

Grundpraktikum im BA-Modul Technische Chemie

Das Grundpraktikum Technische Chemie beinhaltet ein Eingangskolloquium (incl. Sicherheitsbelehrung - Zeitdauer ca. 1 Stunden), 5 Versuche (incl. Kolloquium zum jeweiligen Versuch) sowie ein Seminarvortrag (ca. 15minütig). Die Kolloquien sind in Gruppen zu zwei (in Ausnahmefällen zu drei) Studenten/innen durchzuführen. Die Versuche erfassen die Themengebiete:

- **Rektifikation,**
- **Wärmeübertragung,**
- **Thermisches Verhalten von Reaktoren,**
- **Makrokinetik (Zusammenwirken der Kinetiken des Stofftransports und der Reaktion),**
- **Verweilzeitverhalten (Strömungszustände in Reaktoren),**

Die **Rektifikation** ist die wichtigste thermische Grundoperation und dient der Trennung von Flüssigkeitsgemischen durch wiederholtes Verdampfen und Kondensieren. Bei thermischen Grundoperationen ist für die Auslegung der Trennapparate (zum Beispiel Trennkolonnen) die Kenntnis der Phasengleichgewichte (hier das Gleichgewicht zwischen der Flüssig- und der Dampfphase - VLE) als Funktion der Prozessparameter von grundlegender Bedeutung.

Die genaue Kenntnis der Mechanismen der **Wärmeübertragung** ist Voraussetzung für den sicheren Ablauf von chemischen Prozessen und die richtige Dimensionierung von Reaktoren, Wärmetauschern und Rohrleitungen. Zur dimensionslosen Beschreibung des Wärmeflusses durch Apparatewände werden in der Regel *Kriteriengleichungen* herangezogen, das heißt, dass der Wärmedurchgang mit Hilfe *dimensionsloser Kennzahlen* beschrieben wird.

Ist die chemische Reaktion mit einem Wärmeumsatz verbunden ($\Delta_R H \neq 0 \text{ J/mol}$), muss beim Entwurf des Reaktors neben der Mengenbilanz auch die Wärmebilanz erstellt werden. Im **Thermischen Verhalten von Reaktoren** werden für die idealisierten Reaktortypen (CSTR und PFR) die jeweils auftretenden Charakteristiker vorgestellt.

Die **Makrokinetik** beschreibt das Zusammenspiel der Kinetiken von chemischer Reaktion und Transportvorgängen, die sich sowohl flüssigkeitsseitig an der Phasengrenzfläche Gas/Flüssigkeit als auch in den Poren des Katalysators überlagern und beeinflussen können.

Insbesondere bei kontinuierlicher Prozessführung ist nicht nur die Verweilzeit der Reaktionsmasse im Reaktor sondern auch die durch Rückvermischung bedingte Streuung der Fluidelemente um die mittlere Verweilzeit entscheidend für den Umsatz sowie, bei komplexen Reaktionen, für die Selektivität. Im Praktikumsversuch **Verweilzeitverhalten** werden sowohl die idealisierten Reaktortypen als auch zwei Modelle zu Reaktorbeschreibung bei begrenzter Rückvermischung vorgestellt.

Zu allen Versuchen sind Skripte im Internet zu finden. Diese Skripte sind für den internen Gebrauch bestimmt und kostenfrei herunter zuladen.

Beim Eingangskolloquium zum Praktikum der Technischen Chemie werden folgende Themenbereiche besprochen:

1) Thermodynamische Behandlung

Folgende Aspekte der Thermodynamik spielen in der Technischen Chemie eine besondere Rolle:

- Berechnung von chemischen Gleichgewichten, Regeln zur Gleichgewichtslage, das heißt, Informationen über den maximal zu erwartenden Umsatz
- Gleichgewichtsberechnungen bei simultanen Reaktionen
- Umsatzberechnungen in Abhängigkeit von der Temperatur
- Beschaffung von Zahlenwerten für die Wärmebilanzen; Aussagen über die freigesetzte bzw. verbrauchte Wärmemenge bei gegebenem Umsatz

