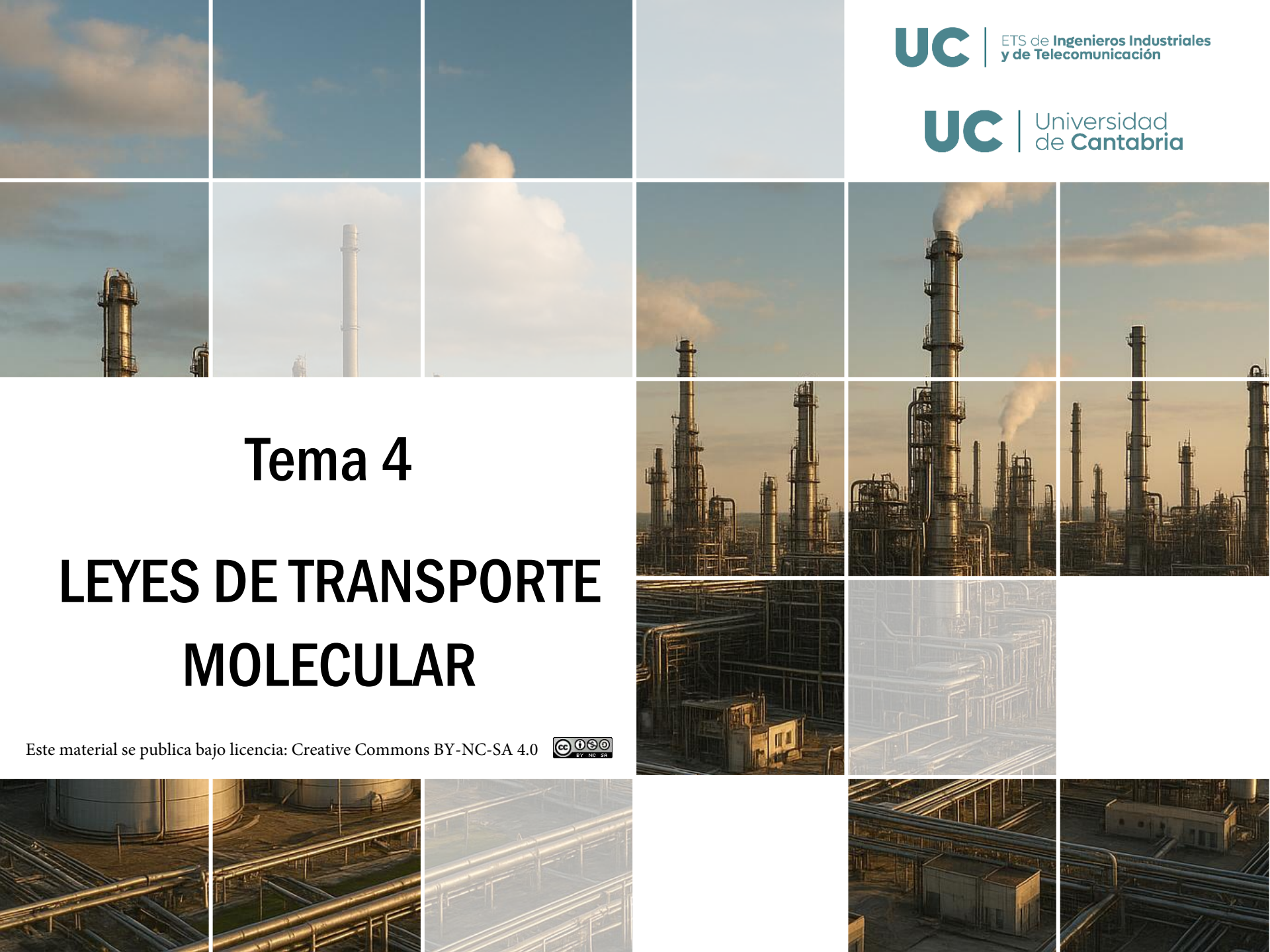


Tema 4

LEYES DE TRANSPORTE MOLECULAR

Este material se publica bajo licencia: Creative Commons BY-NC-SA 4.0





4.1.
Ley de Newton

Tema 4

LEYES DE

TRANSPORTE

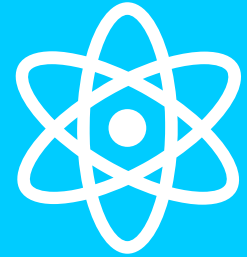
MOLECULAR



4.1.
Ley de Newton



4.2.
Ley de Fourier



4.3.
Ley de Fick

1

Conocer la definición de la ley de Newton de la viscosidad y las consideraciones generales asociadas

Distinguir entre fluidos newtonianos y no newtonianos así como su tipología y características principales

Resultados de aprendizaje

- Identificar los mecanismos de transporte molecular implicados en el transporte de cantidad de movimiento, energía y materia

1

Conocer la definición de la **ley de Newton de la viscosidad** y las consideraciones generales asociadas
Distinguir entre fluidos newtonianos y no newtonianos así como su tipología y características principales

2

Conocer la definición de la **ley de Fourier de la conducción** y las consideraciones generales asociadas

3

Conocer la definición de la **ley de Fick de la difusión** y las consideraciones generales asociadas.
Distinguir entre el enfoque de difusión y el de transferencia de materia
Distinguir entre los componentes difusivo, advectivo y convectivo
Distinguir entre las situaciones en las que se produce contradifusión equimolecular y difusión en una película estancada

4

Identificar las tres leyes de transporte molecular y reconocer las **analogías y diferencias** entre las mismas

4.1 Ley de Newton



Flujo compresible e incompresible

Clase de flujo	Definición
Incompresible (líquidos o gases)	<u>La densidad del fluido es constante</u> Esta aproximación es aplicable cuando los cambios de temperatura son suficientemente pequeños. En líquidos, de forma práctica, la presión no influye en la densidad. Lo mismo sería cierto para gases sometidos a pequeños cambios de presión
Compresible (líquidos o gases)	<u>La densidad del fluido no es constante</u> Los cambios de temperatura son suficientemente importantes para considerar la variación de la densidad con la temperatura, tanto en líquidos como en gases. Cambios notables de presión en gases necesariamente hacen que se considere un flujo compresible. En estos casos la velocidad del gas puede superar la velocidad del sonido en el gas (flujos supersónicos o subsónicos)

Esfuerzo en fluidos

Comparación entre sólidos y fluidos

$$\tau = \frac{F}{A}$$

$$\tau = G\gamma$$

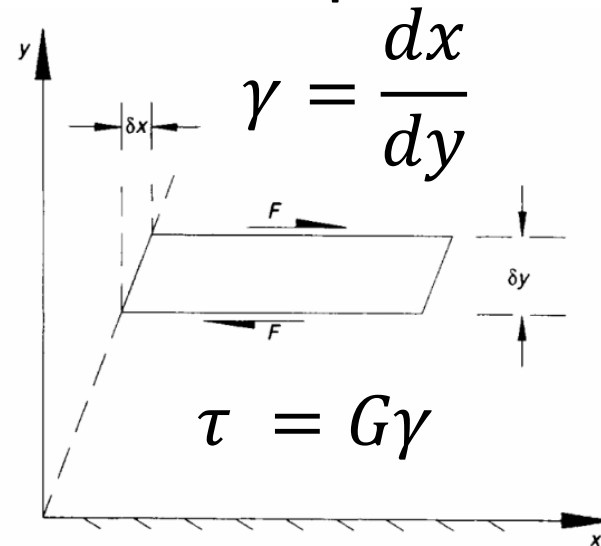
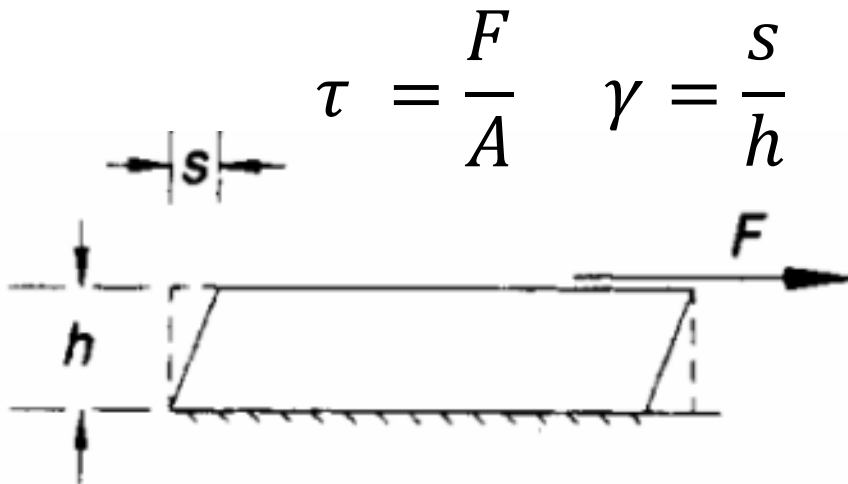
$$\gamma = \frac{s}{h}$$

Término	Definición	Unidades
τ	Esfuerzo/tensión cortante (<i>shear stress</i>), Esfuerzo/tensión de cizalla	N·m ⁻²
F	Fuerza aplicada	N
A	Área	m ²
s, h	Deformaciones	m
G	Módulo cortante o de elasticidad transversal	N·m ⁻²
γ	Deformación por cizalla	-, (Rad)

Esfuerzo en fluidos

Comparación entre sólidos y fluidos SÓLIDO

Considérese un sólido soportado entre dos placas sólidas (inferior fija). Al aplicar una fuerza F sobre la placa superior, para que éste no se mueva aparece otra fuerza de sentido opuesto en la misma dirección F' . Esta fuerza F' que balancea la fuerza F aplicada hace que el sólido no se mueva, **simplemente hace que se deforme.**



