

Vorwort XIII

Die Autoren XV

**Enzyklopädien und Nachschlagewerke zur
Technischen Chemie** XVII

Symbolverzeichnis XIX

Teil I	Einführung in die Technische Chemie	1
	<i>Arno Behr, Ulfert Onken</i>	
1	Chemische Prozesse und chemische Industrie	1
1.1	Besonderheiten chemischer Prozesse	1
1.2	Chemie und Umwelt	2
1.3	Chemiewirtschaft	3
1.3.1	Einteilung der Chemieprodukte	3
1.3.2	Chemiefirmen werden Großunternehmen – ein historischer Rückblick	4
1.3.3	Strukturwandel in der Chemieindustrie	5
1.4	Struktur von Chemieunternehmen	6
1.5	Bedeutung von Forschung und Entwicklung für die chemische Industrie	7
1.5.1	Wissenschaft und chemische Technik	7
1.5.2	Betriebsinterne Forschung	8
1.6	Entwicklungstendenzen und Zukunftsaussichten der chemischen Industrie	10
	<i>Literatur</i>	11
2	Charakterisierung chemischer Produktionsverfahren	13
2.1	Laborverfahren und technische Verfahren	13
2.1.1	Chlorierung von Benzol	13
2.1.2	Oxychlorierung von Benzol	14
2.1.3	Herstellung von Azofarbstoffen	14
2.1.4	Zusammenfassung	15
2.2	Gliederung chemischer Produktionsverfahren	15
2.3	Darstellung chemischer Verfahren und Anlagen durch Fließschemata	18
2.3.1	Grundfließschema	19
2.3.2	Verfahrensfließschema	19
2.3.3	Rohrleitungs- und Instrumenten (RI)- Fließschema	19
2.3.4	Mess- und Regelschema	21
2.3.5	Spezielle Schemata	21
	<i>Literatur</i>	22

Teil II	Chemische Reaktionstechnik	23
	Einführung	23
3	Grundlagen der Chemischen Reaktionstechnik	23
	<i>Manfred Baerns, Hanns Hofmann</i>	
3.1	Grundbegriffe und Grundphänomene	23
3.1.1	Klassifizierung chemischer Reaktionen	24
3.1.2	Grundbegriffe und Definitionen	24
3.1.3	Stöchiometrie chemischer Reaktionen	26
3.1.3.1	Zusammensetzung des Reaktionsgemisches	26
3.1.3.2	Schlüsselkomponenten und Schlüsselreaktionen	27
3.1.3.3	Reaktionsfortschritt	30
3.1.3.4	Zusammenhang zwischen Stöchiometrie und Reaktionskinetik	31
3.2	Chemische Thermodynamik	33
3.2.1	Reaktionsenthalpie	33
3.2.2	Gleichgewichtsumsatz	35
3.2.3	Simultangleichgewichte	38
3.2.3.1	Relaxationsmethode	38
3.2.3.2	Ermittlung der Gleichgewichtszusammensetzung durch Minimierung der Gibbs'schen Enthalpie	40
3.3	Stoff- und Wärmetransportvorgänge	41
3.3.1	Molekulare Transportvorgänge	41
3.3.1.1	Diffusion	41
3.3.1.2	Wärmeleitung	44
3.3.2	Diffusion in porösen Medien	44
3.3.2.1	Molekulare Porendiffusion	45
3.3.2.2	Knudsen-Diffusion in Poren	45
3.3.2.3	Diffusiver Stofftransport im Übergangsbereich von molekularer zu Knudsen-Diffusion	46
3.3.2.4	Poiseuille-Strömung in Poren	47
3.3.2.5	Sonderfälle der Diffusion in porösen Feststoffen	47
3.3.3	Wärmeleitfähigkeit in porösen Feststoffen	48
3.3.4	Stoff- und Wärmetransport an Phasengrenzflächen	49
3.3.5	Wärmeübergang	51
3.3.6	Stoffübergang	54
	<i>Literatur</i>	56
4	Kinetik chemischer Reaktionen	59
4.1	Mikrokinetik chemischer Reaktionen	59
4.1.1	Einführung	59
4.1.2	Kinetik homogener Gas- und Flüssigkeitsreaktionen	61
4.1.3	Kinetik heterogen katalysierter Reaktionen	65
4.1.3.1	Katalytische Oberflächenreaktionen	65
4.1.3.2	Abhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeit von den Gasphasenkonzentrationen	66

