

LISTA UNIDADE 3 - Difusão em gases, líquidos e sólidos

1. Calcule o coeficiente de difusão do CO₂ 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)

Resposta: 0,147 cm²/s

2. 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 cm²/s. Considere o valor da massa molar do ar seco igual a 28,85 g/mol. (CREMASCO, 3ed. 2015)

Resposta: 0,232 cm²/s

3. Calcular o diâmetro de colisão do etano (C₂H₆) e do tolueno (C₇H₈) utilizando: as condições à T_b, condições a T_c e o fator acêntrico. (Adaptado do CREMASCO, 3ed. 2015)

Respostas: etano (4,449 Å, 4,443 Å e 4,342 Å) e tolueno (5,799 Å, 5,721 Å, 5,698 Å)

4. 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 cm²/s. (CREMASCO, 3ed. 2015)

Resposta: 0,287 cm²/s

5. 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 cm²/s. (CREMASCO, 3ed. 2015)

Resposta: 0,23 cm²/s

6. Estime o coeficiente de difusão do CCl₄ em hexano a 25 °C utilizando-se a correlação de Wilke e Chang. Compare o resultado com o valor experimental D_{AB} = 3,70 x 10⁻⁵ cm²/s. (Adaptado do CREMASCO, 3ed. 2015)

Resposta: 4,26x10⁻⁵ cm²/s

7. Utilizando-se os valores dos coeficientes de difusão em diluição infinita tabelados, estime o D_{AB} para o sistema CCl₄ / hexano a 25 °C, no qual a fração molar do hexano é 0,43. A essa temperatura as viscosidades da solução, do CCl₄ 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 CCl₄:

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

Compare o resultado obtido com o valor experimental 2,36 x 10⁻⁵ cm²/s e utilize as correlações de Wilke e de Leffler e Cullinan, para estimar o D_{AB}^{*}. (CREMASCO, 3ed. 2015)

Resposta: 2,14x10⁻⁵ cm²/s (Wilke); 2,14x10⁻⁵ cm²/s (Leffler e Cullinan);

8. Estime o valor do coeficiente de difusão em diluição infinita a 25 °C dos seguintes sais em água: NaCl, MgSO₄, Na₂SO₄, MgCl₂. Compare os resultados obtidos com os valores experimentais tabelados. (CREMASCO, 3ed. 2015)

Resposta: $1,61 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$; $0,85 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$; $1,23 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$; $1,25 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$.

9. Determine o valor do coeficiente efetivo de difusão do CO₂ em uma partícula catalítica esférica de alumina a 30 °C e 1 atm. (Adaptado de CREMASCO, 3ed. 2015)

Resposta: $2,03 \times 10^{-2} \text{ cm}^2/\text{s}$

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

10. Gás natural “azedo” é aquele bastante contaminado com sulfeto de hidrogênio. Os vapores de H₂S 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 H₂S 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 H₂S no interior do adsorvente poroso. Os parâmetros de Lennard-Jones para o H₂S são $\sigma = 3,623 \text{ Å}$ e $\epsilon/k = 301,1 \text{ K}$.

a) Qual é a concentração molar de H₂S na mistura? Resposta: $6,03 \cdot 10^{-3} \text{ mol/L}$

b) Estime o coeficiente de difusão do metano em H₂S nas condições do problema.

Resposta: $1,193 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^2/\text{s}$

c) Estime o coeficiente de difusão efetivo do H₂S no interior do material poroso, supondo que metano e sulfeto de hidrogênio ocupam o espaço vazio no interior do material poroso.

Resposta: $8,727 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$

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

11. A reforma a vapor de hidrocarbonetos é uma maneira de produzir hidrogênio gasoso (H₂) para aplicação em células combustíveis. Entretanto, o gás rico em H₂ 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 H₂ 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.

a) Estime a concentração molar de CO na mistura. Resposta: $9,052 \text{ mol/L}$

b) Estime o coeficiente de difusão molecular do CO em H₂ para a mistura gasosa a 5,0 atm e 400 °C. Resposta: $0,612 \text{ cm}^2/\text{s}$

c) Estime o coeficiente de difusão efetivo do CO no interior do material poroso.

Resposta: $2,01 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^2/\text{s}$

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