

# Lehrprofil Technische Chemie

4. Auflage  
Oktober 2014





# Inhalt

Kapitel 1: Einführung .....	3
Relevanz .....	
Wichtige Beispiele für Anwendungen in der Chemieproduktion.....	
Aktuelle Beispiele: Chemie für die Energie- und Rohstoffwende .....	
Historische Beispiele.....	
Technische Chemie: Definition, Bedeutung, Beispiele .....	
Ausbildung in Technischer Chemie ist wichtig für alle Chemiestudenten und Ingenieure - sagt der Absolventenmarkt .....	
Was macht die Technische Chemie in der Lehre? .....	
Die drei wesentlichen Kompetenzfelder .....	
Kapitel 2: Thermische und mechanische Grundoperationen .....	9
2.1 Zielsetzung .....	
2.2 Inhaltsbeschreibung .....	
2.2.1 Verfahrenstechnische Grundlagen .....	
2.2.2 Thermische Grundoperationen.....	
2.2.3 Mechanische Grundoperationen .....	
2.3 Vorlesungsgliederung.....	
2.3.1 Verfahrenstechnische Grundlagen .....	
2.3.2 Thermische Grundoperationen.....	
2.3.3 Mechanische Grundoperationen .....	
2.4 Hinweise zu Umfang und Schwerpunktsetzung.....	
2.5 Literatur.....	
2.5.1 Einführende Literatur .....	
2.5.2 Weiterführende Literatur .....	
Kapitel 3: Chemische Reaktionstechnik .....	15
3.1 Zielsetzung .....	
3.2 Inhaltsbeschreibung .....	
3.2.1 Reaktionsanalyse .....	
3.2.2 Reaktormodellierung/-auslegung.....	
3.3 Vorlesungsgliederung.....	
3.3.1 Reaktionsanalyse .....	
3.3.2 Chemische Reaktoren und ihre Auslegung.....	
3.4 Hinweise zu Umfang und Schwerpunktsetzung .....	
3.5 Literatur.....	
3.5.1 Einführende Literatur .....	
3.5.2 Weiterführende Literatur .....	

Kapitel 4: Chemische Prozesstechnologien ..... 21

- 4.1 Zielsetzung .....
- 4.2 Inhaltsbeschreibung .....
- 4.2.1 Exemplarische Beschreibung wichtiger Prozesse.....
- 4.2.2 Grundlagen der Verfahrensentwicklung .....
- 4.3 Vorlesungsgliederung.....
- 4.3.1 Stoffliche Aspekte .....
- 4.3.2 Verfahrensentwicklung .....
- 4.4 Hinweise zu Umfang und Schwerpunktsetzung .....
- 4.5 Literatur.....
- 4.5.1 Einführende Literatur .....
- 4.5.2 Weiterführende Literatur .....
- 4.5.3 Literatur zur Biotechnologie.....

Kapitel 5: Vorlesungsbegleitende Lehrveranstaltungen..... 27

- 5.1 Technisch-chemisches Praktikum .....
- 5.2 Exkursionen in die chemische und chemisch-pharmazeutische Industrie .....
- 5.3 Moderne Lehrmethoden (E-Learning / Blended Learning).....
- 5.4 Literatur:.....

# Kapitel 1: Einführung

## Relevanz

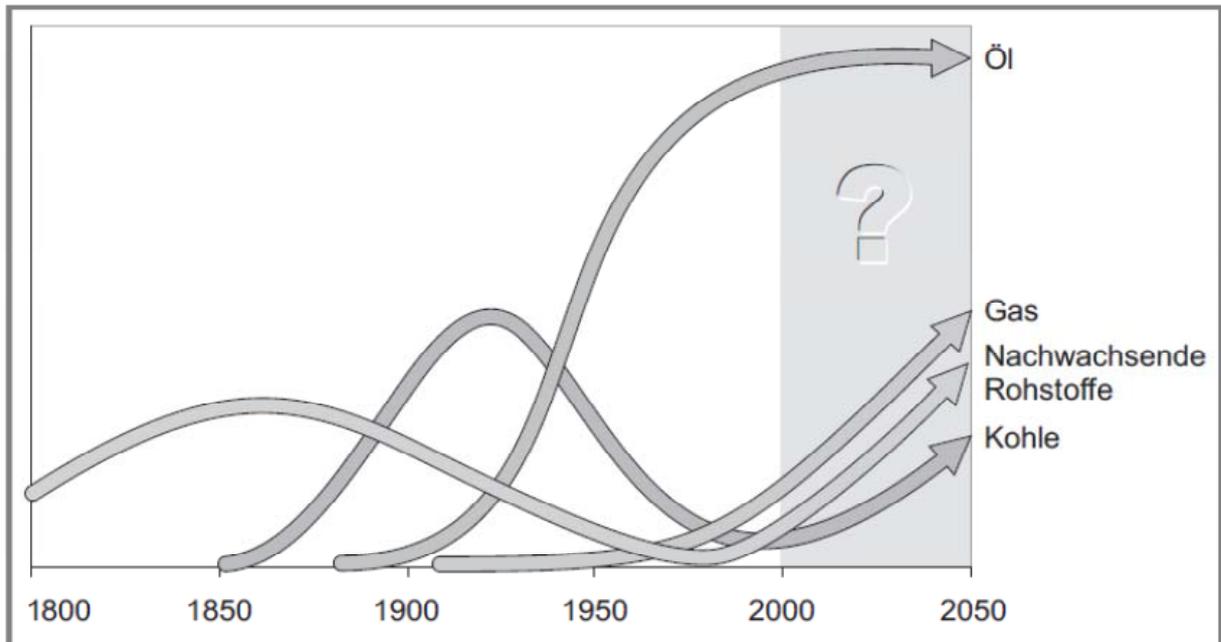
Die Entwicklung Deutschlands zu einem führenden Produktionsstandort ist untrennbar mit der Forschung und Lehre in der Technischen Chemie verbunden. Die chemische Industrie, der Fahrzeug- und Flugzeugbau, moderne Energiespeichertechnologien sowie viele andere Anwendungsfelder und Branchen sind ganz wesentlich auf die Erkenntnisse der Technischen Chemie angewiesen. Sie erschließt neue Wachstumsfelder und Produkte, insbesondere im Rahmen des Übergangs von erdöl- und erdgasbasierten Verfahren hin zu erneuerbaren Rohstoffen, nachhaltigen Produktionsprozessen und effizienten Methoden der Rohstoffgewinnung und -verarbeitung, wie er für unsere Gesellschaft notwendig ist. Die Technische Chemie ist damit einer der wichtigsten Impulsgeber für chemisch-technische Produkt- und Prozessinnovationen am Standort Deutschland.

## Wichtige Beispiele für Anwendungen in der Chemieproduktion

Die chemische Industrie ist ein wesentlicher Eckpfeiler der industriellen Produktion in Deutschland. Ein großer Anteil ihrer Produktionsprozesse beruht auf Verfahren der homogenen, heterogenen sowie Bio- und Elektrokatalyse. Die Erzeugnisse dieser Prozesse sind für eine moderne Gesellschaft unverzichtbar. So liefert z.B. die erdölverarbeitende Industrie neben Kraftstoffen auch petrochemische Zwischenprodukte, die für die Herstellung von Hochleistungspolymeren, Leichtbaumaterialien und den Flugzeugbau benötigt werden. Die chemische Industrie erzeugt wesentliche Materialien für den Automobilbau ebenso wie Reinstsilizium für Speicherchips in der Computerproduktion oder für die Photovoltaik. Die Bandbreite ihrer Produkte umfasst moderne Pharmaka und Kosmetika, Tenside, Dünger und Pflanzenschutzmittel, ebenso wie wichtige Inhaltsstoffe von Haushalts- und Konsumgütern. Kleine und mittelständische Unternehmen produzieren z.B. innovative Beschichtungen und Verpackungsmaterialien. Die Einhaltung aktueller Umweltstandards zur Luftreinhaltung in Kraftwerken und Automobilen ist ohne moderne, robuste und langlebige Katalysatorstechnologien nicht denkbar.

## Aktuelle Beispiele: Chemie für die Energie- und Rohstoffwende

Der weltweit ansteigende Ausstoß von Treibhausgasen und eine zunehmende Verknappung von Rohstoffen stellen Industrie und Gesellschaft vor neue Herausforderungen. Die Entwicklung neuer Technologien für eine effiziente und nachhaltige Energie- und Rohstoffbereitstellung ist unabdingbar. Die Technische Chemie liefert dafür in Forschung und Entwicklung essentielle Beiträge, u.a. durch die Weiterentwicklung der Prinzipien von „Green Chemistry & Engineering“. Außerdem werden z.B. neuartige elektrochemische Energiespeichersysteme in Form von Brennstoffzellen und Redox-Flow-Batterien entwickelt. Zudem wird die effiziente Umwandlung von Solar- und Windstrom in Wasserstoff und Kohlenwasserstoffe erforscht. Einen weiteren Schwerpunkt bilden neue Technologien, um mit Hilfe von Biomasse die Abhängigkeit von Erdöl und Erdgas zu überwinden. So werden z.B. Methoden zum Aufschluss von Lignocellulose (Stroh, Holz) erforscht, um aus den enthaltenen Polysacchariden monomere Zucker und andere Plattformchemikalien zu gewinnen.



**Abb. 1:** Entwicklung der Rohstoffbasis für die chemische Industrie (qualitativ) / Quelle: R. Diercks et al, *Chemie Ingenieur Technik* 2007, 79, No. 5, DOI: 10.1002/cite.200700025

## Historische Beispiele

Bahnbrechende Erkenntnisse der technischen Chemie bilden seit Jahrzehnten die Grundlage für eine führende Rolle Deutschlands in der chemischen Produktion:

### **Ammoniaksynthese: Düngemittel aus Luft und Erdgas oder Kohle**

Eine der größten Erfolgsgeschichten der technischen Chemie ist die Entwicklung der großtechnischen Ammoniaksynthese durch die BASF im Jahre 1913. Die katalytische Umwandlung von Wasserstoff und Stickstoff zu Ammoniak im Haber-Bosch-Verfahren ist der wesentliche Schritt für die Produktion von künstlichem Stickstoffdünger. Nur mit Hilfe dieses Verfahrens ist es möglich, die stetig wachsende Weltbevölkerung weiter zu ernähren. Mittlerweile werden jährlich ca. 140 Millionen Tonnen Ammoniak produziert. Bislang wurden für bahnbrechende Arbeiten zur technischen Stickstofffixierung bereits drei Nobelpreise verliehen (Fritz Haber, Carl Bosch, Gerhard Ertl).

### **Polyolefine: Aus wenigen Bausteinen eine Vielzahl unterschiedlicher Kunststoffe**

Auch die Herstellung vieler Kunststoffe wie Polyethylen und Polypropylen ist eng verknüpft mit deutschen Forschungs- und Entwicklungsarbeiten. Bereits 1942 entstand in Deutschland die erste Pilotanlage für die Hochdruckpolymerisation von Ethylen. Sie erforderte noch Drücke von mehreren 1000 bar. Ein von Karl Ziegler und Giulio Natta entwickeltes Verfahren, das die Ethylen-Polymerisation bei Normaldruck ermöglicht, wurde 1963 mit dem Nobelpreis für Chemie gewürdigt. Auch die metallocen-katalysierte Polypropylenproduktion beruht wesentlich auf den Arbeiten dreier deutscher Forscher in der Technischen Chemie: W. Kaminsky, K.R. Meyer und K.H. Reichert. Metallocen-Katalysatoren ermöglichen eine genaue Kontrolle der molaren Masse und Verteilung der Co-Monomere. Weltweit wurden im Jahr 2011 über 52 Millionen Tonnen Polypropylen neben über 65 Millionen Tonnen Polyethylen hergestellt.

## **Chlorherstellung: Vom alten Quecksilberverfahren zum Membranverfahren**

Mit einer Welt-Jahresproduktion von über 56 Millionen Tonnen ist Chlor eine der wichtigsten Basischemikalien. Auch für viele Zwischenstufen industrieller Prozesse ist Chlor unverzichtbar. Die Herstellung von Chlor mittels der Chloralkalielektrolyse ist ein Paradebeispiel für elektrochemische Produktionsverfahren. Technische Chemiker<sup>1</sup> lieferten seit Anbeginn wichtige Beiträge, um dieses Verfahren zu optimieren. Noch zur Jahrtausendwende dominierten in der industriellen Produktion das Amalgamverfahren, das Quecksilber-Elektroden verwendet, sowie das Diaphragma-Verfahren, bei dem ein Asbest-Diaphragma den Kathoden- vom Anodenraum trennt. Heutzutage wird die technische Chloralkalielektrolyse überwiegend mittels moderner Membranverfahren durchgeführt, die ohne den Einsatz von giftigem Quecksilber und krebserregendem Asbest auskommen. Die jüngste Weiterentwicklung der Membranverfahren besteht im Einsatz einer sogenannten Sauerstoffverzehrkathode anstelle der Wasserstoff entwickelnden Kathode, wodurch die Zellspannung um etwa 1 V gesenkt und eine Energieeinsparung von ca. 30 % erreicht werden kann.

