



Bettina Sander (Autor)

**Zum Einfluss der überkritischen Reaktionsführung
auf die Isomerisierung von n-Butan an sulfatiertem
Zirkoniumdioxid**

Bettina Sander

**Zum Einfluss der überkritischen Reaktionsführung
auf die Isomerisierung von n-Butan
an sulfatiertem Zirkoniumdioxid**



Cuvillier Verlag Göttingen

<https://cuvillier.de/de/shop/publications/3531>

Copyright:

Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentzsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen,
Germany

Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: info@cuvillier.de, Website: <https://cuvillier.de>

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	1
2 Literaturübersicht	4
2.1 Verfahren zur Herstellung von iso-Butan.....	4
2.2 Sulfatiertes Zirkoniumdioxid.....	5
2.2.1 Einfluss der Präparationsmethoden auf die katalytische Aktivität von sulfatiertem ZrO_2	5
2.2.2 Charakterisierung von sulfatiertem ZrO_2	9
2.2.3 Kinetik der Isomerisierung von n-Butan an sulfatiertem ZrO_2 in der Gasphase	11
2.2.4 Deaktivierung von sulfatiertem ZrO_2	19
3 Überkritische Fluide	25
3.1 Einfluss des Drucks auf die Fluidichte und das Löslichkeitsvermögen.....	28
3.2 Einfluss des Drucks auf die Transporteigenschaften.....	33
3.3 Einfluss des Drucks auf die Reaktionsgeschwindigkeit und die Gleichgewichtskonstante	34
4 Experimentelles	37
4.1 Beschreibung der Hochdruckapparatur	37
4.1.1 Dosierung der Edukte.....	37
4.1.2 Druckreaktor	39
4.1.3 Druckregelung und Gasanalyse.....	40
4.1.4 Sicherheitstechnik	41
4.2 Präparation des Katalysators	42
4.2.1 Calcinierung des Katalysatorvorläufers	42
4.2.2 Aktivierung des Katalysators	42
4.3 Durchführung der kinetischen Messungen	43
4.3.1 Messungen bei Atmosphärendruck	43
4.3.2 Messungen bei erhöhtem Druck.....	44
4.4 Auswertung der Versuche	46
4.4.1 Größen zur Beschreibung der katalytischen Aktivität	46
4.4.2 Ermittlung von Umsätzen und Selektivitäten des nicht deaktivierten Katalysators	49
4.4.3 Mathematische Modellierung.....	51

5 Ergebnisse und Diskussion	54
5.1 Reaktionskinetische Messungen bei Atmosphärendruck	54
5.1.1 Reaktionsverlauf und Produktverteilung.....	54
5.1.2 Verhalten des nicht deaktivierten Katalysators.....	57
5.1.3 Entwicklung kinetischer Ansätze und Ergebnisse der Modellierung.....	59
5.1.4 Beschreibung der Deaktivierung.....	63
5.2 Reaktionskinetische Messungen bei überkritischen Bedingungen.....	65
5.2.1 Einfluss der Temperatur	66
5.2.2 Einfluss des Drucks.....	72
5.2.3 Einfluss der Konzentration.....	75
5.2.4 Entwicklung reaktionskinetischer Ansätze	78
5.3 Vergleich der unterkritischen und überkritischen Reaktionsführung.....	92
5.3.1 Raum-Zeit-Ausbeuten an iso-Butan.....	92
5.3.2 Vergleich der überkritischen Prozessführung mit herkömmlichen Verfahren.....	94
6 Zusammenfassung.....	97
7 Anhang	101
7.1 Kinetische Daten.....	101
7.2 Thermodynamik.....	103
7.3 Charakterisierung des Katalysators	106
7.4 Gasanalyse	110
7.4.1 Auswertung der GC-Analyse	111
7.5 Stoffdaten.....	115
7.5.1 Berechnungsmethoden zur Ermittlung kritischer Größen eines Stoffgemischs.....	115
7.5.2 Berechnungsmethode zur Ermittlung der kritischen Dichte	117
7.5.3 Viskosität von Gasen bei niedrigem und erhöhtem Druck	118
7.5.4 Diffusionskoeffizient von Gasen bei niedrigem und erhöhtem Druck	121
7.6 Abschätzung des Druckabfalls	125
7.7 Einfluss der axialen und radialen Dispersion auf die beobachtete Kinetik.....	127
7.8 Einfluss des Stofftransports auf die beobachtete Kinetik.....	130
7.8.1 Äußerer Stofftransport	130
7.8.2 Innerer Stofftransport	134
7.9 Einfluss des Wärmetransports	136
8 Symbolverzeichnis.....	138
9 Literaturverzeichnis.....	141