1 A) Berechnung von Phasengleichgewichten realer Systeme

Das Gleichgewicht ist erreicht, wenn neben Druck und Temperatur die Fugazitäten jeder Komponente in allen Phasen gleich sind, so dass gilt:

$$f_i^V = f_i^L \quad (1)$$

mit Dampf = V und Flüssigkeit = L

Fugazitäten sind allerdings keine messbaren Größen. Deshalb müssen zum Erfassen des realen Verhaltens (Abweichungen vom idealen Verhalten) Fugazitäts- (ϕ) bzw. Aktivitätskoeffizienten (γ) eingeführt werden. Dampf/Flüssigkeits-Gleichgewichte (VLE – vapor/liquid equilibrium) lassen sich unter Zuhilfenahme von Zustandsgleichungen für beide Phasen (Methode A) oder unter Anwendung von Fugazitätskoeffizienten für die Dampfphase sowie Aktivitätskoeffizienten und Sättigungsdampfdrücken für die flüssige Phase (Methode B) beschreiben.

Bei der Methode A werden zur Darstellung des realen Verhaltens sowohl für die dampfförmige als auch für die flüssige Phase Fugazitätskoeffizienten ϕ_i^V und ϕ_i^L benötigt. Diese sind definiert als:

$$\phi_i^V = \frac{f_i^V}{y_i \cdot P} \quad \phi_i^L = \frac{f_i^L}{x_i \cdot P} \quad (2, 3)$$

Somit lässt sich das Phasengleichgewicht formulieren als:

$$y_i \cdot \phi_i^V = x_i \cdot \phi_i^L \quad (4)$$

Die Anwendung der Methode A bedingt, dass die Fugazitätskoeffizienten für beide Phasen erreichbar sind. Dieses gelingt mit Hilfe von Zustandsgleichungen. Im Allgemeinen werden für die Berechnung von Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichten Weiterentwicklungen der van der Waals-Gleichung herangezogen. Erwähnt seien hier die Redlich-Kwong-Gleichung, die Soave-Redlich-Kwong-Gleichung (SRK) und die Peng-Robinson-Gleichung.

Ausgangspunkt für die Berechnung der Fugazität ist die Fundamentalgleichung der Thermodynamik, wobei der Realanteil der molaren Gibbsschen Enthalpie der Komponente i mit Hilfe des Fugazitätskoeffizienten erfasst wird:

$$(g_i - g_i^{ideal}) = R \cdot T \cdot \ln \phi_i = \int_{\infty}^V \left(\left(\frac{\partial P}{\partial n_i} \right)_{T, V, n_j} - \frac{RT}{V} \right) dV - \ln z \quad (5)$$

z ist dabei der Kompressibilitätsfaktor.

Bei der Methode B wird die Fugazität der Komponente i in der Dampfphase mit Hilfe des Fugazitätskoeffizienten ($f_i^V = y_i \cdot \varphi_i^V \cdot P$) und in der flüssigen Phase unter Anwendung des Aktivitätskoeffizienten γ_i ausgedrückt. Wird der Fugazitätskoeffizient lediglich zur Beschreibung des realen Verhaltens in der Dampfphase benutzt, so wird die Virialgleichung herangezogen. Im Gegensatz zum Fugazitätskoeffizienten wird bei Verwendung des Aktivitätskoeffizienten die Fugazität auf eine „Standardfugazität“ bezogen. Die Standardfugazität f_i^0 stellt einen Bezugswert für die Fugazität dar und ist frei wählbar. Sie sollte allerdings so gewählt werden, dass die Werte für die Fugazitätskoeffizienten möglichst wenig vom Wert 1 abweichen. Bei der destillativen Trennung eines Flüssigkeitsgemisches sollte als Standardfugazität die Fugazität der reinen Flüssigkeit i bei Systemtemperatur und Systemdruck gewählt werden.

$$\frac{f_i}{f_i^0} = a_i = \gamma_i \cdot x_i \quad (6)$$

a_i ist die Aktivität und γ_i der Aktivitätskoeffizient der Komponente i . Unter Berücksichtigung dessen, dass das chemische Potential μ_i gleich der partiellen molaren Gibbsschen Enthalpie \bar{g}_i ist, errechnet sich:

$$\begin{aligned} \Delta \bar{g}_i &= R \cdot T \cdot \ln x_i + R \cdot T \cdot \ln \gamma_i \\ &= \underbrace{\Delta \bar{g}_i}_{\text{ideales Verhalten}} + \underbrace{g}_{\text{Exzessanteil}} \end{aligned} \quad (7)$$

