

Übung 1: Reaktoren

Durch die katalytische Dehydrierung von Ethylbenzol kann Styrol nach folgender Reaktion hergestellt werden:



Die Reaktion findet bei Temperaturen zwischen 600 und 650 °C statt.

Um unerwünschte Nebenreaktionen zu vermeiden, wird die Reaktion bei vermindertem Druck (0,1-0,5 bar) durchgeführt.

Folgende Daten sind Ihnen bekannt:

- **$T_{\text{ein}} = 600 \text{ °C}$**
- **$p_{\text{Reaktor}} = 0,5 \text{ bar}$**
- **$F_{\text{ein}} = 200 \text{ mol/sec}$**
- **Properties: RK-Soave**

Teil 0

In welcher Phase findet die Reaktion statt? Erstellen Sie dazu ein p-T-Diagramm für die Komponente Ethylbenzol und tragen Sie den Betriebspunkt ebenfalls in das Diagramm ein.

Übung 1: Reaktoren

Teil 1

- 1) Bilden Sie die Reaktion mit einem stöchiometrischen Reaktor (RStoic) für einen Umsatz von 70 % an Ethylbenzol ab.
 - a) Wie hoch ist die Austrittstemperatur aus dem Reaktor bei adiabater Reaktionsführung?
 - b) Welche Wärmemenge müssen Sie bei einer isothermen Reaktionsführung zuführen?

- 2) Bilden Sie die Reaktion mit einem Gibbs Reaktor (RGibbs) ab. Stellen Sie den Gleichgewichtsumsatz über die Temperatur in Excel graphisch dar für die beiden Prozessdrücke 0,5 und 1 bar. Variieren Sie dabei die Temperatur zwischen 500 und 700 °C.

- 3) Welche Information bekommen Sie bezüglich des Reaktortyps (z.B. Rührkessel, Strömungsrohr etc.) für die beiden Modelle?

Übung 1: Reaktoren

Teil 2

Die Kinetik der Reaktion zur Herstellung von Styrol sieht wie folgt aus:

$$r_{EB} = k \cdot p_{EB} \quad \text{mit} \quad k = k_0 \cdot e^{-\frac{E_A}{R \cdot T}}$$

$$k_0 = 89,22 \text{ kmol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s} \cdot \text{Pa})$$

$$E_A = 21874 \text{ cal/mol}$$

Nutzen Sie den Powerlaw-Ansatz zur Implementierung in Aspen Plus. Beachten Sie dabei, dass es sich um eine Reaktion erster Ordnung handelt.

- 1) Bilden Sie die Reaktion mit einem isothermen Rohrreaktor (RPLUG) mit einer Länge von 1 m und einem Durchmesser von 0,25 m ab.
- 2) Bilden Sie die Reaktion mit drei in Reihe geschalteten, adiabaten Rührkesselreaktoren (CSTR) ab. Die Rührkessel sollen jeweils ein Volumen von 100 Litern haben.
- 3) Mit Hilfe welcher Maßnahmen können die Umsätze im Rohrreaktor bzw. in der Rührkesselkaskade verbessert werden?