

Technische Chemie - Nicht-isotherme Reaktoren

Name: Bernd Hitzmann

Tel.: 762-2963



E-mail: Hitzmann@IFTC.Uni-Hannover.de

Adresse: Institut für Technische Chemie
Callinstr. 24
Raum 211

Warum eine Übung?

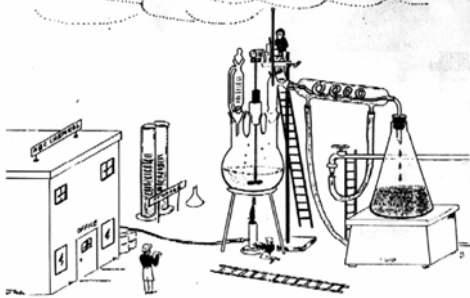
Tell me — I will forget

Show me — I might remember

Involve me — I will understand

Damit Sie die Technische Chemie verstehen!

Problem des Up-Scalings



The bench scale results were so good, that we by-passed the pilot plant!
E.H. Stitt, Chemical Engineering Journal, 90(2002)47-60

Aufgabe

In einem kugelförmigen Reaktor läuft eine exotherme Reaktion ab. Die spezifische Wärmeentwicklung (Wärmemenge pro Zeit pro Volumen) beträgt $w=1 \text{ J/sec/cm}^3$.

Bitte berechnen Sie die Wärmestromdichte, die notwendig ist für einen Reaktor mit einem Radius von $r_a=6,2 \text{ cm}$ und $r_b=1 \text{ m}$, um die gebildete Wärmemenge abzuführen.

$\dot{Q} = wV$ Gebildete Wärmemenge pro Zeit

Volumen $V = \frac{4}{3}\pi r^3$ Fläche $F = 4\pi r^2$

$\vec{j} = -\lambda \text{ grad } T$ Wärmestromdichte $j = \frac{\text{Wärmemenge}}{\text{Fläche Zeit}} \left[\frac{\text{J}}{\text{m}^2 \text{sec}} \right]$

Lösung für r_a

In einem kugelförmigen Reaktor läuft eine exotherme Reaktion ab. Die spezifische Wärmeentwicklung (Wärmemenge pro Zeit pro Volumen) beträgt $w=1 \text{ J/sec/cm}^3$.

Bitte berechnen Sie die Wärmestromdichte, die notwendig ist für einen Reaktor mit einem Radius von $r_a=6,2 \text{ cm}$ und $r_b=1 \text{ m}$, um die gebildete Wärmemenge abzuführen

$$\dot{Q} = wV \quad r_a \quad \dot{Q}_a = 1 \frac{4}{3}\pi (6,2)^3 \frac{\text{J}}{\text{sec cm}^3} \text{cm}^3 \quad \dot{Q}_a = 998,3 \frac{\text{J}}{\text{sec}}$$

$$j_a = \frac{\dot{Q}_a}{\text{Fläche}} \quad j_a = \frac{\dot{Q}_a}{4\pi r^2} \quad j_a = \frac{998,3}{4\pi(6,2)^2} \frac{\text{J}}{\text{sec cm}^2} \quad j_a = 2,07 \frac{\text{J}}{\text{sec cm}^2}$$

Lösung für r_b

In einem kugelförmigen Reaktor läuft eine exotherme Reaktion ab. Die spezifische Wärmeentwicklung (Wärmemenge pro Zeit pro Volumen) beträgt $w=1 \text{ J/sec/cm}^3$.

Bitte berechnen Sie die Wärmestromdichte, die notwendig ist für einen Reaktor mit einem Radius von $r_a=6,2 \text{ cm}$ und $r_b=1 \text{ m}$, um die gebildete Wärmemenge abzuführen.

$$\dot{Q} = wV \quad j = \frac{\dot{Q}}{F} = \frac{wV}{F} = \frac{w \frac{4}{3}\pi r^3}{4\pi r^2} = w \frac{r}{3} \quad j_b = w \frac{r_b}{3} = 1 \frac{1}{3} \frac{\text{J}}{\text{sec cm}^3} \text{m}$$

$$j_b = 0,333 \frac{\text{J } 100 \text{ cm}}{\text{sec cm}^3} = 33,3 \frac{\text{J}}{\text{sec cm}^2} \quad j_a = 2,07 \frac{\text{J}}{\text{sec cm}^2}$$

Aufgabe und Lösung

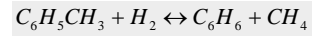
Ein Reaktor mit dem Volumen von $V=0,42 \text{ m}^3$ wird von einem Volumenstrom von $\dot{V}=1 \text{ L/min}$ durchströmt. Wie groß ist die hydrodynamische Verweilzeit (bitte in Stunden angeben)?

$$\tau = \frac{V}{\dot{V}} \quad \tau = \frac{0,42 \text{ m}^3}{1 \frac{\text{L}}{\text{min}}} = \frac{0,42 * 1.000.000 \text{ cm}^3}{1 \frac{1.000 \text{ cm}^3}{\text{min}}}$$

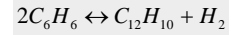
$$\tau = 420 \text{ min} = 420 \frac{1}{60} \text{ h} = 7 \text{ h}$$

