

1 Einleitung

Die Rektifikation, abgeleitet vom lateinischen „recte facere“, das „berichtigen und verbessern“ bedeutet (Behr et al., 2010), stellt ein zentrales Verfahren in der thermischen Trenntechnik dar. Als eine der bedeutendsten Technologien zur Aufreinigung homogener Flüssigkeitsgemische hat die Rektifikation, oft auch als Gegenstromdestillation oder als äquimolare Gegendiffusion (Onda et al., 1968) bezeichnet, immense Relevanz in der chemischen, petrochemischen, biotechnologischen und pharmazeutischen Industrie (Mersmann et al., 2005). Statistiken belegen, dass Rektifikationsprozesse etwa 40 % des Energiebedarfs der chemischen Industrie in den USA einnehmen, wodurch diese Trenntechnik nicht nur einen erheblichen Teil der Produktionskosten verursacht, sondern auch signifikant zum globalen Gesamtenergiebedarf beiträgt (Humphrey, 1995; Kiss et al., 2012; Marin-Gallego et al., 2022).

Im Jahr 2022 wurden in Deutschland 21 % der energetisch verwendeten Energieträger für die Herstellung chemischer Erzeugnisse aufgewendet (Statistisches Bundesamt, 2023). Diese Zahlen verdeutlichen das enorme Einsparpotenzial der chemischen Industrie in Bezug auf Energiebedarf und klimarelevante Emissionen. Vor diesem Hintergrund wird die Motivation zur Optimierung der betrieblichen Effizienz sowie zur Senkung des Energiebedarfs durch innovative Ansätze in der Rektifikation deutlich. So wird geschätzt, dass durch gezielte Forschungs- und Entwicklungsaktivitäten in der Destillation eine Energieeinsparung von bis zu 8 % möglich sei (Cresko et al., 2015).

Die Bestimmung der erforderlichen Packungshöhe stellt bei der Auslegung von Destillationskolonnen eine größere Herausforderung dar, als die Bestimmung des Durchmessers (Eiden et al., 1995). Vor diesem Hintergrund werden zur Bestimmung der Packungshöhe Pilotversuche durchgeführt, welche für die herausfordernde Maßstabsübertragung von Rektifikationsprozessen verwendet werden. Diese Versuche sind überwiegend mit hohen Kosten und hohem zeitlichen Aufwand verbunden. Zusätzlich steht während der Verfahrensentwicklung oft nicht ausreichend Eduktvolumen für die erforderlichen Tests im Pilotmaßstab zur Verfügung. In der industriellen Praxis sind daher experimentelle Trennleistungsmessungen im Labor- oder Technikumsmaßstab erforderlich. Allerdings gibt es Grenzen hinsichtlich der Miniaturisierung. Mit abnehmendem Kolonnendurchmesser wachsen der Einfluss der Kolonnenwand und die Unsicherheiten bei der Übertragbarkeit der Ergebnisse auf großtechnische Anlagen. Dennoch ist es von größter Bedeutung, Skalierungsfaktoren für die Maßstabsübertragung zu identifizieren, da die Trennleistung für die Auslegung, den Betrieb und die Wirtschaftlichkeit von Rektifikationskolonnen entscheidend ist.

Diese Arbeit zielt darauf ab, Messungen der Trennleistung bei der Rektifikation von idealen und nicht-idealen Stoffgemischen durchzuführen sowie deren Druckverluste in strukturierten Packungen zu analysieren. Die vorliegende Dissertation liefert wesentliche Erkenntnisse hinsichtlich der Trennleistung und Druckverluste bei der Rektifikation in Kolonnen. Dabei stehen Rand- und Wandeffekte sowie durchmesserabhängige Einflüsse und stoffspezifische Eigenschaften auf die Trennleistung im Fokus. Darüber hinaus trägt die erhobene experimentelle Datenbasis zur Validierung von sieben etablierten Stoffübergangsmodellen bei. Zudem wird vor dem Hintergrund der Skalierung von Rektifikationskolonnen eine Modellerweiterung zur Verbesserung der Genauigkeit bei der Trennleistungsmodellierung präsentiert. Damit soll die Lücke zwischen akademischer Forschung und industriellem Bedarf verringert wird.

Diese Arbeit grenzt sich durch die Untersuchung von ungelochten, mikrostrukturierten Packungen im Miniplant-, Technikums- und Pilotmaßstab mit Packungshöhen von ≤ 1 m von Trennleistungsmessungen mit gelochten Packungen mit Packungshöhen von ca. 3 m im Pilotmaßstab ab, die üblicherweise für die Entwicklung von Stoffübergangsmodellen verwendet werden.

2 Stand des Wissens

Im Folgenden wird der aktuelle Stand des Wissens zur Rektifikation mit Fokus auf die experimentelle und modellbasierte Bestimmung von Trennleistungen im Miniplant- und Technikumsmaßstab vorgestellt. Dabei wird zunächst auf die thermodynamischen Grundlagen und den Aufbau von Rektifikationsanlagen eingegangen. Anschließend werden die geometrischen Eigenschaften strukturierter Packungen vorgestellt, gefolgt von einer Analyse der Fluidodynamik in Packungskolonnen. Das darauffolgende Kap. 2.4 ist der Quantifizierung der Trennleistung mit Hilfe verschiedener Modelle gewidmet. Darüber hinaus wird der aktuelle Stand der Literatur zur Abhängigkeit der Trennleistung und der Fluidodynamik von den physikalischen Eigenschaften der Stoffgemische dargestellt. Besonderes Augenmerk wird auf die standardisierten Methoden zur experimentellen Trennleistungsmessung und deren Einflüsse auf die Trennleistungsergebnisse gelegt. Abschließend werden in Kap. 2.7 Ansätze zur Maßstabsübertragung und Auslegungsmethoden mittels experimentell ermittelten Trennleistungsdaten dargestellt.

