



Адсорпција и абсорпција

Сагоревање

- У процесима сагоревања, пренос масе може да се одвија из једне фазе у другу:
 - из фазе течности у гас (и обрнуто)
 - из чврсте фазе у гас (и обрнуто).

Адсорпција

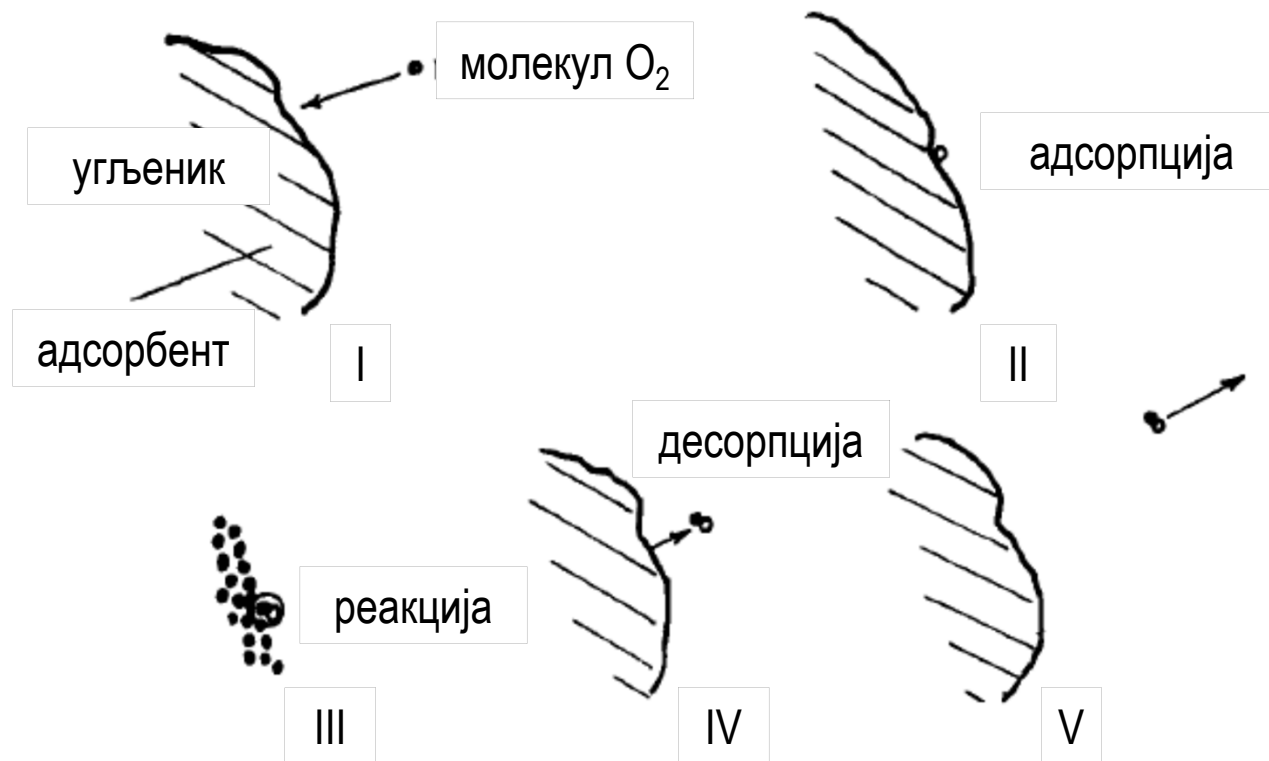
- Хетерогени процес при коме површина чврсте или течне фазе (адсорбент или сорбент) прихвата атоме, јоне или молекуле из раствора или гаса (адсорбата) који је окружују.
- Ако адсорбат продире у унутрашњост адсорбента појава се назива **абсорпција**.