Esfuerzo en fluidos

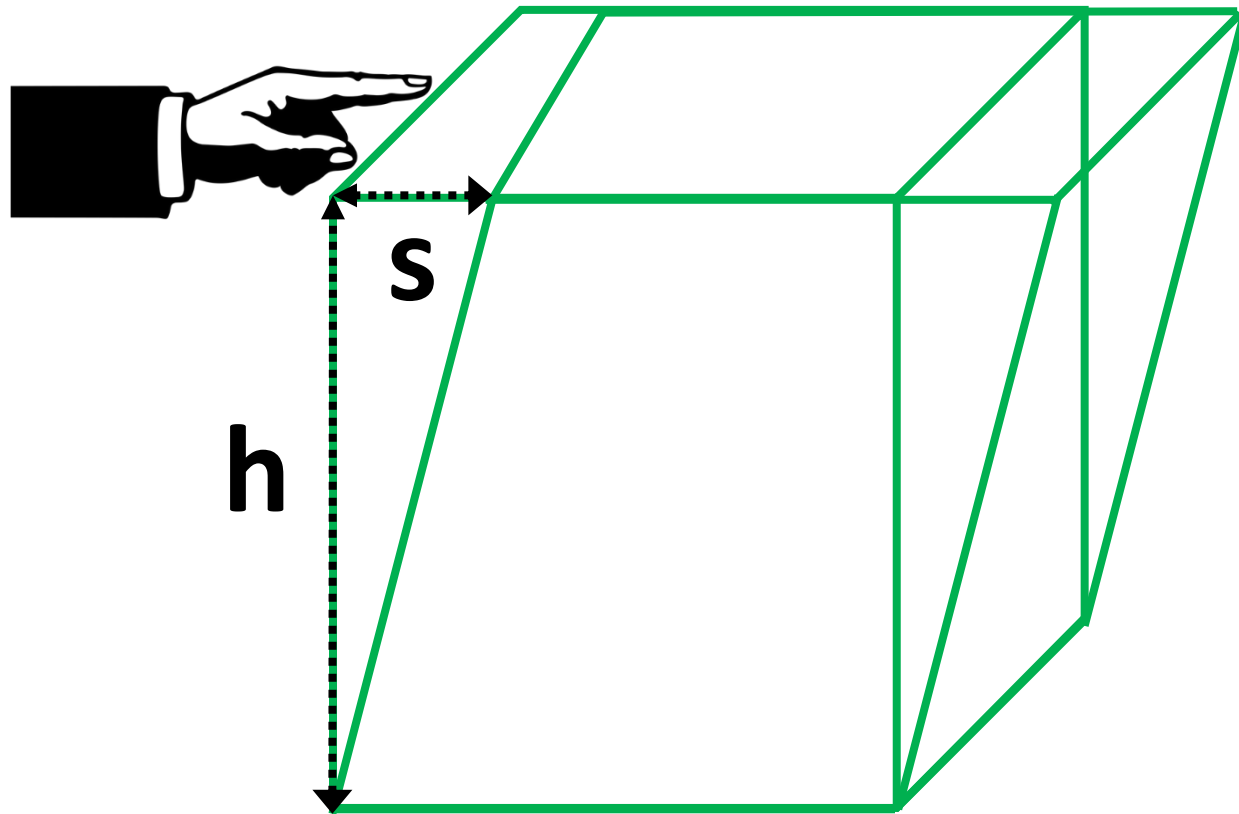
Comparación entre sólidos y fluidos SÓLIDO

Considérese un sólido soportado entre dos placas sólidas (inferior fija). Al aplicar una fuerza F sobre la placa superior, para que éste no se mueva aparece otra fuerza de sentido opuesto en la misma dirección F' . Esta fuerza F' que balancea la fuerza F aplicada hace que el sólido no se mueva, **simplemente hace que se deforme.**



Esfuerzo en fluidos

Comparación entre sólidos y fluidos

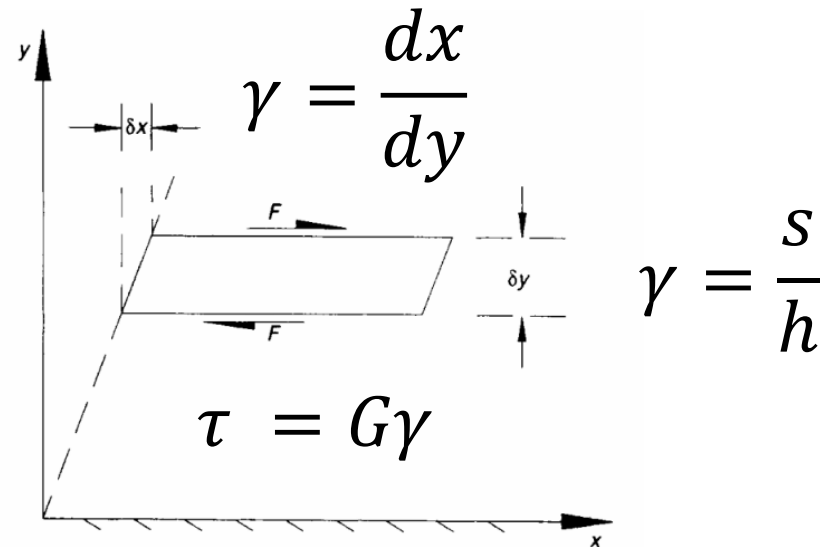
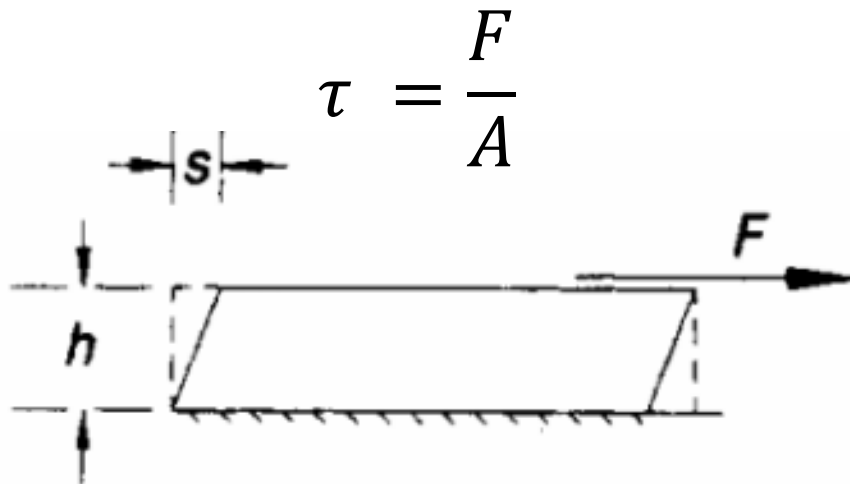


Esfuerzo en fluidos

Comparación entre sólidos y fluidos

Fluido

Considérese un líquido soportado entre dos placas sólidas (inferior fija). Al aplicar una fuerza F sobre la placa superior, esta no deja de moverse a velocidad constante. **Un fluido, a diferencia de un sólido, no puede dejar de soportar un esfuerzo cortante sin deformarse continuamente.**



Ley de Newton (de la viscosidad)

Transporte de cantidad de movimiento

Ley de Newton

$$\tau = \mu \frac{d\gamma}{dt} = \mu \dot{\gamma}$$

el esfuerzo cortante es
proporcional a la velocidad de
deformación por cizalla

Término	Definición	Unidades
τ	Esfuerzo cortante	Pa (N·m ⁻²)
γ	Deformación angular	-
$\dot{\gamma}$	Velocidad/tasa de deformación por cizalla, tasa de cizalla, (<i>rate of shear strain, shear rate</i>)	s ⁻¹
μ	Viscosidad dinámica	kg·m ⁻¹ ·s ⁻¹

En esencia es cuánto cambia la velocidad entre dos capas de fluido dividido por la distancia entre ellas

for Chemical Engineers, 2nd Ed., Edward Arnold, 1995

Ley de Newton (de la viscosidad)

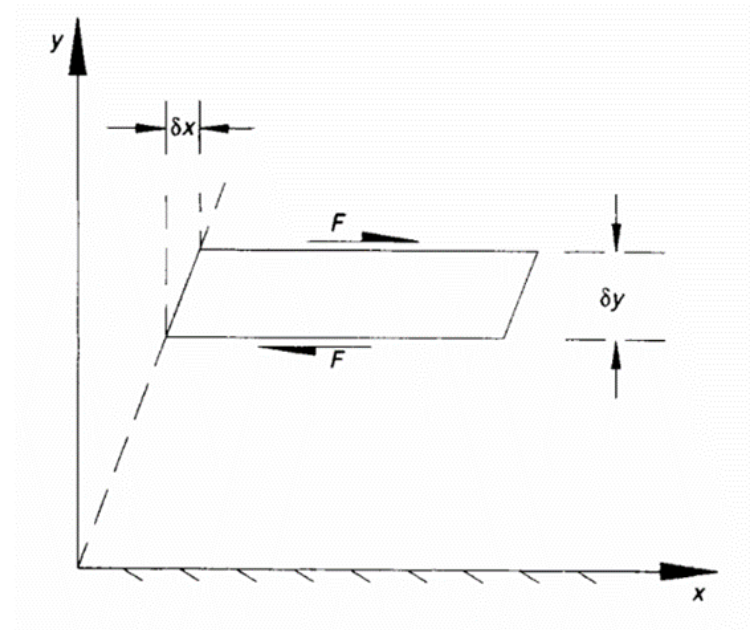
Transporte de cantidad de movimiento

Ley de Newton

$$\tau = \mu \frac{d\gamma}{dt} = \mu \dot{\gamma}$$

el esfuerzo cortante es
proporcional a la velocidad de
deformación por cizalla

$$\begin{aligned}\dot{\gamma} &= \frac{d\gamma}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{dx}{dy} \right) \\ &= \frac{d}{dy} \left(\frac{dx}{dt} \right) = \frac{du_x}{dy}\end{aligned}$$



Ley de Newton (de la viscosidad)

Transporte de cantidad de movimiento

Ley de Newton

$$\tau_{yx} = -\mu \frac{du_x}{dy}$$

para un esfuerzo cortante aplicado en un plano perpendicular a la dirección y en la dirección x

Término	Definición	Unidades
τ_{yx}	Esfuerzo cortante que se ejerce en la dirección x y que varía con la posición y, al aplicarse sobre el plano perpendicular a y	Pa (N·m ⁻²)
u_x	Velocidad lineal del fluido en la dirección x y que varía con la posición y	m·s ⁻¹
μ	Viscosidad dinámica	kg·m ⁻¹ ·s ⁻¹
y	Distancia característica en la dirección y	m

Ley de Newton (de la viscosidad)

Transporte de cantidad de movimiento

$$\tau_{yx} = -\frac{\mu}{\rho} \frac{d(\rho u_x)}{dy}$$
$$= -\nu \frac{d(\rho u_x)}{dy}$$

Ley de Newton

para un esfuerzo cortante aplicado en un plano perpendicular a la dirección y en la dirección x

La reescritura con ν y ρu_x exige densidad constante (flujo incompresible).

