

FT II – Difusão com reações químicas

Felipe B. Pinto 61387 – MIEQB

24 de julho de 2024

Conteúdo

1	Sistemas unidimensionais associados com reação química	2	Exemplo 2	4
			Exemplo 3	5
	Exemplo 1	3		

1 Sistemas unidimensionais associados com reação química

Sistema homogêneo

Quando a reação ocorre uniformemente em uma única fase

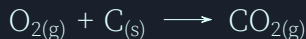
Reações Homogêneas A frequência de aparecimento da espécie A por uma reação homogênea se dá pela equação geral diferencial:

$$\nabla N_A + \frac{\partial C_A}{\partial t} - R_A = 0$$

R_A é a frequência em que A varia pela reação química, ex. em uma reação de ordem 1:
 $R_A = -k_1 C_A$

Reações Heterogêneas Geralmente envolvem uma camada de fluido onde A está dissolvido e uma camada sólida onde ocorre a reação, como a frequência de aparecimento fica dependente da área de contato temos que os fluxos dos componentes são dependentes um dos outros de acordo com a reação

Exemplo



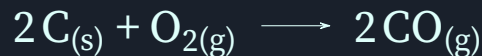
De onde tiramos que $N_{\text{O}_2} = -N_{\text{CO}_2}$

Sistema Heterogêneo

Quando a reação ocorre na fronteira entre duas fases

Exemplo 1

A seguinte reação queima uma esfera de carbono de raio r com $O_{2(g)}$ puro, encontre o a equação para a velocidade de difusão molar do oxigenio



$$Q_{O_2} = W_{O_2}$$

Reações instantâneas: $y_{O_2}|_R = 0$ completamente absorvido pela superfície

Reações O_2 Puro: $y_{O_2}|\infty = 1$

Resposta

$$\begin{aligned} Q_{O_2} &= S N_{O_2} = (4 \pi r^2) \left(\frac{C_{A,L} \mathcal{D}_{A,B}}{\Theta \eta_d r} \ln \frac{1 - \Theta y_{A,2}}{1 - \Theta y_{A,1}} \right) = \\ &= \frac{4 \pi r^2 C_{A,L} \mathcal{D}_{A,B}}{(-1) * 1 r} \ln \frac{1 - (-1) (1)}{1 - (-1) (0)} = \\ &= -4 \pi r C_{A,L} \mathcal{D}_{A,B} \ln 2; \end{aligned}$$

$$\begin{cases} R_1 = r; & y_1 = 0 \\ R_2 \rightarrow \infty; & y_2 = 1 \end{cases};$$

$$\eta_{d,esfera} = 1 - R_1/R_2 \rightarrow 1;$$

$$\Theta = 1 + N_{CO}/N_{O_2} = 1 + (-2 N_{O_2})/N_{O_2} = -1$$

Exemplo 2

Obtenha uma expressão para o fluxo molar de A quando numa superfície catalítica ocorre a reacção instantânea $nA \longrightarrow A_n$. A difusão de A dá-se através de uma camada de espessura l e a fracção molar de A no exterior dessa camada é $y_{A,0}$.

Resposta

$$\begin{aligned} N_{A,z} &= \frac{C_A \mathcal{D}_{A,B}}{\Theta \eta_d l} \ln \frac{1 - \Theta y_{A,1}}{1 - \Theta y_{A,0}} = \\ &= \frac{\frac{P}{RT} \mathcal{D}_{A,B}}{(1 - 1/n) l} \ln \frac{1 - (1 - 1/n) (0)}{1 - (1 - 1/n) y_{A,0}} = \\ &= \frac{P \mathcal{D}_{A,B}}{RT (1 - 1/n) l} \ln \frac{1}{1 - (1 - 1/n) y_{A,0}}; \end{aligned}$$

$$\begin{cases} z_0 = 0; & y_{A,0} \\ z_1 = l; & y_{A,1} = 0 \end{cases};$$

$$\eta_{d,\text{plano}} = 1;$$

$$\Theta = 1 + N_{A_n}/N_A = 1 + (-N_A/n)/N_A = 1 - 1/n$$

Exemplo 3

Um cilindro de aço, cuja superfície está revestida por um catalisador, é usado para promover a reacção de dimerização de um composto gasoso A ($2 A \longrightarrow A_2$), à pressão atmosférica e à temperatura de 50°C . Este composto, com uma pressão parcial de 0.39 atm , difunde-se estacionariamente até à superfície do cilindro, sendo a velocidade de difusão limitada pela difusão de A através de um filme gasoso com 6 mm de espessura.

