

Difusão com Reacção Química Homogénea

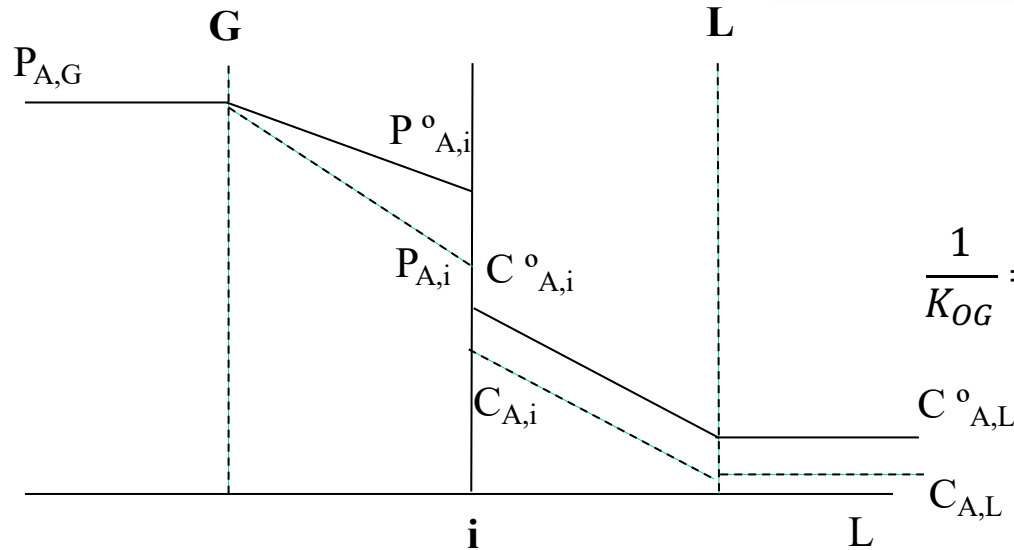
Carla Portugal

cmp@fct.unl.pt

Engenharia Química e Biológica

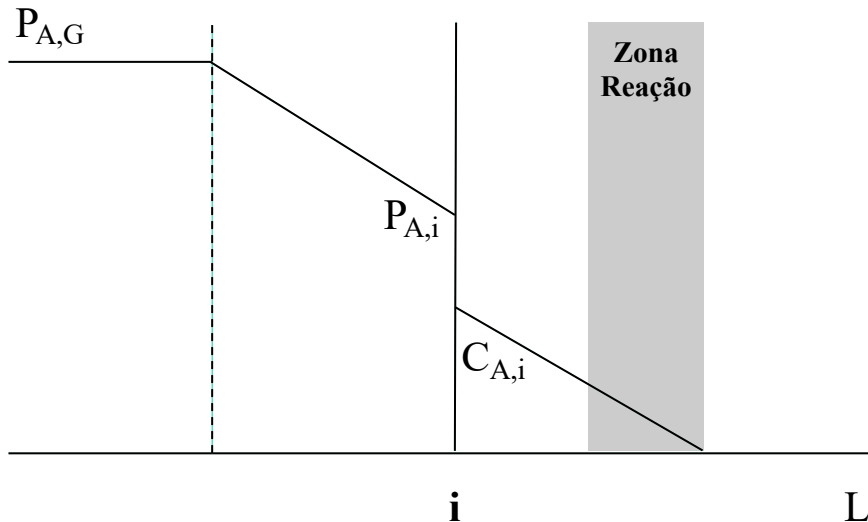
Fenómenos de Transferência II

Difusão com Reacção Química Homogénea



$Ha \leq 0.2$ – *reacção lenta*

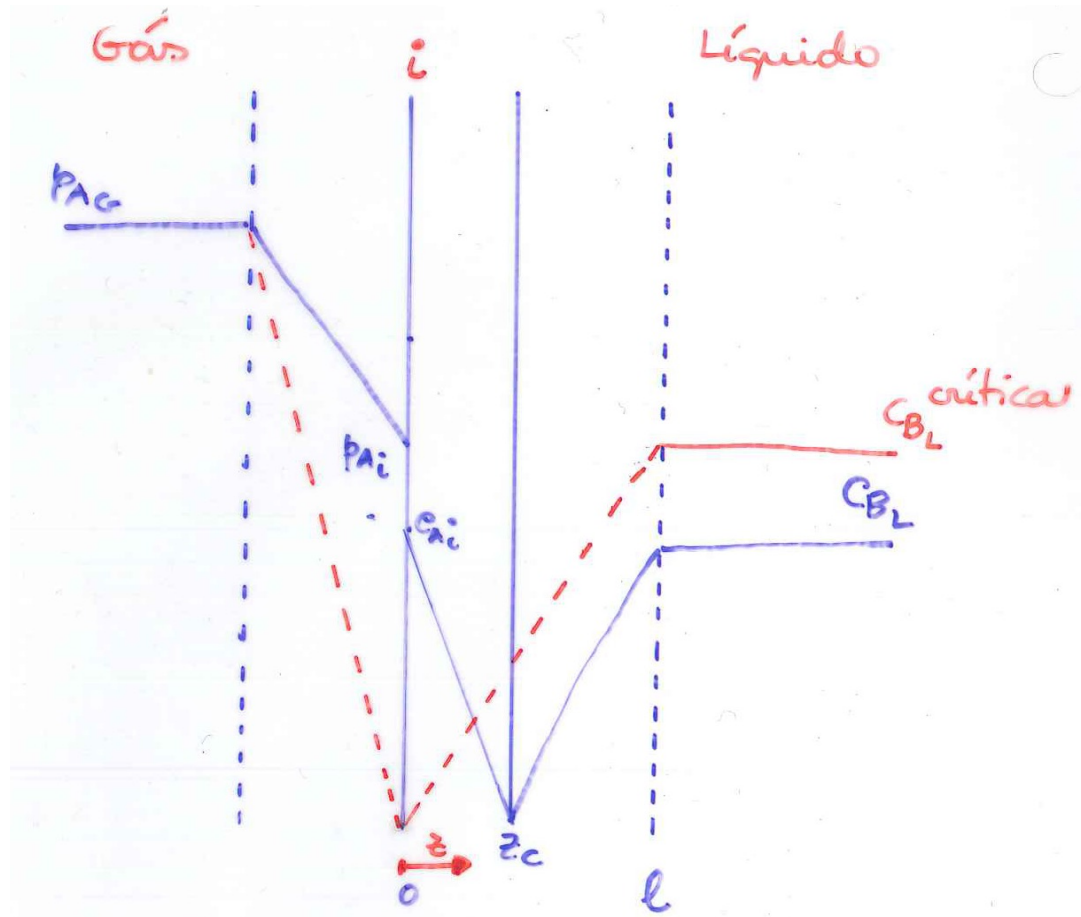
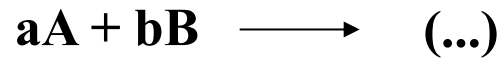
$$\frac{1}{K_{OG}} = \frac{1}{k_G^o} + \frac{H \tanh(Ha)}{k_L^o Ha} \xrightarrow{\frac{Ha}{\tanh(Ha)} \cong 1} \frac{1}{K_{OG}} = \frac{1}{k_G^o} + \frac{H}{k_L^o}$$



$Ha > 3$ – *reacção rápida*

$$\frac{1}{K_{OG}} = \frac{1}{k_G^o} + \frac{H \tanh(Ha)}{k_L^o Ha} \xrightarrow{\tanh(Ha) \rightarrow 1} \frac{1}{K_{OG}} = \frac{1}{k_G^o} + \frac{H}{k_L^o Ha}$$

