

# **COEFICIENTE DIFUSIVO EM FASE LÍQUIDA:**

**1- SOLUTO NÃO ELETROLÍTICO EM SOLUÇÕES LÍQUIDAS DILUÍDAS;**

**2- SOLUTO NÃO ELETROLÍTICO EM SOLUÇÕES LÍQUIDAS CONCENTRADAS;**

**3- SOLUTO ELETROLÍTICO EM SOLUÇÕES LÍQUIDAS DILUÍDAS;**

**4- DIFUSÃO DE ELETRÓLITOS EM SOLUÇÕES LÍQUIDAS CONCENTRADAS.**

# 1- SOLUTO NÃO ELETROLÍTICO EM SOLUÇÕES LÍQUIDAS DILUÍDAS:

## EQUAÇÃO DE Wilke e Chang (1955):

$$\frac{D_{AB}^0 \cdot \mu_B}{T} = 7,4 \cdot 10^{-8} \cdot \frac{(\phi \cdot M_B)^{0,5}}{V_{bA}^{0,6}}$$

$D_{AB}$  → DIFUSIVIDADE. DO SOLUTO(A) NO SOLVENTE ( $cm^2/s$ );

$T$  → TEMPERATURA DO MEIO (K);

$V_{bA}$  → VOLUME MOLAR DO SOLUTO ( $cm^3/gmol$ );

$M_B$  → MASSA MOLECULAR DO SOLVENTE ( $g/gmol$ );

$\phi$  → PARÂMETRO DE ASSOCIAÇÃO DO SOLVENTE

PARA O RESTANTE DOS SOLVENTES:  $\phi = 1,0$

$\mu_B$  → VISCOSIDADE DO SOLVENTE (cP).

$$\phi_{\text{ÁGUA}} = 2,6$$

$$\phi_{\text{ETANOL}} = 1,5$$

$$\phi_{\text{METANOL}} = 1,9$$

<sup>a</sup>Tabela 1.2b:  
Propriedades de gases e de líquidos orgânicos.

Espécies	Fórmula molecular	Massa molecular (g/gmol)	T <sub>b</sub> (K)	V <sub>b</sub> <sup>b</sup> (cm <sup>3</sup> /gmol)	T <sub>c</sub> (K)	P <sub>c</sub> (atm)	V <sub>c</sub> (cm <sup>3</sup> /gmol)	w	μ <sub>p</sub> (debyes)	R <sub>1</sub> (Å)
ácido acético	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	60,052	391,1	64,1 <sup>1</sup>	594,4	57,1	171,0	0,454	1,3	2,5950
acetona	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O	58,080	329,4	77,5 <sup>1</sup>	508,1	46,4	209,0	0,309	2,9	2,7404
benzeno	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	78,114	353,3	96,5 <sup>1</sup>	562,1	48,3	259,0	0,212	0,0	3,0037
clorofórmio	CHCl <sub>3</sub>	119,378	334,3	96,5 <sup>3</sup>	536,4	54,0	239,0	0,216	1,1	3,1779
ciclohexano	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>	84,162	353,9	117,0 <sup>1</sup>	553,4	40,2	308,0	0,213	0,3	3,2605
etano	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	30,07	184,5	53,6 <sup>3</sup>	305,4	48,2	148,0	0,098	0,0	1,8314
etanol	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O	46,069	351,5	60,8 <sup>3</sup>	516,2	63,0	167,0	0,635	1,7	2,2495
glicerol	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>	92,095	563,0	94,8 <sup>3</sup>	726,0	66,0	255,0	–	3,0	–
n-hexano	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	86,178	341,9	140,06 <sup>3</sup>	507,4	29,3	370,0	0,296	0,0	3,8120
metano	CH <sub>4</sub>	16,043	111,7	37,7 <sup>1</sup>	190,6	45,4	99,0	0,008	0,0	1,1234
metanol	CH <sub>4</sub> O	32,042	337,8	42,5 <sup>1</sup>	512,6	79,9	118,0	0,559	1,7	1,5360
naftaleno	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub>	128,174	491,1	156,0 <sup>3</sup>	748,4	40,0	410,0	0,302	0,0	–
n-pentano	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	72,151	309,2	114,0 <sup>3</sup>	469,6	33,3	304,0	0,251	0,0	3,3858
tetracloro de carbono	CCl <sub>4</sub>	153,823	349,7	102,0 <sup>1</sup>	556,4	45,0	276,0	0,194	0,0	3,4581
tolueno	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	92,141	383,8	118,7 <sup>3</sup>	591,7	40,6	316,0	0,257	0,4	3,4432

<sup>a</sup> Fonte: Reid, R. C., Prausnitz, J. M. and Sherwood, T. K. *The Properties of Gases & Liquids*, 3. ed., New York, McGraw-Hill, 1977.

