

OBTENÇÃO DO COEFICIENTE DE DIFUSÃO DE METANOL EM AR ATMOSFÉRICO

Categoria: Educação Superior

Modalidade: Matemática Aplicada e/ou Interrelação com outras Disciplinas

GONZALEZ, Juliana; PINHEIRO, Thasiane Darui; PEREIRA, Fernanda da Cunha.

Instituição participantes: Universidade Regional do Noroeste do Estado do Rio Grande do Sul – Íjuí/RS.

INTRODUÇÃO

O fenômeno de transferência de massa é descrito como “movimento da espécie química a partir da região de concentração mais elevada em direção à região de menor concentração.” (ÇENGEL E GHAJAR, 2012, p.796). A força motriz, para sua ocorrência é segundo Incropera (2008, p.560) a existência de um gradiente de concentração da espécie analisada, em um determinado meio.

O gradiente de concentração representa a variação de concentração de uma substância ao longo de uma direção no meio onde essa está contida. O movimento de uma região de alta concentração para outra de baixa concentração, até o equilíbrio, também é explicado por Cremasco (2002, p.25) através da segunda lei da termodinâmica, a qual afirma, em um sentido geral, que diferenças entre sistemas em contato tendem a se igualar.

Através da primeira lei de Fick apresentada por Cremasco (2002, p.26) o movimento da matéria é proporcional ao gradiente de concentração, assim, quanto maior for a diferença de concentração maior será o movimento. Para desenvolver uma relação de igualdade, é preciso levar em consideração a resistência oferecida pelo meio ao transporte. Para a metodologia desenvolvida nesse trabalho, a resistência está relacionada apenas à interação da substância com o meio, ocorrendo transferência por meio do movimento das moléculas, fenômeno esse que também pode ser denominado como difusão mássica.

O termo utilizado para relacionar a resistência à difusão, é o coeficiente de difusão de uma determinada substância no meio, o qual depende segundo Welty (2007, p.408) da pressão, temperatura e composição do sistema. Para alguns sistemas os coeficientes de difusão obtido

experimentalmente é tabelado, mas devido a dificuldade experimental, foram desenvolvidas equações semi teóricas, para situações específicas de difusão. Neste trabalho a equação utilizada é especial para sistemas pseudo-estacionário.

Com o coeficiente de difusão é possível avaliar o fluxo de difusão mássica de um determinado componente, o que permite, por exemplo, avaliar a volatilização de uma substância tóxica liberada acidentalmente no meio ambiente assim como a taxa de evaporação de água em uma lagoa de abastecimento urbano, entre varias outras situações.

O presente trabalho desenvolvido em grupo na matéria de fenômenos de transporte 3, no primeiro semestre do ano de 2018, tem como objetivo obter o coeficiente de difusão do metanol no ar atmosférico, através: do método experimental, através de equações já desenvolvidos por outros autores e também fazendo uso das tabelas de valores experimentais, para for fim compará-los.

CAMINHOS METODOLÓGICOS

Para encontrar experimentalmente o coeficiente de difusão, seguimos a ideia proposta por Cremasco (2002, p. 220) em que utilizamos um tubo de ensaio semi preenchido com o líquido de análise permitindo a formação de uma película de ar estagnada onde irá ocorrer a difusão. Para obter os dados necessários para o desenvolvimento dos cálculos, fixamos os tubos verticalmente em uma parede e medimos a altura da coluna de líquido e a temperatura duas vezes por dia durante cinco dias.

Nesse caso a difusão da substância ocorre na fase gasosa e o nível de líquido é uma das fronteiras. De acordo com Welty (2007, p.458) quando o nível de líquido muda muito pouco durante um longo período de tempo, pode-se usar o modelo de difusão pseudo-estacionario, o qual é obtido igualando a Equação 1 para o fluxo em regime permanente e a Equação 2 para o fluxo a partir da substância deixando o líquido.