Difusão com Reacção Química Homogénea



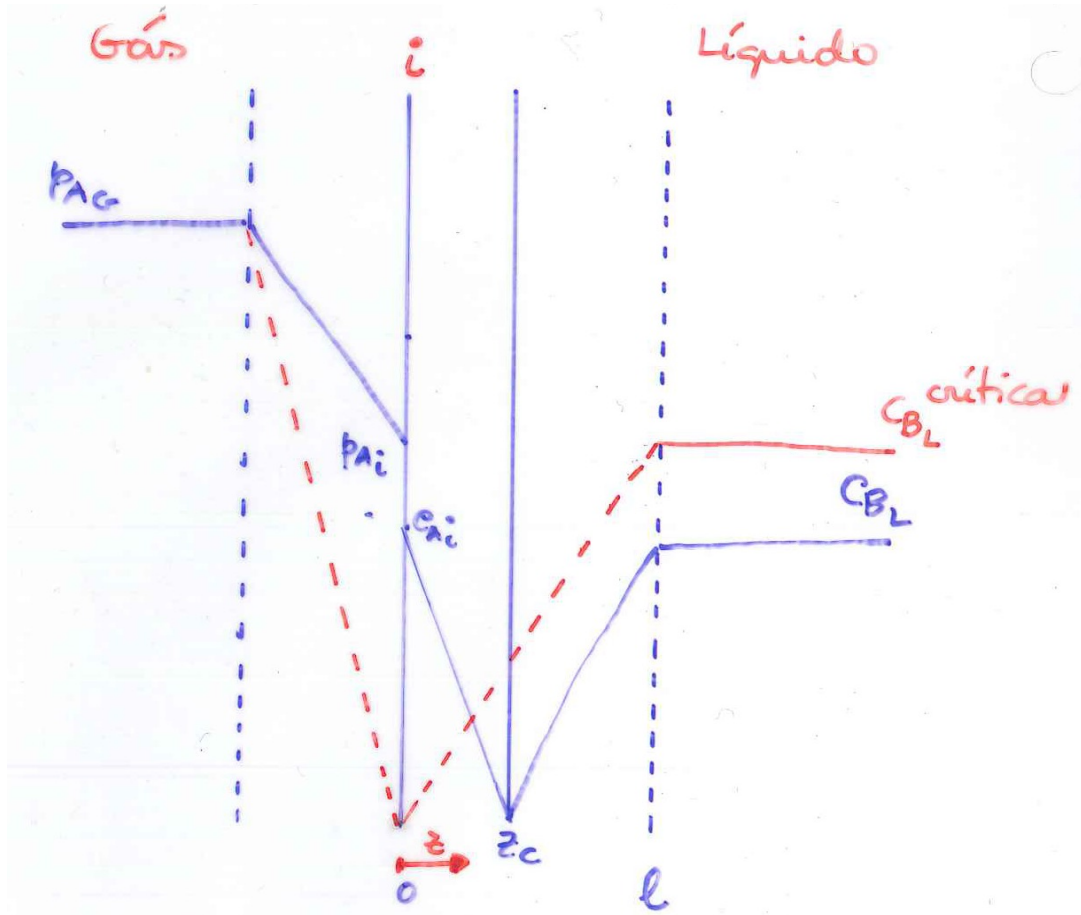
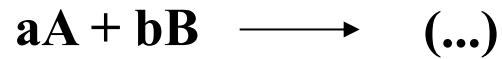
Reacção instantânea

Região de reacção



Plano de reacção

Difusão com Reacção Química Homogénea



Concentração Crítica, $C'_{B,L}$ depende de:

- Quantidade de A existente na fase gasosa
- Estequiometria da reacção
- Coeficiente de transferência de massa individuais da fase líquida, k_L e gasosa, k_G
- Quantidade de B existente na fase líquida

