

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: CH₄ (1.50%) + O₂ (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

Nome file	Catalizzatore	GHSV* (mL g⁻¹ h⁻¹)
220531a	Pd(2%)/Al ₂ O ₃ calcinato a 900°C per 5 h	200000
220601a	Pd(2%)/Al ₂ O ₃ calcinato a 900°C per 5 h	300000
220607a	Pd(2%)/Al ₂ O ₃ calcinato a 900°C per 5 h	100000
220608a	Pd(2%)/Al ₂ O ₃ calcinato a 900°C per 5 h	400000
220609a	Pd(2%)/CeO ₂ (15%)-Al ₂ O ₃ calcinato a 900°C per 5 h	200000
220610a	Pd(2%)/CeO ₂ (15%)-Al ₂ O ₃ calcinato a 900°C per 5 h	400000
220613a	Pd(2%)/CeO ₂ calcinato a 900°C per 5 h	200000
220614a	Pd(2%)/CeO ₂ 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 CH₄.

Punto per punto, calcolare la conversione di CH₄ 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_{APP} assumendo condizioni del primo ordine

La k_{APP} assumendo una reazione del primo ordine rispetto a CH₄ viene calcolata secondo la formula presentata a lezione.

Per arrivare ad ottenere k_{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 GHSV*:

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

- Calcolare il tempo di contatto τ :

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

- Calcolare k_{APP} :

$$k_{APP} = - \frac{\ln(1 - X_{CH_4})}{\tau}$$

4. Calcolo della E_{APP}

Per ogni esperimento, plottare i valori di $\ln(k_{APP})$ 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_{APP} .

5. Valutazione delle condizioni di reazione

Gli esperimenti condotti impiegando Pd/Al₂O₃ sono stati effettuati a diversi valori di GHSV* al fine di valutare la presenza o meno di limitazioni diffusive. Utilizzando l'esperimento con GHSV* più basso, individuare una temperatura a cui si ottiene una conversione di CH₄ tra il 15% ed il 20%. Dagli altri esperimenti condotti su Pd/Al₂O₃,

recuperare la conversione di CH₄ 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 CH₄ in funzione della temperatura (riscaldamento e raffreddamento) e per la determinazione di E_{APP}.
- Rispondere alle domande di seguito riportate.

Domande

1. Analizzando qualitativamente i grafici di X_{CH₄} 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_{APP} 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.