Término	Definición	Unidades
μ	Viscosidad dinámica	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$
ν	Viscosidad cinemática	$\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$
ρu_x	Cantidad de movimiento por unidad de volumen	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$

Ley de Newton (de la viscosidad)

Comportamiento de la viscosidad con la temperatura y la presión

INFLUENCIA DE LA TEMPERATURA

LÍQUIDOS

$$T \uparrow \rightarrow \mu \downarrow$$

GASES

$$T \uparrow \rightarrow \mu \uparrow$$

INFLUENCIA DE LA PRESIÓN

LÍQUIDOS

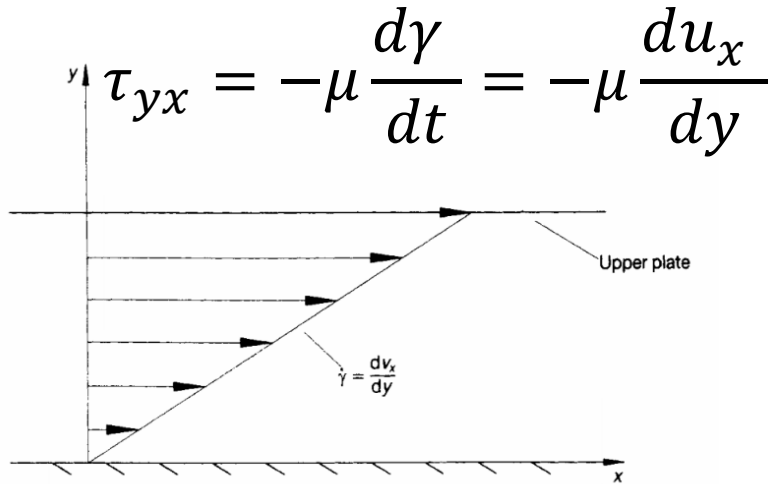
$$P \uparrow \rightarrow \mu \approx \text{cte}$$

GASES

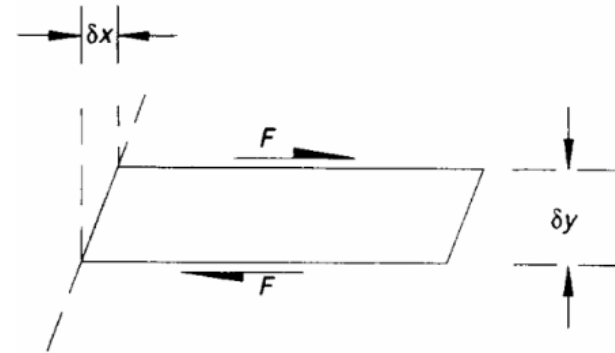
$$P \uparrow \rightarrow \mu \uparrow$$

Ley de Newton (de la viscosidad)

Transporte de cantidad de movimiento



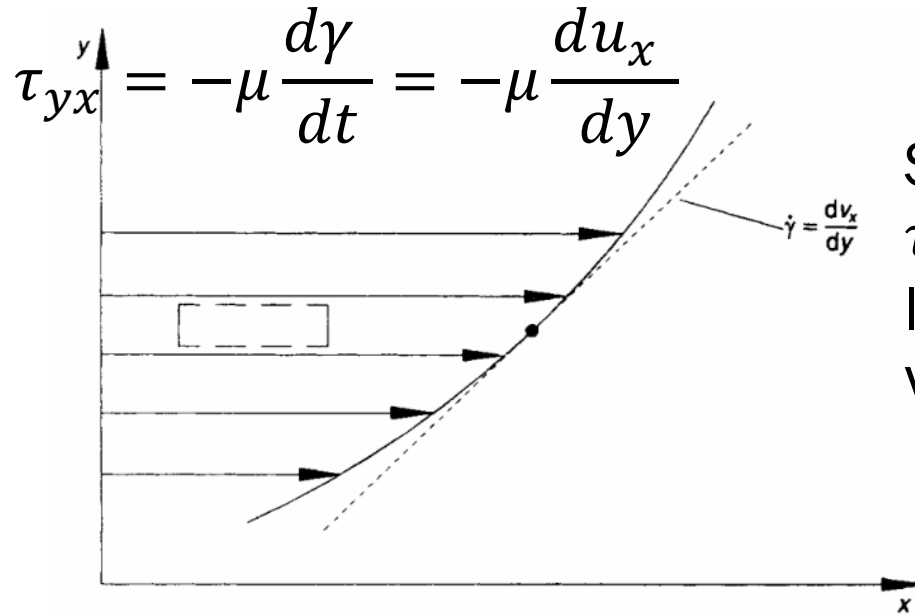
Si $\dot{\gamma}$ es constante, entonces τ_{yx} necesariamente también lo es



Al aplicar una fuerza F sobre la pared superior (no estática), deberá aparecer una fuerza igual y de dirección opuesta en la lámina inferior (en la pared estática). Por tanto, la velocidad de deformación angular $\dot{\gamma}$ será una constante en la dirección Y . En este caso, **al no haber un gradiente de presión**, sino que el movimiento se genera por límites sólidos (paredes), **el perfil de velocidad es lineal**.

Ley de Newton (de la viscosidad)

Transporte de cantidad de movimiento



Si $\dot{\gamma}$ no es constante entonces τ_{yx} necesariamente tampoco lo es, y por tanto también variará con y

Al haber un **gradiente de presión**, es decir, el movimiento no se genera por límites sólidos (paredes), **el perfil de velocidad es curvado** como por ejemplo los que aparecen en el interior de una tubería cilíndrica como consecuencia de una diferencia de presión.

Ley de Newton (de la viscosidad)

Consideraciones

1. A veces se afirma que “LA LEY DE NEWTON DE VISCOSIDAD SÓLO SE APLICA EN RÉGIMEN LAMINAR... Y NO SE CUMPLE PARA FLUJO TURBULENTO”.* Sería más preciso afirmar que es un ley molecular que define al fluido newtoniano, y no al régimen fluidodinámico. En flujo turbulento, el esfuerzo medio incluye tensiones de Reynolds, lo que no invalida la ley molecular.

Ley de Newton (de la viscosidad)

Consideraciones

2. El esfuerzo cortante (*shear stress*) tiene unidades de fuerza ejercida por unidad de superficie (tensión). Al aplicarse sobre una lámina de fluido se produce el arrastre de las láminas de fluido adyacentes (según las diferentes geometrías) a través de la viscosidad del fluido. **Si la viscosidad fuese cero no habría transporte molecular viscoso de cantidad de movimiento (puede seguir existiendo un campo de velocidades no uniforme; lo que desaparece es la tensión cortante viscosa asociada y la condición clásica de no deslizamiento en pared).** El origen de la viscosidad es el movimiento de moléculas entre capas.

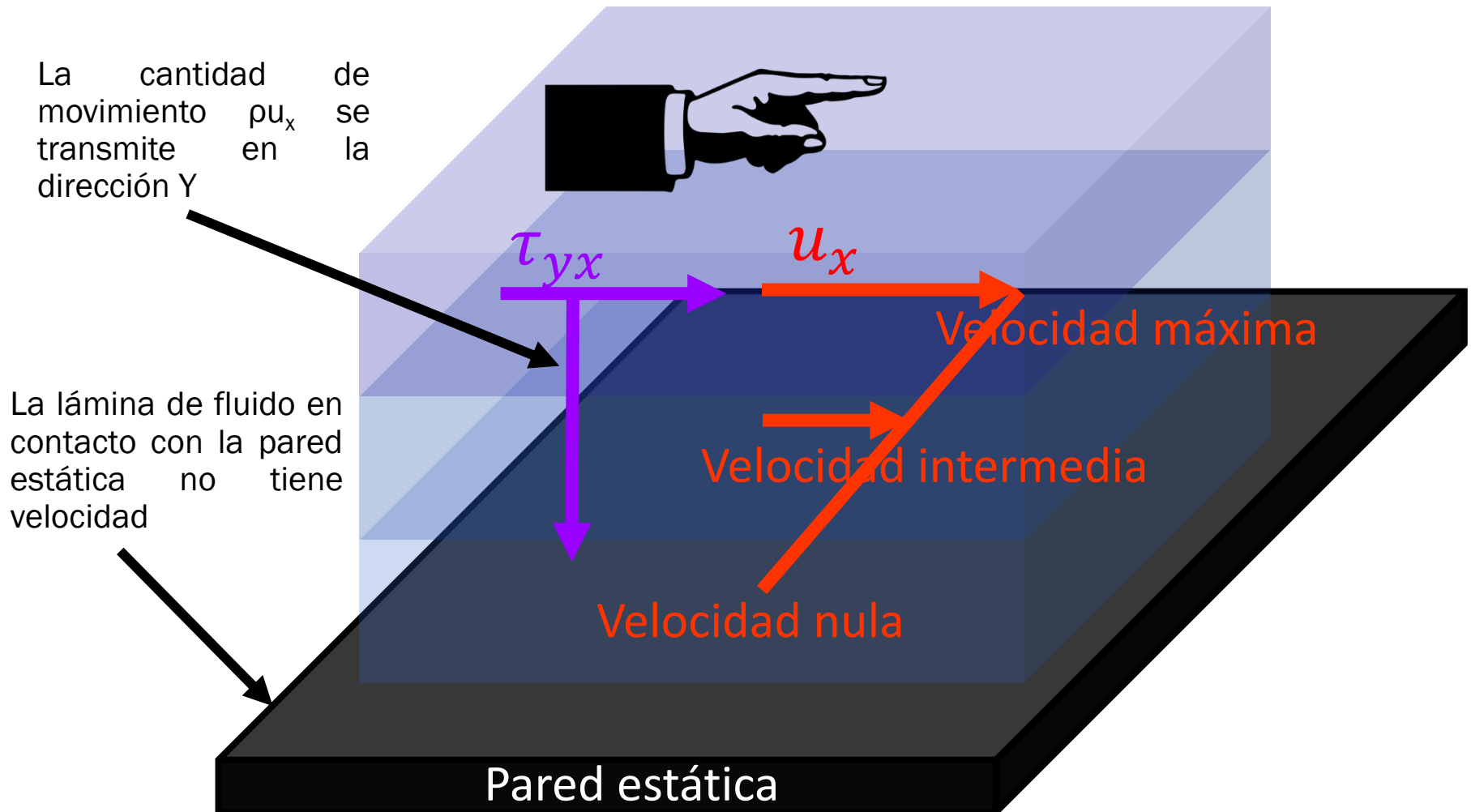
Ley de Newton (de la viscosidad)

Consideraciones

3. La velocidad del fluido u_x en las paredes estáticas es nula (*no slip boundary condition*) (no resbala). Una pared en movimiento transporta cantidad de movimiento a la lámina adyacente más próxima. Cuando una molécula de una capa lenta se difunde a otra capa más rápida, tiende a frenarla y viceversa. ESTO SUCEDE A NIVEL MICROSCÓPICO Y NO MACROSCÓPICO

Ley de Newton (de la viscosidad)

No slip boundary condition



Ley de Newton (de la viscosidad)

Consideraciones

4. Al poder existir láminas de fluido sometidas a diferentes esfuerzos cortantes, se producirá un gradiente de velocidades entre las láminas del fluido, es decir, podrá haber láminas de fluido circulando a diferentes velocidades (se transporta la cantidad de movimiento desde unas láminas a otras)

Ley de Newton (de la viscosidad)