Механизми везивања

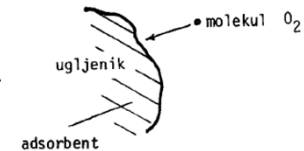
- Физички механизам везивања
 - Ван дер Валсовим међумолекуларним силама
 - ослобађа се топлота која је реда величине топлоте промене фазе адсорбата
 - брза реакција.
- Хемијски механизам везивања
 - молекули обе материје међусобно реагују и настаје хемијско једињење / хемијска једињења
 - ослобађа се знатно већа количина топлоте
 - спора реакција (енергија активације је сразмерно висока).

Реакција угљеника и кисеоника



Адсорпција - фазе

- I фаза – молекули адсорбата се крећу ка површини адсорбента



- II фаза – молекули адсорбата се адсорбују на површини



- III фаза – адсорбовани молекули реагују и образују адсорбоване продукте



- IV фаза – молекули продукта напуштају површину (десорпција)



- V фаза – молекули продукта одлазе у околину



Адсорпција - анализа

- Посматра се адсорпција када се чврста честица налази у атмосфери једнокомпонентног гаса при притиску p и температури T
- Број молова гаса који ударе у чврсту површину у секунди по јединици површине (према кинетичкој теорији идеалних гасова)

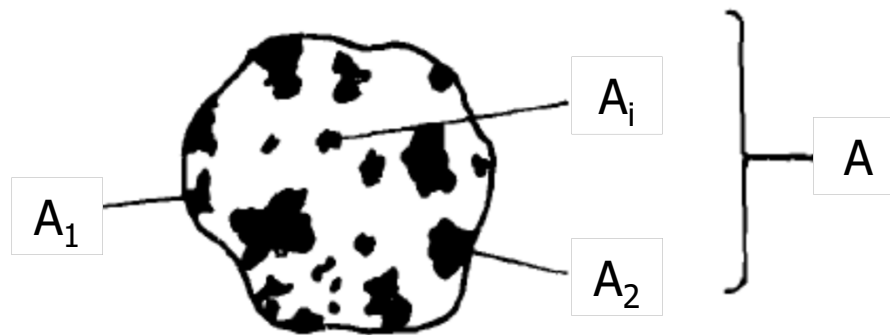
$$\beta = \frac{1}{4} c \cdot 0,925 \sqrt{\frac{3R_o T}{M}} = n \cdot p$$

где су:

c - концентрација гаса

M - молекулска маса гаса

Адсорпција - анализа



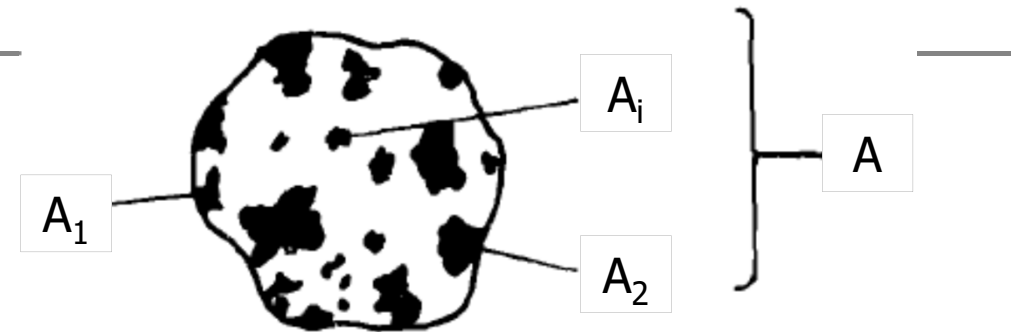
ΣA_i - површина честице прекривена
адсорбованим молекулима

$A - \Sigma A_i$ - слободна површина честице, на којој
нема молекула гаса

$\Theta = \Sigma A_i / A$ - релативна површина честице прекривена
молекулима адсорбованог гаса

$1 - \Theta$ - релативна слободна површина

Адсорпција - анализа



- $\beta(1-\Theta)$ - број молова гаса који удари у слободну јединичну површину честице
- α - фактор акомодације дефинише број молекула који удари у слободну површину и који је адсорбован
- $\alpha\beta(1-\Theta)$ - број молова адсорбованог гаса у јединици времена по јединици површине
- $\mu\Theta$ - број молова адсорбованих молекула који се у секунди са јединице површине враћа у гас

