

Corso di TERMODINAMICA  
AA. 2018/2019

Esercizi per l'esame – Parte 9\*

**Bilanci su sistemi reagenti**

1. La sintesi dell'etano è condotta per idrogenazione dell'acetilene. Un reattore viene alimentato con una carica contenente 1.50 moli  $H_2$ /mole di  $C_2H_2$ . Scrivere e bilanciare la reazione, e quindi:

- Calcolare il rapporto stechiometrico dei reagenti (moli di  $H_2$  teoriche/moli  $C_2H_2$  teoriche) e la resa (moli di  $C_2H_6$  formate/moli  $H_2$  reagite).
- Determinare il reagente limitante e calcolare la percentuale del reagente in eccesso.
- Calcolare la portata in massa dell' $H_2$  (kg/s) necessaria a produrre  $4 \times 10^6$  tonnellate di etano per anno, assumendo che la reazione vada a completezza e che il processo operi in continuo (24 hr/giorno per 300 giorni all'anno).
- All'atto pratico, non è conveniente lavorare con un reagente in eccesso rispetto a condurre il processo in condizioni stechiometriche. Perché?

2) L'ammoniaca viene bruciata per produrre ossido di azoto (NO) ed acqua. Scrivere e bilanciare la reazione, e quindi :

- Calcolare il rapporto (lb-moli  $O_2$  reagite/lb-moli NO formate).
- Se l'ammoniaca viene alimentata con un reattore che lavora in continuo con una portata di 100 kmoli  $NH_3$ /hr, quale portata di  $O_2$  (kmoli/hr) corrisponde ad un eccesso di ossigeno del 40%?
- Se 50 kg di ammoniaca e 100 kg di ossigeno sono alimentati ad un reattore batch, determinare il reagente limitante, la percentuale di eccesso dell'altro reagente, l'estensione della reazione (moli) e la massa di NO prodotta se la reazione procede a completezza.

3) La reazione tra etilene e acido bromidrico per formare bromuro di etile viene condotta in un reattore che lavora in continuo. La stream in uscita viene analizzata e contiene 51.7% moli di  $C_2H_5Br$  e 17.3% di HBr. La stream in ingresso al reattore contiene esclusivamente etilene ed acido bromidrico. Scrivere e bilanciare la reazione, e quindi:

- Calcolare la frazione di conversione del reagente limitante e la percentuale del reagente in eccesso.
- Se la portata in moli della stream in ingresso è 165 moli/s, qual è l'estensione della reazione (fornire sia valore numerico che unità di misura).

4) Nel processo Deacon per la produzione di cloro gassoso, acido cloridrico ed ossigeno vengono fatti reagire per fornire appunto cloro ed acqua. Secondo tale processo, una quantità sufficiente di aria tale da garantire il 35% di eccesso di ossigeno viene inviata al reattore, e la corrispondente conversione di HCl è dell' 85%. Scrivere e bilanciare la reazione, e quindi:

- Calcolare le frazioni in moli dei prodotti nella stream di uscita usando il bilancio sulle specie atomiche.
- Un'alternativa all'aria come fonte di ossigeno potrebbe essere quella di usare ossigeno puro. Condurre l'impianto con ossigeno puro comporta sicuramente costi più elevati rispetto all'impiego dell'aria; al contempo, però, offre anche potenziali motivi di risparmio. Speculare

---

\* Ogni esercizio va svolto completamente, riportando tutti i passaggi e/o motivando la risposta (aka SHOW YOUR WORK)

su quali possano essere questi costi e questi vantaggi economici. Quali, tra questi, secondo voi potrebbe determinare alla fine la scelta?

5) A pressioni medio-basse, l'equazione di "water-gas shift" (che abbiamo discusso ampiamente a lezione) è caratterizzata da una costante di equilibrio  $K_{eq}$  che dipende dalla temperatura secondo la seguente legge:

$$K_{eq} = 0.0247 \exp(4020/T(K))$$

dove  $T$  è la temperatura del reattore (in K). Una carica ad un reattore batch contiene 20% in moli di CO, 10% in moli di CO<sub>2</sub>, 40% in moli di acqua e il resto in gas inerte. Il reattore viene mantenuto alla temperatura di 1123 K.

a) Assumere come base 1 mole di carica, disegnare il flow-chart e mettervi tutte le informazioni relative.

b) Calcolare le moli totali di gas all'equilibrio nel reattore (se impiegate più di 5 secondi a fare questo vi boccio d'ufficio) e la frazione in moli di idrogeno all'equilibrio.

c) Supponiamo che un campione di gas venga prelevato dal reattore ed analizzato poco dopo l'avvio del processo, e che la frazione in moli di H<sub>2</sub> sia significativamente diversa da quella che avete calcolato al punto b). Assumendo di non aver fatto nessun errore di calcolo o di misura, qual è la spiegazione più probabile per tale discrepanza?

6) Metano ed ossigeno vengono fatti reagire in presenza di un catalizzatore per dare formaldeide (HCHO). In una reazione parallela e secondaria, il metano viene ossidato a CO<sub>2</sub> ed H<sub>2</sub>O. La carica ad un reattore continuo contiene quantità equimolari di metano ed ossigeno. Scrivere e bilanciare le due reazioni, e quindi, assumendo una base di 100 moli/s per la carica:

a) Disegnare e scrivere le informazioni sul flow-chart.

b) Derivare le espressioni per le portate in moli nella stream dei prodotti in funzione dell'estensione della reazione.

c) Se la frazione di conversione di metano è 0.900 e la resa in formaldeide è 0.855, calcolare la composizione molare della stream in uscita dal reattore e la selettività della formaldeide rispetto alla CO<sub>2</sub>.

7) L'etano viene fatto reagire con il cloro gassoso per dare cloroetano ed acido cloridrico. Parte del cloroetano prodotto viene ulteriormente clorurato durante una reazione secondaria per dare dicloroetano ed acido cloridrico. Scrivere e bilanciare le due reazioni, e quindi:

a) supponete che il vostro obiettivo principale sia di massimizzare la selettività di cloroetano relativamente a quella di dicloroetano. Per questo, voi progettereste il reattore per una alta o bassa conversione di etano? Giustificate la vostra risposta. Quali altri accorgimenti/step di processo adattereste per renderlo più economicamente sostenibile?

b) Disegnare e scrivere le informazioni sul flow-chart.

c) Se il reattore è progettato per fornire una conversione del 15% di etano ed una selettività di 14 mol di clorometano/mole di diclorometano, con una percentuale trascurabile di cloro gassoso nel prodotto, qual è il rapporto nella carica (moli cloro/moli etano) e la resa di cloroetano?

8) Una miscela di etilene e azoto è alimentata a un reattore in cui l'etilene è dimerizzato a butene (C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>). a) Quante specie molecolari indipendenti sono coinvolte nel processo? b) quante specie atomiche indipendenti sono coinvolte nel processo? c) Eseguire il calcolo dei gradi di libertà del processo con i tre metodi (specie molecolari, specie atomiche e grado di avanzamento della reazione). d) Eseguire il bilancio di materia del processo con i tre metodi.