

Dipl.-Ing. Andreas Chrisochoou, Winterbach

Gewinnung enantiomerenreiner Produkte mit überkritischem CO₂ durch enzymatische Racematspaltung und anschließende Hochdruckextraktion

Reihe **3**: Verfahrenstechnik

Nr. **469**

Inhaltsverzeichnis

Formelverzeichnis	IX
1 Einleitung	1
2 Enzymkatalysierte Reaktionen und überkritische Lösungsmittel	2
2.1 Enzyme und Enantiomere	2
2.2 Kinetische Racematspaltung	4
2.3 Enzymkatalysierte Reaktionen in überkritischen Lösungsmitteln	7
3 Extraktion und überkritische Lösungsmittel	11
3.1 Extraktion	11
3.2 Gegenstromverfahren und -apparate	14
3.3 Extraktion mit überkritischen Lösungsmitteln	16
3.3.1 Prinzip und Einsatzgebiete	16
3.3.2 Stand der Forschung	19
4 Integrierte Produktgewinnung mit überkritischen Lösungsmitteln	21
4.1 Kopplung von enzymkatalysierter Reaktion und Hochdruckextraktion	21
4.2 Gewinnung eines Synthesebausteins für Pyrethroid-Insektizide	23
4.2.1 Pyrethroid-Insektizide	23
4.2.2 Problemstellung	26
5 Hochdruckphasengleichgewichte	30

5.1	Bedeutung für die Prozeßentwicklung	30
5.2	Allgemeine Grundlagen	31
5.2.1	Graphische Darstellung	32
5.2.2	Alyotropes Verhalten	34
5.2.3	Voraussetzungen für die Fraktionierung	35
5.3	Modellierung und Berechnung	37
5.4	Experimentelle Untersuchungen	39
5.4.1	Bestimmung von Reinstoffdampfdrücken	39
5.4.2	Bestimmung von Hochdruckphasengleichgewichten	41
5.5	Parametrierung des Rechenmodells	45
5.5.1	Reinstoffparameter	46
5.5.2	Binäre Wechselwirkungsparameter	50
5.6	Validierung des Rechenmodells	54
5.6.1	Ternäre Untersysteme	54
5.6.2	Gesamtsystem	56
6	Entwurf der Prozeßstruktur	57
6.1	Grundstruktur	57
6.2	Auftrennung in leicht- und schwerlösliche Fraktion	59
6.3	Auftrennung in Einzelsubstanzen	60
6.3.1	Separation der Schwerlöslichen	60
6.3.2	Separation der Leichtlöslichen	61
7	Modellierung und Simulation	64
7.1	Einzelapparate	64
7.1.1	Flash-Apparat	65

7.1.2	HDE-Kolonne mit Extraktrücklauf	66
7.1.3	Enzymreaktor und Mischer	69
7.2	Gesamtanlagen	70
8	Trennverhalten von HDE-Kolonnen	72
8.1	Grundlagen	72
8.2	Theoretische Überlegungen zur optimalen Fraktionierung	76
8.2.1	Kenngößen der Trennleistung	76
8.2.2	Minimale Stufenzahl und optimale Feedstufe	78
8.2.3	Separator	79
8.2.4	Lösungsmittelstrom und Rücklaufverhältnis	81
8.3	Simulationsstudien	83
8.4	Allgemeine Auslegungssystematik	88
9	Auslegung und Simulation des Gesamtprozesses	89
9.1	Reaktion	89
9.2	Separation	90
9.2.1	Fraktionierung der Leicht- und Schwerlöslichen	90
9.2.2	Auftrennung der Fraktionen	91
9.3	Lösungsmittelabtrennung	98
9.4	Gesamtprozeß	98
10	Zusammenfassung	102
A	Anhang	104
A.1	Verwendete Substanzen	104
A.2	Komponenten der Hochdruck-Versuchsanlage	105
A.3	Gaschromatographische Analyse	105

VIII

A.4	Parameter des RKS-Modells	107
A.5	Vergleich von Meßergebnissen und RKS-Modell	108
A.6	Eingabedatei des Simulationsprogramms KOLONNE	121
A.7	Simulationsergebnisse des Gesamtprozesses	122
	Literaturverzeichnis	124