Esercitazione su equilibri chimici – parte 2

Per i cinque casi introdotti nella parte 1 delle esercitazioni sull'equilibrio chimico, si calcoli il calore scambiato al reattore.

Soluzione

In generale, il calore scambiato al reattore è pari alla variazione totale di entalpia tra ingresso e uscita del reattore.

$$
\begin{aligned}
Q &= \Delta H_{tot} = \Delta H^{IN}_{Tin\to Trif} + \varepsilon\cdot\Delta H^{0}_{Trif} + \Delta H^{OUT}_{Trif\to T=Tout} = \\
&= \sum_i n_i^{IN}\int_{Tin}^{Trif} C_{p_i}\,dT + \varepsilon\cdot\Delta H^{0}_{Trif} + \sum_i n_i^{OUT}\int_{Trif}^{T=Tout} C_{p_i}\,dT
\end{aligned}
\tag{1}
$$

in cui è possibile esplicitare ulteriormente i termini riferiti alla corrente di ingresso e a quella di uscita

$$
\begin{aligned}
\Delta H^{IN}_{Tin\to Trif} &= \sum_i n_i^{IN}\int_{Tin}^{Trif} C_{p_i}\,dT = \\
&= R\left[\begin{aligned}&\left(\sum_i n_i^{IN}A_i\right)T_{0in}(\tau_{in}-1)+\frac{\left(\sum_i n_i^{IN}B_i\right)}{2}T_{0in}^2(\tau_{in}^2-1)+\\ &+\frac{\left(\sum_i n_i^{IN}C_i\right)}{3}T_{0in}^3(\tau_{in}^3-1)+\frac{\left(\sum_i n_i^{IN}D_i\right)}{T_{0in}}\left(\frac{\tau_{in}-1}{\tau_{in}}\right)\end{aligned}\right]
\end{aligned}
\tag{2}
$$

$$
\begin{aligned}
\Delta H^{OUT}_{Trif\to T=Tout} &= \sum_i n_i^{OUT}\int_{Trif}^{T=Tout} C_{p_i}\,dT = \\
&= R\left[\begin{aligned}&\left(\sum_i n_i^{OUT}A_i\right)T_{0out}(\tau_{out}-1)+\frac{\left(\sum_i n_i^{OUT}B_i\right)}{2}T_{0out}^2(\tau_{out}^2-1)+\\ &+\frac{\left(\sum_i n_i^{OUT}C_i\right)}{3}T_{0out}^3(\tau_{out}^3-1)+\frac{\left(\sum_i n_i^{OUT}D_i\right)}{T_0}\left(\frac{\tau_{out}-1}{\tau_{out}}\right)\end{aligned}\right]
\end{aligned}
\tag{3}
$$

in cui

$$T_{0in} = T_{in} \qquad \tau_{in} = \frac{T_{rif}}{T_{in}}$$

$$T_{0out} = T_{rif} \qquad \tau_{out} = \frac{T_{out}}{T_{rif}}$$

Nle caso 1) sia la corrente di alimentazione sia quella di uscita si trovano a 25°C, che è anche la temperatura di riferimento a cui è stato calcolato il calore di reazione.
La variazione di entalpia riferita all'alimentazione e quella riferita ai prodotti in uscita sono nulle e, pertanto, il calore da scambiare è pari al calore sviluppato dalla reazione.

$$Q = \varepsilon \cdot \Delta H^0_{298} = -98890 \ \text{W}$$

Questo risultato sta a significare che, affinché il reattore funzioni a 25°C, è necessario sottrarre dal sistema 98890 Joule per ogni secondo di operazione.

Nel caso 2) le cose cambiano, dato che la temperatura di funzionamento è pari a 780°C.
Poiché la temperatura di riferimento è 25°C, la variazione di entalpia associata all'alimentazione è nulla ($T_{in}=T_{rif}$).
La variazione dell'entalpia associata ai prodotti deve essere invece calcolata, come nella eq.(3).

Può essere utile, per acquisire dimestichezza con questi calcoli e per seguire un metodo, preparare una tabella come quella che segue, in cui tutte le grandezze utili al calcolo sono riassunte.

Specie	#	IN [mol/s]	OUT [mol/s]	A_i	B_i	C_i	D_i	$n_i^{OUT} A_i$	$n_i^{OUT} B_i$	$n_i^{OUT} C_i$	$n_i^{OUT} D_i$
SO_2	1	1	0.662	5.699	8.01E-4	0	-1.015E+5	3.773	5.30E-4	0	-6.72E+4
O_2	2	0.5	0.331	3.639	5.06E-4	0	-2.270E+4	1.205	1.68E-4	0	-7.51E+3
SO_3	3	0	0.338	8.060	1.06E-3	0	-2.028E+5	2.724	3.57E-4	0	-6.85E+4
tot	-	1.5	1.331				∑	7.702	1.06E-3	0	-1.43E+5

Applicando l'eq. (3) si ottiene

$$\sum_i n_i^{OUT} \int_{Trif}^{T=Tout} C_{p_i} dT = 49940 \ \text{W}$$

e, infine, il calore scambiato al reattore, mediante l'eq. (1)

$$Q = \Delta H_{tot} = \varepsilon \cdot \Delta H^0_{Trif} + \sum_i n_i^{OUT} \int_{Trif}^{T=Tout} C_{p_i} dT = 0.338 \cdot (-98890) + 49940 = 16520 \ \text{W}$$

Procedendo in maniera analoga, per il caso 3) si ottengono i seguenti valori

$$\sum_i n_i^{OUT} \int_{Trif}^{T=Tout} C_{p_i} dT = 50630 \ \text{W}$$

e il calore scambiato al reattore

$$Q = \Delta H_{tot} = \varepsilon \cdot \Delta H^0_{Trif} + \sum_i n_i^{OUT} \int_{Trif}^{T=Tout} C_{p_i} dT = 0.7679 \cdot (-98890) + 50630 = -25300 \ \text{W}$$

Per i casi 4) e 5) occorre tenere in conto le moli di quei composti che non hanno preso parte alla reazione perché in eccesso o perché inerti.

I risultati sono i seguenti:

per il caso 4)

$$\sum_i n_i^{OUT} \int_{Trif}^{T=Tout} C_{p_i} dT = 62320 \text{ W}$$

e il calore scambiato al reattore

$$Q = \Delta H_{tot} = \varepsilon \cdot \Delta H_{Trif}^{0} + \sum_i n_i^{OUT} \int_{Trif}^{T=Tout} C_{p_i} dT = 0.406 \cdot (-98890) + 62320 = -22170 \text{ W}$$

per il caso 5)

$$\sum_i n_i^{OUT} \int_{Trif}^{T=Tout} C_{p_i} dT = 149300 \text{ W}$$

e il calore scambiato al reattore

$$Q = \Delta H_{tot} = \varepsilon \cdot \Delta H_{Trif}^{0} + \sum_i n_i^{OUT} \int_{Trif}^{T=Tout} C_{p_i} dT = 0.2861 \cdot (-98890) + 149300 = 121000 \text{ W}$$