Reattore

Devo individuare il cammino di reazione più opportuno, cioè quello economicamente più conveniente.

Esempio

Produzione di cloruro di vinile

1° Cammino

$$C_2H_2 + HCl \xrightarrow[200°C]{10\,atm} C_2H_3Cl$$

MASTER COPY

Tel. 388/9837745

2° Cammino

$$C_2H_4 + Cl_2 \xrightarrow[90°C]{1,5\,atm} C_2H_4Cl_2$$

$$C_2H_4Cl_2 \xrightarrow[500°C]{} C_2H_3Cl + HCl$$

↳ prodotto desiderato

3° Cammino

$$C_2H_4 + \frac{1}{2}O_2 + 2HCl \longrightarrow C_2H_4Cl_2 + H_2O$$

$$C_2H_4Cl_2 \longrightarrow C_2H_3Cl + HCl$$

Quale cammino di reazione è il migliore?

Composto	P.M.	Valore $/Kg
C_2H_2	26	1,0
Cl_2	71	0,23
C_2H_4	28	0,58
HCl	36	0,39
C_2H_3Cl	62	0,46

Non riporto l'orizzonte perché mi va bene usare quello atmosferico.
Il valore di mercato dei prodotti chimici è fornito da:

- Chemical marketing Report
- European Chemical News

POTENZIALE ECONOMICO

E.P. = potenziale economico

EP = valore del prodotto - costo materie prime

Prendo come base 1 Kmole di C_2H_3Cl

1° Cammino

$$62 \cdot 0,46 - (28 \cdot 1,0 + 36 \cdot 0,39) = -11,52 \text{ \$/Kmole}$$

Non è conveniente perché le materie prime costano più del prodotto.

2° Cammino

Se HCl può essere un prodotto se riesco a venderlo con facilità, altrimenti è un sottoprodotto.

Se HCl è un prodotto

$$(62 \cdot 0,46 + 36 \cdot 0,39) - (28 \cdot 0,58 + 71 \cdot 0,23) = 10 \text{ \$/Kmole}$$

Ho un margine di profitto.

Se non riesco a venderlo EP = -4,05 \$/Kmole

3 Cammino

$$62 \cdot 0,46 - (28 \cdot 0,58 + 36 \cdot 0,39) = -1,76 \text{ \$/Kmole}$$

Esiste tuttavia un altro camino di reazione.

4

$$C_2H_4 + Cl_2 \rightarrow C_2H_4Cl_2$$

$$C_2H_4 + \frac{1}{2}O_2 + 2HCl \rightarrow C_2H_4Cl_2 + H_2O$$

$$2\,C_2H_4Cl_2 \rightarrow 2C_2H_3Cl + 2HCl$$

Reazione globale

$$C_2H_4 + \frac{1}{2}Cl_2 + \frac{1}{4}O_2 \rightarrow C_2H_3Cl + \frac{1}{2}H_2O$$

$$62 \cdot 0{,}46 - \left(28 \cdot 0{,}58 - \frac{71}{2} \cdot 0{,}23\right) = 4{,}12 \ \$/kmole$$

a livello industriale poco usare il processo di reazione 2 o 4.

Sistemi di Reazione.

1. Reazioni semplici

   Feed → Product

o

   Feed → Product + By-Product

2. Reazioni multiple in parallelo con formazione di sottoprodotti

   Feed → Product

   +

   Feed → By Product

Esempio

$$CH_2 = CH_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CH_2 - CH_2 \quad (\text{con } O \text{ a ponte})$$

$$CH_2 = CH_2 + 3O_2 \rightarrow 2CO_2 + 2H_2O \rightarrow \text{reazione parallela.}$$

MASTER COPY
Tel. 388/9837745

3. Reazioni multiple in serie con formazione di sottoprodotti

Feed → Product

Product → By Product

$$CH_3OH + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow HCOH + H_2O$$

$$HCOH \rightarrow CO + H_2$$

4. Reazioni multiple in serie e in parallelo con formazione di sottoprodotti

F → P

F → By P_1

P → By P_2

MASTER COPY

Tel. 388/9837745

$$H_2C-CH_2 \text{ (ossido di etilene)} + NH_3 \rightarrow NH_2(CH_2)_2OH$$

$$NH_2(CH_2)OH + H_2C-CH_2 \text{ (ossido di etilene)} \rightarrow NH\left(CH_2-CH_2-OH\right)_2$$

$$NH\left(CH_2CH_2OH\right)_2 + H_2C-CH_2 \text{ (ossido di etilene)} \rightarrow N\left(CH_2-CH_2-OH\right)_3$$

5. Reattori di polimerizzazione.

- con stadio di terminazione
- senza stadio di terminazione.

Parametri di prestazione di un reattore.

X conversione = $\frac{\text{reagente convertito nel reattore}}{\text{reagente alimentato al reattore}}$

S = selettività = $\frac{\text{prodotto desiderato}}{\text{reagente convertito di reattore}} \cdot \text{fattore stechiometrico}$

Rr (resa del reattore) = $\frac{\text{prodotto desiderato nel reattore}}{\text{reagente alimentato al reattore}} \cdot \text{fattore stechiometrico}$

$$Rr = S \cdot X$$

Esempio

Produzione di Benzene o partire da Toluene.

$$C_6H_5CH_3 + H_2 \rightarrow C_6H_6 + CH_4$$

$$2\,C_6H_6 \rightleftarrows C_{12}H_{10} + H_2$$

↳ difenile.