

*G. Herbert Vogel*

# **Verfahrensentwicklung**

Von der ersten Idee zur chemischen  
Produktionsanlage

Unter Mitarbeit von  
Dr.-Ing. Gerd Kaibel

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung</b>	<b>1</b>
1.1	Das Ziel industrieller Forschung und Entwicklung	3
1.2	Die Produktionsstruktur der chemischen Industrie	4
1.3	Die Aufgabe der Verfahrensentwicklung	12
1.4	Ideenfindung	12
<b>2</b>	<b>Die chemische Produktionsanlage und ihre Bestandteile</b>	<b>15</b>
2.1	Katalysator	18
2.1.1	Katalysatorperformance	22
2.1.1.1	Selektivität	22
2.1.1.2	Aktivität	22
2.1.1.3	Lebensdauer	24
2.1.1.4	Mechanische Festigkeit	27
2.1.1.5	Herstellkosten	27
2.1.2	Charakterisierung von Katalysatoren	30
2.1.2.1	Chemische Zusammensetzung	30
2.1.2.2	Art des Trägermaterials	31
2.1.2.3	Promotorenzusätze	31
2.1.2.4	Phasenzusammensetzung	32
2.1.2.5	Partikelgröße	32
2.1.2.6	Hohlraumstruktur	33
2.1.2.7	Oberflächenstruktur	33
2.1.2.8	Nebenprodukte im Feed	33
2.1.3	Kinetik der Heterogenkatalyse	34
2.1.3.1	Filmdiffusion	35
2.1.3.2	Porendiffusion	37
2.1.3.3	Sorption	41
2.1.3.4	Oberflächenreaktionen	45
2.1.3.5	Porendiffusion und chemische Reaktion	47
2.1.3.6	Filmdiffusion und chemische Reaktion	52
2.2	Reaktor	53
2.2.1	Grundlagen der chemischen Reaktionstechnik	54
2.2.1.1	Ideale Reaktoren	58
2.2.1.2	Reaktoren mit realem Verhalten	62

2.2.1.3	Nicht-isotherme Reaktoren	70
2.2.1.4	Ausführungsformen von Reaktoren	76
2.3	Produktaufarbeitung (thermische- und mechanische Trennverfahren)	83
2.3.1	Wärmetübertragung, Verdampfung, Kondensation	83
2.3.1.1	Grundlagen	83
2.3.1.2	Dimensionierung	89
2.3.2	Destillation, Rektifikation	98
2.3.2.1	Grundlagen der Gas/Flüssig-Gleichgewichte	98
2.3.2.2	Einstufige Verdampfung	103
2.3.2.3	Mehrstufige Verdampfung (Rektifikation)	106
2.3.2.4	Entwurf von Destillationsanlagen	112
2.3.3	Absorption und Desorption, Stripping, Trägerdampfdestillation	140
2.3.3.1	Grundlagen	140
2.3.3.2	Dimensionierung	141
2.3.3.3	Desorption	146
2.3.3.4	Trägerdampfdestillation	147
2.3.4	Extraktion	148
2.3.4.1	Grundlagen	149
2.3.4.2	Dimensionierung	150
2.3.4.3	Apparatives	158
2.3.5	Kristallisation	160
2.3.5.1	Grundlagen	160
2.3.5.2	Lösungskristallisation	163
2.3.5.3	Schmelzkristallisation	165
2.3.5.4	Dimensionierung	168
2.3.6	Adsorption, Chemisorption	170
2.3.7	Ionentausch	171
2.3.8	Trocknung	172
2.3.9	Sonderverfahren für fluide Phasen	174
2.3.10	Mechanische Verfahren	174
2.3.10.1	Abtrennung von Feststoffen aus Flüssigkeiten	175
2.4	Rohrleitungssystem, Pumpen, Kompressoren	178
2.4.1	Grundlagen der Hydrodynamik	178
2.4.2	Einphasenströmung in Rohrleitungen	180
2.4.3	Flüssigkeitspumpen	185
2.4.4	Verdichter	190
2.5	Energieversorgung	192
2.5.1	Dampf- und Kondensatsystem	192
2.5.2	Elektrische Energie	194
2.5.3	Kühlwasser	194
2.5.4	Kälteenergie	195
2.5.5	Druckluft	195
2.6	Produktversorgung und Lagerung	196
2.7	Rückstandsentsorgung	198
2.7.1	Abgassammelsystem und Fackel	198

