

### LISTA UNIDADE 3 - Difusão em gases, líquidos e sólidos

1. Assinale as seguintes afirmações como verdadeira (V) ou falsa (F).
  - a. ☐ O coeficiente de difusão é a capacidade de uma espécie química de se movimentar em um determinado meio e depende da interação soluto-meio.
  - b. ☐ O coeficiente de difusão é obtido pela segunda lei de Fick.
  - c. ☐ Os valores do coeficiente de difusão seguem a seguinte ordem de grandeza:  $D_{\text{gases}} > D_{\text{líquidos}} < D_{\text{sólidos}}$ .
  - d. ☐ O coeficiente de difusão depende de temperatura, pressão e concentração.
  - e. ☐ O coeficiente de difusão em líquido pode ser estimado por correlações que consideram os parâmetros de Lennard-Jones.
2. Sobre a difusividade em LÍQUIDOS, marque a opção correta:
  - a.  $D_{AB} = D_{BA}$
  - b. A temperatura não influencia significativamente no coeficiente de difusão e pode, portanto, ser desprezada nos cálculos deste.
  - c. A teoria hidrodinâmica, também conhecida como teoria do salto energético, considera um líquido ideal formado por uma rede de moléculas.
  - d. Ao escolher uma correlação para calcular o coeficiente de difusão em líquidos, é necessário saber se o soluto se difunde na forma de íons (eletrólito) ou na forma de moléculas (não-eletrólito) no meio líquido.
3. Sobre a difusividade em SÓLIDOS porosos, marque a opção incorreta:
  - a. Determina-se o coeficiente efetivo de difusão  $\rightarrow D_{ef}$
  - b. Depende do caminho livre médio, da porosidade do sólido e do diâmetro dos poros.
  - c. O adensamento molecular de um meio sólido oferece maior resistência à difusão do que os meios gasoso e líquido, portanto, o coeficiente difusivo efetivo terá magnitude menor que nos outros meios.
  - d. O número de Knudsen ( $K_n$ ) é calculado por:  $K_n = \frac{\lambda_A}{d_p}$
  - e. Um valor de  $K_n$  muito maior que 1 indica difusão simples.
4. Calcule o coeficiente de difusão do  $\text{CO}_2$  no ar a 20 °C e 1 atm. Compare este valor com o valor experimental tabelado. Considere a massa molar do ar como sendo 29 g/mol. (WELTY et al., 5ed. 2015)
5. Estime o valor do coeficiente de difusão do vapor de água em ar seco a 25 °C e 1 atm. Compare o resultado com o valor experimental, que é 0,26 cm<sup>2</sup>/s. Considere o valor da massa molar do ar seco igual a 28,85 g/mol. (CREMASCO, 3ed. 2015)
6. Calcular o diâmetro de colisão do etano ( $\text{C}_2\text{H}_6$ ) e do tolueno ( $\text{C}_7\text{H}_8$ ) utilizando: as condições à  $T_b$ , condições à  $T_c$  e o fator acêntrico. (Adaptado do CREMASCO, 3ed. 2015)
7. Estime o valor do coeficiente de difusão do vapor de água em ar seco a 40 °C e 1 atm. Compare o resultado com o valor experimental, que é 0,288 cm<sup>2</sup>/s. (CREMASCO, 3ed. 2015)

8. Estime o valor do coeficiente de difusão do vapor de água a 25 °C e 1 atm em ar seco e estagnado, considerando-o uma mistura binária contendo 79 % (em mols) de nitrogênio e 21 % (em mols) de oxigênio. Compare o resultado obtido com o valor experimental que é 0,26 cm<sup>2</sup>/s. (CREMASCO, 3ed. 2015)

9. Estime o coeficiente de difusão do CCl<sub>4</sub> em hexano a 25 °C utilizando-se a correlação de Wilke e Chang. Compare o resultado com o valor experimental  $D_{AB} = 3,70 \times 10^{-5}$  cm<sup>2</sup>/s. (Adaptado do CREMASCO, 3ed. 2015)

10. Calcule o coeficiente de difusão do líquido, etanol (C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH) em água, a 10 °C. A 10 °C a viscosidade da solução que contem 0,05 mol de álcool por cada litro de água é de 1,45 centipoise. Compare com o valor experimental tabelado. (WELTY et al., 5ed. 2015)

11. Utilizando-se os valores dos coeficientes de difusão em diluição infinita tabelados, estime o  $D_{AB}$  para o sistema CCl<sub>4</sub> / hexano a 25 °C, no qual a fração molar do hexano é 0,43. A essa temperatura as viscosidades da solução, do CCl<sub>4</sub> e do hexano são, 0,515 cP; 0,86 cP e 0,30 cP, respectivamente. O gradiente de atividade para esse sistema, em que A é o hexano e B o CCl<sub>4</sub>:

$$1 + \frac{d \ln \gamma_A}{d \ln x_A} = 1 - 0,354 x_A x_B$$

Compare o resultado obtido com o valor experimental  $2,36 \times 10^{-5}$  cm<sup>2</sup>/s e utilize as correlações de Wilke e de Leffler e Cullinan, para estimar o  $D_{AB}^*$ . (CREMASCO, 3ed. 2015)

