

Dipl.-Ing. Günther Laufenberg, Köln

**Selektivität und
Stofftransport bei der
Reversosmose
organisch-wäßriger
Mehrkomponentensysteme**

Reihe **3**: Verfahrenstechnik

Nr. **490**

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	1
2 Theoretische Grundlagen	8
2.1 EINFÜHRUNG	8
2.2 THEORIE DER REVERSOSMOSE	11
2.3 REVERSOSMOSE BEI DER AUFBEREITUNG ORGANISCH-WÄßRIGER SYSTEME	14
2.3.1 <i>Industrielle Anwendung</i>	14
2.3.2 <i>Forschung und Entwicklung</i>	17
2.4 MODELLIERUNG DES STOFFTRANSPORTES FÜR MEMBRANEN	20
2.4.1 <i>Einführung</i>	20
2.4.2 <i>Porenmodell</i>	22
2.4.3 <i>Lösungs-Diffusions-Modell</i>	23
2.4.4 <i>Preferential Sorption Modell</i>	25
2.5 TRANSPORTWIDERSTÄNDE	26
2.6 PROZESSBEEINFLUSSENDE PARAMETER	28
2.7 ZIEL DER ARBEIT	29
2.8 VERSUCHSPRINZIP	31
2.8.1 <i>Untersuchungen mit Wirkstoffsystematik</i>	31
2.8.1.1 <i>Untersuchungen mit organischen Säuren</i>	31
2.8.1.2 <i>Untersuchungen mit Aldehyden und Ketonen</i>	32
2.8.1.3 <i>Untersuchungen mit Alkoholen</i>	33
2.8.2 <i>Untersuchungen zur Zielsubstanzspezifität</i>	33
2.8.3 <i>Untersuchungen zur Konzentrationsabhängigkeit</i>	35
2.8.4 <i>Berechnungen zum realen osmotischen Druck</i>	35
3 Experimenteller Teil	36
3.1 MATERIAL	36
3.1.1 <i>Geräte</i>	36
3.1.1.1 <i>Reversosmoseanlage</i>	36
3.1.1.2 <i>Analysengeräte</i>	38
3.1.1.3 <i>Weitere Geräte</i>	38
3.1.2 <i>Chemikalien und enzymatische Analytik</i>	39
3.1.2.1 <i>Chemikalien</i>	39
3.1.2.2 <i>Enzymatische Analytik</i>	40
3.2 METHODEN	40
3.2.1 <i>Versuchsordnung</i>	41
3.2.1.1 <i>Herstellung von Modellösungen</i>	41

3.2.1.2	Betrieb und Standardeinstellungen der Reversosmoseanlage	45
3.2.1.3	Reinigung der Reversosmoseanlage	46
3.2.2	<i>Quantitative Analyse mit Hilfe der Hochleistungsflüssigkeitchromatographie (HPLC) ...</i>	47
3.2.2.1	Prinzip der HPLC-Analytik	47
3.2.2.2	Geräteeinstellungen	47
3.2.2.3	Zwei-Punkt-Kalibriergeraden-Methode mittels externem Standard	48
3.2.2.4	Probenvorbereitung und Messung	48
3.2.3	<i>Quantitative Analytik mit Hilfe der Gaschromatographie (GC)</i>	49
3.2.3.1	Prinzip der GC-Analytik	49
3.2.3.2	Geräteeinstellung und Messung	50
3.2.4	<i>Quantitative enzymatische Analyse</i>	50
3.2.5	<i>Statistische Auswertung der Meßergebnisse</i>	50
3.2.5.1	Rückhalt und Median	50
3.2.5.2	U-Test von Wilcoxon, Mann und Whitney	51
3.2.5.3	Bestimmtheitsmaß R^2	52
3.2.5.4	Pearson'scher Korrelationskoeffizient r	53
3.2.6	<i>Berechnung des realen osmotischen Druckes mit Hilfe von „modified UNIFAX“</i>	53
3.3	ERGEBNISSE	54
3.3.1	<i>Betriebsbedingungen</i>	55
3.3.2	<i>Binäre Modellösungen</i>	57
3.3.2.1	MWCO von organischen Substanzen	57
3.3.2.2	Rückhalte von Säuren, Alkoholen, Aldehyden, Ketonen	57
3.3.2.3	pH-Werte der Einzelkomponenten	61
3.3.2.4	Rückhalt der Zielsubstanz in Abhängigkeit von der Konzentration	64
3.3.3	<i>Ternäre Modellösungen</i>	66
3.3.3.1	Zielsubstanz Essigsäure 1:1	66
3.3.3.2	Signifikanzen	72
3.3.3.3	Zielsubstanz Essigsäure 1:2	77
3.3.3.4	Zielsubstanzvariation	78
3.3.4	<i>Quartäre Modellösungen</i>	83
3.3.4.1	Zielsubstanz Essigsäure 1:0.5:0.5, Wirksubstanzen Carbonsäuren	83
3.3.4.2	Zielsubstanz Essigsäure 1:1:1, Wirksubstanzen Säuren, Alkohole, Aldehyde, Ketone	84
3.3.4.3	Zielsubstanzvariation mit Wirksubstanzen Säuren	89
4	Diskussion	92
4.1	VORBEMERKUNGEN	92
4.1.1	<i>Einführung</i>	92
4.1.2	<i>Signifikanzanalyse und Datenkompression</i>	92