## **Technische Chemie: Definition, Bedeutung, Beispiele**

Grundlage all dieser Entwicklungen ist die Technische Chemie, die Methoden und Verfahren erforscht, mit denen sich Grundlagenforschung und industrielle Anwendung verbinden lassen. Ausgehend von fundamentalen chemischen Erkenntnissen entwickelt sie die technisch einsetzbaren Produktionsprozesse. Gleichzeitig formuliert sie aus den im technischen Maßstab beobachteten Phänomenen und Notwendigkeiten neue Fragestellungen für die physikalische und chemische Grundlagenforschung.

Mit Methoden der Technischen Chemie werden beispielsweise komplexe kinetische Modelle für technisch relevante Reaktionen entwickelt. Koppelt man diese an Modelle zum Stoff- und Wärmetransport, lassen sich unter Nutzung fluiddynamischer Gleichungen Multiskalenmodelle erstellen und lösen. Sie sollen alle in einem chemischen Reaktor ablaufenden Prozesse zeit- und orts aufgelöst beschreiben. Für komplexe chemische Systeme ermittelt die Technische Chemie auch die für die Prozessbeschreibung notwendigen Stoffdaten, z.B. in Stoffgemischen und unter realen Prozessbedingungen, und bildet diese in Modellen ab. Mit Hilfe all dieser Informationen können sowohl Katalysatoren als auch Reaktoren und ganze Produktionsprozesse gezielt optimiert werden.

Im Bereich der Katalyse erforscht die Technische Chemie u.a. das Verhalten von Katalysatoren unter realen Prozessbedingungen wie hohen Drücken und Temperaturen sowie deren Langzeitstabilität. Sie bildet dazu das reale Katalysatorverhalten unter Laborbedingungen nach, beschreibt es mit Hilfe mathematischer Modelle und untersucht Ursachen der Katalysatoralterung mittels physikochemischer Analysemethoden. Daraus werden Lösungsvorschläge für die Produktion von optimierten Katalysatoren sowie Regenerierungs- und Betriebsstrategien entwickelt. Diese sorgen dafür, dass Katalysatoren in Kraftwerken, Automobilen und Brennstoffzellen nicht nur Tage und Wochen, sondern über Jahre hinweg zuverlässig funktionieren. Gleichzeitig fließen Fragen zu den Ursachen des beobachteten Katalysatorverhaltens wiederum in die chemische Grundlagenforschung ein.

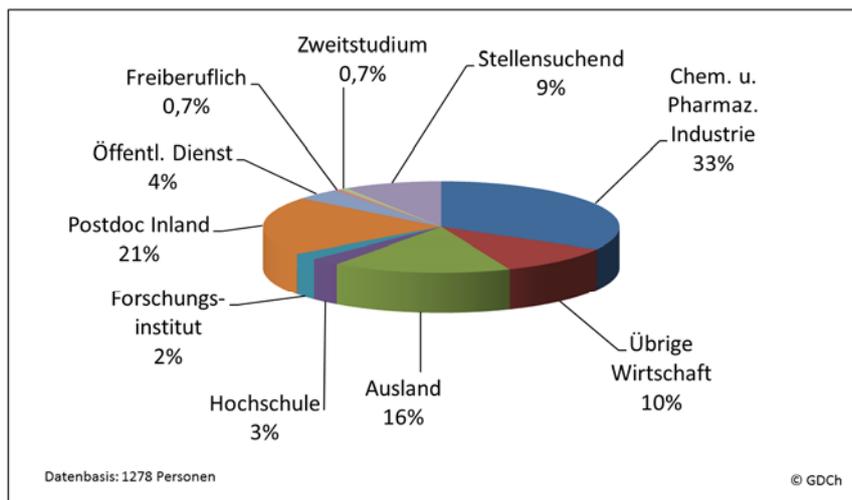
Die Technische Chemie adressiert eine Vielzahl weiterer Fragestellungen. So entwickelt sie unter anderem Strategien für die optimale Integration und den Betrieb von dynamischen Systemen wie Autoabgaskatalysatoren, Brennstoffzellen und Elektrolyseuren. Sie untersucht chemische Reaktionen und stellt wichtige Daten zur Gewährleistung der Sicherheit von chemischen Anlagen und zur Analyse der Wirtschaftlichkeit von Produktionsprozessen bereit. Im Rahmen der Energie- und Rohstoffwende betreibt sie den Aufbau völlig neuer Prozessketten wie die Umwandlung von Strom zu Wasserstoff und schließlich Kohlenwasserstoffen als Kraftstoff oder Einsatzstoff der chemischen Industrie. Die Technische Chemie bildet damit die Grundlage für jede technische Umsetzung einer chemischen Reaktion.

---

<sup>1</sup> \* Alle personenbezogenen Formulierungen beziehen sich sowohl auf weibliche wie auf männliche Personen

## Ausbildung in Technischer Chemie ist wichtig für alle Chemiestudenten und Ingenieure - sagt der Absolventenmarkt

Eine fundierte Ausbildung in Technischer Chemie ist nicht nur im Ingenieurstudium, sondern vor allem auch in der Chemieausbildung relevant. Laut Absolventenstatistik der GDCh für das Jahr 2013 entschieden sich von den Chemiestudenten, die direkt im Anschluss an ihre Promotion eine Stelle in Deutschland antraten, knapp die Hälfte für eine Laufbahn in der chemischen und pharmazeutischen Industrie. Die Mehrzahl der Absolventen benötigt daher ein umfassendes Wissen über moderne chemisch-technische Produktionsverfahren und ihre Grundlagen. An deutschen Hochschulen werden die entsprechenden berufsqualifizierenden und praxisrelevanten Fähigkeiten und Kenntnisse im Bachelor- oder Masterstudium durch Vorlesungen, Übungen, Kurse und Praktika zur Technischen Chemie sowie durch Exkursionen vermittelt.

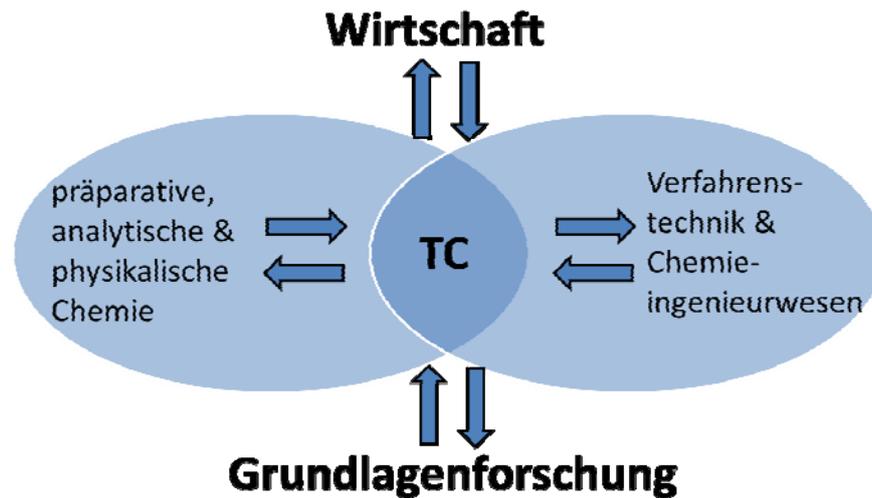


\* ohne Studiengänge Biochemie, Lebensmittelchemie, Lehramt Chemie

**Abb. 2:** Berufswahl der Chemiestudenten, die im Jahr 2013 direkt im Anschluss an ihre Promotion eine Stelle in Deutschland antraten (Quelle: „Chemiestudiengänge in Deutschland - Statistische Daten 2013“ Absolventenstatistik der GDCh)

## Was macht die Technische Chemie in der Lehre?

Die Lehre in der Technischen Chemie baut auf dem Wissen auf, das im Rahmen der Grundlagenausbildung in anorganischer, organischer, physikalischer und Bio-Chemie sowie Mathematik und Physik vermittelt wird, und stellt den Bezug zu technischen Anwendungen, Produktionsprozessen sowie Stoffkreisläufen her. Sie versetzt damit angehende Chemiker in die Lage, chemische Produktionsprozesse zu kennen, zu verstehen und deren technische und wirtschaftliche Relevanz einzuordnen. Die Studierenden lernen, theoriegeleitete wissenschaftliche Methoden zu nutzen. Mit ihrer Hilfe können sie Anforderungen und Randbedingungen aus praktischen Anwendungen erfassen und berücksichtigen.



**Abb. 3:** Die doppelte Brückenfunktion der Technischen Chemie (TC) in Forschung und Lehre

Darüber hinaus vermittelt die Technische Chemie im Sinne der Berufsbefähigung neben anwendungsorientierten Denkansätzen auch die Sprache und Begrifflichkeit, die im Berufsalltag die Kommunikation mit Ingenieuren, Anwendern und Kunden dominiert. Weiterhin liefert sie die Grundlagen, um moderne Ansätze der chemischen Produkt- und Prozessentwicklung verstehen und einordnen zu können, wie etwa Prozessintensivierung durch Mikroverfahrenstechnik, computergestützte Multiskalenmodellierung chemischer Reaktionen und Reaktoren oder Hochdurchsatzmethoden für die Katalysator-, Batterie- und Materialforschung.

Eine solide Ausbildung in Technischer Chemie bildet eine Grundvoraussetzung für den erfolgreichen Berufseinstieg in der Großindustrie, in klein- und mittelständischen Unternehmen der Chemie sowie in Automobilbau, Energie- und Umweltschutztechnik oder auch in Forschungs- und Entwicklungseinrichtungen, für die sich der Großteil der Chemieabsolventen entscheidet. Die Technische Chemie ist somit ein integraler Bestandteil des universitären Chemiestudiums. Ihre Verbindung aus wissenschaftlichen Methoden und Praxisbezug stellt eine wichtige Voraussetzung für die erfolgreiche Akkreditierung von Studiengängen dar.

## Die drei wesentlichen Kompetenzfelder

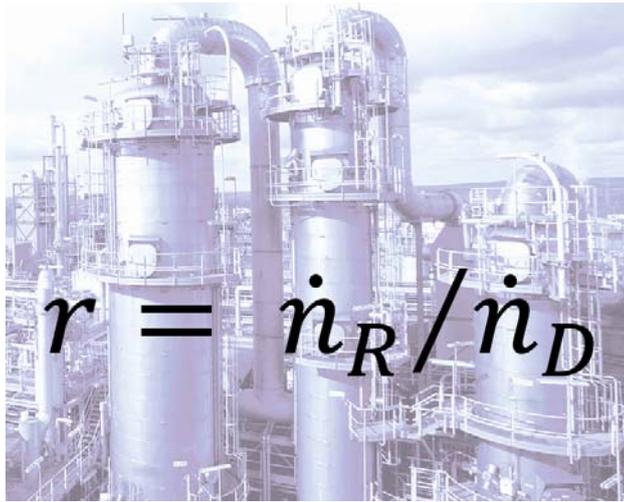
Im Bereich des Chemie- und Ingenieurstudiums vermittelt die Technische Chemie Kompetenzen in drei wesentlichen Wissensfeldern, nämlich den thermischen und mechanischen Grundoperationen, der chemischen Reaktionstechnik sowie der chemischen Prozesstechnologie.

Der Bereich **thermische und mechanische Grundoperationen** gibt einen Einblick in grundlegende Prinzipien verfahrenstechnischer Apparate zur Trennung und Mischung homogener und heterogener Stoffsysteme sowie deren Integration in chemische und biotechnologische Produktionsprozesse. In diesem Abschnitt wird auch die Beschreibung grundlegender Transportphänomene (Stoff, Wärme und Impuls) vermittelt.

Die **chemische Reaktionstechnik** vermittelt die Beschreibung komplexer chemischer Reaktionen mittels Stöchiometrie, Thermodynamik und Reaktionskinetik sowie deren Kopplung mit mikroskopischen und makroskopischen Vorgängen des Stoff-, Wärme- und Impulstransports. Ausgehend von diesem Wissen werden verschiedene wichtige Reaktortypen vorgestellt sowie deren Auswahl und Dimensionierung behandelt.

Die **Chemische Prozesstechnologie** vermittelt die stofflichen und technologischen Grundlagen chemischer Produktionsanlagen, insbesondere die Struktur und Verknüpfung von Energie-, Rohstoff- und Produkt-Verbänden der chemischen Industrie. Dies beinhaltet sowohl die exemplarische Beschreibung klassischer industrieller Prozesse sowie moderner Produktionsverfahren als auch die Methoden der Projektierung und Entwicklung neuer Verfahren.

## Kapitel 2: Thermische und mechanische Grundoperationen



### 2.1 Zielsetzung

Den Begriff Grundoperationen („*unit operations*“) führte Arthur Dehon Little 1916 ein. Damit wurden einzelne Prozessschritte, aus denen industrielle chemische Verfahren zusammengesetzt sind, einer systematischen Betrachtung zugänglich. Zudem konnte man nun die zugrunde liegenden Prinzipien herausarbeiten, die prozessübergreifend Gültigkeit besitzen. Bis dahin herrschte die empirische Beschreibung der verschiedenen chemischen Verfahren als unterschiedliche Technologien vor; nun verfügte man über einen methodisch angelegten Entwurf, der die Entwicklung des Chemieingenieurwesens zu einer modernen Wissenschaft gefördert und entscheidend geprägt hat.

