MI3010
Fenómenos de transporte en metalurgia extractiva

Prof. Christian Ihle
Prof. Leandro Voisin

FCFM Universidad de Chile
Departamento de Ingeniería de Minas

Ingeniería de Minas
FACULTAD DE CIENCIAS
FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
UNIVERSIDAD DE CHILE

1. Objetivos de la clase

2. Leyes de Fick (primera y segunda)

1. Conocer la primera ley de Fick
2. Conocer y aplicar formas de estimar el coeficiente de difusión de masa en términos de la temperatura, y la presión
3. Conocer el origen de la ecuación de advección-difusión para el transporte de masa
4. Conocer la segunda ley de Fick
5. Conocer el concepto de velocidad de mezcla y concepto de transporte de masa convectivo y molar convectivo

Primera ley de Fick

$$\vec{j}_A = -\rho D_{AB} \nabla \lambda_A, \tag{1}$$

en que λ_A es la concentración másica de la especie A $\left(= \frac{\text{masa de la especie } A}{\text{masa total}}\right)$, D_{AB} es el coeficiente de difusión de la especie A en B (en el sistema SI, $[D_{AB}] = \mathrm{m}^2/\mathrm{s}$ y $[\vec{j}_A] = \mathrm{kg/m^2s}$) y ρ la densidad de la mezcla. En general, λ_A es una función del espacio y del tiempo. Nótese que $\vec{j}$ es un flujo unitario (por unidad de área). El flujo másico a calcular será $\int_S \vec{j} \cdot \hat{n} \mathrm{d}S$, en que $\hat{n}$ es la normal orientada hacia fuera de la frontera S.

Coeficientes de difusión

Tabla : Rangos de órdenes de magnitud de difusividad

Sistema	Difusividad (m^2/s)
gas-gas	10^{-5} a 10^{-6}
líquido-líquido	10^{-9} a 10^{-11}
líquido-sólido	10^{-9} a 10^{-11}
gas-sólido	10^{-11} a 10^{-14}
sólido-sólido	10^{-19} a 10^{-34}

Ecuación de Arrhenius

$$D(T) = D_0 \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right), \tag{2}$$

donde E_A (kJ/mol) es la energía de activación, $R = 8.314$ J/mol K es la constante de los gases y T (K) es la temperatura absoluta de la mezcla.

Slattery & Bird (gases)

$$\frac{pD_{AB}}{(p_{cA}p_{cB})^{1/3}(T_{cA}T_{cB})^{5/12}\left(\frac{1}{M_A}+\frac{1}{M_B}\right)^{1/2}} = a\left(\frac{T}{\sqrt{T_{cA}T_{cB}}}\right)^b, \tag{3}$$

con D_{AB} en cm^2/s, p en atm y T en K. Los valores de a y b son 2.745×10^{-4} y 1.823, respectivamente, para gases no polares (excluyendo H_2 y He) y 3.64×10^{-4} y 2.334, respectivamente, para mezclas entre H_2O y gases no polares. p_{cA}, p_{cB}, T_{cA} y T_{cB} son parámetros del modelo.

Chapman-Enskog (gases)

$$D_{AB} = 1.8583 \times 10^{-3} \sqrt{T^3 \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)} \frac{1}{p\sigma_{AB}^2 \Omega_{D,AB}}, \tag{4}$$

con D_{AB} en cm^2/s, p en atm y T en K y σ_{AB} en Å. $\Omega_{D,AB}$ es la integral de colisión. Es función de la temperatura adimensional kT/ε_{AB}. Algunos valores están en la tabla E.2 del libro de Bird. Por otro lado σ_{AB} y ε_{AB} se expresan en función de los parámetros Lenard-Jones σ y ε:

$$\sigma_{AB} = \frac{1}{2} (\sigma_A + \sigma_B) \tag{5}$$

$$\varepsilon_{AB} = \sqrt{\varepsilon_A \varepsilon_B}. \tag{6}$$

También es posible encontrar en la tabla E.2 del Bird valores para éstos.

Wilke-Chang (líquidos)

Esta es una relación empírica para soluciones diluidas de A en B

$$D_{AB} = 7.4 \times 10^{-8} \frac{\sqrt{\varphi_B M_B}\, T}{\mu \tilde{V}_A^{0.6}}, \tag{7}$$

con D_{AB} en cm^2/s, T en K y μ en cP. $\tilde{V}_A$ es el volumen molar, en $\mathrm{cm}^3/\mathrm{mol}$ y φ_B es un parámetro de asociación y depende del solvente (2.6 para el agua).

Gases en metales (ley de Sievert)

(ejemplo, gases diatómicos):

$$x_{A,\mathrm{metal}} = K\sqrt{p_{A_{2(g)}}}, \tag{8}$$

en que p es la presión de vapor entre la fase gas y K es una constante que depende del equilibrio termodinámico ente las dos fases.

Transporte de especie (medio incompresible)

$$\frac{\partial \rho \lambda_A}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \lambda_A \vec{v}) = \nabla \cdot (\rho D_{AB} \nabla \lambda_A) + \rho r_{AB} \tag{9}$$

$$\frac{\partial \lambda_A}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \lambda_A = D_{AB} \nabla^2 \lambda_A + r_{AB} \tag{10}$$

Segunda ley de Fick

$$\frac{\partial \lambda_A}{\partial t} = D_{AB} \nabla^2 \lambda_A. \tag{11}$$

Velocidad de mezcla

$$\vec{J}_A = -\rho\lambda_A(\vec{v}_A - \vec{v}) \tag{12}$$

$$\vec{J}_B = -\rho\lambda_B(\vec{v}_B - \vec{v}) \tag{13}$$

Transporte convectivo

$$\vec{n}_A = \vec{j}_A + \rho_A \vec{v} \tag{14}$$

$$\vec{n}_A = \lambda_A (\vec{n}_A + \vec{n}_B) - \rho D_{AB} \nabla \lambda_A. \tag{15}$$