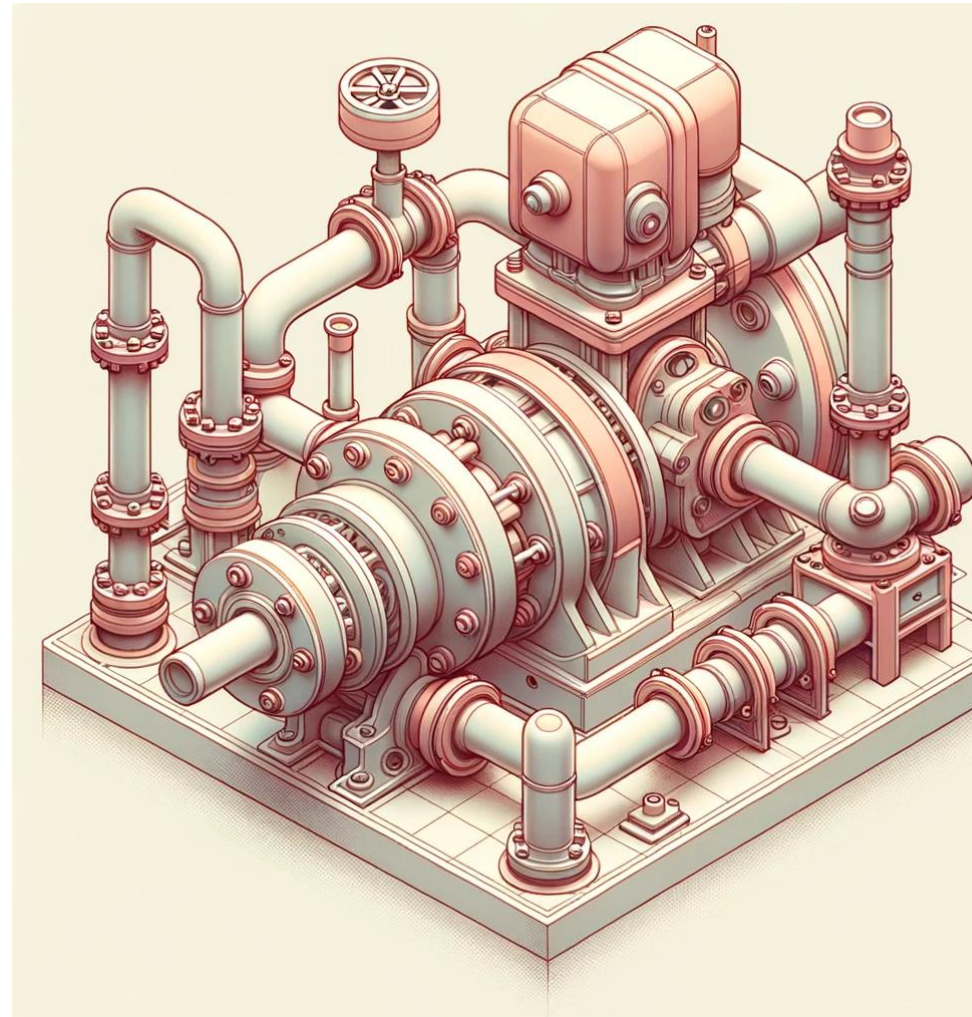
Consideraciones

5. El esfuerzo cortante representaría la densidad de flujo de cantidad de movimiento (flujo representado por unidad de superficie)
6. En la realidad, el rozamiento con las paredes implica una pérdida de energía mecánica y consecuentemente una necesidad adicional de bombeo (líquidos) o compresión (gases)

Ley de Newton (de la viscosidad)

Ejemplos de aplicación en Ingeniería Química

Cálculo de las necesidades de bombeo como consecuencia de la pérdida de carga en una tubería: dimensionado y coste de adquisición y operación (mecánica de fluidos)



Ley de Newton (de la viscosidad)

Ejemplos de aplicación en Ingeniería Química

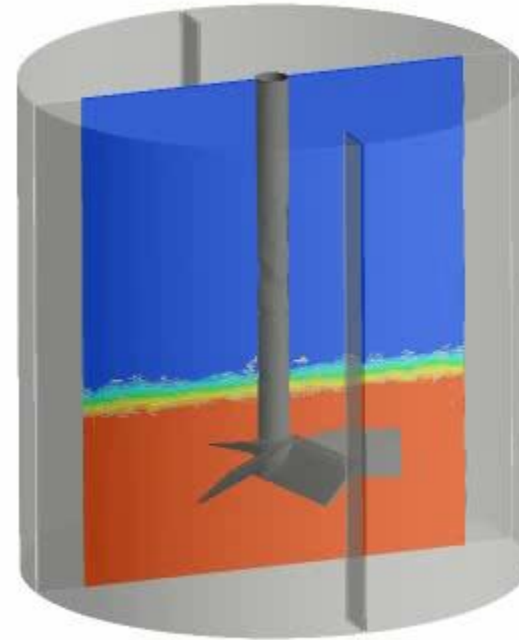
Fundamental en el desarrollo de las ecuaciones de *Navier-Stokes* para la Dinámica Computacional de Fluidos (CFD) en fluidos incompresibles



Ley de Newton (de la viscosidad)

Ejemplos de aplicación en Ingeniería Química

Fundamental en el desarrollo de las ecuaciones de *Navier-Stokes* para la Dinámica Computacional de Fluidos (CFD) en fluidos incompresibles



Fluidos no newtonianos

No dependientes del tiempo

$$|\tau_{yx}| = K \left| \frac{du_x}{dy} \right|^n$$

Ley de potencia para
pseudoplásticos
dilatantes

Término	Definición	Unidades
τ_{yx}	Esfuerzo cortante que se ejerce en la dirección x y que varía con la posición y, al aplicarse sobre el plano perpendicular a y	Pa (N·m ⁻²)
K	Índice de consistencia	Pa·s ⁿ
$\frac{du_x}{dy}$	Velocidad de deformación, tasa de deformación por cizalla, (<i>rate of shear strain</i>)	s ⁻¹
n	$n < 1$ en pseudo-plásticos (<i>shear-thinning</i>) $n > 1$ en dilatantes (<i>shear-thickening</i>)	- -

Fluidos no newtonianos

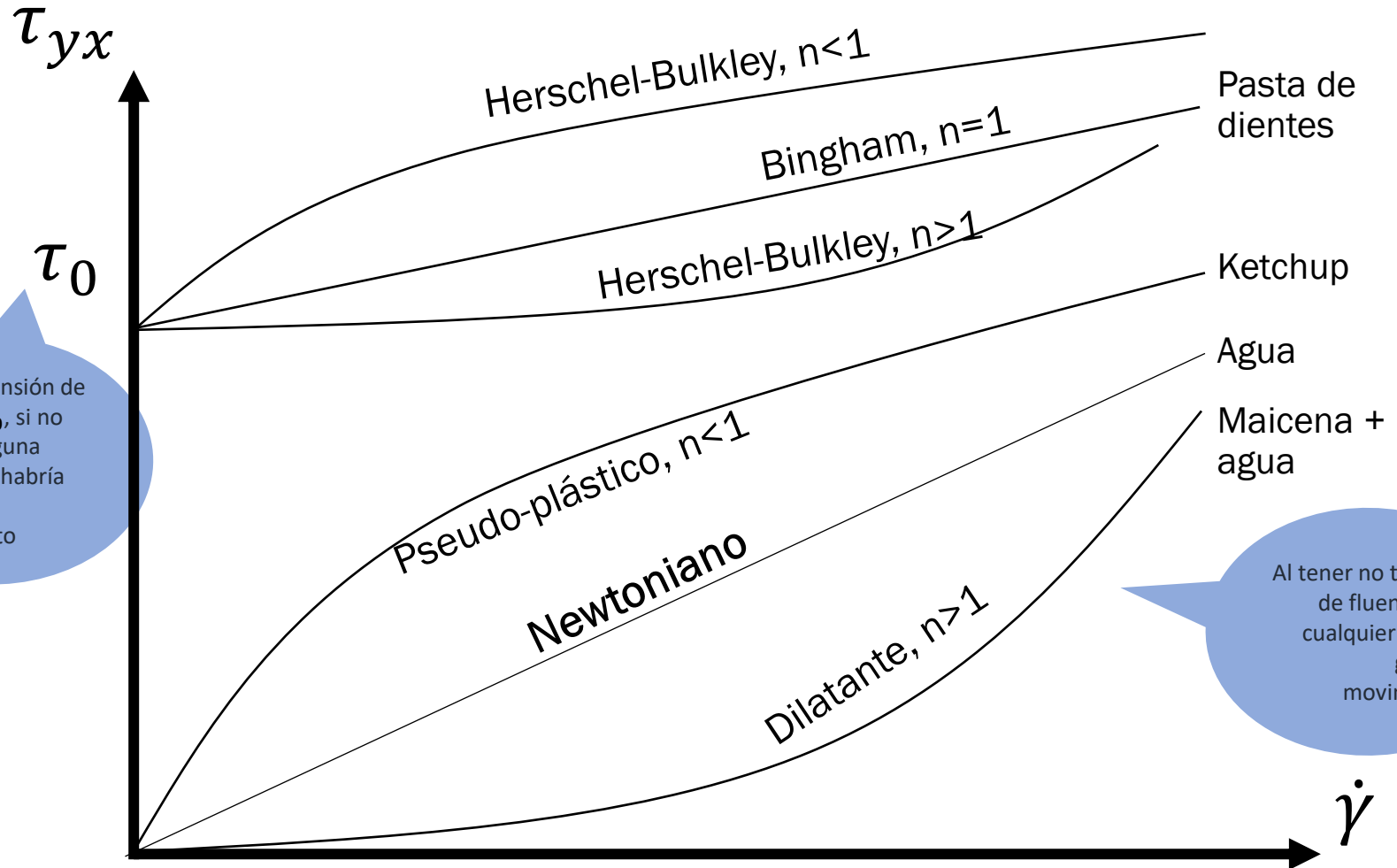
No dependientes del tiempo

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{du_x}{dy} = 0 & \text{si } |\tau_{yx}| < \tau_0 \\ |\tau_{yx}| = \tau_0 + K \left| \frac{du_x}{dy} \right|^n & \text{si } |\tau_{yx}| \geq \tau_0 \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{Herschel-Bulkley:} \\ \text{Ley de potencia} \\ \text{con tensión de} \\ \text{fluencia} \end{array}$$

Término	Definición	Unidades
τ_0	Tensión de fluencia	Pa (N·m ⁻²)
K	Índice de consistencia	Pa·s ⁿ
n	$n < 1$ en pseudo-plásticos (<i>shear-thinning</i>) $n > 1$ en dilatantes (<i>shear-thickening</i>) $n = 1$ en plásticos de Bingham	-

