PQI-3303

Dissolução de partícula esférica

Exercício: Dissolução de partícula esférica

Dissolução de uma partícula esférica A em um fluido B, estagnado e infinito. Dados: raio da partícula, R, difusividade, D_{AB}, densidade do meio, ρ, densidade do sólido, ρ_S, e fração mássica (de equilíbrio) de A na interface, x_{AS} .

- a) Obter uma expressão para o fluxo de transporte de massa na condição de regime permanente. Considere a partícula com diâmetro constante e o meio diluído.
- b) Adotando-se a hipótese de regime pseudo-permanente, obter uma expressão para o tempo necessário para a completa dissolução da partícula.

Aplicação

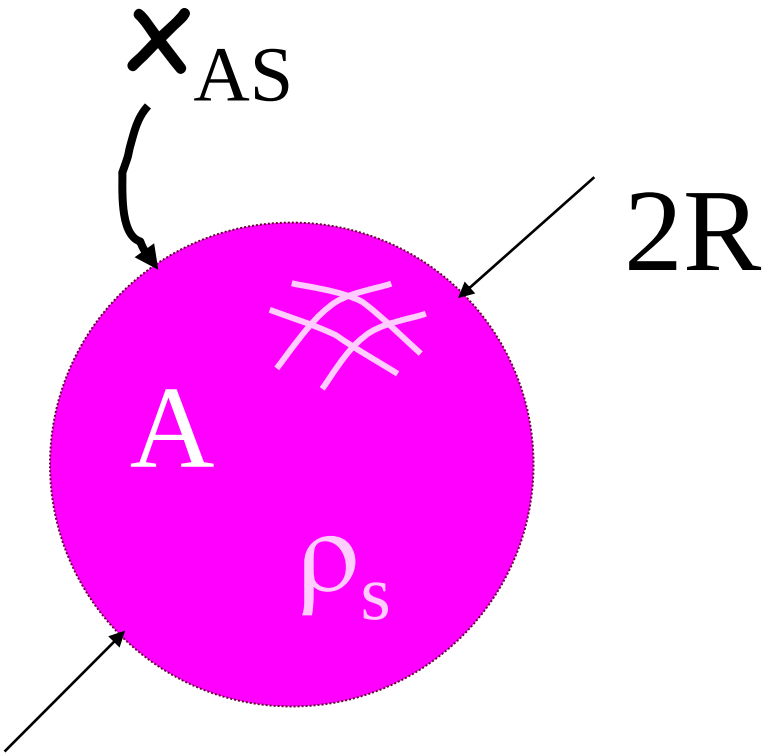
B (fluido)