Auch die chemischen Umsetzungen in einem Verfahren sind in diesem Sinne Grundoperationen, da sie in ähnlicher Weise in verschiedenen Verfahren vorkommen können. Allerdings sind Reaktoren meist stärker an die speziellen Gegebenheiten eines Verfahrens angepasst als die vor- oder nachgeschalteten Schritte, die dazu dienen, die Edukte für den Einsatz vorzubereiten und die Produktmischung so aufzuarbeiten, dass die gewünschten Wertprodukte in der erforderlichen Reinheit vorliegen. Der Begriff „Grundoperationen“ wird deshalb primär für jene Prozessstufen gebraucht, die nicht durch chemische Reaktionen geprägt sind. Üblicherweise unterscheidet man zwischen thermischen und mechanischen Grundoperationen.

Thermische Grundoperationen (bzw. „Verfahren“) sind durch Unterschiede des chemischen Potentials und das Streben nach dem Phasengleichgewicht als Triebkräfte charakterisiert; diese wirken auf molekularer Ebene. Bei mechanischen Verfahren wirken dagegen durch Werkzeuge oder Strömungsprozesse erzeugte Kräfte auf Aggregate, wie z.B. Fluidelemente oder Feststoffpartikel.

Um zu verstehen, wie die benötigten Apparate ausgelegt werden müssen, und um thermische und mechanische Grundoperationen sicher durchzuführen, muss der technische Chemiker mit den Grundsätzen von Stoff- und Energiebilanzen sowie elementaren Grundlagen von Wärme- und Stoffübertragung, Thermodynamik und Fluidodynamik vertraut gemacht werden. Besondere Bedeutung kommt der Behandlung von Phasengleichgewichten zu, die eine zuverlässige Kenntnis der thermodynamischen Reinstoff- und Gemischdaten ebenso erfordert wie die Vertrautheit mit modernen Modellen zur Berechnung der verschiedenen Phasengleichgewichte. Unverzichtbar sind ein vorlesungsbegleitendes Praktikum im Labor und die Behandlung von Beispielen für technische Apparateausführungen. An ihnen lässt sich darstellen wie die im Labor durchgeführten Grundoperationen im technischen Maßstab realisierbar und berechenbar sind. Damit wird eine Basis für die Zusammenarbeit mit Ingenieuren in der späteren beruflichen Praxis geschaffen.

Um die Systematik getrennter Grundoperationen weiterzuentwickeln, soll schließlich an Beispielen aufgezeigt werden, dass die Integration verschiedener Funktionen in eine Prozessstufe Synergieeffekte mit sich bringen kann, welche die Stoff- und Energieeffizienz eines Verfahrens und damit auch die Nachhaltigkeit und die Wirtschaftlichkeit erhöhen.

## 2.2 Inhaltsbeschreibung

### 2.2.1 Verfahrenstechnische Grundlagen

Das Konzept der Bilanzierung von Stoff- und Energieflüssen in chemischen Verfahren wird eingeführt und dessen Anwendung auf Verfahrensebene wie auch auf der Ebene von Prozessstufen, Apparaten und Komponenten wird eingeübt. Elementare Grundlagen von Strömungsprozessen werden erläutert, um Strömungsdruckverluste in verfahrenstechnischen Apparaten einordnen und berechnen zu können. Dabei werden Beziehungen für laminare und turbulente Strömungen in Rohren abgeleitet und auch die Durchströmung von Packungen bzw. Schüttungen behandelt. Es werden ferner elementare Grundlagen der Wärme- und Stoffübertragung vermittelt, die wichtigsten dimensionslosen Kennzahlen zur Behandlung dieser Thematik eingeführt und deren Anwendung anhand von Beispielen eingeübt.

Stofftransportvorgänge auf verschiedenen Skalen beim Mischen von Fluiden werden besprochen. Die Grundaufgaben des Mischens und deren apparative Ausgestaltung in Rührwerken und Strömungsmischern werden dargestellt, wobei auch auf neue Entwicklungen, wie z.B. Mikromischer, eingegangen wird. Weiterhin wird die Auslegung von Wärmeübertragern erläutert. Die charakteristischen Kenngrößen der Wärmeübertragung werden in ihrer stofflichen und parametrischen Abhängigkeit dargestellt. Die Vorgänge beim Verdampfen werden besprochen. Wichtige Bauformen von Wärmeübertragern und Verdampfern werden vorgestellt, wobei auch hier auf neue Entwicklungen, wie z.B. Mikrowärmeübertrager, eingegangen wird.

### 2.2.2 Thermische Grundoperationen

Es wird zunächst eine Übersicht über die thermischen Grundoperationen gegeben, die in industriellen chemischen Verfahren zur Stofftrennung eingesetzt werden; die Prinzipien der einzelnen Verfahren werden kurz dargestellt. Es werden ferner gemeinsame Merkmale, die mehrstufige Verfahrensführung im Gegen- oder Kreuzstrom, ebenso wie übergeordnete Aspekte (z.B. der Energiebedarf zur Stofftrennung) angesprochen.

Zum guten Verständnis der thermischen Trennverfahren müssen dann die thermodynamischen Grundlagen der Stofftrennprozesse behandelt werden, wobei den Phasengleichgewichten und deren Beeinflussung durch Temperatur, Druck und Konzentrationsverhältnisse eine entscheidende Bedeutung zukommt. Wichtig ist die Behandlung von Verteilungskoeffizienten, Trennfaktoren, singulären Punkten und kalorischen Effekten. Kinetische Aspekte müssen ebenfalls Berücksichtigung finden, da bei einigen Trennprozessen, z.B. Kristallisation, Trocknung oder Membrantrennverfahren, auch die Stofftransportgeschwindigkeit prozessbestimmend sein kann.

Im Anschluss erfolgt eine kompakte Darstellung ausgewählter thermischer Trennverfahren, wobei auf die theoretischen Grundlagen, die verschiedenen Betriebsweisen, die wichtigsten Apparatetypen, die Berechnungsansätze für die Auslegung der Verfahren und ggf. auch auf einige besonders wichtige spezielle Verfahrensvarianten eingegangen werden soll. Die technische Realisierung wird jeweils an einem industriell bedeutsamen Beispiel aufgezeigt. Rektifikation, Extraktion, Absorption, Chromatographie und Membrantrennverfahren können dabei gleichrangig besprochen werden.

In vielen Fällen bietet es sich an, mit der kontinuierlich betriebenen Rektifikation als dem industriell bedeutsamsten thermischen Trennverfahren zu beginnen. Vorgestellt werden sollen:

- Der Kolonnenaufbau, einschließlich der Notwendigkeit des Rücklaufs
- Der Einfluss der Temperatur auf das Phasengleichgewicht Dampf/Flüssigkeit und auf den Trennfaktor
- Ideales und nicht-ideales Verhalten binärer Mischungen
- Das Auftreten azeotroper Gemische und Möglichkeiten zu deren Trennung
- Die Trennung von Mehrkomponentengemischen durch Trennwandkolonnen und Seitenstromabnahme

Zur Auslegung der Kolonnen sollen die Möglichkeiten zur Ermittlung der Anzahl notwendiger „theoretischer Trennstufen“ durch rechnerische Bilanzierung und graphische Methoden vorgestellt werden. Die Einführung des Bodenwirkungsgrades (für Bodenkolonnen) sowie des HTU-NTU-Konzepts (HETP-Wert für Packungen) ermöglichen den Vergleich mit der Zahl der „praktischen Trennstufen“. Außerdem sollen Belastungsgrenzen für die Apparate angesprochen werden (Durchsatz, Druckverlust), um daraus den Durchmesser der Kolonnen zu berechnen.

Entsprechende Darstellungen für die anderen genannten thermischen Trennverfahren schließen sich an. Nicht zuletzt soll auch die Strategie der Transformation von Trennproblemen, die mit einem Verfahrensprinzip auf direktem Weg nicht lösbar sind (z. B. Azeotrope durch Rektifikation), in eines oder mehrere direkt lösbare Trennprobleme skizziert und anhand von Beispielen erläutert werden.

### 2.2.3 Mechanische Grundoperationen

Zu den wesentlichen Lehrinhalten gehört die Übersicht der mechanischen Grundoperationen, die für industrielle chemische Verfahren bedeutsam sind. Die darin verwirklichten Prinzipien werden erläutert. Wichtige Aspekte bei der Auswahl mechanischer Verfahren werden diskutiert, u. a. der Einfluss auf die Energieeffizienz des Gesamtverfahrens. Zum besseren Verständnis mechanischer Trennverfahren werden elementare Grundlagen zur Charakterisierung disperser Systeme eingeführt. Sodann wird die technische Ausführung der wichtigsten mechanischen Trennverfahren beschrieben, wobei vordringlich Probleme bei der Übertragung vom Labor in den technischen Maßstab besprochen werden.

## 2.3 Vorlesungsgliederung

### 2.3.1 Verfahrenstechnische Grundlagen

#### a) Stoff- und Energiebilanzen

Aufstellen und Lösen von Stoff- und Energiebilanzen für verschiedene Bilanzgebiete (Verfahren, Prozessstufe, Apparat, Teilbereich im Apparat, etc.); Beschaffung von Stoffdaten aus Datenbanken und durch Abschätzungsmethoden; Ermittlung der Stoff- und Energieeffizienz chemischer Verfahren.

#### b) Strömungsvorgänge

Reibungsfreie und reibungsbehaftete Strömung; Viskosität und Schubspannung; laminare und turbulente Strömung in Rohren; Strömungsgrenzschichten; Druckverlust und Energiedissipation; Beschreibung von Strömungsvorgängen mit dimensionslosen Kennzahlen; Reynoldszahl; Widerstandsbeiwert; Durchströmung von Packungen und Wirbelschichten.

#### c) Wärme- und Stoffübertragung

Wärmeleitung und Diffusion in ruhenden Medien; konvektiver Wärme- und Stofftransport; Wärmetransport durch Strahlung; Stofftransport durch Membranen; Wärme- und Stoffübergang auf Oberflächen; Transportwiderstände von Grenzschichten; Wärmedurchgang; Stoffdurchgang an Phasengrenzen;

volumen- und flächenbezogene Wärme- und Stofftransportkoeffizienten; Beschreibung der Wärme- und Stoffübertragung mit dimensionslosen Kennzahlen; Darstellung der charakteristischen Kenngrößen in ihren stofflichen und parametrischen Abhängigkeiten.

Wärmeübertragung mit Gleichstrom-, Gegenstrom- und Kreuzstromführung; Bauarten von Wärmeübertragern; Verdampfung in Behältern und in Rohren; Mikrowärmeübertrager.

d) Mischprozesse

Mikro- und Makrovermischung in homogenen Medien; Segregationsgrad; Mischzeit; Grundaufgaben des Mischens und deren apparative Ausgestaltung in Rührwerken; Begasen von Flüssigkeiten; Dispergieren nicht mischbarer Fluide; Suspendieren von Feststoffen; Bauformen von Strömungsmischern; Mikromischer.

### 2.3.2 Thermische Grundoperationen

Aufgabe und Bedeutung thermischer Trennverfahren innerhalb einer Chemieanlage; Übersicht über technisch wichtige thermische Trennverfahren; Funktionsprinzipien und gemeinsame Merkmale; Energiebedarf der Stofftrennung.

a) Thermodynamische und kinetische Grundlagen

Phasengleichgewichte dampf-flüssig (Destillation/Rektifikation), flüssig-flüssig (Extraktion), flüssig-fest (Kristallisation), gas-flüssig (Absorption/Gaswäsche), gas-fest (Adsorption): theoretische Berechnung, experimentelle Bestimmung, grafische Darstellung; Verteilungskoeffizienten; Trennfaktoren; singuläre Punkte (azeotrope, eutektische, kritischer Punkt); kalorische Effekte (Misch-, Verdampfungs-, Schmelzwärmen); Kinetik von Stoffübergangsprozessen (geschwindigkeitsbestimmende Teilschritte, Limitierung durch Film- und Porendiffusion, Viskositätseffekte).

b) Darstellung ausgewählter thermischer Trennverfahren

Destillation/Rektifikation

Betriebsweise (kontinuierlich, diskontinuierlich), Rektifikationsapparate (Boden-, Füllkörper-, Packungskolonnen), spezielle Rektifizierverfahren (Vakuum-, Trägerdampf-, Azeotrop- und Extraktivrektifikation, Druckwechselrektifikation), Energiesparmaßnahmen (Druck-Temperatur-Staffelung, Brüdenkompression/Wärmepumpe), Berechnungsansätze für Stufenzahl/-höhe (McCabe-Thiele) und Durchmesser einer Kolonne (F-Faktoren) sowie für den Energiebedarf (Heizung, Kühlung).

Konzept der Trennstufe (theoretische Stufe, praktische Stufe, NTU-, HTU- und HETP-Wert); Führung der Stoffströme (Gleich-, Kreuz-, Gegenstrom); Stoff- und Wärmebilanzen (Arbeitslinien); Gemeinsamkeiten und Unterschiede der apparativen Lösungen.

