

## Analisi dei dati per esperimenti di combustione del metano

### *Premessa*

I dati vi vengono forniti come pressioni parziali dei segnali corrispondenti ai vari rapporti m/z (massa su carica) e temperatura del catalizzatore in funzione del tempo.

La miscela di reazione utilizzata è: CH<sub>4</sub> (1.50%) + O<sub>2</sub> (4.00%) in Ar.

Il valore del flusso di gas che viene riportato è riferito alle condizioni standard (25°C, 1atm).

La densità del catalizzatore è intesa come “densità di mucchio”, cioè è pari alla massa del catalizzatore divisa per il volume occupato all’interno del reattore.

Per i calcoli, convertire tutti i valori in unità di misura del sistema internazionale.

### *Elenco degli esperimenti*

<b>Nome file</b>	<b>Catalizzatore</b>	<b>GHSV* (mL g<sup>-1</sup> h<sup>-1</sup>)</b>
220531a	Pd(2%)/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> calcinato a 900°C per 5 h	200000
220601a	Pd(2%)/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> calcinato a 900°C per 5 h	300000
220607a	Pd(2%)/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> calcinato a 900°C per 5 h	100000
220608a	Pd(2%)/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> calcinato a 900°C per 5 h	400000
220609a	Pd(2%)/CeO <sub>2</sub> (15%)-Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> calcinato a 900°C per 5 h	200000
220610a	Pd(2%)/CeO <sub>2</sub> (15%)-Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> calcinato a 900°C per 5 h	400000
220613a	Pd(2%)/CeO <sub>2</sub> calcinato a 900°C per 5 h	200000
220614a	Pd(2%)/CeO <sub>2</sub> calcinato a 900°C per 5 h	400000

### *Analisi dei dati*

Per ognuno degli esperimenti, analizzare i dati secondo questa procedura.

#### 1. Analisi generale dei risultati

Plottare le pressioni parziali delle varie masse e la temperatura in funzione del tempo. Individuare la zona ideale in cui calcolare il FEED del reattore. Determinare la

pressione parziale del FEED per il metano ( $m/z = 15$ ) come media in un periodo di almeno 15 – 20 minuti.

## 2. Determinazione della conversione di $\text{CH}_4$ .

Punto per punto, calcolare la conversione di  $\text{CH}_4$  e plottarla in grafico in funzione della temperatura, sia in riscaldamento che in raffreddamento. *In questa fase, se siete abili nell'utilizzo di programmi per l'elaborazione di dati, potete applicare un minimo di smoothing delle curve (non obbligatorio e senza esagerare!!!).*

## 3. Calcolo della $k_{\text{APP}}$ assumendo condizioni del primo ordine

La  $k_{\text{APP}}$  assumendo una reazione del primo ordine rispetto a  $\text{CH}_4$  viene calcolata secondo la formula presentata a lezione.

Per arrivare ad ottenere  $k_{\text{APP}}$ , si deve:

- Calcolare il flusso reale di gas ad ogni temperatura, assumendo il gas come un gas ideale (la variazione del numero di moli di gas dovuto alla reazione è trascurabile, in prima approssimazione).
- Calcolare  $\text{GHSV}^*$ :

$$\text{GHSV}^* = \frac{\text{Volumetric Feed Rate}}{\text{Catalyst Mass}}$$

- Calcolare il tempo di contatto  $\tau$ :

$$\tau = \frac{d_{\text{CAT}}}{\text{GHSV}^*}$$

- Calcolare  $k_{\text{APP}}$ :

$$k_{\text{APP}} = - \frac{\ln(1 - X_{\text{CH}_4})}{\tau}$$

## 4. Calcolo della $E_{\text{APP}}$

Per ogni esperimento, plottare i valori di  $\ln(k_{\text{APP}})$  in funzione di  $1/T$  (con  $T$  in Kelvin) e studiarne l'andamento per verificare la presenza o meno di fenomeni diffusionali. Fittare con una retta di regressione lineare, la parte del grafico a conversione più bassa (indicativamente tra 2% ed il 25% di conversione). Dalla pendenza della retta, determinare la  $E_{\text{APP}}$ .

## 5. Valutazione delle condizioni di reazione

Gli esperimenti condotti impiegando  $\text{Pd}/\text{Al}_2\text{O}_3$  sono stati effettuati a diversi valori di  $\text{GHSV}^*$  al fine di valutare la presenza o meno di limitazioni diffusive. Utilizzando l'esperimento con  $\text{GHSV}^*$  più basso, individuare una temperatura a cui si ottiene una conversione di  $\text{CH}_4$  tra il 15% ed il 20%. Dagli altri esperimenti condotti su  $\text{Pd}/\text{Al}_2\text{O}_3$ ,

recuperare la conversione di CH<sub>4</sub> a questa stessa temperatura e plottare i valori in funzione di W/F.

### *Relazione*

Nella relazione, riportare:

- Tutti i grafici prodotti per verificare l'andamento della conversione di CH<sub>4</sub> in funzione della temperatura (riscaldamento e raffreddamento) e per la determinazione di E<sub>APP</sub>.
- Rispondere alle domande di seguito riportate.

### *Domande*

1. Analizzando qualitativamente i grafici di X<sub>CH<sub>4</sub></sub> vs T, quali sono le principali differenze osservate in funzione del supporto utilizzato? Proporre una giustificazione delle differenze osservate.
2. Quali differenze sono state osservate nei valori dei parametri cinetici (E<sub>APP</sub> e fattore pre-esponenziale) al variare del supporto utilizzato e del GHSV\* ? Giustificare la risposta sulla base del meccanismo della reazione e delle informazioni chimiche che i parametri cinetici forniscono.