- 4.1.3.3 Katalytische Oberflächenreaktion als geschwindigkeitsbestimmender Schritt 66
- 4.1.3.4 Komplexe Vorgänge bei einer einfachen Reaktion 67
- 4.1.4 Kinetik der Desaktivierung heterogener Katalysatoren 70
- 4.1.5 Kinetik von Gas-Feststoff-Reaktionen 71
- 4.1.6 Kinetik homogen und durch gelöste Enzyme katalysierter Reaktionen 71
Literatur 72
- 4.2 Ermittlung der Kinetik chemischer Reaktionen 73
 - 4.2.1 Zielsetzungen kinetischer Untersuchungen 73
 - 4.2.2 Betriebsweise und Bauart von Laborreaktoren für kinetische Untersuchungen 74
 - 4.2.2.1 Allgemeine apparative Gesichtspunkte 77
 - 4.2.2.2 Spezielle Laborreaktoren 79
 - 4.2.2.2.1 Laborreaktoren für homogene Reaktionen 79
 - 4.2.2.2.2 Laborreaktoren für heterogen katalysierte Gasreaktionen 80
 - 4.2.2.2.3 Laborreaktoren für Gas-Feststoff-Reaktionen 83
 - 4.2.2.2.4 Laborreaktoren für Gas-Flüssigkeit-Reaktionen 84
 - 4.2.2.2.5 Kalorimetrie 87
 - 4.2.3 Planung und Auswertung kinetischer Messungen zur Ermittlung von Geschwindigkeitsgleichungen 89
 - 4.2.3.1 Klassische Methoden 90
 - 4.2.3.1.1 Einfache Reaktionen 90
 - 4.2.3.1.2 Komplexe Reaktionen 97
 - 4.2.3.2 Statistisch begründete Methoden der Versuchsplanung und Auswertung 101
 - 4.2.3.2.1 Lineare Regression 102
 - 4.2.3.2.2 Normalgleichungen und Standardnormalgleichungen 103
 - 4.2.3.2.3 Beurteilung einer Regression 105
 - 4.2.3.2.4 Grenzen der „multiplen linearen Regression“ 106
 - 4.2.3.3 Versuchspläne für die lineare Regression 108
 - 4.2.3.3.1 Grundsätzliches zur Aufstellung von Versuchsplänen 108
 - 4.2.3.3.2 Ausgewählte Versuchspläne für lineare Regressionen 109
 - 4.2.3.3.3 Faktorielle Versuchspläne 109
 - 4.2.3.4 Auswertungssoftware für kinetische Daten 113
Literatur 114
- 4.3 Makrokinetik chemischer Reaktionen – Zusammenwirken von chemischer Reaktion und Transportvorgängen 116
 - 4.3.1 Heterogen katalysierte Gasreaktionen 116
 - 4.3.1.1 Äußere Transportvorgänge 116
 - 4.3.1.1.1 Stoffübergang und katalytische Reaktion 116
 - 4.3.1.1.2 Stoff- und Wärmeübergang beim Ablauf einer heterogen katalysierten Reaktion 119

- 4.3.1.2 Innere Transportvorgänge und chemische Reaktion 120
- 4.3.1.2.1 Porendiffusion und katalytische Reaktion 121
- 4.3.1.2.2 Zusammenwirken von katalytischer Reaktion, Diffusion und Wärmeleitung im porösen Katalysator 124
- 4.3.1.2.3 Gleichzeitiges Auftreten äußerer und innerer Konzentrationsgradienten 125
- 4.3.1.2.4 Beeinflussung der Temperaturabhängigkeit der Reaktion durch Stofftransportvorgänge 126
- 4.3.1.3 Einfluss der Transportvorgänge auf die Selektivität 127
- 4.3.1.3.1 Einfluss der äußeren Transportvorgänge auf die Selektivität 127
- 4.3.1.3.2 Einfluss der inneren Transportvorgänge (Porendiffusion) auf die Selektivität 130
- 4.3.1.4 Kriterien zur Abschätzung des Einflusses von Stoff- und Wärmetransportvorgängen auf den Reaktionsablauf 131
- 4.3.2 Fluid-Fluid-Reaktionen 133
- 4.3.2.1 Einfluss des Stoffübergangs auf die effektive Reaktionsgeschwindigkeit 133
- 4.3.2.2 Einfluss des Stoffübergangs bei Fluid-Fluid-Reaktionen auf die Selektivität 138
- 4.3.3 Gas-Feststoff-Reaktionen 138
- 4.3.3.1 Nichtporöse Feststoffe 139
- 4.3.3.2 Poröse Feststoffe 143
- Literatur* 144

5 Chemische Reaktoren und deren reaktionstechnische Modellierung 145

Albert Renken

- 5.1 Allgemeine Stoff- und Energiebilanzen 145
- 5.2 Absatzweise betriebene Rührkesselreaktoren 145
- 5.2.1 Stoffbilanz 146
- 5.2.2 Wärmebilanz 149
- 5.2.2.1 Adiabate Reaktionsführung 149
- 5.2.2.2 Polytrope Reaktionsführung 151
- 5.3 Halbkontinuierlich betriebene Rührkesselreaktoren 152
- 5.4 Kontinuierlich betriebener idealer Rührkesselreaktor 153
- 5.4.1 Stoffbilanz des kontinuierlich betriebenen Rührkesselreaktors 153
- 5.4.1.1 Volumenbeständige Reaktionen 154
- 5.4.1.2 Nichtvolumenbeständige Reaktionen 155
- 5.4.2 Wärmebilanz des kontinuierlich betriebenen Rührkesselreaktors 156
- 5.5 Ideale Strömungsrohrreaktoren 160
- 5.5.1 Stoffbilanz 160
- 5.5.2 Wärmebilanz 161
- 5.5.2.1 Adiabate Reaktionsführung 161
- 5.5.2.2 Polytrope Reaktionsführung 162
- 5.6 Kombination idealer Reaktoren 163