2.1 Grundlagen der Rektifikation

Der Begriff der Rektifikation beschreibt eine mehrstufige Destillation. Im Unterschied zur einfachen Destillation wird bei der Rektifikation aufsteigender Dampf (G) mit herabfließender Flüssigkeit (L) im Gegenstrom in Kontakt gebracht und ein Stoffaustausch ermöglicht (Behr et al., 2010; Christen, 2010). Ein Rektifikationsaufbau besteht dafür aus einem Verdampfer am Kolonnensumpf sowie einem Kondensator am oberen Ende der Trennkolonne, der den Dampf kondensiert (s. Abbildung 2.1). Bei einem externen Kondensator wird das Kondensat als Rücklaufstrom zurück in den Kopf der Kolonne gefördert. Im Produktionsbetrieb wird mit dem Verhältnis aus dem Rücklaufstrom R und dem Destillatstrom D das Rücklaufverhältnis $v = R \cdot D^{-1}$ eingestellt.

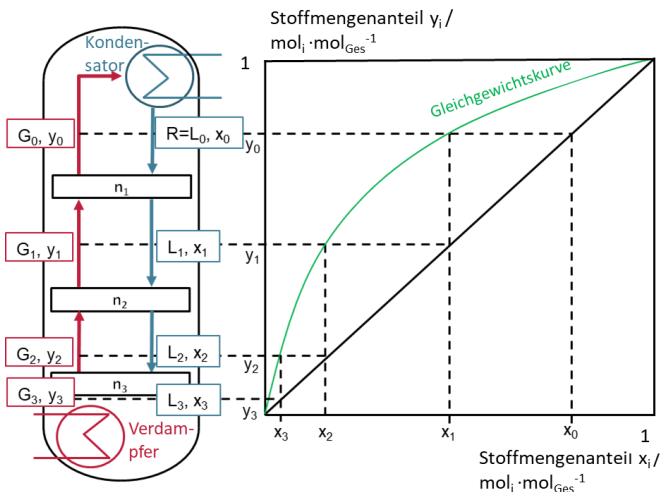


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der Gas- und Flüssigkeitsströme bei Trennleistungsmessungen mit Gegenstrom und totalem Rücklauf in einer Rektifikationskolonne (links) und die resultierenden molaren Stoffanteile der theoretischen Stufen im x-y Diagramm

Im Trennleistungsmessbetrieb wird der Rektifikationsanlage kein Destillat entnommen. Diese Betriebsweise wird als „totaler Rücklauf“ bezeichnet und weist nach $\lim_{D \rightarrow 0} (R \cdot D^{-1}) = \infty$ ein unendliches Rücklaufverhältnis v auf. Aufgrund der Gegenstromführung finden wiederholt Verdampfungs- und Kondensationsprozesse statt, welche zu einer erhöhten Trennleistung im Vergleich zu einer einfachen Destillation führen (Kiss et al., 2018; Marin-Gallego et al., 2022). Bei einer teilweisen Verdampfung eines Zweistoffgemisches kommt es zur Anreicherung der flüchtigeren Komponente (Leichtsieder) in der Dampfphase (y_i) und der im thermodynamischen Gleichgewicht stehenden weniger flüchtigen Komponente (Schwersieder) in der Flüssigphase (x_i). Die Trennleistung von Stoffgemischen beruht auf den unterschiedlichen relativen Flüchtigkeiten der Komponenten und den resultierenden Gleichgewichtskurven der zu trennenden Stoffgemische (Kiss et al., 2018; Marin-Gallego et al., 2022) (s. Abbildung 2.1).

Zur Beschreibung der Trennleistung wird z.B. in dem x-y-Diagramm mit der Mc-Cabe-Thiele Methode (s. 2.4.1) die Anzahl der theoretischen Trennstufen (n_i) quantifiziert. Die damit einhergehenden Fachbegriffe werden im Folgenden näher erläutert und hergeleitet.

Die relative Flüchtigkeit $\alpha_{1,2}$ eines binären Gemisches mit den Komponenten 1 und 2 kann als Maß für den Aufwand zur Trennung eines Gemisches verstanden werden und ist nach Gl. (2-1) (Nietsche 2014) definiert.

$$\alpha_{1,2} = \frac{K_1}{K_2} = \frac{\left(\frac{y}{x}\right)_1}{\left(\frac{y}{x}\right)_2}; \text{ ideale Gemische: } \alpha_{1,2} = \frac{p_1^0}{p_2^0}; \text{ reale Gemische: } \alpha_{1,2} = \frac{\gamma_1 \cdot p_1^0}{\gamma_2 \cdot p_2^0} \quad (2-1)$$

Die Verteilung der Komponente 1 zwischen der Dampfphase mit der Zusammensetzung y_1 und der Flüssigphase mit der Zusammensetzung x_1 wird durch den Gleichgewichtskoeffizienten K_1 dargestellt (Gl. (2-1)). Der Gleichgewichtskoeffizient, auch K -Wert genannt, ist eine Funktion der Siedetemperatur $T_{b,i}$ des Reinstoffes i , des Drucks p_{ges} und ist im Allgemeinen von der Stoffgemischzusammensetzung abhängig. Für ideale Gemische hingegen wird K_i häufig als konstant angenommen (Christen, 2010; Górak und Sorensen, 2014).

