	Kinetik zusammengesetzter (komplexer) Reaktionen .....	149
4.4.3	Experimentelle Bestimmung des Zeitgesetzes .....	153
4.4.3.1	Ermittlung der Reaktionsordnung und der Geschwindigkeitskonstante .....	153
4.4.3.2	Ermittlung des Frequenzfaktors und der Aktivierungsenergie .....	157
4.4.4	Statistische Versuchsplanung und -auswertung .....	157
5.	Allgemeine Stoff- und Wärmebilanzen für einphasige Reaktionssysteme	160
5.1	Stoffbilanz .....	161
5.1.1	Stofftransport durch Strömung (konvektiver Stofftransport) .....	162
5.1.2	Stofftransport durch Diffusion (konduktiver Stofftransport) .....	163
5.1.3	Differentialgleichung der Stoffbilanz für einphasige Reaktionssysteme .....	164
5.2	Wärmebilanz .....	168
6.	Der diskontinuierlich betriebene Rührkessel (Satzreaktor) mit vollständiger (idealer) Durchmischung der Reaktionsmasse .....	172
6.1	Stoff- und Wärmebilanz .....	172
6.2	Berechnung des Reaktionsvolumens eines diskontinuierlich betriebenen Idealkessels .....	176
6.3	Isotherme Reaktionsführung .....	177
6.3.1	Isotherme Reaktionsführung bei zusammengesetzten Reaktionen ..	182
6.3.1.1	Reversible Reaktionen .....	182
6.3.1.2	Parallelreaktionen .....	184
6.3.1.3	Folgereaktionen (Stufenreaktionen) .....	185
6.3.1.4	Ausbeute und Selektivität bei komplexen Reaktionen .....	186
6.4	Nicht-isotherme Reaktionsführung .....	188
6.4.1	Adiabatische Reaktionsführung .....	188
6.4.2	Polytropische Reaktionsführung .....	190

6.5	Optimale Temperaturführung .....	192
6.6	Optimale Wahl des Umsatzes .....	194
<b>7.</b>	<b>Kontinuierliche Reaktionsführung ohne Rückvermischung der Reaktionsmasse (ideales Strömungsrohr) .....</b>	<b>197</b>
7.1	Stoff- und Wärmebilanz des idealen Strömungsrohrs .....	197
7.2	Isotherme Reaktionsführung .....	201
7.2.1	Auswertung von Ergebnissen in Labor-Strömungsrohren .....	204
7.3	Nicht-isotherme Reaktionsführung .....	207
7.3.1	Adiabatische Reaktionsführung .....	207
7.3.2	Polytrope Reaktionsführung .....	209
7.4	Autotherme Betriebsweise von Rohrreaktoren .....	216
7.4.1	Adiabatisch betriebenes Strömungsrohr mit äußerem Wärmeaustausch zwischen Austrag- und Zulaufstrom .....	217
7.4.2	Rohrbündelreaktor mit innerem Wärmeaustausch zwischen Reaktionsmischung und Zulaufstrom .....	218
7.5	Abweichung vom Verhalten eines idealen Strömungsrohrs .....	222
<b>8.</b>	<b>Kontinuierliche Reaktionsführung mit vollständiger Rückvermischung der Reaktionsmasse im Reaktor (Kontinuierlich betriebener Idealkessel und Kaskade) .....</b>	<b>223</b>
8.1	Stoffbilanz des kontinuierlich betriebenen Idealkessels .....	223
8.2	Serienschaltung von kontinuierlich betriebenen Idealkesseln in einer Kaskade .....	229
8.2.1	Algebraische Berechnungsmethoden für Kaskaden .....	232
8.2.2	Graphische Berechnungsmethoden für Kaskaden .....	236
8.3	Wärmebilanz des kontinuierlich betriebenen Idealkessels .....	240
8.4	Berechnung eines kontinuierlich betriebenen Idealkessels bei der Durchführung komplexer Reaktionen .....	242
8.5	Stabilitätsverhalten von kontinuierlich betriebenen Idealkesseln .....	246
8.5.1	Adiabatisch kontinuierlich betriebener Idealkessel .....	247
8.5.2	Kontinuierlich betriebener Idealkessel mit Kühlung .....	251
8.6	Abweichungen technischer kontinuierlich betriebener Rührkessel vom Verhalten eines kontinuierlich betriebenen Idealkessels .....	261
<b>9.</b>	<b>Vergleichende Betrachtung von idealem Strömungsrohr, kontinuierlich betriebenem Idealkessel und Kaskade von kontinuierlich betriebenen Idealkesseln .....</b>	<b>262</b>
9.1	Kriterien für die Wahl des Reaktortyps bei einfachen und zusammengesetzten Reaktionen .....	262
9.2	Der Reaktionsweg bei zusammengesetzten Reaktionen .....	268
9.3	Weitere Möglichkeiten der Stoffstromführung bei zusammengesetzten Reaktionen und kontinuierlicher Betriebsweise .....	270
<b>10.</b>	<b>Der halb-kontinuierlich betriebene ideal durchmischte Rührkessel (Teilfließbetrieb) .....</b>	<b>273</b>