Der Exzessanteil erfasst die Abweichung der partiellen molaren Gibbsschen Enthalpie der Komponente i vom idealen Verhalten. Die Gibbssche Exzessenthalpie der gesamten Mischung errechnet sich durch Summierung der Einzelbeträge:

$$g^E = \sum \left(x_i \cdot \bar{g}_i^E \right) = R \cdot T \cdot \sum (x_i \cdot \ln \gamma_i) \quad (8)$$

Die Berechnung der \bar{g}_i^E -Werte gelingt mit Hilfe von \bar{g}^E -Modellen, von denen die *van Laar*- und die *Margules*-Gleichungen für binäre und die *Wilsen*-, *NRTL*- und *UNIQUAC*-Gleichungen für Multikomponenten-Systeme anwendbar sind. Alle Modelle benötigen binäre Informationen, das heißt, Phasengleichgewichtsdaten von Zweikomponenten-Systemen. Die Möglichkeit, mit derartigen Informationen Multikomponenten-Systeme zu beschreiben, ist von großer Bedeutung, da nahezu keine Messdaten über das reale Verhalten von Multikomponenten-Systemen veröffentlicht wurden. Eine Auflistung der bisher publizierten Messdaten sowie die für die Anwendung der einzelnen \bar{g}^E -Modelle notwendige Daten sind in der DECHEMA-Chemistry Data Series sowie in der Dortmunder Datenbank zu finden. Wurden keine Daten experimentell bestimmt, können die fehlenden Informationen mit Hilfe von Gruppenbeitragsmethoden entwickelt werden (z. B.: UNIFAC „Vapor-Liquid Equilibria Using UNIFAC“ Fredenslund, Gmehling, Rasmussen. Elsevier – 1977).

Die Isofugazitätsbeziehung (Gl. 1) ergibt nach Methode B:

$$x_i \cdot \gamma_i \cdot f_i^0 = y_i \cdot \varphi_i^V \cdot P \quad (9)$$

Als Standardfugazität wird die Fugazität der reinen Flüssigkeit i bei Systemdruck verwendet. Diese berechnet sich aus dem Fugazitätskoeffizienten der Komponente i beim Sättigungsdampfdruck (φ_i^s), dem Sättigungsdampfdruck (P_i^s) und dem Poynting-Faktor (Poy_i)

$$x_i \cdot \gamma_i \cdot \varphi_i^s \cdot P_i^s \cdot Poy_i = y_i \cdot \varphi_i^V \cdot P \quad (10)$$

Der Poynting-Faktor erfasst den Einfluss der Kompression bzw. der Expansion der Flüssigkeit beim Übergang vom Sättigungsdampfdruck auf den als Standardfugazität gewählten Systemdruck. Im Allgemeinen sind $P_{\text{oy}} \approx 1$ und $\varphi_i^s \approx \varphi_i^V$ (Ausnahme: stark assoziierende Verbindungen wie Carbonsäuren), so dass gilt:

$$x_i \cdot \gamma_i \cdot P_i^s = y_i \cdot P \quad (11)$$

Die Methode B hat gegenüber der Methode A den Vorteil, dass mit Hilfe einfacher Modelle (Modelle, die nur wenige Parameter enthalten) eine zuverlässige Beschreibung des Phasengleichgewichts möglich ist. Sie ist auch auf Elektrolyte und Polymersysteme anwendbar, versagt allerdings in der Nähe des kritischen Punktes.

Zur Auslegung eines Trennprozesses ist die Kenntnis des K -Faktors jeder Komponente als $f(T, P, x_i)$ erforderlich.

$$K_i = y_i / x_i = \frac{\gamma_i \cdot P_i^s}{P} \quad (12)$$

Das Verhältnis der K -Faktoren verschiedener Komponenten (i und j) wird als Trennfaktor (α_{ij}) bezeichnet. Dieser ist ein Maß für die zu erzielende Trennung zwischen den Komponenten i und j :

$$\alpha_{ij} = K_i / K_j = \frac{\gamma_i \cdot P_i^s}{\gamma_j \cdot P_j^s} \quad (13)$$

1B) Grundlagen zur Berechnung des Reaktionsgleichgewichts Gleichgewichtslage und Umsatz

Gibbs führte als Kriterium für die Spontanität einer Reaktion die Zustandsgröße freie Enthalpie (G) ein und definierte

$$G = H - TS \quad (14)$$

Die Änderung der Gibbschen Enthalpie G ist für jede spontan ablaufende chemische Reaktion negativ ($\Delta G_R < 0$)_{T,P}. Bei reversiblen Reaktionen kann ΔG_R auch als Maß für das chemische Gleichgewicht verwendet werden. In der „Ruhelage“ ist $\Delta G_R = 0$, das heißt, die Gibbsche Enthalpie besitzt ein Minimum.

