INFLUÊNCIA DA PERDA DE CARGA NO BICO ATOMIZADOR NA PRODUÇÃO DE NANOPARTÍCULAS POR PIRÓLISE EM *SPRAY* FLAMEJANTE

F. D. RANGEL¹, P. BIANCHI NETO², D. NORILER¹

¹ Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química

² Universidade Regional de Blumenau, Departamento de Engenharia Química

Email para contato: fernanda.dassierangel@gmail.com

RESUMO – O uso de pirólise em *spray* flamejante na obtenção de nanopartículas de óxidos metálicos gera produtos de melhor qualidade, uma vez que possuem maior grau de pureza e menor faixa de distribuição de tamanho. O processo ainda apresenta uma carência acerca dos principais fenômenos e parâmetros envolvidos. Dessa forma, o objetivo deste trabalho é a avaliação dos efeitos da perda de carga no bico atomizador sobre as condições térmicas e morfológicas da chama. Foram avaliados os campos de temperatura e velocidade, além da altura e largura da chama. Como esperado, variações nas perdas de cargas alteram o comportamento térmico e morfológico da chama, o que pode interferir nas características das nanopartículas formadas.

1. INTRODUÇÃO

Com constantes descobrimento de novas áreas de atuação, as nanopartículas continuam sendo bastante estudadas por possuírem propriedades químicas e físicas consideradas superiores quando comparadas aos mesmos compostos em escalas maiores. Um dos fatores que justificam essa superioridade é a maior fração de átomos nas superfícies das partículas nanométricas, o que lhes conferem características diferenciadas, tais como condutividade térmica, reatividade, entre outros (Rittner e Abraham, 1998).

As nanopartículas possuem uma potencial aplicação em catalisadores entretanto, o tamanho do aglomerado gerado deve ser controlado independente do tipo de suporte utilizado. Por isso, a escolha de um processamento que atenda tal restrição se torna indispensável, como a pirólise em *spray* flamejante (*Flame Spray Pyrolysis* - FSP) que, além de garantir tal restrição, geram produtos com maior grau de pureza e partículas com composições químicas e granulometria mais homogênea (Habiba et al., 2014).

O processo consiste na injeção de uma mistura de combustível e precursor pelo bico atomizador que, ao entrar em contato com um jato oxidante, evapora e forma uma chama turbulenta, estabilizada por chamas pilotos. Além disso, há uma alimentação de ar atmosférico por arraste na região da chama principal, de forma a garantir a combustão completa e oxidação do precursor. Apesar de eficaz, o FSP é utilizado apenas em pequena escala e, para realizar seu *scale-up*, é necessário conhecer todos os fenômenos químicos e físicos envolvidos no processo, além dos parâmetros que influenciam de forma significativa no produto final (Gröhn et al., 2012). Portanto, o objetivo deste trabalho é avaliar os efeitos da perda de carga no bico injetor sobre o comportamento térmico e morfológico da chama.

2. METODOLOGIA

A simulação realizada no software FLUENT 14.5 consiste em um reator composto por um bico injetor, com diâmetro interno e externo de 0,72 e 0,915 mm respectivamente, circundado pela região onde ocorre a injeção da chama piloto, que é posicionado em um prato metálico de 80 mm de diâmetro. O domínio encontra-se ilustrado na Figura 1, que também indica os dados de distribuição de gotas iniciais e os parâmetros do modelo RRB. O escoamento gás-líquido foi representado por uma abordagem Euleriana-Lagrangiana e

Figura 1 – Domínio computacional e parâmetros da distribuição RRB utilizados.

a cinética química, pelo modelo EDC (*Eddy Dissipation Concept*). Maiores detalhes da modelagem utilizada pode ser observada no trabalho de Noriler et al. (2014).

Para efeitos de simulação, foi considerado uma geometria axissimétrica, com uma malha numérica hexaédrica de aproximadamente 244 mil elementos. O diâmetro inicial das gotículas, considerando uma distribuição de tamanhos de gotas seguindo o modelo de Rosin-Rammler-Bennet (RRB) foi obtido a partir dos experimentos em *spray* a frio apresentados por Noriler et al. (2014), cujos dados encontram-se dispostos na Figura 1.