Die relative Flüchtigkeit $\alpha_{1,2}$ ist das Verhältnis der Gleichgewichtskoeffizienten, welches auch unter der Bezeichnung Trennfaktor bekannt ist (Krell, 1982). Im Gleichgewichtszustand von zwei Phasen (Dampf und Flüssigkeit) kann die thermodynamische Beschreibung der relativen Flüchtigkeit, definiert durch die Phasengehalte einer Komponente relativ zu einer anderen, beschrieben werden. Die relative Flüchtigkeit $\alpha_{1,2}$ kann für ideale Gemische somit als Verhältnis der Sättigungsdampfdrücke p^0 der Gemischkomponenten beschrieben werden. (Gilmont et al., 1950)

Bei weitsiedenden und nicht-idealen Gemischen hängt $\alpha_{1,2}$ hingegen von der Zusammensetzung ab (s. Abbildung 2.2). Zur Berücksichtigung von Nicht-Idealitäten sind in Gl. (2-1) die Aktivitätskoeffizienten γ_1 und γ_2 eingebracht. Die Zusammensetzung in der Dampfphase y_1 nach dem Durchlaufen einer theoretischen destillativen Trennstufe kann durch Umstellen der Gl. (2-2) unter Verwendung der Beziehung $x_1 = 1 - x_2 \wedge y_1 = 1 - y_2$ nach Gl. (2-2) berechnet werden:

$$y_1 = \frac{x_1 \cdot \alpha_{1,2}}{x_1 (\alpha_{1,2} - 1) + 1} \wedge x_1 = \frac{y_1}{\alpha_{1,2} (1 - y_1) + y_1}; \alpha_{1,2} \neq 0 \quad (2-2)$$

Aus der graphischen Auftragung von y_1 gegen x_1 resultiert die Gleichgewichtskurve für das binäre Gemisch bestehend aus den Komponenten 1 und 2, welche den Einfluss des gemischspezifischen $\alpha_{1,2}$ veranschaulicht (s. Abbildung 2.2). Dabei wird die leichtsiedendere Komponente mit höherem

Dampfdruck mit dem Index 1 angegeben. Höhere relative Flüchtigkeiten führen zu konvexeren Gleichgewichtskurven mit höheren molaren Anteilen in der Dampfphase.

Bei dem in Abbildung 2.2 dargestellten Ethanol/Wasser-Gemisch tritt bei einem Ethanolanteil von $x_1 = 0,89 \text{ mol}_{\text{EtOH}} \cdot \text{mol}_{\text{Ges}}^{-1}$ eine relative Flüchtigkeit von $\alpha_{1,2} = 1$ und damit ein azeotroper Punkt im x - y -Diagramm auf. In diesem Punkt sind die Zusammensetzungen im Dampf und in der Flüssigkeit identisch, sodass keine destillative Trennung möglich ist. Im Rahmen dieser Arbeit führen Unterschiede von $\alpha_{1,2}$ bei weitsiedenden Gemischen, die bei Stoffmengenanteilen nahe des Reinstoffs oder des Azeotropen Punkts besonders hoch ausfallen (s. Abbildung 2.2), zu unterschiedlichen Trennleistungen. Dies wird in Kap. 2.4.4 vertieft behandelt.

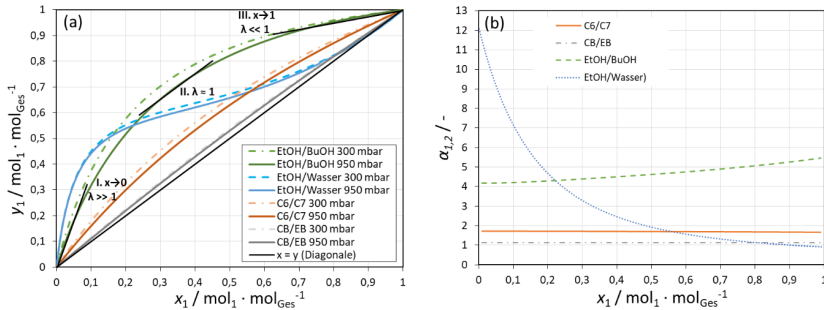


Abbildung 2.2: Gleichgewichtskurven verschiedene Gemische (a) mit Angabe der relativen Flüchtigkeiten $\alpha_{1,2}$ in Abhängigkeit der Zusammensetzung für 950 mbar abs (b)

Bei idealen Gemischen fallen die Wechselwirkungen der Komponenten aufgrund ähnlicher molekularer Struktur gleich hoch aus. Bei moderaten Drücken (≤ 1 bar abs) (Privat et al., 2013) kann mit der Kombination der Gesetze von Dalton ($p_i = p_{\text{ges}} \cdot y_i$) zur Beschreibung der Gasphase und Raoult zur Beschreibung der Flüssigphase ($p_{\text{ges}} = p_1 + p_2 = x_1 \cdot p_1^0 + x_2 \cdot p_2^0$) der Absolutdruck und das Gas-Flüssigkeits-Phasengleichgewicht (VLE) berechnet werden.