Se $C_{B,L}$ for suficientemente grande a reacção ocorre na interface

Processo controlado na fase gasosa

$$\frac{1}{K_{oG}} = \frac{1}{k_G^o} + \frac{m \tanh(Ha)}{k_L^o Ha}$$

$$\frac{1}{k_G^o} \gg \frac{1}{k_L^o}$$



$$\frac{1}{K_{oG}} = \frac{1}{k_G^o}$$

Difusão com Reacção Química Homogénea

Concentração Crítica, $C'_{B,L}$

$$1. C_{B,L} \geq C'_{B,L}$$

Reacção de A ocorre na interface

Fluxo de A

$$N_A = k_G^o (P_{A,G}^o - P_{A,i})$$

$P_{A,i}$ é nulo na interface

$$N_A = k_G^o P_{A,G}^o$$

Fluxo de B

$$N_B = -\frac{D_B}{l} C'_{B,L}$$

tendo em conta que $k_L^o = \frac{D_A}{l}$ vem

$$N_B = -\frac{D_B}{D_A} k_L^o C'_{B,L}$$

Relação estequiométrica da reacção e direcção do fluxo

$$\frac{1}{a} N_A = -\frac{1}{b} N_B$$

$$N_B = -\frac{b}{a} N_A$$

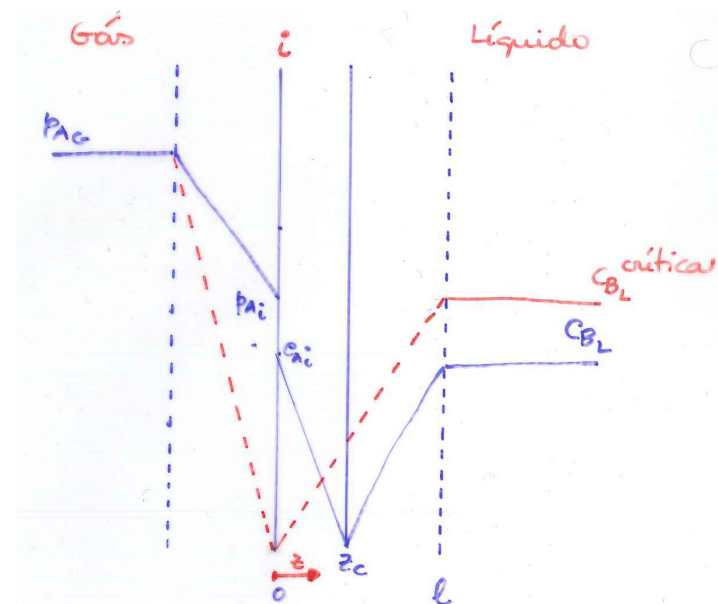
$$\frac{b}{a} N_A = \frac{D_B}{D_A} k_L^o C'_{B,L}$$

Usando (1), vem

$$\frac{b}{a} k_G^o P_{A,G}^o = \frac{D_B}{D_A} k_L^o C'_{B,L}$$

Pelo que,

$$C'_{B,L} = \frac{b D_A k_G^o}{a D_B k_L^o} P_{A,G}^o$$



Difusão com Reacção Química Homogénea

2. $C_{B,L} < C'_{B,L}$

Reacção de A ocorre na no seio da fase líquida

Fluxo de A

$$N_A = k_G^o (P_{A,G}^o - P_{A,i})$$

$P_{A,i}$ não é nulo na interface

$$N_A = k_L^o (C_{A,i} - C_{A,L})$$

$$N_A = \frac{D_A}{Z_c} (C_{A,i} - \cancel{C_{A,L}})$$

$C_{A,L}$ A é totalmente consumido no plano de reacção, Z_c

$$N_A = \frac{D_A}{Z_c} C_{A,i}$$

$$N_A = \frac{k_L^o l}{Z_c} C_{A,i}$$

$$Z_c = \frac{k_L^o l}{N_A} C_{A,i}$$

Fluxo de B

$$N_B = -\frac{D_B}{l - Z_c} C_{B,l}$$

$$N_B = -\frac{D_B l}{l(l - Z_c)} C_{B,l} \quad N_B = -\frac{D_B l}{\frac{D_A}{k_L^o} (l - Z_c)} C_{B,l}$$