- 5.6.1 Kaskade kontinuierlich betriebener
Rührkesselreaktoren 163
- 5.6.2 Strömungsrohrreaktor mit Rückführung 164
- 5.7 Reale homogene und quasihomogene Reaktoren
166
- 5.7.1 Verweilzeitverteilung in chemischen Reaktoren
167
- 5.7.2 Experimentelle Bestimmung der
Verweilzeitverteilung 167
- 5.7.2.1 Sprungfunktion 168
- 5.7.2.2 Pulsfunktion 168
- 5.7.2.3 Beliebige Eingangsfunktion 168
- 5.7.3 Verweilzeitverteilung in idealen Reaktoren 169
- 5.7.3.1 Idealer Strömungsrohrreaktor 169
- 5.7.3.2 Idealer kontinuierlich betriebener
Rührkesselreaktor 170
- 5.7.3.3 Reaktorkaskade 170
- 5.7.3.4 Laminar durchströmtes Rohr 171
- 5.7.4 Verweilzeitmodelle realer Reaktoren 171
- 5.7.4.1 Dispersionsmodell 172
- 5.7.4.2 Zellenmodell 174
- 5.7.4.3 Mehrparametrische Modelle 174
- 5.7.5 Verweilzeitverhalten realer Reaktoren 174
- 5.7.5.1 Rührkesselreaktoren 174
- 5.7.5.2 Strömungsrohrreaktoren 175
- 5.7.6 Einfluss der Verweilzeitverteilung und der
Vermischung auf die Leistung realer Reaktoren
177
- 5.7.6.1 Reaktionen 1. Ordnung 177
- 5.7.6.2 Reaktionen mit nichtlinearer Kinetik 178
- 5.7.7 Vermischung in realen Reaktoren 179
- 5.7.7.1 Segregation 179
- 5.7.7.2 Zeitpunkt der Vermischung 181
- 5.7.7.3 Einfluss der Segregation auf die Reaktorleistung
und Produktverteilung 182
- 5.8 Reale Mehrphasenreaktoren 185
- 5.8.1 Fluid-Feststoff-Systeme 185
- 5.8.1.1 Festbettreaktoren 185
- 5.8.1.2 Wirbelschichtreaktoren (vgl. Abschnitt 7.1.3.3)
187
- 5.8.2 Fluid-Fluid-Systeme (vgl. Abschnitt 4.3.2) 188
- 5.8.3 Gasförmig-flüssig-fest-Systeme
(vgl. Abschnitt 3.3.6; Tabelle 3.3.6) 190
- 5.8.3.1 Mehrphasen-Festbettreaktoren 191
- 5.8.3.2 Dreiphasenblasensäule 192
- 5.8.3.3 Mehrphasen-Rührkesselreaktoren 192
- 5.8.3.4 Strukturierte Mehrphasenreaktoren 192
Literatur 193
- 6 Auswahl und Auslegung chemischer Reaktoren 195**
- 6.1 Reaktorauswahl und reaktionstechnische
Optimierung 195
- 6.1.1 Einfache Reaktionen (Umsatzproblem) 195
- 6.1.1.1 Absatzweise betriebener Reaktor (RK) 195
- 6.1.1.2 Kontinuierlich betriebene Reaktoren 196

6.1.1.3	Temperaturführung	199
6.1.1.4	Isotherme Reaktionsführung	200
6.1.1.5	Adiabate Reaktionsführung	202
6.1.1.6	Adiabater Abschnittsreaktor	202
6.1.2	Komplexe Reaktionen (Ausbeuteproblem)	204
6.1.2.1	Parallelreaktionen	205
6.1.2.2	Folgereaktionen	206
6.1.2.3	Konkurrierende Folgereaktionen	207
6.1.2.4	Polymerisationsreaktionen	210
6.1.2.5	Temperaturführung	211
6.1.2.5.1	Parallelreaktionen	211
6.1.2.5.2	Folgereaktionen	211
6.2	Thermische Prozesssicherheit	212
6.2.1	Theorie der Wärmeexplosion	212
6.2.2	Parametrische Sensitivität	215
6.2.3	Halbkontinuierlich betriebene Rührkesselreaktoren	217
6.2.4	Kontinuierlich betriebene Rührkesselreaktoren	218
6.2.5	Strömungsrohrreaktoren	218
6.3	Mikrostrukturierte Reaktoren	218
6.3.1	Homogene Reaktionen	219
6.3.1.1	Mikrofluidik	219
6.3.1.2	Verweilzeitverteilung	219
6.3.1.3	Stoff- und Wärmeübergang	220
6.3.2	Heterogen katalysierte Fluid-Fest-Reaktionen	223
6.3.2.1	Innerer Stofftransport	223
6.3.2.2	Äußerer Stofftransport	224
6.3.2.3	Temperaturkontrolle	225
6.3.3	Fluid-Fluid-Reaktionen	225
	<i>Literatur</i>	225