<sup>b</sup> Utilizou-se das seguintes fontes: <sup>1</sup> Reid, Prausnitz and Sherwood (1977); <sup>2</sup> Welty, J. R., Wilson, K. E. and Wicks, E., *Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer*, 2. ed., New York, John Wiley, 1976;

<sup>3</sup> Equação de Tyn e Callus,

**EXEMPLO:** ESTIME O COEFICIENTE DE DIFUSÃO DO  $\text{CCl}_4$  EM HEXANO A  $25^\circ\text{C}$  UTILIZANDO-SE A CORRELAÇÃO DE Wilke e Chang. COMPARE O RESULTADO COM O VALOR EXPERIMENTAL  $D_{AB} = 3,70 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$ .  
 DADOS: (A=  $\text{CCl}_4$  ; B=HEXANO);  $\mu_B = 0,3 \text{ Cp}$ .

(TABELA 1.2b DO CREMASCO)

ESPÉCIE	$M_i$ (g/gmol)	$V_{bi}$ ( $\text{cm}^3/\text{gmol}$ )
A= $\text{CCl}_4$	153,823	102
B=hexano	86,178	140,062

$$T = 298\text{K}$$

$$\phi = 1,0$$

$$\mu_B = 0,3\text{cP}$$

$$\frac{D_{AB}^0 \cdot \mu_B}{T} = 7,4 \cdot 10^{-8} \cdot \frac{(\phi \cdot M_B)^{0,5}}{V_{bA}^{0,6}} \Rightarrow \frac{D_{AB}^0 \cdot 0,3}{298} = 7,4 \cdot 10^{-8} \cdot \frac{(1,0 \cdot 86,178)^{0,5}}{102^{0,6}}$$

$$\therefore D_{AB}^0 = 4,25 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$DR = \left| \frac{4,25 \cdot 10^{-5} - 3,70 \cdot 10^{-5}}{3,70 \cdot 10^{-5}} \right| \cdot 100\% = 14,86\%$$

## 2- SOLUTO NÃO ELETROLÍTICO EM SOLUÇÕES LÍQUIDAS CONCENTRADAS:

### A) CORRELAÇÃO DE *Wilke* (1949):

$$\mu_{AB} \cdot D_{AB}^* = x_A \cdot \mu_A \cdot D_{BA}^0 + x_B \cdot \mu_B \cdot D_{AB}^0$$

$\mu_{AB}$  → VISCOSIDADE DA SOLUÇÃO (cP)

$\mu_A$  → VISCOSIDADE DA SOLUÇÃO A (cP)

$\mu_B$  → VISCOSIDADE DA SOLUÇÃO B (cP)

$x_A$  → FRAÇÃO MOLAR DA ESPÉCIE A

$x_B$  → FRAÇÃO MOLAR DA ESPÉCIE B

$D_{AB}^0, D_{BA}^0$  → COEF. DIFUSÃO BINÁRIA EM LÍQUIDOS EM DILUIÇÃO INFINITA ( $cm^2/s$ )

→ TABELA 1.6 (pg. 74 DO CREMASCO)

Tabela 1.6:  
Coeficiente de difusão binária em líquidos em diluição infinita.