Equação 1: Fluxo em regime permanente

$$N_{A,Z} = \left(\frac{CD_{AB}}{Z} \right) (y_{A1} - y_{A2})$$

Equação 2: Fluxo a partir da substância difundindo

$$N_{A,Z} = \left(\frac{\rho_{AL}}{M_A} \right) \left(\frac{dz}{dt} \right)$$

A partir dessas, a Equação 3 é desenvolvida, a qual relaciona a variação da altura da coluna de líquido com o tempo, assim podemos a partir dela plotar um gráfico da variação da

altura em função de tempo, afim de encontrar o coeficiente de inclinação da reta, para então obter o coeficiente de difusão. As variáveis utilizadas para o cálculo são: D_{AB} o coeficiente de difusão, M_A a massa molar da substância em análise, P a pressão atmosférica, y a fração da substância, ρ a massa específica, R a constante dos gases, T a temperatura dos gases, já o valor de y_{Bm} pode ser obtido pela Equação 4 em que y_B é a fração de do ar atmosférico na película. Para o desenvolvimento dos cálculos foi definido com o subscrito (a) todas as propriedades relacionadas com o metanol e (b) todas as propriedades relacionadas com o ar.

Equação 3: Modelo pseudo-estacionário

$$z_t^2 - z_0^2 = \frac{2D_{AB}M_A P (y_{A1} - y_{A2})}{\rho_{AL} y_{Bm} R T} t$$

Equação 4: Concentração média

$$y_{B, \text{médio}} = \frac{(y_{B2} - y_{B1})}{\ln(y_{B2}/y_{B1})}$$

Para encontrar o coeficiente de difusão teórico utilizamos a Equação 5 obtida por Hirschfelder e outros em 1949 e descrita por Welty (2007, p.409), a qual pode ser utilizada para gases polares, que não reagiram.

Equação 5: Equação de Hirschfelder

$$D_{AB} = 1,858 \cdot 10^{-3} \frac{T^{3/2}}{P \sigma_{AB} \Omega_D} \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{1/2}$$

Para o desenvolvimento dessa fórmula o autor fez correlações com temperatura, pressão, massa molar das substâncias do sistema, a relação dos diâmetros de colisão (σ_{AB}) e a integral de colisão (Ω_D).

De acordo com Welty(2007), o diâmetro de colisão representa uma distância limite de aproximação entre as moléculas, passando então a se repelirem, podendo ser também representado pela posição onde a energia de repulsão e atração é nula. Esse fator é calculado para componentes polares, através da Equação 6 e para componentes apolares pela Equação 7, onde: V_b é o volume molecular no ponto de ebulição normal e o termo δ que relaciona a polaridade, o qual pode ser utilizando a Equação 8 com a temperatura normal de ebulição (T_b) e o momento de dipolo (μ_p). Os diâmetros obtidos de cada substância, são relacionados conforme mostra a Equação 9.

Equação 6: Diâmetro de colisão polar

$$\sigma_i = \left(\frac{1,58 V_{bi}}{1 + 1,3 \delta_i^2} \right)^{1/3}$$

Equação 7: Diâmetro de colisão apolar

$$\sigma_i = 1,18 V_b^{1/3}$$

Equação 8: Polaridade

$$\delta_i = \frac{1,94 \cdot 10^3 \mu_{pi}^2}{V_{bi} T_{bi}}$$

Equação 9: Relação dos diâmetros

$$\sigma_{AB} = \sqrt{\sigma_A \sigma_B}$$

A integral de colisão está associada à energia máxima de atração e representa a dependência do diâmetro de colisão com a temperatura. Para encontra-la é utilizada a Equação 10, a qual depende da temperatura reduzida T^* encontrada na Equação 11, que relaciona a temperatura em que se deseja obter o coeficiente de difusão com a constante de Boltzmann (k) e a máxima energia de atração entre as duas moléculas (ϵ_{AB}). A relação da máxima energia de atração com a constante de Boltzmann é obtida na Equação 12, onde: δ relaciona a polaridade e T_b a temperatura normal de ebulição.