Teil III Grundoperationen 227

Jürgen Grmehling, Axel Brehm

7	Konvektiver Stoff- und Wärmetransport	227
7.1	Strömungslehre	227
7.1.1	Strömungsarten, Reynoldssche Ähnlichkeit	227
7.1.2	Mechanik fließfähiger Medien	228
7.1.2.1	Grundlagen der Strömungsgesetze	228
7.1.2.2	Strömung „idealer Fluide“	228
7.1.2.3	Auftreten von Reibungskräften (Strömen von Flüssigkeiten)	229
7.1.3	Strömungsbedingter Druckverlust	230
7.1.3.1	Ungestörte Strömung – Durchströmen eines geraden Rohrs	230
7.1.3.2	Gestörte Strömung – Auftreten örtlicher Druckverluste	231
7.1.3.3	Ausbildung von Wirbelschichten	231
7.2	Fördern von Fluiden: Pumpen, Komprimieren, Vakuumherzeugung	233
7.2.1	Pumpencharakteristika und Pumpenwirkungsgrade	233
7.2.1.1	Pumpencharakteristika	233

7.2.1.2	Pumpenwirkungsgrade	234
7.2.2	Pumpen – Apparate zum Fördern von Flüssigkeiten	234
7.2.2.1	Arbeitsweise von Hubkolbenpumpen	234
7.2.2.2	Arbeitsweise von Kreiselpumpen	235
7.2.2.3	Arbeitsweise von Umlaufkolbenpumpen	236
7.2.3	Verdichten von Gasen	236
7.2.3.1	Druck-Volumen-Diagramm, ein- und mehrstufiges Verdichten	236
7.2.3.2	Bauarten von Kompressoren (Verdichtern)	238
7.2.3.3	Einsatzbereiche von Kompressoren	239
7.2.4	Vakuumerzeugung	240
7.3	Wärmetransportprozesse	241
7.3.1	Wärmeübertragung	241
7.3.1.1	Wärmetransport bei konvektiver Durchmischung	241
7.3.1.2	Wärmetransport durch Strahlung	243
7.3.2	Wärmeführung	244
7.3.2.1	Wärmeträger	244
7.3.2.2	Indirekte Temperaturlenkung	245
7.3.2.3	Direkte Temperaturlenkung	247
7.3.3	Apparative Möglichkeiten zur Temperaturlenkung	248
7.3.3.1	Bauarten von Wärmeaustauschern	248
7.4	Trocknung	249
7.4.1	Trocknungsgüter und Trocknungsarten	249
7.4.2	Kriterien zur Auslegung von Trocknern	249
7.4.3	Apparate zum technischen Trocknen	249
7.4.3.1	Konvektionstrockner	250
7.4.3.2	Kontaktrockner	250
	<i>Literatur</i>	251

8	Thermodynamische Grundlagen für die Berechnung von Phasengleichgewichten	253
8.1	Phasengleichgewichtsbeziehung	254
8.2	Dampf-Flüssig-Gleichgewicht	255
8.2.1	Anwendung von Zustandsgleichungen	256
8.2.2	Virialgleichung	258
8.2.3	Chemische Theorie	259
8.2.4	Anwendung von Aktivitätskoeffizienten-Modellen	259
8.2.5	Aktivitätskoeffizienten-Modelle	261
8.3	Vorausberechnung von Phasengleichgewichten	265
8.4	Konzentrationsabhängigkeit des Trennfaktors binärer Systeme	268
8.4.1	Bedingung für das Auftreten azeotroper Punkte	268
8.4.2	Rückstandslinien, Grenzdestillationslinien und Destillationsfelder	269
8.5	Flüssig-Flüssig-Gleichgewicht	272
8.6	Gaslöslichkeit	274
8.7	Fest-Flüssig-Gleichgewicht	276
8.8	Phasengleichgewicht für die überkritische Extraktion	279

8.9	Adsorptionsgleichgewichte	280
8.10	Osmotischer Druck	283
	<i>Literatur</i>	284
9	Auslegung thermischer Trennverfahren	287
9.1	Konzept der idealen Trennstufe	287
9.2	Realisierung mehrerer Trennstufen	287
9.3	Kontinuierliche Rektifikation	288
9.3.1	Rektifikationskolonne	288
9.3.2	Ermittlung der Zahl theoretischer Trennstufen	290
9.3.2.1	Binäre Systeme	291
9.3.2.2	Mehrkomponentensysteme	298
9.3.2.2.1	Short-cut-Methoden	298
9.3.2.2.2	Fenske-Gleichung	298
9.3.2.2.3	Konzept der Schlüsselkomponenten	300
9.3.2.2.4	Bestimmung des minimalen Rücklaufverhältnisses mit der Underwood-Gleichung	302
9.3.2.2.5	Festsetzung des Rücklaufverhältnisses und der theoretischen Stufenzahl nach Gilliland	302
9.3.2.2.6	Rigoreuse Auslegung von Rektifikationskolonnen	303
9.3.2.2.7	Matrixverfahren	303
9.3.2.2.7.1	Wang-Henke-Verfahren	303
9.3.2.2.7.2	Naphtali-Sandholm-Verfahren	308
9.3.3	Konzept der Übertragungseinheit	310
9.4	Trennung azeotroper und eng siedender Systeme	313
9.4.1	Rektifikative Trennung azeotroper und engsiedender Systeme ohne Zusatzstoff	314
9.4.1.1	Trennung durch Rektifikation im Vakuum oder bei erhöhtem Druck	314
9.4.1.2	Trennung binärer heteroazeotroper Systeme	316
9.4.1.3	Zweidruckverfahren	316
9.4.2	Rektifikation mit Hilfsstoffen	318
9.4.2.1	Extraktive Rektifikation	318
9.4.2.2	Azeotrope Rektifikation	320
9.4.3	Wasserdampfdestillation	322
9.5	Reaktive Rektifikation	322
9.6	Zahl der Kolonnen und mögliche Trennsequenzen	324
9.6.1	Energieeinsparung	325
9.7	Diskontinuierliche Rektifikation	326
9.7.1	Einfache diskontinuierliche Destillation	327
9.7.2	Mehrstufige diskontinuierliche Rektifikation	327
9.8	Auslegung von Rektifikationskolonnen	329
9.8.1	Bodenkolonnen	329
9.8.2	Packungskolonnen	332
9.8.3	Wärmetauscher	336
9.8.3.1	Verdampfer	336
9.8.3.2	Kondensatoren	338
9.9	Absorption	339

