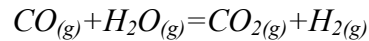


1. calcolare a  $T=1000^{\circ}\text{C}$  e  $P=1\text{bar}$  il grado di avanzamento e la composizione di equilibrio per la reazione



se nel reattore viene alimentata una miscela con composizione stechiometrica di CO e  $\text{H}_2\text{O}$

Ris:  $\epsilon=0.62$

Scriviamo il bilancio di materia

N°	Specie	$\nu$	Ingresso	Reaz	Fr. mol y
1	CO	-1	1	$1-\epsilon$	$(1-\epsilon)/2$
2	$\text{H}_2\text{O}$	-1	1	$1-\epsilon$	$(1-\epsilon)/2$
3	$\text{CO}_2$	1	0	$\epsilon$	$\epsilon/2$
4	$\text{H}_2$	1	0	$\epsilon$	$\epsilon/2$
	Tot	2	2	2	1

Per la reazione in esame,  $\nu=0$

Calcoliamo la costante di equilibrio:

(utilizzando la tabella delle Energie libere di formazione in condizioni standard)

$$\Delta G^{\circ}_r(1273\text{K}) = (-436.907 - 25.551 + 216.655 + 250.880)\text{KJ/mole} = 5.077\text{KJ/mole}$$

$$\ln(K_{eq}) = -\Delta G^{\circ}_r(1273\text{K}) / (R \cdot 1273\text{K}) = -0.48$$

Entrando nel diagramma "Costanti di equilibrio di alcune reazioni in funzione della temperatura" con  $T=1273\text{K}$  e quindi  $1/T \cdot 10^4 = 7.85/\text{K}$  si sarebbe valutato  $\ln(K_{eq}) \approx 0.5$ .

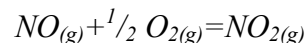
$K_{eq} = 0.62$ .

$$K_{eq} = \frac{y_4 y_3}{y_1 y_2} = \frac{\epsilon^2}{(1-\epsilon)^2} \Rightarrow \epsilon = \frac{\sqrt{K_{eq}}}{1 + \sqrt{K_{eq}}} \quad (\text{il grado di avanzamento deve essere compreso fra 0 e 1})$$

$\epsilon = 0.44$

N°	Specie	Fr. mol y all'eq.
1	CO	0.28
2	$\text{H}_2\text{O}$	0.28
3	$\text{CO}_2$	0.22
4	$\text{H}_2$	0.22
	Tot	1

2. calcolare a  $T=600^{\circ}\text{C}$  e  $P=100\text{bar}$  il grado di avanzamento all'equilibrio della reazione



se nel reattore viene alimentata una mole di NO ed aria in quantità tale da avere il 100% di eccesso di ossigeno.

Ris:  $\epsilon=0.54$

Scriviamo il bilancio di materia

N°	Specie	$\nu$	Ingresso	Reaz	Fr. mol y
1	NO	-1	1	$1-\epsilon$	$(1-\epsilon)/n_{out}$
2	O <sub>2</sub>	-1/2	1	$1-\epsilon/2$	$(1-\epsilon/2)/n_{out}$
3	NO <sub>2</sub>	1	0	$\epsilon$	$\epsilon/n_{out}$
4	N <sub>2</sub>	0	$^{79}/_{21}$	$^{79}/_{21}$	$^{79}/_{21}/n_{out}$
	Tot	$\nu=-1/2$	$n_{in}=2+^{79}/_{21}$	$n_{out}=2+^{79}/_{21}-\epsilon/2$	1

Calcoliamo la costante di equilibrio:

(utilizzando la tabella delle Energie libere di formazione in condizioni standard)

$$\Delta G_r^\circ(823K) = (69.271 + 8.085/2 - 72.724) \text{ KJ/mole} = 8.25 \text{ KJ/mole}$$

$$\ln(K_{eq}) = -\Delta G_r^\circ(823K) / (R \cdot 823K) = -1.14$$

Entrando nel diagramma “Costanti di equilibrio di alcune reazioni in funzione della temperatura” con  $T=823K$  e quindi  $1/T \cdot 10^4 = 11.5/K$  si sarebbe valutato  $\ln(K_{eq}) \approx -1$ .

$$K_{eq} = 0.32.$$

$$K_{eq} \left( \frac{P}{1bar} \right)^{1/2} = \frac{y_3}{y_1 y_2^{1/2}} = \frac{\epsilon}{(1-\epsilon)(1-\epsilon/2)^{1/2}} \left( 2 + \frac{79}{21} - \epsilon/2 \right)^{1/2}$$

L'eq. va risolta per tentativi:

$$\epsilon = \frac{K_{eq} \left( \frac{P}{1bar} \right)^{1/2} (1-\epsilon)(1-\epsilon/2)^{1/2}}{\left( 2 + \frac{79}{21} - \epsilon/2 \right)^{1/2}}$$

un modo possibile è diagrammare il primo e il 2° membro ( $\epsilon$  va fra 0 e 1) e trovare l'intersezione

bastano 4 punti per stabilire che  $\epsilon \approx 0.54$