#### Extraktion

Extraktionsarten (flüssig-flüssig-Extraktion, Reaktivextraktion, Extraktion mit überkritischen Fluiden, Feststoffextraktion); Betriebsweisen (Gegenstrom, Kreuzstrom); Extraktionsapparate (Mixer-Settler, Kolonnen, Zentrifugalextraktoren, Band- und Turm-Extraktoren); Extraktionsmittelauswahl; Berechnungsansätze (Beladungsdiagramm, Dreiecksdiagramm); Regeneration des Extraktionsmittels.

#### Absorption

Absorptionsarten (physikalische/chemische Wäsche); Betriebsweise (Gegenstrom, Gleichstrom); Absorptionsapparate (Kolonnen, Blasensäule, begaster Rührkessel, Sprüh-, Strahl-, Rotationswäscher); Absorptionsmittelauswahl; Berechnungsansätze (Konzept des stufenweisen bzw. stetigen Kontakts der Phasen); Mehrkomponenten-Absorption (Selektivität, kinetische Einflüsse); Regeneration des Absorptionsmittels.

### **Adsorption/Chromatographie**

Adsorptionsarten (Physisorption/Chemisorption), Betriebsweise (Festbett- und Bewegtbett-Verfahren, Verfahren mit suspendiertem Adsorbens); Adsorptionsmittelauswahl; Adsorptionsapparate; Berechnungsansätze für Taktverfahren (Durchbruchskurven) und kontinuierliche Verfahren (Stufenzahlberechnung); Ein- und Mehrkomponenten-Adsorption, Regenerationsmethoden (TSA, PSA u.a.).

### **Membrantrennverfahren**

Verfahrensarten (Umkehrosmose, Ultrafiltration, Elektrodialyse, Pervaporation, Gaspermeation), Membranmaterialien und Membranaufbau (anorganische und organische Membranen, Diffusions- und Porenmembranen, asymmetrische und ionenselektive Membranen), Modularten (Rohr-, Platten-, Wickel-, Kapillar-, Hohlfasermodule), Berechnungsansätze (Stofftransport an/durch die Membran), Deckschichteinflüsse (Fouling, Scaling).

### **2.3.3 Mechanische Grundoperationen**

Aufgabe und Bedeutung mechanischer Grundoperationen innerhalb einer Chemieanlage; Charakterisierung von dispersen Systemen (auf verschiedene Merkmale bezogene Partikelgrößenverteilungen; Trenngrad); Übersicht über technisch wichtige mechanische Trennverfahren; Funktionsprinzipien und gemeinsame Merkmale; Energiebedarf; Apparative Ausgestaltung mechanischer Trennverfahren; Herausforderungen bei der Maßstabsübertragung.

### **2.4 Hinweise zu Umfang und Schwerpunktsetzung**

Der hier beschriebene und empfohlene Inhalt bedarf einer Vorlesung im Umfang von 2 SWS. Von den 14 damit zur Verfügung stehenden Doppelstunden sollten im Normalfall etwa 2-3 auf die verfahrenstechnischen Grundlagen verwandt werden, etwa 8-10 für die thermischen Grundoperationen und die restlichen 2-3 für die mechanischen Grundoperationen. Ein begleitendes Praktikum ist unverzichtbar, um das Lernziel zu erreichen, wobei je nach Thema und Ausgestaltung der Experimente und der Auswertung etwa 3-6 Halbtagesversuche angebracht erscheinen. Darüber hinaus sollte nach Möglichkeit eine vorlesungsbegleitende Übung im Umfang von 1 SWS angeboten werden, damit die Studierenden die Vorlesungsinhalte an Hand eigener Berechnungen nachvollziehen und dadurch nachhaltiger verstehen.

Als mögliche Schwerpunktsetzungen bieten sich vertiefte Darstellungen zu einzelnen Trennverfahren an, alternativ im Bereich Phasengleichgewichte, hybride Verfahren oder Mikroverfahrenstechnik:

- Phasengleichgewichte und Stoffdatenbanken
- Rektifikation azeotroper Gemische
- Extraktionsverfahren
- Absorption und Gaswäsche
- Adsorption und Chromatographie
- Kristallisationsverfahren
- Membrantrennverfahren
- Hybride Verschaltungen thermischer Trennverfahren
- Mikroverfahrenstechnik

## 2.5 Literatur

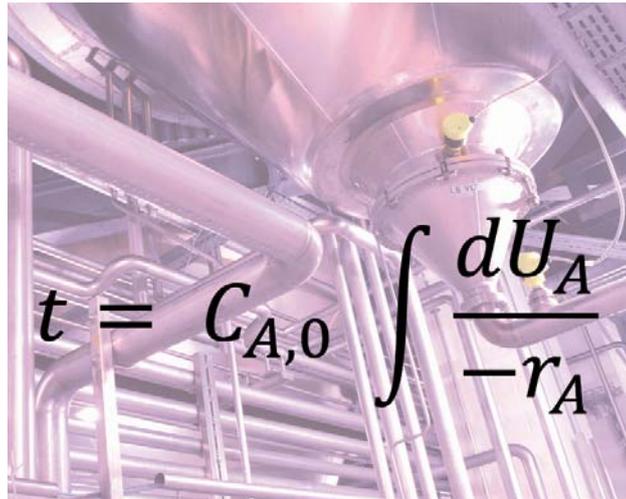
### 2.5.1 Einführende Literatur

- Baerns, M.; Behr, A.; Brehm, A.; Gmehling, J.; Hofmann, H.; Onken, U.; Renken, A.; Hinrichsen, K.; Palkovits, R.; Technische Chemie, 2. Aufl., Wiley-VCH, Weinheim, 2013
- Dittmeyer, R.; Keim, W.; Kreysa, G.; Oberholz, A. (Hrsg.); Winnacker-Küchler, Chemische Technik - Prozesse und Produkte, 5. Aufl., Bd. 1 - Methodische Grundlagen, Wiley-VCH, 2004
- Grassmann, P.; Widmer, F.; Sinn, H.; Einführung in die thermische Verfahrenstechnik, 3. Aufl., Walter De Gruyter, Berlin 1997, Reprint 2001
- Sattler, K.; Thermische Trennverfahren: Grundlagen, Auslegung, Apparate, Wiley-VCH, 2001
- Sattler, K.; Adrian, T.; Thermische Trennverfahren: Aufgaben und Auslegungsbeispiele, Wiley-VCH, Weinheim, 2007
- Bohnet, M.; Mechanische Verfahrenstechnik, Wiley-VCH, Weinheim, 2004

### 2.5.2 Weiterführende Literatur

- Schubert, H.; Handbuch der mechanischen Verfahrenstechnik, Wiley-VCH, Weinheim, 2003
- Mersmann, A.; Kind, M.; Stichlmair, A.; Thermische Verfahrenstechnik: Grundlagen und Methoden, 2. Aufl., Springer, Berlin, 2005
- Goedecke, R. (Hrsg.); Fluidverfahrenstechnik: Grundlagen, Methodik, Technik, Praxis, Wiley-VCH, Weinheim, 2011
- Kraume, M.; Transportvorgänge in der Verfahrenstechnik: Grundlagen und apparative Umsetzungen, 2. Aufl., Springer, Berlin, 2012
- Himmelblau, D.M.; Riggs, J.B.; Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering, 8th ed., Prentice-Hall, Upper Saddle River, 2012
- Seider, W.D.; Seader, J.D., Lewin, D.R., Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis and Design, 3rd ed., Wiley, New York, 2008
- Green, D.; Perry, R.; Perry's Chemical Engineers' Handbook, 8th ed., McGraw-Hill, New York, 2007
- Hessel, V.; Renken, A.; Schouten, J.; Yoshida, Y.-I. (eds.); Micro Process Engineering: A Comprehensive Handbook, Wiley-VCH, Weinheim, 2009
- Poling, B.E.; Prausnitz, J.M.; O'Connell, J.P.; The Properties of Gases and Liquids, 5th ed., McGraw-Hill, New York, 2000
- VDI-Wärmeatlas, 11. Aufl., VDI-Verlag, Düsseldorf, 2013

## Kapitel 3: Chemische Reaktionstechnik



### 3.1 Zielsetzung

Die chemische Reaktionstechnik zielt auf die Entwicklung neuer oder auf die Verbesserung bestehender chemischer Stoffumwandlungsprozesse. Im ersten Fall ist ein sogenanntes „scale-up“ erforderlich, d.h. die Übertragung einer chemischen Reaktion vom Labormaßstab in den technischen Maßstab. Im zweiten Fall muss ein sogenanntes „scale-down“ erfolgen, um die Reaktion im Labormaßstab unter Bedingungen untersuchen zu können, die denen im industriellen Prozess entsprechen. Beiden Fällen gemeinsam ist die Optimierung der Reaktionsführung (z.B. Konzentration, Temperatur, Druck, Katalysator) und des Reaktordesigns mit dem Ziel, den Gesamtprozess zu optimieren bzw. zu intensivieren.

Das Lehrgebiet der chemischen Reaktionstechnik lässt sich in zwei große Teilgebiete einteilen:

- 1) Reaktionsanalyse
- 2) Reaktormodellierung/-auslegung

Die Reaktionsanalyse umfasst die stöchiometrische, thermodynamische und kinetische Analyse der chemischen Reaktion bzw. des Reaktionsschemas. In vielen Fällen findet nicht nur die gewünschte Reaktion statt, sondern auch unerwünschte Reaktionen wie Rückreaktionen, Folge- oder Parallelreaktionen. Gerade hier kann die wirtschaftlich und technisch enorm wichtige Rolle von Katalysatoren verdeutlicht werden. Ziel der Reaktionsanalyse ist letztlich eine vollständige kinetische Beschreibung des Reaktionsschemas, die wiederum Grundlage für die Reaktormodellierung/Auslegung ist.

Die Reaktormodellierung/Auslegung beruht auf der Formulierung von Bilanzgleichungen für Stoffmenge, Energie und Impuls, wobei geeignete Bilanzvolumina zugrunde gelegt werden (differentielles Volumen, integrales Volumen). Deren algebraische, grafische oder numerische Lösung ergibt die zeitlichen und/oder örtlichen Verläufe der Konzentrationen, der Temperatur und der Strömungsgeschwindigkeit im Reaktor. Ziel der Reaktormodellierung/-auslegung ist es, die optimale Reaktionsführung und das optimale Reaktordesign zu finden, bei denen der Umsatzgrad und die Produktausbeute maximal (Feinchemie, Pharma) bzw. der Umsatzgrad und die Selektivität optimal sind (Zwischenprodukte und Grundchemikalien).

## 3.2 Inhaltsbeschreibung

### 3.2.1 Reaktionsanalyse

In der Reaktionsanalyse werden Kenntnisse der chemischen Thermodynamik und chemischen Kinetik vorausgesetzt; sie sind die Lehrinhalte der Vorlesungen der physikalischen Chemie. Dazu gehören die theoretischen Grundlagen und Gleichungen, die für die quantitative Beschreibung von Reaktions- und Phasengleichgewichten notwendig sind, sowie die in der Kinetik relevanten physikalisch-chemischen Größen und Parameter.

Für die Studierenden neu sind dann die reaktionstechnischen und prozessrelevanten Größen Umsatzgrad, Ausbeute, Selektivität, Produktionshöhe, Raum-Zeit-Ausbeute und im Falle von Katalysatoren deren Lebensdauer bzw. deren Desaktivierung sowie Produktivität (turnover number).

Kinetische Ansätze können eine unterschiedliche Modelltiefe haben: Formalkinetische Ansätze wie Potenzansätze liefern lediglich Beschreibungen und gelten nur für den Anpassungsbereich. Mechanistisch begründete Ansätze wie Hougen-Watson-Geschwindigkeitsansätze in der heterogenen Katalyse beruhen auf Elementarschritten und ermöglichen zusätzlich Voraussagen über die Reaktion. Molekulare Ansätze (Stoßtheorie, Theorie des Übergangszustandes, Eyring-Gleichung) sind sogenannte „first principles“-Ansätze. Da sie einen sehr hohen Rechenaufwand erfordern und in vielen Fällen immer noch Vereinfachungen notwendig sind, sind diese Ansätze in der Reaktionstechnik oftmals nicht praktikabel, können aber durchaus Hinweise auf relevante Reaktionspfade und geschwindigkeitsbestimmende Elementarschritte liefern. Diese Ansätze setzen vertiefte Kenntnisse in Physikalischer Chemie voraus, wobei zusätzliche Kenntnisse in Theoretischer Chemie von Vorteil sind.

Kinetische Modelle werden zunächst für einfache und dann für zusammengesetzte Reaktionen, d.h. Rück-, Parallel-, Folge- und Kettenreaktionen, in homogener Phase behandelt (Mikrokinetik). Über die Physikalische Chemie hinausgehend werden nicht nur die Konzentrations-Zeit-Verläufe abgeleitet, sondern die dazugehörigen Umsatzgrad-Zeitverläufe und/oder Ausbeute-Umsatzgrad- oder Selektivitäts-Umsatzgrad-Diagramme diskutiert. Diese Diagramme sind später die Grundlage für die Reaktorauslegung (Dimensionierung auf Basis der optimalen Reaktionsführung: basic engineering) und die Wirtschaftlichkeitsbetrachtung (Gestehungskosten, net-present-value-Rechnungen).

