

Determine o coeficiente de difusão do CO numa mistura gasosa cuja composição é:

$$\begin{array}{l} y_{O_2} = 0.20 \\ y_{N_2} = 0.70 \\ y_{CO} = 0.10 \end{array} \quad \left. \begin{array}{l} \text{2º calcular os} \\ y' \end{array} \right\}$$

3º Aplicar a fórmula de
coef. de dif. dum com-
posto em mistura.

A mistura está à temperatura de 298 K e à pressão de 2 atm.

Os coeficientes de difusão do CO em oxigénio e azoto são:

$$\begin{array}{ll} D_{CO-O_2} = 0.185 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s} & 273 \text{ K}, 1 \text{ atm} \\ D_{CO-N_2} = 0.192 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s} & 288 \text{ K}, 1 \text{ atm} \end{array} \quad \left. \begin{array}{l} \text{1º} \\ \text{Conv. est. com o} \\ \text{calculo empírico} \end{array} \right\}$$

$$D_{CO-\text{mistura}} = 0.102 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$$

$$D \propto (T)^{3/2} \quad D \propto \frac{1}{P}$$

$$D_{CO-O_2}^{298K, 1atm} = D_{273K, 1atm} \cdot \left(\frac{T_{298K}}{T_{273K}} \right)^{3/2}$$

$$= 0.185 \times 10^{-4} \left(\frac{298}{273} \right)^{3/2}$$

$$= 2.11 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$$

$$D_{CO-O_2}^{298K, 2atm} = D_{298K, 1atm} \cdot \left(\frac{1}{2} \right)$$

$$= 2.11 \times 10^{-5} (0.5) = 1.055 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$$

$$D_{CO-N_2}^{298K, 2\text{ atm}} = D_{CO-N_2}^{288K, 1\text{ atm}} \left(\frac{T_{298K}}{T_{288K}} \right)^{3/2} \left(\frac{P_{1\text{ atm}}}{P_{2\text{ atm}}} \right)$$

$$= 0.192 \times 10^{-1} \left(\frac{298}{288} \right)^{3/2} \left(\frac{1}{2} \right)$$

$$= 1.01 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$$

$$y'_{O_2} = \frac{0.2}{0.2 + 0.7} = 0.2222$$

$$y'_{N_2} = \frac{0.7}{0.2 + 0.7} = 0.7778$$

$$D_{CO\text{-mixt}}^{298K, 2\text{ atm}} = \frac{(y'_{O_2}) / (D_{CO-O_2}^{298K, 2\text{ atm}}) + (y'_{N_2}) / (D_{CO-N_2}^{298K, 2\text{ atm}})}{(0.2222) / (2.11 \times 10^{-5}) + (0.7778) / (1.01 \times 10^{-5})}$$

$$= 1.142 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$$

Trabalho de casa: Determine o valor do coeficiente de difusão do oxigénio em água à temperatura de 25°C utilizando as correlações de Wilke-Chang e Scheibel e compare com o valor experimental $D_{\text{oxigénio-água}} = 2.1 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$.

?

$$\frac{D_{AB}\mu_B}{T} = \frac{7.4 \times 10^{-8} (\Phi_B M_B)^{1/2}}{V_A^{0.6}}$$

wilke-chang

$$\frac{D_{AB}\mu_B}{T} = \frac{K}{V_A^{1/3}}$$

$$K = (8.2 \times 10^{-8}) \left[1 + \left(\frac{3V_B}{V_A} \right)^{2/3} \right]$$

Scheibel

$$1^\circ \quad D_{O_2-H_2O} = \frac{T}{\mu_{H_2O}} \cdot \frac{7.4 \times 10^{-8} (\Phi_B M_B)^{1/2}}{V_{H_2O}}$$

$$D_{O_2-H_2O} = \frac{(298,15)}{0,000894 \text{ Pa.s}} \cdot \frac{(7.4 \times 10^{-8}) [(2,26)(18)]^{1/2}}{(25,6 \times 10^{-6})^{0,6} \frac{\text{m}^3}{\text{mol}}} = 4,5 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$$

$$2^\circ \quad D_{O_2-H_2O} = \frac{T}{\mu_{H_2O}} \cdot \frac{K}{(V_A)^{1/3}}$$

$$K: (8.2 \times 10^{-8}) \left[1 + \left(\frac{3V_B}{V_A} \right)^{2/3} \right]$$

$$K = 8,2 \times 10^{-8} \left[1 + \left(\frac{(3)(18,1 \times 10^{-6})}{25,6 \times 10^{-8}} \right)^{\frac{3}{2}} \right]$$

$$K = 3,353 \times 10^{-7}$$

$$D_{O_2 - H_2O} = \frac{298}{0,000891} \frac{(3,353 \times 10^{-7})}{(25,6 \times 10^{-6})^{1/2}}$$

Trabalho de casa:

Considerando o transporte de O₂ e de CO₂ através de uma rolha de cortiça natural numa garrafa de vinho a 23 °C e a 1 bar:

(i) calcule o livre percurso médio para os gases O₂ e de CO₂.

(ii) Calcule o número de Knudsen.

(iii) Será que este transporte segue um comportamento difusivo de Knudsen?

Dados:

$$d_{O_2} = 3,467 \text{ \AA}$$

$$d_{CO_2} = 3,941 \text{ \AA}$$

$$k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$$

$$1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$$

$$d_{poro} = 40 \text{ nm}$$

*Calcular a seletividade
que o material da para
CO₂ e O₂*

Solução:

$$\lambda = 76 \text{ nm O}_2$$

$$\lambda = 59 \text{ nm CO}_2$$

i)

$$\lambda_{O_2} = \frac{(1,38) \times 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}}{\sqrt{2} \cdot \pi \cdot (3,467 \times 10^{-10} \text{ m})^2} \times 10^5 \text{ Pa}$$

$$\lambda_{O_2} = 76,54 \text{ nm}$$

$$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$$

$$\lambda_{CO_2} = \frac{(1,38) \times 10^{-23} \text{ J.K}^{-1})(296 \text{ K})}{\sqrt{2} \cdot \pi \cdot (3,941 \times 10^{-10} \text{ m})^2 (10^5 \text{ Pa})}$$

$$\lambda_{CO_2} = 59,24 \text{ nm} \quad \cancel{\downarrow}$$

ii) $K_u = \frac{\lambda}{d_{pore}} : \frac{76 \text{ nm}}{40 \text{ nm}} = 1,9 \quad \cancel{\downarrow}$

$$K_u = \frac{59}{40} = 1,475 \quad \cancel{\downarrow}$$

iii) O deis segun a difusió
de Kundsen perqwe $K_u > 1 \quad \cancel{\downarrow}$

iv) $\alpha_{O_2, CO_2} = \left(\frac{14}{32} \right)^{1/2}$

$$= 1,173$$

$$\chi_{CO_2-O_2} = \left(\frac{32}{44} \right)^{1/2} = 0,8528$$