

# Inhaltsverzeichnis

<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>iii</b>
<b>1 Einleitung und Problemstellung</b>	<b>1</b>
<b>2 Theoretische Grundlagen</b>	<b>3</b>
2.1 Reaktionsführung chemischer Prozesse . . . . .	3
2.1.1 Einführung . . . . .	3
2.1.2 Die Chemische Kinetik . . . . .	5
2.2 Optimierungsverfahren . . . . .	7
2.2.1 Simulated Annealing . . . . .	7
2.2.2 Genetische Algorithmen . . . . .	8
2.3 Aciditätsbestimmungen in wässrigen Lösungen . . . . .	9
2.4 Infrarotspektroskopie . . . . .	14
2.4.1 Grundlagen der Infrarotspektroskopie . . . . .	14
2.4.2 Abgeschwächte Totalreflektion . . . . .	14
2.4.3 Quantitative Spektrenaussagen . . . . .	17
2.5 Chemometrische Methoden . . . . .	18
2.5.1 Allgemeines . . . . .	18
2.5.2 „Classical-Least-Squares-(CLS)-Methode“ . . . . .	18
2.5.3 „Inverse-Least-Squares-(ILS)-Methode“ . . . . .	20
2.5.4 „Principal-Component-Analysis-(PCA)-Methode“ . . . . .	21
2.5.5 „Principal-Component-Regression-(PCR)-Methode“ . . . . .	22
2.5.6 „Partial-Least-Squares-(PLS)-Methode“ . . . . .	22
2.5.7 Datenvorbehandlungsmethoden . . . . .	24
<b>3 Experimentelles</b>	<b>25</b>
3.1 Versuchsaufbau . . . . .	25
3.2 Versuchsdurchführung . . . . .	27
3.2.1 Ansetzen der Reaktionslösung . . . . .	27
3.2.2 Der Rührkesselreaktor im Reaktionsbetrieb . . . . .	28
3.2.3 Verweilzeitmessung im Reaktionsbetrieb . . . . .	29
3.3 Analytik der Flüssigphase . . . . .	31

3.3.1	Infrarotspektroskopische Analyse . . . . .	31
3.3.2	Kalibrierung und Erstellung des PLS-Modells . . . . .	31
3.3.3	Dichteermittlung der Reaktionsmischung . . . . .	32
<b>4</b>	<b>TBA-Dehydratisierung - Modellentwicklung</b>	<b>33</b>
4.1	Allgemeines . . . . .	33
4.2	Modellansatz nach Bienek . . . . .	33
4.3	Oligomerenbildung nach Allenbach . . . . .	35
4.4	Die Hammett'sche Aciditätsfunktion . . . . .	36
4.5	Das DTBE-Modell . . . . .	39
4.6	Quasistationäre Formulierung der Kinetik . . . . .	41
4.7	Mathematisches Modell des isotherm betriebenen CSTR . . . . .	44
<b>5</b>	<b>Ergebnisse</b>	<b>47</b>
5.1	Kalibrierungsergebnisse der IR-Daten . . . . .	47
5.2	Plausibilität der Quasistationaritätsannahme . . . . .	50
5.3	Ermittlung der Parameter des CSTR-Modells . . . . .	55
5.4	Modellsimulation . . . . .	60
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>67</b>
<b>A</b>	<b>Geräte und Eigenschaften Komponenten</b>	<b>69</b>
A.1	Eigenschaften des Fototransistors BP103 . . . . .	69
A.2	Tracereigenschaften von Kongorot . . . . .	70
A.3	Merkmale der Strahlungsquelle . . . . .	71
A.4	Messbereich der ATR-ZrO <sub>2</sub> -Sonde . . . . .	71
A.5	Dichtebestimmung mit dem Biegeschwinger DMA 50 . . . . .	72
<b>B</b>	<b>Hammett-Funktion für das System: Schwefelsäure/TBA/Wasser</b>	<b>75</b>
<b>C</b>	<b>Gleichgewichtskonstanten analog Bienek resultierend aus dem DTBE-Modell</b>	<b>77</b>
<b>D</b>	<b>Messdaten der CSTR-Versuche</b>	<b>79</b>
D.1	Dichtefunktion der Säurephase . . . . .	79
D.2	Messdaten . . . . .	80
<b>E</b>	<b>Anpassung der CSTR-Versuche</b>	<b>85</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>87</b>