Die kinetische Beschreibung von Transportvorgängen (z.B. Filmtheorie) ist sowohl für die thermischen Grundoperationen (siehe Kap. 2) als auch für die Reaktionstechnik relevant. Bei chemischen Reaktionen in heterogenen Systemen müssen Stoff- und Wärmetransportvorgänge berücksichtigt (Makrokinetik) und deren Einfluss auf die Temperatur- und Konzentrationsverläufe im Reaktor diskutiert werden. Auch im Falle schneller homogener Reaktionen (Reaktionszeit  $\ll$  Mischzeit) kann der Stofftransport zu einer Limitierung führen und so die intrinsische chemische Kinetik „maskieren“.

Sofern im Zeitrahmen der Vorlesung möglich, sollten im Kapitel Kinetik auch die Methoden zur experimentellen Gewinnung kinetischer Daten und deren Auswertung behandelt werden. Weil die Prozessintensivierung ein wesentliches Ziel ist, werden das lokale Verständnis des Geschehens und damit die lokalen Messmethoden immer wichtiger.

### 3.2.2 Reaktormodellierung/-auslegung

Ideale Reaktoren zeichnen sich durch eine bekannte und definierte Fluidynamik aus, das heißt, sie besitzen zwischen Reaktoreingang und Reaktorausgang entweder eine vollständige Rückvermischung (idealer Rührkessel) oder keine Rückvermischung (ideales Strömungsrohr). Konzepte zur diskontinuierlichen, halbkontinuierlichen und kontinuierlichen Prozessführung werden an Prozessbeispielen aus den Bereichen Feinchemie und Pharma sowie Zwischenprodukte und Grundchemikalien erläutert und Vorteile und Grenzen der verschiedenen Ansätze aufgezeigt. Dabei wird gleichermaßen auf in der industri-

ellen Praxis etablierte Technologien wie auch auf neue Ansätze (z.B. Mikroverfahrenstechnik/Flow chemistry) eingegangen.

Die für die idealen Reaktoren typischen Umsatzgrad-Verweilzeit-Verläufe sowie Umsatzgrad-Ausbeute- bzw. Umsatzgrad-Selektivitäts-Verläufe werden auf Basis der Stoffbilanzen in Abhängigkeit vom gewählten idealen Reaktor und der vorliegenden Kinetik diskutiert. Insgesamt können allgemein gültige Äquivalenz- und Auswahlregeln abgeleitet werden.

Für einfache Reaktionen erfolgt die Auslegung von satzweise und kontinuierlich arbeitenden Reaktoren mittels analytischer und grafischer Lösungsmethoden der entsprechenden Stoffbilanzen. Bei komplexen Reaktionen und/oder halbkontinuierlichem Betrieb liegen sogenannte Anfangswertprobleme vor, die mit einem Tabellenkalkulationsprogramm und einem Einschritt-Eulerverfahren einfach gelöst werden können. So kann eine isotherme Reaktorsimulation einfach, effektiv und anschaulich demonstriert werden.

Der nicht-isotherme Betrieb idealer Reaktoren erfordert die simultane Lösung der Stoff- und Energiebilanzen. Bei adiabaten Reaktoren und einfachen Reaktionen hängen Umsatzgrad und Temperaturerhöhung linear zusammen. Die Lösung der Stoff- und Energiebilanz kann in einfachen Fällen grafisch erfolgen. Bei polytropen Reaktoren ergeben sich wiederum Anfangswertprobleme, die nur noch numerisch gelöst werden können. Dies kann im Rahmen der Vorlesung wiederum mit Tabellenkalkulationsprogrammen einfach erfolgen oder es werden die typischen Temperaturverläufe nur qualitativ diskutiert. Bei dem diskontinuierlichem Rührkessel und dem idealen Strömungsrohr soll auf die Entstehung von Hotspots und das Durchgehen des Reaktors hingewiesen werden. Dies kann im Semenov-Diagramm einfach qualitativ anhand dimensionsloser Kenngrößen diskutiert werden. Im Falle des adiabaten und polytropen kontinuierlichen Rührkessels sind statische und dynamische Instabilitäten möglich. Bei statischen Instabilitäten ist insbesondere auf stabile und instabile Betriebspunkte sowie das damit verbundene Zünd-Lösch-Verhalten hinzuweisen, da dies sicherheitstechnische Relevanz für die Praxis hat.

Reale Reaktoren werden u.a. durch die Abweichung ihres fluiddynamischen Verhaltens von den Bedingungen der idealen Reaktoren über die Verweilzeitverteilung, den Zeitpunkt der Vermischung und die Segregation des strömenden Mediums charakterisiert. Zur Anwendung realer Verweilzeitverteilungen für die Reaktorauslegung werden das Dispersions- und das Zellen- bzw. Kaskadenmodell sowie mehrparametrische Modelle eingeführt.

Reale Reaktoren werden für unterschiedliche Reaktionssysteme (Homogene Gas- oder Flüssigphasensysteme, Mehrphasensysteme mit oder ohne Katalysatoren) an Hand von Skizzen oder Fotos vorgestellt.

## 3.3 Vorlesungsgliederung

### 3.3.1 Reaktionsanalyse

#### a) Grundbegriffe und Definitionen

Matrix der stöchiometrischen Koeffizienten, Element-Spezies-Matrix, Reaktionslaufzahl, Reaktionsgeschwindigkeit, Zeitkonstante der Reaktion, Stoffmengenänderungsgeschwindigkeit, Umsatzgrad, Ausbeute, Selektivität, Produktionshöhe, Kapazität, Raum-Zeit-Ausbeute

#### b) Stöchiometrie

Grundgleichung der Stöchiometrie, Element-Bilanzen, Atom-Effizienz, Schlüsselkomponenten, Schlüsselreaktionen

c) Thermodynamik (Wissen, das aus den Vorlesungen der Physikalischen Chemie vorausgesetzt wird): Chemisches Potential, Enthalpie, Gibbsche Bildungsenthalpie, van't Hoffsche Reaktionsisobare, Ullrichsche Näherungen, Gibbs-Helmholtz-Gleichung, Methoden zur Abschätzung unbekannter thermodynamischer Größen einer Reaktion (z.B. Gruppenbeitragsmethode nach Benson), Raoult'sches Gesetz, Henry-Gesetz, Nernst'scher Verteilungssatz, Clausius-Clapeyron-Gleichung, Antoine-Gleichung.

Es wird empfohlen, in den Übungen zur Reaktionstechnik an Hand von Beispielen zur Berechnung chemischer Gleichgewichte (einfache und Simultangleichgewichte) die Grundlagen der chemischen Thermodynamik zu wiederholen. Phasengleichgewichte von Ein- und Mehrstoffsystemen werden üblicherweise in der Vorlesung „Thermische und mechanische Grundoperationen“ behandelt bzw. wiederholt.

#### d) Kinetik

- Unterschied Mikro- / Makrokinetik
- Einführung der Typen kinetischer Ansätze und deren Modelltiefe: Formalkinetiken, mechanistisch begründete Kinetiken (z.B. Lindemann-Mechanismus für unimolekulare Zerfallsreaktionen, Kettenreaktionen mit Initiierung, Wachstum und Abbruch), Hinweis auf Möglichkeiten und Grenzen molekularer Modelle (Molecular Modelling).
- Kinetik in homogenen Reaktionssystemen (einfache irreversible und reversible Reaktionen beliebiger Ordnung, Parallelreaktionen, Folgereaktionen, Kettenreaktionen, molekulare Katalyse, Enzymkatalyse). Umsatzgrad-Zeit-Verläufe und Selektivitäts-Umsatzgrad bzw. Ausbeute-Umsatzgrad-Diagramme.
- Mehrphasen-Reaktionen (Wechselwirkung von chemischer Reaktion und Stofftransport, langsam, schnell und momentan ablaufende Fluid-Fluid-Reaktionen, Fluid-Fest-Reaktionen (z.B. Shrinking-Core-Model)).
- Heterogen katalysierte Reaktionen (Langmuir-Isotherme, Belegungsgrad, Hougen-Watson-Geschwindigkeitsansätze, Film- und Porendiffusion, Nutzungsgrad-Konzept, Wechselwirkung von Transportvorgängen und Reaktion und deren Einfluss auf Umsatzgrad, Ausbeute und Selektivität, a priori Kriterien zur Abschätzung von Transporteinflüssen auf die Reaktionsgeschwindigkeit).
- Experimentelle Bestimmung kinetischer Daten und deren Auswertung, wichtige Typen von Laborreaktoren (Integral-, Differential- und Kreislaufreaktor), Vor- und Nachteile; Auswertung: Klassische Methoden (Differential- bzw. Integralmethode, Lineardarstellung, Parameterbestimmung, Fehlerabschätzung), statistisch begründete Methoden (lineare und nicht-lineare Regression, Vertrauensbereiche, Versuchspläne).

### 3.3.2 Chemische Reaktoren und ihre Auslegung

#### a) Ideale Reaktoren

- Einführung idealer Reaktoren (diskontinuierlich, halbkontinuierlich, vollkontinuierlich betriebener Rührkesselreaktor, Strömungsrohrreaktor, spezielle Verschaltungen idealer Reaktoren wie Rührkesselkaskade, Strömungsrohr mit Rückführung, Mikrostrukturreaktoren)
- Bilanzierung/Auslegung idealer isothermer Reaktoren (Einführung von Stoffbilanzen zur Reaktormodellierung, Vorausberechnung von Umsatzgrad, Ausbeute und Produktionshöhe, grafische und numerische Verfahren zur Reaktorauslegung, Reaktionsführung und Reaktorauswahl, Ausbeute- bzw. Selektivitätsmaximierung bei komplexen Reaktionen)
- Bilanzierung/Auslegung idealer nicht-isothermer Reaktoren (Einführung von gekoppelten Stoff- und Energiebilanzen, Temperaturführung endothermer und exothermer Gleichgewichtsreaktionen, adiabatische Reaktionsführung, polytrope Reaktoren, Einfluss der Temperaturführung auf die Selektivität komplexer Reaktionen, Auftreten von statischen und dynamischen Instabilitäten, Einführung und Diskussion sicherheitstechnisch relevanter Kennzahlen wie die adiabate Temperaturerhöhung, Arrhenius-Zahl, Semenov-Zahl).
- Einführung, Diskussion und Anwendung der dimensionslosen Damköhler-Zahlen ( $Da_I$  bis  $Da_{IV}$ ).

#### b) Reale Reaktoren

- Einführung realer Reaktoren (homogen: Rührkessel und Rohrreaktoren; heterogen: Festbett-, Flugstaub-, Wirbelschicht-, Rieselbett-, begaster Rührkessel-, Blasensäulen- Strahlreaktor, Fermenter), alternative Reaktorkonzepte (z.B. reaktive Trenntechniken, Membranreaktoren, etc.).

- Bilanzierung/Auslegung realer Reaktoren (Verweilzeitverteilung fluider Medien, Reaktorberechnung mittels Kinetik und Verweilzeitverteilung, Mikro- und Makrovermischung, Zeitpunkt der Vermischung, Segregation, Dispersions- und Zellen- bzw. Kaskadenmodell, ein- und zweidimensionale Reaktormodelle, homogene und heterogene Reaktormodelle).

### 3.4 Hinweise zu Umfang und Schwerpunktsetzung

Der hier beschriebene und empfohlene Inhalt bedarf eines Umfangs von 3 SWS. Eine die Vorlesung begleitende Übung von 1 SWS sollte unbedingt angeboten werden, um den Vorlesungsinhalt an Hand von Beispielen zu üben und zu verstehen. Lehrinhalte, die sich für Schwerpunktsetzungen anbieten, sind nachfolgend aufgelistet:

- Messung und Auswertung kinetischer Daten  
Es werden unter besonderer Berücksichtigung komplexer Reaktionen (Reaktionsschemata) Laborreaktoren und ihre Charakteristika (Integral-, Differential- und gradientenfreier Kreislaufreaktor) eingeführt sowie statistische Methoden zur Modellunterscheidung (F-Test) und Parameterschätzung (t-Test) vorgestellt. Hier können auch spezielle Rechenprogramme zur Lösung kinetischer Problemstellungen (z.B. PREDICI<sup>®</sup>, PRESTO<sup>®</sup>) und dynamischer Systeme (z.B. MATLAB<sup>®</sup>, Simulink<sup>®</sup>, Berkeley Madonna<sup>®</sup>, MathCad<sup>®</sup> u.a.m.) vorgestellt werden.
- Statistische Versuchsplanung (Design of Experiments)  
Arten von Versuchsplänen, Varianzanalyse/Regressionsanalyse, Simulationspakete, Beispiele.
- Kinetik und Reaktionstechnik heterogen katalysierter Prozesse  
Mehrkomponenten-Langmuir-Isothermen, Hougen-Watson-Geschwindigkeitsansätze (auch an Beispielen), Stoff- und Wärmetransport (Nutzungsgrad-Konzept bei einfachen Reaktionen, Einfluss auf Selektivität bei komplexen Reaktionen), Zünden/Löschen am/im Korn, eindimensionale/zweidimensionale sowie homogene/heterogene Reaktormodelle.
- Bioreaktionstechnik  
Enzymkinetik (Kinetikmodelle wie Michaelis-Menten, Enzymimmobilisierungskonzepte, Biotransformation), Zellwachstumsmodelle (Monod-Kinetik), Bioreaktorkonzepte, Mehrphasenreaktionen, Prozessführung und -integration (Batch, Fed-Batch, Chemostat, Up-Stream, Down-Stream)
- Numerische Simulation chemischer Reaktoren
- Mikroreaktionstechnik  
Intensivierung von Wärme- und Stofftransport sowie Oberflächenphänomenen, Potentiale für optimale Reaktionsführung, Beispiele aus dem Bereich Flow Chemistry, Typen von mikrostrukturierten Reaktoren

## 3.5 Literatur

### 3.5.1 Einführende Literatur

- Baerns, M.; Behr, A.; Brehm, A.; Gmehling, J.; Hofmann, H.; Onken, U.; Renken, A.; Hinrichsen, K.-O. ; Palkovits, R.: Technische Chemie, Wiley-VCH, Weinheim 2013.
- Jess, A.; Wasserscheid, P.: Chemical Technology, Wiley-VCH, Weinheim 2013.
- Emig, G.; Klemm, E.: Technische Chemie – Einführung in die Chemische Reaktionstechnik, 5. Aufl., Springer, Berlin-Heidelberg-New York 2005.
- Levenspiel, O.: Chemical Reaction Engineering, John Wiley & Sons Inc., New York 1998.