$v \approx 0$

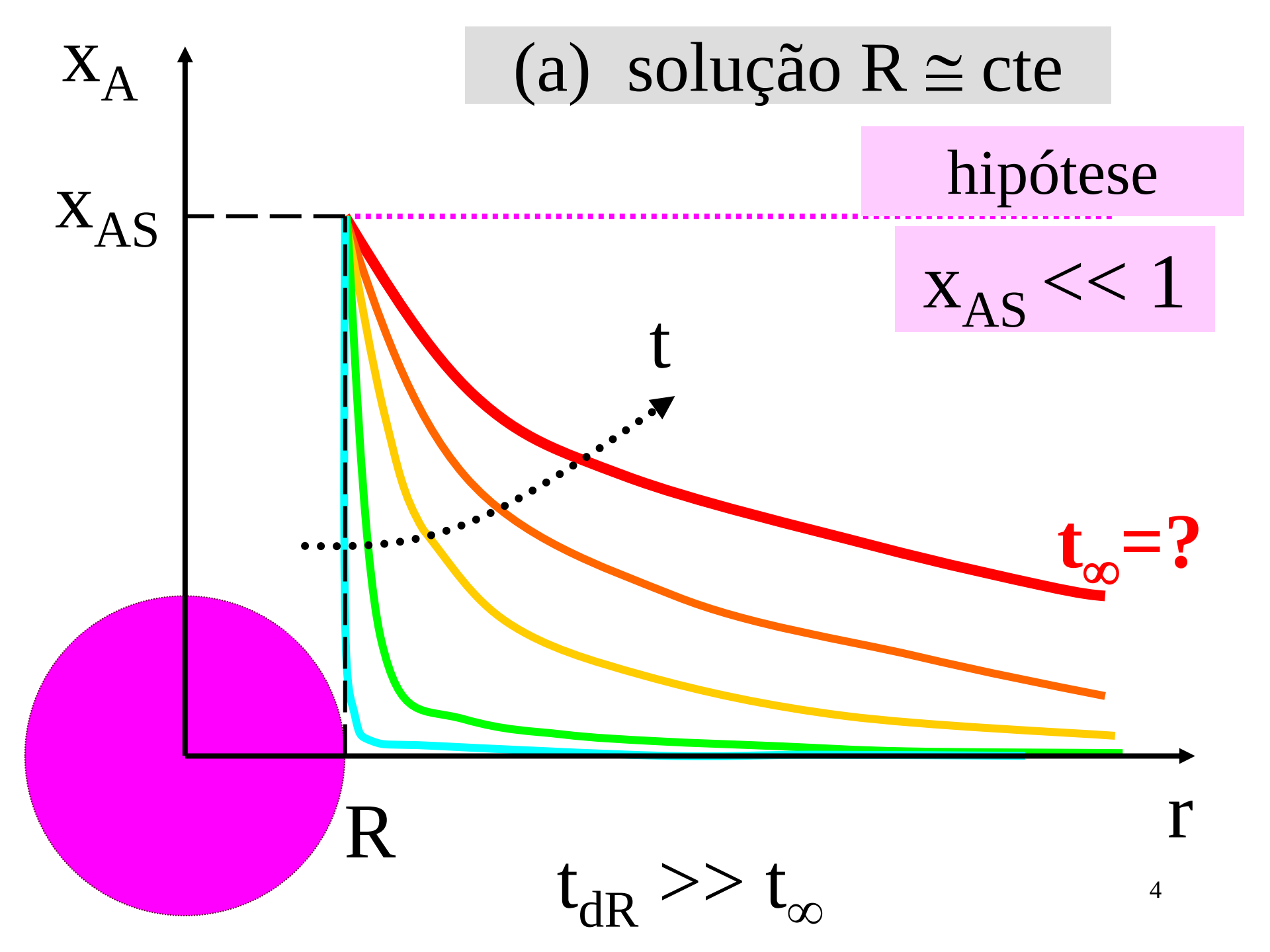
ρ

D_{AB}

p e T ctes



secagem,
evaporação de uma gota,
dissolução de um fármaco


(a) solução R ≅ cte
hipótese
$x_{AS} << 1$
x_A
x_{AS}
t
t_∞=?
R
r
$t_{dR} >> t_\infty$

equacionamento

$$\underbrace{\frac{\partial \rho x_A}{\partial t}}_{\substack{=0 \\ st.st.}} + div\, \underbrace{\rho \vec{v}}_{\vec{n}}\, x_A = -div \overbrace{\vec{j}_A}^{\vec{n}_A - \vec{n} x_A} + \underbrace{r_A}_{\substack{=0 \\ s/reação}}$$

$$\mathrm{div}\,\vec{n}_A = 0$$

$$\vec{n}_A = \vec{j}_A + \overbrace{\vec{n}_A + \underbrace{\vec{n}_B}_{=0}}^{\vec{n}} x_A = \vec{j}_A + \vec{n}_A x_A \qquad \vec{n}_A\left(1 - \underbrace{x_A}_{<<1}\right) = \vec{j}_A$$