Адсорпција - анализа

- Укупна брзина адсорпције

$$b = \alpha\beta(1 - \theta) - \mu\theta$$

коефицијенти α и μ

✓зависе од температуре

✓не зависе од притиска и састава гасне фазе

Адсорпција - анализа

- Равнотежно стање наступа када је укупна адсорпција једнака нули (број молова који бива адсорбован једнак је броју молова који бива десорбован)

$$\alpha\beta(1 - \theta) = \mu\theta$$

односно

$$\theta = \frac{\alpha\beta}{\mu + \alpha\beta} = \frac{\alpha n p}{\mu + \alpha n p} = \frac{k p}{1 + k p}$$

где је

$$k = \frac{\alpha n}{\mu}$$

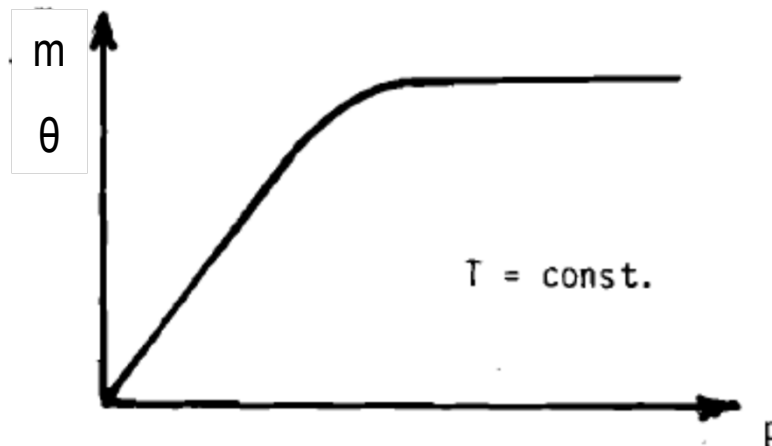
Адсорпција - анализа

- Маса адсорбованог гаса

$$m = gA\theta = \frac{gAkp}{1 + kp}$$

Изотермна адсорпције Лангмјура

где је g маса адсорбованог гаса по јединици површине



Адсорпција - анализа

$$m = gA\theta = \frac{gAkp}{1 + kp}$$

- За случај да је $kp \ll 1$

$$m = gAkp$$

$$\theta = kp$$

количина адсорбованог гаса је пропорционална притиску

- За случај да је $kp \gg 1$

$$m = gA$$

$$\theta = 1$$

Адсорпција је достигла максималну вредност и молекули су потпуно прекрили честицу.

Адсорпција - анализа



Са порастом температуре количина адсорбованог гаса опада код оба типа адсорпције.

Пренос масе

- Пренос масе код хомогених система у процесима сагоревања (гас-гас)
 - молекуларна дифузија
 - молекуларна дифузија и конвекција, истовремено.
- Конвекција
 - природна – настала услед разлике температура или концентрација
 - принудна – изазвана спољашњим силама.
- Пренос масе
 - у покретној смеши (ламинаран и турбулентан)
 - у непокретној смеши.



Дифузија

Дифузија

- Молекули материје се налазе у сталном кретању, без обзира на агрегатно стање.
- Дифузија – продор молекула материје, услед њиховог сталног, хаотичног кретања и разлике концентрација, у простор између молекула других материја (процес је карактеристичан за непокретне смеше).

Дифузија - претпоставке

- Пречници и масе молекула су приближно једнаки
- Гасови су идеални
- Притисак и температура су константни

