

Universidade Nova de Lisboa  
Faculdade de Ciências e Tecnologia - Departamento de Química  
**Transferência de Massa e Processos de Separação**  
1º Teste – 11 de Maio de 2017

**I**

Uma garrafa cheia de clorofórmio é colocada em contacto com ar a 25 C através de um tubo vertical com diâmetro de 2cm e comprimento de 50 cm. Evaporam-se  $16.5 \times 10^{-9}$  Kg/s de clorofórmio.

- a) Quanto evaporaria se o tubo tivesse o dobro da altura e o dobro do diâmetro?
- b) Calcule o coeficiente de difusão do clorofórmio em ar.

$$P^* \text{ clorofórmio a } 25 \text{ C} = 200 \text{ mm Hg} \quad M \text{ clorofórmio} = 119.5 \text{ g/mol}$$

**II**

Uma partícula de carbono com 1 cm de diâmetro é queimada na presença de ar a 1475 K sendo a velocidade de queima limitada pela difusão do oxigénio em sentido oposto ao dos produtos formados na superfície da partícula. A massa específica da partícula é 1280 kg/m<sup>3</sup> e o coeficiente de difusão do oxigénio no ar é 10<sup>-4</sup> m<sup>2</sup>/s. Calcule o tempo necessário para a partícula desaparecer completamente:

- a) Se apenas se formar dióxido de carbono.
- b) Se apenas se formar monóxido de carbono.
- c) Compare os resultados e comente.

**III**

Considere um solvente não volátil com uma concentração inicial de CO<sub>2</sub> igual a 1.8 mol/L. Este solvente é exposto a uma atmosfera de CO<sub>2</sub>. Após 40 minutos, a concentração de CO<sub>2</sub> para a posição z=4cm é igual a  $5 \times 10^{-3}$  mol/cm<sup>3</sup>. Determine a concentração na interface, assumindo D<sub>CO<sub>2</sub>-solvente</sub> igual a  $5 \times 10^{-5}$  m<sup>2</sup>/s. Determine ainda a concentração de CO<sub>2</sub> para a mesma distância após duas horas do início do ensaio.

$$\frac{c_{As} - c_A}{c_{As} - c_{A0}} = erf\left(\frac{z}{\sqrt{4Dt}}\right) \quad \xi = \frac{z}{\sqrt{4Dt}}$$

Table 7-1. Error function values. For negative a, erf(a) is negative

a	erf(a)	a	erf(a)	a	erf(a)
0.0	0.0	0.48	0.50275	0.96	0.82542
0.04	0.04511	0.52	0.53790	1.00	0.84270
0.08	0.09008	0.56	0.57162	1.10	0.88021
0.12	0.13476	0.60	0.60386	1.20	0.91031
0.16	0.17901	0.64	0.63459	1.30	0.93401
0.20	0.22270	0.68	0.66378	1.40	0.95229
0.24	0.26570	0.72	0.69143	1.50	0.96611
0.28	0.30788	0.76	0.71754	1.60	0.97635
0.32	0.34913	0.80	0.7421	1.70	0.98379
0.36	0.38933	0.84	0.76514	1.80	0.98909
0.40	0.42839	0.88	0.78669	2.00	0.99532
0.44	0.46622	0.92	0.80677	3.2	0.99999

$$\text{erf}(1) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-t^2} dt = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[ -\frac{1}{2} e^{-t^2} \right]_0^1 = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left( 1 - e^{-1} \right) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left( 1 - \frac{1}{e} \right) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left( 1 - \frac{1}{2.718} \right) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left( 1 - 0.368 \right) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot 0.632 = 0.84270$$

b) A permeabilidade do etanol num filme polimérico de PDMS foi determinada experimentalmente, colocando a membrana entre dois compartimentos (A e B). O compartimento A contém etanol, e no compartimento B é aplicado vácuo. No início do ensaio, o sistema está em condições de estado não estacionário. Para determinar a permeabilidade e o coeficiente de solubilidade, é necessário considerar a segunda lei de Fick. Indique e justifique quais as condições fronteira e a condição inicial que devem ser consideradas.