Equação 10: Integral de colisão

$$\Omega_D = \frac{1,06036}{T^{*0,15610}} + \frac{0,1930}{e^{0,47635T^*}} + \frac{1,03587}{e^{1,52996T^*}} + \frac{1,76474}{e^{3,89411T^*}}$$

Equação 11: Temperatura reduzida

$$T^* = \sqrt{\left(\frac{\epsilon_A}{k} \frac{\epsilon_B}{k}\right)} \cdot T$$

Equação 12: Relação com energia máxima

$$\frac{\epsilon_i}{k} = 1,18(1 + 1,3\delta_i^2)T_{Bi}$$

Outra fonte de obtenção do coeficiente de difusão é através de tabelas que apresentam o coeficiente encontrado experimentalmente. Para relacionar os coeficientes encontrados, podemos utilizar a correlação feita a partir da Equação 13.

Equação 13: Desvio

$$Desvio(\%) = \frac{D_{ABteórico} D_{ABexp}}{D_{ABteórico}} \times 100$$

RESULTADOS E DISCUSSÃO

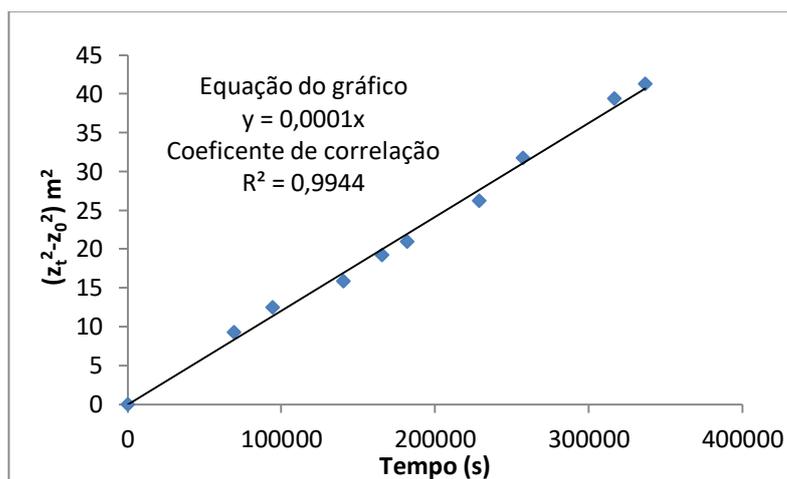
Para encontrar o coeficiente de difusão experimental, colhemos dados da altura da coluna de líquido e temperatura ambiente em diferentes tempos, apresentados na Tabela 1, a fim de obter uma relação desses através de regressão de dados e obter o coeficiente angular da reta produzida conforme ilustrado na Figura 1.

Tabela 1: Dados obtidos no experimento desenvolvido na matéria de Fenômenos de Transporte 3, ofertada no primeiro semestre de 2018 para o Curso de Engenharia Química, na UNIJUÍ.

Temperatura (°c)	Tempo (s)	Metanol ($z_t^2 - z_0^2$) m ²
25,4	0	0
24,7	69060	9,24
26,3	94440	12,48
24,5	140460	15,8
25,9	165660	19,2
26,7	181860	20,93
24,6	228660	26,24
26,8	257460	31,73
25	316860	39,33
26,3	336660	41,28

Fonte: Autor

Figura 1: Plotagem dos dados obtidos experimentalmente na matéria de Fenômenos de Transporte 3, ofertada no primeiro semestre de 2018 para o Curso de Engenharia Química, na UNIJUÍ.



Fonte: Autor

De acordo com a Equação 3 podemos concluir que o coeficiente angular da linha de tendência obtida através dos pontos de altura da coluna em função do tempo é o valor que corresponde a todo o termo que multiplica pelo tempo, conforme a equação abaixo.

Equação 14: Coeficiente angular

$$\text{Coeficiente} = \frac{2D_{AB}M_A P(y_{A1} - y_{A2})}{\rho_{AL} y_{Bm} RT}$$

Para desenvolver as equações relacionadas ao coeficiente de difusão utilizamos os dados informados por Cremasco (2002) e organizados na Tabela 2, o valor obtido para o coeficiente de difusão foi de 0,142 cm²/s.

Tabela 2: Propriedades de metanol e ar, organizados na matéria de Fenômenos de Transporte 3, ofertada no primeiro semestre de 2018 para o Curso de Engenharia Química, na UNIJUÍ.