### 3.5.2 Weiterführende Literatur

- Beenackers, A.A.C.M.; Swaaij, von W.P.M.; Westerterp, K.R.: Chemical Reactor Design and Operation, John Wiley & Sons Inc., New York 1988.
- Carberry, J.J.: Chemical and Catalytic Reaction Engineering, Dover Publications, Dover 2001.
- Froment, G.F.; Bischoff, K.B.: Chemical Reactor Analysis and Design, John Wiley & Sons Inc, New York 1990.
- Fogler, H. S.: Elements of Chemical Reaction Engineering”, 4. Aufl., Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences, Pearson International Edition 2005.
- Löwe, A.: Chemische Reaktionstechnik – mit MATLAB und SIMULINK, Wiley-VCH, Weinheim 2000.
- Satterfield, C.N.: Heterogeneous Catalysis in Industrial Practice, McGraw Hill 1991.
- Schuler, H.: Prozesssimulation, Wiley-VCH, Weinheim 1995.
- Ullmann’s Encyclopedia of Industrial Chemistry, 7. Aufl., Wiley-VCH, Weinheim 2012.
- Vogel, H.: Verfahrensentwicklung, Wiley-VCH, Weinheim 2002.

### 3.5.3 Literatur zur Bioreaktions- und Bioprozesstechnik

- Renneberg, R., Süßbier, D.: Biotechnologie für Einsteiger, Spektrum Akademischer Verlag, 2010.
- Antranikian, G.: Angewandte Mikrobiologie, Springer Verlag, 2006.
- Thieman, W. J., Palladino, M. A.: Biotechnologie, Pearson Education Deutschland GmbH, 2007.
- Buchholz, K; Kasche, V.; Bornscheuer, U.: Biocatalysts and Enzyme Technology, Wiley-Blackwell, 2012.
- Liese, A; Seelbach, K.; Wandrey, C.: Industrial Biotransformation, 2. Auflage, Wiley-VCH, Weinheim 2006.
- Shuler, M. L., Kargi, F.: Bioprocess Engineering (Basic Concepts), Prentice Hall PTR, 2002.
- Cornish-Bowden, A.: Fundamentals of Enzyme Kinetics, Wiley-Blackwell, (4<sup>th</sup> completely revised and greatly enlarged edition) 2012.
- Eibl, R.; Eibl, D.; Pörtner, R.; Catapano, G.; Czermak, P.: Cell and Tissue Reaction Engineering, Springer, 2009.
- Volker C. Hass, Ralf Pörtner: Praxis der Bioprozesstechnik mit virtuellem Praktikum; Spektrum Akademischer Verlag, 2. Auflage, 2011.
- Horst Chmiel: Bioprozesstechnik, Einführung in die Bioverfahrenstechnik; Elsevier GmbH, Spektrum Akademischer Verlag, 3. Auflage.
- Winfried Storhas; Bioverfahrensentwicklung; WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2. Auflage, 2013.

## Kapitel 4: Chemische Prozesstechnologien



### 4.1 Zielsetzung

In den chemischen Prozesstechnologien werden die Grundlagen der chemischen Reaktionen im industriellen Maßstab angewandt. Ziel ist es, den Studierenden ein Verständnis davon zu vermitteln, auf welche Weise sich Laborverfahren in den technischen Maßstab übertragen lassen. Sie sollen lernen, mit welchen Mitteln die chemische Technik Probleme des Stoff- und Wärmetransports in den jeweiligen Produktionsmaßstäben löst. Zudem sollen auch die Relationen der unterschiedlichen Größenordnungen sowie die Skalen der Prozesse dargestellt werden. Ferner sollen sie Grundkenntnisse erlangen, welche die Entwicklung neuer bzw. die Verbesserung bestehender Verfahren ermöglichen; dies ist insbesondere für die Tätigkeit des Chemikers in der industriellen Praxis von Bedeutung.

Hierzu gehört u.a. auch eine Einführung in die Praxis der Verfahrensentwicklung. Dafür werden ausgewählte, wichtige Prozesse der chemischen Industrie vorgestellt. Dabei wird auf das interdisziplinäre Feld der chemischen Energiespeicherung und den Rohstoffwandel Bezug genommen. Beides hat Konsequenzen für die Verbundproduktion, welche die chemische Industrie kennzeichnet. Zudem werden biotechnologische Produktionsverfahren behandelt, für die anhand ausgewählter Beispiele Gemeinsamkeiten sowie Unterschiede zu den jeweiligen konventionell-chemischen Verfahren herausgearbeitet werden.

Das Zusammenwirken wirtschaftlicher, technisch-wissenschaftlicher, sicherheitstechnischer und umweltrelevanter Gesichtspunkte bei der Entwicklung chemischer und biotechnologischer Verfahren wird ebenfalls erörtert. Diese werden mit qualitativen und quantitativen Beurteilungskriterien mit Blick auf eine Lebenszyklus- bzw. und Ökoeffizienzanalyse verknüpft und unterlegt. Anhand ausgewählter Verfahren sollen immer wiederkehrende Fragestellungen und Lösungen der technischen Reaktionsführung und Stofftrennung sowie des Rohstoff-, Produkt- und Energieverbundes exemplarisch behandelt werden.

### 4.2 Inhaltsbeschreibung

#### 4.2.1 Exemplarische Beschreibung wichtiger Prozesse

Hier stehen drei Ziele im Vordergrund. Zum einen wird die stoffliche Verflechtung in der industriellen Chemie dargelegt: aus wenigen Rohstoffen entsteht eine kleine Zahl von Grundchemikalien, von denen sich dann eine Vielzahl von Zwischen- und Endprodukten ableitet. Zum anderen sind charakteristische Verfahrensweisen und Reaktionsführungen beispielhaft vorzustellen. Ferner soll die Bedeutung katalytischer Prozesse betont werden. Eine enzyklopädische Darstellung aller technischen Prozesse kann nicht erfolgen, vielmehr muss anhand einer Auswahl typischer Verfahren das Verständnis für die grundlegen-

den Fragestellungen vermittelt werden. Mittels ausgewählter Prozessbeispiele wird eine Verknüpfung zu den erworbenen Kompetenzen in der chemischen Reaktionstechnik sowie zu thermischen und mechanischen Grundoperationen hergestellt und im konkreten Kontext veranschaulicht und angewendet. Drei Beispiele sollen dies illustrieren:

### **Produktion von Schwefelsäure**

Für die Produktion von Schwefelsäure nach dem Doppelkontaktverfahren wird zunächst die Bereitstellung des Schwefels als Rohstoff (Hydrodesulfurierung von Rohölfractionen mit anschließendem Claus-Prozess) vorgestellt. Die Verbrennung des Schwefels zu  $\text{SO}_2$  wird der früheren Pyritröstung im Wirbelschichtreaktor gegenübergestellt. Die  $\text{SO}_2$ -Oxidation zu  $\text{SO}_3$  ist ein Beispiel für eine thermodynamisch limitierte, heterogen katalysierte Reaktion. Die reaktionstechnischen Grundlagen werden anhand des genutzten Hordenreaktors mit Zwischenkühlung und Zwischenabsorption erläutert, in dem ein Umsatz nahe am thermodynamischen Gleichgewicht (Umsatz-Temperatur-Diagramm) erreicht wird. Für die Abtrennung der Schwefelsäure wird auf die Grundoperationen der Absorption zurückgegriffen; dabei kann die Bedeutung der Energieintegration mittels Wärmetauscher betont werden. Schließlich werden die zahlreichen Folgeprodukte (organische Zwischenprodukte, Tenside, Wasch- und Düngemittel, Säuren und Salze) aufgeführt, die aus Schwefelsäure zugänglich sind.

### **Produktion von Propylenoxid**

Zunächst wird das derzeit vorwiegend genutzte Chlorhydrinverfahren zur Herstellung von Propylenoxid erläutert. Die Nachteile dieses Verfahrens, v.a. die großen Mengen an Calciumchlorid (2 t in 43 t pro t Propylenoxid) als Koppelprodukt, werden diskutiert. Als alternative Routen werden das SMPO-Verfahren (Styrene Monomer Propylene Oxide) und das HPPO-Verfahren (Hydrogen Peroxide Propylene Oxide) vorgestellt; beim SMPO-Verfahren wird gleichzeitig Styrol aus Ethylbenzol als nutzbarem Nebenprodukt gebildet, das HPPO-Verfahren (Hydrogen Peroxide Propylene Oxide) erlaubt die Umsetzung von Propylen mit Wasserstoffperoxid zu Propylenoxid unter Nutzung eines mikroporösen Feststoffkatalysators. Hier werden Aspekte der Katalysatorentwicklung (Titansilikalit-1 (TS-1)) sowie die entsprechenden Nachhaltigkeitskriterien (Atomökonomie, -effizienz, E-Faktor) berechnet. Zudem werden die aktuellen Anlagenkonzepte vorgestellt. Neuere Ansätze im Forschungs- und Entwicklungsstadium wie die Direktsynthese aus Propylen und gasförmigem Wasserstoffperoxid in Mikroreaktoren oder mit molekularem Sauerstoff und Wasserstoff an bifunktionellen Katalysatoren, z.B. Au/TS-1, werden behandelt.

### **Produktion von Acrylamid**

Acrylamid dient als Grundstoff für die Erzeugung von Polymeren und Co-Polymeren z. B. für den Einsatz als Flockungsmittel. Hergestellt wird es über die Hydratisierung von Acrylnitril in wässriger Lösung. Dafür stehen zwei Katalysatorsysteme zur Verfügung, die vorgestellt werden: 1. Kupfer (konventionell chemisch), 2. Nitrilhydratase (Biokatalysator). Es wird erläutert, dass der Umsatz der konventionellen Variante auf 60 bis 80% limitiert ist; Ursachen sind die sonst vermehrte Bildung des Folgeprodukts Acrylsäure und seine unerwünschte Polymerisation sowie der hohe Trenn- und Reinigungsaufwand des Verfahrens. Biotechnologisch lässt sich Acrylnitril mit einer Selektivität von nahezu 100 % in Acrylamid überführen. Durch den Einsatz eines Enzyms wird intrinsisch eine Folgehydrolyse vermieden. Betont wird die geringe Reaktionstemperatur von ca.  $10^\circ\text{C}$ , die durch die hohe Aktivität des Biokatalysators möglich ist, wodurch die Nebenproduktbildung weitestgehend unterdrückt wird. Das Enzym wird in Form immobilisierter Zellen des Nitrilhydratase-Produzenten *Rhodococcus rhodochrous* eingesetzt. Die Vorteile des biokatalytischen gegenüber dem kupferbasierten Verfahren werden diskutiert.

## **4.2.2 Grundlagen der Verfahrensentwicklung**

Die stoffliche Gliederung dieses Teils umfasst die allgemeinen Randbedingungen der chemischen Industrie, die technisch-wissenschaftlichen und wirtschaftlichen Gesichtspunkte sowie die praktische Durchführung eines Verfahrens. Zu den allgemeinen Randbedingungen gehören: Energie- und Rohstoffversorgung, Koppelprodukte, Ressourcenschonung durch stoffliche und energetische Wiederverwertung, Werksverbund, Standortwahl, Umwelt- und Arbeitsschutz, Sicherheit, Lagerung, Transport. Hier sollen auch die Struktur und Organisation eines Unternehmens vorgestellt werden. Die wirtschaftli-

chen Gesichtspunkte behandeln die verschiedenen Kostenarten (Herstellkosten, Investitionen, Inbetriebnahme, Rohstoff-, Personal- und Energiekosten, Instandhaltung) sowie Erlöse und Ergebnis. Unter technisch-wissenschaftlichen Gesichtspunkten wird auf die Auswirkungen neuer Reaktionswege, Ausbeute- und/oder Selektivitätssteigerung, neuer Rohstoffe (Primär- und Sekundärrohstoffe sowie Energierohstoffe), auf neue Verfahrens- und Reaktorkonzepte sowie die Bedeutung der Katalyse etc. eingegangen.