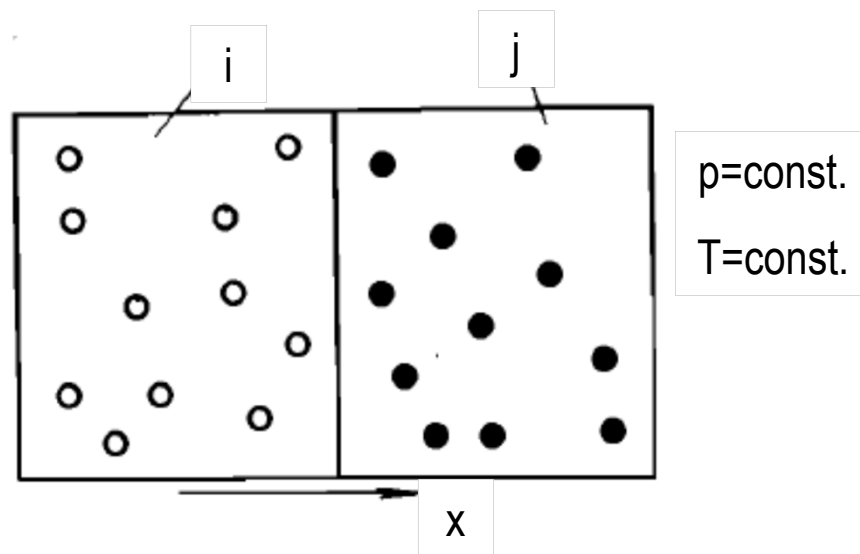
Напомена: 1 kmol гаса садржи $6,023 \cdot 10^{23}$ молекула који при притиску од 1,013 Pa и температури од 273 K испуњавају равномерно запремину од 22,4 m³.

Ако је молекул сферног облика, онда је његов пречник око $2\text{-}3 \cdot 10^{-10}$ m, а удаљеност између молекула је око 10 молекулских пречника.

Кретање молекула је праволинијско, а судари су савршено еластични

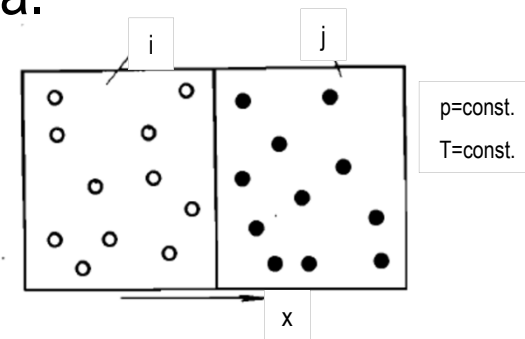
Пут који молекули пређу од претходног до следећег судара је реда величине 10 међумолекулских растојања.

Дифузија



Дифузија

- Суд произвољне запремине је подељен преградом
- У једном делу се налази гас i , а у другом гас j
- Оба гаса су на истом притиску и температури (број молекула по јединици запремине је исти)
- Кад се уклони преграда молекули материје i продиру међу молекуле j и обрнуто
- После одређеног времена оба гаса ће бити равномерно распоређена по целој запремини суда.



Дифузија - претпоставке

- Средњи слободни пут

$$\bar{l} = \frac{1}{\pi d^2 n \sqrt{2}}$$

где је

d - пречник молекула

n - број молекула по јединици запремине

- Средња вредност квадрата брзине молекула

$$\overline{u^2} = \frac{3R_o T}{M}$$

- Средња вредност брзине молекула

$$\bar{u} = 0,925 \sqrt{\overline{u^2}}$$

Дифузија - анализа

- Дифузија се описује по Фиковом (Fick) закону који је емпиријског карактера

$$G_{M_i} = -D_{ij} \frac{\partial c_i}{\partial x} \quad (\text{kmol/m}^2\text{s})$$

$$G_i = -D_{ij} \frac{\partial \rho_i}{\partial x} \quad (\text{kg/m}^2\text{s})$$

