A composição molar de uma mistura gasosa a 273 K e 1.5 * 10^5 Pa é:

O_2	7%
CO	10%
CO_2	15%
N_2	68%

Determine:

a) A composição em percentagem mássica

b) A massa específica da mistura gasosa

B.C. = 1 mol

$m_{O_2} = 0{,}07 \text{ mol} \cdot \frac{32 \text{ g}}{1 \text{ mol}}$

$= 2{,}24 \text{ g}$

$m_{CO} = 0{,}10 \text{ mol} \cdot \frac{28 \text{ g}}{1 \text{ mol}}$

$= 2{,}8 \text{ g}$

$m_{CO_2} = 0{,}15 \text{ mol} \cdot \frac{44 \text{ g}}{1 \text{ mol}}$

$= 6{,}6 \text{ g}$

$m_{N_2} = 0{,}68 \text{ mol} \cdot \frac{28 \text{ g}}{1 \text{ mol}}$

$= 19,04\ g$

$m_{total} = 30,68\ g$

$$X_{mO_2} = \frac{2,24\ g}{30,68\ g/mol} = 0,073$$

$$X_{mCO} = \frac{2,8\ g}{30,68\ g/mol} = 0,091$$

$X_{mCO_2} = 0,215$

$X_{mN_2} = 0,620$

b)

$$PV = nRT$$

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{P \cdot M}{R\ T} = \frac{(1,5 \times 10^5)(30,68)}{(8,314)(273)}$$

$$M = \frac{m_{total}}{n_{total}} = \frac{30,68\ g}{1\ mol} =$$

$\rho = 2{,}027 \frac{Kg}{m^3}$

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

$y_{O2} = 0.20$
$y_{N2} = 0.70$
$y_{CO} = 0.10$

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:

$\mathcal{D}_{CO-O2} = 0.185 \times 10^{-4}\ m^2/s$ 273 K, 1 atm
$\mathcal{D}_{CO-N2} = 0.192 \times 10^{-4}\ m^2/s$ 288 K, 1 atm

$\mathcal{D}_{CO-mistura} = 0.102 \times 10^{-4}\ m^2/s$

$$D_{\substack{CO-O_2 \\ 2atm,\,298K}} = \left(\frac{298}{273}\right)^{3/2}\left(\frac{1\ atm}{2\ atm}\right)\left(0{,}185\times10^{-4}\right)$$

$$= 1{,}055\times10^{-5}\ \frac{m^2}{s}$$

$$D_{CO-N_2} = \left(\frac{298}{288}\right)^{3/2}\left(\frac{1}{2}\right)\left(0{,}192\times10^{-4}\right)$$

$$= 1{,}010 \times 10^{-5} \frac{m^2}{s}$$

$$y'_{O_2} = \frac{0{,}2}{0{,}2 + 0{,}7} = 0{,}22$$

$$y'_{N_2} = \frac{0{,}7}{0{,}9} = 0{,}77$$

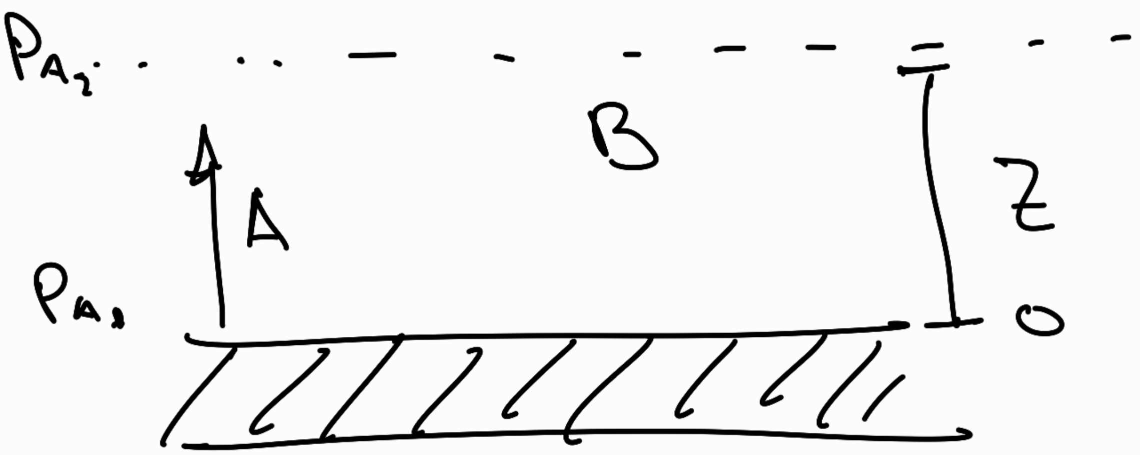
$$D_{CO\text{-}mistura} = \frac{1}{(1{,}055 \times 10^{-5})(0{,}22) + (1{,}01 \times 10^{-5})(0{,}77)}$$

$$= 0{,}102 \times 10^{-4} \frac{m^2}{s}$$

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_{A1} e no outro lado $p_{A2} < p_{A1}$.
Mostre que o fluxo máximo possível de A através dessa camada é dado por:

$$N_{A\,max} = \frac{D\,P}{R\,T\,Z} \ln\left(\frac{P}{P - p_{A1}}\right)$$

Sendo P a pressão total



$P_{A_1} > P_{A_2}$

$N_A =$ ctte, porque não varia ao longo da camada

$$N_A = y(N_A + \overset{0 \rightarrow \text{fixo}}{\cancel{N_B}}) - c D_{AB} \frac{dy_A}{dz}$$

$$\text{C.f.} \begin{cases} z_1 = 0 \rightarrow y_{A_1} = \dfrac{P_{A_1}}{P} \\ \\ z_2 = z \rightarrow y_{A_2} = \dfrac{P_{A_2}}{P} = 0 \end{cases}$$

Para o fluxo ser máximo → temos de garantir que a força motriz seja máx, e isto acontece.

Se e só se, $y_{A_2} = 0$

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

$$N_{A\,máx} \int_0^z dz = -\frac{P}{RT} D_{AB} \int_{y_{A_1}}^{0} \frac{1}{(1 - y_A)} dy_A$$

$$N_{A\,máx} = \frac{P \cdot D_{AB}}{R \cdot T \cdot z} \ln\left(\frac{1}{1 - y_{A_1}}\right)$$

$$= \frac{P \cdot D_{AB}}{R \cdot T \cdot z} \ln\left(\frac{P}{P - P_{A_1}}\right)$$

1. 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:

$$Q = \frac{2\pi L D P}{R T} \ln\left(\frac{1 - y_{A2}}{1 - y_A^*}\right) / \ln\left(\frac{R_2}{R_1}\right)$$