- 9.9.1 Lösemittelauswahl 340
- 9.9.2 McCabe-Thiele-Verfahren 340
- 9.9.3 Kremser-Gleichung 342
- 9.9.4 Chemische Absorption 344
- 9.9.5 Absorberbauarten 345
- 9.10 Flüssig-Flüssig-Extraktion 345
- 9.10.1 Auswahl des Extraktionsmittels 347
- 9.10.2 McCabe-Thiele-Verfahren 347
- 9.10.2.1 Kremser-Gleichung 349
- 9.10.3 Anwendung von Dreiecksdiagrammen 349
- 9.10.4 Extraktoren 352
- 9.10.4.1 Mixer-Settler 352
- 9.10.4.2 Extraktionskolonnen 353
- 9.10.4.3 Zentrifugalextraktoren 354
- 9.11 Fest-Flüssig-Extraktion 354
- 9.12 Extraktion mit überkritischen Fluiden 355
- 9.13 Kristallisation 356
- 9.13.1 Kristallisationsprozess 356
- 9.13.2 Kristallisatoren 357
- 9.14 Adsorption 359
- 9.14.1 Adsorptionsmittel 360
- 9.14.2 Adsorptions- und Desorptionsschritt 361
- 9.14.3 Adsorberbauarten 362
- 9.15 Membrantrennverfahren 364
- 9.15.1 Trennprinzip und Arbeitsweise 364
- 9.15.2 Arten von Membranverfahren 366
- 9.15.3 Membranmodule 368
- Literatur* 370

- 10 Mechanische Grundoperationen 371**
- 10.1 Mischen fluider Phasen 371
- 10.1.1 Mischen in flüssiger Phase 371
- 10.1.1.1 Aufbau von Rührbehältern;
Rührorgane und ihre Förderwirkung 371
- 10.1.1.2 Ermittlung des Leistungsbedarfs für Rührer 373
- 10.1.1.3 Begasen von Flüssigkeiten, Emulgieren und
Suspendieren 375
- 10.1.2 Flüssigkeitsverteilung in der Gasphase 376
- 10.1.2.1 Kriterien der Flüssigkeitsverteilung 376
- 10.1.2.2 Abtropfen, Strahl- und Lamellenzerfall 377
- 10.1.2.3 Einflussgrößen und Auswahlkriterien beim
Zerstäuben 378
- 10.2 Mechanische Trennverfahren 379
- 10.2.1 Partikelabtrennung aus Flüssigkeiten 379
- 10.2.1.1 Sedimentieren und Zentrifugieren 379
- 10.2.1.2 Filtrieren 382
- 10.2.2 Partikelabscheidung aus Gasströmen 386
- 10.2.2.1 Ausnutzung der Schwer- und der
Zentrifugalkraft 386
- 10.2.2.2 Filterelemente, Elektrofilter, Nassentstaubung
388
- 10.2.3 Trennen weiterer disperser Systeme 389
- 10.2.3.1 Emulsionstrennung 389
- 10.2.3.2 Auftrennen von Schäumen (Schaumbrechen
und Schaumverhinderung) 390

- 10.3 Verarbeiten von Feststoffen 391
- 10.3.1 Zerkleinern von Feststoffen 391
- 10.3.1.1 Grundlagen des Zerkleinerns 391
- 10.3.1.2 Energiebedarf beim Zerkleinern 393
- 10.3.1.3 Zerkleinerungsapparate 394
- 10.3.2 Klassieren und Sortieren 396
- 10.3.2.1 Auftrennen des Mahlgut nach Kornklassen (Klassieren) 396
- 10.3.2.2 Auftrennen des Mahlguts unter Ausnutzung von Stoffeigenschaften (Sortieren) 398
- 10.3.3 Formgebung 400
- Literatur* 402

