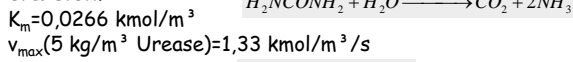


### Aufgabe und Lösung

In einem isothermen Satzreaktor wird Harnstoff  $c_{H_2O} = 0,1 \text{ kmol/m}^3$  mit dem Enzym Urease  $c_U = 0,001 \text{ kg/m}^3$  zu  $\text{NH}_3$  und  $\text{CO}_2$  umgesetzt. Welche Zeit wird benötigt, um einen Umsatz von 0,8 zu erzielen?



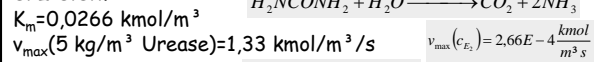
Enzymreaktion im STR  $\frac{dc}{dt} = -v_{\max} \frac{c}{K_m + c}$

$$\frac{v_{\max}(c_{E_1})}{c_{E_1}} = \frac{v_{\max}(c_{E_2})}{c_{E_2}} \rightarrow v_{\max}(c_{E_2}) = c_{E_2} \frac{v_{\max}(c_{E_1})}{c_{E_1}} = 0,001 \frac{1,33 \text{ kmol}}{5 \text{ m}^3/\text{s}}$$

$$v_{\max}(c_{E_2}) = 2,66E-4 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3 \text{ s}}$$

### Aufgabe und Lösung

In einem isothermen Satzreaktor wird Harnstoff  $c_{H_2O} = 0,1 \text{ kmol/m}^3$  mit dem Enzym Urease  $c_U = 0,001 \text{ kg/m}^3$  nach  $\text{NH}_3$  und  $\text{CO}_2$  umgesetzt. Welche Zeit wird benötigt, um einen Umsatz von 0,8 zu erzielen?



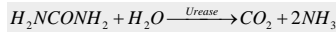
Enzymreaktion im STR  $\frac{dc}{dt} = -v_{\max} \frac{c}{K_m + c}$

Umsatz berücksichtigen  $U = \frac{c_0 - c}{c_0}$   $\frac{dU}{dc} = -\frac{1}{c_0}$

$$\left(\frac{K_m + c}{c}\right) dc = -v_{\max} dt$$

$$c = c_0(1 - U) \quad dc = -c_0 dU$$

### Lösung



$$\left(\frac{K_m + 1}{c}\right) dc = -v_{\max} dt \quad c = c_0(1 - U) \quad dc = -c_0 dU$$

$$-c_0 \left(\frac{K_m}{c_0(1-U)} + 1\right) dU = -v_{\max} dt \quad \int \left(\frac{K_m}{1-U} + c_0\right) dU = v_{\max} \int dt$$

$$\int_0^{U(t')} \left(\frac{K_m}{1-U} + c_0\right) dU = v_{\max} \int_0^{t'} dt \quad \left(-K_m \ln(1-U) + c_0 U\right)_0^{U(t')} = v_{\max} t'$$

$$t' = -\frac{K_m}{v_{\max}} \ln(1-U(t')) + \frac{c_0}{v_{\max}} U(t')$$

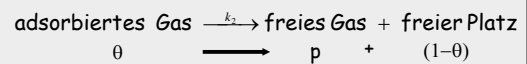
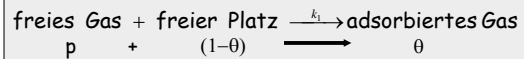
Kann nicht nach  $U(t')$  aufgelöst werden!!

$$t' = -\frac{0,0266}{2,66E-4} \ln(1-0,8) + \frac{0,1}{2,66E-4} \cdot 0,8 \quad t_{U=0,8} = 461,7 \text{ s}$$

### Aufgabe

Der Bedeckungsgrad  $\theta$  bei der Adsorption eines Gases mit dem Partialdruck  $p$  lässt sich aus einem kinetischen Ansatz ableiten (energetisch homogene Oberfläche, keine lateralen Wechselwirkungen, Monoschicht).

#### Ansatz



Wie lautet die Änderung von  $\theta$  mit der Änderung der Zeit?

$$\frac{d\theta}{dt} = k_1 p(1-\theta) - k_2 \theta$$

Betrachten Sie nun die Gleichung unter stationären Bedingungen und lösen sie nach  $\theta$  auf unter Benutzung von  $b = \frac{k_1}{k_2}$

$$\frac{d\theta}{dt} = k_1 p(1-\theta) - k_2 \theta$$

Betrachten Sie nun die Gleichung unter stationären Bedingungen und lösen sie nach  $\theta$  auf unter Benutzung von  $b = \frac{k_1}{k_2}$

stationär  $\frac{d\theta}{dt} = k_1 p(1-\theta) - k_2 \theta = 0$

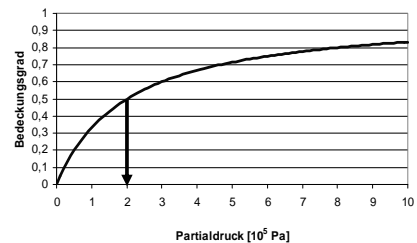
$$k_1 p(1-\theta) = k_2 \theta \quad \frac{k_1}{k_2} p(1-\theta) = \theta \quad bp(1-\theta) = \theta$$

$$bp - bp\theta = \theta \quad bp = \theta + bp\theta \quad bp = (1 + bp)\theta$$