<sup>a</sup> Sistema soluto/solvente	T (K)	$D_{AB} \times 10^5$ (cm <sup>2</sup> / s)	<sup>b</sup> Sistema soluto/solvente	T (K)	$D_{AB} \times 10^5$ (cm <sup>2</sup> / s)
acetona/CCl <sub>4</sub>	298,15	1,70	ácido acético/acetona	298	3,31
argônio/CCl <sub>4</sub>	298,15	3,63	ácido benzóico/acetona	298	2,62
benzeno/CCl <sub>4</sub>	298,15	1,54	ácido acético/benzeno	298	2,09
ciclohexano/CCl <sub>4</sub>	298,15	1,27	etanol/benzeno	280,6	1,77
etano/CCl <sub>4</sub>	298,15	2,36	etanol/benzeno	298	3,82
etanol/CCl <sub>4</sub>	298,15	1,95	naftaleno/benzeno	280,6	1,19
heptano/CCl <sub>4</sub>	298,15	1,13	CCl <sub>4</sub> /benzeno	298	1,92
hexano/CCl <sub>4</sub>	298,15	1,49	acetona/clorofórmio	288	2,36
isooctano/CCl <sub>4</sub>	298,15	1,34	benzeno/clorofórmio	288	2,51
metano/CCl <sub>4</sub>	298,15	2,97	etanol/clorofórmio	288	2,20
metanol/CCl <sub>4</sub>	298,15	2,61	acetona/tolueno	293	2,93
nitrogênio/CCl <sub>4</sub>	298,15	3,54	ácido acético/tolueno	298	2,26
oxigênio/CCl <sub>4</sub>	298,15	3,77	ácido benzóico/tolueno	293	1,74
pentano/CCl <sub>4</sub>	298,15	1,57	etanol/tolueno	288	3,00
tolueno/CCl <sub>4</sub>	298,15	1,40	água/anilina	293	0,70
argônio/hexano	298,15	8,50	água/etanol	298	1,132
metano/hexano	298,15	8,69	água/etileno glicol	293	0,18
etano/hexano	298,15	5,79	água/glicerol	298	0,0083
pentano/hexano	298,15	4,59	água/n-propanol	288	0,87
ciclohexano/hexano	298,15	3,77	H <sub>2</sub> /água	298	4,8
heptano/hexano	298,15	3,78	O <sub>2</sub> /água	298	2,41
isooctano/hexano	298,15	3,38	N <sub>2</sub> /água	298	3,47
benzeno/hexano	298,15	4,64	amônia/água	298	1,64
tolueno/hexano	298,15	4,21	benzeno/água	298	1,02
acetona/hexano	298,15	5,26	etanol/água	298	0,84
CCl <sub>4</sub> /hexano	298,15	3,70	metanol/água	298	0,84

<sup>a</sup> Fonte: Oliveira, J. V. e Krishnaswamy, *Anais do IX COBEQ*, Salvador, 1992.

<sup>b</sup> Fontes: Hines, A. L. and Maddox, R. N. *Mass Transfer: Fundamentals and Applications*, New Jersey, Prentice-Hall, 1985; e Cussler, E. L. *Diffusion: Mass Transfer in Fluid Systems*, Cambridge, Cambridge University Press, 1984.

## B) CORRELAÇÃO DE *Leffler and Cullinan* (1970):

$$\mu_{AB} \cdot D_{AB}^* = \left( \mu_A \cdot D_{BA}^0 \right)^{x_A} \cdot \left( \mu_B \cdot D_{AB}^0 \right)^{x_B}$$

$$\begin{cases} D_{AB} = \alpha \cdot D_{AB}^* \\ \alpha = 1 - 0,354 \cdot x_A \cdot x_B \end{cases}$$

$\alpha \rightarrow$  GRADIENTE DE ATIVIDADE: REFERE-SE À CORRELAÇÃO DA NÃO-IDEALIDADE DA SOLUÇÃO NO FLUXO DE MATÉRIA

**EXEMPLO:** UTILIZANDO-SE OS VALORES DOS COEFICIENTES DE DIFUSÃO EM DILUIÇÃO INFINITA PRESENTES NA TABELA 1.6 (CREMASCO), ESTIME O  $D_{AB}$  PARA O SISTEMA  $\text{CCl}_4/\text{HEXANO}$  A  $25^\circ\text{C}$ , NO QUAL A FRAÇÃO MOLAR DO HEXANO É 0,43. A ESSA TEMPERATURA AS VISCOSIDADES DA SOLUÇÃO, DO TETRACLORETO DE CARBONO E DO HEXANO SÃO, RESPECTIVAMENTE: 0,515 cP, 0,86 cP e 0,3 cP. PARA ESTE SISTEMA, O  $\text{CCl}_4$  É A ESPÉCIE A E O HEXANO A ESPÉCIE B. COMPARE O RESULTADO OBTIDO COM O VALOR EXPERIMENTAL  $2,36 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$  E UTILIZE AS CORRELAÇÕES DE *Wilke E Leffler* e *Cullinan* PARA ESTIMAR O VALOR DE  $D_{AB}$ .

