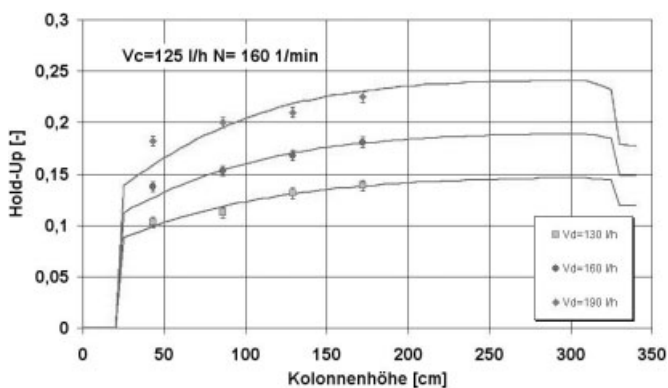


siert die Auslegung industrieller Extraktionskolonnen weitestgehend auf Short-Cut-Methoden und einfachen Modellen, wie beispielsweise dem HTU-NTU-Konzept. Für die Überführung der Ergebnisse in halbempirische Berechnungsansätze dienen vereinfachte Strömungsmodelle wie das Stufenmodell, die die hydrodynamischen Vorgänge mehr oder weniger stark idealisiert beschreiben. Ein direkter Scale-up zu industriellen Apparategrößen ist jedoch ohne die Grundlage einer genauen Modellbildung und Simulation nicht möglich, deren Parameter in Einzeltropfen- und Tropfenschwarmexperimenten bestimmt werden. Grundlage dieser Simulation ist das Tropfenpopulationsbilanzmodell (TPBM), dessen Ansatz die Entwicklung der Tropfengrößenverteilung in der Kolonne unter Berücksichtigung von Transport, axialer Dispersion, Koaleszenz, Zerfall und Stoffaustausch beschreibt. Daher werden am Lehrstuhl die Hydrodynamik und der Stoffaustausch an gerührten Kolonnen der Bauart RDC und an Kühni-Kolonnen im Technikummaßstab (DN150) bis hin zum Labormaßstab (DN32) im Miniplantformat untersucht. Die in die Simulation einfließenden hydrodynamischen Parameter werden in charakteristischen Kolonnensegmenten, unterschiedlichen Geometrien, mit den von der EFCE empfohlenen Stoffsystemen (Toluol/Wasser, *n*-Butylacetat/Wasser) gemessen und in diesem Beitrag präsentiert.

In den Einzeltropfenexperimenten werden die einbautenspezifische und drehzahlabhängige Verzögerung des Tropfenaufstiegs sowie der Einzeltropfenzerfall für Tropfendurchmesser bis zu 4 mm bestimmt. Anhand der Ergebnisse der Einzeltropfenuntersuchungen in Geometrien, von Miniplant- bis zur Technikumgröße, werden Modellgleichungen zum Tropfenaufstieg und -zerfall präsentiert, die einen breiten Geltungsbereich abdecken. Neben dem Energieeintrag und der Einbautengeometrie werden auch die Stoffsystemparameter, wie Viskosität und Grenzflächen-spannung, für die Berechnung der Kolonnenhydrodynamik berücksichtigt.

Abbildung.

Simulierte und gemessene Hold-Up Profile einer Kühni DN150 unter Variation der Dispersphasendurchsätze für das Stoffsystem Toluol/Wasser.



Unter Lösung einer diskreten Tropfenpopulationsbilanzgleichung werden in Abhängigkeit der Stoff- und Betriebsdaten die simulierten Tropfengrößenverteilungen an die aus Tropfenschwarmexperimenten gewonnenen

Tropfengrößenverteilungen angepasst und die für die Simulation erforderlichen Koaleszenzparameter ermittelt. Mit den in das TPBM implementierten Modellgleichungen aus den Einzeltropfenexperimenten und Tropfenschwarmexperimenten können die Hydrodynamik der untersuchten Extraktionskolonnen über einen weiten Größenbereich mit der Simulation beschrieben werden (s. Abb.).