$$\vec{n}_A \approx \vec{j}_A \qquad \mathrm{div}\,\vec{j}_A = 0$$

modelo

$$div\,\vec{j}_A = 0$$

$$\vec{j}_A = -\rho D_{AB}\, gr\vec{a}d x_A$$

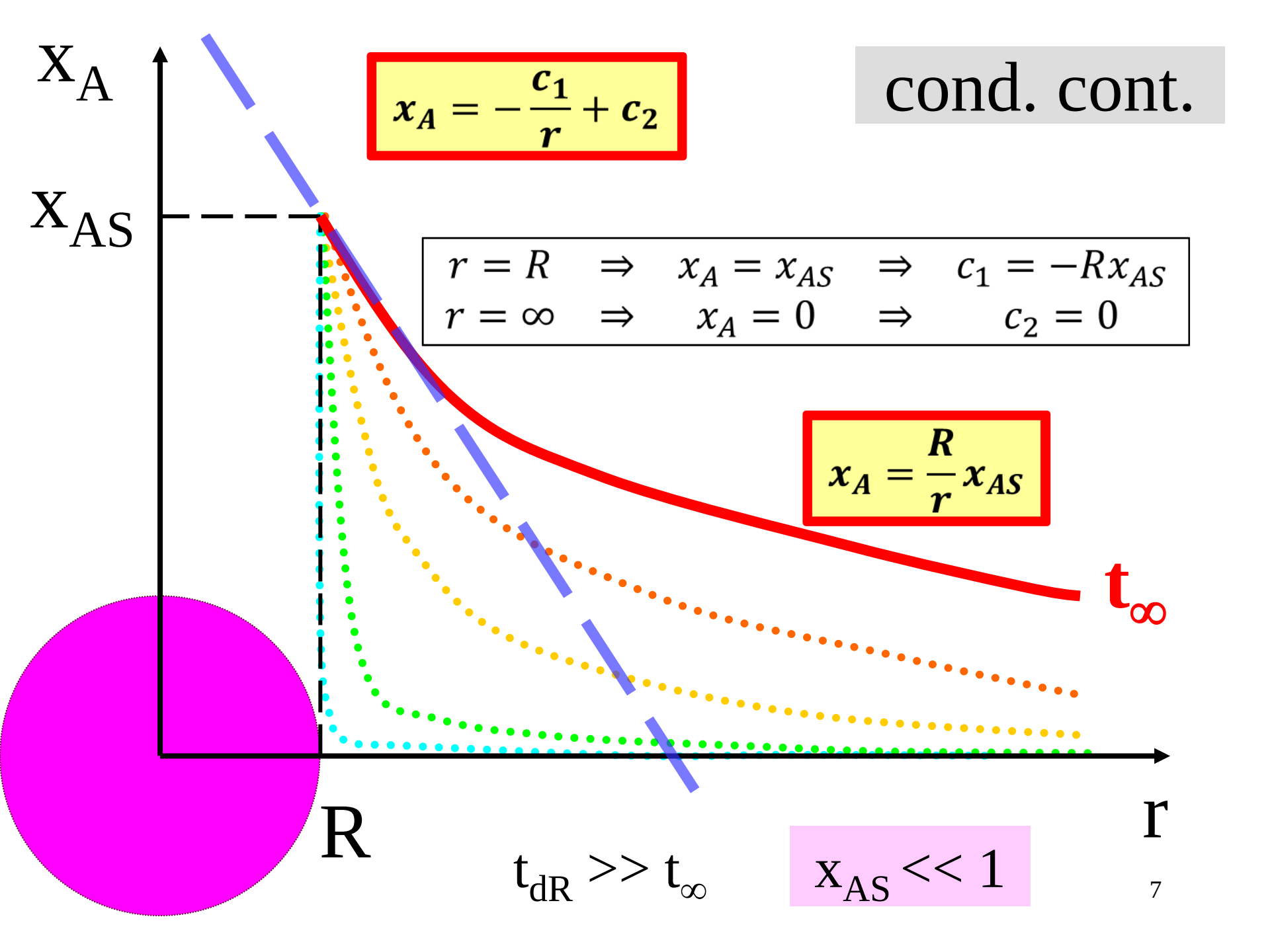
$$div(-)\underbrace{\rho D_{AB}}_{p;Tctes}\, gr\vec{a}d x_A = -\rho D_{AB} Lap x_A = 0$$

$$Lap x_A = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial x_A}{\partial r}\right) + \ldots = 0$$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dx_A}{dr}\right) = 0 \longrightarrow r^2\frac{dx_A}{dr} = c_1 \longrightarrow dx_A = \frac{c_1}{r^2}dr$$