ESPÉCIE	$M_i$ (g.gmol <sup>-1</sup> )	$V_{bi}$ (cm <sup>3</sup> .gmol <sup>-1</sup> )	$x_i$	$\mu_i$ (cP)
A= $\text{CCl}_4$	153,823	102,000	0,57	0,86
B=HEXANO	86,178	140,062	0,43	0,3

$$D_{AB}^0 = 3,7 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$D_{BA}^0 = 1,49 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$\alpha = 1 - 0,354 \cdot x_A \cdot x_B = 1 - 0,354 \cdot 0,57 \cdot 0,43 = 0,91$$

CORRELAÇÃO DE *Wilke*:  $\mu_{AB} \cdot D_{AB}^* = x_A \cdot \mu_A \cdot D_{BA}^0 + x_B \cdot \mu_B \cdot D_{AB}^0$

$$0,515 \cdot D_{AB}^* = 0,57 \cdot 0,86 \cdot 1,49 \cdot 10^{-5} + 0,43 \cdot 0,30 \cdot 3,70 \cdot 10^{-5}$$

$$D_{AB}^* = 2,35 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$\therefore D_{AB} = 0,91 \cdot 2,35 \cdot 10^{-5} = 2,13 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$D.R. = 9,32\%$$



Tabela 1.6:  
Coeficiente de difusão binária em líquidos em diluição infinita.

<sup>a</sup> Sistema soluto/solvente	T (K)	$D_{AB}^0 \times 10^5$ (cm <sup>2</sup> /s)	<sup>b</sup> Sistema soluto/solvente	T (K)	$D_{AB}^0 \times 10^5$ (cm <sup>2</sup> /s)
acetona/CCl <sub>4</sub>	298,15	1,70	ácido acético/acetona	298	3,31
argônio/CCl <sub>4</sub>	298,15	3,63	ácido benzóico/acetona	298	2,62
benzeno/CCl <sub>4</sub>	298,15	1,54	ácido acético/benzeno	298	2,09
ciclohexano/CCl <sub>4</sub>	298,15	1,27	etanol/benzeno	280,6	1,77
etano/CCl <sub>4</sub>	298,15	2,36	etanol/benzeno	298	3,82
etanol/CCl <sub>4</sub>	298,15	1,95	naftaleno/benzeno	280,6	1,19
heptano/CCl <sub>4</sub>	298,15	1,13	naftaleno/benzeno	298	1,92
hexano/CCl <sub>4</sub>	298,15	1,49	tolueno/clorofórmio	288	2,36
isooctano/CCl <sub>4</sub>	298,15	1,34	benzeno/clorofórmio	288	2,51
metano/CCl <sub>4</sub>	298,15	2,97	etanol/clorofórmio	288	2,20
metanol/CCl <sub>4</sub>	298,15	2,61	acetona/tolueno	293	2,93
nitrogênio/CCl <sub>4</sub>	298,15	3,54	ácido acético/tolueno	298	2,26
oxigênio/CCl <sub>4</sub>	298,15	3,77	ácido benzóico/tolueno	293	1,74
pentano/CCl <sub>4</sub>	298,15	1,57	etanol/tolueno	288	3,00
tolueno/CCl <sub>4</sub>	298,15	1,40	água/anilina	293	0,70
argônio/hexano	298,15	8,50	água/etanol	298	1,132
metano/hexano	298,15	8,69	água/etileno glicol	293	0,18
etano/hexano	298,15	5,79	água/glicerol	298	0,0083
pentano/hexano	298,15	4,59	água/n-propanol	288	0,87
ciclohexano/hexano	298,15	3,77	H <sub>2</sub> /água	298	4,8
heptano/hexano	298,15	3,78	O <sub>2</sub> /água	298	2,41
isooctano/hexano	298,15	3,38	N <sub>2</sub> /água	298	3,47
benzeno/hexano	298,15	4,64	amônia/água	298	1,64
tolueno/hexano	298,15	4,21	etanol/água	298	1,02
acetona/hexano	298,15	5,26	tolueno/água	298	0,84
CCl <sub>4</sub> /hexano	298,15	3,70	etanol/água	298	0,84

$D_{BA}^0$

$D_{AB}^0$

<sup>a</sup> Fonte: Oliveira, J. V. e Krishnaswamy, *Anais do IX COBEQ*, Salvador, 1992.

<sup>b</sup> Fontes: Hines, A. L. and Maddox, R. N. *Mass Transfer: Fundamentals and Applications*, New Jersey, Prentice-Hall, 1985; e Cussler, E. L. *Diffusion: Mass Transfer in Fluid Systems*, Cambridge, Cambridge University Press, 1984.