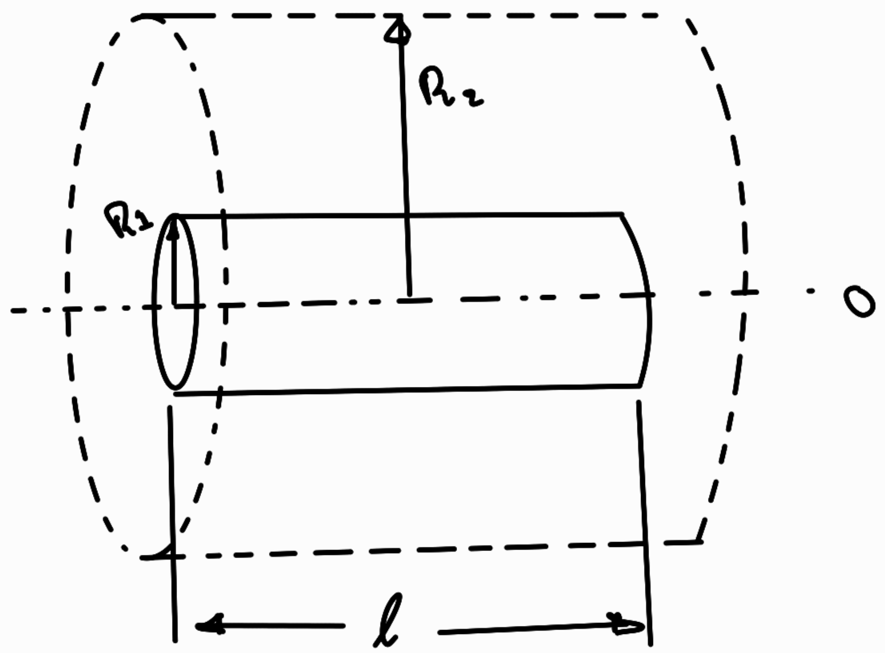
Sendo y_A^* a fracção molar correspondente à pressão de vapor do naftaleno e y_{A2} a fracção molar correspondente a R_2.

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

2. E se a geometria for esférica?

$$N_{A_r} \cdot r = N_{A_1} \cdot R_1 = ctte$$

$$Q = N_{A_1} 2\pi R_1 . l \Rightarrow N_{A_1} . R_1 = \frac{Q}{2\pi l}$$



$$N_{A_r} = \frac{N_{A_1} R_1}{r}$$

$$C.F.\begin{cases} R_0 = R_1 \longrightarrow y_{A_1} = y_A^* \\ \\ R_f = R_2 \longrightarrow y_{A_2} = y_{A_2} \end{cases}$$

$$N_{A_r} = y_A(N_{A_r} + \cancelto{0}{N_{B_r}}) - cD_{AB}\frac{dy_A}{dr}$$

$$\frac{Q}{2\pi \ell r}(1 - y_A) = -\frac{PD_{AB}}{RT}\frac{dy_A}{dr}$$

$$\frac{Q}{2\pi \ell}\int_{R_1}^{R_2}\frac{1}{r}\,dr = -\frac{PD_{AB}}{RT}\int_{y_A^*}^{y_{A_2}}\frac{1}{1-y_A}\,dy_A$$

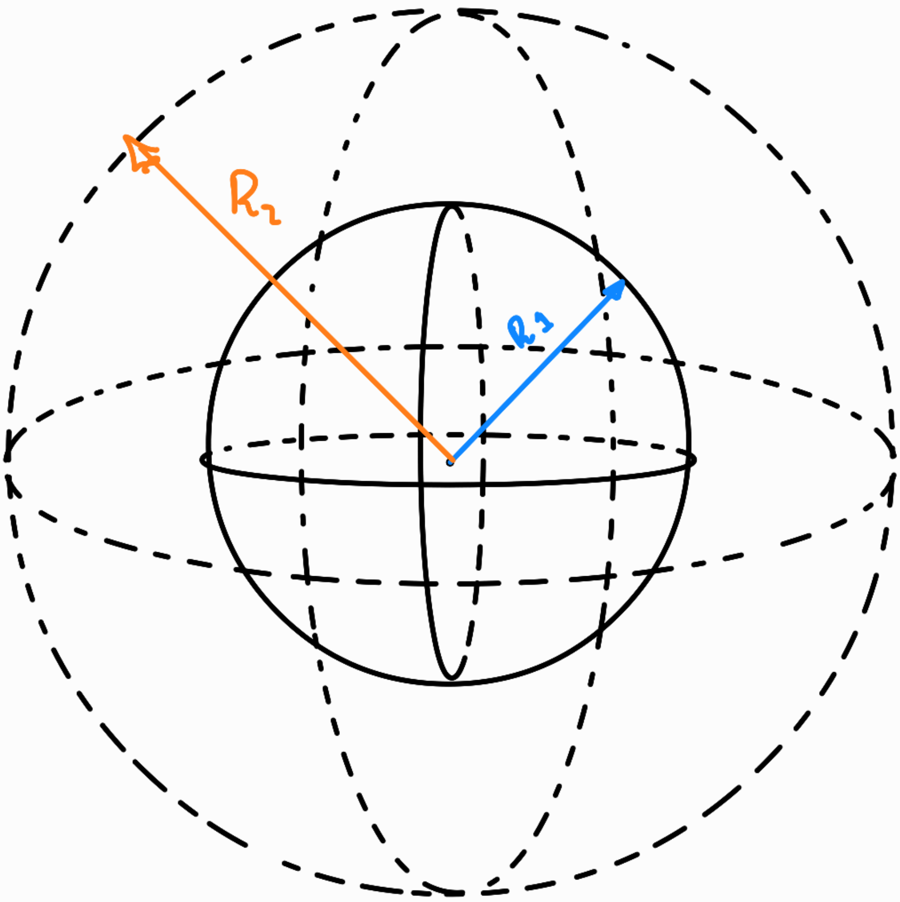
$$\frac{Q}{2\pi \ell}\ln\left(\frac{R_2}{R_1}\right) = \frac{PD_{AB}}{RT}\ln\left(\frac{1-y_{A_2}}{1-y_A^*}\right)$$

$$Q = \frac{2\pi \ell P D_{AB}}{RT \cdot \ln\left(\frac{R_2}{R_1}\right)} \cdot \ln\left(\frac{1 - y_{A2}}{1 - y_A^*}\right)$$

$$\underline{\underline{R_2 \longrightarrow \infty}}$$

$$\lim_{R_2 \to \infty} Q = 0$$

2 ..



$$N_A = y_A(N_A + N_B) - c D_{AB} \frac{dy_A}{d}$$

$$N_A \cdot S = ctt = N_{Ar} 4\pi r^2 = Q$$

$$N_{Ar} = y_A \left(N_{Ar} + \cancelto{0}{N_{Br}}\right) - c D_{AB} \frac{dy_A}{dr}$$

$$N_{Ar} (1 - y_A)\, dr = - \frac{P D_{AB}}{RT}\, dy_A$$

$$\frac{Q}{4\pi} \int_{R_1}^{R_2} \frac{1}{r^2}\, dr = - \frac{P D_{AB}}{RT} \int_{y_A^*}^{y_{A2}} \frac{1}{1 - y_A}\, dy_A$$

$$\frac{Q}{4\pi} \left(\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2} \right) = \frac{P D_{AB}}{RT} \ln \left(\frac{1 - y_{A2}}{1 - y_A^*} \right)$$

$$Q = \frac{4\pi P D_{AB}}{RT} \cdot \ln \left(\frac{1 - y_{A2}}{1 - y_A^*} \right) \cdot \left(\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2} \right)^{-1}$$

