1
Einführung

1.1
Die Aufgaben der Chemischen Reaktionstechnik

Die Chemische Reaktionstechnik ist ein Teilgebiet der Technischen Chemie und stellt heute einen Ausbildungsschwerpunkt von Chemikern, Chemieingenieuren und Verfahrenstechnikern dar.

Ziel der Chemischen Reaktionstechnik ist die sichere Übertragung einer im Labor gefundenen chemischen Umsetzung in den technischen Maßstab bzw. die Auslegung eines chemischen Reaktors für eine gegebene Reaktion. Voraussetzung dafür ist vor allem die Kenntnis der Geschwindigkeit der betreffenden Reaktion, die sog. *Mikrokinetik*.

Weil die meisten technisch bedeutsamen Reaktionen nicht in einer intensiv durchmischten homogenen Phase ablaufen, haben auch Stoff- und Wärmetransportvorgänge einen wesentlichen Einfluss auf solche Prozesse. Damit kommt der *Makrokinetik* – dem Zusammenwirken von Transportkinetik und chemischer Kinetik – in der Chemischen Reaktionstechnik eine besondere Bedeutung zu. Zahlreiche, richtungsweisende Arbeiten über derartige makrokinetische Gesichtspunkte, d. h. über den Einfluss der Strömung, des Mischens, der Verweilzeitverteilung und des Stoff- und Wärmeübergangs auf die chemische Reaktion wurden bereits von G. Damköhler ab 1935 durchgeführt.

Die eigentliche Entwicklung der Chemischen Reaktionstechnik auf breiter Basis als neue, fachübergreifende Disziplin im Chemieingenieurwesen setzte jedoch erst ab 1957 (1. Symposium über Chemische Reaktionstechnik in Amsterdam) ein. In den folgenden Jahrzehnten wurden die wissenschaftlichen Grundlagen dieses Gebietes sehr rasch entwickelt und auch Spezialgebiete einbezogen. Moderne computergestützte Rechenverfahren haben ab den 1980er-Jahren eine stürmische Entwicklung erfahren, sie sind heute sowohl für die Lehre als auch für die industrielle Praxis unverzichtbar.

Bei der Chemischen Reaktionstechnik handelt es sich um ein komplexes, vielschichtiges Wissensgebiet, das sich erst langsam zu einer systematischen Wissenschaft innerhalb der Technischen Chemie entwickelt hat. Wir können die Chemi-

Chemiereaktoren – Grundlagen, Auslegung und Simulation, 2. Auflage. Jens Hagen.
© 2017 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. Published 2017 by WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.

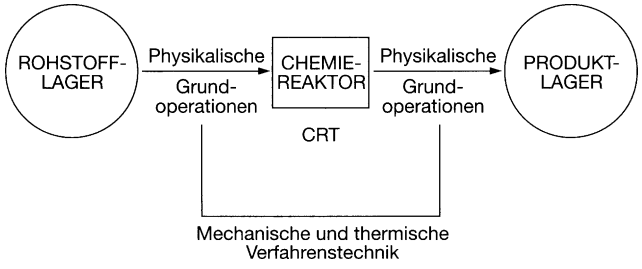

Abb. 1.1 Der Chemiereaktor im Produktionsprozess.

sche Reaktionstechnik zusammenfassend wie folgt definieren:

„Chemische Reaktionstechnik ist die Anwendung der chemischen Kinetik und Thermodynamik sowie der Gesetze über den Stoff-, Wärme- und Impulsaustausch auf den Entwurf eines wirtschaftlich optimal produzierenden Chemiereaktors."

Der Chemieingenieur muss also folgende Fragen beantworten können:

1. Welches ist der geeignete *Reaktortyp* für die vorgegebene Reaktion?
2. Welche *Abmessungen* muss der Reaktor haben?
3. Welches sind die *optimalen Reaktionsbedingungen* (Druck, Temperatur, Zusammensetzung des Reaktionsgemischs, Katalysator)?