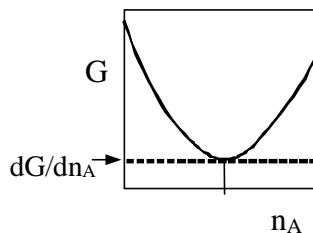


Abb.1: Gibbsche Enthalpie als Funktion der Zusammensetzung
Aus den Fundamentalgleichungen der Thermodynamik ist abzuleiten:

$$dG = -S \cdot dT + V \cdot dP + \sum \mu_i \cdot dn_i \quad (15)$$

dG_R ist im Reaktionsgleichgewicht gleich Null, so dass bei konstantem Druck und konstanter Temperatur gilt:

$$dG_R = \sum \mu_i \cdot dn_i = 0 \quad (16)$$

μ_i ist das chemische Potential der Komponente i , das sich über das chemische Potential der Standardzustände und die Fugazitäten beschreiben lässt:

$$\mu_i = \mu_i^0 + RT \ln \frac{f_i}{f_i^0} \quad (17)$$

$$\sum \mu_i^0 dn_i + RT \sum \ln \frac{f_i}{f_i^0} dn_i = 0 \quad (18)$$

bzw. unter Berücksichtigung der Stöchiometriefaktoren:

$$\sum \nu_i \mu_i^0 = -RT \sum \ln \left(\frac{f_i}{f_i^0} \right)^{\nu_i} \quad (19)$$

Das chemische Potential im Standardzustand ist identisch mit der molaren *Gibbsschen* Bildungsenthalpie $\Delta g_{B,i}^0$. Der Term auf der linken Seite der Gleichung 19 entspricht der *Gibbsschen* Standardreaktionsenthalpie und der Term auf der rechten Seite der Gleichgewichtskonstanten K . Die Gleichgewichtskonstante K lässt sich damit direkt aus den Standardbildungsenthalpien berechnen. Es gilt:

$$\Delta g_R^0 = \sum \nu_i \Delta g_{B,i}^0 = -RT \sum \ln \left(\frac{f_i}{f_i^0} \right)^{\nu_i} = -RT \ln K \quad (20)$$

Mit den tabellierten *Gibbsschen* Standardenthalpien lässt sich nach Gleichung 20 direkt der Wert der Gleichgewichtskonstanten bei 25 °C ermitteln. In den meisten Fällen wird aber nicht die Gleichgewichtskonstante bei 25 °C, sondern bei einer anderen Temperatur benötigt. Unter Berücksichtigung der Definition der molaren *Gibbsschen* freien Enthalpie ergibt sich:

$$R \ln K = -\frac{\Delta g_R^0}{T} = -\frac{\Delta h_R^0}{T} + \Delta s_R \quad (21)$$

Die Berechnung der Gleichgewichtskonstanten bei einer anderen Temperatur kann mit Hilfe der *van't Hoff-Gleichung*[#] durchgeführt werden.

$$\frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta h_R^0}{RT^2} \quad (22)$$

An der *van't Hoff-Gleichung* ist zu erkennen, dass

- zur Berechnung der Temperaturabhängigkeit des Umsatzes lediglich die Standardreaktionsenthalpie benötigt wird, die wiederum aus tabellierten Standardbildungsenthalpien ermittelt werden kann.
- die Gleichgewichtskonstante im Falle exothermer Reaktionen mit steigender Temperatur kleinere Werte annimmt. Dies bedeutet, dass der thermodynamisch erreichbare Umsatz mit steigender Temperatur sinkt.