perfil

$$x_A = -\frac{c_1}{r} + c_2$$

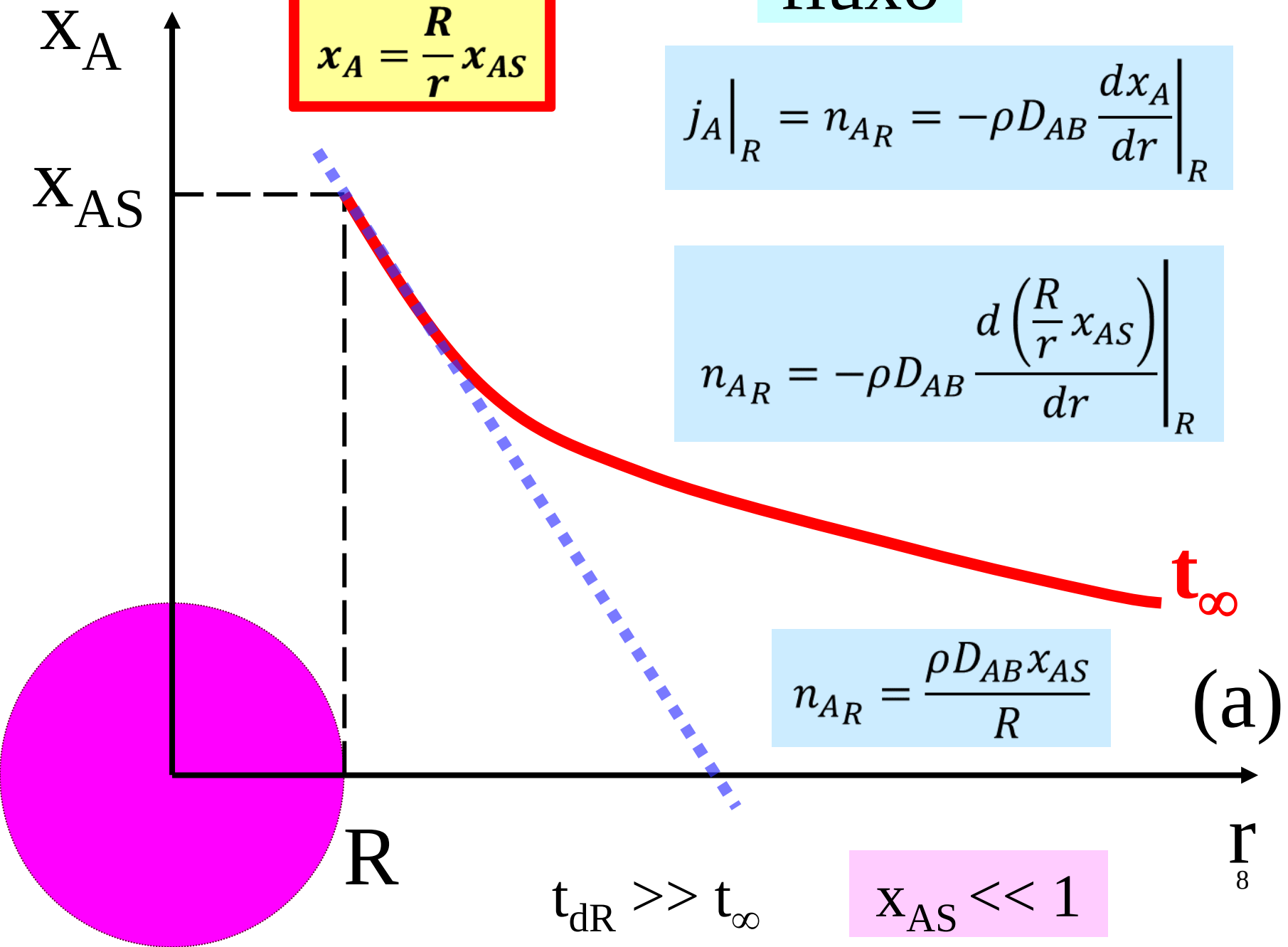

x_A
x_{AS}
$x_A = -\frac{c_1}{r} + c_2$
cond. cont.
$r = R \Rightarrow x_A = x_{AS} \Rightarrow c_1 = -Rx_{AS}$
$r = \infty \Rightarrow x_A = 0 \Rightarrow c_2 = 0$
$x_A = \frac{R}{r} x_{AS}$
t_∞
R
r
$t_{dR} >> t_\infty$
$x_{AS} << 1$