Im Allgemeinen sind folgende Größen bei der Reaktorauslegung vorgegeben:

1. *Produktionsleistung* und *Kapazität* der geplanten Anlage, daraus ergibt sich das erforderliche Reaktions- und Reaktorvolumen
2. *Kinetik* und *Thermodynamik* der entsprechenden Reaktion

Für die Förderung, Herrichtung und Aufbereitung der Stoffe sowie die Zufuhr und Abfuhr von Wärme sind eine ganze Reihe von physikalischen Verfahrensschritten notwendig, wie Zerkleinern, Mischen, Komprimieren, Heizen und Kühlen, Destillieren, Kristallisieren und Trocknen. In einem chemischen Produktionsprozess sind diese physikalisch-technischen Verfahrensweisen (Grundoperationen = unit operations) oft wesentlich umfangreicher und fallen dementsprechend auch investitionsmäßig wesentlich stärker ins Gewicht als die eigentliche chemische Reaktion (vgl. Abb. 1.1).

Die Chemische Reaktionstechnik ist durch ein enges Zusammenwirken von Chemie und Ingenieurwissenschaften gekennzeichnet. In diesem Bereich sind in Deutschland der technische Chemiker, der Chemieingenieur und der Verfahrensingenieur, in den angelsächsischen Ländern der „chemical engineer" verantwortlich. Die folgende Übersicht (Abb. 1.2) zeigt die Chemische Reaktionstechnik als interdisziplinär ausgerichtetes Fach.

Mittelpunkt eines jeden chemischen Prozesses ist der Chemiereaktor, in dem chemische Umsetzungen unter technischen Bedingungen durchgeführt werden. Jeder Chemiker und Chemieingenieur benötigt ein Grundlagenwissen über den Betrieb, die Auslegung und Modellierung eines Chemiereaktors.

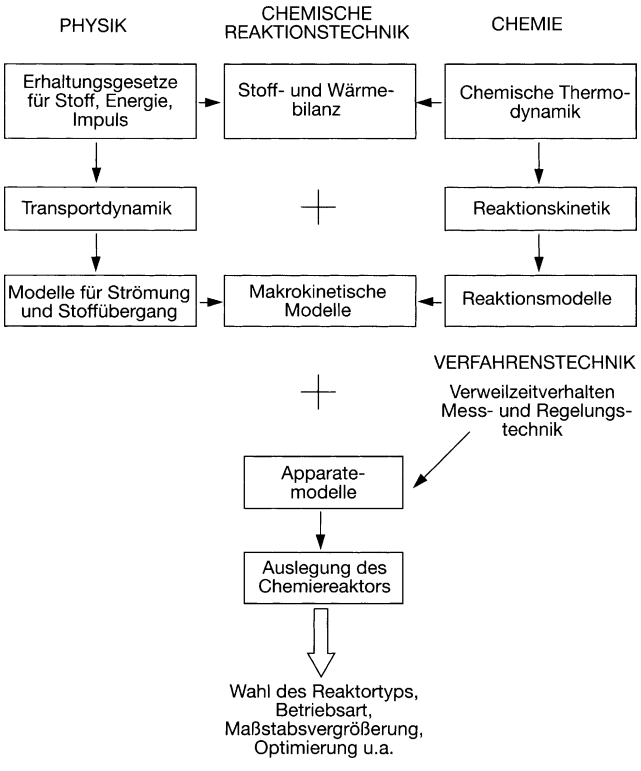

Abb. 1.2 Grundlagen der Chemischen Reaktionstechnik.

Bei der technischen Realisierung von Verfahren sind chemische Stoffumwandlungen mit dem Stoff-, Wärme- und Impulsaustausch gekoppelt und verhalten sich daher im Kleinen (Labor- oder Technikumsmaßstab) anders als im Großen (Betriebsmaßstab). Diese Vorgänge sind maßstabsabhängig. Dazu gehören heterogene Reaktionen sowie die meisten verfahrenstechnischen Grundoperationen wie Mischen und Rühren, Filtrieren, Zentrifugieren usw. Es ist ein wichtiges Anliegen des Chemieingenieurs, solche Vorgänge im Modell nachzuahmen, um Aufschluss über die Auslegung und Dimensionierung einer technischen Anlage zu bekommen. Mithilfe der Maßstabsübertragung (Scale-up) ist es möglich, chemische Prozesse vom Labormaßstab in den Produktionsmaßstab zu übertragen.

Ziel dieses Lehr- und Übungsbuches ist es, dem Leser zunächst diejenigen Grundkenntnisse zu vermitteln, die eine Auslegung von Chemiereaktoren ermöglichen; dabei fließen insbesondere Informationen aus den Bereichen der Verfahrenstechnik, Physikalischen Chemie und Technischen Chemie ein.

