

**Vorwort** XIII

**Die Autoren** XV

**Enzyklopädien und Nachschlagewerke zur  
Technischen Chemie** XVII

**Symbolverzeichnis** XIX

**Teil I Einführung in die Technische Chemie** 1

*Arno Behr, Ulfert Onken*

**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

*Literatur* 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 Verfahrenfließschema 19

2.3.3 Rohrleitungs- und Instrumenten (RI)-  
Fließschema 19

2.3.4 Mess- und Regelschema 21

2.3.5 Spezielle Schemata 21

*Literatur* 22

<b>Teil II</b>	<b>Chemische Reaktionstechnik</b>	23
	Einführung	23
<b>3</b>	<b>Grundlagen der Chemischen Reaktionstechnik</b>	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
<b>4</b>	<b>Kinetik chemischer Reaktionen</b>	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
	<i>Literatur</i>	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
	<i>Literatur</i>	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
	<i>Literatur</i>	193
<b>6</b>	<b>Auswahl und Auslegung chemischer Reaktoren</b>	<b>195</b>
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 Gmehling, Axel Brehm*

<b>7</b>	<b>Konvektiver Stoff- und Wärmetransport</b>	<b>227</b>
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, Vakuumerzeugung	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 Wärmeleitung 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

*Literatur* 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
  - Literatur 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 Rigorose 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 Naphthali-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	Absorberbauarten	362
9.15	Membrantrennverfahren	364
9.15.1	Trennprinzip und Arbeitsweise	364
9.15.2	Arten von Membranverfahren	366
9.15.3	Membranmodule	368
	<i>Literatur</i>	370

<b>10</b>	<b>Mechanische Grundoperationen</b>	<b>371</b>
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 Alkalischemelze 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
<b>12</b>	<b>Verfahrensgrundlagen</b>	<b>445</b>
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

<b>13</b>	<b>Wirtschaftlichkeit von Verfahren und Produktionsanlagen</b>	<b>463</b>
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
	<i>Literatur</i>	477

<b>14</b>	<b>Planung und Bau von Anlagen</b>	<b>479</b>
14.1	Projekttablauf	479
14.2	Projektorganisation	480
14.3	Genehmigungsverfahren für Chemieanlagen	482
14.4	Anlagenplanung	482
14.5	Projektentwicklung	485
14.5.1	Ablaufplanung und -überwachung	485
14.5.2	Bau und Montage	488
	<i>Literatur</i>	489

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

<b>15</b>	<b>Organische Rohstoffe</b>	<b>491</b>
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 (Butanale) 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
- Literatur* 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 Färbvorgänge 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**