Die Verwendung von Aktivitätskoeffizienten der flüssigen Phase nach dem γ - φ -Ansatz (Privat et al., 2013) ermöglicht die Anwendung des Raoult'schen Gesetzes auf nicht-ideale Gemische. Dieser γ - φ -Ansatz nach Gl. (2-3) basiert allgemein auf der Bedingung, dass gleiche chemische Potentiale $\mu_{g,i} = \mu_{l,i}$ und gleiche Fugazitäten $f_i^V = f_i^L$ in der gasförmigen und in der flüssigen Phase vorliegen.

$$f_i^V = f_i^L \Leftrightarrow \Phi_i^V \cdot y_i \cdot p_{\text{ges}} = x_i \cdot \gamma_i \cdot \Phi_i^0(T) \cdot p_i^0(T) \cdot e^{\left[\frac{1}{R \cdot T} \cdot \int_{p_i^0}^{p_{\text{ges}}} \bar{v}_i^L dp \right]} \quad (2-3)$$

Der letzte Exponentialterm ist der sogenannte Poynting-Faktor, welcher den Einfluss des Drucks auf die flüssige Phase beschreibt. Bei Drücken < 50 bar abs beträgt der Poynting-Korrekturfaktor ungefähr eins (Privat et al., 2013; Skogestad, 2008). Bei niedrigen bis moderaten Drücken (< 5 bar abs) und abhängig von den Stoffgemischeigenschaften kann in der Rektifikation die Dampfphase mit dem idealen Gasgesetz annäherungsweise beschrieben werden (Sattler, 2001). Unter diesen Bedingungen betragen die Fugazitätskoeffizienten $\Phi_i^V(T, p, y_i) = 1$ und $\Phi_i^0(T) = 1$.

Dies vereinfacht den γ - φ -Ansatz zur erweiterten Raoult'schen Gl. (2-4). Wenn die Wechselwirkungen zwischen den Molekülen der gelösten Komponenten gleich sind wie die zwischen der gelösten Komponente und dem Lösungsmittel, dann verhält sich die Mischung ideal und das VLE kann mithilfe von Aktivitätskoeffizienten $\gamma_i = 1$ beschrieben werden (Pöschmann et al., 2023; Stephan et al., 2013).

$$y_i \cdot p_{ges} = x_i \cdot \gamma_i \cdot p_i^0 \quad (2-4)$$

Die Aktivitätskoeffizienten γ_i sind nach Gl. (2-4) hauptsächlich abhängig von T_b und der Flüssigkeitszusammensetzung x_i und beschreiben die Nicht-Idealität der flüssigen Phase. Wenn die Wechselwirkungen zwischen den gleichartigen Molekülen größer als zwischen ungleichartigen sind, dann tritt eine positive Abweichung vom Raoult'schen Gesetz mit Aktivitätskoeffizienten $\gamma_i > 1$ auf. Im umgekehrten Fall weist die Lösung negative Abweichungen ($\gamma_i < 1$) auf. (Sattler, 2001)

Für die Berechnung von Aktivitätskoeffizienten zur Vorhersage vom VLE nicht-idealer Gemische können Modellierungsansätze zu Mischungsregeln verwendet werden. Diese beinhalten die Energie- (und Covolumen-) Parameter von kubischen Zustandsgleichungen (EoS) und oft einer lokalen Zusammensetzung (Kontogeorgis und Coutsikos, 2012). Beispielmodelle sind NRTL, UNIQUAC, UNIFAC oder COSMO-RS (Bradtmöller, 2017), welche Modelle der freien Exzessenthalpie (g^E) darstellen.

Neben nicht-idealen Gemischen werden in dieser Arbeit auch weitsiedende Gemische mit Siedetemperaturdifferenzen bis zu 39 K untersucht. Da dieser Siedetemperaturunterschied nicht größer als 40 K ist und die Molekülstrukturen relativ ähnlich sind, kann für die behandelten Rektifikationsprozesse die Pictet-Trouton-Regel angewendet werden (Wisniak, 2003). Diese Regel besagt, dass die Entropiezunahme beim Verdampfen, genauer der Quotient aus der molaren Verdampfungswärme ΔS_b und der absoluten Siedetemperatur T_b , konstant ist.

2.2 Strukturierte Packungen

Kolonneneinbauten dienen der Verbesserung des Stoff- und Wärmeübergangs zwischen dem aufsteigenden Dampf und der herabfließenden Flüssigkeit (Christen 2010). Diese trennwirksamen Einbauten haben die Aufgabe, Phasengrenzflächen für den Stoffübergang bereitzustellen. Allgemein gibt es Boden- und Packungskolonnen. Bei Packungskolonnen wird darüber hinaus zwischen Zufallspackungen und strukturierten Packungen unterschieden.

Im Vergleich zu Füllkörpern bieten strukturierte Packungen mehrere Vorteile, insbesondere eine höhere mechanische Belastbarkeit und einen geringeren spezifischen Druckverlust, der auf ihre offenere Struktur und die Filmströmung zurückzuführen ist. Diese Eigenschaften führen zu einer ausgeprägten Flexibilität und Anpassungsfähigkeit während des Betriebs (Dmitrieva et al., 2005; Olujić et al., 2013, 2000) und resultieren in einer erhöhten Trennwirkung sowie in einer reduzierten erforderlichen Packungshöhe (Schug, 2018). Daher haben sich in der Destillation strukturierte Packungen seit mehreren Jahrzehnten etabliert.

Die Auswahl zwischen verschiedenen Arten von Einbauten und deren Detailkonstruktion hängt neben den genannten Faktoren von zahlreichen weiteren Einflussfaktoren wie Produktspezifikation, Verschmutzungsanfälligkeit, Kapazität und Durchsatz, Investitions- und Betriebskosten, Erfahrung und Know-how ab. Eine vertiefte Behandlung dieser Aspekte findet sich in der Literatur (Fischer et al., 2003; Górak und Schoenmakers, 2014; Kister, 1992). Im Vergleich zu regellosen Zufallspackungen mit Füllkörpern besitzen strukturierte Packungen eine wiederholende Geometrie. Eine strukturierte Packung besteht aus Packungselementen, welche ein Packungsbett bilden. Die Packungshöhe der Kolonne ergibt sich aus der Summe der Höhe der eingesetzten Packungsbetten.

