

# ANÁLISIS DE LA TRANSFERENCIA DE MASA GASEOSA EN UN REACTOR DE GEOMETRÍA FIJA

**M.O. Barbaglia<sup>1\*</sup> y M.R. Esquivel<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Laboratorio Pladema-Universidad Nacional del Centro de la Pcia. de Buenos Aires  
Pinto 399-(B7000GHG)-Tandil-Buenos Aires-Argentina

*e-mail: barbagli@exa.unicen.edu.ar*

<sup>2</sup> Centro Atómico Bariloche-Comisión Nacional de Energía Atómica-  
Av. Bustillo km 9.5 (R8402AGP)-Bariloche-Río Negro-Argentina

En este trabajo se deduce un coeficiente de transferencia de masa considerando dos procesos en serie: difusión en el interior del crisol que contiene la muestra y difusión en el seno del gas. Este coeficiente, útil para analizar la transferencia de masa externa en un reactor de geometría fija, fue deducido a partir de la simulación de la fluidodinámica del sistema seleccionado.

In this work, a mass transfer coefficient is deduced by considering two processes in series: diffusion within the crucible containing the sample and diffusion in the gas bulk. This coefficient, useful to analyze the external mass transfer in a fixed geometry reactor, was deduced from the simulation of the fluid-dynamics of the selected system.

## I. INTRODUCCIÓN

El análisis de la velocidad de transferencia de masa externa en reacciones heterogéneas sólido-gas es usualmente realizado comparando los valores experimentales con aquellos obtenidos a partir de ecuaciones teórico-empíricas como la de Ranz-Marshall.<sup>1,2</sup> En esta ecuación, se considera que la transferencia de masa es realizada desde y hacia una esfera representativa de la muestra que flota libremente en el fluido rodeada por una capa límite de espesor representativo a través de la cual difunden las especies consideradas.<sup>3</sup>

Sin embargo, los valores de velocidad arrojados por esta ecuación son de al menos dos órdenes de magnitud mayores que aquellos experimentales, por lo cual se utilizan coeficientes experimentales de corrección que consideran cambios en la geometría y en la fluido-dinámica del sistema y que disminuyen los valores de transferencia obtenidos.<sup>4</sup>

A diferencia de este enfoque, en este trabajo se propone estimar la velocidad de transferencia de masa deduciendo una expresión para el coeficiente de transferencia que considere los cambios experimentados en distintas zonas alrededor del fluido en contacto con la muestra. Este concepto es útil para estimar las velocidades de procesos tales como evaporación en distintas atmósferas o descomposiciones térmicas a fin de introducir mejoras en los reactores respectivos. La estimación del coeficiente de transferencia de masa puede hacerse extensiva hacia el de transferencia de calor y puede ser utilizada para obtener coeficientes de difusión no disponibles experimentalmente. Este doble objetivo, donde el conocimiento científico es orientado

a aplicaciones en el campo tecnológico, ha impulsado la elaboración del presente trabajo.

## II. SISTEMA SELECCIONADO Y CONDICIONES DE SIMULACIÓN

El sistema simulado consiste en un reactor cilíndrico conteniendo un porta-muestra prismático hueco. Las dimensiones y características del dispositivo se muestran en la Figura 1.

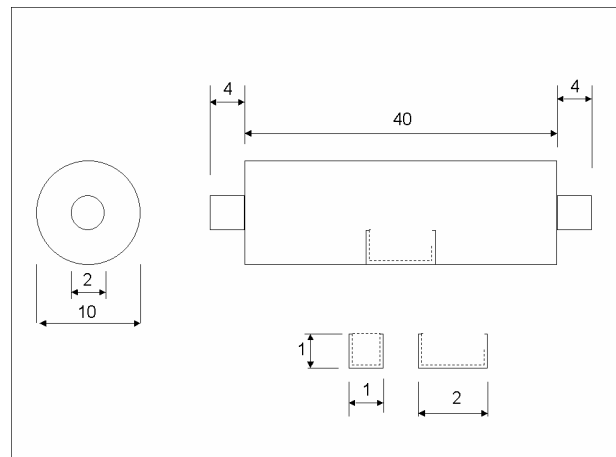


Figura 1. Dispositivo simulado. Las dimensiones están dadas en cm.

Las simulaciones fueron realizadas para un sistema gas ideal compresible en condiciones isotérmicas utilizándose una solución laminar sobre una malla de 27668 celdas y 14500 nodos. El fluido simulado fue Aire a 300 °C para dos velocidades lineales de entrada:

\* Autor a quién debe dirigirse la correspondencia.

$4.42 \cdot 10^{-4} \text{ m.s}^{-1}$  y  $4.42 \cdot 10^{-2} \text{ m.s}^{-1}$ . Las dimensiones y disposición de este sistema no fueron una elección casual, ya que los mismos son equivalentes a aquellos usados para determinar experimentalmente la velocidad de transferencia de masa en reacciones de descomposición térmica o evaporación de sólidos en distintas atmósferas.