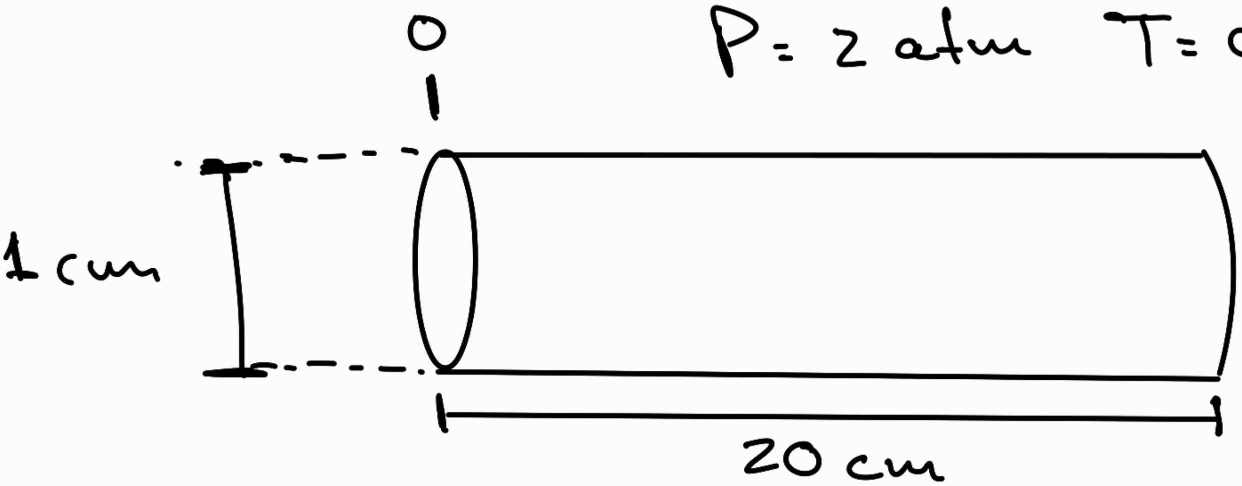
$$\lim_{R_2 \to \infty} Q = Q_{min}.$$

Um tubo com 1 cm de diâmetro e 20 cm de comprimento está cheio com uma mistura de CO_2 e H_2 a uma pressão total de 2 atm e a uma temperatura de 0ºC. O coeficiente de difusão do $CO_2 – H_2$ nestas condições é 0.275 cm2 /sec. Se a pressão parcial do CO_2 for 1.5 atm num dos lados do tubo e 0.5 atm no outro extremo, calcule a velocidade de difusão para:

i) Contradifusão equimolar ($N_{CO2} = - N_{H2}$)

ii) A seguinte relação entre os fluxos $N_{H2} = -0.75\ N_{CO2}$

$P = 2$ atm $\quad T = 0\,°C$



$$D_{CO_2-H_2} = 0{,}275\ \frac{cm^2}{s} \cdot \frac{(1\ m)^2}{(100\ cm)^2} = 2{,}75 \times 10^{-5}\ \frac{m^2}{s}$$

$$P_{1\,CO_2} = 1{,}5\ atm \qquad P_{2\,CO_2} = 0{,}5\ atm$$

$$Q = ? \quad i)\ N_{CO_2} = -N_{H_2}$$

$$C.F. \begin{cases} z_1 = 0\ m \rightarrow y_{1\,CO_2} = \frac{1.5}{2} = 0{,}75 \\ z_2 = 0{,}02\ m \rightarrow y_{2\,CO_2} = \frac{0{,}5}{2} = 0{,}25 \end{cases}$$

$$N_{CO_2} = ctte$$

$$N_{CO_2} = y_{CO_2}\left(\cancelto{0}{N_{CO_2} + \overset{-N_{CO_2}}{N_{H_2}}}\right) - c D_{CO_2-H_2} \frac{dy_{CO_2}}{dz}$$

$$N_{CO_2} = -\frac{P D_{CO-H_2}}{RT} \frac{dy_{CO_2}}{dz}$$

$$N_{CO_2} \int_0^{0,02} dz = -\frac{P D_{CO_2}}{RT} \int_{0,75}^{0,25} dy_{CO_2}$$

$$N_{CO_2} = \frac{-(2 \times 10^{5})(2,75 \times 10^{-5})(-0,5)}{(8,314)(273)(0,02)}$$

$$= 0,0605 \ \frac{mol}{m^2.s}$$

$$Q = N_{CO_2} . S = N_{CO_2} . \frac{\pi}{2} r^2$$

$$Q = 0{,}0605\ \frac{mol}{m^2 \cdot s} \cdot \frac{\pi}{2}\left(\frac{0{,}01}{2}\right)^2$$

$$= 2{,}376 \times 10^{-6}\ \frac{mol}{s}$$

ii) $N_{CO_2} = -0{,}75\, N_{H_2}$

$$N_{CO_2} = -0{,}33\, y_{CO_2} N_{CO_2} - c D_{CO_2-H_2} \frac{d y_{CO_2}}{dz}$$

$$N_{CO_2}(1 + 0{,}33\, y_{CO_2}) = -c D_{CO_2-H_2} \frac{d y_{CO_2}}{dz}$$

$$N_{CO_2} \int_0^{0{,}02} dz = -\frac{P D_{CO_2-H_2}}{RT} \int_{0{,}75}^{0{,}25} \frac{1}{1 + 0{,}33\, y_{CO_2}}\, d y_{CO_2}$$

$$N_{CO_2} = -\frac{(2 \times 10^5)(2{,}75 \times 10^{-5})}{(8{,}314)(273)(0{,}02)} \ln\left(\frac{1 + (0{,}33)(0{,}25)}{1 + (0{,}33)(0{,}75)}\right)$$

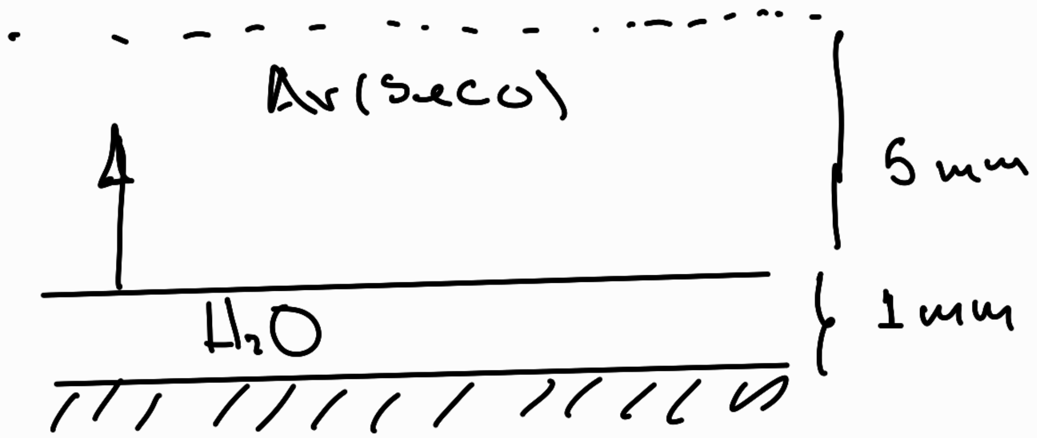
$$= 0{,}0172\ \frac{mol}{m^2 s}$$

$$Q = 0{,}0172\ \frac{mol}{m^2 s} \cdot \frac{\pi}{2} \cdot \left(\frac{0{,}01}{2}\right)^2$$

$= 6{,}75 \times 10^{-7}\ mol \cdot s^{-1}$

1. Uma camada de água com 1 mm de espessura é mantida a 20 ºC em contacto 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, calcule o tempo necessário para que a água evapore completamente. O coeficiente de difusão de água no ar é 0.26 cm^2/s e a pressão de vapor da água a 20ºC é 0.0234 atm.