2.2.1 Aufbau und Entwicklung

Strukturierte Packungselemente bestehen aus mehreren Lagen gefalteter Bleche oder Drahtnetze, die in der Regel perforiert und gelocht sind. Diese mit entgegengesetzter Neigung nebeneinander angeordneten Blech- oder Drahtnetzlagen bilden eine Wabenstruktur, in welcher Dampf und Flüssigkeit im Gegenstrom

fließen und welche eine große Kontaktfläche zwischen Dampf- und Flüssigphase ermöglicht. Je größer die spezifische Packungsoberfläche, desto enger wird die Wabenstruktur. Dadurch steigen der Druckverlust und in der Regel die Trennleistung (Gutperl, 2026; Kister, 1992). Diese Wabenstruktur wird durch eine Falblattstruktur ermöglicht, welche gefaltete Dreieckskanäle bildet.

Die Packungshersteller wenden unterschiedliche Herstellungsverfahren an, sodass sich die strukturierten Packungen in der Mikro- und Makrostruktur sowie der Perforation (Spiegel und Duss, 2014) unterscheiden. So weisen Packungen der Firma Koch-Glitsch (ehemals Julius Montz GmbH) sinusförmige abgerundete Falstrukturen auf, während bei anderen Herstellern ein spitz zulaufender, dreieckiger Querschnitt (s. Abbildung 2.3 (1)) üblich ist (Kister, 1992; Shetty und Cerro, 1997).

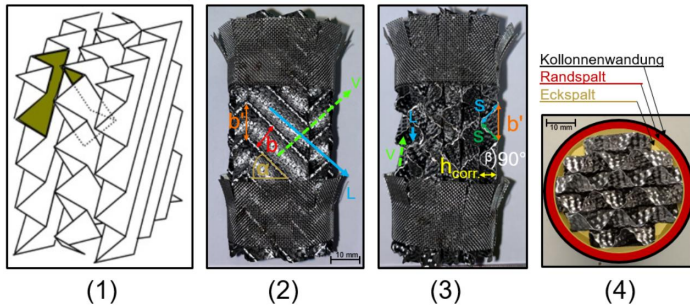


Abbildung 2.3: (1) Stilisierte Makro-Faltstruktur (Lavalle et al., 2018), RMP-N ähnliches 500.Y strukturiertes Packungselement in verschiedenen Perspektiven: (2) Frontansicht auf Bleche und Randabweiser aus Metallgewebe, (3) Seitenansicht der gewellten Bleche, (4) Draufsicht des Packungskerns mit hervorgehobenen Rand- und Eckspalten zwischen Blech und Kolonnenwand

Die Makro- und Mikrostrukturgeometrie des strukturierten Packungstyps „Mellapak™“ (Meier et al., 1979) wurde seit der Vorstellung in dem Jahr 1974 (Spiegel, 2013) mit dem Ziel weiterentwickelt, möglichst hohe Stoffübergangsraten und hohe Durchsätze bei geringen Druckverlusten (Billet, Reinhard 1998) zu erreichen. Dies wurde unter anderem mithilfe einer Mikrostruktur bewerkstelligt. Diese Mikrostruktur stellt einen geringen Widerstand für den Gasfluss dar und unterstützt die Flüssigkeitsausbreitung und Erneuerung der Flüssigkeitsoberfläche (Spiegel und Duss, 2014). Damit verbundene erhöhte Trennleistungen wurden im Jahr 2000 mit der Generation sogenannter Hochleistungspackungen erreicht, bei denen die Kanalgeometrie an den Stoßstellen der Packungselemente angepasst wurde (Ž. Olujić, 2019; Schultes, 2013). Als neueste Entwicklung wurde eine neue Packungsgeneration „MellapakEvo™“ vorgestellt, welche auf einer neuen Perforation und Blechgeometrie basiert. Diese verspricht höhere Trennleistungen und Kapazität bei geringeren Druckverlusten und damit geringerem Energiebedarf (SULZER Chemtech AG, 2024). Insbesondere bei Vakuumrektifikationsprozessen mit geringen Flüssigkeitsbelastungen werden Gewebepackungen eingesetzt. Diese haben den Vorteil einer höheren Benetzung des Drahtgewebes durch darin auftretende Kapillareffekte im Vergleich zu Blechpackungen, welche bei geringen Flüssigkeitsbelastungen nicht vollständig benetzt werden (Olujić et al., 2009).

Die Orientierung der Packungselemente wird gegenüber dem darunter liegenden Element um 90° rotiert, um eine großflächige radiale Verteilung und Vermischung zu gewährleisten (Stoter et al., 1993). Diese Rotation führt jedoch zu einem erheblichen Druckverlust aufgrund der abrupten Änderung der Gasströmungsrichtung bei jedem Übergang zwischen den Packungslagen (Olujić et al., 1999).