4.1.3 MWCO und Tromp'sche Fraktionsabscheidkurve	93
4.1.4 Interaktion der Komponenten in einer Multikomponentenlösung	94
4.2 KONZENTRATIONSABHÄNGIGKEIT	95
4.3 SÄURESTÄRKE	97
4.3.1 Vorbemerkungen.....	97
4.3.2 pK_S versus Rückhalt.....	97
4.4 WASSERSTOFFBRÜCKENBINDUNGSFÄHIGKEIT	98
4.5 PH-WERT.....	99
4.6 FUNKTIONALITÄT	100
4.6.1 Vorbemerkungen.....	100
4.6.2 Carboxylgruppe.....	101
4.6.3 Carbonylgruppe.....	103
4.6.4 Hydroxylgruppe.....	104
4.7 MOLEKULARE MASSE	106
4.8 RÄUMLICHER ANSPRUCH	109
4.8.1 Vorüberlegungen.....	109
4.8.2 Verzweigung.....	111
4.8.3 Stellung der funktionellen Gruppe	113
4.8.4 Cyclische Systeme.....	114
4.8.4.1 Aromatische Systeme	114
4.8.4.2 Alicyclische Systeme	116
4.8.5 Doppelbindung.....	118
4.9 ZIELSUBSTANZSPEZIFITÄT	120
4.9.1 Vorüberlegungen.....	120
4.9.2 Monocarbonsäuren mit steigender Masse	120
4.9.2.1 Ameisensäure.....	120
4.9.2.2 Essigsäure.....	121
4.9.2.3 Propionsäure.....	122
4.9.3 Hydroxycarbonsäure: Glycolsäure	123
4.9.4 Carbonsäure mit Doppelbindung: Acrylsäure.....	123
4.9.5 Methoxyessigsäure.....	124
4.9.6 Schlußfolgerungen.....	125
4.10 ALGORITHMUS ZUM STOFFTRANSPORT	126
4.11 QUARTÄRE LÖSUNGEN UND KOMBINATION DER EINFLUSSPARAMETER	130
4.11.1 Vorüberlegungen.....	130
4.11.2 Kategorie der Effekte.....	130
4.11.2.1 Definitionen	130
4.11.2.2 Zielsubstanz Essigsäure mit Wirksubstanzen Carbonsäuren.....	130
4.11.2.3 Zielsubstanzvariation mit Wirksubstanzen Carbonsäuren	132

4.11.2.4 Zielsubstanz Essigsäure mit Wirksubstanzen Aldehyden und Ketonen.....	134
4.11.2.5 Zielsubstanz Essigsäure mit Wirksubstanzen Alkoholen.....	136
4.11.2.6 Schlußfolgerungen	137
<i>4.11.3 Verhältnis der Konzentration zur beeinflussenden Wirkung</i>	<i>139</i>
<i>4.11.4 Richtung der beeinflussenden Wirkung</i>	<i>141</i>
<i>4.11.5 Verschiedenheit der beeinflussenden Parameter</i>	<i>143</i>
4.12 OSMOTISCHER DRUCK MIT UNIFAX	144
4.13 INTERPRETATION DER MECHANISMEN	147
<i>4.13.1 Vorüberlegungen</i>	<i>147</i>
<i>4.13.2 Theorie der Grenzschicht-Kanäle</i>	<i>148</i>
4.14 AUSBLICK.....	150
5 Thesen.....	152
6 Anhang	155
6.1 DEFINITIONEN.....	155
6.2 NOMENKLATUR.....	157
6.3 STRUKTURFORMELN.....	159
6.4 RELATIVE BEEINFLUSSUNGEN DER RETENTION ΔR IN QUARTÄREN LÖSUNGEN.....	164
7 Literaturverzeichnis.....	167
8 Bibliographie.....	175