Für den Fall, dass die Standardreaktionsenthalpie im betrachteten Temperaturbereich konstant ist, kann sofort integriert werden.

$$\ln K = \ln K_{T_0} - \frac{\Delta h_R^0}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \quad (23)$$

[#] Die Ableitung der Gleichung 21 nach T ist trivial für den Fall, dass Δh_R und Δs_R im betrachteten Temperaturbereich temperaturunabhängig sind. In der Regel ist dem nicht so. Dennoch ist die *van't Hoff-Gleichung* exakt, da entlang der Coexistenzkurve (Gleichgewichtskurve) nicht nur $dg = 0$ gilt, sondern auch:

$$\frac{dg}{dT} = 0 = \frac{d \Delta h}{dT} - \frac{d \Delta s}{dT}$$

Ist die Standardreaktionsenthalpie nicht konstant, so kann die Temperaturabhängigkeit bei Kenntnis der molaren Wärmekapazität $c_P = f(T)$ beschrieben werden (*Kirchhoffscher Satz*).

$$\Delta h_{R(T)} = \Delta h_{R(T_0)} + \int_{T_0}^T \sum v_i c_P dT \quad (24)$$

Zur Integration der Gleichung (24) benötigt man die Molwärmen der an der Reaktion beteiligten Stoffe als Funktion der Temperatur.

$$c_{P_i} = a_i + b_i T + c_i T^2 + d_i T^3 + \dots \quad (25)$$

a_i, \dots, d_i sind in Tabellenwerken enthalten [z. B. in „The Properties of Gases and Liquids“ (R. C. Reid, J. M. Prausnitz, B. E. Poling, McGraw-Hill New York, 1986) bzw. in einschlägigen Datenbanken (mit dem Rechner abrufbar)].

$$\sum v_i c_{P_i} = A + BT + CT^2 + DT^3 \quad (26)$$

mit

$$A = \sum v_i a_i; \quad B = \sum v_i b_i; \quad C = \sum v_i c_i; \quad D = \sum v_i d_i$$

Mit Hilfe dieser Gleichungen und der Kenntnis tabellierter Zahlenwerte kann die Temperaturabhängigkeit der Gleichgewichtskonstanten beschrieben werden.

Temperaturabhängigkeit des Umsatzes

Der Umsatz bezieht sich immer auf die Schlüsselkomponente, das heißt, den Ausgangsstoff, der (unter Einbeziehung der Stöchiometrie der Reaktion und unter Berücksichtigung möglicher Parallelreaktionen) am Reaktoreingang im Unterschuss vorliegt, und ist folgendermaßen definiert:

$$X = \frac{\dot{n}_{A0} - \dot{n}_A}{\dot{n}_{A0}} \quad (27)$$

Unter Berücksichtigung der Stöchiometrie, also mit

$$\dot{n}_i = \dot{n}_{i0} + v_i \cdot \frac{\dot{n}_{A0} X}{|v_A|} \quad (28)$$

ergibt sich:

$$x_i(X) = \frac{\dot{n}_i}{\sum_i \dot{n}_i} = \frac{x_{i0} + \frac{v_i}{|v_A|} x_{A0} X}{1 + \frac{\sum_i v_i}{|v_A|} x_{A0} X} \quad (29)$$

Bei Einführung des MWG:

$$\ln K_x = \sum v_i \ln x_i \quad (30)$$

bzw. für die Gasphasenreaktionen (mit P = Gesamtdruck)

$$\ln K_P = \sum (v_i \cdot \ln x_i) + (\sum v_i) \cdot \ln P \quad (31)$$

↷

$$\ln K_P = f(x_{i0}, X) = \sum \left(v_i \ln \frac{x_{i0} + \frac{v_i}{|v_A|} x_{A0} X}{1 + \frac{v_i}{|v_A|} x_{A0} X} \right) + (\sum v_i) \cdot \ln P \quad (32)$$

Die Berechnung der Temperaturabhängigkeit des Umsatzes im Gleichgewicht $X = f(T)_p$ erfolgt über die Gleichgewichtskonstante mit $K_p = f(T)_p$ sowie $K_p = f(X)$. Da i.allg. die Gleichungen nicht nach T oder X auflösbar sind, muss die Ermittlung von $X = f(T)$ nach dem graphischen Verfahren oder numerisch (Iterationsverfahren auf dem Rechner) erfolgen. In der Praxis ist ferner zu beachten, dass bei nicht idealem Verhalten die Fugazitätskoeffizienten eingeführt werden und diese Funktionen von P und T sind. Die Abhängigkeit des Umsatzes von der Temperatur sowohl für exotherme als auch für endotherme Reaktionen ($X = f(T)$) sind in Abb. 2 a und b graphisch dargestellt.

