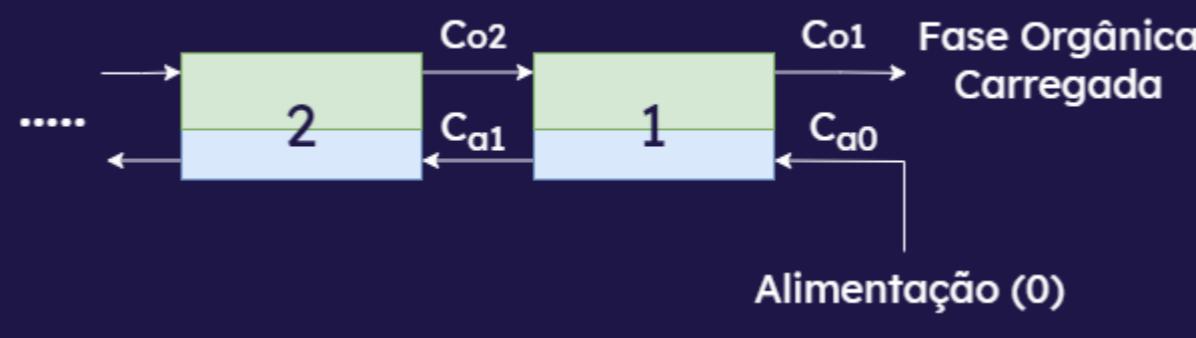


Pelo princípio da conservação de massa:

$$n_{saída} = n_{entrada}$$

Onde 'n' é quantidade de matéria, seja mols, massa ou qualquer outra.

Considere a imagem abaixo:



$$n_{o1} + n_{a1} = n_{o2} + n_{a0} \quad (1)$$

Onde os subscritos 'a' e 'o' representam fases aquosa e orgânica, respectivamente.

Os números sobrescritos representam a concentração no dado estágio, assumindo equilíbrio.

Quantidade de matéria pode ser expressa como o produto da concentração (C) pelo volume (V):

$$n = C \cdot V \quad (2)$$

Aplicando (2) em (1) temos que:

$$C_{o1} \cdot V_{o1} + C_{a1} \cdot V_{a1} = C_{o2} \cdot V_{o2} + C_{a0} \cdot V_{a0} \quad (3)$$

Seja 'R' a razão volumétrica entre as fases aquosa e orgânica:

$$R = V_a / V_o \quad (4)$$

Sabendo que o volume das fases em cada estágio é aproximadamente constante, dividindo (3) por  $V_o$  e aplicando (4) em (3), temos que:

$$C_{o1} + C_{a1} \cdot R = C_{o2} + C_{a0} \cdot R \quad (5)$$

Seja o coeficiente de partição ou razão de distribuição (D), dado pela proporção das concentrações orgânica e aquosa num estágio de separação. Então, no estágio i, temos que:

$$D_i = C_{oi} / C_{ai} \quad (6)$$

Aplicando (6) em (5) para substituir  $C_o$ , obtemos:

$$C_{a1} \cdot D_1 + C_{a1} \cdot R = C_{a2} \cdot D_2 + C_{a0} \cdot R \quad (7)$$

D foi determinado experimentalmente por um modelo que correlaciona seu  $\log_{10}$  com o pH.

$$\log D = a \cdot pH + b$$

Onde 'a' e 'b' são parâmetros empíricos.

Sendo  $pH = -\log_{10}[H^+]$ , onde  $[H^+]$  é a concentração de prótons na fase aquosa, a seguinte correlação foi obtida, utilizando as propriedades dos logaritmos:

$$D_i = [H_i^+]^{-a} \cdot 10^b \quad (8)$$

Substituindo (8) em (7), temos que:

$$C_{a1} \cdot ([H_i^+]^{-a} \cdot 10^b) + C_{a1} \cdot R = C_{a2} \cdot ([H_i^+]^{-a} \cdot 10^b) + C_{a0} \cdot R \quad (9)$$

Passando todos os termos para a esquerda e aplicando a propriedade distributiva, temos que:

$$C_{a1} \cdot (([H_i^+]^{-a} \cdot 10^b) + R) - C_{a2} \cdot ([H_i^+]^{-a} \cdot 10^b) - C_{a0} \cdot R = 0 \quad (10)$$