Fluidos no newtonianos

No dependientes del tiempo



Fluidos no newtonianos

Ejemplo: disoluciones de almidón de maíz



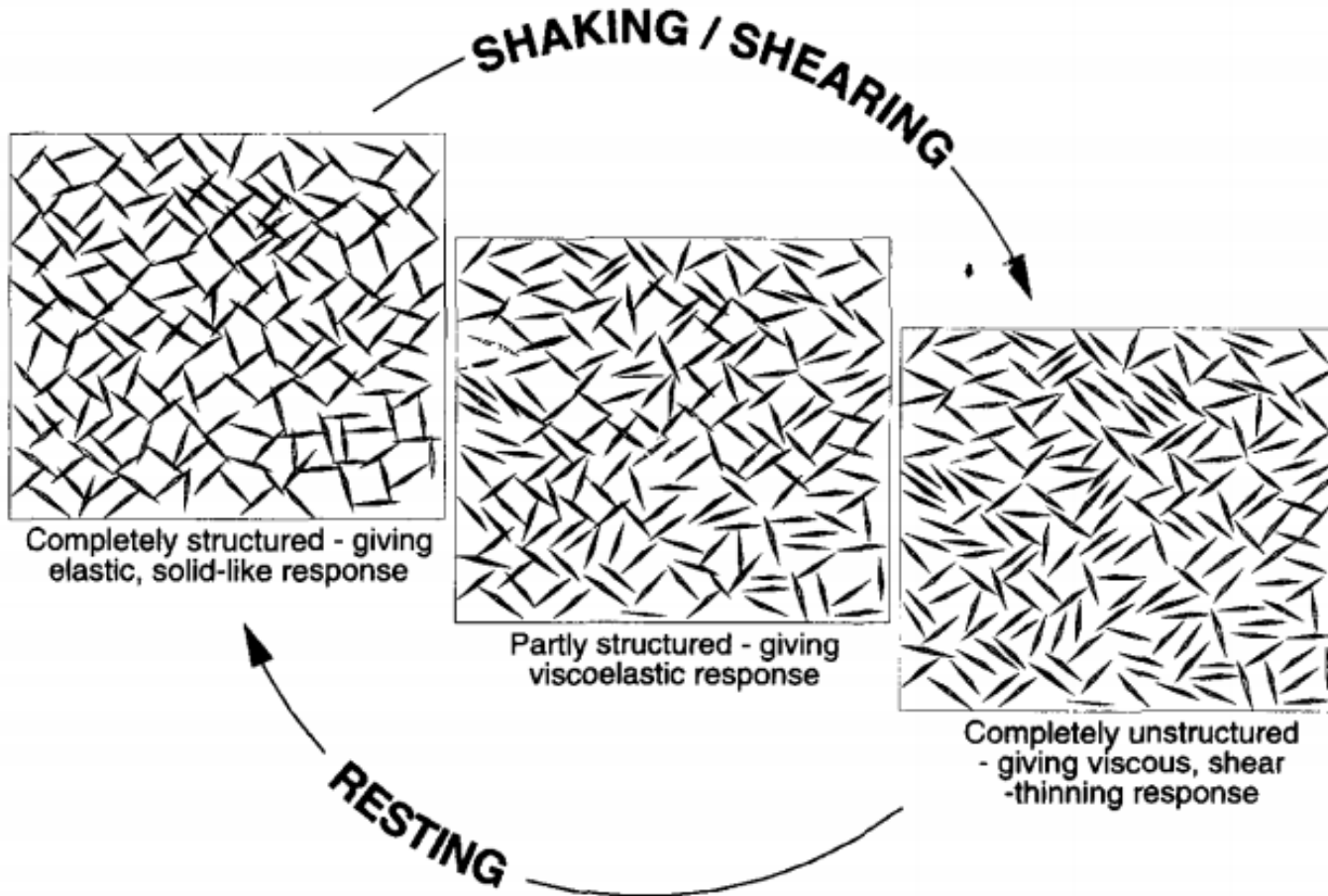
Fluidos no newtonianos

Ejemplo: disoluciones de almidón de maíz



Fluidos no newtonianos

Dependientes del tiempo: tixotropía



Fluidos no newtonianos

Dependientes del tiempo: tixotropía

Fluidos tixotrópicos

al ser sometidos a una velocidad de deformación constante en el tiempo disminuyen su viscosidad

Fluidos antitixotrópicos (reopécticos)

al ser sometidos a una velocidad de deformación constante en el tiempo aumentan su viscosidad



Clasificación de fluidos según Ley de Newton



NEWTONIANOS

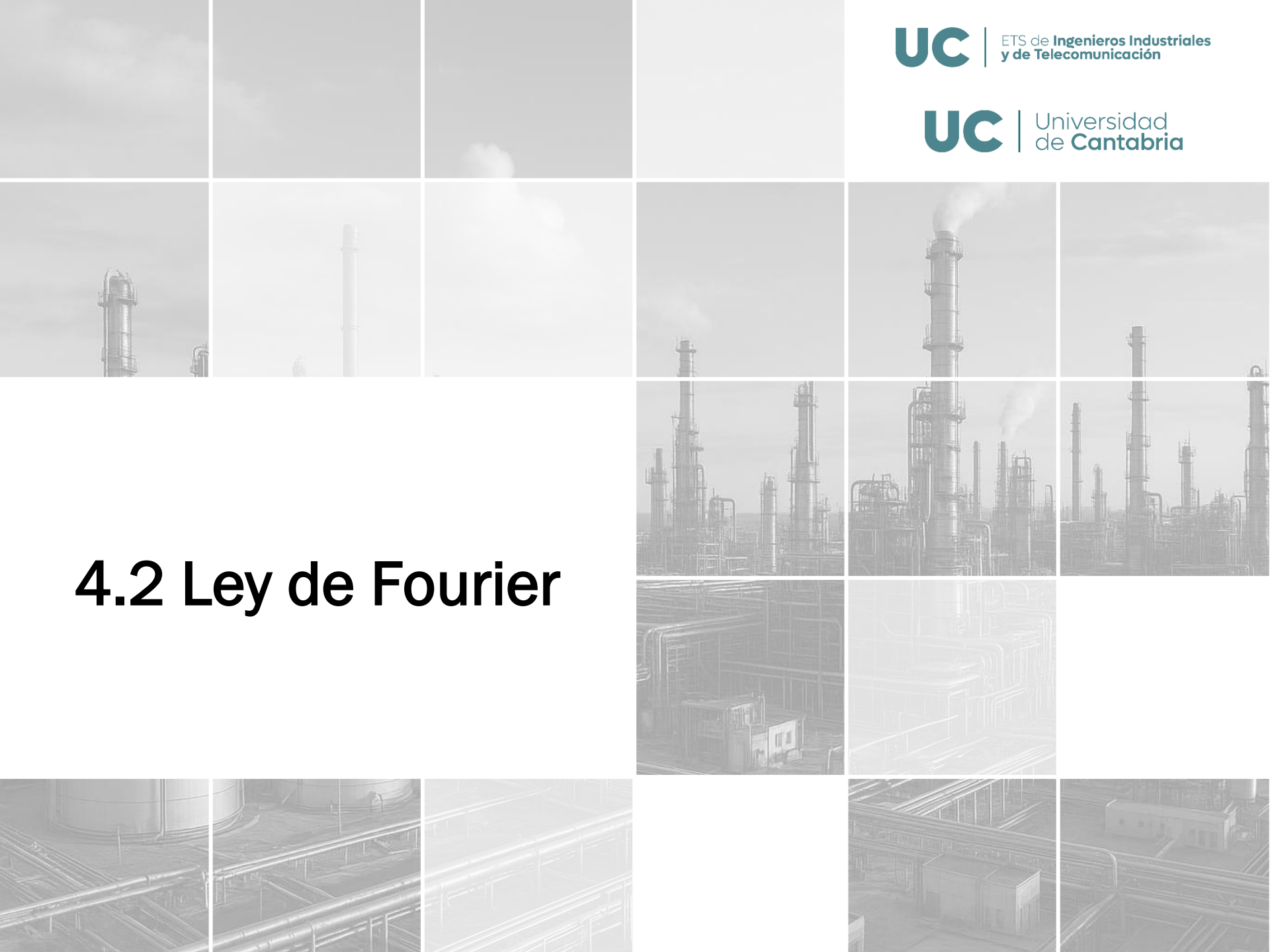
NO NEWTONIANOS

No dependientes del tiempo
Herschel-Bulkley, (Bingham),
Dilatantes, Pseudo-plásticos

Dependientes del tiempo

Tixotrópicos
Antitixotrópicos

4.2 Ley de Fourier



Ley de Fourier (de conducción de calor)

Transporte de calor / energía

Ley de Fourier

$$q_y = -k \frac{dT}{dy}$$

para la densidad de flujo de calor en la dirección y con un gradiente de temperatura en la misma dirección

Término	Definición	Unidades
q_y	Densidad de flujo de calor en la dirección y	$\text{J}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$
T	Temperatura	K
k	Conductividad térmica	$\text{J}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
y	Distancia característica en la dirección y	m
α	Difusividad térmica =conductividad térmica/(densidad*capacidad calorífica específica)	$\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$ $q_y = -\alpha \frac{d(\rho c_p T)}{dy}$

■ Equivalente solo si ρ y c_p son constantes; no es la forma general

Ley de Fourier (de conducción de calor)

Transporte de calor / energía

INFLUENCIA DE LA TEMPERATURA

LÍQUIDOS

$T \uparrow \rightarrow k \downarrow$

GASES

$T \uparrow \rightarrow k \uparrow$

INFLUENCIA DE LA PRESIÓN

LÍQUIDOS

$T \uparrow \rightarrow k \downarrow$

GASES

$P \uparrow \rightarrow k \uparrow$

Ley de Fourier (de conducción de calor)

Transporte de calor / energía

COORDENADAS
RECTANGULARES

(placas planas, sólidos
prismáticos)

$$q_x = -k \frac{dT}{dx}$$

$$q_y = -k \frac{dT}{dy}$$

$$q_z = -k \frac{dT}{dz}$$

COORDENADAS
CILÍNDRICAS

(tuberías)

$$q_r = -k \frac{dT}{dr}$$

$$q_\theta = -k \frac{1}{r} \frac{dT}{d\theta}$$

$$q_z = -k \frac{dT}{dz}$$

COORDENADAS
ESFÉRICAS

(esferas)

$$q_r = -k \frac{dT}{dr}$$

$$q_\theta = -k \frac{1}{r} \frac{dT}{d\theta}$$

$$q_\phi = -k \frac{1}{r \sin \theta} \frac{dT}{d\phi}$$

Ley de Fourier (de conducción de calor)

Consideraciones

1. LA LEY DE FOURIER SE APLICA ÚNICAMENTE PARA EL MECANISMO DE CONDUCCIÓN POR CALOR (NO EN CONVECCIÓN O EN RADIACIÓN)
2. Mientras que el esfuerzo cortante (*shear stress*) considera una dirección determinada sobre un plano (tiene nueve componentes totales, es decir tiene tratamiento vectorial), la densidad de flujo de calor para una dirección sólo tiene esa componente

Ley de Fourier (de conducción de calor)