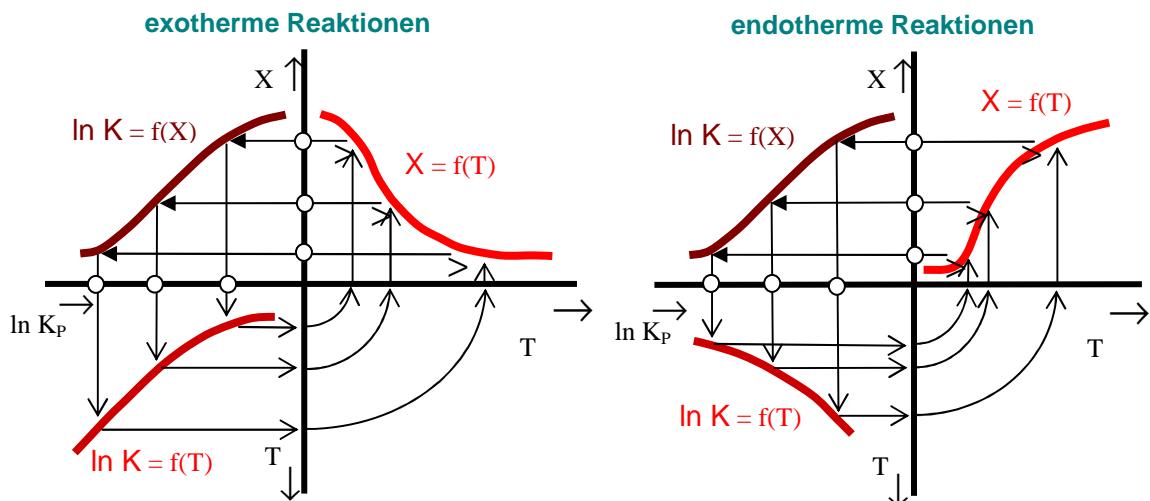


Abb. 2a: Graphisches Verfahren zur Ermittlung der Temperaturabhängigkeit des Gleichgewichtsumsatzes ($X_{\text{Reaktionsgleichgewicht}} = f(T)$)

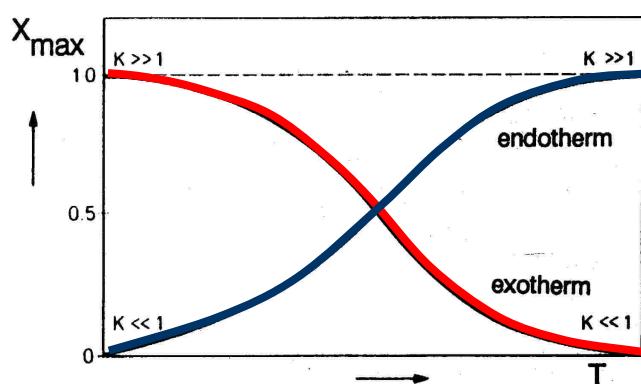


Abb. 2b: Einfluss der Temperatur auf den Gleichgewichtumsatz

$aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$

a) Standardreaktionsenthalpie

$$\Delta h_R^\circ = \sum \nu_i \Delta h_{B,i}^\circ$$

Kirchhoff:

$$\Delta h_{R,T}^\circ = \Delta h_{R,T_0}^\circ + \int_{T_0}^T \sum \nu_i c_p i dT \quad \xrightarrow{\text{a} + bT + cT^2}$$

b) Chemisches Gleichgewicht

$G^\ddagger = \text{Minimum}$

$$-RT \ln K = \Delta g_R^\circ = \sum \nu_i \Delta g_{Bi}^\circ$$

$$K = \frac{(f_C/f_C^\circ)^c}{(f_A/f_A^\circ)^a} \frac{(f_D/f_D^\circ)^d}{(f_B/f_B^\circ)^b} = f(T)$$

van't Hoff :

$$\frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta h_R^\circ}{RT^2}$$

(f_i° = Standardzustand für Δg_{Bi}°)

Schema 1: Zusammenfassung wichtiger Gleichungen zur Berechnung der Reaktionsenthalpie und des Gleichgewichtsumsatzes

2) Definitionen zur Reaktionskinetik und Struktur kinetischer Gesetze

Unter der **Reaktionsgeschwindigkeit** versteht man die zeitliche Änderung der Molzahl der betrachteten Komponente A [#] bezogen auf einen den Reaktionsort charakterisierenden Parameter $\xi(X_i)$:

$$r_A = \frac{1}{\xi} \cdot \frac{dn_A}{dt} \quad (33)$$

In homogenen (einphasigen) Systemen ist der Reaktionsort das Volumen der Phase, so dass gilt:

$$r_A = \frac{1}{V} \cdot \frac{dn_A}{dt} = \frac{dc_A}{dt} \quad (34)$$

In heterogenen Systemen ist es üblich, die zeitliche Änderung der Stoffmenge auf Größen wie Phasengrenzfläche, Katalysatormasse, Katalysatorvolumen, Katalysatoroberfläche, Wandfläche etc. zu beziehen.