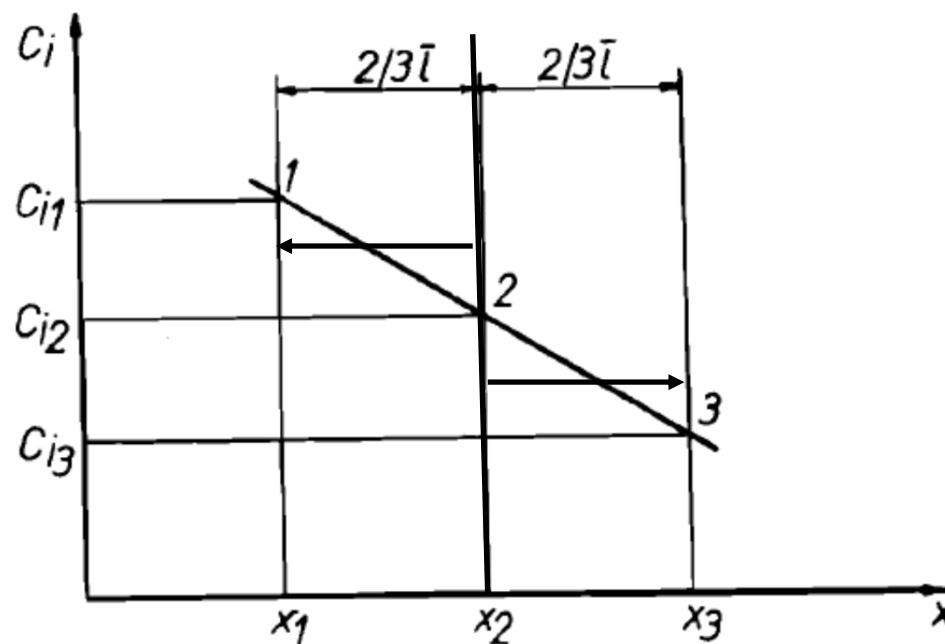
Количина материје која дифундира пропорционална је

- попречном пресеку кроз који се одвија дифузија
- градијенту концентрације материје
- прираштају времена.

где је

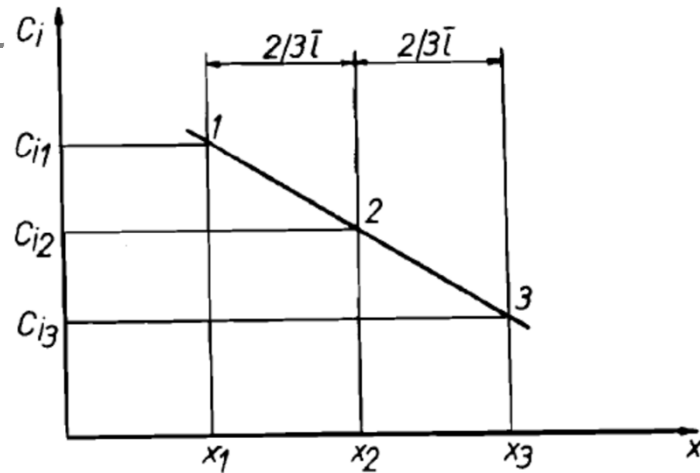
D_{ij} – физичка константа, која за одређену температуру и средину показује количину супстанције која дифундира кроз пресек у јединици времена и при градијенту концентрације једнаком јединици, коефицијент дифузије материје i у мешавини са материјом j . Негативни знак означава да је дифузија усмерена супротно позитивном градијенту концентрације материје.

Дифузија - анализа



Сваки молекул који пролази кроз раван имао је или ће имати судар на растојању од $2/3$ слободног пута.

Дифузија - анализа



Претпоставља се да је промена концентрације линеарна, односно да је

$$\frac{dc_i}{dx} = \text{const.}$$

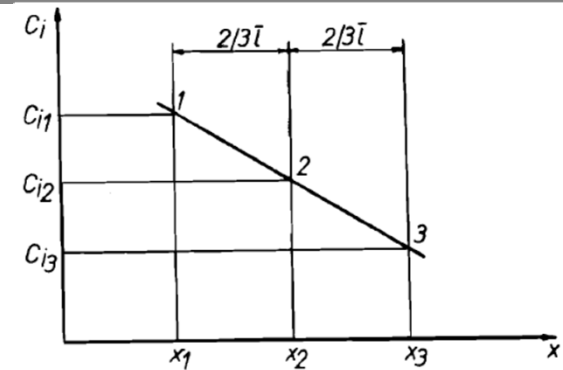
$$c_{i1} = c_{i2} - \frac{2}{3} \bar{l} \frac{dc_i}{dx}$$