K-17

Berechnung von Flüssig/Flüssig-Extraktionskolonnen

Ms. Sc. M. M. Attarakih¹⁾

Prof. H.-J. Bart*¹⁾

E-Mail: bart@mv.uni-kl.de

Prof. N. M. Faqir²⁾

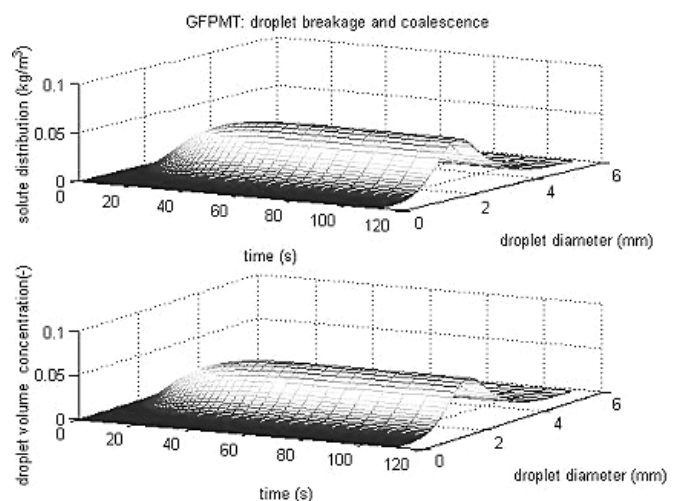
¹⁾ Universität Kaiserslautern, Lehrstuhl für Thermische Verfahrenstechnik, POB 3049, D-67653 Kaiserslautern.

²⁾ Chemical Engng. Department, University of Jordan, 11942 Amman, Jordan

Flüssig/Flüssig-Extraktionskolonnen haben eine weite industrielle Verbreitung in der Hydrometallurgie, der nuklearen-, petrochemischen-, pharmazeutischen- und Nahrungsmittelindustrie. Ein Problem bis heute ist noch immer die kosten- und zeitaufwändige Scale-up-Prozedur vom Labor bis zur Großanlage. Populationsmodelle, die ein realistischeres Bild der lokalen Tropfenstruktur abgeben, eröffnen die Möglichkeit, das Kolonnenverhalten genauer vorauszuberechnen. Bivariate Populationen berücksichtigen dabei Tropfenaufbruch und Koaleszenz mit gekoppeltem Stoffübergang von der kontinuierlichen zur dispersen Phase über alle Tropfenpopulationen (s. Abb.). Jeder Tropfen wird dabei durch seine internen Koordinaten (z. B. Konzentra-

Abbildung.

Entwicklung der bivariaten Verteilung (Tropfenkonzentration und Tropfenvolumen) in einem RDC (0.15'0.15 m) unter Berücksichtigung von Tropfenzerfall und -koaleszenz.



tion) und den externen Koordinaten Zeit und Ort in einer bivarianten Verteilung im Extraktorvolumen charakterisiert. Die Systeme sind stark miteinander korreliert, da Koaleszenz und Tropfenaufbruch neben Geometriefaktoren und Energieeintrag stark von Stoffdaten wie Viskosität und Grenzflächenspannung abhängen. Gerade letztere werden aber durch den Stoffaustausch kontinuierlich verändert, so dass neben der internen Koordinate Konzentration gleichzeitig auch Viskosität und Grenzflächenspannung zu berücksichtigen sind. Ein effektiver Algorithmus basierend auf einer generalisierten Fixed-pivot-Technik (GFPM), der die bivariate Populationsbilanz einer Gegenstromextraktionskolonne im Minutenbereich stabil lösen lässt, wird dazu vorgestellt.

K-18

Extraktive Isolierung von PHA, Extraktionsbedingungen und Matrixeffekte

Dipl.-Ing. H. Frühwirth-Smounig*¹⁾

o.Univ. Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. Dr. h. c. R. Marr¹⁾