Beachte: Heterogene Systeme sind in der Praxis häufig anzutreffen. Es ist deshalb besonders darauf zu achten, wie r_A definiert ist und was ξ darstellt. Oft unterscheiden sich Literaturwerte für r_A nur deshalb, weil unterschiedliche Größen für ξ gewählt wurden.

[#] I. allg. ist r_A auf die Schlüsselkomponente A (der unter Berücksichtigung der Stöchiometrie im Unterschuss vorliegende Ausgangsstoff) bezogen und daher stets negativ.

Die Reaktionsgeschwindigkeit ist von zahlreichen Parametern abhängig. Stark vereinfachend - aber für technische Zwecke oft ausreichend - lässt sich r_A durch folgenden Ansatz darstellen:

$$r_A = \Phi(n_i) \Psi(T, \text{Katalysator}, \epsilon, \eta, \dots)$$

Dabei stellt $\Phi(n_i)$ bzw. $\Phi(c_i)$, $\Phi(p_i)$ eine von den Stoffmengen (Konzentrationen, Aktivitäten, Partialdrücken) abhängige Funktion dar und wird äußerer Mechanismus genannt. Die Funktion $\Psi(T, \text{Kat.}, \dots)$ wird als innerer Mechanismus bezeichnet. Es ist üblich, dass diese Funktion zur Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten k_r zusammengefasst wird. Man beachte aber stets, dass $k_r = k(T, \text{Umgebung})$ ist.

Weitere wichtige Begriffe in der Reaktionskinetik sind der **Umsatz**, die **Ausbeute** und die **Selektivität**. Der **Umsatz** (entsprechend der Kinetik^{##}) ist die in bestimmter Zeit umgesetzte Stoffmenge an Edukt j bezogen auf die eingesetzte Menge dieser Komponente:

$$X = \frac{n_{j0} - n_j}{n_{j0}} \quad (35)$$

In der Regel wird für die Formulierung des Umsatzes die Schlüsselkomponente (stöchiometrische Unterschusskomponente = $n_{j0} / |\nu_j| \Rightarrow \text{Minimum}$) verwendet. Bei abweichendem Vorgehen wird durch Verwendung eines Indexes angegeben, auf welche Komponente sich der Umsatz bezieht.

Die Begriffe Ausbeute und Selektivität werden unter Einbeziehung der Stöchiometrie definiert. Die **Ausbeute** ist die gebildete Stoffmenge an Produkt i bezogen auf die eingesetzte Menge (Edukt) an Schlüsselkomponente k :

$$Y_{ik} = \frac{n_i - n_{i0}}{n_{k0}} \cdot \frac{|\nu_k|}{\nu_i} \quad (36)$$

Die **Selektivität** ist die gebildete Stoffmenge an Produkt i bezogen auf die umgesetzte Stoffmenge an Schlüsselkomponente k :

$$S_{ik} = \frac{Y_{ik}}{X} = \frac{n_i - n_{i0}}{n_{k0} - n_k} \cdot \frac{|\nu_k|}{\nu_i} \quad (37)$$

Weitere, mehr in der industriellen Praxis verwendete Begriffe sind:

- Die **Raum-Zeit-Ausbeute** (bzw. Reaktorkapazität) ≡ Massenstrom an Schlüsselkomponente dividiert durch das Reaktorvolumen:

$$RZA = \frac{\dot{m}_k}{V_R} \quad (38)$$

oft wird für das Reaktorvolumen die eingesetzte Katalysatormasse verwendet, so dass auch hierbei auf die verwendete Einheit zu achten ist!

- Die **Reaktorbelastung** (auch als Raumgeschwindigkeit oder Space Velocity bezeichnet) ≡ in den Reaktor eingeleiteter Volumenstrom bezogen auf das Reaktorvolumen:

$$SV = \frac{\dot{V}_0}{V_R} \quad (39)$$

^{##} Bei reversiblen Reaktionen wird die Lage des Reaktionsgleichgewichts durch die Thermodynamik bestimmt (siehe unten)