Die Verfahrensentwicklung beinhaltet die Übertragung eines Verfahrens vom Labor ins Technikum, die Massen- und Energiebilanz eines Verfahrens, das Verständnis von Blockfließbildern, Projektierung, Auswahl geeigneter Apparate (Konstruktion, Werkstoffe), Einsatz von Mess-, Regel- und Prozessleittechnik sowie Anlagenbau und -inbetriebnahme.

Der Schwerpunkt der Ausbildung liegt in der Vermittlung eines Verständnisses für die Wahl von Werkstoff, Reaktor und Produktionsparametern sowie für das Wärmestrommanagement.

In Ergänzung zu Exkursionen in Chemiebetriebe sollen Fragen der beruflichen Tätigkeit des Chemikers einen besonderen Raum einnehmen. Anhand von Prozessen kann dargestellt werden, wie sich die Verfahrensentwicklung in Zusammenarbeit von Chemikern, Biotechnologen, Verfahrensingenieuren und Ingenieuren verschiedener Fachrichtungen vollzieht.

## 4.3 Vorlesungsgliederung

### 4.3.1 Stoffliche Aspekte

Aus den im Folgenden aufgeführten Prozessen muss eine Auswahl getroffen werden. Sie muss einerseits die Breite der Produkte und andererseits der Vielfalt der Prozesstechnologien vor dem Hintergrund der Struktur und wirtschaftlichen Entwicklung der chemischen Industrie abbilden. Bei der Darstellung der Inhalte können die Bezüge zu den grundlegenden Themen der thermischen und mechanischen Grundoperationen (Apparate, Misch- und Trennprinzipien) sowie der chemischen Reaktionstechnik (Thermodynamik, Kinetik, Reaktoren) hergestellt werden. Besonderes Augenmerk gilt dabei der Übertragung von im Labor angewendeten Synthesestrategien in den Maßstab der industriellen Produktion und den Besonderheiten großtechnischer Prozesse. Hierbei werden die Aspekte der Produktion auf unterschiedlichen Mengen- und Volumenskalen hervorgehoben und die Prozessintegration entlang der gesamten Wertschöpfungskette behandelt. Ein weiterer Fokus liegt in der Umsetzung der Prinzipien von Nachhaltigkeit und produktionsintegriertem Umweltschutz, besonders mit Blick auf die Energie- und Rohstoffwende und die damit verbundenen Aspekte der Sicherung der Rohstoffbasis bzw. Standortwahl.

#### a) Prozesse zur Rohstoffverarbeitung

Erdöl (Lagerstättenbildung, petrochemische und Kraftstoffraffinerie), Erdgas (einschl. Steam Reforming), Kohle (Verkokung, Hydrierung, Vergasung), Schwefel (Claus-Prozess), nachwachsende Rohstoffe (Biomasse, CO<sub>2</sub>), chemische Speicherung regenerativer Energien (Windenergie, Photovoltaik, Solarthermie, Photokatalyse) in Form von Methanol (Power-to-Liquid) oder Methan (Power-to-Gas), Technische Gase (Luftzerlegung), Wasser, Gewinnung und Verarbeitung mineralischer Rohstoffe (Salze, Phosphat, Erze).

#### b) Prozesse zur Herstellung von Grundchemikalien

Erdölchemie, Cracken, Pyrolyse, Treibstoffe und Petrochemikalien, Synthesegas, Ammoniak, Schwefelsäure, Chlor und Natronlauge, Wasserstoff, BTX-Aromaten, Methanol.

#### c) Zwischenprodukte

Anorganische Zwischenprodukte:

Säuren (Salzsäure, Salpetersäure, Phosphorsäure) und ihre Salze, Phosphor, Schwefel, Wasserstoffperoxid, Füllstoffe, Katalysatorträger, anorganische Fasern etc., organische Zwischenprodukte und Feinchemikalien: Olefine (Steamcracker) und Aromaten, sauerstoffhaltige (Alkohole, Ester, Säuren, Anhydri-

de, Epoxide), stickstoffhaltige (Amine, Lactame, Nitrile), halogenhaltige, phosphorhaltige, schwefelhaltige oder metallorganische Zwischenprodukte und Zwischenprodukte der Bioraffinerie.

d) Endprodukte

Polymere, Polymeradditive, Kraftstoffadditive, Detergentien, Agrochemikalien, Pharmaprodukte, Fermentationsprodukte, Düngemittel, Farbstoffe, Pigmente, Keramik, Metalle, Reinstoffe (Silicium), Gläser und Baustoffe/Zement.

e) Nachhaltige Chemie und produktionsintegrierter Umweltschutz

Steigerung der Ressourcen- und Energieeffizienz, Erhöhung der Selektivität, Reintegration von Sekundärrohstoffströmen in die Wertschöpfungskette, integrierte Prozesse, Grundlagen der Ökobilanzierung, Schadstoffentfernung in mobilen (Kraftfahrzeuge) und stationären (Kraftwerke, Müllverbrennungsanlagen) Anlagen, Abwasserbehandlung, Substitution von Rohstoffen und Recycling.

### 4.3.2 Verfahrensentwicklung

Die Verfahrensentwicklung schließt Projektierung, Planung und Bau von Chemieanlagen ein. Sie behandelt neben Wirtschaftlichkeitsbetrachtungen die Randbedingungen, die der Prozessentwicklung zugrunde liegen (Rohstoffe, Standort, Energiequellen, Produktionsskalen) sowie Zeit- und Kostenaspekte, Ablaufpläne und das Erstellen von Rohrleitungs- und Instrumentenfließbildern. Grundlagen der Mess-, Steuer- und Regelungstechnik werden vorgestellt. Insbesondere werden Kriterien für die Auswahl von alternativen Produktionsrouten und die Integration von Eduktvorbereitung und Produktaufbereitung sowie für den Energie- und Stoffverbund der Chemieanlagen erarbeitet. Bei der Vorstellung der Inhalte werden Maßnahmen der Sicherheitstechnik und des (produktionsintegrierten) Umweltschutzes sowohl bei der Auswahl der einzelnen Apparate und Grundoperationen als auch im Hinblick auf den Gesamtprozess integriert.

a) Allgemeine Randbedingungen der chemischen Industrie

Energie- und Stoffversorgung, Koppelproduktion, Werksverbund, Standortwahl, produktionsintegrierter Umweltschutz, Arbeitsschutz, Sicherheit, Lagerung, Transport/ Logistik, Struktur und Organisation eines Chemieunternehmens.

b) Wirtschaftliche Gesichtspunkte

Kostenarten (Herstellkosten, Investitionen, Inbetriebnahme, Rohstoff-, Personal- und Energiekosten, Instandhaltung), Erlöse, Ergebnis, Feasibility-Studien.

c) Technisch-wissenschaftliche Gesichtspunkte

Auswahl der Rohstoffe und Reaktionswege unter ökologischen und ökonomischen Gesichtspunkten, Ausbeute und/oder Selektivitätsoptimierung, neue Rohstoffe (einschließlich Recycling), Minimierung von Nebenprodukten, Abgasen, Abwässern und Abfällen, konkurrierende Alternativverfahren.

d) Praktische Durchführung

Labor, Technikum, Demonstrationsanlage, Massen-, Stoff- und Energiebilanz, Fließbilder, Projektierung, Apparateauswahl (Konstruktion, Werkstoffe), Produkt-/Katalysatordesign, Messen, Steuern und Regeln, Prozessleittechnik, Anlagenbau und -inbetriebnahme, Genehmigungsverfahren, Störfallverordnung, Projektabwicklung (Netzplantechnik).

## 4.4 Hinweise zu Umfang und Schwerpunktsetzung

Der hier beschriebene und empfohlene Inhalt bedarf eines Umfangs von 2 SWS Vorlesung. Eine die Vorlesung begleitende Übung von 1 SWS sollte unbedingt angeboten werden, um den Vorlesungsinhalt an Hand von Beispielen zu üben und zu verstehen. Lehrinhalte, die sich für Schwerpunktsetzungen anbieten, sind:

Projektierungskurse empfehlen sich für die Vertiefung der Aspekte der Verfahrensentwicklung (Planung und Bau von Chemieanlagen) und zeigen die Anwendung der thermodynamischen und reaktionstechnischen Grundlagen für die Auslegung der Prozesse auf. Zur Veranschaulichung sei hier auch nochmals auf die Bedeutung von Pflichtexkursionen in die Industrie verwiesen, bei denen chemische Prozesse konkret und im Detail vertieft vorgestellt werden (s. Kap. 5, mindestens 0,5 SWS).

Je nach den im Vertiefungsstudium (Bachelor- und Master-Studiengang) angebotenen Vorlesungsinhalten bieten sich weitere Themen für Schwerpunktsetzungen an:

- Industrielle Katalyse: Mechanistisches Verständnis auf Mikroebene, Mikrokinetik, Katalysatordesign
- Simulation von Apparaten und Produktionsanlagen  
Ergebnisse für analytisch nicht oder nur schwer lösbare Probleme sind durch numerische Lösungsansätze zugänglich. Durch die Simulation kann somit die Funktion, die Effektivität und Wirtschaftlichkeit chemischer Produktionsanlagen veranschaulicht und verständlich gemacht werden. Die Komplexität der Betrachtung kann einerseits in der Breite (Verkettung aller vereinfacht dargestellter Komponenten einer Produktionsanlage) oder der Tiefe (detaillierte Simulation der Prozesse einzelner Apparate) liegen. Die Aufgabenstellung in der Chemischen Prozesstechnologie liegt dabei besonders in der Verknüpfung mehrere Komponenten, um ein Verfahren ganzheitlich zu simulieren. Vor dem Hintergrund der hohen Komplexität chemischer Produktionsanlagen können auch einzelne Apparate behandelt werden. Moderne Software zur Prozesssimulation kann genutzt werden, um die Planung in der industriellen Anwendung zu demonstrieren (z.B. Aspen Simulator<sup>®</sup>, HySys<sup>®</sup>, Pro/II<sup>®</sup>, DYNSIM<sup>®</sup>, System 7<sup>®</sup>, RSI<sup>®</sup>, CHEMCAD<sup>®</sup>, IPSEpro<sup>®</sup>, Presto Kinetics<sup>®</sup>, Predici<sup>®</sup>, Parsival<sup>®</sup>).
- Rohstoffgewinnung und -verarbeitung, Schließen von Stoffkreisläufen, Recycling, Verbundkonzepte in der chemischen Industrie zur Erhöhung der Energie- und Ressourceneffizienz
- Nachhaltige Produktion von Chemikalien und Kraftstoffen
- Wirtschaftlichkeitsanalyse von chemischen Prozessen, Standortabhängigkeit
- Quantitative Nachhaltigkeitskriterien, Ökoeffizienzanalysen (z.B. Umberto<sup>®</sup>, Sabento<sup>®</sup>), Ökobilanzen
- Politische und gesetzliche Rahmenbedingungen der chemischen Produktion
  - Zulassungsverfahren
  - EU-Gesetzgebung (Weißbücher)
  - REACH
  - GMP
- Neue Trends in der Prozesstechnik (Kombination mehrerer Grundoperationen, Modularisierung, unetstetige Betriebsweise)

## 4.5 Literatur

### 4.5.1 Einführende Literatur

- Baerns M., et al., Technische Chemie, 2. Aufl. Wiley-VCH, Weinheim, 2012.
- Emig, G., Klemm, E., Technische Chemie, 5. akt. Auflage, Springer-Verlag, Heidelberg, 2005
- Jess, A.; Wasserscheid, P.: Chemical Technology: An Integral Textbook, Wiley-VCH, Weinheim 2003.
- Bertau, M.; Müller, A.; Fröhlich, P.; Katzberg, M.: Industrielle Anorganische Chemie, 4. Aufl., Wiley-VCH, Weinheim 2013.
- Arpe, H.-J.: Industrielle Organische Chemie. Bedeutende Vor- und Zwischenprodukte, 6. Aufl., Wiley-VCH, Weinheim 2007.
- Behr, A.; Agar, D.W.; Jörissen, J. Einführung in die Technische Chemie, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 2010.

#### 4.5.2 Weiterführende Literatur

- Bernecker, G.: Planung und Bau verfahrenstechnischer Anlagen, 4. Aufl., Springer Verlag, Heidelberg 2001.
- Blaß, E.: Entwicklung verfahrenstechnischer Prozesse, 2. Aufl, Springer Verlag, Heidelberg, 1999.
- Elias, H.-G.: Makromoleküle, 6. Aufl., Bd.1 (1999), Bd. 2 (2001), Bd. 3 (2001), Wiley-VCH, Weinheim.
- Meyers, R.A.: Handbook of Petroleum Refining Processes, 2. Aufl., McGraw-Hill Book Co., New York 1996.
- Moulijn, J.A.; Makkee, M.; van Diepen, A.: Chemical Process Technology, Wiley & Sons, Chichester-New York-Weinheim 2001.
- Schönbacher, A.: Thermische Verfahrenstechnik – Grundlagen und Berechnungsmethoden für Ausrüstungen und Prozesse, Springer Verlag, Heidelberg 2002.
- Steinbach, J.: Sicherheitstechnik, Springer Verlag, Heidelberg 2002.
- Vogel, H.: Verfahrensentwicklung, Wiley-VCH, Weinheim 2002.
- Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, 6. Aufl., Wiley-VCH, Weinheim 2002.
- Dittmeyer, R., Keim, W., Kreysa, G., Oberholz, A., Winnacker-Küchler: Chemische Technologie, in 9 Bd., 5. Aufl. Wiley-VCH, Weinheim 2006.