$T = 20°C \qquad P = 1\ atm$



$D_{H_2O-Ar} = 0{,}26\ \frac{cm^2}{s} \qquad P^*_{H_2O} = 0{,}0234\ atm$

$$N_{H_2O_z} = y_{H_2O}(N_{H_2O_z} + \cancel{N_{Ar_z}}^{0}) - c\,D_{H_2O-Ar}\frac{dy_{H_2O}}{dz}$$

$$cf \begin{cases} z_1 \rightarrow y_1 = \frac{0{,}0234}{1} = 0{,}0234 \\ z_2 \rightarrow y_2 = 0 \ (\text{Ar seco}) \end{cases}$$

$$N_{H_2O}\left(1-y_{H_2O}\right) = -\frac{P\,D_{H_2O.Air}}{RT}\,\frac{d\,y_{H_2O}}{dz}$$

$$N_{H_2O} = \frac{P \cdot D_{H_2O} \cdot \ln\left(\frac{1}{1-y_A^*}\right)}{R \cdot T \cdot \underbrace{(z_2 - z_1)}_{\delta}}$$

$$N_{H_2O} = C_{Al}\,\frac{d\delta}{dt}$$

$$C_{Al}\,\frac{d\delta}{dt} = \frac{P \cdot D_{H_2O} \ln\left(\frac{1}{1-y_A^*}\right)}{RT\,\delta}$$

$$C_{Al}\int_{\delta_0}^{\delta_f} \delta\, d\delta = \frac{P D_{H_2O} \ln\left(\frac{1}{1-y_A^*}\right)}{RT}\int_0^t dt$$

$$C.F.\begin{cases} t = 0 \longrightarrow \delta_0 = 5\times10^{-3}\,m \\ t = t \longrightarrow \delta_f = 6\times10^{-3}\,m \end{cases}$$

$$\frac{C_{AL}}{2}\left(\delta_f^2-\delta_0^2\right)=\frac{P \cdot D_{H_2O} \cdot \ln\left(\frac{1}{1-y_A^*}\right)}{R\,T}\,t$$

$$t=\frac{C_{AL}\cdot\left(\delta_f^2-\delta_0^2\right)\cdot R\cdot T}{2\cdot P\cdot D_{H_2O}\cdot \ln\left(\frac{1}{1-y_A^*}\right)}$$

$$C_{AL}=\frac{10^6\ \frac{g}{m^3}}{18\ g/mol}=55{,}56\times10^4\ \frac{mol}{m^3}$$

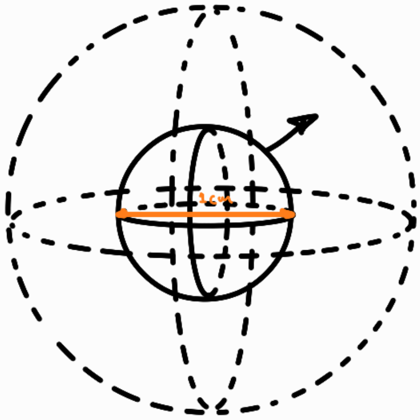
$$t=\frac{(55.56\times10^3)\left((6\times10^{-3})^2-(5\times10^{-3})^2\right)(8{,}314)(293)}{(2)(1\times10^5)(0{,}26\times10^{-4})\ln\left(\frac{1}{1-0{,}0234}\right)}$$

$$=12091{,}54\ s \Rightarrow 3{,}35\ h$$

2. Calcule o tempo necessário para sublimar completamente uma esfera de naftleno ($C_{10}H_8$) cujo diâmetro inicial é 1 cm. A esfera está colocada numa quantidade "infinita" de ar a 318 K.
P*(naftaleno) = 0.106 atm ρ (naftaleno) = 1140 kg/m^3 $D_{naft-ar} = 6.9\times10^{-7}$ m^2/s

$T = 318\,K$

$P = 1\,atm$



$P^*_{naf} = 0{,}106$ atm

$\rho_{naf} = 1140 \dfrac{kg}{m^3}$

$D_{naf.ar} = 6{,}9 \times 10^{-7} \dfrac{m^2}{s}$

$$N_A . r^2 = N_{A_1} R_1^2 \Rightarrow$$

$$Q_A = N_{A_1} 4 \pi R_1^2$$

$$Q_A = N_A . r^2 4\pi \Rightarrow N_A = \frac{Q_A}{4\pi} \frac{1}{r^2}$$

$$N_A = y_A (N_A + \cancelto{0}{N_B}) - c D_{AB} \frac{dy_A}{dr}$$

$$N_A \, dr = -\frac{P D_{AB}}{RT} \frac{1}{1 - y_A} dy_A$$

$$\begin{cases} R_0 = R_1 \longrightarrow y_0^* = 0{,}106 \\ R_f = \infty \longrightarrow y_f = 0 \end{cases}$$

$$\frac{Q_A}{4\pi}\int_{R_1}^{\infty}\frac{1}{r^2}\,dr = -\frac{P D_{AB}}{RT}\int_{y_A^*}^{0}\frac{1}{1-y_A}\,dy_A$$

$$\leftarrow \frac{Q_A}{4\pi}\left(\cancelto{0}{\frac{1}{\infty}} + \frac{1}{R_1}\right) = \frac{P D_{AB}}{RT}\ln\left(\frac{1}{1-y_A^*}\right)$$

$$\frac{Q_A}{4\pi}\cdot\frac{1}{R_1} = \frac{P D_{AB}}{RT}\ln\left(\frac{1}{1-y_A^*}\right)$$

$$Q_A = -C_{AL}\frac{dV}{dt} \Rightarrow \frac{dV}{dt} = S\frac{dr}{dt}$$

$$= 4\pi R_1^2\frac{dr}{dt}$$

$$C_{AL} R_1\frac{dr}{dt} = \frac{P D_{AB}}{RT}\ln\left(\frac{1}{1-y_A^*}\right)$$

$$-C_{AL}\int_{R_1}^{0} r_1\,dr = \frac{P D_{AB}}{RT}\ln\left(\frac{1}{1-y_A^*}\right)\int_0^t dt$$

$$-\frac{C_{AL}}{2}\left((0)^2-(R_1)^2\right)=\frac{P D_{AB}}{RT}\ln\left(\frac{1}{1-y_A^*}\right)t$$