fluxo

$$x_A = \frac{R}{r} x_{AS}$$

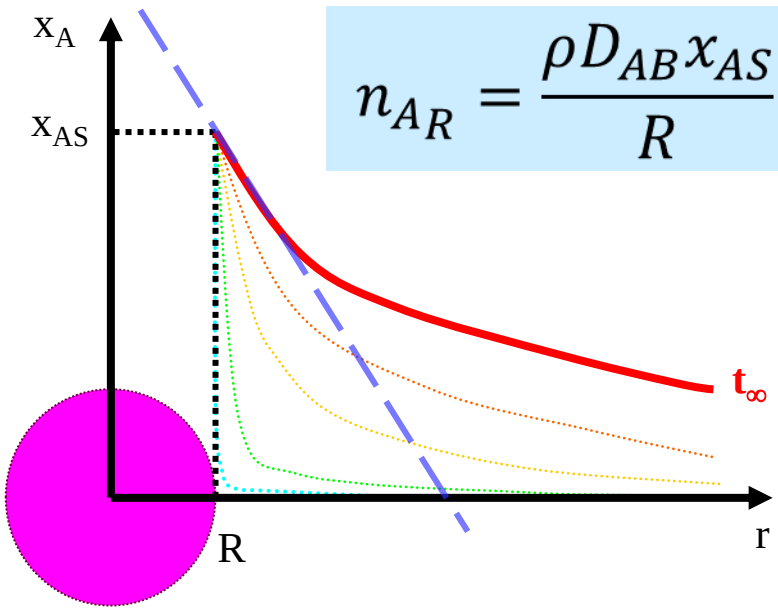
$$j_A\Big|_R = n_{A_R} = -\rho D_{AB} \frac{dx_A}{dr}\Big|_R$$

$$n_{A_R} = -\rho D_{AB} \frac{d\left(\frac{R}{r} x_{AS}\right)}{dr}\Big|_R$$

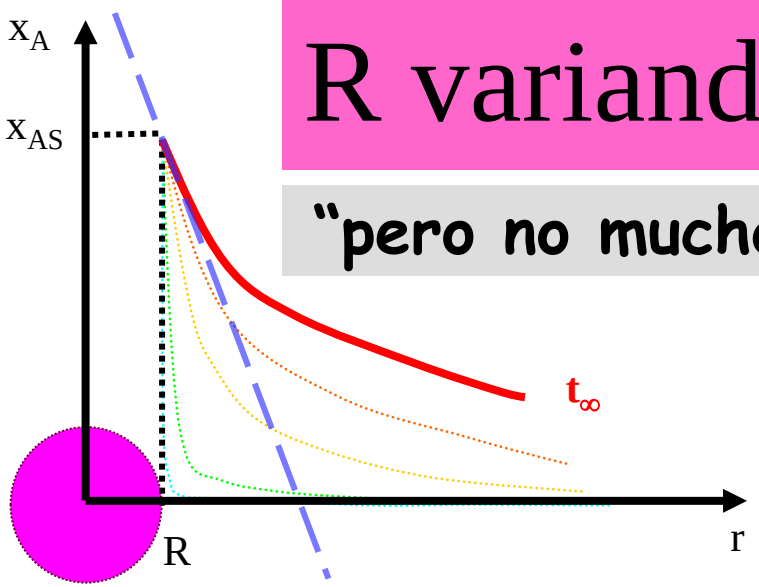


$$n_{A_R} = \frac{\rho D_{AB} x_{AS}}{R}$$

(a)