#### 4.5.3 Literatur zur Biotechnologie

- Liese, A.; Seelbach, K.; Wandrey, C.: Industrial Biotransformations, 2. Aufl., Wiley-VCH, Weinheim 2006.
- Rehm, H.J.; Klein, J. (Hrsg.): Biotechnology. A Multi-Volume Comprehensive Treatise, 2. Aufl., Wiley-VCH, Weinheim 2000.
- G.E. Jeromin, M. Bertau, Bioorganikum, Wiley-VCH, Weinheim, 2005
- K. Drauz, H. Gröger, O. May (Hrsg.), Enzyme Catalysis in Organic Synthesis: A Comprehensive Handbook, 3. Aufl., Wiley-VCH, Weinheim, 2012
- H. Chmiel, Bioprozesstechnik, 2. Aufl., Elsevier-Spektrum, Heidelberg, 2005
- V.C. Hass, R. Pörtner, Praxis der Bioprozesstechnik mit virtuellem Praktikum, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 2011

# Kapitel 5: Vorlesungsbegleitende Lehrveranstaltungen

## 5.1 Technisch-chemisches Praktikum

Ausgehend von Grundkenntnissen der Thermodynamik von Phasengleichgewichten und der chemischen Kinetik soll das technisch-chemische Praktikum die Grundlagen für die Auslegung von chemischen Reaktoren sowie von Prozesseinheiten für thermische und mechanische Grundoperationen mit der dazugehörigen Mess- und Regelungstechnik vermitteln. Zudem bilden Versuche exemplarisch chemische, katalytische sowie biokatalytische Prozesse der Industrie ab und vermitteln das Zusammenspiel der vielfältigen Aspekte industrieller Verfahren. Dadurch werden die Studierenden in die Lage versetzt, ihre experimentellen Fähigkeiten und ihr bisheriges Wissen auf dem Gebiet der Technischen Chemie zu vertiefen, damit sie in ihrem späteren Berufsleben technisch-chemische Verfahren ausarbeiten, betreiben und verbessern können. Neben klassischen Praktikumsversuchen im Labor bzw. Technikum gewinnen dabei Internet-basierte bzw. sogar über das Internet ferngesteuerte Experimente zunehmend an Bedeutung (siehe dazu Kapitel 5.3 „Moderne Lehrmethoden“).

Unter Beachtung der jeweiligen Vorlesungsschwerpunkte sollte das technisch-chemische Praktikum folgende Komplexe umfassen:

### *Praktikumsversuche zur chemischen Reaktionstechnik*

- Ideale und reale Reaktortypen:
  - o Umsatz
  - o Verweilzeitverhalten
  - o Betriebszustände
  - o Wärmebilanz, -transport, -übertragung
- Mikroreaktionstechnik
- Mikro- und makrokinetische Untersuchungen inkl. Stofftransportlimitierung bei heterogenen Reaktionen

### *Praktikumsversuche zu thermischen und mechanischen Grundoperationen*

- Wärmeübertragung (z.B. Doppelrohrwärmeübertrager)
- Thermische Trennverfahren, z.B.
  - o Rektifikation
  - o Extraktion
  - o Absorption
  - o Adsorption/Chromatographie
  - o Kristallisation
  - o Membrantrennverfahren
- Mechanische Grundoperationen, z.B.
  - o Mischen, Rühren, Begasen, Filtrieren, Zerkleinern
- Messen, Steuern, Regeln von chemischen/biochemischen Prozessstufen

### *Praktikumsversuche zu chemischen Prozesstechnologien*

- Experimentelle Durchführung ausgewählter chemischer, katalytischer, biokatalytischer Verfahrensstufen, z.B.
  - o Reformieren, Cracken
  - o Synthesegaschemie (z.B. Hydroformylierung)
  - o Wacker-Höchst-Prozess
  - o Aufschluss/Verarbeitung biogener Rohstoffe
  - o Biodieselherstellung
  - o Enzymtechnik oder Kultivierungsprozesse
  - o ggf. anorganisch-chemische Prozesse (z.B. Chloralkali-Elektrolyse (Membranverfahren), Abgaskatalyse (De-NO<sub>x</sub>/-N<sub>2</sub>O))

- ggf. auch kombinierte Reaktion/Stofftrennung nach Methoden der Prozessintensivierung (z.B. Reaktivdestillation)

## 5.2 Exkursionen in die chemische und chemisch-pharmazeutische Industrie

Exkursionen (Chemie, Pharma, Raffinerien, Zellstoffherstellung u.ä.) sollen einen Beitrag dazu leisten,

- die Praxisrelevanz der in den Vorlesungen, Praktika und Rechenübungen vermittelten Lehrinhalte sichtbar zu machen,
- anschaulich zu zeigen, welche Probleme zu lösen sind, um einen chemischen Prozess vom Labor in den Industriemaßstab zu überführen oder eine Anlage über lange Zeit „stabil“ zu fahren bzw. ein Verfahren bei laufendem Betrieb weiter zu verbessern,
- die enge Verknüpfung von Prozesstechnologien, chemischer/biochemischer Reaktions- und Verfahrenstechnik, Sicherheitstechnik, Ökologie und Ökonomie zu verdeutlichen,
- die Bedeutung der Kooperation mit Spezialisten für Verfahrenstechnik, Regelungstechnik, Prozessautomatisierung und Betriebsökonomie deutlich zu machen.

Exkursionen sollen außerdem die Gelegenheit bieten, neben dem Einblick in die berufliche Praxis aus erster Hand Informationen über Einstellungskriterien und Aufstiegsvoraussetzungen zu erhalten.

Die inhaltliche Gestaltung der Exkursion sollte sich an den betrieblichen Möglichkeiten im Hinblick auf die genannten Zielstellungen orientieren. Um einen möglichst hohen Mehrwert der Exkursionen zu erreichen, empfiehlt es sich,

- die inhaltlichen Schwerpunkte vorher mit den Betrieben abzusprechen und in den Lehrveranstaltungen darzustellen und
- die Studierenden zu beauftragen, Exkursionsberichte zu einem prozessspezifischen Thema und/oder zu einem Querschnittsthema zu erstellen. Die Aufgabenstellung sollte bereits vor der Exkursion benannt werden.

## 5.3 Moderne Lehrmethoden (E-Learning / Blended Learning)

Die Allgegenwärtigkeit des Internets und die Prägung der neuen Studierendengenerationen durch Kommunikationsportale, Computerspiele und Foren eröffnen die Möglichkeit, traditionelle Lehre in Präsenzveranstaltungen (Vorlesungen, Übungen, Praktika) durch zeitlich und räumlich entkoppelte elektronische Angebote zu ergänzen. Dieses „*Blended Learning*“ ermöglicht eine individuell passgenaue Versorgung mit zusätzlichem Lehrangebot, das idealerweise auch solche Lerntypen bedient, die sich mit traditionellen Formaten schwertun.

Schon seit den Neunzigern hat es interaktive Formate wie das Spiel von T.W. Fraser Russell (University of Delaware) gegeben, das sein Buch „Mass and Heat Transfer“ begleitet, oder das Lehrmodul „*Vicher*“ von J.T. Bell und S. Fogler (University of Michigan), das chemische Reaktionstechnik in einer virtuellen Realität vermittelt. Einen weiteren Schritt in die Richtung von Computerspielen stellt „Die Rettung der Zink & Co.“ dar (V. Deringer, S. Heddrich, M.A. Liaw; RWTH Aachen). Hier lösen die Studierenden vorlesungsbegleitend reaktionstechnische Aufgaben, wobei ihr Avatar in der virtuellen Fabrik mit anderen Charakteren zusammentrifft und für richtig gelöste Aufgaben sein Budget aufstockt. Der Einsatz von eigens entwickelten Computerspielen und Simulatoren in der Lehre, wie er bereits stark z. B. im medizinischen Bereich oder in der Luftfahrt Ausbildung genutzt wird, eröffnet auch für die technische Chemie noch große Chancen. Die Verknüpfung von Sachverhalten in einem industriell relevanten Zusammenhang ist hier auch für hohe Studierendenzahlen problemlos vermittelbar. Die Skalierbarkeit ist ebenfalls bei der OpenCourseWare (v.a. MIT) und ähnlichen Formaten gegeben. Für die technische Chemie ist das Concept Warehouse der AIChE zu nennen, das eine umfangreiche Aufgabensammlung umfasst, die sich auch für die dort empfohlene „*Peer Instruction*“ eignet. Dabei wird in der Übung eine Aufgabe zunächst individuell gelöst, dann mit den Sitznachbarn diskutiert und die eigene Antwort danach ggf. revidiert. Dieses Format lässt sich auch auf Übungen außerhalb der Veranstaltungsräume ausweiten. Die interaktive Komponente ist schließlich auch ein zentrales Element bei MOOCs (*Massive Open*

Online Courses), die über die Gruppe der Studierenden hinaus eine große Öffentlichkeit einladen, viele Wochen lang einen Kurs zum jeweiligen Thema über das Internet zu verfolgen und zu absolvieren. MOOCs zur technischen Chemie wären so eher als Werbung für das Fach und als öffentliche Information zu sehen.

„Blended Learning“-Angebote zur Weiterbildung im Fachbereich Technische Chemie werden z.B. von der Universität Leipzig angeboten ([www.tc-compact.de](http://www.tc-compact.de)), wobei Elemente von Präsenzveranstaltungen und Online-Angebote kombiniert werden. Zudem sei besonders auf das internetbasierte und frei zugängliche Lernmaterial in der "Chemgapedia" zur Technischen Chemie hingewiesen ([http://www.chemgapedia.de/vsengine/topics/de/Chemie/Technische\\_00032Chemie/index.html](http://www.chemgapedia.de/vsengine/topics/de/Chemie/Technische_00032Chemie/index.html)). Es deckt in strukturierten Lerneinheiten unterschiedlichen Umfangs zahlreiche Themen bis hin zu ausgewählten Praktikumsversuchen ab. Unter anderem besteht die Möglichkeit Praktikumsversuche online ferngesteuert durchzuführen, wodurch das klassische Praktikum als Präsenzveranstaltung räumlich entkoppelt wird.

## 5.4 Literatur:

- Kripylo, P.; Vogt, F.: Praktikum der Technischen Chemie, Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie GmbH, Leipzig Stuttgart 1993.
- Patat, F.; Kirchner, K.: Praktikum der Technischen Chemie, 4. Aufl., Walter de Gruyter, Berlin 1986.
- Reschetilowski, W.: Technisch-Chemisches Praktikum, Wiley-VCH, Weinheim 2002.

### Autoren:

Prof. Dr. A. Brehm, Universität Oldenburg (Kapitel 2)  
Prof. Dr. R. Dittmeyer, Karlsruher Institut für Technologie, Karlsruhe (Kapitel 2)  
Prof. Dr. R. Gläser, Universität Leipzig (Kapitel 4)  
Prof. Dr.-Ing. E. Klemm, Universität Stuttgart (Kapitel 3, Schlussredaktion)  
Dr.-Ing. R. Krähnert, Technische Universität Berlin (Kapitel 1 und 5)  
Prof. Dr. M. Liauw, RWTH Aachen (Kapitel 5)  
Dr. M. Rose, RWTH Aachen (Kapitel 1 und 5)  
Prof. Dr. K. Wagemann, DECHEMA e.V. (Kapitel 1 und 5, Schlussredaktion)

### Außerdem haben mitgewirkt:

Prof. Dr. M. Bertau, Technische Universität Bergakademie Freiberg  
Prof. Dr. M. Bron, Universität Oldenburg  
Prof. Dr. M. Busch, Technische Universität Darmstadt  
Prof. Dr. W. Grünert, Universität Bochum  
Prof. Dr. J.-D. Grunwaldt, Karlsruher Institut für Technologie, Karlsruhe  
Prof. Dr. H.-U. Moritz, Universität Hamburg  
Prof. Dr. F. Scheffler, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg  
Prof. Dr. T. Scheper, Leibniz Universität Hannover  
Prof. Dr. R. Schomäcker, Technische Universität Berlin  
Prof. Dr.-Ing. H. Vogel, Technische Universität Darmstadt  
Dr. A. J. Vorholt, Technische Universität Dortmund  
Prof. Dr.-Ing. H.-J. Warnecke, Universität Paderborn







**DECHEMA**

Gesellschaft für Chemische Technik  
und Biotechnologie e.V.

DECHEMA e.V.  
Gesellschaft für Chemische Technik  
und Biotechnologie e.V.  
D-60486 Frankfurt

Postfach 15 01 04  
D-60061 Frankfurt

Telefon 069 75 64 0  
Telefax 069 75 64 201