$$c_{i3} = c_{i2} + \frac{2}{3} \bar{l} \frac{dc_i}{dx}$$

Дифузија - анализа

Број молекула који прођу кроз раван по јединици
површине у јединици времена

$$\frac{1}{4} \bar{c} \bar{u}$$



$$G_{M_i} = \frac{1}{4} c_{i1} \bar{u} - \frac{1}{4} c_{i3} \bar{u} = \frac{1}{4} \bar{u} \left(c_{i2} - \frac{2}{3} \bar{l} \frac{dc_i}{dx} - c_{i2} - \frac{2}{3} \bar{l} \frac{dc_i}{dx} \right) = -\frac{1}{3} \bar{l} \bar{u} \frac{dc_i}{dx}$$

$$G_{M_i} = -D_{ij} \frac{dc_i}{dx}$$

$$D_{ij} = \frac{1}{3} \bar{l} \bar{u} \quad (\text{m}^2/\text{s})$$

Дифузија - анализа

- За двокомпонентне системе

$$D_{ij} = D_{ji}$$

$$p = p_i + p_j = \text{const.}$$

$$c = c_i + c_j = \text{const.}$$

Промена концентрације једне материје истовремено изазива промену концентрације друге материје, тј. проток материје

$$G_{M_i} = G_{M_j}$$

Дифузија - анализа

- Коефицијент дифузије зависи од температуре и притиска

$$D = \frac{1,013 \cdot 10^5}{p} \left(\frac{T}{273} \right)^a D_o$$

Одређује се експериментално.

где је а у опсегу од 1,8 до 2,3

- За вишекомпонентне смеше може се одредити коефицијент дифузије ако су познати коефицијенти дифузије појединих парова

$$D_{i,smesa} = \frac{1 - r_i}{\frac{r_j}{D_{ij}} + \frac{r_k}{D_{ik}} + \frac{r_l}{D_{il}} + \dots}$$

Дифузија

- Процеси молекуларне дифузије у непокретној средини практично не постоје, осим у чврстим телима.
- У течним и гасовитим срединама је неизбежно постојање конвекције (природне или прининудне).



Закони и аналогije

Сагоревање - закони

- Фиков (Fick) закон – пренос масе

$$G_{M_i} = -D_{ij} \frac{dc_i}{dx}$$

- Фуријеов (Fourier) закон – пренос топлоте

$$q = -\lambda \frac{dT}{dx} = -a \frac{d(\rho c_p T)}{dx}$$

- Њутнов (Newton) закон – пренос количине кретања

$$\tau = -\nu \frac{d(\rho u)}{dx}$$

У процесима сагоревања истовремено се одвијају пренос масе, топлоте и количине кретања. Ове појаве се описују законитосима истог облика – **аналогне појаве**.

Сагоревање - аналогиије

- коефицијент преноса масе D
- коефицијент температурске проводности a
- коефицијент кинематске вискозности ν
- димензија m^2/s



- Аналогност се може приказати

$$D = a = \nu$$

Сагоревање – бездимензиони бројеви

- Прантлов (Prandtl) број

$$Pr = \frac{\nu}{a}$$

релативна мера преноса количине кретања и топлоте

- Шмитов (Schmidt) број

$$Sc = \frac{\nu}{D}$$

релативна мера преноса количине кретања и масе

- Луисов (Lewis) број

$$Le = \frac{a}{D} = \frac{Sc}{Pr}$$

релативна мера преноса количине топлоте и масе

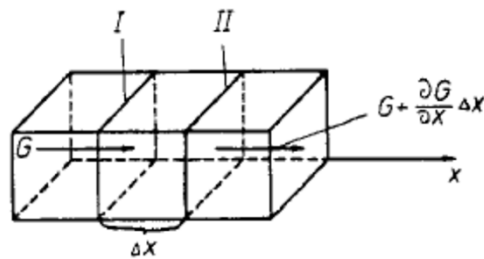
Код реалних гасних смеша

$Pr, Sc, Le < 1$

Код идеалних система

$Pr=Sc=Le=1$

Дифузија при струјању флуида



Посматра се једнодимензионо струјање у правцу x -осе.

