

---

# Inhalt

<b>Inhalt</b> .....	<b>I</b>
<b>Symbolverzeichnis</b> .....	<b>VI</b>
<b>Lateinische Symbole</b> .....	<b>VI</b>
<b>Griechische Symbole</b> .....	<b>IX</b>
<b>Indizes</b> .....	<b>IX</b>
<b>Abkürzungen</b> .....	<b>XI</b>
<b>Abstract</b> .....	<b>XIV</b>
<b>Kurzfassung</b> .....	<b>XVI</b>
<b>Kapitel 1 Einleitung</b> .....	<b>1</b>
<b>Kapitel 2 Stand des Wissens</b> .....	<b>5</b>
<b>2.1. Integrierte reaktive Trennverfahren</b> .....	<b>5</b>
2.1.1. Multifunktionale Reaktoren.....	5
2.1.2. Phasenmodell.....	7
2.1.3. Freiheitsgrade reaktiver Trennprozesse.....	9
2.1.4. Reaktionsraumkonzept .....	10
2.1.5. Produktbereiche nicht-reaktiver und reaktiver Trennungen .....	14
2.1.6. Betriebsfenster .....	21

<b>2.2.</b>	<b>Ausgewählte Aspekte der chemischen Verfahrenstechnik.....</b>	<b>22</b>
2.2.1.	Reaktionstechnik .....	23
2.2.1.1.	Reaktionstechnische Kennzahlen .....	23
2.2.1.2.	Reaktionskinetik.....	24
2.2.1.3.	Ideale Reaktoren.....	25
2.2.2.	Adsorption und reaktive Chromatographie .....	27
2.2.2.1.	Prinzip von Adsorption und Desorption.....	27
2.2.2.2.	Adsorptionsgleichgewicht – linearer Modellansatz.....	28
2.2.2.3.	Prinzip der Reaktivchromatographie .....	28
2.2.2.4.	Moving-Bed Prozesse.....	29
2.2.3.	Flüssig-Flüssig-Gleichgewichte bei der Extraktion.....	31
2.2.4.	Numerische Optimierung .....	33
<b>2.3.</b>	<b>Methoden der Prozesssynthese .....</b>	<b>34</b>
<b>Kapitel 3</b>	<b>Verteilung von Funktionalitäten .....</b>	<b>40</b>
<b>3.1.</b>	<b>Allgemeiner Teil .....</b>	<b>40</b>
3.1.1.	Begriff der Funktionalität .....	40
3.1.2.	Integrationsgrade und räumliche Struktur .....	43
<b>3.2.</b>	<b>Funktionalitätenverteilung in der reaktiven Chromatographie – Design idealer Stoffsysteme .....</b>	<b>45</b>
3.2.1.	Beschreibung des Simulationsmodells .....	46
3.2.1.1.	Modellierung einer Einzelsäule und Verknüpfung zum TMBR.....	47
3.2.2.	Vorgehensweise bei den Simulationsstudien.....	50
3.2.3.	Auswertung der Simulationsstudien.....	53
3.2.3.1.	Reaktionstyp $A \rightleftharpoons B+C$ .....	53
3.2.3.2.	Reaktionstyp $A+B \rightleftharpoons C+D$ .....	61
3.2.3.3.	Reaktionstyp $A+B \rightleftharpoons C$ .....	69
3.2.4.	Eignung chromatographischer Reaktoren für verschiedene Reaktionen.....	72
<b>3.3.</b>	<b>Funktionalitätenverteilung in der reaktiven Rektifikation – Design realer Stoffsysteme.....</b>	<b>75</b>
3.3.1.	Herstellung von Methylacetat durch reaktive Rektifikation.....	77
3.3.1.1.	Thermodynamik des MeAc-Systems.....	77