$\theta = \frac{bp}{(1 + bp)}$  **Langmuir-Isotherme**  
 Bedeckungsgrad in Abhängigkeit des Partialdrucks bei energetisch homogener Oberfläche, keine lateralen Wechselwirkungen

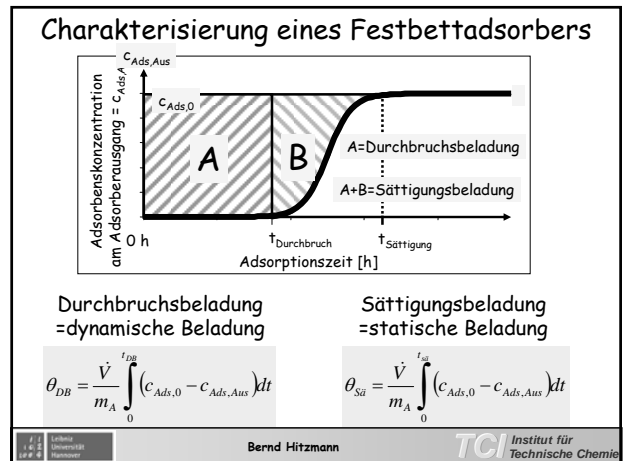
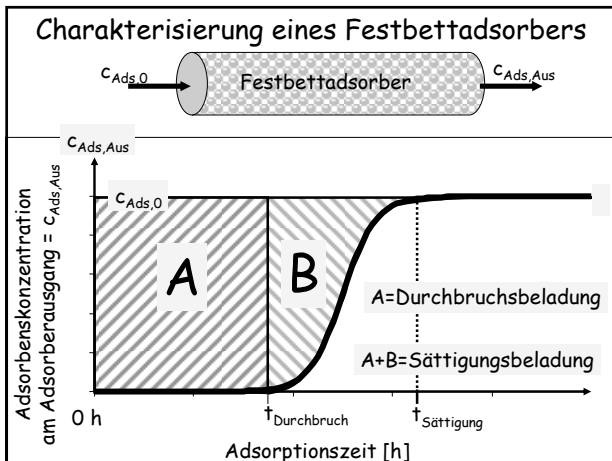
$\theta = \frac{bp}{(1 + bp)}$  **Langmuir-Isotherme**  
 Bedeckungsgrad in Abhängigkeit des Partialdrucks

$$b = \frac{k_1}{k_2}$$



Wie groß ist  $b$ ? Wie groß ist  $\theta_{\max}$ ?  $\theta_{\max} = 1$

$$\theta = \frac{\theta_{\max} p}{\left(\frac{1}{b} + p\right)} \rightarrow \frac{1}{b} = 2 \cdot 10^5 \text{ Pa} \rightarrow b = 0,5 \cdot 10^{-5} \text{ Pa}^{-1}$$



#### Aufgabe

Aus einem mit  $c_0=5 \text{ g/m}^3$  Aceton beladenen Abgas einer Filmfabrik soll das Aceton durch Aktivkohle bei Raumtemperatur ( $T_R=293 \text{ K}$ ) bis auf eine Restkonzentration von  $c_R=25 \text{ mg/m}^3$  adsorptiv entfernt werden. Der Festbettadsorber ist mit Aktivkohle gefüllt (Schüttdichte  $500 \text{ kg/m}^3$ ) und arbeitet unter Normaldruck ( $10^5 \text{ Pa}$ ). Der Gasdurchsatz beträgt  $10.000 \text{ m}^3/\text{h}$ . Die experimentell ermittelte Adsorptionsisotherme gehorcht der Langmuir-Gleichung und lässt sich in ihrem Anfangsteil durch die lineare Gleichung  $\theta=1,75 \cdot 10^{-4} p$  beschreiben ( $\theta$  statische Beladung der Aktivkohle in  $\text{kg/kg}$ ,  $p$  Acetonpartialdruck in  $\text{Pa}$ ). Berechnen Sie für den vorgegebenen Durchsatz die erforderliche Aktivkohlemasse des Adsorbers, wenn die dynamische Beladung der Aktivkohle unter den gegebenen Bedingungen 75 % der statischen Beladung und die Dauer der Adsorptionsphase (Standzeit) 1 h beträgt.