Пресек I: количина материје која уђе $G\Delta t$

Пресек II: количина материје која изађе

$$\left(G + \frac{\partial G}{\partial x} \Delta x \right) \Delta t$$

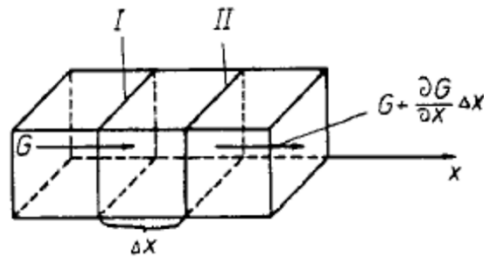
Између пресека I и II порастао је садржај материје

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \Delta t \Delta x = G\Delta t - \left(G + \frac{\partial G}{\partial x} \Delta x \right) \Delta t = -\frac{\partial G}{\partial x} \Delta x \Delta t$$



$$\frac{\partial G}{\partial x} = -\frac{\partial \rho}{\partial t}$$

Дифузија при струјању флуида и постојању хемијске реакције



У случају када постоји хемијска реакција

$$\frac{\partial G_i}{\partial x} = -\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + R_{i,reakc.}$$

Пренос масе у општем случају

$$G_i = G_{i,konv.} + G_{i,dif.}$$

$$\frac{\partial G_i}{\partial x} = \frac{\partial G_{i,konv.}}{\partial x} + \frac{\partial G_{i,dif.}}{\partial x} = \frac{\partial g_i G}{\partial x} + \frac{\partial G_{i,dif.}}{\partial x} = g_i \frac{\partial G}{\partial x} + G \frac{\partial g_i}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_i \frac{\partial \rho g_i}{\partial x} \right) = -\frac{\partial \rho g_i}{\partial t} + R_{i,reakc.}$$

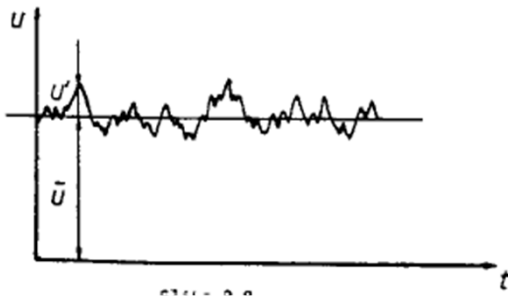
$$G \frac{\partial g_i}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_i \frac{\partial \rho g_i}{\partial x} \right) = -\frac{\rho \partial g_i}{\partial t} + R_{i,reakc.}$$



$$G \frac{dg_i}{dx} - D_i \frac{d^2 \rho g_i}{dx^2} = 0$$

Устаљено струјање без хемијских реакција, при $D_i = \text{const.}$

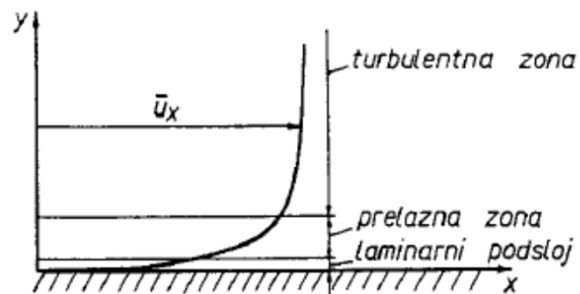
Турбулентно струјање



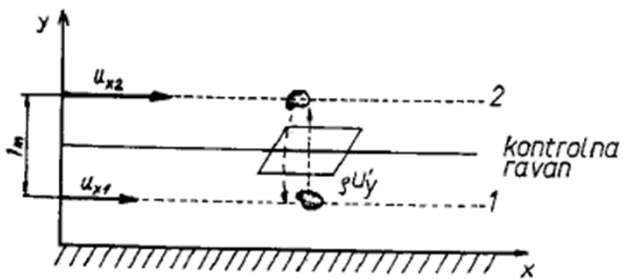
Тренутна брзина представља збир средње брзине \bar{u} и флукуационе компоненте u'

$$u = \bar{u} + u'$$

$$\bar{u} = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} u dt \right]$$



Турбулентно струјање



Разматра се количина кретања
 кроз контролну раван.

