

Mechanistische Modellierung der Flüssigkeitsverteilung in Schüttelreaktoren

Einführung

Schüttelreaktoren sind das wichtigste Arbeitsmittel der Bioprozeßentwicklung. Jährlich werden über 1 Million individuelle Versuchsansätze in Schüttelreaktoren durchgeführt. Bezüglich der Flüssigkeitsverteilung und der daraus resultierenden Stoff-, Impuls und Wärmeaustauschflächen gab es bisher keinerlei Informationen.

Ziel der Arbeit

In dieser Arbeit soll die Flüssigkeitsverteilung in geschüttelten Bioreaktoren auf Basis von einfachen hydrodynamischen Betrachtungen modelliert werden.

Modellierung der Flüssigkeitsverteilung

Die Bewegung eines Schüttelreaktors auf einer Schüttelmaschine kann man sich in zwei Teilbewegungen zerlegt denken (s. Abb. 1), der Drehung des Kolbens um die Exzenterachse (ω_1) und die entgegengesetzte Drehung des Kolbens um die eigene Achse (ω_2). Zur Modellierung der Oberflächenkontur der Flüssigkeit wurde vereinfachend angenommen, daß die Viskosität sehr gering ist und keine Reibungskräfte zwischen Reaktorwand und Flüssigkeit übertragen werden. Diese Vereinfachung ist äquivalent mit der Annahme, daß die Drehbewegung $\omega_2 = 0$ ist. Die Flüssigkeitsverteilung ergibt sich dann als das Schnittvolumen des Schüttelreaktors mit einem in Abb. 1 angedeuteten Rotationsparaboloid. Für diese Berechnungen sind keinerlei Anpassungsparameter notwendig.

Als Beispiel zeigt Abb. 2 die für die angegebenen Bedingungen berechnete Verteilung der kreisenden Flüssigkeit (blau, s. Abb. 2) in einem Erlenmeyerkolben. Die Flüssigkeit verteilt sich sichelförmig im Schüttelkolben. Aus der berechneten Flüssigkeitsverteilung lassen sich alle relevanten Stoff-,

Impuls- und Wärmeaustauschflächen berechnen.

Validierung des Modells für die Flüssigkeitsverteilung

Zur ersten Überprüfung des Modells wurden Messungen der maximalen Flüssigkeitshöhen herangezogen. Abb. 3 zeigt, daß der sigmoide Anstieg der Meßwerte mit der Drehzahl sehr gut von den Modellrechnungen wiedergegeben wird. Unter einer Vielzahl von Bedingungen bestimmte maximale Flüssigkeitshöhen stimmen gut mit den berechneten Werten überein (s. Abb. 4).

Validierung der berechneten Stoffaustauschflächen (a)

Es wurden die Stoffaustauschflächen (a) im 250 ml-Schüttelkolben mit der beschleunigten Sulfitoxidationsmethode vermessen. Durch einen Vergleich dieser gemessenen Stoffaustauschflächen mit den berechneten (s. Abb. 5) konnte nachgewiesen werden, daß

- 1) neben der direkten Gas/Flüssigkeits-Grenzfläche (blau, s. Abb. 2) auch die benetzte Glasfläche (grün) am Stofftransfer teilnimmt und
- 2) die Fläche der benetzten Glaswand sogar den größeren Beitrag zum gesamten Stofftransfer beisteuert.

Die vollständige Benetzung der Innenwände von "normalen", d.h. hydrophilen Kolben kann anhand von fotografischen Aufnahmen nachgewiesen werden. In Kolben mit hydrophobisierten Glasinnenflächen tritt dagegen keine Benetzung auf. Dadurch ist die Stoffaustauschfläche (a) in diesen hydrophobisierten Schüttelkolben im Vergleich zu "normalen" Kolben geringer, was sich in einem deutlich geringeren Stofftransfer (OTR) niederschlägt (s. Abb. 6).

