

MEMBRANTECHNIK

Engineering, Auslegung und Optimierung von Membranprozessen für Industrie und Forschung.

Massentransport

1 Massentransport (*mass transfer*)

Massentransport bezeichnet den Transport von Stoffen in einem Mehrkomponentensystem infolge treibender Kräfte wie Konzentrationsgradienten, Druckunterschieden oder Strömungsvorgängen. Er beschreibt die relative Bewegung einzelner Komponenten eines Gemisches gegenüber anderen Komponenten und wird in der Regel durch Diffusion, Konvektion oder eine Überlagerung beider Mechanismen verursacht.

Das Verständnis des Massentransports ist grundlegend für die Beschreibung druckgetriebener Membranprozesse.

Viele Phänomene der Membrantechnologie lassen sich als spezielle Formen des Stofftransports in fluiden Systemen interpretieren.

Bei den transportierten Stoffen handelt es sich typischerweise um Moleküle, Ionen oder andere gelöste Komponenten.

In druckgetriebenen Membranprozessen wirkt zusätzlich ein Druckunterschied als antreibende Kraft. Der angelegte Druck setzt das Fluid in Bewegung und zwingt es durch die Membran. Dadurch wird die Trennung von Komponenten möglich, da einzelne Stoffe die Membran unterschiedlich gut passieren können.

Die Membrantrennung kann daher als relative Bewegung einer oder mehrerer Komponenten des Ausgangsgemisches durch eine Membran verstanden werden, während der Durchtritt anderer Komponenten eingeschränkt oder vollständig verhindert wird. Welche Stoffe die Membran passieren und welche zurückgehalten werden, hängt sowohl von den Eigenschaften der Stoffe, etwa Molekülgrösse, Ladung oder Löslichkeit, als auch von den Eigenschaften der

Membran, dem Milieu des Mediums, den Zustandsgrössen und den Strömungsbedingungen ab.

1.1 Konzentrationsgrössen

Zur Beschreibung der Zusammensetzung eines Gemisches oder einer Lösung werden vor allem die Stoffmengenkonzentration und die Massenkonzentration verwendet. Beide Grössen geben an, wie viel einer bestimmten Komponente in einem gegebenen Volumen enthalten ist, unterscheiden sich jedoch in ihrer physikalischen Bedeutung.

1.1.1 Stoffmengenkonzentration

Die Stoffmengenkonzentration einer Komponente i ist definiert als Stoffmenge pro Volumen:

$$c_i = \frac{n_i}{V} \quad (1)$$

Dabei ist n_i die Stoffmenge der Komponente i und V das Gesamtvolumen der Lösung oder des Gemisches.

1.1.2 Massenkonzentration

Die Massenkonzentration einer Komponente i ist definiert als die Masse dieser Komponente pro Volumen des Gemisches beziehungsweise der Lösung:

$$c_i^{(m)} = \frac{m_i}{V} \quad (2)$$

Dabei bezeichnet m_i die Masse der Komponente i und V das Gesamtvolumen des Gemisches beziehungsweise der Lösung.

Beide Konzentrationsgrössen lassen sich über die molare Masse M_i miteinander verknüpfen. Aus

$$m_i = n_i M_i \quad (3)$$

folgt unmittelbar

$$c_i^{(m)} = M_i c_i \quad (4)$$

Die Summe aller Massenkonzentrationen ergibt die Massendichte des Gemisches:

$$\sum_i c_i^{(m)} = \rho \quad (5)$$

Ein einfaches Beispiel ist eine wässrige Natriumchloridlösung. Befinden sich 10 g Natriumchlorid mit der molaren Masse 58.44 g mol^{-1} in einem Liter Lösung, so ergibt sich für die Stoffmenge:

$$n = \frac{10 \text{ g}}{58.44 \text{ g mol}^{-1}} \approx 0.171 \text{ mol} \quad (6)$$

Daraus folgen die Stoffmengenkonzentration

$$c = 0.171 \text{ mol L}^{-1} \quad (7)$$

und die Massenkonzentration

$$c^{(m)} = 10 \text{ g L}^{-1} \quad (8)$$

2 Bezug zu Membranprozessen

In Membranprozessen spielen Konzentrationsgrößen eine zentrale Rolle, da sie direkt mit dem Stofftransport durch die Membran verknüpft sind. Konzentrationen beschreiben den lokalen Zustand eines Gemisches und bilden damit die Grundlage für die Analyse von Transportvorgängen.