Bei dem Zickzack-Weg des Dampfes durch das Packungsbett nach oben erfährt die Dampfströmung abrupte Änderungen der Strömungsrichtung. Dies und die Gas-Gas-Wechselwirkung an der Grenzfläche, die an den Kreuzungen der Gasströmungskanäle entsteht, tragen zum Gesamtdruckverlust bei (Olujčić, 1997). Bei Laborkolonnen mit Innendurchmessern < 80 mm und hohen Randeckeffekten relativ zur Querschnittsfläche wird eine Rotation der Packungslagen um 45° anstatt um 90° wie im Technikums- und Industriemaßstab realisiert, um den Eckspalt um 85 % zu verkleinern (Neumann et al., 2025). Diese geringere Rotation hat im Labormaßstab mit 50 mm und im Industriemaßstab mit 900 mm Innendurchmesser keinen Einfluss auf die Trennleistung und den Druckverlust gezeigt (Pavlenko et al., 2019).

2.2.2 Geometrische Packungsparameter

Die Geometrie der Packungsbleche wird durch die Abmessungen der Wellung über die Parameter Wellenhöhe ($h_{corr.}$), Länge der Wellenbasis (b), horizontaler Wellenabstand (b'), Seitenlänge der Welle (s), und dem Neigungswinkel (α) der Wellen zur Horizontalen charakterisiert (s. Abbildung 2.3) (Spiegel und Duss, 2014). Der Neigungswinkel α beträgt üblicherweise 45° oder 60° (Bradtmöller, 2017) und beeinflusst die Kontaktfläche, die Turbulenz und damit auch den Stoffübergang. Bleche mit einem höheren Neigungswinkel von 60° ermöglichen der Gas- und Flüssigphase in einem steileren Winkel zur Vertikalen zu strömen, was den Druckverlust und die Trennleistung verringert (Bradtmöller, 2017), aber die Kapazität erhöht (Olujčić, 2000). Die 60° -Packung zeigt daher ein breiteres Belastungsspektrum mit einer Verschiebung des Beladungspunkts zu einem höheren F-Faktor (Olujčić et al., 2000).

Eine 45° -Packung verlängert den Strömungsweg und erhöht die Verweilzeit (Fair et al., 2000; Olujčić et al., 1997; Verschoof et al., 1999) sowie die Turbulenz der Dampfströmung (Bradtmöller, 2015). Diese Effekte erhöhen die Trennleistung. Bei Hochleistungspackungen nähert sich der Neigungswinkel α der Wellen am oberen und unteren Ende der Packungselemente der vertikalen Achse (90°) an. Dies ermöglicht eine weniger abrupte, aber gleichmäßige und kontinuierliche Änderung der Strömungsrichtung an den Stoßstellen. Dies führt zu einer Verringerung des Druckverlustes, der Scherkraft zwischen Gas- und Flüssigphase und der Gasgeschwindigkeit, was zu einer Kapazitätssteigerung von Hochleistungspackungen (MellapakPlus™) von 50 % im Vergleich zur Mellapak™ führt (SULZER AG, 2024). Dieser Vergleich zeigt, dass diese reduzierten Effekte an den Stoßstellen der Packungselemente (vgl. 2.6.5) zu einer Erhöhung der Trennleistung um 30 %-Punkte führen (SULZER Chemtech AG, 2024).

2.2.3 Mikrostruktur und Perforation

Neben makroskopischen Faltstrukturen weisen moderne Packungen häufig mikrostrukturierte Oberflächen auf (Kapoustina et al. 2019). Mikrostrukturierte Oberflächen, wie Dellen und Riffelungen, haben geometrische Abmessungen von $0,1 \mu\text{m}$ bis $1000 \mu\text{m}$ (Kohrt; Repke et al., 2011). Sie dienen der verbesserten Feinverteilung und Benetzung von Flüssigkeiten (Bertling et al., 2023; Meier et al., 1979). Damit verbunden ist eine Steigerung der effektiven Oberfläche um 10 % (Tsai et al., 2011) und des flüssigkeitsseitigen Stofftransports.

Studien zeigen, dass Packungen mit mikrostrukturierten oder auch sogenannten texturierten Oberflächen den Stofftransport in Destillationstestsystemen um 20 % ... 100 % (Schultes, 2013) erhöhen können. Untersuchungen mit einer mikrostrukturierten B1-500.Y Packung zeigten eine Erhöhung des flüssigseitigen volumetrischen Stoffübergangskoeffizienten um 90 % (Kohrt, 2012) sowie an Tropfen- und Rinsalströmung an geneigten Platten um bis zu 80 % (Repke et al., 2011). Diese Verbesserung des flüssigseitigen Stofftransports hängt unter anderem vom Verhältnis des Abstandes und der Maxima der Dellen ab (Davies und Warner, 1969), sowie vom Verhältnis von Filmdicke (Kapoustina, 2019) und der Höhe (Spitze-Tal-Wert) bzw. der Amplitude der Dellen (Zhao und Cerro, 1992).

Ursachen für die Erhöhung des Stofftransports sind eine erhöhte turbulente Wirbelbildung im Flüssigkeitsfilm und ein verbesserter Flüssigkeitsrückhalt durch das Aufbringen einer Mikrostruktur (Tong et al., 2012). Weitere Effekte, wie eine verbesserte Benetzung der Oberfläche, tragen ebenfalls zur Effizienzsteigerung bei (Kohrt 2012). Insbesondere bei geringen Gas- und Flüssigkeitsbelastungen unterhalb des Staupunkts (Kohrt, 2012) konnte der signifikant stofftransportverstärkende Einfluss der Mikrostruktur nachgewiesen werden (Kapoustina, 2019).

