

## 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>
250521b	Pd(2%)/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> calcinato a 900°C per 4 h	200000
250522b	Pd(2%)/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> calcinato a 900°C per 4 h	300000
250526b	Pd(2%)/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> calcinato a 900°C per 4 h	100000
250527b	Pd(2%)/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> calcinato a 900°C per 4 h	400000
250528b	Pd(2%)/CeO <sub>2</sub> (15%) calcinato a 900°C per 4 h	200000
250529b	Pd(2%)/CeO <sub>2</sub> (15%)-Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> calcinato a 900°C per 4 h	200000

### *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 20 minuti.

#### 2. Determinazione della conversione di CH<sub>4</sub>.

Punto per punto, calcolare la conversione di CH<sub>4</sub> e plottarla in grafico in funzione della temperatura, sia in riscaldamento che in raffreddamento.

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

La  $k_{APP}$  assumendo una reazione del primo ordine rispetto a  $CH_4$  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  $\tau$ :

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

- 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  $Pd/Al_2O_3$  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  $CH_4$  tra il 15% ed il 20%. Dagli altri esperimenti condotti su  $Pd/Al_2O_3$ , recuperare la conversione di  $CH_4$  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  $CH_4$  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  $X_{CH_4}$  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 di  $E_{APP}$  al variare del supporto utilizzato e del  $GHSV^*$  ? Giustificare la risposta sulla base del meccanismo della reazione.
3. Tenendo presente che l'esperimento con  $GHSV^* = 200000 \text{ mL g}^{-1} \text{ h}^{-1}$  è sempre stato condotto per primo per ogni campione utilizzato, come si può giustificare il fatto che i risultati ottenuti per questi esperimenti si discostino leggermente da tutti gli altri?