Dabei ist eine wichtige Unterscheidung zu beachten: In vielen Transportprozessen wird ein Konzentrationsunterschied als treibende Kraft für den Stofftransport interpretiert. Dies trifft insbesondere auf diffusionsgetriebene Systeme zu. In druckgetriebenen Membranprozessen liegt die Situation jedoch anders.

Hier stellt der angelegte Druckunterschied die primäre treibende Kraft dar. Er setzt das Fluid in Bewegung und zwingt es durch die Membran. Aufgrund der selektiven Durchlässigkeit der Membran werden einzelne Komponenten unterschiedlich stark zurückgehalten oder durchgelassen.

Der Konzentrationsunterschied zwischen Feed- und Permeatseite ist somit nicht die Ursache des Transports, sondern eine Folge des durch den Druckunterschied erzwungenen Stofftransports. Da die einzelnen Komponenten die Membran unterschiedlich

gut passieren können, kommt es zu einer Trennung und damit zur Ausbildung unterschiedlicher Konzentrationen auf beiden Seiten der Membran. Der Stofftransport wird somit durch den Druckunterschied angetrieben, während der resultierende Konzentrationsunterschied eine Folge der selektiven Durchlässigkeit der Membran ist.

Während das Lösungsmittel die Membran oft gleichsweise leicht passieren kann, wird der Transport gelöster Komponenten durch die Eigenschaften der Membran begrenzt. Dadurch entstehen unterschiedliche Konzentrationen auf der Feed-, Retentat- und Permeatseite.

2.1 Konzentrationsgradient

Für den Stofftransport ist nicht nur entscheidend, wie gross die Konzentration an einem bestimmten Ort ist, sondern auch, wie sie sich im Raum verändert. Diese räumliche Änderung wird als Konzentrationsgradient bezeichnet.

In eindimensionaler Betrachtung, beispielsweise senkrecht zur Membranoberfläche, lautet der Konzentrationsgradient einer Komponente i

$$\frac{dc_i}{dx} \quad (9)$$

Dabei ist x die Ortskoordinate in Transportrichtung. Anschaulich kann man den Konzentrationsgradienten als Steigung einer Kurve verstehen. Ist die Konzentration in einem kleinen räumlichen Bereich stark verändert, so ist der Gradient gross. Ändert sich die Konzentration kaum, so ist der Gradient klein oder gleich null.

Das Symbol d steht für eine infinitesimal kleine Änderung. Der Quotient dc_i/dx beschreibt somit, wie stark sich die Konzentration an einem bestimmten Ort ändert, wenn man sich um ein infinitesimal kleines Stück in x -Richtung bewegt. Im Unterschied dazu beschreibt Δ eine endliche Änderung über einen messbaren Abstand.

Mathematisch ist die Ableitung definiert als

$$\frac{dc_i}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{c_i(x + \Delta x) - c_i(x)}{\Delta x} \quad (10)$$

Ist die Ableitung positiv, nimmt die Konzentration mit zunehmendem Ort x zu. Ist sie negativ, nimmt die Konzentration ab. Ist sie gleich null, so ist die Konzentration entlang dieser Raumrichtung konstant.

