

<b>Insegnamento:</b> <b>n°crediti/ n°ore</b> <b>Docente titolare:</b> <b>Qualifica</b> <b>SSD di appartenenza</b> <b>Struttura di afferenza</b> <b>Telefono</b> <b>e-mail</b> <b>Orario di ricevimento</b> <b>Sito web docente</b>	Ingegneria delle Reazioni Chimiche 9 CFU/90 ore Renzo Carta Professore di 2° fascia ING-IND/24 Dipartimento di ingegneria chimica e materiali 3298606814 <a href="mailto:carta@dicm.unica.it">carta@dicm.unica.it</a> Lunedì-Venerdì 10:00-12:00 <a href="http://www.unica.it/rcarta">http://www.unica.it/rcarta</a>
<b>Curriculum scientifico</b>	RENZO CARTA professore associato Attualmente la ricerca scientifica è indirizzata allo studio della cinetica stimolata da Microonde. La ricerca in questo settore ha avuto inizio a metà 1998 e tende ad accertare l'influenza che onde elettromagnetiche di frequenza compresa fra 0.3 e 30 GHz esercitano sulla evoluzione della cinetica di reazioni chimiche. Nella prima fase l'attività sviluppata ha avuto soprattutto il fine di determinare l'effetto che le microonde esercitano sulla cinetica di una reazione. Nel mio caso la reazione selezionata è stata l'idrolisi del fenil acetato ad acetone ed acido acetico evolvente in ambiente acquoso omogeneo e catalizzata da acetato di sodio. Successivamente l'attività di ricerca è proseguita applicando le procedure già sperimentate per sistemi chimici ai sistemi di natura biologica con lo scopo di accertare e quantificare un eventuale effetti specifico delle MO.
<b>Contenuto schematico del corso di insegnamento</b>	<p style="text-align: center;"><b>Corso di Ingegneria delle Reazioni Chimiche</b></p> <pre> graph TD     Title[Corso di Ingegneria delle Reazioni Chimiche] --&gt; Cinetica     Title --&gt; Reattori[Reattori a fluidodinamica Ideale]          subgraph Cinetica [Cinetica]         C1[Concetti generali: Vel. di reazione, Conversione, Grado di avanzamento, Resa,]         C2[Cinetica dei sistemi omogenei. Reazioni enzimatiche, catalitiche e di]         C3[Cinetica dei sistemi eterogenei. Evoluzione dei processi cinetici eterogenei con catalizzatore solido.]     end          subgraph Reattori [Reattori a fluidodinamica Ideale]         R1[Reattori batch]         R2[Reattori a mescolamento nullo (PFR)]         R3[Reattori a mescolamento infinito (CSTR)]         R4[Sistemi complessi di reattori ideali]     end       </pre>
<b>Obiettivi formativi e risultati attesi (secondo i descrittori di Dublino)</b>	Il primo obiettivo che il corso si propone è quello di comprendere i fondamenti dell'Ingegneria delle Reazioni Chimiche. Questo obiettivo sarà conseguito attraverso il