A conservação de massa é válida para todos as espécies presentes na separação. Num sistema com dois componentes, descrito no Trabalho Final,  $Dy$  e  $Ho$ , podemos renomear 'C' pelo símbolo do elemento e adicionar subscritos nos parâmetros empíricos do modelo, que é específico para cada espécie. Além disso, podemos remover o subscrito 'a', para clarear a notação, visto que colocamos a equação em termos apenas da fase aquosa.

$$Dy_1 \cdot (([H_1^+]^{-a_{Dy}} \cdot 10^{b_{Dy}}) + R) - Dy_2 \cdot (([H_2^+]^{-a_{Dy}} \cdot 10^{b_{Dy}}) - Dy_0 \cdot R = 0 \quad (11)$$

$$Ho_1 \cdot (([H_1^+]^{-a_{Ho}} \cdot 10^{b_{Ho}}) + R) - Ho_2 \cdot (([H_2^+]^{-a_{Ho}} \cdot 10^{b_{Ho}}) - Ho_0 \cdot R = 0 \quad (12)$$

No mecanismo de extração por solventes, para que o extrator capture uma espécie do elemento de terras-raras, ele deve doar uma quantidade de prótons tal que a carga das fases se mantenham constantes. Dessa forma, também existe um balanço de conservação de cargas no sistema. Seja a reação de complexação, que descreve o mecanismo de extração de um elemento:



Onde  $(HA)_2$  é o extrator na sua forma de dímero, que doa um  $H^+$ . E  $Etr^{3+}$  é a forma em que as espécies  $Dy$  e  $Ho$  se encontram na fase aquosa.

Dessa forma, podemos escrever a equação de conservação de cargas da seguinte forma:

$$K = [H_0^+] + 3Dy_0 + 3Ho_0 \quad (13)$$

(13)

Onde K é a constante de carga do meio e  $[H_0^+]$ ,  $Dy_0$  e  $Ho_0$  são as concentrações das espécies, em base molar, na alimentação (entrando no estágio 1).

K é determinado usando (13) pois todos os termos do lado direito são conhecidos. Entretanto, K é válido em qualquer estágio:

$$K = [H_i^+] + 3Dy_i + 3Ho_i \quad (14)$$

Colocando (14) em termos de  $[H_i^+]$ , temos que:

$$[H_i^+] = \frac{K}{3Dy_i + 3Ho_i} \quad (15)$$

Substituindo (15) em (11) e (12):

$$Dy_1 \left( \left( \frac{K}{3(Dy_1 + Ho_1)} \right)^{-a_{Dy}} \cdot 10^{b_{Dy}} + R \right) - Dy_2 \left( \left( \frac{K}{3(Dy_2 + Ho_2)} \right)^{-a_{Dy}} \cdot 10^{b_{Dy}} \right) - Dy_0 \cdot R = 0$$

$$Ho_1 \left( \left( \frac{K}{3(Dy_1 + Ho_1)} \right)^{-a_{Ho}} \cdot 10^{b_{Ho}} + R \right) - Ho_2 \left( \left( \frac{K}{3(Dy_2 + Ho_2)} \right)^{-a_{Ho}} \cdot 10^{b_{Ho}} \right) - Ho_0 \cdot R = 0$$

O balanço de massa é válido para todos os estágios. Bastante mudar os subscritos em (2) e acompanhar o resto. No último estágio entretanto, a concentração da fase orgânica que entra é necessariamente zero. Por conta disso, o primeiro termo do lado direito que aparece em (1) é zero, e as equações podem ser simplificadas para:

$$Dy_n \left( \left( \frac{K}{3(Dy_n + Ho_n)} \right)^{-a_{Dy}} \cdot 10^{b_{Dy}} + R \right) - Dy_{n-1} \cdot R = 0$$

$$Ho_n \left( \left( \frac{K}{3(Dy_n + Ho_n)} \right)^{-a_{Ho}} \cdot 10^{b_{Ho}} + R \right) - Ho_{n-1} \cdot R = 0$$

Onde 'n' seria o último estágio (cuidado que 'n' é referido ao longo das demonstrações no documento principal ora como um estágio qualquer, ora como o número total de estágios).