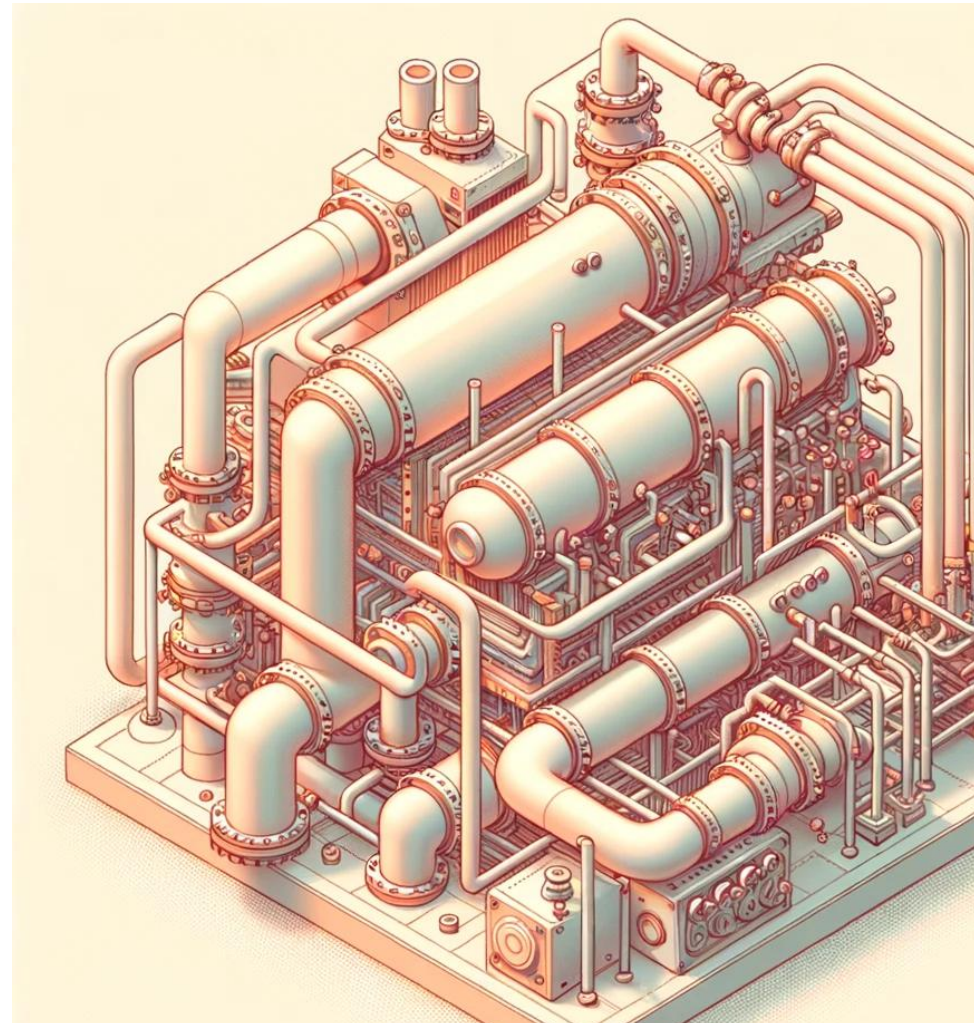
Consideraciones

3. La densidad de flujo de calor tiene sentido positivo desde el punto de más temperatura al punto de menos temperatura, es decir tiene sentido contrario al gradiente positivo de temperatura

Ley de Fourier (de conducción de calor)

Consideraciones

Cálculo de las necesidades de **calentamiento** o **enfriamiento** en un equipo, lo cual determina el consumo de combustible/refrigeración en el proceso químico y por tanto su viabilidad económica (*p.ej.: la viabilidad de una destilación depende de la cantidad de calor que hay aportar en el intercambiador de calor*)



4.3 Ley de Fick

Definición de fase

“Una fase es una parte de un sistema enteramente homogénea y limitada por una superficie, y por tanto puede ser separada de las otras partes”



Difusión

Definición

El fenómeno de la **difusión** es el **resultado del movimiento de las moléculas en un medio fluido**. Si se observa el movimiento de las moléculas en un medio fluido desde el punto de vista de la escala molecular, las moléculas se mueven al azar en varias direcciones y a diferentes velocidades. El estímulo físico es causado por distintos tipos de interacciones moleculares, tamaños y formas, efectos de temperatura, etc. Todas estas causan el movimiento de un componente a través de una mezcla. **Implica el transporte neto de material dentro de una única fase en ausencia de mezclado.**



By Sbyrnes321 - Own work, Public Domain,
<https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=8995324>

Difusión

Tipos de difusión

- **Difusión molecular:** Se debe al movimiento aleatorio de las moléculas dentro de un gas, líquido o sólido.
- **Difusión por remolinos (*Eddy diffusion*):** se debe al mezclado macroscópico en un fluido, lo que implica flujo convectivo y difusión molecular

Difusión

Tipos de difusión

Diffusion

COLD WATER,
LESS VIBRATING
MOLECULES



HOT WATER,
MORE VIBRATING
MOLECULES



Higher temperatures increase the energy and therefore the movement of the molecules, increasing the rate of diffusion. Lower temperatures decrease the energy of the molecules, thus decreasing the rate of diffusion.



Subscribe



Difusión

Tipos de difusión

- **Difusión térmica:** si en una región de una mezcla existe un gradiente de temperaturas de tal forma que hay flujo de calor, entonces aparece un gradiente de concentraciones. En una mezcla binaria, una molécula va a la zona fría y otra a la zona caliente (efecto Soret). El efecto recíproco —la aparición de un flujo de calor inducido por gradientes de concentración en una mezcla— se denomina efecto Dufour
- **Difusión por presión:** como consecuencia de un gradiente de presión (ultracentrifugación)
- **Difusión forzada:** actuación de una fuerza externa diferente de la gravedad, como por ejemplo sobre los iones en un electrolito dentro de un campo eléctrico

Difusión

Difusión en sólidos porosos

- **Poros: macroscópicos y microscópicos.** Fundamental para reacciones con sólidos porosos, adsorción, lixiviación, lechos rellenos, lechos fluidizados, etc. La difusividad efectiva en un sólido es menor que en un fluido debido a la tortuosidad. La difusión de Knudsen ocurre cuando el tamaño de los poros se acerca al camino medio libre de las moléculas gaseosas (choque con paredes en lugar de moléculas)
- **Películas poliméricas:** fundamental en separaciones con membranas. La difusión tiene lugar fundamentalmente a través de las regiones amorfas. Hay mayor orden que en sólidos porosos
- **Sólidos cristalinos:** la anisotropía hace que la difusividad sea diferente según las direcciones

Ley de Fick (de la difusión)

Transporte de materia

Primera Ley de Fick

$$J_A = -D_{AB} \frac{dC_A}{dz}$$

para la densidad de flujo de materia en la dirección z con un gradiente de concentración de A en la misma dirección en una solución compuesta por A y B

Término	Definición	Unidades
J_A	Densidad de flujo de A por difusión en la dirección z	$\text{mol}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$
C_A	Concentración de A	$\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$
D_{AB}	Difusividad de A en B	$\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$
z	Distancia en la dirección z	m

Difusividad

D_{AB}

La difusividad o coeficiente de difusión es una función de la temperatura y de la concentración, pero no del gradiente de concentración. Usualmente en cm^2/s

Gases $0,1 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$

Líquidos $10^{-5} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$

Sólidos $10^{-30} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
(en polímeros $10^{-18} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$)

Estimación de difusividades moleculares en gases

Ecuación de Fuller (aire)

$$D_{AB} = 10^{-3} T^{1,75} \sqrt{\frac{\frac{M_A + M_B}{M_A M_B}}{\left[P \left(V_A^{1/3} + V_B^{1/3} \right) \right]^2}} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

Término	Definición	Unidades
D_{AB}	Difusividad de A en B	$\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
M_i	Peso molecular de la especie i (A soluto, B aire)	$\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$
V_i	Volumen molar de la especie i	$\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
P	Presión	atm
T	Temperatura	K

Estimación de difusividades moleculares en gases

Ecuación de Hirschfelder

$$D_{AB} = 1,858 \cdot 10^{-7} T^{3/2} \frac{\sqrt{\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}}}{\left[\left(\frac{P}{101325} \right) \left(\frac{\sigma_A + \sigma_B}{2} \right)^2 \Omega \left(T \sqrt{\left(\frac{k}{\varepsilon_A} \right) \cdot \left(\frac{k}{\varepsilon_B} \right)} \right) \right]} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

Término	Definición	Unidades
M_i	Peso molecular de la especie i (A soluto, B aire)	$\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$
σ_i	Diámetros de colisión de la especie i	Ångström
$\Omega(T_D)$	Integral de colisión	
ε_i	Energía característica de la especie i	J
P	Presión	Pa
T	Temperatura	K
k	Constante de Boltzmann, $1,38 \cdot 10^{-23}$	$\text{J} \cdot \text{K}^{-1}$

Estimación de difusividades moleculares en liq.

Ecuación de Wilke-Chang (agua)

$$D_{BW} = 7,4 \cdot 10^{-8} T \frac{\sqrt{\Phi_W M_W}}{\mu_W [V_B^{0,6}]} \quad \text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

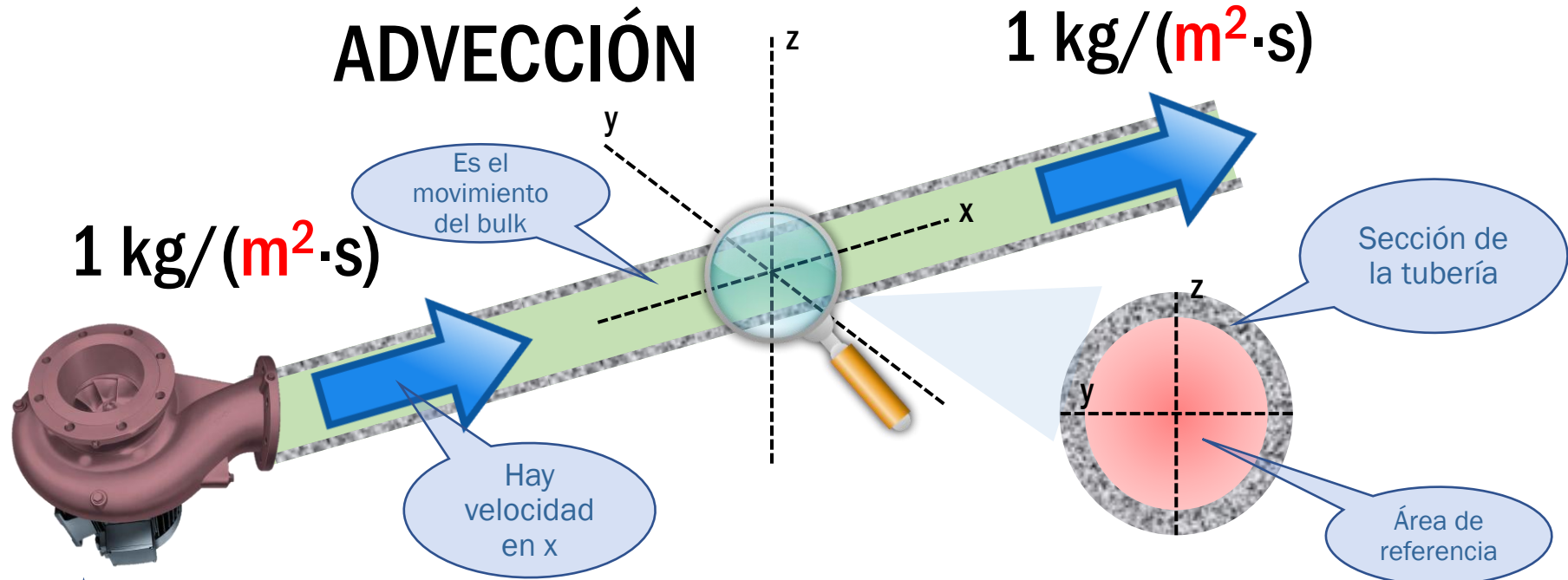
Término	Definición	Unidades
M_W	Peso molecular del agua	$\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$
Φ_W	Factor de asociación del disolvente -agua- (2,6)	-
μ_W	Viscosidad del agua	cP
V_B	Volumen molar del soluto a su temperatura de ebullición	$\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
T	Temperatura	K