As perdas de pressões consideradas foram de 1, 1,5 e 2 bar, respectivamente. Foi obtida a morfologia¹ da chama (altura e largura) e os perfis de temperatura e velocidade.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Com base na metodologia proposta, foram obtidos os campos de temperatura e velocidade da chama para cada perda de carga considerada, conforme ilustrado na Figura 2.

¹Obtidas no ponto de máxima altura e largura na isoterma de 1500 K.

Figura 2 – Contornos de temperatura (A) e velocidade (B) obtidos da chama.

Como esperado, um aumento na perda de pressão gera picos de velocidades maiores, uma vez que há mais restrições geométricas ao escoamento. Além disso, também são geradas distribuições de tamanhos de gotas iniciais distintas, o que interfere no comportamento da chama. O perfil de velocidade associado a diferentes distribuições de gotas iniciais promovem alterações morfológicas da chama.

A Figura 3 ilustra os perfis da temperatura no eixo central do reator para cada caso. É possível observar um aumento repentino de temperatura até um valor máximo, que se deve principalmente a chama piloto. Com o aumento da posição axial, a temperatura cai devido o resfriamento gerado pelo ar de arraste que alimenta a chama. Como esperado,

Figura 3 – Perfil axial da temperatura da chama.

há uma inversão do comportamento da chama para as perdas de carga de 1 e 2 bar após o valor máximo obtido para a chama, visto que para maiores perdas de carga, há um aumento do tamanho da partícula, o que diminui a taxa evaporação, e consequentemente, a temperatura, uma vez que há diminuição do calor latente gerado.

Nota-se uma diferença significativa do perfil na região da chama principal (área des-

tacada na Figura 3) devido a distribuição do tamanho das gotas. As distribuições mais homogêneas são encontradas na perda de carga de 1,5 bar, onde ocorre a evaporação completa das gotas, fornecendo mais combustível da chama, o que aumenta o perfil de temperatura. Os resultados obtidos para a morfologia da chama no eixo axial do FSP estão disponíveis na Tabela 1.

Tabela 1 – Resultados obtidos para a morfologia da chama

Pressão (bar)	Altura da chama (mm)	Largura da chama (mm)
1	81,497	5,63
1,5	99,892	6,44
2	92,122	6,82

Os perfis de velocidade obtidos para as maiores perdas de cargas geraram chamas maiores e mais largas, como ilustrado na Tabela 1. Além disso, na região central da chama, a distribuição do tamanho de partículas dita a morfologia da chama e, por isso, para pressões menores, a chama é mais estreita e curta.

4. CONCLUSÕES

Pelo trabalho exposto, foi possível realizar uma análise inicial do processo FSP, onde se avaliou a influência da queda de pressão no bico sobre o perfil térmico e morfológico da chama. Os resultados numéricos mostraram que a condição de perda de carga de 1,5 bar apresentou a maior altura de chama, possivelmente devido a uma melhor dispersão das gotas geradas nessa condição. Com bases nisso, pretende-se implementar modelos que permitam prever os perfis das nanopartículas formadas através da solução da PBE.

5. REFERÊNCIAS

- GRÖHN, A. J.; PRATSINIS, S. E.; WEGNER, K. Fluid-particle dynamics during combustion spray aerosol synthesis of zro 2. *Chemical Engineering Journal*, 191, 491–502, 2012.
- HABIBA, K.; MAKAROV, V. I.; WEINER, B. R.; MORELL, G. Fabrication of nanomaterials by pulsed laser synthesis. *Manufacturing Nanostructures, One Central Press, Manchester, UK*, 2014.
- NORILER, D.; ROSEBROCK, C.; MADLER, L.; MEIER, H.; FRITSCHING, U. Influence of atomization and spray parameters on the flame spray process for nanoparticle production. *Atomization and Sprays*, 24(6), 2014.
- RITTNER, M. N.; ABRAHAM, T. Nanostructured materials: An overview and commercial analysis. *JOM Journal of the Minerals, Metals and Materials Society*, 50(1), 37–38, 1998.