

# Indice

|          |                                                                                                                 |           |
|----------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>I fondamentali</b>                                                                                           | <b>1</b>  |
| 1.1      | Introduzione . . . . .                                                                                          | 1         |
| 1.2      | Bilanci di materia . . . . .                                                                                    | 3         |
| 1.2.1    | Una premessa: le variabili intensive e estensive . . . . .                                                      | 3         |
| 1.2.2    | Bilanci di materia di sistemi reagenti . . . . .                                                                | 5         |
| 1.2.3    | Stechiometria della reazione . . . . .                                                                          | 5         |
| 1.2.4    | Grado di avanzamento e conversione . . . . .                                                                    | 6         |
| 1.2.5    | Ragionando in termini di concentrazioni . . . . .                                                               | 10        |
| 1.2.6    | Consistenza di dati sperimentali . . . . .                                                                      | 12        |
| 1.2.7    | Reazioni multiple . . . . .                                                                                     | 14        |
| 1.2.8    | Reazioni indipendenti . . . . .                                                                                 | 17        |
| 1.2.9    | Valutazione dei gradi di avanzamento da dati sperimentali . . . . .                                             | 18        |
| 1.2.10   | Sistemi eterogenei . . . . .                                                                                    | 22        |
| 1.3      | Bilanci di energia . . . . .                                                                                    | 25        |
| 1.3.1    | Reattori a flusso in stato stazionario . . . . .                                                                | 26        |
| 1.3.2    | Reattori batch . . . . .                                                                                        | 34        |
| R1       | Il Reforming . . . . .                                                                                          | 36        |
| <b>2</b> | <b>I limiti termodinamici</b>                                                                                   | <b>41</b> |
| 2.1      | Introduzione . . . . .                                                                                          | 41        |
| 2.2      | Determinazione delle condizioni di equilibrio, note le reazioni indipendenti che evolvono nel sistema . . . . . | 43        |
| 2.2.1    | Stati di riferimento, costanti di equilibrio e sistemi multifase . . . . .                                      | 52        |
| 2.3      | Determinazione delle condizioni di equilibrio, note le specie chimiche che si formare . . . . .                 | 54        |
| 2.4      | Calcolo delle energie libere nello stato di riferimento e della costante di equilibrio della reazione . . . . . | 56        |
| 2.5      | Determinazione delle condizioni di equilibrio in un reattore adiabatico . . . . .                               | 58        |
| R2       | Il Reforming . . . . .                                                                                          | 64        |

|          |                                                                                                    |            |
|----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| <b>3</b> | <b>Un po' di cinetica chimica</b>                                                                  | <b>87</b>  |
| 3.1      | Introduzione . . . . .                                                                             | 87         |
| 3.2      | Velocità di reazione . . . . .                                                                     | 88         |
| 3.3      | Espressione cinetica intrinseca e apparente . . . . .                                              | 88         |
| 3.4      | Espressione cinetica intrinseca . . . . .                                                          | 90         |
| 3.5      | Dipendenza della velocità di reazione dalla temperatura . . . . .                                  | 91         |
| 3.6      | Reazioni reversibili . . . . .                                                                     | 93         |
| 3.6.1    | Espressione della velocità di reazione in funzione della conversione.                              | 94         |
| 3.6.2    | Espressione della velocità di reazione in funzione della conversione e della temperatura . . . . . | 96         |
| R3       | Il Reforming . . . . .                                                                             | 100        |
| <b>4</b> | <b>Reattori ideali</b>                                                                             | <b>111</b> |
| 4.1      | Introduzione . . . . .                                                                             | 111        |
| 4.2      | Reattori a flusso perfettamente miscelati funzionanti in condizioni stazionarie . . . . .          | 114        |
| 4.2.1    | Calcolo di progetto e di verifica . . . . .                                                        | 115        |
| 4.3      | Reattori perfettamente miscelati funzionanti in condizioni non stazionarie                         | 120        |
| 4.4      | Reattori a flusso a pistone . . . . .                                                              | 128        |
| 4.4.1    | Calcolo di progetto e di verifica . . . . .                                                        | 129        |
| 4.5      | Un confronto tra CSTR e PFR . . . . .                                                              | 140        |
| 4.6      | Tempo di riempimento, "space time", "space velocity" e altro . . . . .                             | 145        |
| 4.7      | Tempo di permanenza e distribuzione dei tempi di permanenza . . . . .                              | 147        |
| R4       | Il Reforming . . . . .                                                                             | 150        |
| <b>5</b> | <b>Ancora sui reattori ideali</b>                                                                  | <b>155</b> |
| 5.1      | Introduzione . . . . .                                                                             | 155        |
| 5.2      | Sistemi di reattori . . . . .                                                                      | 156        |
| 5.3      | Reattori con riciclo . . . . .                                                                     | 156        |
| 5.4      | Reazioni multiple . . . . .                                                                        | 163        |
| 5.4.1    | Reazioni in parallelo . . . . .                                                                    | 165        |
| 5.4.2    | Reazioni in serie . . . . .                                                                        | 166        |
| 5.5      | Analisi di un caso complesso . . . . .                                                             | 171        |
| 5.5.1    | Reattore CSTR . . . . .                                                                            | 172        |
| 5.5.2    | Reattore PFR . . . . .                                                                             | 173        |
| R5       | Il Reforming . . . . .                                                                             | 174        |
| <b>6</b> | <b>Effetti termici</b>                                                                             | <b>181</b> |
| 6.1      | Introduzione . . . . .                                                                             | 181        |
| 6.2      | Reattori perfettamente miscelati . . . . .                                                         | 182        |
| 6.2.1    | Funzionamento in stato stazionario . . . . .                                                       | 182        |
| 6.2.2    | Scambio termico nei reattori perfettamente miscelati . . . . .                                     | 183        |
| 6.2.3    | Calcolo di progetto . . . . .                                                                      | 186        |
| 6.2.4    | Simulazione del funzionamento di un reattore CSTR . . . . .                                        | 192        |
| 6.2.5    | Molteplicità di stati stazionari . . . . .                                                         | 196        |

---

|       |                                                                                                  |     |
|-------|--------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 6.2.6 | Risposta del reattore alla variazione delle condizioni operative . .                             | 199 |
| 6.2.7 | Funzionamento del reattore in stato non stazionario . . . . .                                    | 205 |
| 6.3   | Reattori a flusso a pistone . . . . .                                                            | 212 |
| 6.3.1 | Scelta della temperatura di funzionamento per un reattore in<br>condizioni isoterme . . . . .    | 213 |
| 6.3.2 | Funzionamento adiabatico . . . . .                                                               | 214 |
| 6.3.3 | Reattore PFR raffreddato mediante scambio termico con un fluido<br>a temperatura $T_f$ . . . . . | 218 |
| 6.3.4 | Sensibilità alle condizioni operative . . . . .                                                  | 222 |