

Difusão com Reacção Química Homogénea 1ª ordem

Carla Portugal

cmp@fct.unl.pt

Engenharia Química e Biológica

Fenómenos de Transferência II

Isabel Coelho

imrc@fct.unl.pt

Difusão com Reacção Química Homogénea 1ª ordem

Equação Conservação

$$0 = N_{A_z}|_z S - N_{A_z}|_{z+\Delta z} S + \Delta V r_A$$

$$r_A = -k_1 C_A$$

Dividindo por $S \Delta z$ e $\lim \Delta z \rightarrow 0$

$$\frac{d}{dz} N_{A_z} = -k_1 C_A$$

Difusão com Reacção Química Homogénea

1ª ordem

Equação Cinética

$$N_{Az} = -C \mathcal{D}_{AB} \frac{dx_A}{dz} + x_A (N_{Az} + \cancel{N_{Bz}})$$

$$(1 - x_A) N_{Az} = -C \mathcal{D}_{AB} \frac{dx_A}{dz}$$

Se $x_A \ll 1$ e $C = \text{constante}$

$$N_{Az} = -\mathcal{D}_{AB} \frac{dC_A}{dz}$$

Difusão com Reacção Química Homogénea 1ª ordem

$$\mathcal{D}_{AB} \frac{d^2 C_A}{dz^2} = k_1 C_A$$

$$\frac{d^2 C_A}{dz^2} = \frac{k_1}{\mathcal{D}_{AB}} C_A$$

EDO 2ª ordem

e fazendo

$$\alpha = \sqrt{k_1 / \mathcal{D}_{AB}}$$

$$C_A = A e^{\alpha z} + B e^{-\alpha z}$$

Difusão com Reacção Química Homogénea

1ª ordem

$$z = 0$$

$$C_A = C_{A0}$$

$$z = \delta$$

$$C_A = C_{A\delta} = 0$$

$$\sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$$

$$A = \frac{-C_{A0} e^{-a\delta}}{2 \sinh(a\delta)}$$

$$B = \frac{C_{A0} e^{a\delta}}{2 \sinh(a\delta)}$$

$$C_A = C_{A0} \frac{\sinh[a(\delta - z)]}{\sinh(a\delta)}$$

Difusão com Reacção Química Homogénea

1ª ordem

$$N_{Az}|_{z=0} ?$$

$$N_{Az}|_{z=0} = -D_{AB} \frac{dC_A}{dz} \Big|_{z=0}$$

$$N_{Az}|_{z=0} = \frac{D_{AB} C_{A0} a}{\tanh(a\delta)}$$

$$a\delta / \tanh(a\delta)$$

nº de Hatta = Ha

$$N_{Az}|_{z=0} = \frac{D_{AB} C_{A0}}{\delta} \frac{Ha}{\tanh Ha}$$

$$Ha^2 = \frac{\delta^2 / D_A}{1/k_1} = \frac{t_D}{t_R}$$

Difusão com Reacção Química Homogénea 1ª ordem

Reacção rápida $Ha > 3$

$$\frac{k}{k^o} = Ha$$

$$\frac{Ha}{\tanh Ha} = Ha$$

(The term $\tanh Ha$ is circled in red with an arrow pointing to it from below, indicating it approaches 1.)

$$N_A = k^o Ha c_{A0} = \sqrt{k_1 2} c_{A0}$$

k função
da cinética e
do coef. difusão

Reacção lenta $Ha < 0,2$

$$\frac{Ha}{\tanh Ha} = 1$$

$$N_A = k^o c_{A0}$$

Absorção física

Difusão com Reacção Química Homogénea

1ª ordem

Usa-se uma coluna de absorção gasosa para absorver um composto A de uma corrente de ar à pressão atmosférica usando água. Para soluções diluídas os dados de equilíbrio podem ser obtidos por uma recta: $P_A = 0.5 C_A$, sendo P_A em atm e C_A em mol/m³. Num determinado ponto da coluna a percentagem molar de A no ar é 7% e a sua fracção molar no líquido é nula. Os coeficientes individuais de transferência de massa para cada uma das fases são: $k_G = 0.3$ mol/(m² h atm) e $k_L = 0.25$ m/h.

- Determine o coeficiente global de transferência de massa K_L .
- Determine o fluxo molar e as composições interfaciais no referido ponto da coluna.
- Calcule a percentagem de resistência exercida por cada uma das fases.
- Determine o coeficiente de transferência de massa na fase líquida no caso de ocorrer uma reacção química irreversível de 1ª ordem com uma constante de velocidade igual a 30 s⁻¹. Será válido considerar que a reacção é rápida? ($D_{A-H_2O} = 2.1 \times 10^{-5}$ cm²/s).

$$a) \quad N_A = k_L (c_A^* - c_A)$$

$$N_A = k_2 (c_{Ai} - c_A)$$

$$N_A = k_G (p_A - p_{Ai}) = k_G H (c_A^* - c_{Ai})$$

$$(c_A^* - c_A) = (c_A^* - c_{Ai}) + (c_{Ai} - c_A)$$

$$\boxed{\frac{1}{k_L} = \frac{1}{H k_G} + \frac{1}{k_2}}$$

$$\frac{1}{k_L} = \frac{1}{0.5 \times 0.3} + \frac{1}{0.25}$$

$$k_L = 0.094 \text{ m/h}$$

b)

$$N_A = k_L (c_A^* - c_A)$$

$$c_A = 0$$

$$c_A^* = \frac{P_A}{0.5} = \frac{y_A P}{0.5} = \frac{0.07 * 1}{0.5} = 0.14 \text{ mol/m}^3$$

$$N_A = 0.094 (0.14 - 0) = 1.32 \times 10^{-2} \frac{\text{mol}}{\text{m}^3} \cdot \frac{\text{m}}{\text{s}} \quad \text{mol/m}^2 \text{h}$$

$$1.32 \times 10^{-2} = 0.25 (c_{A_i} - 0) \Rightarrow c_{A_i} = 5.26 \times 10^{-2} \text{ mol/m}^3$$

$$P_{A_i} = 0.5 * 5.26 \times 10^{-2} = 2.63 \times 10^{-2} \text{ atm}$$

$$1.32 \times 10^{-2} = 0.3 (0.07 - P_{A_i}) \Rightarrow P_{A_i} = 2.6 \times 10^{-2} \text{ atm}$$

c) % Favre liquid: $\frac{\frac{1}{k_L}}{\frac{1}{k_L}} = \frac{k_L}{k_L} = \frac{0.024}{0.25} \times 100 = 37.6 \%$

$\frac{\frac{1}{h k_G}}{\frac{1}{k_L}} = \frac{k_L}{h k_G} = \frac{0.094}{0.5 + 0.3} = 62.7 \%$

$$k_L^0 = \frac{D}{\delta}$$

$$\delta = \frac{2.1 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}}{\frac{0.25}{3600} \text{ m/s}}$$

$$\delta = 3.0 \times 10^{-5} \text{ m}$$

$$Ha = \sqrt{\frac{k_1}{D}} \delta$$

$$Ha = \sqrt{\frac{30}{2.1 \times 10^{-9}}} \times 3 \times 10^{-5}$$

$$Ha \approx 3.6$$

$$\frac{k}{k^0} = Ha$$

$$k_1 = 30 \text{ s}^{-1} \Rightarrow k_L = 0.90 \text{ m/h}$$