FT II – Test 2020.1 Resolution

Felipe B. Pinto 61387 – MIEQB

20 de julho de 2024

Conteúdo

Questão 1

Uma partícula de carvão queima numa atmosfera gasosa (21 % de percentagem molar em oxigénio) a $1200\,\mathrm{K}$, à pressão atmosférica ($1.013\,\mathrm{E}^5\,\mathrm{Pa}$). O processo é limitado pela difusão de O_2 em sentido oposto ao do O_2 que se forma, através de uma reacção instantânea com o carvão à sua superfície. O carvão, constituído por esferas com diâmetro de $0.2\,\mathrm{mm}$, consiste em carbono puro com uma massa específica de $1280\,\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^{-3}$.

$$C_{(s)} + O_{2(g)} \longrightarrow CO_{2(g)}$$

Considere

$$\mathscr{D}_{O_2,\text{mist gas}} = 1 \,\mathrm{E}^{-4} \,\mathrm{m}^2/\mathrm{s};$$
 $R = 8.206 \,\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{Pa/mol} \cdot \mathrm{K}$

Nota: Nas alíneas seguintes, de b) a e) assuma que o processo de difusão ocorre em estado estacionário.

Q1 a.

Faça uma estimativa do coeficiente de difusão do oxigénio no ar se a pressão for o dobro da pressão atmosférica e a temperatura for $1500\,\mathrm{K}$.

$$\begin{cases} A: & O_2 \\ B: & \text{Mist gasosa} \end{cases}$$

$$\mathscr{D}_{A,B,1500 \text{ K},2 P_1 \text{ atm}} = \mathscr{D}_{A,B,1200 \text{ K},P_1 \text{ atm}} \frac{P_1}{P_2} \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^{3/2} =$$

$$= 1 \text{ E}^{-4} \frac{P_1}{2 P_1} \left(\frac{1500}{1200}\right)^{3/2} \cong 6.988 \text{ E}^{-5} \text{ m/s}$$

Q1 b.

Voltando às condições referidas no enunciado, faça um esquema do processo que está a ocorrer, apresente a respectiva equação de conservação de massa e explicite as condições fronteira que considerou.

$$egin{cases} A: \mathsf{O}_2 \ B: \mathsf{CO} \ N_{\mathsf{CO}} = -N\mathsf{O}_2 \quad \text{Reação Instantanea} \end{cases}$$

$$N_{A,r} = -\frac{C \mathcal{D}_{A,B}}{1 - \Theta y_A} \frac{\mathrm{d}y_A}{\mathrm{d}r};$$

$$\Theta = 1 + N_B/N_A = 1 - N_A/N_A = 0;$$

$$\therefore N_{A,r} = -C\,\mathcal{D}_{A,B}\,\frac{\mathrm{d}y_A}{\mathrm{d}r} \quad \begin{cases} r_0 = R \\ r_1 = \infty & \text{(Atmosfera)} \\ y_{A,0} = 0 & \text{(Reação instantanea)} \\ y_{A,1} = 0.21 & \text{(\%}_{O_2} \text{ na atmosfera)} \end{cases}$$

Q1 c.

Com base na sua resposta à alínea b) deduza uma expressão para a velocidade de difusão do oxigénio.

$$Q = -N_{A,r} S_r = C \mathcal{D}_{A,B} \frac{\mathrm{d}y_A}{\mathrm{d}r} (4 \pi r^2) \implies$$

$$\implies \int_{r_0}^{\infty} Q \frac{\mathrm{d}r}{r^2} = Q \int_{r_0}^{\infty} \frac{\mathrm{d}r}{r^2} = -Q (0 - r_0^{-1}) =$$

$$= \int_{y_{A,r_0}}^{y_{A,\infty}} C \mathcal{D}_{A,B} 4 \pi \, \mathrm{d}y_r = C \mathcal{D}_{A,B} 4 \pi \int_0^{.21} \mathrm{d}y_{A,r} =$$

$$= \left(\frac{P}{RT}\right) \mathcal{D}_{A,B} 4 \pi 0.21 \implies$$

$$\implies Q = \frac{P \mathcal{D}_{A,B} 4 \pi 0.21 r_1}{RT}$$

Q1 d.

Calcule o valor da velocidade de difusão do oxigénio.

$$Q = \frac{P \mathcal{D}_{A,B} 4 \pi 0.21 r_1}{R T} =$$

$$= \frac{1.013 E^5 * (1 E^{-4}) * 4 \pi * 0.21 * 0.1 E^{-3}}{8.314 * 1200} \cong$$

$$\cong 2.679 E^{-7} \text{ mol/s}$$

Q1 e.

Quanto tempo demora uma partícula de carvão a arder completamente?

$$-C_{A,L} \frac{dV}{dt} = -C_{A,L} \frac{d(4\pi r^3/3)}{dt} = -C_{A,L} 4\pi r^2 \frac{dr}{dt} = Q = \frac{P \mathcal{D}_{A,B} 4\pi 0.21 r}{RT} \implies$$

$$\implies \int_{r_0}^{r_1} -C_{A,L} 4\pi r dr = -C_{A,L} 4\pi \int_r^0 r dr = -C_{A,L} 4\pi (0^2 - r^2)/2 =$$

$$= \int_0^t \frac{P \mathcal{D}_{A,B} 4\pi 0.21}{RT} dt = \frac{P \mathcal{D}_{A,B} 4\pi 0.21}{RT} \int_0^t dt = \frac{P \mathcal{D}_{A,B} 4\pi 0.21}{RT} t \implies$$

$$\implies t = \frac{C_{A,L} r^2 RT}{P \mathcal{D}_{A,B} 2*0.21} = \frac{(1280 E^3/12)*(0.1 E^{-3})^2 *8.314*1200}{(1.013 E^5)*1 E^{-4}*2*0.21} \cong$$

$$\cong 2.501 s$$

Q1 f.

Assuma agora que o processo de difusão ocorre em estado pseudo-estacionário. Nestas circunstâncias, quanto tempo demora uma partícula de carvão a arder completamente. Compare com o resultado obtido na alínea e) e comente.

$$\begin{split} Q &= \frac{N}{t} \implies \\ &\implies t = \frac{N}{Q} = Q^{-1} \frac{V \, \rho}{M} = \frac{(4 \, \pi \, r^3/3) \, \rho}{M \, Q} \cong \frac{(4 * \pi \, (0.1 \, \mathrm{E}^{-3})^3/3) \, 1280}{12 \, \mathrm{E}^{-3} \, 2.679 \, \mathrm{E}^{-7}} \cong \\ &\cong 1.668 \, \mathrm{s} \end{split}$$