$$N_{A,r} r^2 = N_{A,i} R_i^2 = c f_{le}$$

esf

$$N_{A,r} r = N_{A,i} R_i = c f_{le}$$

cilind

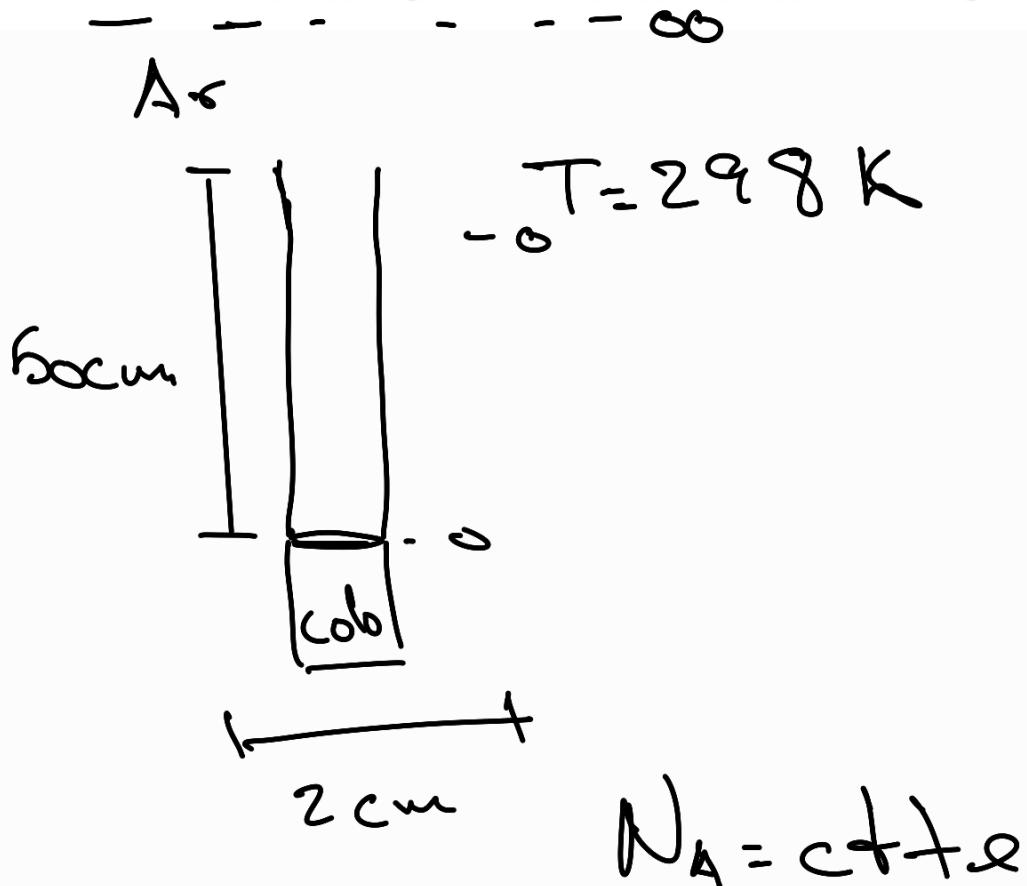
$$N_{A,z} = c f_{le} = N_{A,i} \quad | \text{ const}$$

## I

Uma garrafa cheia de clorofórmio é colocada em contacto com ar a 25 C através de um tubo vertical com diâmetro de 2cm e comprimento de 50 cm. Evaporam-se  $16.5 \times 10^{-9}$  Kg/s de clorofórmio.

- Quanto evaporaria se o tubo tivesse o dobro da altura e o dobro do diâmetro?
- Calcule o coeficiente de difusão do clorofórmio em ar.

$$P^* \text{ clorofórmio a } 25 \text{ C} = 200 \text{ mm Hg} \quad M \text{ clorofórmio} = 119.5 \text{ g/mol}$$



$$\dot{Q} = 16.5 \times 10^{-9} \frac{\text{Kg}}{\text{s}} = 1.38 \times 10^{-7} \frac{\text{mol}}{\text{s}}$$

a)  $\dot{Q} = N_A \cdot \pi r^2$

$$N_A = \frac{16.5 \times 10^{-9} \frac{\text{Kg}}{\text{s}}}{\pi (1 \times 10^{-2})^2} =$$

$$= 5,25 \times 10^{-5} \frac{Kg}{m^2 \cdot s} : 4,4 \times 10^{-4} \frac{mol}{m^2 \cdot s}$$

$$\frac{Q_1}{Q_2} = \frac{\cancel{N_A} \cdot \cancel{\pi} r_1^2}{\cancel{N_A} \cancel{\pi} r_2^2}$$

$$\frac{Q_1}{Q_2} = 0,25$$

$$Q_2 = \frac{16,5 \times 10^{-9}}{0,25} = 6,6 \times 10^{-8} \frac{Kg}{s}$$

↓

$$= 5,52 \times 10^{-7} \frac{mol}{s}$$

$$N_A = g_A (N_A + \cancel{N_B}) - c D_{AB} \frac{dy_A}{dz}$$

$$c_f \left\{ \begin{array}{l} z_0 = 0 \rightarrow y_0 : \frac{200}{760} = 0,263 \\ z_f = z_2 \rightarrow y_f = 0 \end{array} \right.$$

$$N_A(1-y_A) = - \frac{PD_{AB}}{RT} \frac{dy_A}{dz}$$

$$N_A \int_0^{z_2} dz = - \frac{PD_{AB}}{RT} \int_{y_A^*}^0 \frac{1}{1-y_A} dy_A$$

$$N_A = \frac{PD_{AB} \ln\left(\frac{1}{1-y_A^*}\right)}{RT z}$$

Se  $N_A$  é conste porque varia ao longo de  $z$ ?

$$D_{AB} = \frac{N_A \cdot R \cdot T}{P \ln\left(\frac{1}{1-y_A^*}\right)}$$

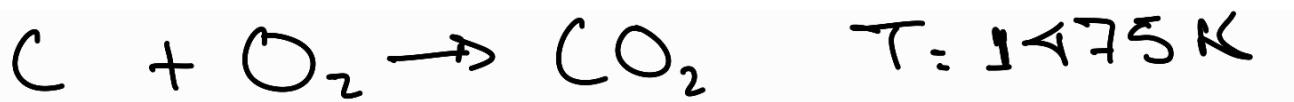
$$= \frac{(4,4 \times 10^{-4})(50 \times 10^{-2})(8,314)(298)}{(1 \times 10^5) \ln\left(\frac{1}{0,735}\right)}$$

$$= 1,78 \times 10^{-5} \frac{m^2}{s}$$

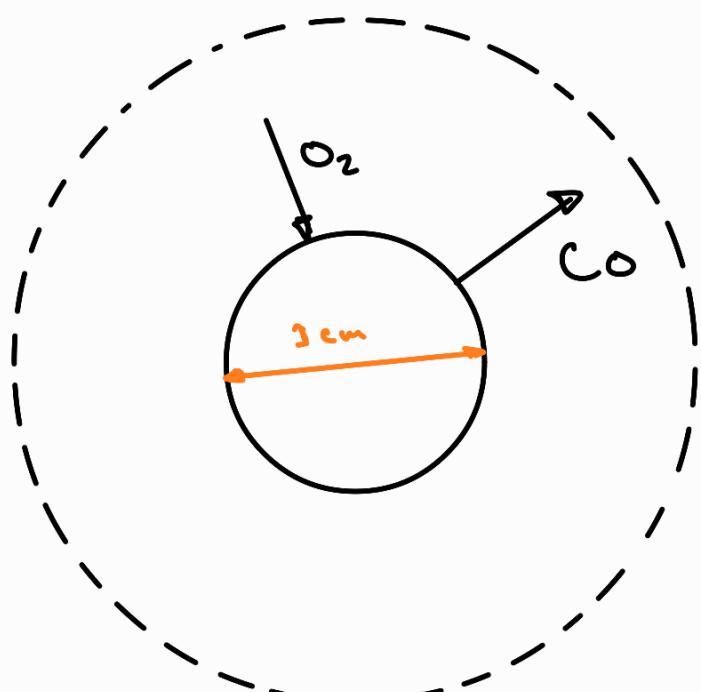
## II

Uma partícula de carbono com 1 cm de diâmetro é queimada na presença de ar a 1475 K sendo a velocidade de queima limitada pela difusão do oxigénio em sentido oposto ao dos produtos formados na superfície da partícula. A massa específica da partícula é 1280 kg/m<sup>3</sup> e o coeficiente de difusão do oxigénio no ar é 10<sup>-4</sup> m<sup>2</sup>/s. Calcule o tempo necessário para a partícula desaparecer completamente:

- a) Se apenas se formar dióxido de carbono.
- b) Se apenas se formar monóxido de carbono.
- c) Compare os resultados e comente.



$$\rho_c = 1280 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$



$$D_{O\text{-mis}} = 10^{-4} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$$

$$N_{CO_2} = -N_{O_2}$$

$$N_{O_2} r^2 = N_{CO_2} r^2$$

$$Q = N_{O_2} r^2 < \pi$$

$$\left\{ \begin{array}{l} N_{O_2} = \frac{Q}{4\pi r^2} \end{array} \right.$$

$$N_{O_2} = y_{O_2}(N_{O_2} + \cancel{N_{CO_2}}) - c D_{O_2\text{-mix}} \frac{dy_{O_2}}{dr}$$

$$C_F \left\{ \begin{array}{l} R_o = R_i \rightarrow y_{O_2} = 0 \quad \text{reacão imediata} \\ R_f: \infty \rightarrow y_{f O_2} = 0,21 \quad \text{composição O}_2 \text{ no ar.} \end{array} \right.$$

$$\frac{Q}{4\pi} \int_{R_i}^{\infty} \frac{1}{r^2} dr = - \frac{PD_{O_2\text{-mix}}}{RT} \int_0^{y_{O_2 f}} dy_{O_2}$$

$$\frac{Q}{4\pi} \left( \frac{1}{\infty} - \frac{1}{R_i} \right) = \frac{PD_{O_2\text{-mix}}}{RT} (y_{O_2})$$

$$Q = - C_{AL} \frac{dV}{dt} : \underbrace{C_{AL} \cdot 4\pi R_i^2}_{\text{for que as vezes}} \frac{dR_i}{dt}$$

$$C_F \left\{ \begin{array}{l} t=0 \rightarrow R_o = R_i \\ t=t \rightarrow R_o = 0 \end{array} \right. \begin{array}{l} \text{as vezes} \\ \text{é menos} \\ \text{e as vezes} \end{array}$$

wars?

$$- C_{AL} \cdot R_1 \cdot \frac{dR_1}{dt} = \frac{P \cdot D_{O\text{-mist}}}{R \cdot T} \cdot y_{O_2}$$

$$- C_{AL} \int_{R_1}^0 R_1 dR_1 = \frac{P \cdot D_{O\text{-mist}} \cdot y_{O_2}}{R \cdot T} \int_0^t dt$$

$$- \frac{C_{AL}}{2} (-R_1^2) = \frac{P \cdot D_{O\text{-mist}} \cdot y_{O_2}}{R \cdot T} t$$

$$t = \frac{C_{AL} \cdot R_1^2 \cdot R \cdot T}{(2)(y_{O_2})(P)(D_{O\text{-mist}})}$$

$$t: \frac{(1280)(0,5 \times 10^{-2})^2 (8,314)(1475)}{(12,8 \times 10^{-3})(2)(0,21)(1 \times 10^5)(10^4)}$$

$$\approx 7299,5 \text{ s} \approx 2,027 \text{ h} \rightarrow$$

b)  $N_{CO} = -z N_{O_2}$

$$\frac{Q}{4\pi} \int_{R_1}^{\infty} \frac{1}{r^2} dr = - P D_{O_2\text{-mist}} \frac{1}{RT} \int_0^{y_{O_2} f} \frac{1}{1+y_{O_2}} dy_{O_2}$$

$$\frac{Q}{4\pi} (-R_1^2) = + \frac{P D_{O_2\text{-mis}}}{RT} \ln \left( \frac{1+y_{O_2}}{1+y_{O_2} f} \right)$$

: pseudo-stationär

$$t = \frac{C_{AL} \cdot R_1^2 \cdot RT}{(2)(1+y_{O_2})(P)(D_{O_2\text{-mis}})}$$

$$\therefore \frac{(1280)(0.5 \times 10^{-2})^2 (8.314)(175)}{(2)(12.8 \times 10^{-3}) \ln(1+0.21) (1 \times 10^5) (1 \times 10^{-6})}$$

$$= 8,041 \times 10^3 \quad t = 2,23 \text{ h}$$

### III

Considere um solvente não volátil com uma concentração inicial de CO<sub>2</sub> igual a 1.8 mol/L. Este solvente é exposto a uma atmosfera de CO<sub>2</sub>. Após 40 minutos, a concentração de CO<sub>2</sub> para a posição z=4cm é igual a 5 x 10<sup>-3</sup> mol/cm<sup>3</sup>. Determine a concentração na interface, assumindo D<sub>CO<sub>2</sub>-solvente</sub> igual a 5 x 10<sup>-5</sup> m<sup>2</sup>/s. Determine ainda a concentração de CO<sub>2</sub> para a mesma distância após duas horas do início do ensaio.

$$\frac{c_{As} - c_A}{c_{As} - c_{A0}} = \operatorname{erf}\left(\frac{z}{\sqrt{4Dt}}\right) \quad \xi = \frac{z}{\sqrt{4Dt}}$$

Table 7-1. Error function values. For negative a, erf(a) is negative

a	erf(a)	a	erf(a)	a	erf(a)
0.0	0.0	0.48	0.50275	0.96	0.82542
0.04	0.04511	0.52	0.53790	1.00	0.84270
0.08	0.09008	0.56	0.57162	1.10	0.88021
0.12	0.13476	0.60	0.60386	1.20	0.91031
0.16	0.17901	0.64	0.63459	1.30	0.93401
0.20	0.22270	0.68	0.66378	1.40	0.95229
0.24	0.26570	0.72	0.69143	1.50	0.96611
0.28	0.30788	0.76	0.71754	1.60	0.97635
0.32	0.34913	0.80	0.7421	1.70	0.98379
0.36	0.38933	0.84	0.76514	1.80	0.98909
0.40	0.42839	0.88	0.78669	2.00	0.99532
0.44	0.46622	0.92	0.80677	3.2	0.99999

$$C_{A0} = 1.8 \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

$$t = 40 \text{ min}$$

$$z = 4 \text{ cm}$$

$$D_{AB} = 5 \times 10^{-5} \frac{m^2}{s}$$

$$C_A = 5 \times 10^{-3} \frac{\text{mol}}{\text{cm}^3}$$

a)  $C_{AS} = ?$

$$\operatorname{erf} \left( \frac{z}{\sqrt{4D t}} \right)$$

$$= \operatorname{erf} \left( \frac{4 \times 10^{-2}}{\sqrt{4} \times (5 \times 10^{-5}) (40 \times 60)} \right)$$

$$= \operatorname{erf}(0,058) = 0,065 \quad \downarrow$$

$$\frac{C_{AS} - 5 \text{ M}}{C_{AS} - 1,8 \text{ M}} = 0,065$$

$$C_{AS} - 5 \text{ M} = 0,065 C_{AS} - 0,117$$

$$C_{AS} = \frac{5 - 0,117}{1 - 0,065} = 5,22 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3} \quad \downarrow$$

$$b) \operatorname{erf}(0,03) = 3.38 \times 10^{-2}$$

$$C_{AS} - 5M = 0,0338 C_{AS} - 0,0609$$

$$C_{AS} : \frac{5 - 0,0609}{1 - 0,0338} = 5,11 \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}$$