Bernd Hitzmann TCI Institut für Technische Chemie

#### Aufgabe

Standzeit = 1 h

Abgas mit Aceton Festbettadsorber: Aktivkohle gefordert

$c_{A0} = 5 \frac{\text{g}}{\text{m}^3}$

$\dot{V}_{\text{gas}} = 10000 \frac{\text{m}^3}{\text{h}}$

$p = 10^5 \text{ Pa}$

$T = 293 \text{ K}$

$c_{A,Aus} = 25 \frac{\text{mg}}{\text{m}^3}$

ideales Gas  $pV = nRT$

Korngröße  $d = 5 \cdot 10^{-3} \text{ m}$

Schüttdichte  $\rho_s = 500 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$

Gesucht: erforderliche Aktivkohlemasse

#### Lösung: Langmuir-Isotherme

wenn  $bp \ll 1$

$$\theta = \frac{bp}{1+bp} \approx 1,75 \cdot 10^{-4} p \frac{\text{kg}}{\text{kg Pa}}$$

$R = 8,3143 \frac{\text{J}}{\text{mol K}}$

$M_{\text{Aceton}} = 58,08 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$

$$p_{\text{Aceton}} = \frac{nRT}{V} = c \frac{RT}{M} = 5 \frac{8,3143 \cdot 293}{58,08} \frac{\text{g}}{\text{m}^3 \text{ mol K}} \frac{\text{mol}}{\text{g}} = 209,7 \text{ Pa}$$

Bernd Hitzmann TCI Institut für Technische Chemie

#### Langmuir-Isotherme

Standzeit = 1 h

$c_{A0} = 5 \frac{\text{g}}{\text{m}^3}$

$\dot{V}_{\text{gas}} = 10000 \frac{\text{m}^3}{\text{h}}$

$c_{A,Aus} = 25 \frac{\text{mg}}{\text{m}^3}$

$$\theta = \frac{bp}{1+bp} \approx 1,75 \cdot 10^{-4} p \frac{\text{kg}}{\text{kg Pa}}$$

wenn  $bp \ll 1$

$p_{\text{Aceton}} = 209,7 \text{ Pa}$

statische Beladung  $\theta \approx 1,75 \cdot 10^{-4} \frac{\text{kg}}{\text{kg Pa}} * 209,7 \text{ Pa} = 0,0367 \frac{\text{kg}}{\text{kg}}$

dynamische Beladung = Durchbruchbelastung = 75 % der statischen Beladung

$\theta_{\text{dyn}} = 0,75 \theta = 0,75 * 0,0367 \frac{\text{kg}}{\text{kg}} = 0,0275 \frac{\text{kg}_{\text{Ac}}}{\text{kg}_{\text{Kohle}}}$  ist nicht immer so!

$$\theta_{DB} = \frac{\dot{V}}{m_A} \int_0^{t_{DB}} (c_{Ads,0} - c_{Ads,Aus}) dt = \theta_{\text{dyn}}$$

$$m_A = \frac{\dot{V}}{\theta_{\text{dyn}}} (c_{Ads,0} - c_{Ads,Aus}) t_{DB} = \frac{10.000}{0,0275} (5 - 0,025) 1 \frac{\text{m}^3 \text{ g}_{\text{Ac}} \text{ kg}_{\text{Kohle}} \text{ h}}{\text{h m}^3 \text{ kg}_{\text{Ac}}} = 1.809 \text{ kg}_{\text{Kohle}}$$

Bernd Hitzmann TCI Institut für Technische Chemie

#### Aufgabe

Der Bedeckungsgrad  $\theta_A$  und  $\theta_B$  bei der Mischadsorption zweier Gase A und B mit den Partialdrücken  $p_A$  und  $p_B$  lässt sich für die stationäre Chemiesorption aus einem kinetischen Ansatz ableiten (energetisch homogene Oberfläche, keine lateralen Wechselwirkungen):

Ansatz ( $F$  = freier Platz) Beschreibung mit messbaren Größen

$$A_{\text{frei}} + F \xrightarrow{k_{A1}} A_{\text{ads}} \quad p_A + (1-\theta_A-\theta_B) \longrightarrow \theta_A$$

$$A_{\text{ads}} \xrightarrow{k_{A2}} A_{\text{frei}} + F \quad \theta_A \longrightarrow p_A + (1-\theta_A-\theta_B)$$

$$B_{\text{frei}} + F \xrightarrow{k_{B1}} B_{\text{ads}} \quad p_B + (1-\theta_A-\theta_B) \longrightarrow \theta_B$$

$$B_{\text{ads}} \xrightarrow{k_{B2}} B_{\text{frei}} + F \quad \theta_B \longrightarrow p_B + (1-\theta_A-\theta_B)$$