	<p>ragionamento piuttosto che attraverso la memorizzazione delle numerose equazioni e delle condizioni che regolano la applicabilità di ciascuna equazione. Per conseguire questo risultato penso di :</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. proporre la soluzione di problemi di base secondo le metodologie tradizionali, questo rinforzerà la comprensione da parte degli studenti dei concetti e dei principi di base;</li> <li>2. proporre la soluzione di esercizi che richiedano la consultazione di testi differenti da quelli usati e l'approfondimento di alcune conoscenze.</li> </ol> <p>Il secondo obiettivo, in accordo con quanto richiesto dai "descrittori di Dublino" per lauree del 1° ciclo, sarà quello di ottenere una "autonomia di giudizio" nel senso che lo studente acquisirà una capacità critica che lo renderà capace di i dati sperimentali e di interpretarli in modo critico;</p> <p>Il terzo obiettivo riguarda la capacità di comunicare informazioni, idee, problemi e soluzioni a interlocutori specialisti e non specialisti.</p> <p>Le competenze che saranno acquisite riguardano i seguenti aspetti:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. capacità di interpretare dati cinetici e di valutare da esse l'ordine di reazione e la costante cinetica;</li> <li>2. capacità di calcolare le conversioni ottenibili in reattori batch con qualunque cinetica elementare, e ciò sia in sistemi a volume costante come anche in sistemi a volume variabile;</li> <li>3. capacità di conoscere le limitazioni culturali connesse con il concetto di "reattore ideale" e quindi saper determinare la loro applicabilità o meno ai sistemi reali;</li> <li>4. capacità di poter eseguire calcoli sia di progetto che di verifica di reattori chimici a fluidodinamica ideale;</li> <li>5. capacità di poter comunicare i risultati del loro lavoro in maniera essenziale ma completa e chiara.</li> </ol> <p>In conclusione gli studenti acquisiranno nel campo della cinetica e dei reattori chimici ideali la capacità di dare risposta alle seguenti domande:  Perché è stata fatta una certa scelta;  Si può fare una scelta alternativa;  Che tipo di generalizzazione si può trarre dai risultati conseguiti;  Perché è stata posta questa domanda</p>
<p><b>Articolazione del corso</b></p>	<p><b>Generalità</b> Il principio di conservazione in sistemi reagenti. Velocità di reazione e velocità di generazione. Bilanci di materia. Conversione frazionaria e reagente limitante. Bilancio di energia in sistemi reagenti calore di reazione. Evoluzione di piu' reazioni chimiche. Resa frazionaria, grado di avanzamento e selettività. Conversione di equilibrio. Cenni sull'adsorbimento, adsorbimento chimico e fisico, isoterma di Langmuir.</p> <p><b>Concetti iniziali</b> Dipendenza ed indipendenza lineare di</p>

reazioni chimiche. Rappresentazione algebrica delle reazioni chimiche matrice stechiometrica vettore delle specie vettore delle velocità di reazione. Velocità di reazione definizione ed espressione fenomenologica. Concetto di ordine di reazione e di costante cinetica. Cinetiche elementari. Aspetto cinetico dell'equilibr. Influenza della temperatura sulla velocità di reazione, costante cinetica legge di Arrhenius energia di attivazione fattore pre-esponenziale (o di frequenza). Ottenimento ed analisi dei dati cinetici Raccolta dei dati con processo differenziale o con processo integrale. Tecnica di analisi differenziale, integrale, della semi-vita, delle velocità iniziali. Tecnica di analisi dei minimi quadrati

**Reazioni omogenee e catalisi omogenea:** Teoria dell'intermedio attivo. Ipotesi dello stato pseudo-stazionario. Ricerca del meccanismo di evoluzione di una reazione da dati cinetici sperimentali. Catalisi omogenea, catalisi acida e basica generale e specifica. Reazioni enzimatiche cinetica di Michaelis-Menten. Reazioni complesse, reazioni in parallelo (influenza sulla selettività della temperatura e della concentrazione dei reagenti), reazioni in serie (tempo e concentrazione ottimale). Reazioni autocatalitiche. Cenni sulle reazioni di polimerizzazione.

**Cinetica delle reazioni fluido solido con solido catalitico:** Cinetica delle reazioni di adsorbimento (Langmuir Hinshelwood). Esame dei passi che hanno luogo in un processo catalitico interessante un fluido reagente ed un solido catalitico (diffusione esterna, diffusione nel poro, adsorbimento superficiale del reagente, reazione superficiale, desorbimento del prodotto diffusione del prodotto nel poro, diffusione esterna del prodotto). Velocità di evoluzione della reazione sotto il controllo a) della diffusione esterna b) dell'adsorbimento/desorbimento c) della diffusione nei pori.

**Disattivazione dei catalizzatori:** Disattivazione per sinterizzazione. Disattivazione per cooking o fouling. Disattivazione per avvelenamento. Espressioni cinetiche.

**Reattore batch:** Generalità. Il reattore batch isoterma equazione di prestazione e suo significato geometrico. Sistemi a volume variabile, variazione frazionaria del volume. Reattore batch isoterma nella gestione della sperimentazione cinetica Reattore batch non isoterma (bilancio di energia).

