FT II – Reação Química Heterogénea

Felipe B. Pinto 61387 – MIEQB

31 de maio de 2024

Conteúdo

Exemplo 1

$$2\,C + O_2 \longrightarrow 2\,CO$$

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

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

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

Resposta

$$Q_{O_2} = 4\,\pi\,r^2\,N_{O_2};$$

Fluxo Molar O_2:

$$N_{O_2} = y_{O_2}\,(N_{O_2} + N_{CO}) - C\,\mathscr{D}\,\frac{\mathrm{d}y_{O_2}}{\mathrm{d}r};$$

Fluxo Molar CO:

$$\frac{N_{CO}}{2} = \frac{N_{O_2}}{-1} \implies N_{CO} = -2\,N_{O_2} \implies$$

$$\implies \int_R^\infty N_{O_2}\,\mathrm{d}r = \int_R^\infty \frac{Q_{O_2}}{4\,\pi\,r^2}\,\mathrm{d}r = \frac{Q_{O_2}}{4\,\pi}\int_R^\infty \frac{\mathrm{d}r}{r^2} =$$
$$= -\frac{Q_{O_2}}{4\,\pi}\,\Delta(1/r)\,\Big|_R^\infty = \frac{Q_{O_2}}{4\,\pi\,R} =$$

$$= \int_{y_{O_2|R}}^{y_{O_2|\infty}} -C\,\mathscr{D}\,\frac{\mathrm{d}y_{O_2}}{y_{O_2}+1} = -C\,\mathscr{D}\int_0^1 \frac{\mathrm{d}y_{O_2}+1}{y_{O_2}+1} = -C\,\mathscr{D}\,\Delta\left(\ln\left(y_{O_2}+1\right)\right)\Big|_0^1$$
$$= -C\,\mathscr{D}\ln\frac{1+1}{0+1} = -C\,\mathscr{D}\ln 2 \implies$$

$$\implies Q_{O_2} = -4\,\pi\,R\,C\,\mathscr{D}\ln 2$$

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

Fluxo em geometria plana:

$Q_{A,z} = N_{A,z};$

Fluxo Molar:

$$N_A = -C\,\mathscr{D}\,\frac{\mathrm{d}y_A}{\mathrm{d}z} + y_A\,(N_A + N_{A_n}) = -C\,\mathscr{D}\,\frac{\mathrm{d}y_A}{\mathrm{d}z} + y_A\,(N_A + N_A/n) =$$

$$= -C\,\mathscr{D}\,\frac{\mathrm{d}y_A}{\mathrm{d}z} + y_A\,N_A\,(1 - 1/n) \implies$$

$$\implies \int_0^l N_A\,\mathrm{d}z = N_A \int_0^l \mathrm{d}z = N_A\,l =$$

$$= \int_0^{y_{A,0}} -C\,\mathscr{D}\,\frac{\mathrm{d}y_A}{1 - y_A\,(1-1/n)} = -C\,\mathscr{D}\int_0^{y_{A,0}} \frac{\mathrm{d}y_A}{1 - y_A\,(1-1/n)} =$$

$$= \frac{-C\,\mathscr{D}}{(1-1/n)}\int_0^{y_{A,0}} \frac{\mathrm{d}(1 - y_A\,(1-1/n))}{1 - y_A\,(1-1/n)} = \frac{-C\,\mathscr{D}}{(1-1/n)}\ln\left(1 - y_{A,0}(1-1/n)\right)$$

$$\implies N_A = \frac{-C\,\mathscr{D}}{l\,(1-1/n)}\ln\left(1 - y_{A,0}(1-1/n)\right)$$

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 ($2\,\mathrm{A} \longrightarrow \mathrm{A_2}$), à pressão atmosférica e à temperatura de $50\,°\mathrm{C}$. Este composto, com uma pressão parcial de $0.39\,\mathrm{atm}$, difunde-se estacionariamente até à superfície do cilindro, sendo a velocidade de difusão limitada pela difusão de A através de um filme gasoso com $6\,\mathrm{mm}$ de espessura.

- $D_A = 2.5\,\mathrm{E}^{-5}\,\mathrm{m^2/s}$
- $d = 5\,\mathrm{cm}$
- $L = 10\,\mathrm{cm}$

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

Fluxo em geometria cilindrica:
$Q_A = N_{A,R}\,2\,\pi\,r\,L;$

Fluxo molar:

$$N_{A,R} = -C\,\mathscr{D}\,\frac{\mathrm{d}y_A}{\mathrm{d}r} + y_A\,(N_{A,R} + N_{A_2,R}) =$$
$$= -C\,\mathscr{D}\,\frac{\mathrm{d}y_A}{\mathrm{d}r} + y_A\,(N_{A,R} - (1/2)\,N_{A,R}) =$$
$$= -C\,\mathscr{D}\,\frac{\mathrm{d}y_A}{\mathrm{d}r} + y_A\,N_{A,R}/2 \implies$$

$$\implies \int_R^{R+\delta} N_{A,R}\,\mathrm{d}r = \int_R^{R+\delta} \frac{Q_{A,R}}{2\,\pi\,r\,L}\,\mathrm{d}r = \frac{Q_{A,R}}{2\,\pi\,L}\int_R^{R+\delta}\frac{\mathrm{d}r}{r} = \frac{Q_{A,R}}{2\,\pi\,L}\ln$$

$$= \int_0^{y_{A,0}} -C\,\mathscr{D}\,\frac{\mathrm{d}y_A}{1-y_A/2} = \frac{C\,\mathscr{D}}{1/2}\int_0^{y_{A,0}}\frac{\mathrm{d}(1-y_A/2)}{1-y_A/2} = \frac{C\,\mathscr{D}}{1/2}\ln\frac{1-y_{A,0}/}{1-0}$$
$$= \frac{C\,\mathscr{D}}{1/2}\ln\frac{1-p_{A,0}/2\,P}{1-0} \implies$$

$$\implies Q_{A,R} = \frac{\frac{P}{RT}\,\mathscr{D}\,2\,\pi\,L}{(1/2)\ln\frac{R+\delta}{R}}\ln(1-p_{A,0}/2\,P) =$$
$$= \frac{\frac{1}{82.057*323.15}*2.5\,\mathrm{E}^{-1}*2*\pi*10}{(1/2)\ln\frac{2.5+0.6}{2.5}}\ln(1-0.39/2*1) \cong -1.19\,\mathrm{E}^{-3}\,\mathrm{mol}$$

E3 b)

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

Resposta

Fluxo em geometria plana:
$Q_{A,z} = N_{A,z};$

Fluxo molar:

$$N_{A,z} = \frac{C\,\mathscr{D}}{\delta/2}\ln(1-y_{A,0}/2) = \frac{C\,\mathscr{D}}{\delta/2}\ln(1-p_{A,0}/2*P) =$$
$$= \frac{\frac{1}{82.057*323.15}*0.25}{0.6/2}\ln(1-0.39/2*1) \cong -6.817\,\mathrm{E}^{-6}\,\mathrm{mol/s}$$