Teil IV Verfahrensentwicklung 403

Arno Behr, Ulfert Onken

- 11 Gesichtspunkte der Verfahrensauswahl 403**
- 11.1 Stoffliche Gesichtspunkte 403
- 11.1.1 Phenol – sieben technische Synthesewege 403
- 11.1.1.1 Alkalischmelze von Natriumbenzolsulfonat 404
- 11.1.1.2 Wasserdampfhydrolyse von Chlorbenzol (Raschig-Hooker-Verfahren) 404
- 11.1.1.3 Alkalische Hydrolyse von Chlorbenzol 404
- 11.1.1.4 Cumolverfahren (Hock-Verfahren) 405
- 11.1.1.5 Toluoloxidation 405
- 11.1.1.6 Dehydrierung von Cyclohexanol/Cyclohexanon 406
- 11.1.1.7 Benzolhydroxylierung mit Distickstoffmonoxid 406
- 11.1.1.8 Vergleich der Phenolverfahren 406
- 11.1.2 Zusammenfassung 407
- 11.2 Katalyse 407
- 11.2.1 Was ist Katalyse? 407
- 11.2.2 Heterogene Katalyse 409
- 11.2.2.1 Grundprinzipien 409
- 11.2.2.2 Eigenschaften von Feststoff-Katalysatoren 410
- 11.2.3 Homogene Katalyse 411
- 11.2.4 Biokatalyse 413
- 11.2.4.1 Biokatalysatoren 414
- 11.2.4.2 Biotransformationen 414
- 11.2.4.3 Entwicklungschancen der Biokatalyse 417
- 11.2.5 Heterogene und homogene Katalyse – Vergleich und besondere Anwendungsformen 418
- 11.3 Energieaufwand 418
- 11.3.1 Energiearten und Energienutzung 418
- 11.3.2 Wasserstoff 419
- 11.3.2.1 Wasserstofferzeugung aus fossilen Rohstoffen 420
- 11.3.2.2 Wasserstofferzeugung durch Wasserelektrolyse 421
- 11.3.2.3 Vergleich: Wasserstoff aus fossilen Rohstoffen oder durch Wasserelektrolyse 422
- 11.3.2.4 Wasserstoff als Energieträger und Energiespeicher 422

11.4	Sicherheit	423
11.4.1	Exotherme Reaktionen	424
11.4.1.1	Ausfall der Kühlung am Beispiel der Blockpolymerisation von Styrol	424
11.4.1.2	Explosion eines Ethylenoxidbehälters als Beispiel einer Wärmeexplosion	425
11.4.1.3	Exotherme Sekundärreaktionen	425
11.4.2	Brennbare und explosive Stoffe und Stoffgemische	426
11.4.2.1	Explosionen	426
11.4.2.2	Explosionsbereich	426
11.4.2.3	Organische Peroxide	427
11.4.2.4	Maßnahmen zur Verhinderung von Explosionen	427
11.4.3	Toxische Stoffe	428
11.4.4	Zusammenfassung und Folgerungen	428
11.5	Umwelt	429
11.5.1	Luftverunreinigungen	429
11.5.2	Abwasserbelastungen	431
11.5.2.1	Ersatz des Chlorhydrinverfahrens für Ethylenoxid und Propylenoxid	432
11.5.2.2	Abwasserreinigung	433
11.5.3	Abfälle	436
11.5.4	Zusammenfassung und Folgerungen	438
11.6	Betriebsweise	439
11.6.1	Beispiel: Hydrierung von Doppelbindungen	439
11.6.1.1	Hydrierung im Suspensionsreaktor	439
11.6.1.2	Hydrierung im Rieselbettreaktor	440
11.6.2	Unterschiede zwischen diskontinuierlichen und kontinuierlichen Verfahren	440
11.6.3	Entscheidungskriterien	442
	<i>Literatur</i>	443
12	Verfahrensgrundlagen	445
12.1	Ausgangssituation und Ablauf	445
12.2	Verfahrensinformationen	447
12.2.1	Übersicht	447
12.2.2	Sicherheitstechnische Kenndaten	447
12.2.3	Toxikologische Daten	449
12.3	Stoff- und Energiebilanzen	451
12.3.1	Stoff- und Energiebilanzen – Werkzeug in Verfahrensentwicklung und Anlagenprojektierung	451
12.3.2	Stoffbilanzen	451
12.3.3	Energiebilanzen	456
12.4	Versuchsanlagen	456
12.4.1	Notwendigkeit und Aufgaben	456
12.4.2	Typen von Versuchsanlagen	457
12.4.3	Planung einer Versuchsanlage	458
12.5	Auswertung und Optimierung	458
12.5.1	Auswertung	459
12.5.2	Prozess-Simulation und Prozessoptimierung	459
	<i>Literatur</i>	460

- 13 **Wirtschaftlichkeit von Verfahren und Produktionsanlagen** 463**
- 13.1 Erlöse, Kosten und Gewinn 463
- 13.2 Herstellkosten 464
- 13.2.1 Vorkalkulation und Nachkalkulation 464
- 13.2.2 Ermittlung des Kapitalbedarfs 464
- 13.2.3 Ermittlung der Herstellkosten 467
- 13.3 Kapazitätsauslastung und Wirtschaftlichkeit 470
- 13.3.1 Erlöse und Gewinn 470
- 13.3.2 Fixe Kosten und veränderliche Kosten 470
- 13.3.3 Gewinn bzw. Verlust in Abhängigkeit von der Kapazitätsauslastung 471
- 13.4 Wirtschaftlichkeit von Projekten 472
- 13.4.1 Rentabilität als Maß für die Wirtschaftlichkeit 472
- 13.4.2 Kapitalrückflusszeit 473
- 13.4.3 Andere Methoden der Rentabilitätsbewertung 473
- 13.4.4 Entscheidung zwischen Alternativen 474
Literatur 477