### III RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En las Figuras 2 y 3 se muestran los contornos lineales obtenidos por simulación del sistema para velocidades lineales de entrada correspondientes a  $4.42 \cdot 10^{-4} \text{ m.s}^{-1}$ . En la primera, se observa que los valores de velocidad lineal disminuyen a medida que se aproximan a las paredes del reactor.

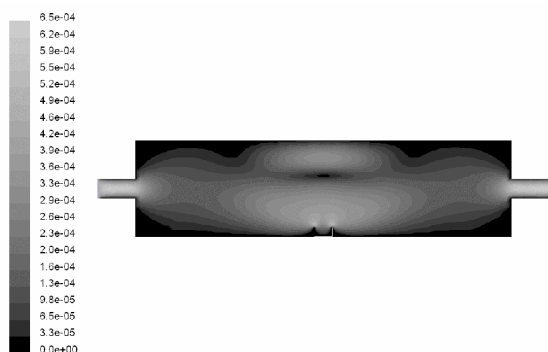


Figura 2. Contornos de velocidad obtenidos por simulación para velocidades lineales de entrada de  $4.42 \cdot 10^{-4} \text{ m.s}^{-1}$

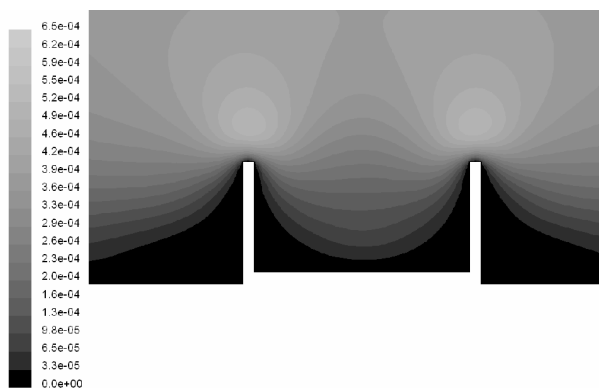


Figura 3. Detalles del crisol. Contornos de velocidad obtenidos para  $4.42 \cdot 10^{-4} \text{ m.s}^{-1}$ .

En el seno del fluido (Figura 2), definido como el centro geométrico del reactor ubicado sobre el crisol que hace las veces de porta-muestra, la velocidad lineal es de dos órdenes de magnitud mayor que la velocidad lineal obtenida en el seno del crisol (Figura 3). La velocidad en el interior del crisol disminuye hasta cero en las cercanías de las paredes del mismo, debido al rozamiento.

Los contornos de velocidad para simulaciones hechas para  $4.42 \cdot 10^{-2} \text{ m.s}^{-1}$  se muestran en las Figuras 4 y 5 donde se observan el reactor y un detalle del crisol, respectivamente.

Puede notarse que la turbulencia en el seno del gas es mayor para este caso. Sin embargo, las diferencias en velocidades entre el seno del gas y el interior del crisol se mantienen en la misma relación que el caso anterior.

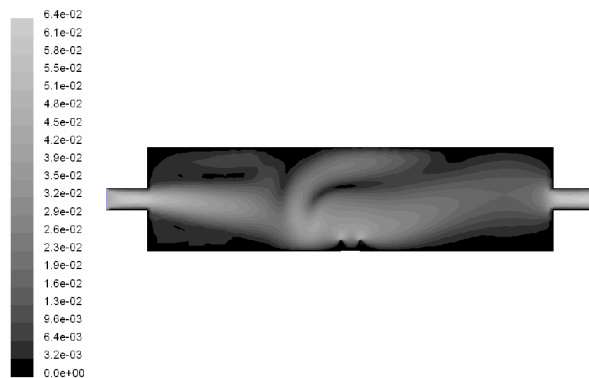


Figura 4. Contornos de velocidad obtenidos por simulación para velocidades lineales de entrada de  $4.42 \cdot 10^{-2} \text{ m.s}^{-1}$

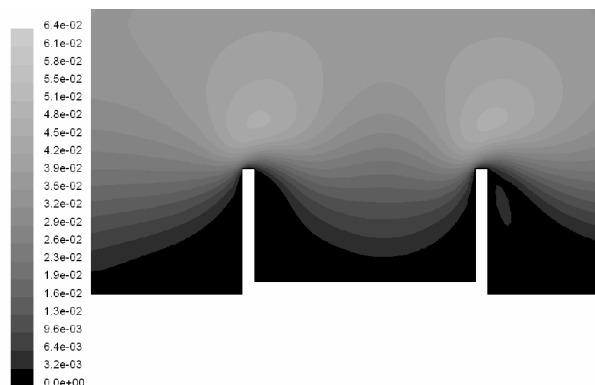


Figura 5. Detalle del crisol. Contornos de velocidad obtenidos para  $4.42 \cdot 10^{-2} \text{ m.s}^{-1}$ .

