



UNIVERSIDAD DEL MAR

Campus Puerto Ángel

**Análisis de Resistencias a la Transferencia de
Masa en una Reacción de Electrólisis**

Tesis

**Que para obtener el título de
Ingeniera Ambiental**

Presenta

Iris Concepción Valdez Domínguez

Director

M en C. Alejandro Regalado Méndez

Puerto Ángel, Oaxaca, 2015

Agradecimientos

Quiero dedicar el presente trabajo a mi madre María Esther Domínguez Antonio por su infinito amor, comprensión incondicional, confianza y apoyo económico que me ha brindado desde la distancia en este proceso de crecimiento profesional, porque no dudaste en seguir impulsándome aun en los momentos inciertos. Gracias por sacrificar tus horas incontables de trabajo extra para poder mantener mi estancia en la Universidad, gracias por contestar el teléfono aún cuando tuviste un día pesado, gracias por los regaños cuando sabías que los necesitaba y gracias por nunca dejarme rendir. Te amo por siempre mamá.

A mi papá, José Guadalupe Valdez Sánchez por su amor y apoyo, tú eres motivo de inspiración constante para superarme y ser mejor profesionista. A mi tía Maguito, por mostrarme siempre su nobleza y por ser un pilar fundamental en mi vida, te amo mucho tía. A mi abuelita maguito, por cuidarme desde mi infancia y por ser un modelo de lucha constante. A mi familia, en especial a mis hermanos y primas Laura, Cristina y Ana.

A Lenin Moisés Flores Ramírez, por la compañía, cariño, amistad y confianza brindada durante esta hermosa etapa de mi vida, la vida universitaria no hubiera sido la misma sin ti.

A mis amistades que hice en esta etapa de mi vida, gente valiosa que sin duda marco mi vida por siempre, en especial a mis amigos Piña, Paquito, Hugo, Cotsi, Luis, Ernan, Julian, Mario, Tino, Gloria, Zury, Jocelyn, Martha, Brenda, Ana Laura, Liz, Berenice, Anel, Daniela, Gaby, Fátima y Nancy.

A mi Director de tesis el M en C Alejandro Regalado Méndez, por su conocimiento brindado a lo largo de mi formación profesional y por su enorme compromiso que hizo que hoy culminara esta etapa de mi vida.

Al Diputado Federal de la LXII Legislatura, José Arturo López Cándido por la confianza brindada en el último año para crecer de manera profesional y darme la oportunidad de ejercer por primera vez mi carrera.

Índice de Contenido

Índice de figuras	4
Lista de Acrónimos.....	5
Resumen.....	6
Abstract	6
1. Marco Teórico	7
1.1. Electrólisis	7
1.2. Difusión	7
1.3. Capa de difusión	7
1.4. Coeficiente de transferencia de masa.....	8
1.5. Ley de Fick	9
1.6. Capa de difusión de Nernst	9
1.7. Reacciones controladas por el transporte de masa en procesos electroquímicos ..	10
1.8. Densidad de flujo de transporte de los iones en solución diluida.....	11
1.9. Números adimensionales	12
1.10. Números adimensionales para la transferencia de masa	13
1.11. Biot de masa.....	14
1.12. Ecuación diferencial parcial.....	14
1.13. Método de diferencias finitas	15
2. Estado del Arte.....	16

3. Justificación.....	21
4. Hipótesis	22
5. Objetivos.....	22
6. Metodología	22
7. Modelos	24
7.1. Estado Estacionario.....	24
7.2. Estado transitorio	30
8. Resultados y Discusión	35
9. Conclusiones	42
10. Trabajos a Futuro	43
11. Bibliografía.....	44
Anexos	46

Índice de figuras

<i>Figura 1. Transporte de masa en la capa de difusión de Nernst se lleva a cabo principalmente por difusión y migración. Torralba, (2006) ⁵ .</i>	10
<i>Figura 2. Diagrama de metodología.</i>	24
<i>Figura 3. Sistema de degradación electrolítica.</i>	26
<i>Figura 4. Elemento de volumen de control.</i>	30
<i>Figura 5. Perfiles de concentración para diferentes B_i en estado estacionario.</i>	36
<i>Figura 6. Perfiles de concentración promedio para diferentes B_i en estado estacionario.</i>	37
<i>Figura 7. Perfil de concentración en estado transitorio para $B_i = 0.1$ y $\tau = 0.2$.</i>	39
<i>Figura 8. Perfil de concentración en estado transitorio a distintos valores de tiempo adimensional cuando a) $B_i = 0.1$, b) $B_i = 1.0$, c) $B_i = 10$ y $B_i = 100$.</i>	41
<i>Figura 9. Predicción del estado estacionario en relación al número de Biot de masa.</i>	42