Die Perforation von Packungsblechen mit 4 mm Löchern führt zu einer Vergrößerung der Gas-Flüssigkeits-Grenzfläche, einer verbesserten lokalen Flüssigkeitserneuerung und einem modifizierten Hold-up. (Bertling 2024; Meier et al., 1979). Die Perforation ermöglicht bei hohen oder inhomogenen Flüssigkeitsbelastungen die Entweichung des Gases in benachbarte Kanäle (Yan et al., 2023). Dies führt nach Gl. (9-26) zu einem größeren effektiven Dampfströmungswinkel α_{eff} und zu vorteilhaften, geringeren Druckverlusten. Obwohl die Perforation zu einer Verringerung der geometrischen Packungsoberfläche um 10 % führt (Olujić et al., 2012, 2004), ist die Trennleistung von perforierten Packungen bei niedrigen Gasbelastungen (Repeke et al., 2011) und bei hohen Gasbelastungen, aufgrund von Tropfen- und Sprayströmungen, höher als die von nicht-perforierten Packungen (Pöschmann et al., 2024).

Perforierte Packungen werden aufgrund dieser Vorteile als Standardkonfiguration für Trennleistungsmessungen und darauf basierende Stoffübergangsmodelle verwendet. Weiterführende Literatur für detaillierte Erläuterungen befindet sich im Anhang K.3.

2.3 Fluidodynamik in Packungskolonnen

Die Fluidodynamik in der Packung resultiert aus der Belastung von Dampf- und Flüssigkeitsströmungen und ist mit dem Druckverlust charakterisierbar. Diese Fluidbelastung bestimmt die Kapazität der Packung und ist abhängig von der Benetzung der Packungsoberfläche (Kister, 1990).

2.3.1 Gas- und Flüssigkeitsbelastung

Zur Charakterisierung der Fluidodynamik der Packung werden die durchströmenden Gas- und Flüssigkeitsvolumenströme betrachtet. Dies wird bei der Auslegung und dem Betrieb von Packungen durch die folgenden Kenngrößen berücksichtigt.

In Abhängigkeit von F_G (2-5) kann der Innendurchmesser d_i in m und die Querschnittsfläche der leeren Kolonne A_K in m^2 und damit die Kapazität der Kolonne festgelegt werden (Schug 2018). A_K und der Gasvolumenstrom \dot{V}_G in $m^3 \cdot s^{-1}$ bedingt die in der ungepackten Kolonne auftretende Leerrohrgeschwindigkeit u_{Gs} in $m \cdot s^{-1}$. Der Gasbelastungsfaktor F_G ist außerdem von der Gasdichte ρ_G in $kg \cdot m^{-3}$ abhängig. Die Herleitung von F_G erfolgt gemäß der Druckgleichung nach Bernoulli. Die Quadrierung von F_G entspricht näherungsweise dem Staudruck (Kister, 1992), welcher zudem als dynamischer Druckabfall bezeichnet wird.

$$F_G = u_{Gs} \cdot \sqrt{\rho_G} = \frac{\dot{V}_G}{A_K} \cdot \sqrt{\rho_G} = \frac{\dot{m}_G}{A_K \cdot \sqrt{\rho_G}} \quad (2-5)$$

In der englischsprachigen Literatur wird häufig der Kapazitätsfaktor mit C_G verwendet (Cai, 2014). Dieser hängt mit F_G über $C_G = F_G \cdot \sqrt{\rho_L - \rho_G}$ zusammen. Auch in der deutschsprachigen Literatur wird mit C_G und F_G die Kapazität der Packung charakterisiert (Bradtmöller, 2017; Kammermaier, 2008).

Die Flüssigkeitsbelastung w_L in $m^3 \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ wird mit dem Verhältnis aus dem zwischen der Packung herabfließenden Flüssigkeitsvolumenstrom \dot{V}_L in $m^3 \cdot s^{-1}$ und A_K beschrieben (2-6).

$$w_L = \frac{\dot{V}_L}{A_K} \quad (2-6)$$

Bei Packungskolonnen ist die minimale Flüssigkeitsbelastung ein strengeres Auslegungskriterium als bei Bodenkolonnen. Wird die Flüssigkeitsbelastungsgrenze unterschritten (s. Abbildung 2.4), kommt es zum Aufreißen des Flüssigkeitsfilms und zur Reduzierung der Benetzung der Packungsblechoberflächen und der Trennleistung. Aus diesem Grund werden bei geringeren Flüssigkeitsbelastungen von bis zu $0,05 \text{ m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1}$ strukturierte Gewebepackungen verwendet (Goedecke, 2006).

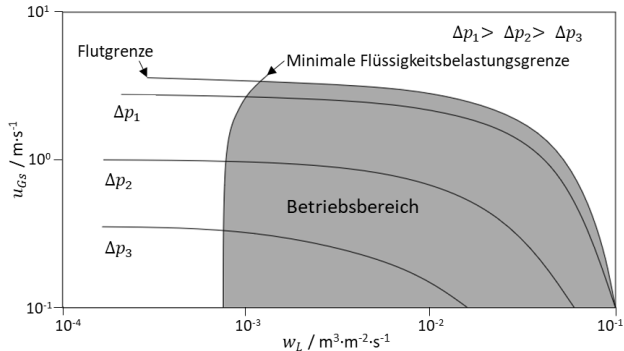


Abbildung 2.4: Belastungsdiagramm einer strukturierten Packung nach (Green und Perry, 2007; Gutperl, 2026)

In dem Belastungsdiagramm in Abbildung 2.4 wird deutlich, dass die obere Belastungsgrenze, d.h. Flutgrenze, den Betriebsbereich begrenzt. Die Gasbelastung bestimmt die Trennleistung und damit in der Anwendung schließlich die Kosten der Packungen für eine bestimmte Trennaufgabe (Christen, 2010).