Komplexere Aufgabenstellungen der Chemischen Reaktionstechnik sind jedoch nicht mehr einfach analytisch lösbar, da sie sich nur durch miteinander gekoppelte Differenzialgleichungen und algebraische Gleichungen beschreiben lassen. Diese Modellansätze sind zweckmäßigerweise unter Anwendung numerischer Verfahren mit dem Computer zu lösen.

Mit einem einmal aufgestellten Modell lässt sich der Einfluss verschiedener Reaktionsparameter auf den Gesamtprozess leicht nachvollziehbar simulieren. Der Vorteil der mathematischen Modellierung liegt besonders darin, dass nur noch eine Problembeschreibung mithilfe von Differenzialgleichungen und algebraischen Gleichungen erfolgen muss und dann die mathematische Lösung des Gleichungssystems dem Computer überlassen werden kann. Die Simulation gestattet es, die Werte am Reaktorausgang bei variierenden Eingangs- und Betriebsbedingungen zu berechnen und damit das Reaktorverhalten ohne die Durchführung von Experimenten zu beurteilen.

1.2 Wirtschaftliche Prozessführung

Die Aufgabe des Chemieingenieurs besteht vor allem darin, innerhalb des vorgegebenen Spielraums optimale Werte für die Prozessbedingungen (Reaktionszeit, Umsatz, Temperatur u. a.) zu finden. So ist es verständlich, dass der Reaktor, wie auch andere Teile einer Produktionsanlage im Hinblick auf das wirtschaftliche Optimum des Gesamtprozesses ausgelegt werden muss. Bei dieser Betrachtung dürfen nicht nur die Anschaffungs- und Betriebskosten des Reaktors gesehen werden, sondern auch die vor- oder nachgeschalteten Aufarbeitungsschritte. So ist beispielsweise wenig gewonnen, wenn ein kostengünstiger Reaktor ausgewählt wird, bei dem ein viel höherer Aufwand für die Produktaufarbeitung betrieben werden muss als bei einer teureren Spezialkonstruktion.

Das Ziel einer wirtschaftlichen Prozessführung ist i. A. ein *maximaler Gewinn*. Dies wird durch die folgende Grundbeziehung ausgedrückt:

$$\text{Gewinn} = \text{Erlös} - \text{Herstellkosten}$$

Am Beispiel einer chemischen Umsetzung soll dieser Zusammenhang erläutert werden. Bei einer einfachen, irreversiblen Reaktion hängt der Umsatz der eingesetzten Rohstoffe von der Reaktionszeit ab. Es stellt sich nun die Frage, welche Reaktionszeit gewählt werden soll.

Die Zielgröße ist keinesfalls immer ein möglichst hoher Umsatz, dann wäre das Problem einfach gelöst. Die Kostenstruktur kann jedoch wie in Abb. 1.3 dargestellt aussehen.

Es zeigt sich, dass durch eine Optimierungsrechnung die wirtschaftlichsten Arbeitsbedingungen (Reaktionszeit und Umsatz) für jeden Einzelfall ermittelt werden müssen. Bei der Bewertung eines Prozesses geht man von den *Herstellkosten* aus. An dieser Stelle sollen nur die wichtigsten Faktoren genannt werden, die die Herstellkosten von chemischen Produkten beeinflussen.

1. *Der Produktionsumfang.* Die Herstellkosten für ein bestimmtes Produkt sind von der Größe der Anlage abhängig. Es gilt generell, dass Großanlagen kostengünstiger arbeiten als Kleinanlagen.

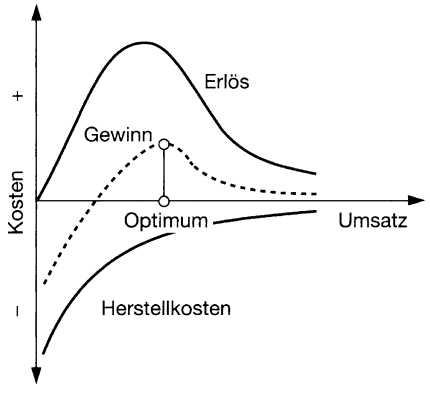

Abb. 1.3 Umsatz als Zielgröße der Optimierung.