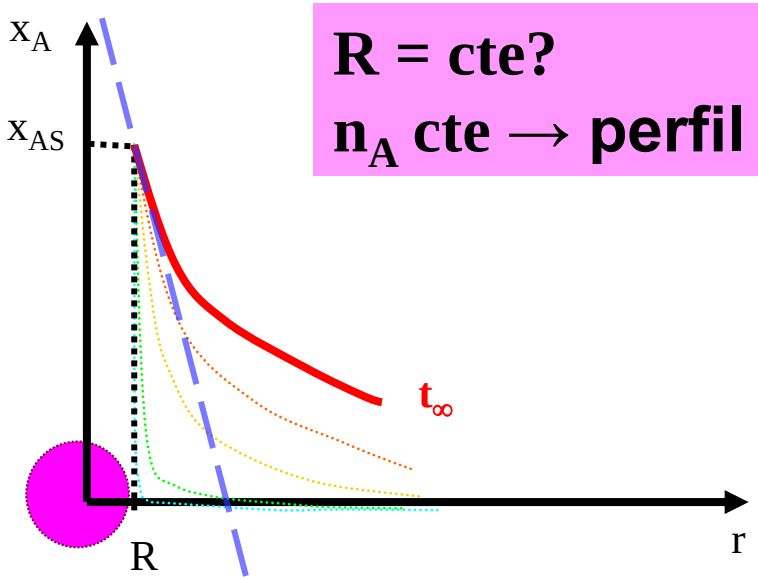


$$n_{A_R} = \frac{\rho D_{AB} x_{AS}}{R}$$



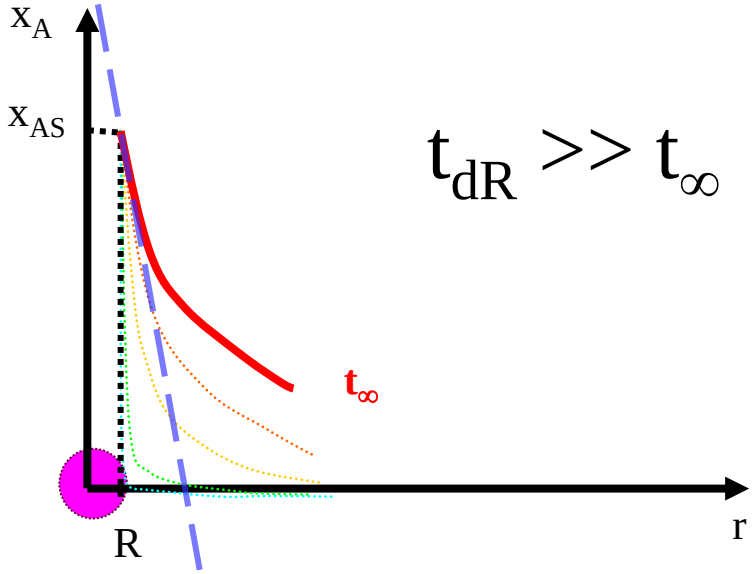
R variando

"pero no mucho"



R = cte?

n_A cte → perfil cte?



$t_{dR} >> t_\infty$

"quase" estacionário

$x_{AS} << 1$

(b)Tempo para dissolução total

pseudo-permanente

n_{AR} aumenta mas a área diminui

$$\frac{dm_A}{dt} = -An_{A_R} = \frac{d(\rho_s V)}{dt} = \rho_s \frac{d(4/3\,\pi R^3)}{dt} = -4\pi R^2 n_{A_R}$$

$$\rho_s \frac{4}{3}\frac{d(R^3)}{dt} = -4R^2\left[\frac{\rho D_{AB} x_{AS}}{R}\right] = \rho_s \frac{3}{3R} R^2 dR = -\rho D_{AB} x_{AS} dt$$

$$\frac{\rho_s}{\rho D_{AB} x_{AS}} R dR = -dt = \int_R^0 \frac{\rho_s}{\rho D_{AB} x_{AS}} R dR = -\int_0^t dt$$

$$t = \frac{R^2 \rho_s}{2\rho D_{AB} x_{AS}}$$

$t \approx m^{2/3}$

numéricos

ácido benzóico sólido em água; R = 1 cm
$D_{AB} = 10^{-5}$ cm²/s; $\rho_S \sim 1$ g/cm³; $\rho \sim 1$ g/cm³
solubilidade = 2,5 g/l = 0,0025 g/cm³ → $x_{AS} = 0,0025$

$$t_{diss} = \frac{1^2 .1}{2.1.10^{-5} .0,0025} = 2.10^7 s \approx 5000h$$

iodo sólido em ar; R = 1 cm
$D_{AB} = 10^{-1}$ cm²/s; $\rho_S \sim 1$ g/cm³; $\rho \sim 0,001$ g/cm³
$p^V_{I2} = 0,5$ mmHg ; $x_{AS} = 5,7.10^{-3}$

$$t_{diss} = \frac{1^2 .1}{2.10^{-3}.10^{-1}.5,7.10^{-3}} = 10^6 s \approx 300h$$

Coeficiente convectivo

$$n_{A_R} = \frac{\rho D_{AB} x_{AS}}{R} = k\rho(x_{AS} - \underbrace{x_{A\infty}}_{=0})$$

$$k = \frac{D_{AB}}{R} \qquad \frac{kR}{D_{AB}} = 1 \qquad \frac{kD}{D_{AB}} = 2 = Sh$$

Se as partículas forem muito pequenas mesmo que v ≠ 0 não se observa movimento relativo então Sh = 2 e Nu = 2 também. No caso geral:

$$Sh = 2 + 0{,}6 Re^{1/2} Sc^{1/3}$$

Sherwood