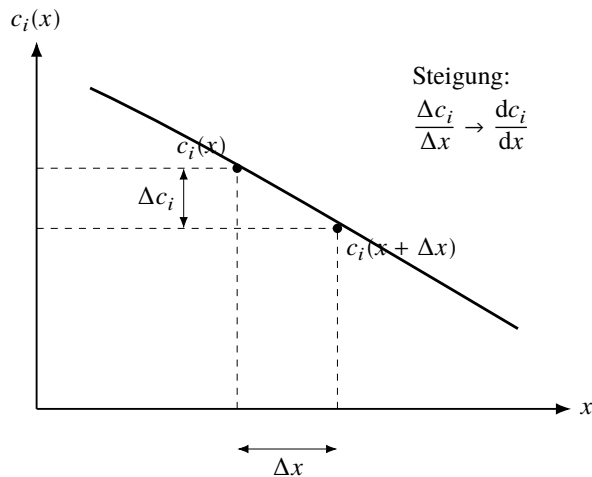


Abbildung: Anschauliche Darstellung des Konzentrationsgradienten.

Ein von null verschiedener Konzentrationsgradient zeigt an, dass ein Konzentrationsunterschied im Raum vorliegt. Ein solcher Gradient ist die treibende Kraft für diffusionsgetriebenen Stofftransport.

2.2 Diffusion und Stoffstromdichte

Diffusion ist ein molekularer Transportmechanismus, bei dem sich Teilchen infolge ihrer thermischen Bewegung von Bereichen hoher Konzentration zu Bereichen niedriger Konzentration bewegen. Dieser Prozess benötigt keine makroskopische Strömung.

Zur quantitativen Beschreibung des Transports ist es zweckmässig, zwischen Stoffstrom und Stoffstromdichte zu unterscheiden. Der Stoffstrom J_i beschreibt die gesamte Stoffmenge einer Komponente i , die pro Zeit durch eine betrachtete Fläche transportiert wird. Die Stoffstromdichte j_i beschreibt dagegen den Transport bezogen auf die Fläche:

$$j_i = \frac{J_i}{A} \quad (11)$$

Die Stoffstromdichte ist damit eine intensive Grösse. Sie gibt an, wie viel Stoffmenge pro Zeit und Fläche transportiert wird.

Für den diffusionsgetriebenen Transport gilt das erste Fick'sche Gesetz:

$$j_i^{\text{diff}} = -D_i \frac{dc_i}{dx} \quad (12)$$

Dabei ist D_i der Diffusionskoeffizient der Komponente i . Das negative Vorzeichen zeigt, dass der Transport in Richtung abnehmender Konzentration erfolgt.

Damit wird der Übergang von der lokalen Konzentrationsverteilung zu einer messbaren Transportgrösse möglich: Je grösser der Betrag des Konzentrationsgradienten ist, desto grösser ist auch die diffusive Stoffstromdichte.

3 Stofftransport in Fluiden und Membranen

In realen fluiden Systemen erfolgt der Stofftransport im Allgemeinen durch eine Überlagerung von Diffusion und Konvektion. Beide Mechanismen wirken gleichzeitig, ihr jeweiliger Anteil hängt jedoch von den Prozessbedingungen ab.

Konvektion beschreibt den Stofftransport durch die Bewegung des Fluids als Ganzes. Wird ein Fluid beispielsweise durch einen Druckunterschied in Strömung versetzt, so werden darin gelöste Stoffe mitgeführt. Der Transport erfolgt dann nicht nur aufgrund molekularer Bewegung, sondern auch durch die makroskopische Bewegung des Trägermediums.

Für den konvektiven Anteil der Stoffstromdichte einer Komponente i gilt

$$j_i^{\text{konv}} = c_i v \quad (13)$$

Dabei ist v die mittlere Strömungsgeschwindigkeit des Fluids. Diese Beziehung ist anschaulich nachvollziehbar: Je höher die Konzentration eines Stoffes und je grösser die Strömungsgeschwindigkeit, desto mehr Stoff wird pro Fläche und Zeit transportiert.