Wie lautet die Änderung von  $\theta_A$  und  $\theta_B$  mit der Änderung der Zeit?

$$\frac{d\theta_A}{dt} = k_{A1} p_A (1-\theta_A-\theta_B) - k_{A2} \theta_A \quad \frac{d\theta_B}{dt} = k_{B1} p_B (1-\theta_A-\theta_B) - k_{B2} \theta_B$$

Annahme stationärer Bedingungen und auflösen nach  $\theta_A$  und  $\theta_B$ !

$$\frac{d\theta_A}{dt} = k_{A1}p_A(1-\theta_A-\theta_B) - k_{A2}\theta_A \quad \frac{d\theta_B}{dt} = k_{B1}p_B(1-\theta_A-\theta_B) - k_{B2}\theta_B$$

Annahme stationärer Bedingungen und auflösen nach  $\theta_A$  und  $\theta_B$ !

Berücksichtigung von  $b_A = \frac{k_{A1}}{k_{A2}}$  und  $b_B = \frac{k_{B1}}{k_{B2}}$

Für  $\theta_A$ :

$$k_{A1}p_A(1-\theta_A-\theta_B) - k_{A2}\theta_A = 0$$

$$k_{A1}p_A - k_{A1}p_A\theta_A - k_{A1}p_A\theta_B = k_{A2}\theta_A$$

$$\frac{k_{A1}}{k_{A2}}p_A - \frac{k_{A1}}{k_{A2}}p_A\theta_B - \frac{k_{A1}}{k_{A2}}p_A\theta_A = \theta_A$$

$$b_A p_A - b_A p_A \theta_B - b_A p_A \theta_A = \theta_A$$

$$b_A p_A (1 - \theta_B) = (b_A p_A + 1) \theta_A \quad \longrightarrow \quad \theta_A = \frac{b_A p_A (1 - \theta_B)}{1 + b_A p_A}$$

Lehrstuhl für Technische Chemie  
Bernd Hitzmann  
TCI Institut für Technische Chemie

muss ersetzt werden

$$\theta_A = \frac{b_A p_A (1 - \theta_B)}{1 + b_A p_A} \quad \text{analoges Vorgehen}$$

$$\theta_B = \frac{b_B p_B (1 - \theta_A)}{1 + b_B p_B}$$

$$1 - \theta_B = 1 - \frac{b_B p_B (1 - \theta_A)}{1 + b_B p_B}$$

$$1 - \theta_B = \frac{1 + b_B p_B - b_B p_B (1 - \theta_A)}{1 + b_B p_B}$$

$$\theta_A = \frac{b_A p_A (1 + b_B p_B - b_B p_B (1 - \theta_A))}{(1 + b_A p_A)(1 + b_B p_B)} \quad \text{Nach } \theta_A \text{ auflösen!}$$

$$\theta_A = \frac{b_A p_A (1 + b_B p_B - b_B p_B) + b_A p_A b_B p_B \theta_A}{(1 + b_A p_A)(1 + b_B p_B) + b_A p_A b_B p_B}$$

Lehrstuhl für Technische Chemie  
Bernd Hitzmann  
TCI Institut für Technische Chemie

$$\theta_A = \frac{b_A p_A (1 + b_B p_B - b_B p_B) + b_A p_A b_B p_B \theta_A}{(1 + b_A p_A)(1 + b_B p_B) + b_A p_A b_B p_B}$$

$$\theta_A - \frac{b_A p_A b_B p_B \theta_A}{(1 + b_A p_A)(1 + b_B p_B) + b_A p_A b_B p_B} = \frac{b_A p_A (1 + b_B p_B - b_B p_B)}{(1 + b_A p_A)(1 + b_B p_B) + b_A p_A b_B p_B}$$

$$\theta_A \left[ 1 - \frac{b_A p_A b_B p_B}{(1 + b_A p_A)(1 + b_B p_B) + b_A p_A b_B p_B} \right] = \frac{b_A p_A (1 + b_B p_B - b_B p_B)}{(1 + b_A p_A)(1 + b_B p_B) + b_A p_A b_B p_B}$$

$$\theta_A [(1 + b_A p_A)(1 + b_B p_B) - b_A p_A b_B p_B] = b_A p_A (1 + b_B p_B - b_B p_B)$$

$$\theta_A = \frac{b_A p_A (1 + b_B p_B - b_B p_B)}{(1 + b_A p_A)(1 + b_B p_B) - b_A p_A b_B p_B}$$

$$\theta_A = \frac{b_A p_A}{1 + b_A p_A + b_B p_B} \quad \text{analoges Vorgehen} \quad \theta_B = \frac{b_B p_B}{1 + b_A p_A + b_B p_B}$$

Mischadsorption

Lehrstuhl für Technische Chemie  
Bernd Hitzmann  
TCI Institut für Technische Chemie