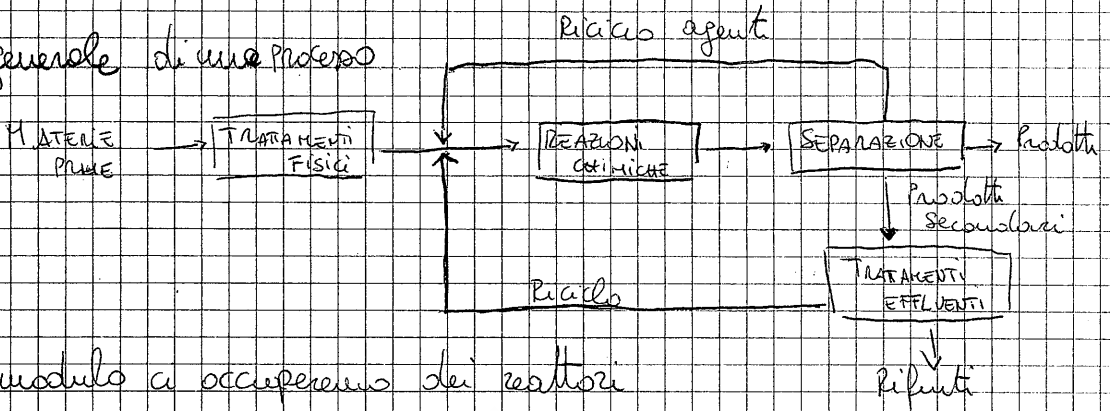
IRC 25/10/19 ①

Schema generale di una Processo



In questo modulo ci occuperemo dei reattori

Faremo riferimento a 3 tipologie di reattori

a) discontinuo (batch)

b) continuo - perfettamente mescolato

c) reattore a flusso a pistone

Ci occuperemo di bilanci di materia e di energia

Sia nel reattore batch che nel continuo il fluido è considerato perfettamente miscelato → le variabili non saranno dipendenti dallo spazio. Nel (c) il fluido dipenderà dallo spazio, solo lungo lungo l'asse, radialmente sono omogenee le proprietà

DISTINGUIAMO reazioni omogenee e eterogenee: stessa fase o diverse fasi

MASTER COPY
Tel. 050 8312126
Cell. 388 9837745

Idrodesolforazione

Si eliminano composti solforici utilizzando idrogeno

- lo zolfo crea dei composti organici che stanno vicino agli idrocarburi del gasolio
- va rimosso per le regolazioni ambientali

$$R_2S + 2H_2 = RH_2 + H_2S$$

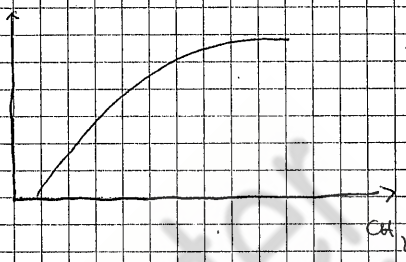
$$r = \underbrace{k}_{\text{cost. cinetica}} \underbrace{C_{H_2}^{\alpha}}_{\text{ordine reaz.}} \; k \, C_{R_2S}^{\beta} \Big/ \underbrace{(1 + K_{H_2} C_{H_2} + K_{H_2S} C_{R_2S})}_{(1)}{}^{\gamma}$$

cost. di equilibrio

r ci dice quanto velocemente reagiscono i reagenti

K_{H_2} fa riferimento all'esperimento di assorbimento dell'H_2 sul catalizzatore.

Se la concentrazione dell'idrogeno aumenta



Perché non c'è più spazio nel catalizzatore (1)

Il Termine al denominatore rappresenta la reazione

Chemical Reactor Analysis and Energy Design Fundamentals
Rawlings and J.B. Ekerdt

Esame: Ricevimento 16.30 - 18.30

mandare email con nome, cognome, n° matricola

Esame: Scritto, 3 ore, una Teoria che non esercitazioni

MASTER COPY
Tel. 050 8312126
Cell. 388 9837745

La stechiometria si occupa di trovare le quantità massive riferite a una reazione chimica

Esempio:

1) $2NO + O_2 = 2NO_2$

a) lista delle specie

$A_1 = NO$ $A_2 = O_2$ $A_3 = NO_2$

b) reazione stechiometrica

coeff. stechiometrici

$-2A_1 - A_2 + 2A_3 = 0$

MASTER COPY
Tel. 050 83121 26
Cell. 388 9837745

2) reazione shift del gas d'acqua

$H_2O + CO = H_2 + CO_2$

questa reazione avviene in due passaggi elementari

a) $H_2O + H^* = H_2 + OH$ * idrogeno radicalare

b) $OH + CO = CO_2 + H$

Questo schema coinvolge 6 specie

$A_1 = H$ $A_2 = H_2$ $A_3 = OH$ $A_4 = H_2O$ $A_5 = CO$ $A_6 = CO_2$

$$\begin{cases} -A_4 - A_1 + A_2 + A_3 = 0 \\ -A_3 + A_5 + A_6 + A_1 = 0 \end{cases}$$

$$\Downarrow$$

$$-A_4 - A_5 + A_2 + A_6 = 0$$

$$\begin{bmatrix} -2 & -1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{bmatrix} = 0$$

Riferito all'esempio 1

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ A_5 \\ A_6 \end{bmatrix} = 0$$

↓ coefficienti stechiometrici

$$\nu A = 0 \qquad \nu \in \mathbb{R}^{n_r \times n_s} \qquad A \in \mathbb{R}^{n_s}$$

↑ matrice di stechiometria

Legge della conservazione della massa: se considero il peso molecolare di ogni specie M_j allora deve essere soddisfatta

$$\nu \cdot M_{\#} = 0$$

IRC 28/09

Reazioni indipendenti

Def. Le sono se non posso scrivere almeno una come combinazione lineare delle altre

Ciò è legato al rango della matrice ν, $\text{rank}(\nu) \leq \min(n_r, n_s)$ (n° di reazioni, n° di specie)

Una set di reazioni è linearmente indipendenti se $\Leftrightarrow$ $\text{rank}\,\nu = n_r$

$\Downarrow$

$n_s \geq n_r$

Deve essere strettamente $>$ perché altrimenti non è verificato $\nu M = 0$

Se Trovo un vettore $c = [c_1 \dots c_r] \neq 0$ tale che

$c\nu = 0$ allora non sono lin. indipendenti

È consigliabile avere un set di reazioni indipendenti

Problema1: valutare un set di reazioni

Problema2: date le specie quante reazioni posso scrivere?

Procedura generale volta a scrivere le reazioni possibile da scrivere:

a) Scriviamo tutte le reazioni di formazione delle specie presenti, tranne quelle degli elementi (es. H_2)

b) attraverso combinazione lineare eliminiamo gli elementi non presenti nella lista delle specie presenti

c) Se eliminiamo un elemento, eliminiamo anche una reazione

Esempio $A = [CO_2 \; H_2O \; CH_4 \; CO \; H_2 \; O_2]^T$

1) $H_2 + \frac{1}{2}O_2 = H_2O$ 4) $2C + \frac{1}{2}O_2 = 2CO$

2) $C + O_2 = CO_2$

3) $C + 2H_2 = CH_4$