Propriedades	Metanol	Ar
$T_{m\acute{e}dia}$	298,77 K	298,77 K
P	1 atm	1 atm
M_i	34 g/gmol	29 g/gmol
V_b	42,5 cm ³ /gmol	29,9 cm ³ /gmol
μ_p	1,7 Debyes	0 Debyes
T_b	337,8 K	84 k

Fonte: Cremasco (2002)

Para obter o coeficiente experimental utilizamos o coeficiente angular da figura 1 e assim como para o cálculo anterior, também fizemos uso de dados, utilizamos algumas propriedades do experimento, assim como a massa específica, massa molar e a constante dos gases também informado por Cremasco (2002) e apresentadas na Tabela 3. O valor encontrado foi de 0,161 cm²/s.

Tabela 3: Dados necessários para o desenvolvimento dos cálculos do experimento da matéria de Fenômenos de Transporte 3, ofertada no primeiro semestre de 2018 para o Curso de Engenharia Química, na UNIJUÍ.

Propriedades	Metanol
$T_{m\acute{e}dia}$	298,77 K
P	1 atm
M_i	34 g/gmol
ρ_i	0,71 g/cm ³
R	82,07 atm.cm ³ /gmol.K
y_{a1}	0,1715
y_{a2}	0
y_{b1}	0,8285
y_{b2}	1

Fonte: Cremasco (2002) e Autor

A fim de obter o coeficiente informado na literatura, utilizamos a Tabela J-1 do apêndice J apresentada por Welty (2007, p.691) onde, o coeficiente de difusão também obtido experimentalmente foi de, 0,162 cm²/s.

O coeficiente de difusividade, encontrado por Martínez (2018) de 0,16 cm²/s está muito próximo do encontrado experimentalmente e do valor indicado por Welty (2007). Através dos

resultados encontrados neste trabalho, chegamos a um desvio de 0,6%, o que indica uma diferença pouco significativa entre o valor encontrado e o informado por Martínez.

CONCLUSÕES

A partir deste trabalho foi possível aplicar alguns conhecimentos vistos em sala de aula, como: transferência de massa e a determinação da difusividade mássica de líquidos em gases. O método utilizado para a determinação dos valores experimentais para o D_{AB} , se mostrou um método de simples montagem, e com certa eficiência, pois na determinação do coeficiente de difusividade do metanol, o resultado experimental encontrado foi de $0,161 \text{ cm}^2/\text{s}$ e o teórico obtido por meio de equações foi de $0,142 \text{ cm}^2/\text{s}$, isso significa que obteve-se um desvio do valor teórico de 13,38%. Já quando se compara o valor experimental com o valor teórico encontrado em tabelas, esse valor foi de $0,162 \text{ cm}^2/\text{s}$, o que leva a ter um desvio do valor da literatura de 0,6%.

REFERÊNCIAS

BIRD, Robert. B; STEWART, Warren. E; LIGHTFOOT, Edwin. N. **Fenômenos De transporte**. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2014. 838 p. ISBN 978-85-216-1393-0.

ÇENGEL, Yunus. A; GUAJAR, Afshin, J. **Transferência de calor e massa: uma abordagem prática**. 4. ed. Porte Alegre: AMGH, 2012. 902 p. ISBN 978-85-8055-127-3.

CREMASCO, Marco Aurélio. **Fundamentos de transferência de massa**. 2. ed. Campinas: Editora da Unicamp, 2002. 725 p. ISBN 85-268-0595-9.

INCROPERA, Frank. P. et al. **Fundamentos de transferência de calor e de massa**. 6. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2008, 643 p. ISBN 978-85-216-1584-2.

MARTÍNEZ, Isidoro. **Mass diffusivity data**. Disponível em: <http://webserver.dmt.upm.es/~isidoro/dat1/Mass%20diffusivity%20data.pdf>. Acesso em: 24/05/2018

WELTY, James R. et al. **Fundamentals of Momentum, Heat, and Mass Transfer**. 5. ed. Danvers, MA: John Wiley & Sons, Inc, 2007, . ISBN-13 978-0470128688.

Dados para contato:

Expositor: Juliana Gonzalez; **e-mail:** juliana.g0809@gmail.com;

Expositor: Thasiane Dauri Pinheiro;

Professor Orientador: Fernanda Cunha Pereira; **e-mail:**; Fernanda.cunha@unijui.edu.br