2.7.2	Verbrennungsanlagen für gasförmige und flüssige Rückstände	198
2.7.3	Spezielle Verfahren zur Abluftreinigung	200
2.7.4	Abwasserreinigung und -entsorgung	203
2.7.4.1	Kläranlage	203
2.7.4.2	Spezielle Verfahren der Abwasserreinigung	206
2.7.5	Slopsystem	207
2.8	Mess-, Steuerungs- und Regelungstechnik	209
2.8.1	Messtechnik	209
2.8.1.1	Temperaturmessung	209
2.8.1.2	Druckmessung	212
2.8.1.3	Füllstandsmessung	212
2.8.1.4	Durchflussmessung	213
2.8.1.5	Analysen	217
2.8.2	Regelungstechnik	218
2.8.3	Steuerungstechnik	225
2.9	Anlagensicherheit	228
2.10	Werkstoffauswahl	232
2.10.1	Wichtige Werkstoffe und ihre Eigenschaften	234
2.10.1.1	Mechanische Eigenschaften und thermische Beständigkeit	236
2.10.1.2	Korrosionsverhalten	238
2.10.2	Metallische Werkstoffe	242
2.10.3	Nichtmetallische Werkstoffe	243
<b>3</b>	<b>Verfahrensunterlagen</b>	245
3.1	Chemische Daten	247
3.1.1	Reaktionswärme	247
3.1.2	Thermodynamisches Gleichgewicht	248
3.1.3	Kinetik	253
3.1.4	Selektivität und Umsatz als Funktion der Prozessparameter	265
3.2	Massenbilanz	269
3.3	Stoffdaten	271
3.3.1	Reinstoffdaten	272
3.3.2	Mischungsdaten	273
3.4	Aufarbeitung	275
3.5	Patent- und Lizenzsituation	275
3.6	Entwicklungskosten	279
3.7	Standort	280
3.8	Marktsituation	280
3.9	Rohstoffe	282
3.10	Anlagenkapazität	285
3.11	Entsorgungssituation	286
3.12	Endprodukt	287

<b>4</b>	<b>Ablauf einer Verfahrensentwicklung</b>	289
4.1	Die Verfahrensentwicklung als iterativer Prozess	291
4.2	Die Aufstellung des ersten Verfahrenskonzeptes	294
4.2.1	Handwerkszeuge	297
4.2.1.1	Datenbanken	297
4.2.1.2	Simulationsprogramme	298
4.2.1.3	Expertensysteme	302
4.3	Die Prüfung der Einzelschritte	304
4.4	Mikroplant, Schnittstelle zwischen Labor und Technikum	306
4.5	Die Prüfung des Gesamtverfahrens im Technikum	307
4.5.1	Miniplant-Technik	307
4.5.1.1	Einleitung	307
4.5.1.2	Aufbau	308
4.5.1.3	Grenzen der Miniaturisierung	310
4.5.1.4	Grenzen der Miniplanttechnik	312
4.5.2	Pilotanlage	312
<b>5</b>	<b>Planung, Errichtung und Betriebnahme einer Chemieanlage</b>	315
5.1	Allgemeiner Ablauf einer Projektabwicklung	317
5.2	Wichtige Teilespekte bei der Projektabwicklung	324
5.2.1	Genehmigung	324
5.2.2	Sicherheitsstudien	327
5.2.3	Störfallverordnung	331
5.2.4	R&I-Fließbilder	332
5.2.5	Funktionspläne	333
5.2.6	Technische Blätter	334
5.2.7	Modellbau	334
5.2.8	Erstellung weiterer wichtiger Unterlagen	336
5.3	Commissioning	336
5.4	Inbetriebnahme	337
<b>6</b>	<b>Verfahrensbewertung</b>	339
6.1	Erstellung von Studien	341
6.1.1	Kurzfassung	342
6.1.2	Grundfließbild	342
6.1.3	Verfahrensbeschreibung und Verfahrensfließbild	342
6.1.4	Entsorgungsfließbild	344
6.1.5	Investitionsschätzung	345
6.1.5.1	Einleitung	345
6.1.5.2	Investitionen (ISBL)	346
6.1.5.3	Investitionen (OSBL)	349
6.1.5.4	Infrastrukturmaßnahmen	349
6.1.6	Berechnung der Herstellkosten	349
6.1.6.1	Einsatzstoffkosten	350
6.1.6.2	Energiekosten	351

6.1.6.3	Entsorgungskosten	357
6.1.6.4	Personalkosten	358
6.1.6.5	Werkstattkosten	359
6.1.6.6	Sonstige Kosten	359
6.1.6.7	Kapitalabhängige Kosten (Abschreibung)	359
6.1.7	Technologiebewertung	360
6.1.8	Maßnahmen zur Erhöhung der technischen Zuverlässigkeit	362
6.1.9	Experimenteller Ausarbeitungsstand	368
6.2	Rentabilität	368
6.2.1	Statische Rentabilität	368
6.2.2	Dynamische Rentabilität	370
6.3	Wirtschaftliches Risiko	371
6.3.1	Sensitivitätsanalyse	372
6.3.2	Amortisationszeit	372
6.3.3	Cash-Flow	373

