

### 3. Allgemeine theoretische Grundlagen

Die Systematisierung der Reaktivextraktionsmodelle kann erfolgen nach:

1. Reaktionsgeschwindigkeit
2. Zeitlicher Verlauf des Prozesses (stationär/instationär)
3. Zahl der Phasen, in denen die Reaktion gleichzeitig abläuft
4. Theorie des Transportmechanismus.

Als Theorie des Transportmechanismus fungieren hier folgende Modellvorstellungen:

1. Filmtheorie von Lewis, Whitman (1) und Hatta (2)
2. Oberflächenenerneuerungstheorie von Danckwerts (3)
3. Penetrationstheorie von Higbie (4)
4. Filmpenetrationstheorie von Toor, Marchello (5) und Huang, Kuo (6)
5. Starre Kugel von Newman (7) und Crank (8)
6. Laminare Zirkulation von Brunson und Weliek (9)
7. Turbulente Zirkulation von Handlos und Baron (10)
8. Oszillation von Brunson und Weliek (11)
9. Numerische Modelle; Integration des 2. Fickschen Gesetzes unter Berücksichtigung chemischer Reaktionen (diese Arbeit).

Bis auf die älteste Theorie von Lewis und Whitman behandeln alle Modelle aus formal mathematischer Sicht den gleichen Gegenstand: die Integration des 2. Fickschen Gesetzes plus Reaktionsterm für jede der beteiligten Reaktionskomponenten und bestimmten für das Modell charakteristischen Randbedingungen.

Die Modelle von Lewis/Whitman, Higbie, Toor/Marchello und Newman befassen sich nur mit dem Stofftransport ohne Reaktion. Sie sind jedoch aus Vergleichsgründen mit in die gegebene Übersicht aufgenommen worden. Bis auf das Modell von Lewis und Whitman sind sie auch für den Bereich des instationären Stoffübergangs gültig.

Die Modelle mit den Literatur Zitaten (7), (8), (9), (10), (11) sind ausschließlich für den Bereich des reaktionsgekoppelten Stoff Übergangs im Einzeltropfen gültig. Sie nehmen an, daß der Widerstand gegen den Stoffübergang in der kontinuierlichen Phase vernachlässigbar ist. Dies schließt das Vorhandensein von fluiddynamischen Grenzschichten um Einzeltropfen aus.

Die Behandlung der Reaktivextraktion erfolgt in der vorliegenden Arbeit in Hinblick auf den Reaktionsort und somit nach der Zahl und Art der Phasen, in denen der reaktionsgekoppelte Transport stattfindet. Somit wird unterschieden in Modelle, die ausschließlich für die disperse Phase gültig sind (Tropfenmodelle), Modelle, die ausschließlich den Stoff Übergang im Kontinuum an einer ebenen Grenzfläche beschreiben sowie Modelle, die beide Prozesse in Betracht ziehen und somit die größte Allgemeingültigkeit besitzen.

Der reaktionsgekoppelte Stofftransport in und an Tropfen sowie Dispersionen unterscheidet sich vom Stoffübergang einer gelösten Komponente durch die Phasengrenze zweier überschichteter nicht mischbarer flüssiger Phasen (in einer Rührzelle) darin, daß prinzipiell nur die kontinuierliche Phase eine unendliche Ausdehnung besitzen kann und die Flüssigphasengrenze gekrümmt ist. Hieraus resultieren folgende Systemeigenschaften:

- " der Tropfen besitzt eine spezielle Fluiddynamik
- " der Stoffübergang ist prinzipiell instationär und es ist im Einzelfall zu prüfen, ob quasi-stationäre Modelle den Extraktionsvorgang hinreichend genau beschreiben
- " es sind Tropfenoszillationen möglich
- " Reaktionskopplung des Stofftransports wird schon bei Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten signifikant, die um ein bis zwei Zehnerpotenzen

unterhalb entsprechender Werte für die Diffusionsgrenzschicht liegen, da die Diffusionswege im Tropfen größer sind als durch die Grenzschicht ( $M = k_r l^2 / D$ ).