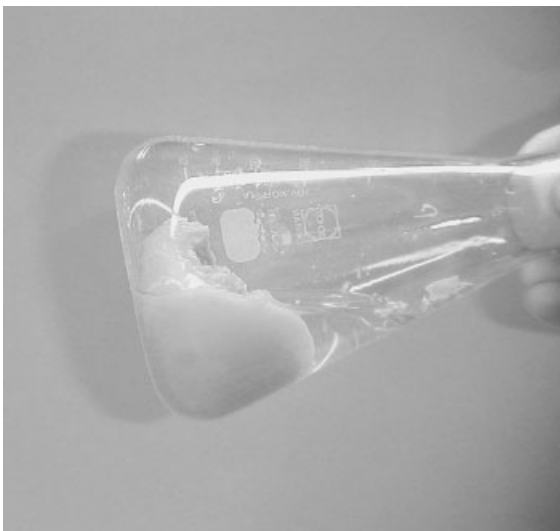
Dr. M. Siebenhofer²⁾

¹⁾ TU Graz, Institut für Thermische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik, Inffeldgasse 25, A-8010 Graz;

²⁾ VTU ENGINEERING GmbH, Parkring 18, A-8074 Grambach/Graz.

Untersucht wurde die extraktive Isolierung von Polyhydroxyalkanoaten (PHA) aus Biomasse mit Dichlormethan. Für die extraktive Isolierung aus Zellmaterial entsprechen chlorierte Lösungsmittel den Anforderungen in Bezug auf Selektivität und Löslichkeit. Als Lösungsmittel wurde Dichlormethan verwendet, das sowohl in der Lebensmittelindustrie als auch in der pharmazeutischen Industrie eingesetzt wird.

Abbildung.
Gelbildung im System Zellmaterial/DCM/NaCl-Lösung.



Abhängig vom zur Fermentation eingesetzten Bakterienstamm zeigte das System Zellmaterial/PHA/Dichlormethan eine mehr oder weniger stark ausgeprägte Gelbildungstendenz (s. Abb.). Dies führte zu mechanischen Problemen bei der Trennung der Extraktphase von der Raffinatphase. Um die Gelbildung zu unterdrücken, wurde die Wirkung verschiedener Additive untersucht. Es wurde festgestellt, dass die Ionenstärke einen Einfluss auf die Gelbildungstendenz des Systems hat. Allerdings haben verschiedene Additive derselben Ionenstärke unterschiedliche Wirkung, wobei auch der pH-Wert die Gelbildung beeinflusst.

Bei Redispergierung lyophilisierter Bakterienzellen in Natriumchlorid-Lösungen wurde massive Schaumbildung und nach Zugabe des Lösungsmittels massive Gelbildung beobachtet. Gelbildung erfolgte vor allem bei hohem pH-Wert, bei dem Säurereste am Polymermolekül dissoziiert sind. Bei niedrigem pH-Wert und hoher Ionenstärke konnte die Gelbildung vollständig verhindert werden.

L Adsorption

Chromatographie

L-01

Chirale Trennung von Phenylalanin durch selektive Komplexbildung bei der mizellaren Chromatographie

Dipl.-Ing. L. Garcia Diez*¹⁾

E-Mail: garcia@mv.uni-kl.de

Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. H.-J. Bart¹⁾

¹⁾ Lehrstuhl für Thermische Verfahrenstechnik, TU Kaiserslautern, D-67663 Kaiserslautern.

Viele biologische wichtige Substanzen sind Enantiomere, z. B. Aminosäuren, Zucker, Proteine, Vitamine, Alkaloide und Steroide. Die unterschiedliche pharmakologische Wirksamkeit der enantiomeren Moleküle macht es notwendig, sie als isolierte Enantiomere zu gewinnen. Die Flüssigchromatographie ist heute eine Methode der ersten Wahl, wenn es um eine präparative chirale Trennung geht.

Ziel ist, die mizellare Chromatographie (MLC) für die Enantiomerentrennung zu nutzen. Die Trennung soll durch ein chirales aktives Säulenmaterial für das L-Enantiomer und eine mizellare gelöste Komplexbildung für das D-Enantiomer erfolgen. Als Beispiel soll ein Aminosäuregemisch aus D-Phenylalanin und L-Phenylalanin (Phe) getrennt werden. Für diese Enantiomerentrennung werden verschiedene Selektoren in den Mizellen des nichtionischen Tensids Nonyl-phenyl-(9)-polyoxyethylen benutzt. Um den Aminosäure-Selektor-Komplex zu bilden, werden Kupferionen dazugegeben. Die Komplexbildung in der mizellaren Phase erfolgt nach Gl. (1).