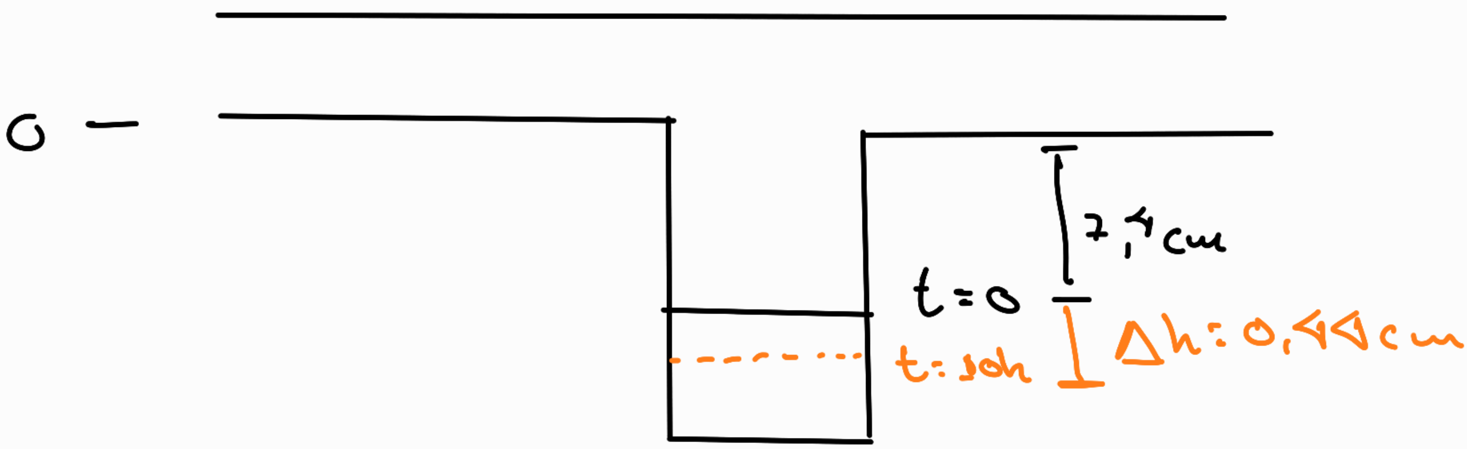
$$t=\frac{C_{AL}\cdot(R_1)^2\, R\, T}{2(P)(D_{AB})\ln\left(\frac{1}{1-y_A^*}\right)}$$

$$t=\frac{\frac{1140}{128,18}(0,003)^2(8,314)(318)}{(2)(1\times10^5)(6,9\times10^{-7})\ln\left(\frac{1}{1-y_A^*}\right)}$$

$$t=\frac{587,84}{0,01546}=38023,51\ s$$

$$=10,56\ h$$

3. Foi usada uma célula de Arnold para medir o coeficiente de difusão do clorofórmio em ar a 25ºC e à pressão de 1 atm. A massa específica do clorofórmio é 1.485 g/cm^3 e a pressão de vapor é 200 mmHg. No tempo t=0 a superfície do clorofórmio líquido situava-se a 7.4 cm do topo do tubo e após 10 horas a superfície do líquido desceu 0.44 cm. Se a concentração de clorofórmio for nula no topo do tubo, qual será o valor do coeficiente de difusão do clorofórmio em ar? $T=25°C$ $P=1\ atm$



$$\rho_A = 1,485\ g.cm^{-3} \cdot \frac{1\ Kg}{1000\ g} \cdot \frac{(100\ cm)^3}{(1\ m)^3} = 1485 \frac{Kg}{m3}$$

$$P_A^* = 200\ mmHg$$

$$C.f \begin{cases} z_1 = 7,4\ cm \longrightarrow y_1 = \frac{200}{760} = 0,263 \\ z_2 = 0 \longrightarrow y_2 = 0 \end{cases}$$

$$N_A = y_A(N_A + \cancel{N_B}^{\,0}) - c D_{AB} \frac{dy_A}{dz}$$

$$N_A \int_{z_1}^{z_2} dz = -\frac{P D_{AB}}{RT} \int_{0,263}^{0} \frac{1}{1-y_A}\, dy_A$$

$$N_A = \frac{P D_{AB}}{RT\delta} \ln\left(\frac{1}{1-y_{A1}}\right)$$

Por qué em camada $N_A = Q$?

$$N_A = -C_{AL} \frac{d\delta}{dt}$$

$$C_{AL}\frac{d\delta}{dt}=\frac{PD_{AB}}{RT\delta}\ln\left(\frac{1}{1-y_{A1}}\right)$$

$$CF\begin{cases} t=0 \longrightarrow \delta_0=7{,}4\times10^{-2}\,cm \\ t=10 \longrightarrow \delta_f=7{,}84\times10^{-2}\,cm \end{cases}$$

$$C_{AL}\int_{\delta_0}^{\delta_f}\delta\, d\delta=\frac{PD_{AB}}{RT}\ln\left(\frac{1}{1-y_{A1}}\right)\int_0^{10}dt$$

$$D_{AB}=\frac{C_{AL}\left((\delta_f)^2-(\delta_0)^2\right)RT}{(2)(P)\ln\left(\frac{1}{1-y_{A1}}\right)(10)}$$

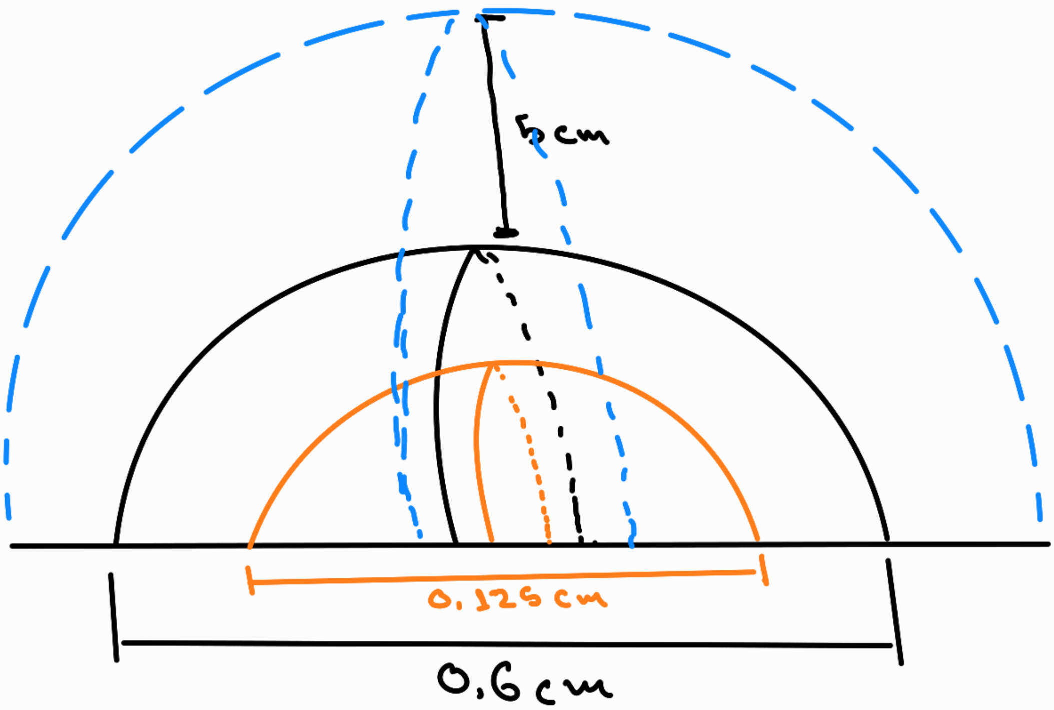
$$=\frac{\frac{1485}{119{,}5\times10^{-3}}\left((7{,}84\times10^{-2})^2-(7{,}4\times10^{-2})^2\right)(8.314)(298)}{(2)(1\times10^{5})\ln\left(\frac{1}{0{,}737}\right)(36000)}$$