<b>11.</b>	<b>Verweilzeitverteilung und Vermischung in kontinuierlich betriebenen Reaktoren .....</b>	277
11.1	Verweilzeit-Summenfunktion und Verweilzeitspektrum .....	277
11.2	Experimentelle Ermittlung der Verweilzeit-Summenkurve und des Verweilzeitspektrums .....	279
11.3	Verweilzeitverhalten des kontinuierlich betriebenen Idealkessels, einer Kaskade von kontinuierlich betriebenen Idealkesseln und des laminar durchströmten Rohres .....	282
11.3.1	Verweilzeitverhalten des kontinuierlich betriebenen Idealkessels ..	283
11.3.2	Verweilzeitverhalten einer Kaskade von kontinuierlich betriebenen Idealkesseln .....	283
11.3.3	Verweilzeitverhalten eines laminar durchströmten Rohres .....	285
11.4	Verweilzeitverhalten realer Systeme .....	288
11.4.1	Verweilzeitverhalten realer, kontinuierlich betriebener Rührkessel ..	288
11.4.2	Verweilzeitverhalten realer Strömungsrohre .....	288
11.4.2.1	Diffusionsmodell .....	289
11.4.2.2	Kaskadenmodell .....	295
11.5	Umsatz in nicht idealen (realen) Reaktoren .....	296
11.5.1	Mikrovermischung und Makrovermischung (Segregation) .....	296
11.5.2	Berechnung des Umsatzes bei bekanntem Verweilzeitverhalten und bekanntem Segregationsgrad .....	298
11.5.3	Berechnung des Umsatzes nach dem Diffusionsmodell .....	302
<b>12.</b>	<b>Chemische Reaktionen in mehrphasigen Systemen .....</b>	306
12.1	Effektive Reaktionsgeschwindigkeit .....	308
<b>13.</b>	<b>Heterogene Reaktionen an der Grenzfläche zwischen einer fluiden und einer festen Phase .....</b>	313
13.1	Äußere Transportvorgänge bei heterogenen Reaktionen .....	314
13.1.1	Einfluß äußerer Transportvorgänge auf die Temperatureinstellung an der äußeren Oberfläche von Feststoffen .....	316
13.1.2	Beziehungen zur Berechnung von Stoff- und Wärmeübergangskoeffizienten .....	319
13.2	Innere Transportvorgänge bei heterogenen Reaktionen .....	322
13.2.1	Stofftransport und chemische Reaktion innerhalb poröser Feststoffe .....	323
13.2.2	Stofftransport, Wärmetransport und chemische Reaktion innerhalb poröser Feststoffe .....	334
13.3	Zusammenwirken äußerer Transportvorgänge, innerer Transportvorgänge und chemischer Reaktionen .....	337
13.3.1	Effektive Diffusionskoeffizienten in porösen Festkörpern .....	345
<b>14.</b>	<b>Heterogen katalysierte Reaktionen .....</b>	348
14.1	Allgemeines über feste Katalysatoren .....	348
14.2	Reaktionsmechanismen heterogen katalysierter Reaktionen .....	350
14.3	Reaktoren für heterogen katalysierte Reaktionen .....	353

14.3.1	Festbettreaktoren .....	354
14.3.1.1	Ausführungsformen .....	354
14.3.1.2	Stoff- und Wärmebilanzen für Festbettreaktoren .....	357
14.3.1.3	Isotherme Reaktionsführung im Festbettreaktor .....	361
14.3.1.4	Adiabatische Reaktionsführung im Festbettreaktor .....	363
14.3.1.5	Polytrope Reaktionsführung .....	368
14.3.2	Fließbettreaktoren .....	373
15.	Nicht-katalysierte heterogene Reaktionen zwischen fluiden Stoffen und Feststoffen .....	381
15.1	Modell mit schrumpfendem Feststoffkern .....	384
15.1.2	Umsatz als Funktion der Zeit für ein einzelnes Feststoffteilchen bei konstanter Zusammensetzung der fluiden Phase .....	387
15.2	Berechnung von Reaktoren für Reaktionen zwischen fluiden und festen Reaktionspartnern .....	392
15.2.1	Gleichförmige Zusammensetzung der fluiden Phase im gesamten Reaktor .....	393
15.2.2	Veränderliche Zusammensetzung der fluiden Phase im Reaktor .....	394
16.	Reaktionstechnik der Polyreaktionen .....	399
16.1	Besonderheiten der technischen Herstellung von Polymeren .....	399
16.2	Kinetik der Polyreaktionen .....	403
16.2.1	Molare Masse und Polymerisationsgrad .....	403
16.2.2	Radikalische Polymerisation .....	404
16.2.3	Ionische Polymerisation .....	410
16.2.4	Polykondensation, Polyaddition .....	412
16.3	Einfluß des Reaktortyps auf die Verteilung der molaren Massen ..	415
16.3.1	Diskontinuierliche Polymerisation .....	415
16.3.2	Kontinuierliche Polymerisation .....	419
16.4	Technische Reaktionsführung .....	420
16.4.1	Kontinuierliche Lösungspolymerisation von Styrol .....	420
16.4.2	Dynamisches Verhalten eines kontinuierlich betriebenen Polymerisationsreaktors .....	422
16.4.3	Copolymerisation Styrol/Acrylnitril .....	426
16.4.4	Kontinuierliche Herstellung von Polyethylenterephthalat .....	428
16.4.5	Perlpolymerisation .....	430
16.5	Schlußbemerkung .....	434
Anhang .....	435	
Literaturverzeichnis .....	439	
Sachverzeichnis .....	447	