2.3.2 Druckverlust und Hold-up

Der Flüssigkeitsinhalt einer Packung wird als Hold-up bezeichnet. Der Hold-up bedingt den Druckverlust, der als bedeutende fluiddynamische Größe zur Charakterisierung von Packungskolonnen verwendet wird.

Hold-up

Der Hold-up in der Packung beeinflusst die Trennleistungsmessung (Nitsche, 2014). Der gesamte Hold-up einer Packungskolonne setzt sich aus einem dynamischen Anteil und einem statischen Anteil zusammen (Maćkowiak, 2003; Mersmann et al., 2005; Zakeri et al., 2011).

Der statische Hold-up $h_{L,stat}$ basiert auf Flüssigkeit, welche aufgrund von Adhäsions- und Kapillarkräften in der Packung verbleibt, z. B. in der Prägung der Mikrostruktur oder als Zwickelflüssigkeit an den Kontaktstellen der Bleche (Suess und Spiegel, 1992), s. Abbildung 2.5.

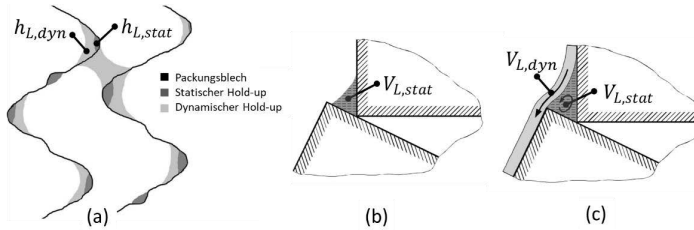


Abbildung 2.5: Schematische Darstellung des statischen (b) und des dynamischen (c) Hold-up nach (Kraume, 2004) in einer strukturierten Packung anhand einer computertomographischen Aufnahme (a) nach (Schug, 2018)

Der statische Hold-up $h_{L,stat}$ ist eine Funktion der physikalischen Stoffeigenschaften der Flüssigkeit (Dichte ρ_L , dynamische Viskosität η_L und Oberflächenspannung σ_L), der charakteristischen Packungseigenschaften (Hohlraumanteil ε und spezifische Packungsoberfläche a_{pa}), der Flüssigkeitsbelastung w_L und der Erdbeschleunigung g (Zakeri et al., 2011).

Untersuchungen von Sidi-Boumedine und Raynal (2005) zum statischen Hold-up an Kontaktpunkten der Bleche zeigen, dass das Verhältnis des statischen Hold-up von Packungen mit $\alpha = 45^\circ$ bzw. $\alpha = 60^\circ$ dem Verhältnis der Anzahl der Kontaktpunkte entspricht. Unabhängig von der Flüssigkeitsbelastung und der Viskosität betrug der Anteil der Zwickelflüssigkeit am gesamten Hold-up für Wasser/Glycerin-Gemische 22 % ... 24 % (Janzen et al., 2013). Unter Gas-Flüssigkeit-Tropfenströmungsbedingungen beträgt der statische Hold-up bis zu 25 % oder 33 % des gesamten Hold-up (Aferka et al., 2007; Kramer, 1998).

Der Hauptteil (67 % ... 75 %) des Hold-up entfällt auf den größeren dynamischen Hold-up $h_{L,dyn}$ (Stichlmair und Fair 1998). Der dynamische Hold-up basiert auf dem Flüssigkeitsinhalt, der während des Betriebes aktiv an der Flüssigkeitsströmung teilnimmt und somit die Flüssigkeitgeschwindigkeit erhöht. In der Regel führt ein erhöhter dynamischer Hold-up zu höheren Trennleistungen (Nitsche, 2014; Ono und Erhard, 2011).

Wenn die Flüssigkeitsbelastung erhöht wird, folgt der Flüssigkeitsfilm nicht mehr der Form der strukturierten Wand. Es bilden sich in Bereichen, die dem statischen Hold-up zuzuordnen sind, Rezirkulationszonen (s. Abbildung 2.5). Diese Rezirkulationszonen wachsen mit zunehmender Reynolds-Zahl und erhöhen damit die Strömungsgeschwindigkeiten und Turbulenzen, die den Stoffaustausch fördern. Es existieren detaillierte Untersuchungen zum Hold-up für verschiedene Strömungsregime in Filmströmungen in Abhängigkeit von der dimensionslosen Reynolds-Zahl und der Amplitude der Mikrostruktur (Haroun et al., 2012; Zhao und Cerro, 1992).

Druckverlust

Der Druckverlust wird spezifisch auf die Packungshöhe bezogen. Ein geringer spezifischer Druckverlust ist insbesondere bei der rektifikativen Auftrennung von temperatursensiblen Produkten in Packungskolonnen relevant, bei denen eine möglichst geringe Sumpftemperatur angestrebt wird (Behr et al., 2010; Schultes, 1998). Der Druckverlust in einer Kolonne setzt sich aus dem hydrostatischen Druck der Flüssigkeitsbelastung und dem dynamischen Strömungswiderstand des Dampfes zusammen (Christen, 2010). Der dynamische Strömungswiderstand wird auch als Gas-Gas-Druckverlust bezeichnet, da er auf die Reibung und die Richtungsänderung des Gaststroms entlang des Flüssigkeitsstroms durch die Packungen zurückzuführen ist und mit steigender Dampfgeschwindigkeit zunimmt. Zusätzlich werden