**Reattore a plug-flow (PFR):** Generalità, significato della sigla PFR e significato analitico della scelta. Bilanci di materia in sistemi a volume costante e a volume variabile per la derivazione delle equazioni di prestazione. Concetto di tempo di riempimento e sua differenza dal tempo di reazione. Significato grafico delle equazioni di prestazione dei reattori a plug flow. Bilancio di energia e derivazione della curva  $T$  vs.  $X_i$  per sistemi adiabatici. Bilancio di quantità di moto, equazione di Fanning ed equazione di Ergun. Problemi di verifica e di progettazione di PFR. Reattori a plug flow con riciclo,

	<p>concetto di rapporto di riciclo, differenza fra reattore a plug-flow e sistema reagente, scelta del valore ottimale del rapporto di riciclo, significato grafico della derivazione analitica.</p> <p><b>Reattore a mescolamento perfetto (CSTR):</b> Generalità, significato della sigla CSTR e significato analitico della scelta. Bilanci di materia ed energia per la derivazione delle equazioni di prestazione congruentemente con le semplificazioni del CSTR, equazioni di base, uso delle equazioni di prestazione per il progetto del CSTR in condizioni stazionarie. Analisi delle prestazioni dei CSTR. Gestione di CSTR con sistemi di reazioni complesse selettività ottimale nei casi di network di reazioni in serie ed in parallelo, influenza della temperatura sulla prestazione dei CSTR. Molteplicità degli stati stazionari accensione del reattore, curve calore rimosso vs. temperatura e calore generato vs. temperatura; effetto della efficienza dello scambio del calore con l'ambiente e delle condizioni della corrente uscente sulla curva calore rimosso vs. temperatura; effetto della variazione del tempo di riempimento sulla curva calore generato vs. temperatura. Molteplicità degli stati stazionari soluzioni stabili e soluzioni non stabili, interventi possibili per evitare condizioni di funzionamento non desiderate (accensione del sistema, modifica dello scambio termico). Problemi di verifica.</p> <p><b>Collegamento di reattori ideali:</b> Equazioni di prestazione per CSTR in serie, significato grafico delle equazioni di prestazione per CSTR in serie. Prestazioni dei CSTR in serie al variare del loro numero, confronto serie di CSTR <math>\leftrightarrow</math> PFR. Esame delle serie di reattori a plug-flow significato grafico delle equazioni di prestazione dei PFR in serie. Reattori ideali in parallelo. Equivalenza fra più CSTR in parallelo con un CSTR e di più PFR in parallelo con un PFR Confronto fra serie di CSTR e serie di PFR, conversioni ottenibili in funzione dei tempi di riempimento e dei tempi di riempimento a parità di conversione, confronto fra volumi necessari per ottenere una assegnata conversione e conversioni ottenibili con un fissato volume, scelta ottimale del CSTR. Serie miste di reattori ideali significato grafico delle equazioni di prestazione, confronto delle conversioni ottenibili nelle disposizioni CSTR+PFR e PFR+CSTR. Prestazioni delle strutture con le reazioni autocatalitiche, PFR con riciclo vs. CSTR senza riciclo, PFR con riciclo, reattori multipli scelta ottimale di un network di reattori. Cenni sui problemi economici Reattori discontinui per la gestione di operazioni che evolvono per lunghi periodi.</p> <p><b>Software di ingegneria delle reazioni chimiche (Reactor_Lab).</b> Esercitazione su reattori PFR, Reattori CSTR, Combinazione di CSTR in serie</p>
<b>Propedeuticità</b>	Chimica di base; conoscenza e capacità di applicare i principi di conservazione, analisi matematica; equilibrio chimico: fenomeni di trasporto;
<b>Anno di corso e semestre</b>	2° anno, 2° sem.
<b>Testi di riferimento</b>	Scott Fogler Elements of Chemical Reaction Engineering

	Levenspiel Ingegneria delle Reazioni Chimiche Dispense delle lezioni (disponibili all'indirizzo internet <a href="http://www.unica.it/rcarta">www.unica.it/rcarta</a> )
<b>Modalità di erogazione dell'insegnamento</b>	Tradizionale
<b>Modalità di frequenza</b>	La frequenza è consigliata ma facoltativa
<b>Metodi di valutazione</b>	Prova scritta/prova orale/prove in itinere
<b>Calendario prove d'esame</b>	<a href="https://webstudenti.unica.it/esse3/ListaAppelliOfferta.do;jsessionid=5BB9895F4434F3A7ACF11F5CE763DD3F">https://webstudenti.unica.it/esse3/ListaAppelliOfferta.do;jsessionid=5BB9895F4434F3A7ACF11F5CE763DD3F</a>
<b>Organizzazione della didattica</b>	90 ore, di cui 72 ore di lezione e 18 di esercitazione