* $\Phi_W = 2,6$; $\Phi_{disol\ org} = 1$; $\Phi_{Alcoholes} = 1,5$; ** $\Phi_W = 2,26$;

Transferencia de materia

Convección: advección y difusión

ADVECCIÓN



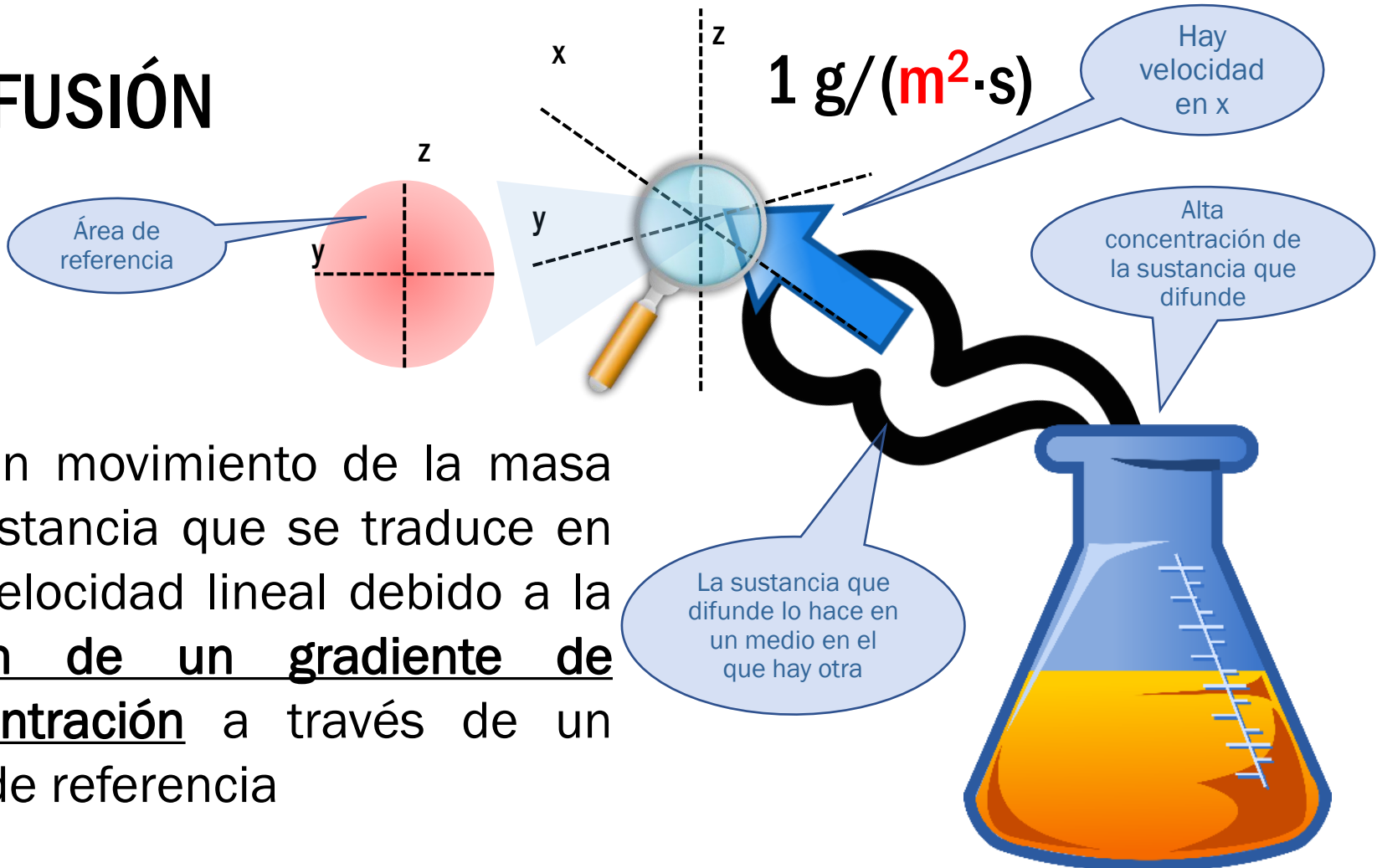
Hay un movimiento conjunto (en bloque) de la masa de fluido a través de un área de referencia, que se manifiesta como una velocidad media del fluido. Habitualmente impulsado por fuerzas externas (presión, gravedad...).

¡Podría actuar la gravedad!

Transferencia de materia

Convección: advección y difusión

DIFUSIÓN



Hay un movimiento de la masa de sustancia que se traduce en una velocidad lineal debido a la acción de un gradiente de concentración a través de un área de referencia

Transferencia de materia

Convección: advección y difusión

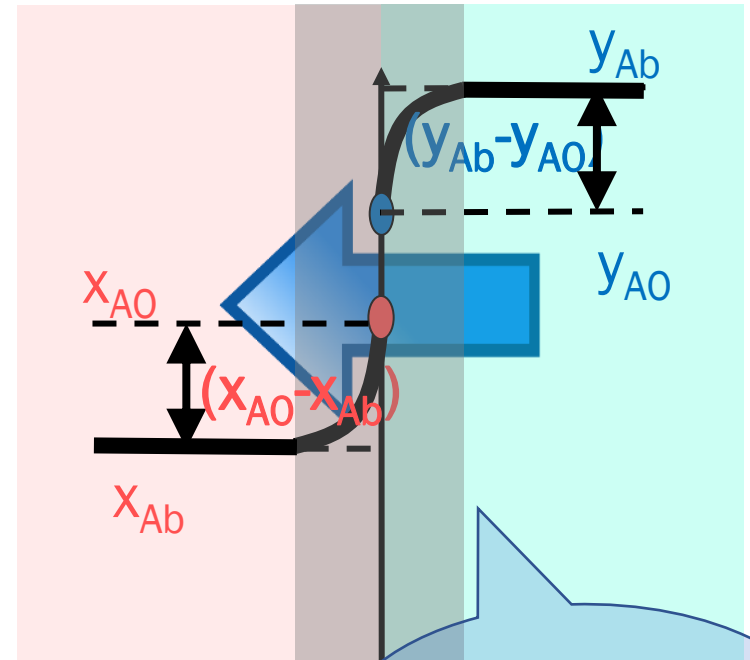
La transferencia de materia por convección implica la existencia de dos fenómenos acoplados: la advección y la difusión. La advección es el transporte por el movimiento conjunto (bulk) del fluido; este movimiento suele estar inducido por fuerzas externas como la presión o la gravedad. La difusión ocurre debido a gradientes de concentración.

En ciertos casos, la difusión puede generar convección de manera indirecta al producir un gradiente de densidad, lo que se conoce como convección natural.

Transferencia de materia

Definición

Es el movimiento de un componente desde una fase a otra debido a la diferencia de concentración entre las fases. La transferencia de materia abarca la **difusión** (a través de la interfase) y la **convección** por corrientes establecidas debido a flujos, laminar o turbulento, diferencias de temperatura y concentración, diferencias, que **son complementarias entre sí**, y siempre a través de los límites interfaciales.



Cuanto más intensa es la convección en ambas fases fluidas, mayor será la transferencia de materia hacia la interfase

Contradifusión equimolecular

Definición

Tiene lugar cuando por cada molécula de una especie que se difunde en una dirección (N_A), hay difusión de otra molécula en la dirección opuesta (N_B). Como resultado **no hay flujo molar neto a través de la interfase** ($N_A + N_B = 0$). *En destilación, por ejemplo, por cada molécula que se evapora desde la fase líquida, habrá otra molécula que se condense desde la fase vapor, de tal forma que el número de moléculas en cada fase permanece constante (no hay pérdidas de calor con el exterior –adiabático– y los calores latentes de vaporización son similares)*

$$(N_A + N_B) = 0$$

$$J_A = -J_B$$

Tanque 2 inicialmente
cargado con B, a T y P cte.

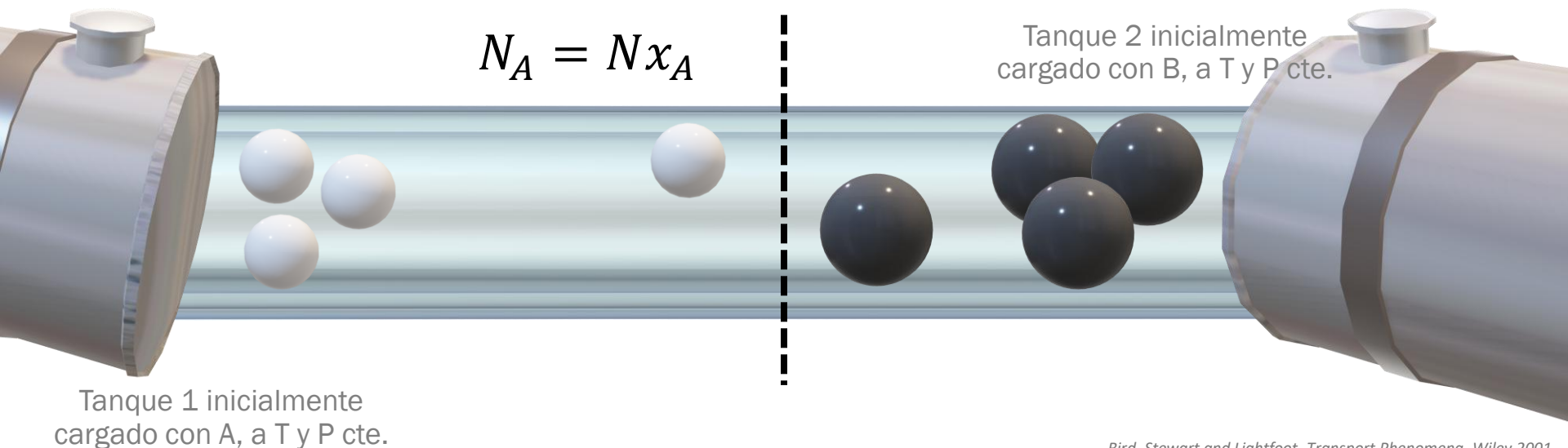
Tanque 1 inicialmente
cargado con A, a T y P cte.