$$D_{AB}=9{,}396\times10^{-6}\ \frac{m^2}{s}$$

4. Uma gota de água com geometria de hemisfério repousa numa superfície plana. O diâmetro do hemisfério da gota de água é reduzido de 0,6cm até 0,125cm, por evaporação através de difusão molecular num filme estagnado de azoto com 0,5cm de espessura. O teor de vapor de água no seio da fase gasosa de azoto é nulo. A pressão de vapor de água à temperatura do ensaio (25°C) é de 1.013×10^4 Pa e a pressão total do sistema é de 1.013×10^5Pa. A esta pressão e temperatura o coeficiente de difusão da água em azoto é de 2.1×10^{-5} m^2/s.

a) Calcule o tempo necessário para o processo acima descrito se a espessura do filme de azoto for constante.

b) Repita o cálculo anterior no caso da espessura do filme de azoto ocupar o espaço deixado livre pela água evaporada.



$T = 25\,^{\circ}C$

$P^*_{H_2O} = 1,013\times10^4\ Pa$

$P = 1,013\times10^5\ Pa$

$D_{H_2O-N_2} = 2,1\times10^{-5}\ \frac{m^2}{s}$

$N_a = ct$

$N_A . r = ctt$

$\{ N_A r^2 = N_{A1} R_1^2 = ctte$

$$Q = N_{A1} R_1^2 \, 4\pi \Rightarrow N_A = \frac{Q}{2\pi r^2}$$

$$N_A = y_A(N_A + \cancel{N_B}^{\,0}) - c D_{AB} \frac{dy_A}{dr}$$

$$CF \begin{cases} R_0 = R_1 \rightarrow y_A^* = \dfrac{1,013 \times 10^4}{1,013 \times 10^5} = 0,1 \\ R_f = R_2 \rightarrow y_A = 0 \end{cases}$$

$$R_2 = \left(\frac{0,6 \times 10^{-2}}{2}\right) + 0,5 \times 10^{-2} = 0,8 \times 10^{-2}\, m$$

$$\frac{Q}{2\pi} \int_{R_1}^{R_2} \frac{1}{r^2} dr = \frac{-P D_{AB}}{RT} \int_{y_A^*}^{0} \frac{1}{1 - y_A} dy_A$$

$$\frac{Q}{2\pi} \left(\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2}\right) = \frac{P D_{AB}}{RT} \ln\left(\frac{1}{1 - y_A^*}\right)$$

$$Q = \frac{2\pi P D_{AB}}{RT} \ln\left(\frac{1}{1 - y_A^*}\right) \cdot \left(\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2}\right)^{-1}$$

$$Q = \frac{2\pi(1{,}013 \times 10^{5})(2{,}1 \times 10^{-5})}{(8{,}314)(298)\left(\frac{1}{3\times10^{-3}} - \frac{1}{8\times10^{-2}}\right)} \cdot \ln\left(\frac{1}{0{,}9}\right)$$

$$= 2{,}728 \times 10^{-6}\ mol/s$$

$$V_{hemisferio} = \frac{1}{2} \cdot \frac{4}{3} \pi R^3$$

$$\Delta V = \frac{2}{3}\pi\left((3\times10^{-3})^3 - (0{,}0625\times10^{-2})^3\right)$$

$$= 5{,}604 \times 10^{-8}\ m^3$$

$$Q = \frac{mol}{t} \Rightarrow t = \frac{mol}{Q}$$

$$\rho = \frac{m}{V} \Rightarrow m = V \cdot \rho$$

$$m = (5{,}604 \times 10^{-8}\ m^3)\left(1000\ \frac{Kg}{m^3}\right)$$
$$= 5{,}604 \times 10^{-5}\ Kg$$

$$n = \frac{5{,}604 \times 10^{-5}\ \cancel{Kg}}{18 \times 10^{-3}\ \frac{\cancel{Kg}}{mol}} = 3{,}113 \times 10^{-3}\ mol$$

$$t = \frac{3,113 \times 10^{-3}\ \text{mol}}{2,728 \times 10^{-5}\ \frac{\text{mol}}{s}} = 1141,2\ s$$

$$= 19\ \text{min}$$

$$\frac{Q}{2\pi}\left(\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2}\right) = \frac{P D_{AB}}{RT} \ln\left(\frac{1}{1-y_A^*}\right)$$

$$Q = -C_{AL}\frac{dV}{dt} = -C_{AL}\, 2\pi r_1^2 \frac{dr_1}{dt}$$

$$-C_{AL}\left(R_1 - \frac{R_1^2}{R_2}\right)\frac{dR_1}{dt} = \frac{P D_{AB}}{RT}\ln\left(\frac{1}{1-y_A^*}\right)$$

$$C_f \begin{cases} t=0 \longrightarrow R_0 = R_1 \\ t=t \longrightarrow R_f = 0 \end{cases}$$

$$-C_{AL}\int_{R_1}^{0} R_1\, dR_1 + \frac{C_{AL}}{R_2}\int_{R_1}^{0} R_1^2\, dR_1 = \frac{P D_{AB}}{RT}\left(\ln\frac{1}{1-y_A^*}\right)\int_0^t dt$$

$$\frac{C_{AL}}{2}\left(-R_1^2\right)+\frac{C_{AL}}{3R_2}\left(R_1^3\right)=\frac{P D_{AB}}{RT}\ln\left(\frac{1}{1-y_A^*}\right) t$$

$$t=\frac{C_{AL}\left(-\frac{R_1^2}{2}+\frac{R_1^3}{3R_2}\right) R\,T}{P\,D_{AB}\ln\left(\frac{1}{1-y_A^*}\right)}$$

$$t=\frac{(55{,}56\times10^3)\left(-\frac{(3\times10^{-3})^2}{2}+\frac{(3\times10^{-3})^3}{3(6{,}25\times10^{-4})}\right)(8.314)(298)}{(1.013\times10^5)(2.1\times10^{-5})\ln\left(\frac{1}{0{,}9}\right)}$$

$$t=6080{,}2\ s=101{,}33\ min$$

$$=1.68\ h$$

5. Uma partícula de carvão queima no ar a 1145 K e o processo é limitado pela difusão de O_2 em sentido oposto ao do CO formado à superfície. Se o carvão for considerado como uma esfera de carbono puro com uma massa específica de 1280 kg/m^3 e com um diâmetro inicial de 0.015 cm:

a) Calcule o tempo que a partícula demora a arder completamente

b) Repita o cálculo anterior considerando que em vez de arder no ar a partícula arde numa atmosfera de oxigénio puro.