$$N_B = -\frac{D_B l}{\frac{D_A}{k_L^o} l (1 - \frac{Z_c}{l})} C_{B,l}$$

$$N_B = -\frac{D_B k_L^o}{\frac{k_L^o l}{N_A} C_{A,i}} C_{B,l} \quad D_A (1 - \frac{\frac{k_L^o l}{N_A} C_{A,i}}{l})$$

$$N_B = -\frac{D_B k_L^o}{D_A (1 - \frac{k_L^o l}{N_A} C_{A,i})} C_{B,l}$$

Difusão com Reacção Química Homogénea

Fluxo de B (cont.)
$$N_B = - \frac{D_B k_L^o}{D_A \left(1 - \frac{k_L^o}{N_A} C_{A,i}\right)} C_{B,l}$$

Relação estequiométrica da reacção e direcção do fluxo

$$N_A = - \frac{a}{b} N_B$$

$$N_B = - \frac{D_B k_L^o}{D_A \left(1 + \frac{k_L^o}{\frac{a}{b} N_B} C_{A,i}\right)} C_{B,l} \qquad N_B = - \frac{D_B k_L^o \frac{a}{b} N_B}{D_A \left(\frac{a}{b} N_B + k_L^o C_{A,i}\right)} C_{B,l}$$

$$- \frac{b}{a} N_A = - \frac{D_B k_L^o \frac{a}{b} N_B}{D_A \left(\frac{a}{b} N_B + k_L^o C_{A,i}\right)} C_{B,l} \qquad N_A = \frac{a}{b} \frac{D_B}{D_A} k_L^o C_{B,l} + k_L^o C_{A,i}$$

$$N_A = k_L^o \left(\frac{a}{b} \frac{D_B}{D_A} C_{B,l} + C_{A,i} \right)$$

$$N_A = k_L^o \left(1 + \frac{a}{b} \frac{D_B}{D_A} \frac{C_{B,l}}{C_{A,i}} \right) C_{A,i}$$

Pelo que,

$$k_L = k_L^o \left(1 + \frac{a}{b} \frac{D_B}{D_A} \frac{C_{B,l}}{C_{A,i}} \right)$$

Difusão com Reacção Química Homogénea

Experiências de absorção de SO_2 realizadas numa coluna de parede molhada permitiram obter o valor do coeficiente global de transferência de massa $K_G = 0.03 \text{ mol}/(\text{h m}^2 \text{ atm})$. Num dado ponto da coluna o gás contém 10% de SO_2 e a concentração de SO_2 na fase líquida é 10g/L.

A coluna opera a 25 C e à pressão atmosférica e 60% da resistência total é exercida pela fase gasosa. A linha de equilíbrio é descrita pela seguinte equação $y^* = 10 x$.

- a) Determine o fluxo molar de A nesse ponto do equipamento.
- b) Calcule os coeficientes individuais de transferência de massa da fase gasosa e da fase líquida, k_y e k_x .
- c) Calcule as composições interfaciais.
- d) Se em vez de água usar soluções de NaOH calcule a concentração crítica. O que acontece se usar valores inferiores a essa concentração?

$$\begin{array}{lll} M_{\text{SO}_2} = 64 \text{ g/mol} & M_{\text{H}_2\text{O}} = 18 \text{ g/mol} & \rho = 1000 \text{ kg/m}^3 \\ D_{\text{NaOH}} = 2.1 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s} & & D_{\text{SO}_2} = 1.9 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s} \\ & \text{SO}_2 + 2 \text{ NaOH} \rightarrow \text{Na}_2 \text{ SO}_3 + \text{H}_2\text{O} & \end{array}$$