N_i es la densidad de flujo de materia de la especie i y J_i es la componente difusiva

Película estancada

Definición

Tiene lugar cuando por cada molécula de una especie se difunde en una dirección (N_A), no hay difusión de otra molécula en la dirección opuesta ($N_B = 0$). Como resultado **hay flujo molar neto a través de la interfase** ($N_A = N x_A$). Esta situación se produce cuando la especie B es insoluble en el seno de la fase compuesta por la especie A

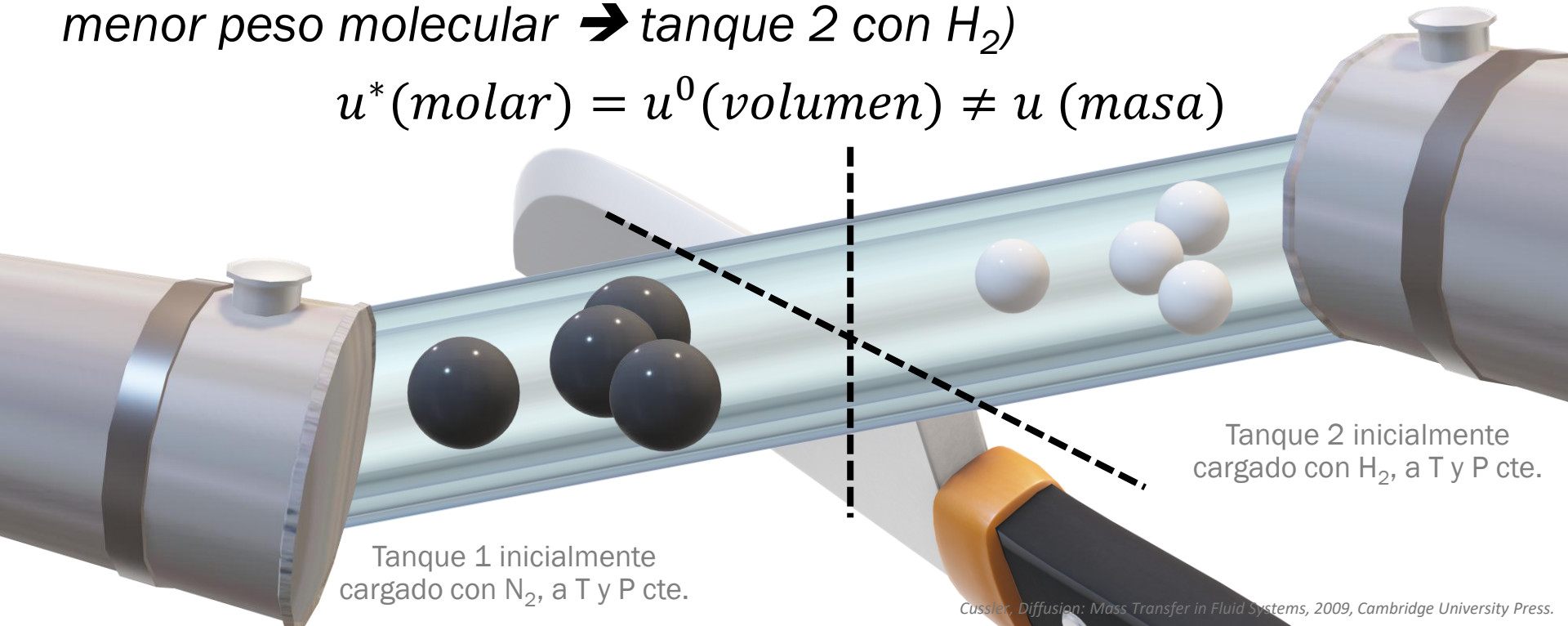


Formas de la ecuación de difusión

Influencia de la velocidad promedio de referencia

Debido a que las especies poseen diferentes pesos moleculares, la velocidad promedio molar u^* y la velocidad promedio volumétrica u^0 serían nulas, pero no la velocidad másica promedio u (hay velocidad másica neta en la dirección del de menor peso molecular → tanque 2 con H_2)

$$u^*(\text{molar}) = u^0(\text{volumen}) \neq u(\text{masa})$$



Formas de la ecuación de difusión

Referenciada a la velocidad volumétrica u^0

$$N_A = C_A u^0 + J_A$$

Depende de una velocidad promedio: en función de la velocidad promedio que tome u^* (molar), u^0 (volumen), o u (masa) tendré un valor u otro

Densidad de flujo de A por flujo difusivo
(componente difusiva)

Densidad de flujo de A por flujo advectivo
(componente advectiva)

Densidad de flujo molar total de A con referencia a la velocidad volumétrica u^0

Mejor ajuste general, válido para líquidos con densidades constantes y gases ideales y se puede usar masa o moles para la concentración

En la expresión de la densidad de flujo de materia, la advección no tiene que ser necesariamente por un gradiente de presión externo (forzada), sino también como consecuencia del movimiento relativo entre las especies en el fluido: es el debido al movimiento conjunto (en masa) del fluido

$$u^0 = C_1 \bar{V}_1 u_1 + C_2 \bar{V}_2 u_2$$

Término	Definición	Unidades (ej. en moles)
N_i	Densidad de flujo total de materia de la especie i en la dirección z	$\text{mol} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$
C_i	Concentración de la especie i	$\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$
V_i	Volumen específico de la especie i	$\text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
u_i	Velocidad lineal de la especie i	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$

Formas de la ecuación de difusión

Referenciada a la velocidad volumétrica u^0

$$N_A = (N_A + N_B)x_A - D_{AB} \frac{dC_A}{dz}$$

Densidad de flujo molar total de A con referencia a la velocidad volumétrica u^0

¡La ecuación de difusión no es la ley de Fick!

Densidad de flujo de A por flujo difusivo (componente difusiva)

Densidad de flujo de A por flujo advectivo (componente advectiva)

Término	Definición	Unidades
N_i	Densidad de flujo total de materia de i en la dirección z	$\text{mol}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$
x_i	Fracción molar de i	-

Ley de Fick (de la difusión)

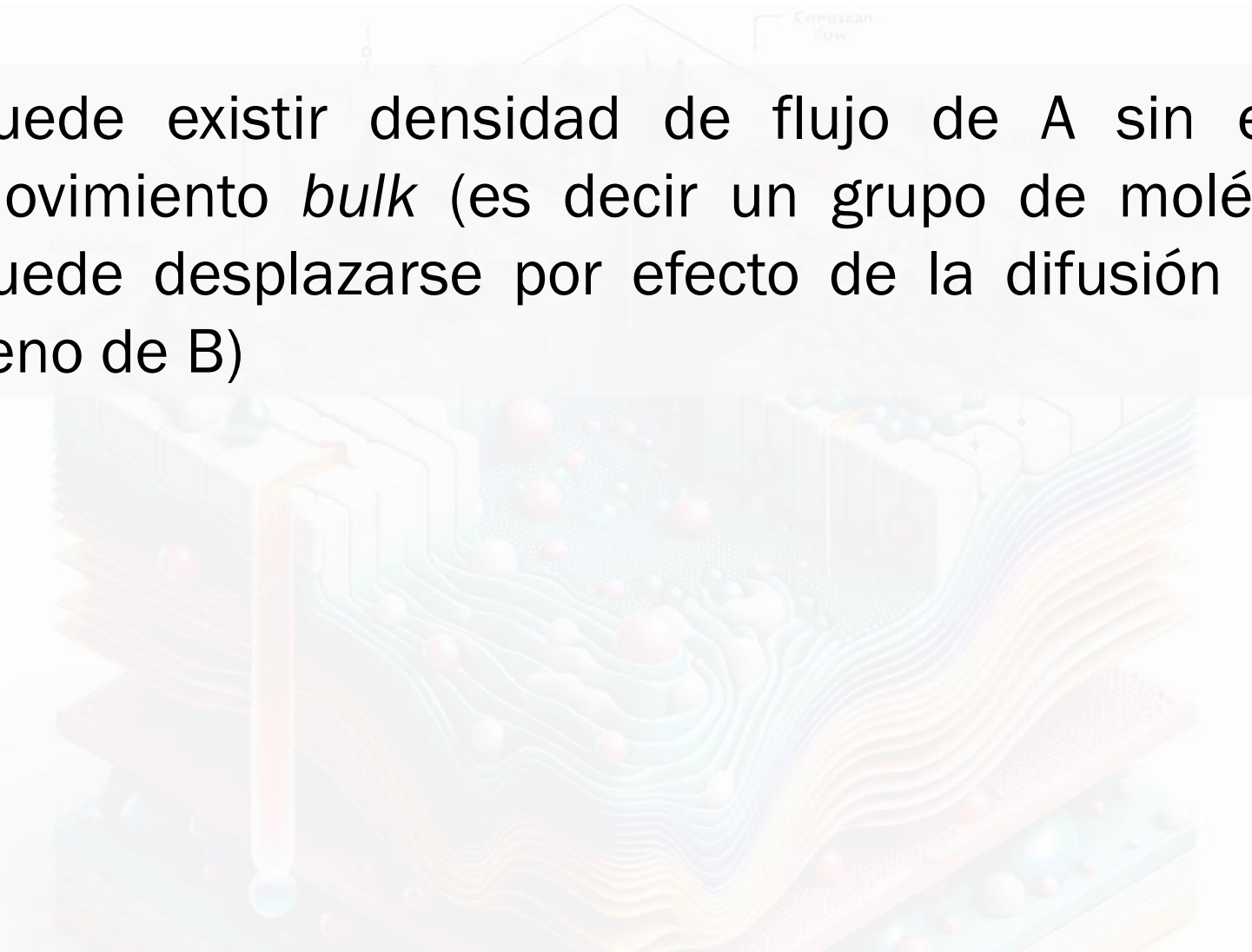
Consideraciones

1. LA LEY DE FICK EXPRESA LA DIFUSIÓN MOLECULAR DE UNA SUSTANCIA A EN OTRA SUSTANCIA B (a través de la difusividad / coeficiente de difusión de A en B)
2. Es fundamental distinguir entre la contribución *bulk* al movimiento de A, fundamentalmente por la velocidad de la corriente, y la contribución por la difusión definida a través de la Ley de Fick. La densidad de flujo total para la sustancia A será la suma de ambas.

Ley de Fick (de la difusión)

Consideraciones

3. Puede existir densidad de flujo de A sin existir movimiento *bulk* (es decir un grupo de moléculas puede desplazarse por efecto de la difusión en el seno de B)



Analogías de las leyes de transporte

Elemento	LEY DE NEWTON	LEY DE FOURIER	LEY DE FICK
Transporte (densidades de flujos de propiedades extensivas)	Cantidad de movimiento $(kg \cdot \frac{m}{s})$	Calor (J)	Materia (mol) <i>Vinculadas a la masa</i>
Variable intensiva (su gradiente impulsa el transporte)	Velocidad $(\frac{m}{s})$	Temperatura (K) <i>Propiedades intensivas que impulsan flujos de propiedades extensivas</i>	Concentración $(\frac{mol}{m^3})$
Propiedad de transporte <i>Unidades de área por unidad de tiempo</i>	Viscosidad cinemática	Difusividad térmica	Difusividad molecular de A en B

Analogías de las leyes de transporte

$$\Gamma = \frac{\Delta\Pi}{R}$$

Término	Definición
Γ	Densidad de flujo de la propiedad extensiva
$\Delta\pi$	Fuerza impulsora gradiente de la propiedad extensiva
R	Resistencia ejercida al transporte / transferencia (vinculada a la propiedad de transporte como su inverso)

Diferencias entre las leyes de transporte

Elemento	LEY DE NEWTON	LEY DE FOURIER	LEY DE FICK
Carácter vectorial / escalar de la propiedad extensiva	Vectorial	Escalar	Escalar
Presencia de sistemas multi-componentes	No necesario	No necesario	Necesario