$D_{O2\text{-mistura}} = 1\text{x}10^{-4}$ m^2/s

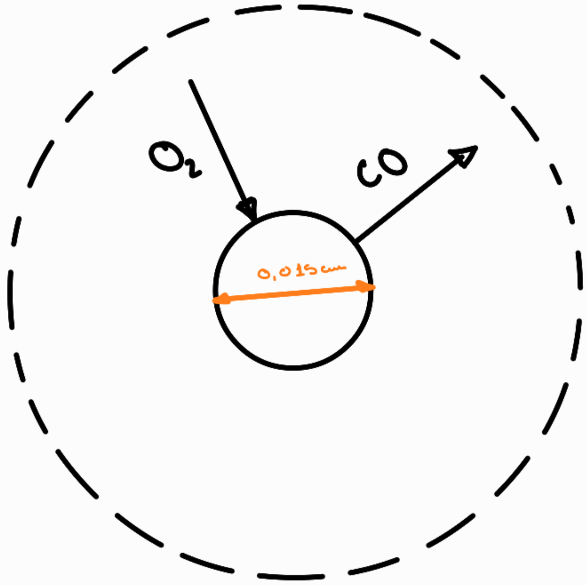
$T=1145K \quad \rho_c=1280\,\frac{Kg}{m^3}$

$P=1\,atm$

$$2C+O_2\longrightarrow 2CO$$

$$-N_{O_{2r}} = \frac{1}{2} N_{CO_r}$$

$$y_{O_2} = 0,21$$



$$N_{O_{2r}} \cdot r^2 = N_{O_2} \cdot r_1^2 = \text{ctte}$$

$$N_{O_{2r}} = y_{CO}\left(\cancelto{-2N_{O_{2r}}}{N_{CO_r}} + N_{O_{2r}}\right) - cD_{CO-O_2}\frac{dy_A}{dr}$$

$$\frac{N_{O_2} r_1^2}{r^2}\left(1 + y_{O_2}\right) = -cD_{O_2-mis}\frac{dy_A}{dr}$$

$$Q = N_{O_2} \cdot r_1^2 \, 4\pi \rightarrow N_{O_2} \cdot r_1^2 = \frac{Q}{4\pi}$$

$$\text{C.F.} \begin{cases} R_0 = R_1 \longrightarrow y_0 = 0 \\ R_f = \infty \longrightarrow y_f = 0,21 \end{cases}$$

$$\frac{Q}{4\pi}\int_{R_1}^{\infty}\frac{1}{r^2}\,dr = -c\,D_{O_2\text{-mist}}\int_{y_{A1}}^{y_{A2}}\frac{1}{1+y_A}\,dy_A$$

$$-\frac{Q}{4\pi}\left(\frac{1}{\infty}-\frac{1}{R_1}\right) = -\frac{P.D_{O_2\text{-mist}}}{R.T}\ln\left(1+y_{A_2}\right)$$

$$\frac{Q_{O_2}}{4\pi}\cdot\frac{1}{R_1} = -\frac{P\,D_{O_2\text{-mist}}}{R\,T}\ln\left(1+y_{A2}\right)$$

$$Q_{O_2} = 2Q_c$$

$$Q_c = -C_{AL}\frac{dV}{dt} = -C_{AL}\,(4)\pi R_1^2\,\frac{dR_1}{dt}$$

$$CF\begin{cases} t=0 \longrightarrow R_0 = R_1 & \dfrac{Q_{O_2}}{4\pi} = \quad C_{AL}R_1^2\,\dfrac{dr}{dt} \\ t=t \longrightarrow R_f = 0 \end{cases}$$

$$-C_{AL}\int_{R_1}^{0}R_1\,dR_1 = -\frac{2PD_{O_2}}{RT}\ln\left(1+y_{A2}\right)\int_0^t dt$$

$$-\frac{C_{AL}}{2}\left(-R_1^2\right) = \frac{-2PD_{O_2}\ln(1+y_{A2})\,t}{RT}$$

$$t = \frac{-C_{AL} \cdot R_1^2 (R)(T)}{4 \cdot P \cdot D_{O_2\text{-mist}} \cdot \ln\left(1 + y_{A2}\right)}$$

$Q_c = 2Q_{O_2}$

$$t_c = \frac{-\left(\frac{1280}{12\times10^{-3}}\right)\left(7.5\times10^{-5}\right)^2(8{,}314)(1145)}{(4)(1\times10^5)(1\times10^{-4})\ln(1+0{,}21)}$$

$t_c = 0{,}75 \text{ s}$

b) $t = 0{,}206 \text{ s}$

$$\frac{t_1}{t_2} = \frac{\ln(2)}{\ln(1.21)}$$

$$\frac{t_1}{t_2} = 0{,}275 \Rightarrow t_2 = \frac{0{,}75}{3{,}63} = 0.206 \text{ s}$$

Problema 1

Uma peça pré-aquecida de aço macio com uma concentração inicial (homogénea) de 0.2%p/p é exposta a uma atmosfera carbonizante com um teor em carbono constante.

a) Sabendo que ao fim de 0.5 h a concentração de carbono no aço a 0.01cm da superfície é de 0.55%p/p, determine a sua concentração na superfície.

b) Determine a concentração de carbono no aço à mesma distância uma hora depois do inicio do ensaio.

Coeficiente de difusão do carbono no aço = 1×10^{-11} m^2s^{-1}.

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

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[illegible]	0.99999

$C_{A_0} = 0{,}002$ p/p

a) $t = 0{,}5\,h \cdot \frac{3600\,s}{1\,h} = 1800\,s$

$z = 0{,}01$ cm

$C_{A_S} = ?$

$C_A = 0{,}0055$ p/p

$$erf\left(\frac{0.01 \times 10^{-2}}{\sqrt{4(1\times10^{-11})(1800)}}\right)$$

$$erf(\underbrace{0{,}37}_{a}) \approx 0{,}399 \sim 0{,}4$$

$$\frac{C_{As} - 0,0055}{C_{As} - 0,002} = 0,4$$

$$C_{As} - 0,0055 = 0,4\,C_{As} - 0,0008$$

$$C_{As}(1 - 0,4) = 0,0055 - 0,0008$$

$$C_{As} = 0,00783 = 0,783\ \%\ p/p$$

b) $C_{As} = 0,00783$ $\quad C_{Ao} = 0,002$

$t = 3600\ s$

$$\operatorname{erf}\left(\frac{0,01 \times 10^{-2}}{\sqrt{(4)(1 \times 10^{-11})3600}}\right)$$

$$= \operatorname{erf}(0,26) \simeq 0,29$$

$$\frac{0,0078 - C_A}{0,0078 - 0,002} = 0,29$$

$$C_A = 0,0078 - 0,0017$$

$= 0{,}0061 \Rightarrow 0{,}61\%\ P/P$

Problema 2

A água de um lago profundo tem CO_2 dissolvido com uma concentração uniforme 1 kg/m^3. Se a concentração do CO_2 na água à superfície for subitamente elevada para 9 kg/m^3 calcule:

a) Qual o fluxo de CO_2 para t=24 h?

b) Qual a percentagem desse fluxo que está para além de 1 cm de profundidade nesse tempo?