Fazit

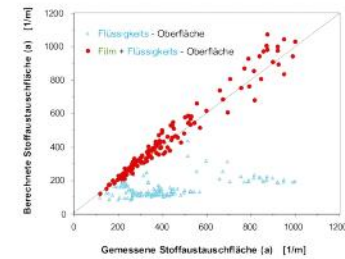


Abb. 5. Vergleich gemessener und berechneter Stoffaustauschflächen in hydrophilen 250 ml-Schüttelkolben, 2,5 - 5 cm Schütteldurchmesser, 10 - 50 ml Füllvolumen. Grün und blau geschriebene Flüssigkeits- und Film-Oberfläche siehe Abb. 2.

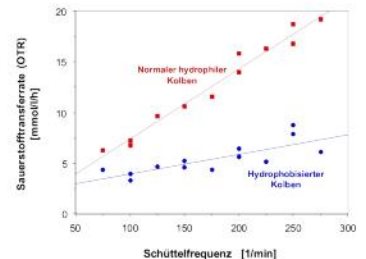


Abb. 6. Einfluß der Oberflächeneigenschaft des Kolbenwandinnenmaterials (hydrophil oder hydrophob) auf den Sauerstofftransfer, 250 ml-Schüttelkolben, 5 cm Schütteldurchmesser, 26 ml Füllvolumen.

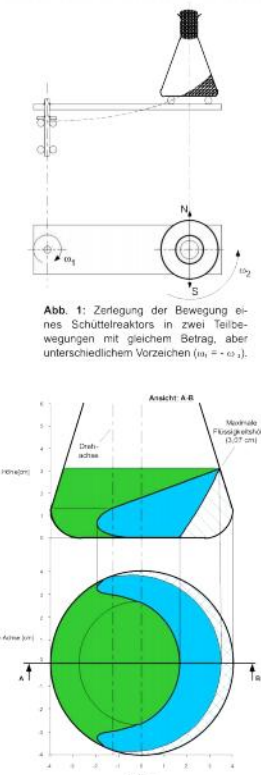


Abb. 1: Zerlegung der Bewegung eines Schüttelreaktors in zwei Teilbewegungen mit gleichem Betrag, aber unterschiedlichem Vorzeichen ($\omega_1 = -\omega_2$).

Abb. 2: Berechnete Flüssigkeitsverteilung in einem 250 ml-Schüttelkolben, 2,5 cm Schütteldurchmesser, 200 U/min Schüttelfrequenz, 26 ml Füllvolumen. Im unteren Teil der Abbildung ist durch eine Doppelschraffur die Benetzungsfäche der Flüssigkeit mit der Glaswand des kegelförmigen Kolbenoberteils dargestellt.

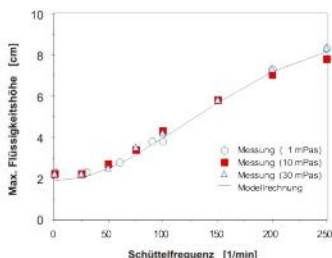


Abb. 3. Vergleich gemessener und berechneter maximaler Flüssigkeitshöhen (vergl. Abb. 2) in einem 1-l-Schüttelkolben, 5 cm Schütteldurchmesser, 200 ml Füllvolumen.

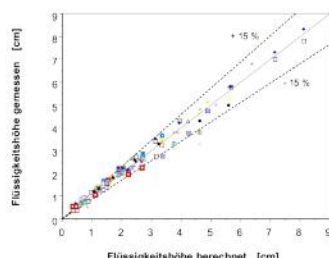


Abb. 4. Vergleich gemessener und berechneter maximaler Flüssigkeitshöhen (vergl. Abb. 2) in einem 1-l-Schüttelkolben, 5 cm Schütteldurchmesser, Füllvolumen: 5 - 20% des Nominalvolumens. Viskosität: 1 - 30 mPas.

- Bei Schüttelreaktoren spielt der von der kreisenden Flüssigkeitsmasse auf den hydrophilen Innenwänden zurückgelassene Flüssigkeitsfilm eine entscheidende Rolle.
- Das entwickelte Modell für die Flüssigkeitsverteilung in Schüttelreaktoren beschreibt die Hauptabmessung der kreisenden Flüssigkeit (maximale Flüssigkeitshöhe) und die integrale Stoffaustauschfläche (a) für die untersuchten Bedingungen mit sehr guter Genauigkeit.