Der gesamte Stofftransport ergibt sich aus der Summe des diffusionsbedingten und des konvektiven Anteils:

$$j_i = j_i^{\text{diff}} + j_i^{\text{konv}} \quad (14)$$

Setzt man die entsprechenden Ausdrücke ein, erhält man

$$j_i = -D_i \frac{dc_i}{dx} + c_i v \quad (15)$$

Diese Gleichung verdeutlicht, dass der Stofftransport sowohl durch Konzentrationsgradienten als auch durch Strömung verursacht werden kann.

3.1 Flux, Permeabilität und Rückhalt

In der Membrantechnik wird die Stoffstromdichte j_i häufig als Flux bezeichnet. Der Flux ist somit die zentrale Grösse zur Beschreibung des Stoffdurchtritts durch eine Membran.

Wird der Transport durch ein Konzentrationsgefälle angetrieben, so lässt sich der Flux in vereinfachter Form proportional zur Konzentrationsdifferenz schreiben:

$$j_i = P \Delta c_i \quad (16)$$

Dabei ist P die Permeabilität der Membran gegenüber der betrachteten Komponente. Sie fasst die Eigenschaften der Membran zusammen, die den Stofftransport beeinflussen, beispielsweise Membrandicke, Porenstruktur und Wechselwirkungen zwischen Membran und Stoff.

Neben dem Transport selbst ist in der Membrantechnik die Trennwirkung von zentraler Bedeutung. Diese wird durch den Rückhalt beschrieben:

$$R_i = 1 - \frac{c_{i,Perm}}{c_{i,Feed}} \quad (17)$$

Dabei ist $c_{i,Feed}$ die Konzentration der Komponente i auf der Feedseite und $c_{i,Perm}$ die Konzentration im Permeat.

Der Rückhalt ist eine dimensionslose Grösse zwischen 0 und 1. Ein Wert von $R_i = 0$ bedeutet, dass die Komponente die Membran ungehindert passiert, während $R_i = 1$ einem vollständigen Rückhalt entspricht.

Stoffstromdichte, Permeabilität und Rückhalt beschreiben somit drei verschiedene, aber eng miteinander verknüpfte Aspekte von Membranprozessen: den Stofftransport durch die Membran, die Durchlässigkeit der Membran und die Trennleistung gegenüber einzelnen Komponenten.

4 Verwendete Grössen und SI-Einheiten

Tabelle 1. Verwendete Grössen und SI-Einheiten

Symbol	Bedeutung	SI-Einheit
m_i	Masse der Komponente i	kg
n_i	Stoffmenge der Komponente i	mol
V	Volumen der Lösung bzw. des Gemisches	m^3
A	Fläche, z. B. Querschnitts- oder Membranfläche	m^2
x	Ortskoordinate in Transportrichtung	m
Δx	endlicher Abstand in x -Richtung	m
dx	infinitesimale Ortsänderung	m
c_i	Stoffmengenkonzentration der Komponente i	mol m^{-3}
$c_i^{(m)}$	Massenkonzentration der Komponente i	kg m^{-3}
$c_{i,\text{Feed}}$	Stoffmengenkonzentration im Feed	mol m^{-3}
$c_{i,\text{Perm}}$	Stoffmengenkonzentration im Permeat	mol m^{-3}
Δc_i	Konzentrationsdifferenz der Komponente i	mol m^{-3}
dc_i	infinitesimale Änderung der Konzentration	mol m^{-3}
$\frac{dc_i}{dx}$	Konzentrationsgradient	mol m^{-4}
M_i	molare Masse der Komponente i	kg mol^{-1}
ρ	Massendichte des Gemisches	kg m^{-3}
D_i	Diffusionskoeffizient der Komponente i	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
v	mittlere Strömungsgeschwindigkeit	m s^{-1}
J_i	Stoffstrom der Komponente i	mol s^{-1}
j_i	Stoffstromdichte bzw. Flux der Komponente i	$\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$
j_i^{diff}	diffusive Stoffstromdichte der Komponente i	$\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$
j_i^{konv}	konvektive Stoffstromdichte der Komponente i	$\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$
P	Permeabilität der Membran bezogen auf Δc_i	m s^{-1}
R_i	Rückhalt der Komponente i	1