$D_{CO2\ \text{-água}} = 10^{-5}$cm^2/s.

$$J_A^{\ *} = -D\frac{\partial c_A}{\partial z} = \sqrt{D/\pi t}\, e^{-z^2/4Dt}(c_{As} - c_{A0})$$

$$C_{A_0} = 1\ \frac{Kg}{m^3} \qquad C_{As} = 9\ \frac{Kg}{m^3}$$

a) $t = 24 \times 3600 = 86400\ s$

$$J_A = \sqrt{\frac{10^{-5} \times 10^{-4}}{\pi \cdot 86400}}\ (1)(9-1)$$

$$= 4{,}86 \times 10^{-7}\ \frac{Kg}{m^2 \cdot s}$$

em 24 h dissolvem-se por m^2:

$$4.86 \times 10^{-7} \cdot (24)(3600) = 4.2 \times 10^{-2}\ Kg$$

$$= 42\ g$$

b) $$J_A = \sqrt{\frac{10^{-9}}{(\pi)(86400)}}\ e^{\frac{-(1 \times 10^{-2})^2}{4(10^{-9})86400}} \cdot (9-1)$$

$$= 3{,}64 \times 10^{-7}\ \frac{Kg}{m^2 \cdot s}$$

$$\%J = \frac{3{,}64 \times 10^{-7}}{4{,}86 \times 10^{-7}} \times 100 = 74.8\ \%$$

Problema 3

A permeabilidade do CO_2 numa membrana foi determinada a 50°C, sendo igual a 1.089 × 10 $^{-12}$ mol.m.m^{-2}.s^{-1}.Pa^{-1}. Sabendo que a ordenada na origem da representação da pressão com o tempo é igual a -2.04 × 10^{-2} Pa, determine o coeficiente de difusão do CO_2 na membrana.

Dados

Área = 7.07 × 10^{-4} m^2

R = 8.314 m^{3}Pamol^{-1}K^{-1}

p_0 = 50 000 Pa

V = 70 cm^3

l = 2 cm

$$p = \left[\frac{ARTp_0}{Vl}\right]\left(SD_{AB}t - \frac{Sl^2}{6}\right)$$

Área do filme

Permeabilidade

$$\underbrace{P}_{y} = \frac{ARTP_0}{V \cdot l} \cdot \left(\overbrace{S.D_{AB}}\ \underbrace{t}_{x} - \frac{Sl^2}{6}\right)$$

Volume

comprimento do filme

$$\frac{-S\,l\,ARTP_0}{6V} = -2{,}04 \times 10^{-2}$$

$$S = \frac{(2{,}04 \times 10^{-2})(6)(V)}{l\ A\ R\ T\ P_o}$$

$$S = \frac{(2{,}04 \times 10^{-2}\ \cancel{Pa})(6)(70 \times 10^{-6}\ \cancel{m^3})}{(2 \times 10^{-2}\ m)(7{,}07 \times 10^{-4}\ m^2)\left(8{,}314\ \frac{\cancel{m^3}\ \cancel{Pa}}{mol\ \cancel{K}}\right)(323\ \cancel{K})(5 \times 10^{4}\ Pa)}$$

$$S = 4{,}51 \times 10^{-9}\ \frac{mol}{m^3\ Pa}$$

$$SD_{AB} = 1{,}089 \times 10^{-12}$$

$$D_{AB} = \frac{1{,}089 \times 10^{-12}}{S}$$

$$D_{AB} = \frac{1{,}089 \times 10^{-12}\ \cancel{mol}\ m^{-1}\ s^{-1}\ \cancel{Pa^{-1}}}{4{,}51 \times 10^{-9}\ \cancel{mol}\ m^{-3}\ \cancel{Pa^{-1}}}$$

$$= 2{,}41 \times 10^{-4}\ \frac{m^2}{s}$$

Problema 4

A permeabilidade de O_2 numa membrana de PDMS foi determinada experimentalmente a 30°C. Sabendo que a representação de p em função do tempo, para tempos elevados é uma recta com declive igual a 40 $Pa.s^{-1}$, determine a permeabilidade de O_2 na membrana, assumindo:

Área = 6.28×10^{-4} m^2

R = 8.314 $m^3Pa.mol^{-1}K^{-1}$

$p_0 = 1 \times 10^5$ Pa

V = 50 cm^3

l= 2 cm

$$p = \left[\frac{ARTp_0}{Vl}\right]\left(SD_{AB}t - \frac{Sl^2}{6}\right)$$

$$\frac{ARTP_0SD_{AB}}{Vl} = 40\,\frac{Pa}{s}$$

$$SD_{AB} = ?$$

$$\Rightarrow SD_{AB} = \frac{(40\,\cancel{Pa}.s^{-1})(50\times10^{-6}\,\cancel{m^3})(2\times10^{-2}\,m)}{(6{,}28\times10^{-4}\,m^2)\left(8{,}314\,\frac{\cancel{m^3}\,Pa}{mol\,\cancel{K}}\right)(303\,\cancel{K})(1\times10^5\,\cancel{Pa})}$$

$$= 2{,}53\times10^{-10}\ mol\,m\,m^{-2}\,Pa^{-1}\,s^{-1}$$

II. Pretende-se transferir oxigénio para o meio aquoso de um reactor biológico, através da utilização de um "manto" de gás contendo oxigénio, o qual cobre toda a superfície do meio aquoso.

A concentração inicial de oxigénio no meio aquoso é de 1 kg/m³. Se a concentração do oxigénio no meio aquoso for subitamente elevada à superfície para 9 kg/m³, calcule quanto tempo deverá decorrer para que o fluxo de oxigénio a 1 cm de profundidade seja 40% do fluxo de oxigénio à superfície. $D_{O2\text{-água}} = 10^{-9}$ m²/s.

$$J_A^* = -D\frac{\partial c_A}{\partial z} = \sqrt{D/\pi t}\, e^{-z^2/4Dt}(c_{As} - c_{A0})$$

$$J_A^*\Big|_{z=0} = \sqrt{D/\pi t}\,(c_{As} - c_{A0})$$

$C_{A_0} = 1 \frac{Kg}{m}$ $\quad C_{AS} = 9 \frac{Kg}{m^3}$

$$0{,}4 = \frac{J_A\big|_{z=1cm}}{J_A\big|_{z=0\,cm}}$$

$$J_A\big|_{z=1cm} = 0{,}4\, J_A\big|_{z=0\,cm}$$

$$J_A\big|_{z=1cm} = \cancel{\sqrt{D\pi t}}\; e^{-\frac{(1\times10^{-2})^2}{4Dt}}\, \cancel{(C_{AS} - C_0)}$$

$$J_A\big|_{z=0} = \cancel{\sqrt{D\pi t}}\; \cancel{(C_{AS} - C_0)}$$

$$0{,}4 = e^{-\frac{(1\times10^{-2})^2}{4Dt}}$$

$$0{,}916 = \frac{(1 \times 10^{-2})^2}{4\,D\,t}$$

$$t = \frac{(1 \times 10^{-2})^2}{4(10^{-9})(0{,}916)} = 27{,}3 \times 10^4\ s$$

$$= 7{,}58\ h$$