Estos resultados nos sugieren que las condiciones fluido-dinámicas para la difusión de especies que arriben o salgan desde el seno del gas, hacia una partícula de sólido genérica ubicada en el seno del crisol no se mantienen constantes. Entonces, si se considera un coeficiente de transferencia de masa definido por la siguiente ecuación:

$$k = \frac{D}{l} \quad (1)$$

en la cual  $k$  (longitud. tiempo<sup>-1</sup>),  $D$  (longitud.tiempo<sup>-2</sup>) y  $l$  (longitud) representan el coeficiente de transferencia

de masa, el coeficiente de difusión de la especie en la mezcla gaseosa y un espesor representativo, respectivamente, es posible re-definir un coeficiente de transferencia de masa global en el cual se consideren dos términos: el primero representando la difusión en el interior del crisol y el segundo representa la difusión en el seno del fluido. De esta manera, la ecuación (1) se transforma en:

$$k_g = \left( \frac{1}{k_1} + \frac{1}{k_2} \right)^{-1} \quad (2)$$

donde  $k_g$ , representa el coeficiente de transferencia de masa global y  $k_1=D.l_1^{-1}$  y  $k_2=D.l_2^{-1}$ .  $k_1$  representa el coeficiente de transferencia de masa global para las condiciones dentro del crisol, mientras que  $k_2$  dependerá de las condiciones definidas dentro del seno del gas.

La estimación de  $k_2$  puede hacerse a partir de correlaciones de transferencia de masa disponibles en la bibliografía para sistemas en flujo laminar para placas horizontales con flujo paralelo a la superficie.<sup>5,6</sup> Y esta parte del coeficiente global será independiente de la evolución de la muestra y del tiempo transcurrido.

A diferencia de  $k_2$ ,  $k_1$  dependerá de la altura de la muestra (la distancia que exista entre la mayor altura de la muestra y el borde del superior del crisol). Los valores de difusión tendrán dos valores extremos: si la muestra tiene una altura menor a 1 milímetro, la difusión será puramente molecular, ya que la especie gaseosa debe difundir a través de una capa completamente estanca como se observa en las Figs. 3 y 5. El coeficiente  $D$  será el correspondiente a la especie considerada y  $l_1= 1$  mm. Si la muestra tiene 1 cm de altura (supera la altura máxima del crisol) el valor de este coeficiente no tendrá sentido, ya que su inversa, la resistencia a la transferencia de masa, será igual a cero.  $k_g$  será entonces equivalente sólo a  $k_2$ . Para valores intermedios,  $k_1$  dependerá de la evolución geométrica y temporal de la muestra. Será por lo tanto, una función del grado de reacción.

#### IV CONCLUSIONES

En este trabajo se deduce un coeficiente de transferencia de masa global definido por la ec. (2) consistente en dos términos:  $k_1$  y  $k_2$  a partir de la simulación de los contornos de velocidad en el sistema de reactor-crisol con geometría fija seleccionado.

El primero depende de la geometría dispuesta en el crisol y de la altura de la muestra contenida en el mismo. Como la muestra no permanece constante, ya sea porque parte de ella se descompone, sobre ella se deposita otro compuesto o se evapora totalmente, este coeficiente estará relacionado con la geometría de la misma. Será a su vez, dependiente del grado de reacción. Los valores extremos para  $k_1$  estarán fijados por la altura máxima del crisol, donde la inversa de este valor es cero y por los valores correspondientes al

coeficiente entre el coeficiente de difusión de la especie considerada y 1 mm, la altura de la capa estanca.

Los valores de  $k_2$  pueden ser deducidos a partir de cualquier correlación adecuada para esta geometría donde el flujo es paralelo a una placa plana imaginaria (la superficie superior del crisol), estas correlaciones están disponibles en la bibliografía.

La comparación entre los valores obtenidos utilizando esta expresión y aquellos obtenidos experimentalmente en un sistema controlado por transferencia de masa constituirá el núcleo de un próximo trabajo.

#### V REFERENCIAS

- 1 – Esquivel, M.R. et. al., *Thermochim. Acta* **403**, 2, 207-218 (2003).
- 2 – Esquivel, M.R. et. al., *Thermochim. Acta* **398**, 81-91 (2003).
- 3 – Scott Fogler, H., en “Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas”, Prentice Hall, México, pág. 693, (2001).
- 4 – Hakvoort, G., *Thermochim. Acta* **233**, 63-73 (1994).
- 5 – Treybal, R.E, en “Operaciones de Transferencia de Masa”, Mc Graw-Hill, México D.F, pág. 23-49, (1990).
- 6– Dowraiwamy, L.K, Sharma, M.M., en “Heterogeneous Reactions Analysis, examples and Reactor Design”, New York, pág 117-136, (1983).