## 7 Trends in der Verfahrensentwicklung 375

8	<b>Anhang</b>	381
8.1	Mathematische Formeln	383
8.2	Naturkonstanten	392
8.3	Elementzusammenstellung mit relativen Atommassen und Bindungsradien sowie Schmelz- und Siedepunkten	392
8.4	Umrechnung verschiedener Maßeinheiten in SI-Einheiten	395
8.5	Wichtige Zusammenhänge zwischen abgeleiteten Einheiten und Basiseinheiten	400
8.6	Umrechnung von Konzentrationsangaben binärer Mischungen der gelösten Komponente A im Lösungsmittel B	400
8.7	Van-der-Waals-Konstanten $a$ und $b$ und kritische Werte für einige Gase in alphabetischer Reihenfolge	401
8.8	Wärmekapazitäten einiger Stoffe und ihre Temperaturabhängigkeit	402
8.9	Thermodynamische Daten ausgewählter organischer Verbindungen	403
8.10	Größenordnung der Reaktionsenthalpie $\Delta_R H$ ausgewählter technischer Reaktionen	404
8.11	Antoine-Parameter ausgewählter organischer Verbindungen	407
8.12	Eigenschaften von Wasser	409
8.12.1	Formeln für die Berechnung der physikalisch-chemischen Eigenschaften von flüssigem Wasser zwischen 0 und 150 °C	409
8.12.2	Stoffwerte von Wasser	412
8.12.3	Dichte $\rho / \text{kg m}^{-3}$ von Wasser bei verschiedenen Temperaturen und Drücken	414
8.12.4	Spezifische Wärmekapazität $c_p/\text{kJ kg}^{-1} \text{K}^{-1}$ von Wasser bei verschiedenen Temperaturen und Drücken	415
8.12.5	Dynamische Viskosität $\eta/10^{-6} \text{ kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ von Wasser bei verschiedenen Temperaturen und Drücken	416

- 8.12.6 Selbstdiffusionskoeffizient  $D/m^2\ s^{-1}$  von Wasser  
bei verschiedenen Temperaturen und Drücken 417
- 8.12.7 Wärmeausdehnungskoeffizient  $\beta/10^{-3}\ K$  von Wasser  
bei verschiedenen Temperaturen und Drücken 418
- 8.12.8 Wärmeleitfähigkeit  $\lambda/10^{-3}\ W\ m^{-1}\ K^{-1}$  von Wasser bei verschiedenen  
Temperaturen und Drücken 419
- 8.12.9 Negativer dekadischer Logarithmus des Ionenproduktes  
von Wasser  $pK_w/mol^2\ kg^{-2}$  [Marshall 1981] von Wasser  
bei verschiedenen Temperaturen und Drücken 420
- 8.12.10 Relative statische Dielektrizitätskonstante  $\epsilon_r$  von Wasser als Funktion  
von Druck und Temperatur 420
- 8.13 Eigenschaften von trockener Luft  
(Molmasse:  $M = 28,966\ g\ mol^{-1}$ ) 421
- 8.13.1 Realgasfaktoren  $r = pV/RT$  von trockener Luft bei verschiedenen  
Temperaturen und Drücken 422
- 8.13.2 Spezifische Wärmekapazität  $c_p$  in  $kJ\ kg^{-1}\ K^{-1}$  von trockener Luft  
bei verschiedenen Temperaturen und Drücken 422
- 8.13.3 Dynamische Viskosität  $\eta/10^{-3}\ mPa\ s$  von trockener Luft  
bei verschiedenen Temperaturen und Drücken 423
- 8.13.4 Wärmeleitfähigkeit  $\lambda/W\ m^{-1}\ K^{-1}$  von trockener Luft  
bei verschiedenen Temperaturen und Drücken 423
- 8.14 Dimensionslose Kennzahlen 424
- 8.15 Wichtige gesetzliche Regelungen beim Umgang mit Stoffen 426
- 8.16 Gefahren- und Sicherheitshinweise 426
- 8.17 Die 25 größten Unternehmen der Welt im Jahr 2000 430
- 8.18 Die 25 größten Unternehmen in Deutschland im Jahr 2000 431
- 8.19 Oberflächenuntersuchungsmethoden 432
- 9 Literatur** 435
- Register** 475