Aufgabe

Nach folgender Reaktion wird aus Toluol Benzol hergestellt



Bedingt durch eine Folgereaktion entsteht aus einem Teil des Benzols Diphenyl



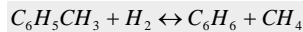
Reaktant	----- Reaktor -----	
	Eingang kmol/h	Ausgang kmol/h
H ₂	1858	1583
CH ₄	804	1083
C ₆ H ₆	13	282
C ₆ H ₅ CH ₃	372	93
C ₁₂ H ₁₀	0	4

Bitte berechnen Sie
- den Umsatz
- die Ausbeute
- die Selektivität
bezüglich Toluol

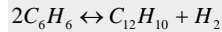
Lösung Umsatz

Index i Edukt
Index k Produkt

Nach folgender Reaktion wird aus Toluol Benzol hergestellt



Bedingt durch eine Folgereaktion entsteht aus einem Teil des Benzols Diphenyl



Reaktant	----- Reaktor -----	
	Eingang kmol/h	Ausgang kmol/h
H ₂	1858	1583
CH ₄	804	1083
C ₆ H ₆	13	282
C ₆ H ₅ CH ₃	372	93
C ₁₂ H ₁₀	0	4

Umsatz bezüglich Toluol

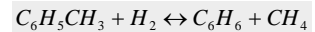
$$U_i = \frac{n_{i0} - n_i}{n_{i0}}$$

$$U_i = \frac{372 - 93}{372} = 0,75$$

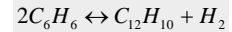
Lösung Ausbeute

Index i Edukt
Index k Produkt

Nach folgender Reaktion wird aus Toluol Benzol hergestellt



Bedingt durch eine Folgereaktion entsteht aus einem Teil des Benzols Diphenyl



Reaktant	----- Reaktor -----	
	Eingang kmol/h	Ausgang kmol/h
H ₂	1858	1583
CH ₄	804	1083
C ₆ H ₆	13	282
C ₆ H ₅ CH ₃	372	93
C ₁₂ H ₁₀	0	4

Ausbeute bzgl. Toluol

$$Y_k = \frac{n_k - n_{k0}}{n_{i0}} \frac{V_i}{V_k}$$

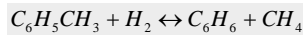
$$Y_k = \frac{282 - 13}{372} \frac{1}{1}$$

$$Y_k = \frac{282 - 13}{372} \frac{1}{1} = 0,72$$

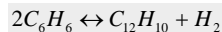
Lösung Selektivität

Index i Edukt
Index k Produkt

Nach folgender Reaktion wird aus Toluol Benzol hergestellt



Bedingt durch eine Folgereaktion entsteht aus einem Teil des Benzols Diphenyl



Reaktant	----- Reaktor -----	
	Eingang kmol/h	Ausgang kmol/h
H ₂	1858	1583
CH ₄	804	1083
C ₆ H ₆	13	282
C ₆ H ₅ CH ₃	372	93
C ₁₂ H ₁₀	0	4

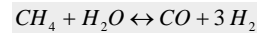
Selektivität bzgl. Toluol

$$S_{ki} = \frac{Y_k}{U_i} = \frac{n_k - n_{k0}}{n_{i0} - n_i} \frac{V_i}{V_k}$$

$$S_{ki} = \frac{0,72}{0,75} = 0,96$$

Aufgabe

Für die folgende Reaktion soll die Gleichgewichtskonstante K berechnet werden.

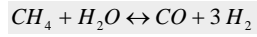


Gegeben sind die Gibbs'schen Standardbildungsenthalpien

	ΔG_B^0 [kJ/mol]
CH ₄	-50,835
H ₂ O	-228,59
CO	-137,27
H ₂	0

Lösung

Für die folgende Reaktion soll die Gleichgewichtskonstante K berechnet werden.



Gegeben sind die Gibbs'schen Standardbildungsenthalpien

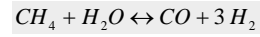
	v_i	ΔG_B^0 [kJ/mol]
CH_4	-1	-50,835
H_2O	-1	-228,59
CO	1	-137,27
H_2	3	0

$$\Delta G_R^0 = \sum_i v_i \Delta G_{B,i}^0 = -RT \ln K$$

$$\begin{aligned} \sum_i v_i \Delta G_{B,i}^0 &= (-1)(-50,835) + \\ & (-1)(-228,59) + \\ & (1)(-137,27) + \\ & (3)(0) = 142,155 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \end{aligned}$$

Lösung

Für die folgende Reaktion soll die Gleichgewichtskonstante K berechnet werden.



$$\sum_i v_i \Delta G_{B,i}^0 = 142,155 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} \quad \Delta G_R^0 = \sum_i v_i \Delta G_{B,i}^0 = -RT \ln K$$

$$\frac{\sum_i v_i \Delta G_{B,i}^0}{RT} = \ln K \quad K = e^{-\frac{\sum_i v_i \Delta G_{B,i}^0}{RT}} \quad K = e^{-\frac{142,155 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}}{8,3143 \cdot 298,15 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}}}$$

$$K = e^{-57,3458}$$

$$K = 1,24 \cdot 10^{-25}$$

$$K = 1,24 \cdot 10^{-25}$$