- 14 **Planung und Bau von Anlagen** 479**
- 14.1 Projektablauf 479
- 14.2 Projektorganisation 480
- 14.3 Genehmigungsverfahren für Chemieanlagen 482
- 14.4 Anlagenplanung 482
- 14.5 Projektabwicklung 485
- 14.5.1 Ablaufplanung und -überwachung 485
- 14.5.2 Bau und Montage 488
Literatur 489

Teil V **Chemische Prozesse 491**
Arno Behr, Ulfert Onken

- 15 **Organische Rohstoffe** 491**
- 15.1 Erdöl 491
- 15.1.1 Zusammensetzung und Klassifizierung 491
- 15.1.2 Bildung und Vorkommen 491
- 15.1.3 Förderung und Transport 493
- 15.1.4 Erdölraffinerien 496
- 15.1.5 Thermische Konversionsverfahren 500
- 15.1.6 Katalytische Konversionsverfahren 501
- 15.2 Erdgas 506
- 15.2.1 Zusammensetzung und Klassifizierung 506
- 15.2.2 Förderung und Transport 506
- 15.2.3 Weiterverarbeitung 507
- 15.3 Kohle 508
- 15.3.1 Zusammensetzung und Klassifizierung 508
- 15.3.2 Vorkommen 509
- 15.3.3 Förderung 509
- 15.3.4 Verarbeitung 510
- 15.3.4.1 Verkokung 511
- 15.3.4.2 Kohlevergasung 513

- 15.3.4.3 Kohlehydrierung 516
- 15.4 Nachwachsende Rohstoffe 517
- 15.4.1 Bedeutung der nachwachsenden Rohstoffe 517
- 15.4.2 Fette und Öle 518
- 15.4.3 Kohlenhydrate 524
- 15.4.3.1 Cellulose 524
- 15.4.3.2 Stärke 526
- 15.4.3.3 Zucker 527
- 15.4.4 Pflanzliche Sekrete und Extrakte 528
- Literatur* 529

16 Organische Grundchemikalien 531

- 16.1 Alkane 531
- 16.1.1 Herstellung 531
- 16.1.1.1 Methan 531
- 16.1.1.2 Höhere *n*- und *iso*-Alkane 532
- 16.1.1.3 Cycloalkane 532
- 16.1.2 Verwendung 532
- 16.1.2.1 Methan 532
- 16.1.2.2 Höhere *n*-Alkane 533
- 16.1.2.3 Cycloalkane 534
- 16.2 Alkene 534
- 16.2.1 Herstellung 534
- 16.2.2 Verwendung 541
- 16.3 Aromaten 544
- 16.3.1 Herstellung 544
- 16.3.2 Verwendung 547
- 16.4 Acetylen 550
- 16.4.1 Herstellung 550
- 16.4.1.1 Acetylen aus Kohle 550
- 16.4.1.2 Acetylen aus Kohlenwasserstoffen 551
- 16.4.2 Verwendung 551
- 16.5 Synthesegas 552
- 16.5.1 Herstellung 552
- 16.5.1.1 Steamreforming 553
- 16.5.1.2 Partielle Oxidation 555
- 16.5.2 Verwendung 555
- 16.5.3 Kohlenmonoxid 556
- Literatur* 557

17 Organische Zwischenprodukte 559

- 17.1 Sauerstoffhaltige Verbindungen 559
- 17.1.1 Alkohole 559
- 17.1.1.1 Methanol 559
- 17.1.1.2 Ethanol 563
- 17.1.1.3 Propanole 566
- 17.1.1.4 Butanole 566
- 17.1.1.5 Längerkettige Alkohole 566
- 17.1.1.6 Cyclische Alkohole 566
- 17.1.1.7 Ungesättigte Alkohole 566
- 17.1.1.8 Mehrwertige Alkohole 567
- 17.1.2 Phenole 568
- 17.1.3 Ether 569
- 17.1.3.1 Aliphatische Ether 569
- 17.1.3.2 Cyclische Ether 569

- 17.1.4 Epoxide 570
- 17.1.4.1 Ethylenoxid 570
- 17.1.4.2 Propylenoxid 571
- 17.1.5 Aldehyde 572
- 17.1.5.1 Formaldehyd (Methanal) 572
- 17.1.5.2 Acetaldehyd (Ethanal) 573
- 17.1.5.3 Butyraldehyd (Butanal) 574
- 17.1.5.4 Ungesättigte Aldehyde 576
- 17.1.6 Ketone 576
- 17.1.6.1 Aceton und Methylisobutylketon 576
- 17.1.6.2 Methylethylketon 577
- 17.1.7 Carbonsäuren 577
- 17.1.7.1 Ameisensäure 577
- 17.1.7.2 Essigsäure 578
- 17.1.7.3 Ungesättigte Carbonsäuren 580
- 17.1.7.4 Aliphatische Dicarbonsäuren 580
- 17.1.7.5 Aromatische Carbonsäuren 581
- 17.2 Stickstoffhaltige Verbindungen 583
- 17.2.1 Amine 583
- 17.2.1.1 Niedere Amine 584
- 17.2.1.2 Fettamine 584
- 17.2.1.3 Diamine 584
- 17.2.1.4 Cyclische Amine 584
- 17.2.1.5 Aromatische Nitroverbindungen und Amine 585
- 17.2.2 Lactame 586
- 17.2.3 Nitrile 586
- 17.2.3.1 Acrylnitril 586
- 17.2.3.2 Adipodinitril 587
- 17.2.4 Isocyanate 588
- 17.2.4.1 Aliphatische Isocyanate 588
- 17.2.4.2 Aromatische Isocyanate 589
- 17.3 Halogenhaltige Verbindungen 589
- 17.3.1 Chlormethane 589
- 17.3.2 Chlorderivate höherer Aliphaten 591
- 17.3.3 Chloraromaten 593
- 17.3.4 Fluorverbindungen 594
- Literatur* 595