Lista de Acrónimos

Variable	Descripción	Unidades
D :	Coefficiente de difusión de la especie electroactiva	$cm^2 s^{-1}$
C_A :	Concentración de la especie electroactiva	$mol m^{-3}$
$C_{A\infty}$:	Concentración de la especie electroactiva en el seno del líquido	$mol m^{-3}$
T :	Temperatura	$^{\circ}C$
A_S :	Área de sección transversal a la dirección del transporte	cm^2
J_A :	Flujo difusivo	$mol s^{-1} cm^{-2}$
N_A :	Flujo convectivo	$mol s^{-1} cm^{-2}$
t :	Tiempo	S
B_i :	Biot de masa	<i>Adimensional</i>
k_f :	Coefficiente de transferencia de masa	$m s^{-1}$
u :	Concentración adimensional	<i>Adimensional</i>
x :	Dirección del transporte de masa	Cm
C_1 :	Constante de integración	<i>Adimensional</i>
C_2 :	Constante de integración	<i>Adimensional</i>
L :	Longitud característica	M
J_i :	Flujo de la especie i a la distancia x de la superficie	$mol s^{-1} cm^{-2}$
Q :	Carga electrónica	C
$v(x)$:	Velocidad a la que se mueve un elemento de volumen de la disolución a lo largo del eje.	$m s^{-1}$
F :	Constante de Faraday	C mol^{-1}
R :	Constante de los gases ideales	$atm L mol^{-1} K^{-1}$
W_o :	Flujo molar de la especie O	$mol m^{-2} s^{-1}$
<i>Símbolos griegos</i>		
Ψ :	Definición del método cambio de variable	
δ :	Espesor de la capa de difusión	Cm
Δ :	Incremento	
ξ :	Distancia adimensional	<i>Adimensional</i>
Φ_x :	Potencial eléctrico	V
τ :	Tiempo adimensional	<i>Adimensional</i>
σ :	Conductividad eléctrica	$V A^{-1} m^{-1}$
<i>Subíndices</i>		
f :	Flujo	
O :	Especie electroactiva transportada por difusión lineal semi-infinita	
I :	Índice de cambio de la concentración en la dirección x en la malla del método de diferencias finitas	
J :	Índice de cambio de la concentración respecto al tiempo en la malla del método de diferencias finitas	

Resumen

En este trabajo se desarrolló un modelo matemático adimensional de transferencia de masa de una especie electroactiva (V.gr: contaminante orgánico) en una reacción de electrólisis. Las principales suposiciones del modelo son: i) la reacción es instantánea en la superficie del electrodo y ii) en la capa de difusión (δ) el flujo difusivo es igual al flujo convectivo. Dicho modelo fue resuelto en estado estacionario y estado transitorio y está basado en un análisis de resistencias de transferencia de masa por difusión y convección. Como principales resultados se encuentran que para el caso del estado estacionario el modelo predice que a medida que el número de Biot de masa (B_i) incrementa, la especie electroactiva alcanza fácilmente la superficie del electrodo reaccionando instantáneamente, ya que la resistencia a la transferencia de masa externa al transporte de masa disminuye. Mientras que para el estado transitorio, se realizaron múltiples simulaciones a distintos valores del número de B_i en un intervalo cerrado $B_i = [0.1, 100]$ para diferentes tiempos adimensionales (τ) en el intervalo cerrado $\tau = [0, 3.0]$, observándose que conforme el número de B_i incrementa el tiempo adimensional estacionario ($\tau^{E:E}$) disminuye. Finalmente, este estudio presenta pistas para el diseño, operación y control de un proceso de electrólisis a gran escala.

Abstract

In the present work we developed a dimensionless mathematical model for electroactive specie for the mass transfer in electrolysis reaction. Main suppositions of model are: i) reaction is instantaneous on electrode's surface and ii) On diffusion layer (δ) the diffusive flux is equal to convective flux. The model was solved in steady state and transitory state. It has been based in resistance analysis of diffusion-convection mass transfer. The main results are for the case of steady state model predicts that when the mass Biot number (B_i) increases, the electroactive species reach the electrode's surface easily and the react instantaneously on the electrode, since resistance to the external mass transfer to mass transport decreases. Whereas to the transient state, multiple simulations has been doing with different values of B_i in a closed interval $B_i = [0.1, 100]$ to different dimensionless time (τ) in the closed interval $\tau = [0, 3.0]$. It is shown that when the number of B_i increases the dimensionless time stationary ($\tau^{E:E}$) decreases. Finally, this study provides ensigns for the design, operation and control of an electrolysis process a large scale.