

Inhaltsverzeichnis

Vorwort zur 2. Auflage IX

Vorwort zur 1. Auflage XI

Formelzeichen und Abkürzungen XIII

1 Einführung 1

1.1 Die Aufgaben der Chemischen Reaktionstechnik 1

1.2 Wirtschaftliche Prozessführung 4

1.3 Literatur zu Beispielen, Übungen und weiterführende Literatur 6

2 Chemiereaktoren im Überblick 7

2.1 Betriebsweise und Grundtypen von Chemiereaktoren 7

2.2 Beurteilungsgrößen für Chemiereaktoren 11

2.3 Literatur zu Beispielen, Übungen und weiterführende Literatur 17

Lösungen zu den Übungsaufgaben 17

3 Physikalisch-chemische Aspekte der Reaktionstechnik 19

3.1 Umsatz und Stöchiometrie 19

3.2 Das chemische Gleichgewicht 23

3.3 Reaktionskinetische Gleichungen 24

3.4 Aufstellen der Stoffbilanz 28

3.5 Aufstellen der Wärmebilanz 30

3.6 Literatur zu Beispielen, Übungen und weiterführende Literatur 31

Lösungen zu den Übungsaufgaben 32

4 Grundlagen der Reaktormodellierung und -simulation 33

4.1 Mathematische Modelle 33

4.2 Simulation 36

4.3 Numerische Differenziation 37

4.4 Lösung von partiellen Differenzialgleichungen 39

4.5 Lösung von Differenzialgleichungen 2. Ordnung 39

4.6 Lösung eines Systems von nichtlinearen Gleichungen 43

4.7	Literatur zu Beispielen, Übungen und weiterführende Literatur	48
	Lösungen zu den Übungsaufgaben	49
5	Ideale, isotherm betriebene Reaktoren	53
5.1	Der diskontinuierlich betriebene Rührkessel	53
5.2	Der kontinuierlich betriebene Rührkessel	68
5.2.1	Das Anfahrverhalten eines kontinuierlich betriebenen Rührkessels	69
5.3	Das Strömungsrohr	78
5.4	Reaktoren mit Kreislaufführung	89
5.4.1	Der Kreislauf- oder Schlaufenreaktor	89
5.4.2	Reaktor mit Trennstufe und Rückführung	96
5.5	Halbkontinuierlich betriebene Reaktoren	101
5.6	Reaktorkombinationen	109
5.6.1	Die Rührkesselkaskade	110
5.6.2	Reihenschaltung von Rührkessel und Strömungsrohr	119
5.6.3	Reihen- und Parallelschaltung von Strömungsrohren	121
5.7	Leistungsvergleich der Idealreaktoren	122
5.8	Literatur zu Beispielen, Übungen und weiterführende Literatur	130
	Lösungen zu den Übungsaufgaben	131
6	Messung und Auswertung kinetischer Daten für den Reaktorbetrieb	145
6.1	Rückvermischungseffekt bei einfachen Reaktionen	145
6.2	Reaktordesign für komplexe Reaktionen	153
6.2.1	Parallelreaktionen	154
6.2.2	Folgereaktionen	156
6.2.3	Komplexe Serienreaktionen	159
6.2.4	Vergleichende Betrachtung von komplexen Reaktionen	161
6.3	Laborreaktoren für kinetische Untersuchungen	169
6.4	Analyse kinetischer Daten mittels Regression	182
6.5	Literatur zu Beispielen, Übungen und weiterführende Literatur	193
	Lösungen zu den Übungsaufgaben	194
7	Nichtideale Reaktoren und Reaktormodelle	201
7.1	Verweilzeitspektrum	201
7.2	Verweilzeitsummenfunktion und mittlere Verweilzeit	204
7.3	Experimentelle Ermittlung der Verweilzeitkurven	207
7.4	Verweilzeitverteilung und Umsatz in Realreaktoren	209
7.5	Modellbetrachtungen	215
7.5.1	Diffusions- und Kaskadenmodell	216
7.5.2	Zwei-Parameter-Modell: Rührreaktor mit Totzone und Kurzschlussströmung	226
7.5.3	Rührreaktor mit Kurzschlussströmung und schlecht durchmischter Zone	230
7.6	Einfluss der Vermischung auf den Umsatz	234

7.6.1	Segregation	234
7.6.2	Zeitpunkt der Vermischung	239
7.7	Der laminar durchströmte Rohrreaktor	241
7.8	Isothermes Strömungsrohr mit axialer Dispersion	244
7.9	Simulation von Realreaktoren	248
7.10	Literatur zu Beispielen, Übungen und weiterführende Literatur	253
	Lösungen zu den Übungsaufgaben	254
8	Reaktorauslegung unter Berücksichtigung des Wärmetransports	257
8.1	Lenkung des Temperaturverlaufs in Reaktoren	257
8.2	Wärmeumsatz in Reaktoren	259
8.3	Wärmetechnische Auslegung von Chemiereaktoren	262
8.3.1	Der diskontinuierlich betriebene Rührkessel	263
8.3.2	Das ideale Strömungsrohr	274
8.3.3	Der kontinuierlich betriebene Rührkessel	283
8.4	Literatur zu Beispielen, Übungen und weiterführende Literatur	294
	Lösungen zu den Übungsaufgaben	295
9	Der Einfluss des Stoffübergangs auf den Reaktorbetrieb	301
9.1	Fluid-Fluid-Reaktionen	301
9.2	Heterogen katalysierte Reaktionen	307
9.2.1	Filmdiffusion und chemische Reaktion	309
9.2.2	Porendiffusion und katalytische Reaktion	311
9.2.3	Stoff- und Wärmeübergang in porösen Katalysatoren	316
9.2.4	Berechnung von Katalysereaktoren	330
9.2.5	Katalysatordeaktivierung	341
9.3	Druckverlust in Festbettreaktoren	346
9.4	Reaktionen zwischen Gas, Flüssigkeit und Feststoff	352
9.5	Literatur zu Beispielen, Übungen und weiterführende Literatur	360
	Lösungen zu den Übungsaufgaben	362
10	Technische Reaktionsführung	369
10.1	Auswahlkriterien für Chemiereaktoren	369
10.2	Reaktoren für homogene Reaktionen	372
10.3	Reaktoren für heterogene Reaktionen	374
10.3.1	Fluid-Fluid-Reaktionen	374
10.3.2	Fluid-Feststoff-Reaktionen	379
10.3.3	Dreiphasenreaktionen	386
10.3.4	Spezielle Reaktoren	392
10.4	Literatur zu Beispielen, Übungen und weiterführende Literatur	401
	Lösungen zu den Übungsaufgaben	402
11	Scale-up von Chemiereaktoren	405
11.1	Problematik der Maßstabsübertragung	405
11.1.1	Selektivitätseinflüsse	408

VIII | *Inhaltsverzeichnis*

- 11.2 Stofftransport bei Mehrphasenprozessen 412
- 11.3 Vermischung in Reaktoren 414
- 11.4 Simulation eines Scale-up-Prozesses 419
- 11.5 Literatur zu Beispielen, Übungen und weiterführende Literatur 425

Anhang A Kurzanleitung für Polymath 427

Stichwortverzeichnis 431