18 Anorganische Grund- und Massenprodukte 597

- 18.1 Anorganische Schwefelverbindungen 597
- 18.1.1 Schwefel und Sulfide 597
- 18.1.2 Schwefeldioxid 597
- 18.1.3 Schwefeltrioxid und Schwefelsäure 598
- 18.2 Anorganische Stickstoffverbindungen 598
- 18.2.1 Ammoniak 598
- 18.2.2 Salpetersäure 602
- 18.2.3 Harnstoff und Melamin 603
- 18.3 Chlor und Alkalien 603
- 18.3.1 Chlor und Alkalilauge durch Alkalichloridelektrolyse 603
- 18.3.2 Natronlauge und Soda 605
- 18.4 Phosphorverbindungen 606
- 18.4.1 Elementarer Phosphor 606
- 18.4.2 Phosphorsäure und Phosphate 607

18.5	Technische Gase	607
18.5.1	Sauerstoff und Stickstoff	608
18.5.2	Edelgase	609
18.5.3	Kohlendioxid	610
18.6	Düngemittel	610
18.6.1	Bedeutung der Düngemittel	610
18.6.2	Stickstoffdüngemittel	610
18.6.3	Phosphordüngemittel	611
18.6.4	Kalidüngemittel	611
18.6.5	Mehrnährstoffdünger	612
18.6.6	Wirtschaftliche Betrachtung	612
18.7	Metalle	612
18.7.1	Stähle	612
18.7.2	Nichteisenmetalle und ihre Legierungen	613
18.7.3	Korrosion und Korrosionsschutz	613
	<i>Literatur</i>	614

19	Chemische Endprodukte	617
19.1	Polymere	617
19.1.1	Aufbau und Synthese von Polymeren	617
19.1.1.1	Stufenreaktionen	618
19.1.1.2	Kettenreaktionen	618
19.1.2	Polymerisationstechnik	621
19.1.3	Massenkunststoffe	625
19.1.4	Fasern	629
19.1.5	Klebstoffe	629
19.1.6	Hochtemperaturfeste Kunststoffe	630
19.1.7	Elektrisch leitfähige Polymere	630
19.1.8	Flüssigkristalline Polymere	631
19.1.9	Biologisch abbaubare Polymere	631
19.2	Tenside und Waschmittel	632
19.2.1	Aufbau und Eigenschaften	632
19.2.2	Anionische Tenside	632
19.2.3	Kationische Tenside	634
19.2.4	Nichtionische Tenside	634
19.2.5	Amphotere Tenside	637
19.2.6	Vergleich der Tensidklassen	637
19.2.7	Anwendungsgebiete	639
19.3	Farbstoffe	642
19.3.1	Übersicht	642
19.3.2	Azofarbstoffe	643
19.3.3	Carbonylfarbstoffe	644

- 19.3.4 Methinfarbstoffe 645
- 19.3.5 Phthalocyanine 646
- 19.3.6 Färbevorgänge 646
- 19.4 Pharmaka 648
- 19.4.1 Allgemeines 648
- 19.4.2 Arten pharmazeutischer Produkte 648
- 19.4.3 Wirkstoffherstellung durch chemische Synthese 652
- 19.4.4 Wirkstoffherstellung mit Biokatalysatoren 653
- 19.4.5 Wirkstoffherstellung durch Fermentationsverfahren 654
- 19.4.6 Sonstige Verfahren zur Wirkstoffherstellung 657
- 19.5 Pflanzenschutzmittel 657
- 19.5.1 Bedeutung des Pflanzenschutzes 657
- 19.5.2 Insektizide 657
- 19.5.3 Herbizide 659
- 19.5.4 Fungizide 660
- 19.5.5 Marktdaten und Entwicklungstrends 661
- 19.6 Metallorganische Verbindungen 661
- 19.7 Silicone 663
- 19.7.1 Struktur und Eigenschaften 663
- 19.7.2 Herstellung der Ausgangsverbindungen 664
- 19.7.3 Herstellung der Silicone 665
- 19.7.4 Technische Siliconerzeugnisse 667
- 19.8 Zeolithe 667
- Literatur* 669

Anhang 673

Anhang 1 Größen zur Charakterisierung von Reaktionen, Verfahren und Anlagen 673

Anhang 2 Tabellen zu Reinstoffdaten 675

Anhang 3 Graphische Symbole für Fließschemata nach EN ISO 10 628 679

Anhang 4 Programm zur Auslegung von Rektifikationskolonnen 689

Stichwortverzeichnis 705