Кроз јединичну површину у јединици времена у правцу осе у прође маса флуида $\rho u_y'$ чија је брзина у правцу осе $x - u_x$. За време dt проток масе је $\rho u_y' dt$, а количина кретања кроз контролну површину по јединицу површине $\rho u_y' u_x dt$

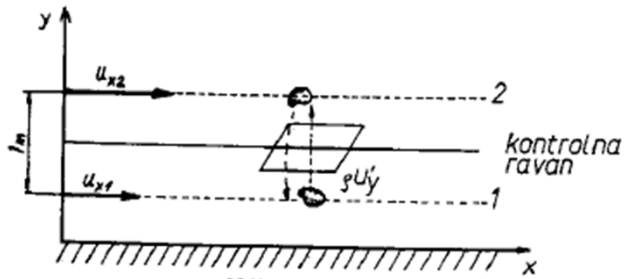
$$\lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \rho u_y' (\bar{u}_x + u_x') dt \right] = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \rho u_y' \bar{u}_x dt + \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \rho u_y' u_x' dt \right] = \overline{\rho u_y' u_x'}$$

$$\tau_{turb} = -\overline{\rho u_y' u_x'}$$

Турбулентни тангенцијални напон

Знак – означава да је пренос количине кретања у смеру негативног градијента брзине.

Турбулентно струјање



$$u_x' = u_y' = l_m \frac{d\bar{u}_x}{dy}$$

$$\tau_{turb} = -\rho l_m^2 \left| \frac{d\bar{u}_x}{dy} \right| \frac{d\bar{u}_x}{dy} = -\nu_{turb} \rho \frac{d\bar{u}_x}{dy}$$

$$\nu_{ef} = \nu_{lam} + \nu_{turb}$$

Турбулентно струјање

- Прантлов (Prandtl) број $Pr_{turb} = \frac{\nu_{turb}}{a_{turb}}$ релативна мера преноса количине кретања и топлоте
- Шмитов (Schmidt) број $Sc_{turb} = \frac{\nu_{turb}}{D_{turb}}$ релативна мера преноса количине кретања и масе
- Луисов (Lewis) број $Le_{turb} = \frac{Sc_{turb}}{Pr_{turb}}$ релативна мера преноса количине топлоте и масе

Израз за пренос масе у општем случају

$$D_{i_{efek}} = D_{ij} + \frac{\nu_{turb}}{Sc_{turb}}$$

$$Sh = 0,023 Re^{0,8} Sc^{1/3} = \frac{\beta d}{D}$$

β – коефицијент преноса масе, сложена ф-ја својства флуида, геометрије система, струјања и концентрације.

$$\beta = \frac{D}{d} 0,023 Re^{0,8} Sc^{1/3}$$

Дифузионо и кинетичко сагоревање

- Хемијске реакције и процес сагоревања одвијају се само у одређеним условима
 - молекули реактаната треба да дођу у непосредни контакт
 - молекули реактаната треба да поседују довољну енергију судара да би започели процес реакције
 - међусобни судар молекула треба да се деси само у оквиру неких њихових осетљивих тачака.

Дифузионо и кинетичко сагоревање

- Дифузионо сагоревање - ако је брзина хемијске реакције већа од брзине којом се молекули доводе у контакт (процес дифузије)
- Кинетичко сагоревање – ако је брзина хемијске реакције мала у односу на дифузију, тада је критична фаза управо хемијска реакција, тј. кинетика процеса.

Дифузионо и кинетичко сагоревање

- **Дамкелеров број** – однос карактеристичних времена процеса дифузије и кинетике хемијских реакција

$$Da = \frac{t_{dif}}{t_{kin}}$$

- $Da \ll 1$ – кинетичко сагоревање
- $Da \gg 1$ – дифузионо сагоревање