12. Estime o valor do coeficiente de difusão em diluição infinita a 25 °C dos seguintes sais em água: NaCl, MgSO<sub>4</sub>, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, MgCl<sub>2</sub>. Compare os resultados obtidos com os valores experimentais tabelados. (CREMASCO, 3ed. 2015)

13. Determine o valor do coeficiente efetivo de difusão do CO<sub>2</sub> em uma partícula catalítica esférica de alumina a 30 °C e 1 atm. (Adaptado de CREMASCO, 3ed. 2015)

Para os próximos exercícios, usar  $\lambda = 3,106 \cdot 10^{-24} \frac{T}{\sigma_A^2 P}$  e as demais variáveis em unidades do S.I.

14. Gás natural “azedo” é aquele bastante contaminado com sulfeto de hidrogênio. Os vapores de H<sub>2</sub>S são comumente removidos pela passagem do gás em leito fixo, que contém partículas adsorventes. No presente processo, o gás com 99 % (molar) de metano e 1,0 % (molar) de H<sub>2</sub>S será tratado com material adsorvente poroso, que tem fração de vazios de 0,5, diâmetro médio de poro de 20 nm e tortuosidade 4,0, na temperatura de 30 °C e 15,0 atm de pressão total do sistema. Para projetar o leito do adsorvente, é necessário estimar o coeficiente de difusão do H<sub>2</sub>S no interior do adsorvente poroso. Os parâmetros de Lennard-Jones para o H<sub>2</sub>S são  $\sigma = 3,623$  Å e  $\epsilon/k = 301,1$  K.

- Qual é a concentração molar de H<sub>2</sub>S na mistura?
- Estime o coeficiente de difusão do metano em H<sub>2</sub>S nas condições do problema.
- Estime o coeficiente de difusão efetivo do H<sub>2</sub>S no interior do material poroso, supondo que metano e sulfeto de hidrogênio ocupam o espaço vazio no interior do material poroso.

(Adaptado de WELTY et al., 6ed, 2017)

15. A reforma a vapor de hidrocarbonetos é uma maneira de produzir hidrogênio gasoso ( $H_2$ ) para aplicação em células combustíveis. Entretanto, o gás rico em  $H_2$  produzido por esse processo se apresenta contaminado com monóxido de carbono (CO), em um teor molar porcentual de 1,0 %. Esse contaminante provoca envenenamento do catalisador da célula combustível e deve ser removido para permitir melhor operação da célula. Deseja-se separar CO do  $H_2$  gasoso empregando uma membrana cerâmica microporosa catalítica. O diâmetro médio do poro da membrana é de 15 nm, a tortuosidade tem o valor de 4,0 e a fração de vazios do sistema é 0,30. O sistema opera a 5,0 atm de pressão e 400 °C de temperatura.

- Estime a concentração molar de CO na mistura.
- Estime o coeficiente de difusão molecular do CO em  $H_2$  para a mistura gasosa a 5,0 atm e 400 °C.
- Estime o coeficiente de difusão efetivo do CO no interior do material poroso.

(Adaptado de WELTY et al., 6ed, 2017)

### Respostas

- V, F, F, V, F
- d.
- e.
- 0,147 cm<sup>2</sup>/s.
- 0,232 cm<sup>2</sup>/s.
- etano (4,449 Å ; 4,443 Å ; 4,342 Å) e tolueno (5,799 Å ; 5,721 Å ; 5,698 Å).
- 0,287 cm<sup>2</sup>/s.
- 0,23 cm<sup>2</sup>/s.
- 4,26x10<sup>-5</sup> cm<sup>2</sup>/s.
- 7,7x10<sup>-6</sup> cm<sup>2</sup>/s.
- 2,14x10<sup>-5</sup> cm<sup>2</sup>/s (Wilke); 2,14x10<sup>-5</sup> cm<sup>2</sup>/s (Leffler e Cullinan).
- 1,61x10<sup>-5</sup> cm<sup>2</sup>/s; 0,85x10<sup>-5</sup> cm<sup>2</sup>/s; 1,23x10<sup>-5</sup> cm<sup>2</sup>/s; 1,25x10<sup>-5</sup> cm<sup>2</sup>/s.
- 2,03x10<sup>-2</sup> cm<sup>2</sup>/s.
- a) 6,03x10<sup>-3</sup> mol/L ; b) 1,193x10<sup>-2</sup> cm<sup>2</sup>/s ; c) 8,727x10<sup>-4</sup> cm<sup>2</sup>/s.
- a) 9,052 mol/L ; b) 0,612 cm<sup>2</sup>/s ; c) 2,01x10<sup>-2</sup> cm<sup>2</sup>/s.