FT II – Test 2020.1 Resolution

Felipe B. Pinto 61387 – MIEQB

25 de junho 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 CO_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 $1280\,\mathrm{kg}\,\mathrm{m}^{-3}$.

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

Considere

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

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 presssão atmosférica e a temperatura for 1500 K.

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

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

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

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.

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

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

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

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

Q1 c.

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

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

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

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

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

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

Q1 d.

Calcule o valor da velocidade de difusão do oxigénio.

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

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

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

Q1 e.

Quanto tempo demora uma partícula de carvão a arder completamente?

$$-C_{A,L} \frac{dV}{dt} = -C_{A,L} \frac{d(4 \pi r^3/3)}{dt} = -C_{A,L} 4 \pi r^2 \frac{dr}{dt} =$$

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

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

$$= -C_{A,L} 4 \pi (0^2 - r^2)/2 =$$

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

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

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

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.

$$Q = \frac{N}{t} \implies$$

$$\implies t = \frac{N}{Q} = Q^{-1} \frac{V \rho}{M} = \frac{(4 \pi r^3/3) \rho}{M Q} \cong \frac{(4 * \pi (0.1 E^{-3})^3/3) 1280}{12 E^{-3} 2.679 E^{-7}} \cong$$

$$\cong 1.668 s$$