2. *Die Kapazitätsauslastung* einer vorhandenen Produktionsanlage hat einen erheblichen Einfluss auf die Kosten und den Gewinn.
3. *Wahl des Rohstoffs.* Etwa 90 % der organischen chemischen Erzeugnisse werden heute aus petrochemischen Rohstoffen wie Erdöl und Erdgas hergestellt. Vielfältige Einflüsse wie Verknappungen bei Rohstoffen, Änderung der Technologie und Anforderungen der Umwelt sorgen immer wieder dafür, dass sich die Rohstoffbasis für bestimmte Produkte oder Produktlinien ändert (Beispiele: Ethylen/Acetylen, Kohle/Erdöl/Erdgas, Pyrit/Schwefel). Es dürfte klar sein, dass sich Rohstoffbasis, Reaktionstechnik und Verfahrenstechnik gegenseitig beeinflussen, sodass hier Kaufleute, Chemiker und Ingenieure gefordert sind, gemeinsame Kompromisslösungen zu finden.
4. *Wahl des Verfahrens.* Bei diesem Punkt steht die Reaktionstechnik im Mittelpunkt. Auswahl, Dimensionierung und Design des Reaktors ist eine Zentralaufgabe der Chemischen Reaktionstechnik. Wir sollten aber auch hier nicht vergessen, dass nicht unbedingt das technologische Optimum gefragt ist, sondern dass die maximale Rentabilität des Gesamtprozesses betrachtet werden muss. Demnach kann also auch bei diesem Aspekt der Ingenieur nicht alleine entscheiden, sondern er ist auf die Zusammenarbeit mit Kaufleuten, Chemikern, Maschinen- und Apparatebauern und anderen Fachleuten angewiesen. Das Gebiet der chemischen Verfahrensentwicklung kann nur fachübergreifend erfolgreich bearbeitet werden.

Zahlreiche Kriterien können die Auswahl des Verfahrens und des Reaktors beeinflussen, beispielsweise

- Betriebsweise (kontinuierlich, diskontinuierlich, halbkontinuierlich),
- Kreislaufführung (Recyclisierung) von nicht umgesetzten Ausgangsstoffen,
- Art der Energiezuführung oder -abführung,
- Katalysatoren,
- Werkstofffragen,
- Fragen des Umweltschutzes.

Einzelne Gesichtspunkte werden in diesem Buch erläutert, andere müssen aufgrund der auferlegten Beschränkung entfallen.

Die komplexen Zusammenhänge erfordern es, möglichst viele Informationen frühzeitig zur Verfügung zu stellen, um eine optimale Prozessführung zu ermöglichen. Dazu sollen die Grundlagen der Chemischen Reaktionstechnik in den nächsten Kapiteln dienen.

1.3 Literatur zu Beispielen, Übungen und weiterführende Literatur

1 Baerns, M., Behr, A., Brehm, A., Gmehling, J., Hinrichsen, K.-O., Hofmann, H., Onken, U., Palkovits, R. und Renken, A. (2013) *Technische Chemie*, 2. Aufl., Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim.

2 Baerns, M., Hofmann, H. und Renken, A. (2001) *Chemische Reaktionstechnik*, 3. Aufl., Thieme, Stuttgart.

3 Behr, A., Agar, D.W. und Jörissen, J. (2010) *Einführung in die Technische Chemie*, Spektrum Verlag, Heidelberg.

4 Cappelli, A. und Trambouze, P. (1977) Die Bedeutung der Chemischen Reaktionstechnik für die Industrie. *Chem. Ing. Tech.*, **49**, 5.

5 Denbigh, K.G. und Turner, J.C.R. (1973) *Einführung in die chemische Reaktionstechnik*, Verlag Chemie, Weinheim.

6 Dittmeyer, R., Keim, W., Kreysa, G. und Oberholz, A. (Hrsg.) (2003–2005) in *Winnacker-Küchler Chemische Technik*, Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim.

7 Emig, G. und Klemm, E. (2005) *Technische Chemie: Eine Einführung in die Chemische Reaktionstechnik*, 5. Aufl., Springer, Berlin.

8 Hertwig, K. und Martens, L. (2012) *Chemische Verfahrenstechnik*, 2. Aufl., Oldenbourg, München.

9 Vogel, G.H. (2004) *Lehrbuch Chemische Technologie*, Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim.