

title here

Felipe B. Pinto 61387 – MIEQB

24 de julho de 2024

Conteúdo

I Fundamentos: Transferencia de massa		
2		
1 Operações de transferencia de massa	3	
2 Composições	4	
Exemplo 1	5	
3 Velocidades	6	
4 Coeficiente de Difusão	7	
5 Lei da difusão	8	
6 Fluxo máximo (molar) de i	9	
II Coeficientes de difusão	10	
1 Coeficiente de Difusão	11	
Exemplo 1	17	
2 Variação \mathcal{D} com a temperatura	19	
3 Difusão em mistura de gases	20	
Exemplo 2	21	
4 \mathcal{D} em líquidos	22	
Exemplo 3	27	
5 \mathcal{D} em sólidos	29	
6 Difusão superficial	34	
7 Condensação capilar		35
8 Peneiros moleculares		36
9 Dif por meios não poros e sem partição de soluto		37
10 Solubilização		38
IV Difusão em estado estacionário	39	
1 Difusão em estado estacionário para todas as geometrias		40
Exemplo 1		43
Exemplo 2		44
VI Reação Química Heterogénea	46	
Exemplo 1		47
Exemplo 2		48
Exemplo 3		49
VII Difusão em estado pseudo estacionário	50	
1 Diff em estado pseudo estacionário		51
Exemplo 1		54

I - Fundamentos: Transferencia de massa

1 Operações de transferencia de massa

1.1 Destilação

- Líquido-Vapor
- Todos os componentes tem duas fases
- Composição diferente em cada fase

1.2 Absorção Gasosa

- Gás-Líquido
- Apenas uma componente se distribui

1.3 Secagem

- Gás-Sólido
- Difusão do líquido presente no sólido para o gás

1.4 Extração Líquido-Líquido

- Solução heterogênea
- Solvente + Solução → Extrato + Resíduo

2 Composições

Concentração mássica

$$\rho_A = \frac{m_A}{V} \quad \rho = \sum_i \rho_i$$

Concentração molar

$$c_A = \frac{\rho_A}{M_A} = \frac{N_A}{v} = \frac{p_A}{R T}$$

Fração molar

$$y_A = \frac{c_A}{c} = \frac{p_A/(R T)}{P/(R T)} = \frac{p_A}{P}$$

Exemplo 1

A composição molar de uma mistura gasosa a 273 K e 1.5e5 Pa é

O ₂	CO	CO ₂	N ₂
7%	10%	15%	68%

Determine

E1 a)

A composição em percentagem mássica

Resposta

$$\rho_X = \frac{m_X \frac{g(X)}{mol}}{M \frac{g}{mol}} = \frac{100 m_X}{M} \frac{\% g_X}{g};$$

$$m_X \frac{g_X}{mol} = \frac{M_X g_X}{mol_X} \frac{c_X mol_X}{mol} = M_X c_X \frac{g_X}{mol};$$

$$M \frac{g}{mol} = \sum m_X \frac{g(X)}{mol} \implies$$

$$\implies \rho_X = \frac{100 M_X c_X}{\sum m_X} \frac{\% g_X}{g}$$

	O ₂	CO	CO ₂
m_x	2.24	2.80	6.60
ρ_X	7.301173402868318	09.126466753585398	21.5123859191655

E1 b)

A massa específica da mistura gasosa

Resposta

Assumindo gás ideal.

$$\rho = \frac{M n}{V} = \frac{M n}{\frac{n R T}{P}} = \frac{M P}{R T} \cong \frac{30.68 E^{-3} * 1.5 E^5}{8.314462618 * 273.15} \cong 2.026334899933467 \text{ kg m}^{-3}$$

3 Velocidades

Velocidade mássica

$$v = \frac{\sum_{i=1}^n \rho_i v_i}{\sum_{i=1}^n \rho_i} = \frac{\sum_{i=1}^n \rho_i v_i}{\rho}$$

Velocidade média molar

$$V = \frac{\sum_{i=1}^n c_i v_i}{c}$$

Velocidade relativa

Velocidade do componente i relativamente à velocidade mássica/molar

$$\Delta v_i = v_i - v$$

$$\Delta V_i = v_i - V$$

4 Coeficiente de Difusão

$$D = f(P, T, \text{natureza do componente})$$

$$\mathbf{J}_A = -D_{A,B} \nabla c_A$$

Valores típicos

Gases $1e-5 \rightarrow 1e-4$

Líquidos $.5e-9 \rightarrow 2e-9$

Sólidos $1e-24 \rightarrow 1e-12$

5 Lei da difusão

1^a Lei de Fick

$$\mathbf{J}_A = -D_{A,B} \nabla c_A$$

$D_{A,B}$ Coeficiente de difusão

Sistemas

Unidirecional

Isobárico e isotérmico

$$J_{A,z} = -D_{A,B} \frac{dc_A}{dz}$$

$$J_{A,z} = -c D_{A,B} \frac{dy_A}{dz}$$

6 Fluxo máximo (molar) de i

$$\mathbf{N}_A = c_A \mathbf{v}_A = \mathbf{y}_A (\mathbf{N}_A + \mathbf{N}_B) - c D_{A,B} \nabla \mathbf{y}_A$$

$$\mathbf{N}_{A,z} = \mathbf{y}_A (\mathbf{N}_{A,z} + \mathbf{N}_{B,z}) - c D_{A,B} \frac{dy_A}{dz}$$

$$J_{A,z} = c_A (v_{A,z} - V_z) = -c D_{A,B} \frac{dy_A}{dz} \implies$$

$$\implies c_A v_{A,z} = c_A v_z - c D_{A,B} \frac{dy_A}{dz} = c_A \left(\frac{c_A v_{A,z} + c_B v_{B,z}}{c} \right) - c D_{A,B} \frac{dy_A}{dz} = \\ = y_A (c_A v_{A,z} + c_B v_{B,z}) - c D_{A,B} \frac{dy_A}{dz};$$

$$N_A = c_A v_A \implies$$

$$\implies c_A v_{A,z} = N_{A,z} = y_A (N_{A,z} + N_{B,z}) - c D_{A,B} \frac{dy_A}{dz} \implies$$

$$\implies N_A = y_A (N_A + N_B) - c D_{A,B} \nabla y_A$$

6.1 Formas equivalentes para fluxo de massa em sistemas binarios (A, B)

Flux	Gradient	Fick rate eq	Restrictions
n_A	$\nabla \omega_A$	$n_A = -\rho D_{A,B} \nabla \omega_A + \omega_A (n_A + n_B)$	Constant ρ
	$\nabla \rho_A$	$n_A = -D_{A,B} \nabla \rho_A + \omega_A (n_A + n_B)$	
j_A	$\nabla \omega_A$	$j_A = -\rho D_{A,B} \nabla \omega_A$	
	$\nabla \rho_A$	$j_A = -D_{A,B} \nabla \rho_A$	
N_A	∇y_A	$N_A = -c D_{A,B} \nabla y_A + y_A (N_A + N_B)$	Constant c
	∇c_A	$N_A = -D_{A,B} \nabla c_A + y_A (N_A + N_B)$	
J_A	∇y_A	$J_A = -c D_{A,B} \nabla y_A$	
	∇c_A	$J_A = -D_{A,B} \nabla c_A$	

II - Coeficientes de difusão

1 Coeficiente de Difusão

$$\mathcal{D} = f(P, T, \text{natureza do componente})$$

$$\mathbf{J}_A = -\mathcal{D}_{A,B} \nabla c_A$$

Valores típicos

Gases $1e-5 \rightarrow 1e-4$

Líquidos $.5e-9 \rightarrow 2e-9$

Sólidos $1e-24 \rightarrow 1e-12$

Constante de proporcionalidade entre fluxo e força motriz

$$\dim \mathcal{D}_{A,B} = \dim \frac{-\mathbf{J}_{A,z}}{\frac{dc_A}{dz}} = \frac{M}{L^2 T} \frac{1}{(M/L^3)/L} = \frac{L^2}{T}$$

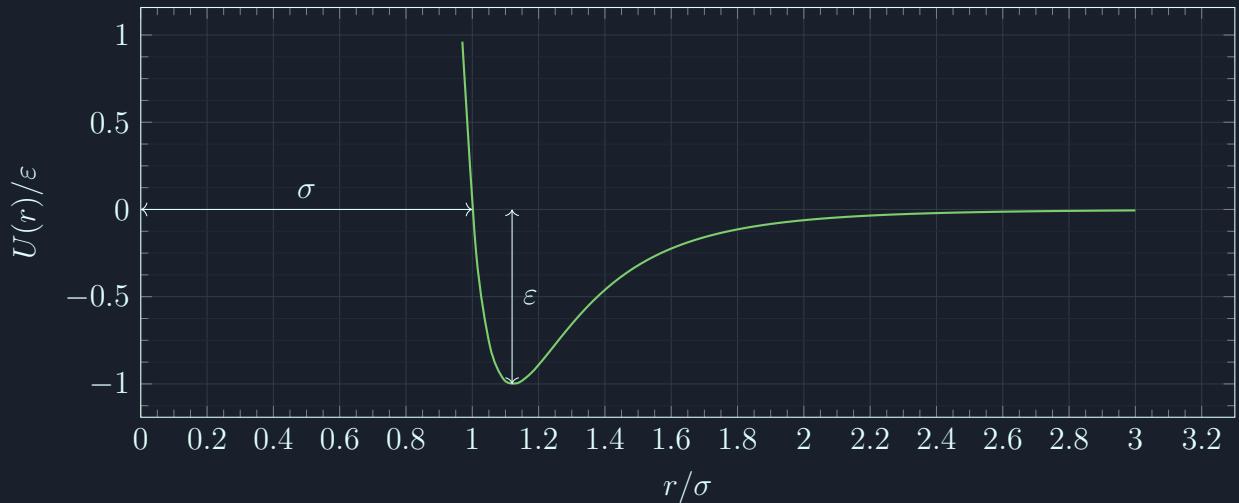
Dem Gases

1.1 Teoria cinética de Chapman–Enskog

Misturas gasosas a baixa pressão: coeficientes de transporte são função da energia potencial de interação entre um par de moléculas no gás

$$U(r) = 4 \varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right)$$

- $U(r)$ Potencial de energia intramolecular de Lennard–Jones
- ε Energia de interação, diretamente relacionada com a força de interação entre as partículas ou sua ligação
- σ Diâmetro de colisão



1.2 \mathcal{D} em gases

$$\mathcal{D}_{A,B} = 1.858 * 10^{-3} \frac{T^{3/2} \sqrt{M_A^{-1} + M_B^{-1}}}{P \sigma_{A,B}^2 \Omega_D}$$

$\dim \mathcal{D} = \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ Coeficiente de difusão da espécie A na espécie B

$\dim M_X = \text{g}_X \text{mol}_X^{-1}$ Massa molecular da substância gasosa X

$\dim P = \text{atm}$ Pressão total

$\dim \sigma_X = \text{\AA}$ Diâmetro de colisão de X

$\dim \sigma_{A,B} = \text{\AA}$ Distância limite

$\dim T = \text{K}$ Temperatura

$\dim \Omega = 0$ Integral de colisão

Valores seguintes se encontram tabelados

Diametro de colisão

$$\sigma_{A,B} = \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2}$$

Energia de interação

$$\varepsilon_{A,B} = \sqrt{\varepsilon_A \varepsilon_B}$$

Integral de colisão

$$\Omega_D = f(k_B T \varepsilon_{A,B}^{-1})$$

Nota: $k_B = 1.380649e - 23 \text{ J K}^{-1}$ Constante de boltzman

1.3 Tabela Lennard-Jones Parametros de potencial

Substance		$\sigma(\text{\AA})$	$\varepsilon/k(\text{^\circ K})$
Ar	Argon	3.542	93.3
He	Helium	2.551	10.22
Kr	Krypton	3.655	178.9
Ne	Neon	2.820	32.8
Xe	Xenon	4.047	231.0
Air	Air	3.711	78.6
Br ₂	Bromine	4.296	507.9
CCl ₄	Carbon tetrachloride	5.947	322.7
CF ₄	Carbon tetrafluoride	4.662	134.0
CHCl ₃	Chloroform	5.389	340.2
CH ₂ Cl ₂	Methylene chloride	4.898	356.3
CH ₃ Br	Methyl bromide	4.118	449.2
CH ₃ Cl	Methyl chloride	4.182	350.0
CH ₃ OH	Methanol	3.626	481.8
CH ₄	Methane	3.758	148.6
CO	Carbon monoxide	3.690	91.7
CO ₂	Carbon dioxide	3.941	195.2
CS ₂	Carbon disulfide	4.483	467.0
C ₂ H ₂	Acetylene	4.033	231.8
C ₂ H ₄	Ethylene	4.163	224.7
C ₂ H ₆	Ethane	4.443	215.7
C ₂ H ₅ Cl	Ethyl chloride	4.898	300.0
C ₂ H ₅ OH	Ethanol	4.530	362.6
CH ₃ OCH ₃	Methyl ether	4.307	395.0
CH ₂ CHCH ₃	Propylene	4.678	298.9
CH ₃ CCH	Methylacetylene	4.761	251.8
C ₃ H ₆	Cyclopropane	4.807	248.9
C ₃ H ₈	Propane	5.118	237.1
n-C ₃ H ₇ OH	n-Propyl alcohol	4.549	576.7
CH ₃ COCH ₃	Acetone	4.600	560.2
CH ₃ COOCH ₃	Methyl acetate	4.936	469.8
n-C ₄ H ₁₀	n-Butane	4.687	531.4
iso-C ₄ H ₁₀	Isobutane	5.278	330.1
C ₂ H ₅ OC ₂ H ₅	Ethyl ether	5.678	313.8
CH ₃ COOC ₂ H ₅	Ethyl acetate	5.205	521.3

Tabela 1: *Lennard-jones potential parameters found from viscosities*

1.4 The collision integral

$k_B T/\varepsilon$	Ω	$k_B T/\varepsilon$	Ω	$k_B T/\varepsilon$	Ω
0.30	2.6620	1.65	1.1530	4.0	0.8836
0.35	2.4760	1.70	1.1400	4.1	0.8788
0.40	2.3180	1.75	1.1280	4.2	0.8740
0.45	2.1840	1.80	1.1160	4.3	0.8694
0.50	2.0660	1.85	1.1050	4.4	0.8652
0.55	1.9660	1.90	1.0940	4.5	0.8610
0.60	1.8770	1.95	1.0840	4.6	0.8568
0.65	1.7980	2.00	1.0750	4.7	0.8530
0.70	1.7290	2.10	1.0570	4.8	0.8492
0.75	1.6670	2.20	1.0410	4.9	0.8456
0.80	1.6120	2.30	1.0260	5.0	0.8422
0.85	1.5620	2.40	1.0120	6	0.8124
0.90	1.5170	2.50	0.9996	7	0.7896
0.95	1.4760	2.60	0.9878	8	0.7712
1.00	1.4390	2.70	0.9770	9	0.7556
1.05	1.4060	2.80	0.9672	10	0.7424
1.10	1.3750	2.90	0.9576	20	0.6640
1.15	1.3460	3.00	0.9490	30	0.6232
1.20	1.3200	3.10	0.9406	40	0.5960
1.25	1.2960	3.20	0.9328	50	0.5756
1.30	1.2730	3.30	0.9256	60	0.5596
1.35	1.2530	3.40	0.9186	70	0.5464
1.40	1.2330	3.50	0.9120	80	0.5352
1.45	1.2150	3.60	0.9058	90	0.5256
1.50	1.1980	3.70	0.8998	100	0.5130
1.55	1.1820	3.80	0.8942	200	0.4644
1.60	1.1670	3.90	0.8888	300	0.4360

Tabela 2: The collision integral, Data from Hirschfelder et al. (1954)

Exemplo 1

Faça uma estimativa do coeficiente de difusão do dióxido de carbono em ar a 20 °C e à pressão atmosférica, utilizando a equação de Hirschfelder

Dados :

- $M_{ar} = 28.9647 \text{ g/mol}$

Resposta

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_{\text{CO}_2,ar} &= 1.858 \text{ E}^{-3} \frac{T^{3/2} \sqrt{M_{\text{CO}_2}^{-1} + M_{ar}^{-1}}}{P \sigma_{\text{CO}_2,ar}^2 \Omega_D} = \\ &= 1.858 \text{ E}^{-3} \frac{T^{3/2} \sqrt{M_{\text{CO}_2}^{-1} + M_{ar}^{-1}}}{P (0.5 * (\sigma_{\text{CO}_2} + \sigma_{ar}))^2 f(k T / \varepsilon_{\text{CO}_2,ar})} = \\ &= 1.858 \text{ E}^{-3} \frac{(20 + 273.15)^{3/2} \sqrt{(44)^{-1} + (28.9647)^{-1}}}{1 * (0.5 * (3.941 + 3.711))^2 * 1.0078677646226} \cong \\ &\cong 151.245553638939978 \text{ cm}^2/\text{s};\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}f(k T / \varepsilon_{\text{CO}_2,ar}) &= f\left(k T (\varepsilon_{\text{CO}_2} \varepsilon_{ar})^{-1/2}\right) = f\left(T \left(\frac{\varepsilon_{\text{CO}_2}}{k} \frac{\varepsilon_{ar}}{k}\right)^{-1/2}\right) \cong \\ &\cong f\left((20 + 273.15) (195.2 * 78.6)^{-1/2}\right) \cong f(2.366675521150001) \implies \\ &\implies \frac{f(2.366675521150001) - f(2.30)}{2.366675521150001 - 2.30} = \frac{f(2.40) - f(2.30)}{2.40 - 2.30} \implies \\ &\implies f(2.366675521150001) = \frac{f(2.40) - f(2.30)}{2.40 - 2.30} (2.366675521150001 - 2.30) + f(2.30) \\ &\cong \frac{1.0120 - 0.9996}{2.40 - 2.30} (2.366675521150001 - 2.30) + 0.9996 \cong \\ &\cong 1.0078677646226\end{aligned}$$

1.5 Equação de Fuller

$$\mathcal{D}_{A,B} = \frac{1 \text{ E}^{-3} T^{1.75} \sqrt{M_A^{-1} + M_B^{-1}}}{P \left((\sum v)_A^{1/3} + (\sum v)_B^{1/3} \right)^2}$$

- v volumes de difusão, tabelados

2 Variação \mathcal{D} com a temperatura

$$\mathcal{D}_{A,B,T_2,P_2} = \mathcal{D}_{A,B,T_1,P_1} \frac{P_1}{P_2} \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^{3/2} \frac{\Omega_{D,T_1}}{\Omega_{D,T_2}}$$

$$D \propto T^{3/2} \Omega \wedge D \propto P^{-1}$$

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{D}_{A,B,T_2,P_2}}{\mathcal{D}_{A,B,T_1,P_1}} &= \frac{1.858 * 10^{-3} \frac{T_2^{3/2}}{P_2 \sigma_{A,B}^2 \Omega_{D,T_2}} \sqrt{M_A^{-1} + M_B^{-1}}}{1.858 * 10^{-3} \frac{T_1^{3/2}}{P_1 \sigma_{A,B}^2 \Omega_{D,T_1}} \sqrt{M_A^{-1} + M_B^{-1}}} = \frac{\left(\frac{T_2^{3/2}}{P_2 \Omega_{D,T_2}} \right)}{\left(\frac{T_1^{3/2}}{P_1 \Omega_{D,T_1}} \right)} = \\ &= \frac{P_1}{P_2} \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^{3/2} \frac{\Omega_{D,T_1}}{\Omega_{D,T_2}} \end{aligned}$$

3 Difusão em mistura de gases

$$\mathcal{D}_{1,m} = \left(\sum_{i=2}^n \frac{y'_{1,i}}{\mathcal{D}_{1,i}} \right)^{-1} = \left(\sum_{i=2}^n \frac{\frac{y_i}{\sum_{j=2}^n y_j}}{\mathcal{D}_{1,i}} \right)^{-1} = \frac{\sum_{j=2}^n y_j}{\sum_{i=2}^n y_i / \mathcal{D}_{1,i}}$$

Exemplo 2

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

y_{O_2}	y_{N_2}	y_{CO}
0.20	0.70	0.10

- A mistura está à temperatura de 298 K e à pressão de 2 atm
- Os coeficientes de difusão do CO em oxigênio e azoto são:
 - $\mathcal{D}_{CO,O_2} = 0.185e - 4 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ 273 K, 1 atm
 - $\mathcal{D}_{CO,N_2} = 0.192e - 4 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ 288 K, 1 atm

Resposta

Coeff de Dif de CO na mistura :

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_{CO,M} &= \frac{\sum_{j=2}^n y_j}{\sum_{i=2}^n y_i / \mathcal{D}_{CO,i}} = \frac{0.9}{\left(\begin{array}{l} 0.20 / \mathcal{D}_{CO,O_2,298 \text{ K}, 2 \text{ atm}} \\ + 0.70 / \mathcal{D}_{CO,N_2,298 \text{ K}, 2 \text{ atm}} \end{array} \right)} \cong \\ &\cong \frac{0.9}{\left(\begin{array}{l} 0.20 / 1.05492639372282e - 3 \\ + 0.70 / 1.01043154819129e - 3 \end{array} \right)} \cong 1.01999185289502e - 3 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1};\end{aligned}$$

Coeff de Difusão do CO:

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_{CO,O_2,298 \text{ K}, 2 \text{ atm}} &= \mathcal{D}_{CO,O_2,273 \text{ K}, 1 \text{ atm}} \frac{1}{2} \left(\frac{298}{273} \right)^{3/2} = \\ &= 0.185 \text{ E}^{-4} \frac{1}{2} \left(\frac{298}{273} \right)^{3/2} \cong 1.05492639372282e - 3 \text{ m}^2/\text{s};\end{aligned}$$

Coeff de Difs do NO

$$\begin{aligned}\mathcal{D}_{CO,N_2,298 \text{ K}, 2 \text{ atm}} &= \mathcal{D}_{CO,N_2,288 \text{ K}, 1 \text{ atm}} \frac{1}{2} \left(\frac{298}{288} \right)^{3/2} = \\ &= 0.192 * 10^{-4} \frac{1}{2} \left(\frac{298}{288} \right)^{3/2} \cong 1.01043154819129e - 3 \text{ m}^2/\text{s}\end{aligned}$$

4 \mathcal{D} em líquidos

Stokes-Einstein

$$\mathcal{D}_A = \frac{k_B T}{6 \pi \mu R_A}$$

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{D}_A &= u_A R T && \text{(Nernst-Einstein)} \\ u_A &\sim (6 \pi \mu R_A)^{-1} && \text{(Stokes)} \end{aligned} \right\} \implies \mathcal{D}_A = \frac{R T}{6 \pi \mu R_A}$$

u_A Mobilidade da partícula

k_B Constante de boltsman: ($1.380649e - 23 \text{ J K}^{-1}$)

Constante de boltsman

$$k_B = \frac{\mathbf{R}}{N_A} \cong \frac{8.314462618 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}}{6.02214076e23 \text{ mol}^{-1}} \cong \\ \cong 1.380648999974554e - 23 \text{ J K}^{-1}$$

$$k_B \underset{\text{exactly}}{=} 1.380649e - 23 \text{ J K}^{-1}$$

Transforma a lei dos gases perfeitos numa verão por molécula

Casos específicos

Prolate ellipsoid

$$\mathcal{D} = \frac{k_B T}{6 \pi \mu \left(\frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{\ln \left(\frac{a + \sqrt{a^2 - b^2}}{b} \right)} \right)}$$

Oblate ellipsoid

$$\mathcal{D} = \frac{k_B T}{6 \pi \mu \left(\frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{\tan^{-1} \sqrt{\frac{a^2 - b^2}{b^2}}} \right)}$$

4.1 Correlação de Wilke-Chang

$$\frac{\mathcal{D}_{A,B} \mu_B}{T} = \frac{7.4 * 10^{-8} \sqrt{\Phi_B M_B}}{V_A^{0.6}}$$

- Soluções diluidas

$\dim \mathcal{D} = \text{cm}^3/\text{s}$ Coeficiente de difusão

$\dim M_B = \text{g (B)}/\text{mol}$ Peso molecular do solvente B

$\dim \mu_B = \text{cP} = 0.1 \text{ cPa s}$ Viscosidade do solvente B

$\dim V_A = \text{cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ Volume molar do soluto A no seu ponto de vaporização normal

$\dim \Phi_B = 0$ parametro de associação

- $2.26 \rightarrow$ Água

- $1.50 \rightarrow$ Etanol

- $1.90 \rightarrow$ Metanol

- $1.00 \rightarrow$ Benzeno, éter...

(não associados / polares)

4.2 Diluição Infinita (Hayduk-Ludie)

$$\mathcal{D}_{A,B} = 13.26 * 10^{-5} \mu_B^{-1.14} V_A^{-0.589}$$

dim μ_B = cP = 0.1 cPa s Viscosidade do solvente B

dim V_A = $\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1}$ Volume molar do soluto A no seu ponto de vaporização normal

4.3 Equação de Sheibel

$$\frac{\mathcal{D}_{A,B} \mu_B}{T} = \frac{K}{V_A^{1/3}} = \frac{8.2 * 10^{-8} (1 + (3 V_B/V_A)^{2/3})}{V_A^{1/3}}$$

Scheibel elimina o parametro de associação Φ_B

4.4 Tabela de volumes moleculares

Compound		Molecular volume, $\text{cm}^3 \text{ g}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
Hydrogen,	H_2	14.3
Oxygen,	O_2	25.6
Nitrogen,	N_2	31.2
Air		29.9
Carbon monoxide,	CO	30.7
Carbon dioxide,	CO_2	34.0
Carbonyl sulfide,	COS	51.5
Sulfur dioxide,	SO_2	44.8
Nitric oxide,	NO	23.6
Nitrous oxide,	N_2O	36.4
Ammonia,	NH_3	25.8
Water,	H_2O	18.9
Hydrogen sulfide,	H_2S	32.9
Bromine,	Br_2	53.2
Chlorine,	Cl_2	48.4
Iodine,	I_2	71.5

Exemplo 3

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

Dados:

- $\mu_{água} = 1 \text{ cP}$

Resposta

Wilke-Chang

$$\frac{\mathcal{D}_{oxigenio,água} \mu_B}{T} = \frac{7.4 \text{ E}^{-8} (\Phi_B M_B)^{1/2}}{V_A^{0.6}} \implies$$
$$\implies \mathcal{D}_{oxigenio,água} = \frac{T}{\mu_B} \frac{7.4 \text{ E}^{-8} (\Phi_B M_B)^{1/2}}{V_A^{0.6}} = \frac{273.15 + 25}{1} \frac{7.4 \text{ E}^{-8} (2.26 * 18)^{1/2}}{25.6^{0.6}} \approx$$
$$\cong 2.011004425623542674e - 5 \text{ cm}^2/\text{s};$$

Scheibel

$$\frac{\mathcal{D}_{A,B} \mu_B}{T} = \frac{8.2 \text{ E}^{-8} (1 + (3 V_B / V_A)^{2/3})}{V_A^{1/3}} \implies$$
$$\implies \mathcal{D}_{A,B} = \frac{T}{\mu_B} \frac{8.2 \text{ E}^{-8} (1 + (3 V_B / V_A)^{2/3})}{V_A^{1/3}} =$$
$$= \frac{273.15 + 25}{1} \frac{8.2 \text{ E}^{-8} (1 + (3 * 18.9 / 25.6)^{2/3})}{25.6^{1/3}} \cong$$
$$\cong 2.239032934947616576e - 5 \text{ cm}^2/\text{s}$$

*D*em Sólidos

5 Difusão em sólidos

Difusão através de

- Meios porosos
- não porosos
(densos)
- compósitos

Aplicação meios porosos e não porosos

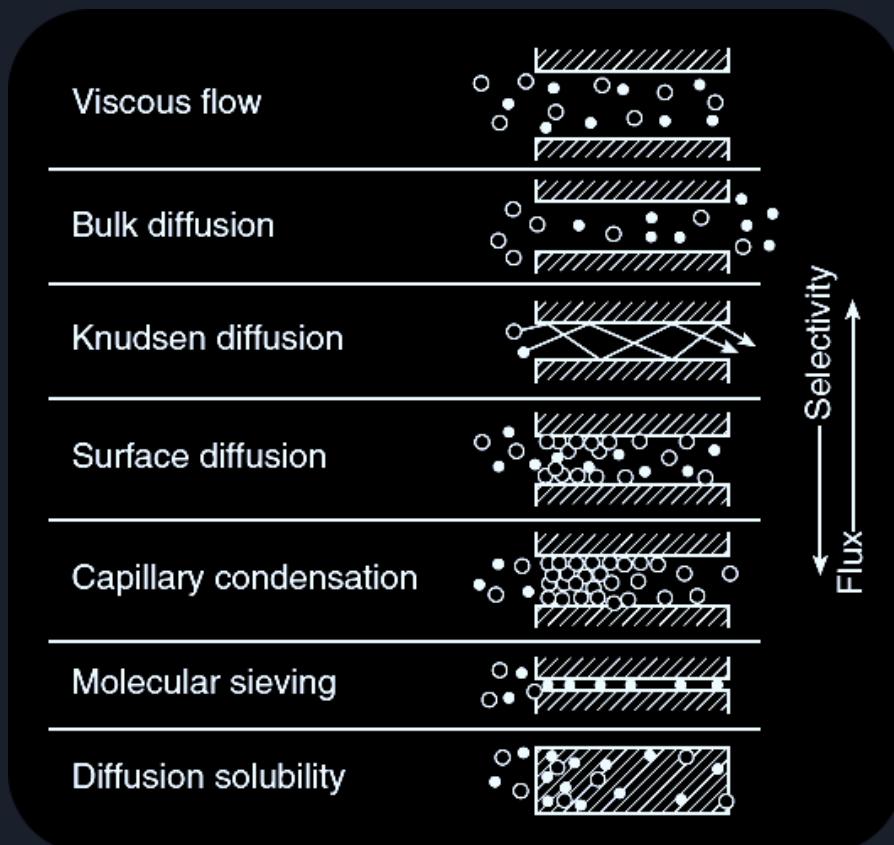
- Processos catalíticos (CatHet)
- Processos membranas (permeação de gases e vapores)
- Permeação através de embalagens
- Liberação controlada de farmacos, agroquímicos,...

5.1 Difusão em meios porosos

Defin. IUPAC

$$\begin{aligned}d &> 50 \text{ nm} \\2 < d < 50 \text{ nm} \\d &< 2 \text{ nm}\end{aligned}$$

Macroporos
Mesoporos
Microporos



5.2 Difusão de Knudsen

Considere uma difusão de baixa densidade por poros capilares bem pequenos onde o diametro dos póros são menores que a distancia média de colisão entre moléculas, estas vao colidir mais com os poros do que consigo próprias.

$$K_n = \lambda / d_{LJ}$$

λ Distancia média percorrida livremente pelas partículas (sem colisão)

d_{LJ} diametro de Lennard–Jones do poro

Mede a influencia desse tipo de difusão no evento

$0.1 < K_n < 1$ A difusão de Knudsen tem parte mesurável porem moderada na difusão geral

$1 < K_n$ A dif de K é importante

$10 < K_n$ A dif de K domina

λ Distancia média percorrida livremente pelas partículas (sem colisão)

$$\lambda = \frac{k_B T}{\sqrt{2} \pi d^2 p}$$

p Pressão do lado da alimentação

d_{LJ} Diametro de Lennard–Jones, colisão entre gases que se difundem (tabelado)

$k_B = 1.380649e - 23 \text{ J/K}$ Constante de Boltzmann

\mathcal{D} de Knudsen

$$\mathcal{D}_{kn,eff,i} = \frac{\varepsilon \mathcal{D}_{kn,i}}{\tau} = \frac{\varepsilon d_{LJ}}{\tau 3} \sqrt{\frac{8 R T}{\pi M W_i}}$$

$$\mathcal{D}_{kn,i} \propto (M W_i)^{-1/2}; \quad \mathcal{D}_{kn,i} \propto T^{1/2}$$

$\dim \mathcal{D}_{kn,i} = \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ Coeficiente de difusão de Kn do gás i

$\dim \mathcal{D}_{kn,eff,i} = \text{m}^2 \text{s}^{-1}$ Coeff de diff de Kn efetivo do gás i

$\dim \varepsilon = 0$ Porosidade do meio poroso

$\dim \tau = 0$ tortuosidade do meio poroso

$\dim d_{LJ} = \text{m}$ diametro do poro

Condições para considerarmos difusão de Knudsen

d_{LJ}/nm	$< 10^3$	$< 10^2$	< 10	< 2
p/bar	0.1	1	10	50

$$K_n > 1 \wedge \lambda > d_{LD}$$

Seletividade de sep da \mathcal{D}_{kn}

$$\alpha = \sqrt{\frac{M W_j}{M W_i}}$$

Diametros de Lennard-Jones

Gás	Diametro cinético $d_k/\text{\AA}$	Diametro de Lennard-Jones $d_{LJ}/\text{\AA}$
He	2.6	2.551
H ₂	2.89	2.827
O ₂	3.46	3.467
N ₂	3.64	3.798
CO	3.76	3.69
CO ₂	3.3	3.941
CH ₄	3.8	3.758
C ₂ H ₆	—	4.443
C ₂ H ₄	3.9	4.163
C ₃ H ₈	4.3	5.118
C ₃ H ₆	4.5	4.678
n-C ₄ H ₁₀	4.3	4.971
i-C ₄ H ₁₀	5	5.278
H ₂ O	2.65	2.641
H ₂ S	3.6	3.623

Outras difusões

6 Difusão superficial

- $1 \text{ nm} < d_{LR} < 4 \text{ nm}$
- Molec de gas adsv nas paredes do poro
- relacionada com a mobilidade das moléculas à superficie
- rela. c a natureza química do gás e do mat poroso ($\text{CO}_2 > \text{CH}_4 > \text{N}_2 > \text{H}_2 > \text{He}$)
- Referente a misturas gasosas e vapores
- depende fortemente de T

7 Condensação capilar

- $0.6 \text{ nm} < d_{LR} < 6 \text{ nm}$
- Moléculas de gás ou vapor condensam dentro dos poros e movem-se como líquidos
- elevada seletividade para gases ou vapores que condensam
- relacionado com a nat quimica do soluto

8 Peneiros moleculares

- $0.2 \text{ nm} < d_{LR} < 1 \text{ nm}$
- Tamanho dos poros comparaveis com o tamanho do gás alvo
- elevada seletividade
- relacionado com o tamanho do soluto
- referente a misturas gasosas e vapores

9 Dif por meios não poros e sem partição de soluto

1^a lei de fick

$$J_i = -\mathcal{D}_i \frac{dc_i}{dz}$$

- estrutura do meio é considerada homogênea e tratada como “blackbox”

9.1 Transporte de massa através do filme

$$J_i = \frac{\mathcal{D}_i}{\delta} \Delta c_i$$

$$J_i = \frac{\mathcal{D}_i}{\delta} \Delta p_i$$

10 Solubilização

Difusão depende de

- Tamanho do soluto que permeia
- natureza do material e meio sólido
- pode ser necessário considerar resistencias externas ao transporte do soluto (transf de massa externa)

$$\frac{\mathcal{D}_{eff} - \mathcal{D}}{\mathcal{D}_{eff} + 2\mathcal{D}} = \phi_s \frac{\mathcal{D}_s - \mathcal{D}}{\mathcal{D}_s + 2\mathcal{D}}$$

ϕ_s fração de volume das esferas do material compósito

\mathcal{D} Coef de dif na fase continua

\mathcal{D}_s Coef de dif da através das esferas (fase dispersa)

- Depende apenas da fração de volume das esferas (não do tamanho)

Se as esferas fossem impermeaveis

$$\frac{\mathcal{D}_{eff}}{D} = \frac{2(1 - \phi_s)}{2 + \phi_s}$$

$$\lim_{\mathcal{D}_s \rightarrow \infty} \frac{\mathcal{D}_{eff}}{D} = 1.33$$

IV - Difusão em estado estacionário

1 Difusão em estado estacionário para todas as geometrias

$$\begin{aligned} N_{A,z} = y_A (N_A + N_B) - C_{A,L} \mathcal{D}_{A,B} \frac{dy_A}{dz} &\implies \\ \implies N_{A,z_1} = \frac{c D_{A,B}}{\Theta \eta_d z_1} \ln \frac{1 - \Theta y_{A,1}}{1 - \Theta y_{A,0}}; \quad \Theta = 1 + \frac{N_{B,z}}{N_{A,z}} \end{aligned}$$

z : Dimensão característica

- z para película plana
- r_1 para cilindros e esferas

η_d : Fator adimensional

- 1 para plano
- $\ln(r_2/r_1)$ para cilíndro
- $1 - r_2/r_1$ para esfera

Caracterização de um estado estacionário Transferencia de massa em estado estacionário através de um sistema simples no qual a concentração e o fluxo molar são funções de uma unica coordenada no espaço.

1.1 Geometria cilíndrica

Equação de conservação

$$2\pi r L N_{A,r} \Big|_r = 2\pi r L N_{A,r} \Big|_{r+\Delta r} \implies \begin{cases} r N_{A,r} \text{ é constante} \\ r N_{B,r} \text{ é constante} \end{cases}$$

1.2 Casos específicos em dif plana

Difusão através de componente estagnado

$$N_{A,z_1} = \frac{c \mathcal{D}_{A,B}}{z_1} \ln \frac{1 - y_{A,1}}{1 - y_{A,0}} \quad N_B = 0$$

Contra Difusão Equimolar

$$N_{A,z_1} = -\frac{c \mathcal{D}_{A,B}}{z_1} (y_{A,1} - y_{A,0}); \quad N_B = -N_A$$

Exemplo 1

Um componente A difunde-se através de uma camada em repouso de um componente B de espessura Z . A pressão parcial de A num dos lados da camada é $p_{A,1}$ e no outro lado $p_{A,2} < p_{A,1}$. Mostre que o fluxo máximo possível de A através dessa camada é dado por:

$$N_{A \text{ max}} = \frac{\mathcal{D} P}{R T Z} \ln \frac{P}{P - p_{A,1}}$$

Resposta

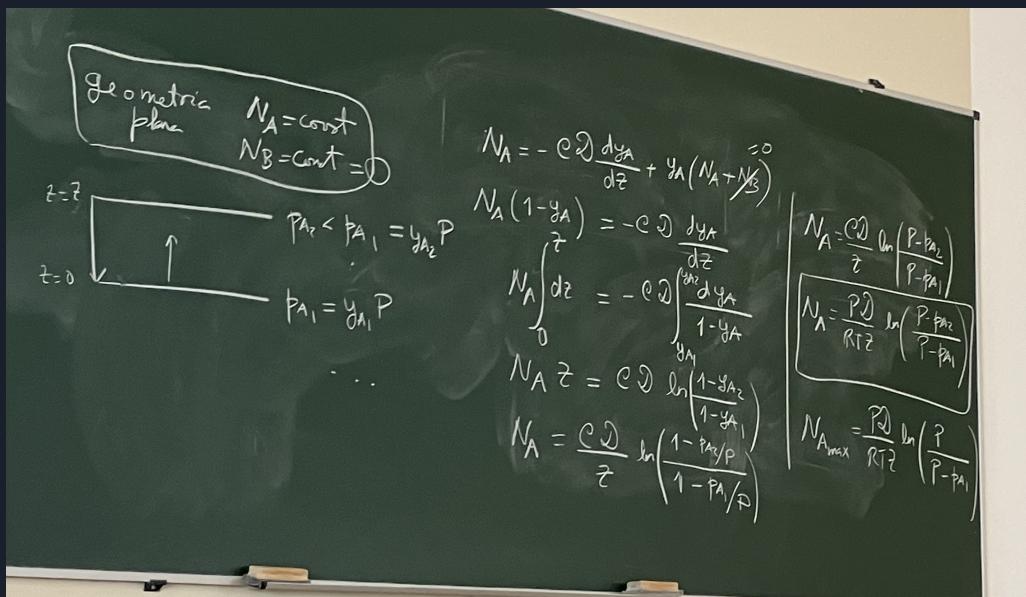
$$N_{A,\max,z} = \frac{c \mathcal{D}_{A,B}}{\Theta \eta_d z} \ln \frac{1 - \Theta y_{A,2}}{1 - \Theta y_{A,1}} = \frac{P}{R T} \mathcal{D}_{A,B} \ln \frac{1 - \Theta y_{A,2}}{1 - \Theta y_{A,1}},$$

$$N_{A,\max,z} \implies y_{A,2} = 0;$$

$$\Theta = 1 + N_{B,z}/N_{A,z} = 1;$$

$$\begin{aligned} \therefore N_{A,\max,z} &= \frac{P \mathcal{D}_{A,B}}{R T (1) z} \ln \frac{1}{1 - y_{A,1}} = \\ &= \frac{P \mathcal{D}_{A,B}}{R T z} \ln \frac{1}{1 - P_{A,1}/P} = \frac{P \mathcal{D}_{A,B}}{z R T} \ln \frac{P}{P - P_{A,1}} \end{aligned}$$

Resposta



Exemplo 2

Moldou-se naftaleno sob a forma de um cilindro de raio R_1 que se deixou sublimar no ar em repouso. Mostre que a velocidade de sublimação é dada por:

$$Q = \frac{2\pi L \mathcal{D} P}{RT \ln(R_2/R_1)} \ln \frac{1 - y_{A,2}}{1 - y_A^*}$$

Sendo a fracção molar correspondente à pressão de vapor do naftaleno e $y_{A,2}$ a fracção molar correspondente a R_2 .

Explique o que sucede à velocidade de sublimação quando R_2 se torna muito grande.

Resposta

$$\begin{aligned} Q &= N_{A,R_1} S_{R_1} = \frac{c \mathcal{D}_{A,B}}{\Theta R_1 \ln(R_2/R_1)} \ln \frac{1 - \Theta y_{A,2}}{1 - \Theta y_{A,1}} (2\pi R_1 L) = \\ &= \frac{\left(\frac{P}{RT}\right) \mathcal{D}_{A,B} 2\pi L}{\Theta \ln(R_2/R_1)} \ln \frac{1 - \Theta y_{A,2}}{1 - \Theta y_{A,1}}; \end{aligned}$$

$$\Theta = 1 + N_B/N_A = 1 + 0/N_A = 1;$$

$$\therefore Q = \frac{P \mathcal{D}_{A,B} 2\pi L}{R T \ln(R_2/R_1)} \ln \frac{1 - y_{A,2}}{1 - y_A^*}$$

Resposta

Geometria cílindrica

$$N_{A1} \cdot R = \text{const}$$
$$N_{B1} \cdot R = \text{const} = 0$$
$$\boxed{Q = N_{A1} \cdot 2\pi r_1 L}$$
$$= N_{A1} \cdot 2\pi R_1 L$$
$$\frac{Q}{2\pi L} \ln\left(\frac{R_2}{R_1}\right) = \frac{P \mathcal{D}}{R T} \ln\left(\frac{\frac{y_{A1}}{1-y_{A1}}}{\frac{y_{A2}}{1-y_{A2}}}\right)$$

Maximizar Q removemos $y_{A,2}$

E2 a)

E se a geometria for esférica

Resposta

$$Q = N_{A,R_1} S_{R_1} = \frac{c \mathcal{D}_{A,B}}{\Theta R_1 (1 - R_1/R_2)} \ln \frac{1 - \Theta y_{A,2}}{1 - \Theta y_{A,1}} (4\pi R_1^2) = \\ = \frac{\left(\frac{P}{RT}\right) \mathcal{D}_{A,B} 4\pi}{R_1^{-1} - R_2^{-1}} \ln \frac{1 - y_{A,2}}{1 - y_A^*};$$

$$\lim_{R_2 \rightarrow \infty} Q = \lim_{R_2 \rightarrow \infty} \frac{P \mathcal{D}_{A,B} 4\pi}{R T (R_1^{-1} - R_2^{-1})} \ln \frac{1 - y_{A,2}}{1 - y_A^*} = \\ = \frac{P \mathcal{D}_{A,B} 4\pi}{R T \lim_{R_2 \rightarrow \infty} (R_1^{-1} - R_2^{-1})} \ln \frac{1 - y_{A,2}}{1 - y_A^*} = \\ = \frac{P \mathcal{D}_{A,B} 4\pi}{R T (R_1^{-1})} \ln \frac{1 - y_{A,2}}{1 - y_A^*}$$

Resposta

The image shows a handwritten derivation on a chalkboard. At the top left, it says "Geometria esférica". Below that, two equations are written: $N_{A_1} \cdot R^2 = \text{const}$ and $N_{B_1} \cdot R^2 = \text{const} = 0$. To the right, there is a formula: $N_{A_1} = -C \mathcal{D} \frac{dy_A}{dr} + y_A (N_{A_2} + \frac{y_A}{r})$. Further down, another equation is shown: $N_{A_1} (1 - y_A) = -C \mathcal{D} \frac{dy_A}{dr}$. This is followed by an integral equation: $\frac{Q}{4\pi} \int_{R_1}^{R_2} \frac{dy_A}{r^2} = -C \mathcal{D} \int_{y_{A_1}}^{y_{A_2}} \frac{dy_A}{1 - y_A}$. Below this, another integral equation is given: $\frac{Q}{4\pi} \left(\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2} \right) = \frac{P \mathcal{D}}{R T} \ln \left(\frac{1 - y_{A_2}}{1 - y_{A_1}} \right)$. Finally, the formula for Q is derived: $Q = \frac{4\pi P \mathcal{D}}{R T \left(\frac{1}{R_1}, \frac{1}{R_2} \right)} \ln \left(\frac{1 - y_{A_2}}{1 - y_{A_1}} \right)$.

VI - Reação Química Heterogénea

Exemplo 1



$$Q_{\text{O}_2} = W_{\text{O}_2}$$

Reações instantâneas: $y_{\text{O}_2|R} = 0$ completamente absorvido pela superfície

Reações O₂ Puro: $y_{\text{O}_2|\infty} = 1$

Resposta

$$Q_{\text{O}_2} = 4\pi r^2 N_{\text{O}_2};$$

Fluxo Molar O₂:

$$N_{\text{O}_2} = y_{\text{O}_2} (N_{\text{O}_2} + N_{\text{CO}}) - C \mathcal{D} \frac{dy_{\text{O}_2}}{dr};$$

Fluxo Molar CO:

$$\frac{N_{\text{CO}}}{2} = \frac{N_{\text{O}_2}}{-1} \implies N_{\text{CO}} = -2 N_{\text{O}_2} \implies$$

$$\begin{aligned} & \implies \int_R^\infty N_{\text{O}_2} dr = \int_R^\infty \frac{Q_{\text{O}_2}}{4\pi r^2} dr = \frac{Q_{\text{O}_2}}{4\pi} \int_R^\infty \frac{dr}{r^2} = \\ & = -\frac{Q_{\text{O}_2}}{4\pi} \Delta(1/r) \Big|_R^\infty = \frac{Q_{\text{O}_2}}{4\pi R} = \\ & = \int_{y_{\text{O}_2|R}}^{y_{\text{O}_2|\infty}} -C \mathcal{D} \frac{dy_{\text{O}_2}}{y_{\text{O}_2} + 1} = -C \mathcal{D} \int_0^1 \frac{dy_{\text{O}_2} + 1}{y_{\text{O}_2} + 1} = -C \mathcal{D} \Delta(\ln(y_{\text{O}_2} + 1)) \Big|_0^1 = \\ & = -C \mathcal{D} \ln \frac{1+1}{0+1} = -C \mathcal{D} \ln 2 \implies \\ & \implies Q_{\text{O}_2} = -4\pi R C \mathcal{D} \ln 2 \end{aligned}$$

Exemplo 2

Obtenha uma expressão para o fluxo molar de A quando numa superfície catalítica ocorre a reacção instantânea $nA \longrightarrow A_n$. A difusão de A dá-se através de uma camada de espessura l e a fracção molar de A no exterior dessa camada é $y_{A,0}$.

Resposta

Fluxo em geometria plana:

$$Q_{A,z} = N_{A,z};$$

Fluxo Molar:

$$\begin{aligned}N_A &= -C \mathcal{D} \frac{dy_A}{dz} + y_A (N_A + N_{A_n}) = -C \mathcal{D} \frac{dy_A}{dz} + y_A (N_A + N_A/n) = \\&= -C \mathcal{D} \frac{dy_A}{dz} + y_A N_A (1 - 1/n) \implies \\&\implies \int_0^l N_A dz = N_A \int_0^l dz = N_A l = \\&= \int_0^{y_{A,0}} -C \mathcal{D} \frac{dy_A}{1 - y_A (1 - 1/n)} = -C \mathcal{D} \int_0^{y_{A,0}} \frac{dy_A}{1 - y_A (1 - 1/n)} = \\&= \frac{-C \mathcal{D}}{(1 - 1/n)} \int_0^{y_{A,0}} \frac{d(1 - y_A (1 - 1/n))}{1 - y_A (1 - 1/n)} = \frac{-C \mathcal{D}}{(1 - 1/n)} \ln (1 - y_{A,0}(1 - 1/n)) \implies \\&\implies N_A = \frac{-C \mathcal{D}}{l (1 - 1/n)} \ln (1 - y_{A,0}(1 - 1/n))\end{aligned}$$

Exemplo 3

Um cilindro de aço, cuja superfície está revestida por um catalisador, é usado para promover a reacção de dimerização de um composto gasoso A ($2A \rightarrow A_2$), à pressão atmosférica e à temperatura de 50°C . Este composto, com uma pressão parcial de 0.39 atm, difunde-se estacionariamente até à superfície do cilindro, sendo a velocidade de difusão limitada pela difusão de A através de um filme gasoso com 6 mm de espessura.

$$\bullet D_A = 2.5E - 5 \text{ m}^2/\text{s} \quad \bullet d = 5 \text{ cm} \quad \bullet L = 10 \text{ cm}$$

E3 a)

Determine a velocidade de difusão de A para o caso em que a reacção ocorre somente na superfície lateral exterior do cilindro.

Resposta

Fluxo em geometria cilíndrica:

$$Q_A = N_{A,R} 2\pi r L;$$

Fluxo molar:

$$\begin{aligned} N_{A,R} &= -C \mathcal{D} \frac{dy_A}{dr} + y_A (N_{A,R} + N_{A_2,R}) = \\ &= -C \mathcal{D} \frac{dy_A}{dr} + y_A (N_{A,R} - (1/2) N_{A,R}) = \\ &= -C \mathcal{D} \frac{dy_A}{dr} + y_A N_{A,R}/2 \implies \end{aligned}$$

$$\implies \int_R^{R+\delta} N_{A,R} dr = \int_R^{R+\delta} \frac{Q_{A,R}}{2\pi r L} dr = \frac{Q_{A,R}}{2\pi L} \int_R^{R+\delta} \frac{dr}{r} = \frac{Q_{A,R}}{2\pi L} \ln \frac{R+\delta}{R} =$$

$$\begin{aligned} &= \int_0^{y_{A,0}} -C \mathcal{D} \frac{dy_A}{1-y_A/2} = \frac{C \mathcal{D}}{1/2} \int_0^{y_{A,0}} \frac{d(1-y_A/2)}{1-y_A/2} = \frac{C \mathcal{D}}{1/2} \ln \frac{1-y_{A,0}/2}{1-0} = \\ &= \frac{C \mathcal{D}}{1/2} \ln \frac{1-p_{A,0}/2 P}{1-0} \implies \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \implies Q_{A,R} &= \frac{\frac{P}{RT} \mathcal{D} 2\pi L}{(1/2) \ln \frac{R+\delta}{R}} \ln(1 - p_{A,0}/2 P) = \\ &= \frac{\frac{1}{82.0573660809596*323.15} * 2.5 E^{-1} * 2 * \pi * 10}{(1/2) \ln \frac{2.5+0.6}{2.5}} \ln(1 - 0.39/2 * 1) \cong -1.19467654735 \end{aligned}$$

E3 b)

Calcule a velocidade de difusão de A para o caso em que a reacção ocorre somente numa das bases do cilindro.

Resposta

Fluxo em geometria plana:

$$Q_{A,z} = N_{A,z};$$

Fluxo molar:

$$\begin{aligned} N_{A,z} &= \frac{C \mathcal{D}}{\delta/2} \ln(1 - y_{A,0}/2) = \frac{C \mathcal{D}}{\delta/2} \ln(1 - p_{A,0}/2 * P) = \\ &= \frac{\frac{1}{82.0573660809596*323.15} * 0.25}{0.6/2} \ln(1 - 0.39/2 * 1) \cong -6.816832220539635e-6 \text{ mol/s} \end{aligned}$$

VII - Difusão em estado pseudo estacionário

1 Diff em estado pseudo estacionário

From an unsteady-state material balance:

$$\begin{aligned} \text{In} - \text{Out} = 0 - N_{A,z} S &= - \left(\frac{c \mathcal{D}_{A,B}}{\Theta \eta_d l} \ln \frac{1 - \Theta y_{A,2}}{1 - \Theta y_{A,1}} \right) S = \\ &= \text{Accumulation} = \frac{\rho_{A,L} S}{M_A} \frac{dz}{dt}; \end{aligned}$$

$$N_{A,z} \Delta z = - \frac{c \mathcal{D}_{A,B}}{1 - y_A} \frac{dy_A}{dz}$$

$$z = f(t) \begin{cases} t_0 = 0 & z_0 \\ t & z_t \end{cases}$$

$$N_A = f(z) \iff N_A = f(t)$$

$$Q_A = -C_{A,L} \frac{dV}{dt} \quad N_A = C_{A,L} \frac{dz}{dt}$$

Caracterização: Se a distância do caminho da difusão variar pequenas quantidades por um longo período de tempo, pode-se usar o modelo de difusão em estado pseudo-estacionário.

$$t = \frac{C_{A,l} \Delta(z^2)}{2 D_{A,B} C \ln \frac{1-y_{A,1}}{1-y_{A,0}}}$$

$$N_A = \frac{D_{A,B} C}{z} \ln \frac{1-y_{A,1}}{1-y_{A,0}} = C_{A,l} \frac{dz}{dt} \implies$$

$$\implies \int dt = t =$$

$$\begin{aligned} &= \int \frac{C_{A,l}}{D_{A,B} C \ln \frac{1-y_{A,1}}{1-y_{A,0}}} z \, dz = \frac{C_{A,l}}{D_{A,B} C \ln \frac{1-y_{A,1}}{1-y_{A,0}}} \int z \, dz = \frac{C_{A,l}}{D_{A,B} C \ln \frac{1-y_{A,1}}{1-y_{A,0}}} \frac{\Delta(z^2)}{2} = \\ &= \frac{C_{A,l} \Delta(z^2)}{2 D_{A,B} C \ln \frac{1-y_{A,1}}{1-y_{A,0}}} \end{aligned}$$

1.2 Geometria esférica

$$t = \frac{C_{A,l}}{2 D C \ln(1 - y_{A,0})^{-1}} \Delta(-r^2)$$

$$\lim_{\substack{r_2 \rightarrow \infty \\ y_{A,1} \rightarrow 0}} -C_{A,l} 4 \pi r^2 \frac{dr}{dt} = \frac{4 \pi D C}{r_0^{-1}} \ln(1 - y_{A,0})^{-1}$$

Exemplo 1

Calcule o tempo necessário para que a água evapore completamente.

- Uma camada de água com 1 mm de espessura
- É mantida a 20 °C
- em contato com o ar seco a 1 atm
- Admitindo que a evaporação se dá por difusão molecular através de uma camada de ar estagnado com 5 mm de espessura
- O coeficiente de difusão de água no ar é 0.26 cm²/s
- A pressão de vapor da água a 20 °C é 0.0234 atm

Resposta

$$\begin{aligned} N_A &= y_A(N_A + N_B) - \frac{P D_{A,B}}{R T} \frac{dy_A}{dz} = y_A N_A - \frac{P D_{A,B}}{R T} \frac{dy_A}{dz} \implies \\ \implies \int N_A dz &= N_A \int dz = N_A \Delta z = \\ \int -\frac{P D_{A,B}}{R T} \frac{dy_A}{1-y_A} &= -\frac{P D_{A,B}}{R T} \int \frac{dy_A}{1-y_A} = \frac{P D_{A,B}}{R T} \ln \frac{1-y_{A,1}}{1-y_{A,0}} \xrightarrow{y_{A,1}=0} \\ \xrightarrow{y_{A,1}=0} N_A &= \\ &= \frac{P D_{A,B}}{R T \Delta z} \ln \frac{1}{1-y_{A,0}} = \frac{P D_{A,B}}{R T \delta} \ln \frac{1}{1-y_{A,0}} = \\ &= Q_A/S = -C_{A,l} \frac{dV}{dt} \frac{1}{S} = -C_{A,l} \left(-S \frac{d\delta}{dt} \right) \frac{1}{S} = C_{A,l} \frac{d\delta}{dt} \implies \\ \implies \int C_{A,l} \delta d\delta &= C_{A,l} \int \delta d\delta = C_{A,l} \Delta(\delta^2)/2 = \\ &= \int \frac{P D_{A,B}}{R T} \ln \frac{1}{1-y_{A,0}} dt = \frac{P D_{A,B}}{R T} \ln \frac{1}{1-y_{A,0}} \int dt = \frac{P D_{A,B}}{R T} \ln \frac{1}{1-y_{A,0}} \Delta t = \\ \implies \Delta t &= \frac{C_{A,l} \Delta(\delta^2)/2}{\frac{P D_{A,B}}{R T} \ln \frac{1}{1-y_{A,0}}} = \frac{C_{A,l} \Delta(\delta^2) R T}{2 P D_{A,B} \ln \frac{1}{1-p_{A,0}/P}} = \\ &= \frac{\left(\frac{1000 \text{ kg}_\text{Água}}{\text{m}^3 (\text{Água})} \frac{\text{mol}_\text{Água}}{18 \text{ g}_\text{Água}} \right) * ((6 \text{ E}^{-3})^2 - (5 \text{ E}^{-3})^2) * 8.20573660809596e - 5 * (20 + 273.1)}{2 * 1 * (0.26 \text{ E}^{-4}) \ln \frac{1}{1-0.0234}} \\ &\cong 11939.247507707150908 \text{ s} \frac{\text{h}}{3600 \text{ s}} \cong 3.316457641029764 \text{ h} \end{aligned}$$