$\bullet\ D_A = 2.5\text{ E}^{-5}\text{ m}^2/\text{s}$

$\bullet\ d = 5\text{ cm}$

$\bullet\ L = 10\text{ cm}$

E3 a)

Determine a velocidade de difusão de A para o caso em que a reacção ocorre somente na superfície lateral exterior do cilindro.

Resposta

$$\begin{aligned} Q_{A,R} &= S\ N_{A,R} = (2\ \pi\ r_0\ L)\ \left(\frac{C_A\ \mathscr{D}_{A,B}}{\Theta\ \eta_d\ r_0}\ln\frac{1-\Theta\ y_{A,1}}{1-\Theta\ y_{A,0}}\right) = \\ &= \frac{2\ \pi\ L\ \frac{P}{RT}\ \mathscr{D}_{A,B}}{(1/2)\ \left(\ln\frac{r_1}{r_0}\right)}\ln\frac{1-(1/2)\ y_{A,1}}{1-(1/2)\ (0)} = \\ &= \frac{4\ \pi\ L\ P\ \mathscr{D}_{A,B}}{R\ T\ \ln\frac{r_1}{r_0}}\ln(1-y_{A,1}/2) \cong \\ &\cong \frac{4\ \pi\ 10\text{ E}^{-2}\ * 1\ * 2.5\text{ E}^{-5}}{8.206\text{ E}^{-5}\ * (50 + 273.15)\ * \ln\frac{2.5\text{ E}^{-2}+6\text{ E}^{-3}}{2.5\text{ E}^{-2}}}\ln(1-0.39/2) \cong \\ &\cong -1.195\text{ E}^{-3}\text{ mol/m}^2\text{ s}; \end{aligned}$$

Condições de fronteira do fluxo :

$$\begin{cases} r_0 = 2.5\text{ E}^{-2}; & y_{A,0} = 0 \\ r_1 = 2.5\text{ E}^{-2} + 6\text{ E}^{-3}; & y_{A,1} = P_A/P = 0.39/1 \end{cases};$$

$$\Theta = 1 + N_{A_2}/N_A = 1 + (-N_A/2)/N_A = 1/2;$$

$$\eta_{d,\text{Cilindro}} = \ln\frac{r_1}{r_0}$$

E3 b)

Calcule a velocidade de difusão de A para o caso em que a reacção ocorre somente numa das bases do cilindro.

Resposta

$$\begin{aligned} Q_{A,z} &= S\ N_{A,z} = (\pi\ r_0^2)\ \left(\frac{C_A\ \mathscr{D}_{A,B}}{\Theta\ \eta_d\ l}\ln\frac{1-\Theta\ y_{A,1}}{1-\Theta\ y_{A,0}}\right) = \\ &= \frac{\pi\ r_0^2\ \frac{P}{RT}\ \mathscr{D}_{A,B}}{(1/2)\ 1\ l}\ln\frac{1-(1/2)\ y_{A,1}}{1-(1/2)\ (0)} = \\ &= \frac{2\ \pi\ r_0^2\ P\ \mathscr{D}_{A,B}}{R\ T\ l}\ln(1-y_{A,1}/2) \cong \\ &\cong \frac{2\ \pi\ * (2.5\text{ E}^{-2})^2\ * 1\ * 2.5\text{ E}^{-5}}{8.206\text{ E}^{-5}\ * (50 + 273.15)\ * 6\text{ E}^{-3}}\ln(1-0.39/2) \cong \\ &\cong -1.338\text{ E}^{-4}\text{ mol/m}^2\text{ s}; \end{aligned}$$

Condições de fronteira

$$\begin{cases} z_0 = 0; & y_{A,0} = 0 \\ z_1 = 6\text{ E}^{-3}; & y_{A,1} = 0.39 \end{cases};$$

$$\eta_{d,\text{plano}} = 1;$$

$$\Theta = 1/2$$