

A maioria dos métodos de permeação eletroquímica são baseados em saltos de concentração no lado de entrada e medida do fluxo na saída. A utilização de saltos facilita a resolução das equações que modelam o sistema, mas se mostra inconveniente na presença de reações paralelas de captura de hidrogênio por defeitos cristalinos, pois o salto de concentração conduz a um coeficiente de difusão que aparentemente varia com a concentração. Neste trabalho modelamos e simulamos a difusão do hidrogênio em membranas de ferro, sujeitas a uma concentração de entrada senoidal e a condições experimentalmente adequadas, desenvolvendo assim, um método sem saltos de concentração para determinação de coeficientes de difusão e de constantes cinéticas de reações de captura-liberação de hidrogênio. O processo de difusão foi dividido nas seguintes situações, conforme o controle atuante: 1) Difusão sem armadilhas - as equações foram resolvidas utilizando o teorema de Duhamel, obtendo-se as expressões para o fluxo na saída e a diferença de fase entre a concentração na entrada e o fluxo na saída; 2) Difusão com apenas um tipo de armadilha - No caso de controle difusional, a solução é a mesma do caso 1), mas com um coeficiente de difusão efetivo. No caso de controle cinético a solução foi obtida aplicando um método semi-analítico (a obtenção de uma solução analítica está em andamento); 3) Difusão com mais de um tipo de armadilha - não fará parte deste trabalho. As condições do problema foram simuladas em computador, resultando em vários gráficos de fluxo e diferença de fase. Pela análise dos resultados conclui-se que, com a utilização de concentração oscilatória de hidrogênio é possível determinar o coeficiente de difusão sem a influência de reações paralelas, obtendo-se a relação entre diferença de fase e amplitude do fluxo de saída e parâmetros cinéticos. (CNPq)