ESPÉCIE	$M_i$ (g.gmol <sup>-1</sup> )	$V_{bi}$ (cm <sup>3</sup> .gmol <sup>-1</sup> )	$x_i$	$\mu_i$ (cP)
A=CCl <sub>4</sub>	153,823	102,000	0,57	0,86
B=HEXANO	86,178	140,062	0,43	0,3

$$D_{AB}^0 = 3,7 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$D_{BA}^0 = 1,49 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$\alpha = 1 - 0,354 \cdot x_A \cdot x_B = 1 - 0,354 \cdot 0,57 \cdot 0,43 = 0,91$$

CORRELAÇÃO DE *Leffler e Cullinan*:  $\mu_{AB} \cdot D_{AB}^* = (\mu_A \cdot D_{BA}^0)^{x_A} \cdot (\mu_B \cdot D_{AB}^0)^{x_B}$

$$0,515 \cdot D_{AB}^* = (0,86 \cdot 1,49 \cdot 10^{-5})^{0,57} \cdot (0,30 \cdot 3,7 \cdot 10^{-5})^{0,43}$$

$$D_{AB}^* = 2,33 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$\therefore D_{AB} = 0,91 \cdot 2,33 \cdot 10^{-5} = 2,128 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$DR = \left| \frac{2,128 \cdot 10^{-5} - 2,36 \cdot 10^{-5}}{2,36 \cdot 10^{-5}} \right| \cdot 100\% = 9,8\%$$

### 3- SOLUTO ELETROLÍTICO EM SOLUÇÕES LÍQUIDAS DILUÍDAS:

$$D_A^0 \equiv \left[ \frac{(|z_1| + |z_2|) \cdot D_1 \cdot D_2}{(|z_1| \cdot D_1 + |z_2| \cdot D_2)} \right]$$

$z_1, z_2 \rightarrow$  CARGA DO ELETRÓLITO

$D_1, D_2 \rightarrow$  COEFICIENTE DE DIFUSÃO IÔNICA EM DILUIÇÃO INFINITA EM ÁGUA A 25°C

$D_A^0 \rightarrow$  COEF. DIFUSÃO EM SOLUÇÃO DILUÍDA DO ELETRÓLITO  $A|z_2| \cdot B|z_1|$  EM UM SOLVENTE ( $\text{cm}^2/\text{s}$ )

\*Tabela 1.8:  
Coeficiente de difusão iônica em diluição infinita em água a 25 °C.

Cátions	$D_i$ ( $\text{cm}^2/\text{s} \times 10^5$ )	Ânions	$D_i$ ( $\text{cm}^2/\text{s} \times 10^5$ )
H <sup>+</sup>	9,31	OH <sup>-</sup>	5,28
Li <sup>+</sup>	1,03	F <sup>-</sup>	1,47
Na <sup>+</sup>	1,33	Cl <sup>-</sup>	2,03
K <sup>+</sup>	1,96	Br <sup>-</sup>	2,08
Rb <sup>+</sup>	2,07	I <sup>-</sup>	2,05
Cs <sup>+</sup>	2,06	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	1,90
Ag <sup>+</sup>	1,65	CH <sub>3</sub> COO <sup>-</sup>	1,09
NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	1,96	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> COO <sup>-</sup>	0,95
Ca <sup>2+</sup>	0,79	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	1,06
Mg <sup>2+</sup>	0,71	CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	0,92
La <sup>3+</sup>	0,62	Fe(CN) <sub>6</sub> <sup>3-</sup>	0,98

\* Fonte: Cussler, E. L. *Diffusion: Mass Transfer in fluid systems*, Cambridge, Cambridge University Press, 1984.

**EXEMPLO:** DETERMINE O COEFICIENTE DE DIFUSÃO EM DILUIÇÃO INFINITA A 25°C DO NaCl, MgSO<sub>4</sub>, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> E MgCl<sub>2</sub> EM ÁGUA. COMPARE OS RESULTADOS OBTIDOS COM O VALOR EXPERIMENTAL CONTIDO NA TABELA 1.9 DO CREMASCO.

NaCl:  $Z_1 = +1$   
 $Z_2 = -1$   
 $D_1 = 1,33 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$   
 $D_2 = 2,03 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$

\*Tabela 1.8:  
 Coeficiente de difusão iônica em diluição infinita em água a 25 °C.

Cátions	$D_i$ ( $\text{cm}^2 / \text{s} \times 10^5$ )	Ânions	$D_i$ ( $\text{cm}^2 / \text{s} \times 10^5$ )
H <sup>+</sup>	9,31	OH <sup>-</sup>	5,28
Li <sup>+</sup>	1,03	F <sup>-</sup>	1,47
Na <sup>+</sup>	1,33	Cl <sup>-</sup>	2,03

$$D_{NaCl}^0 \equiv \left[ \frac{(|+1| + |-1|) \cdot 1,33 \cdot 10^{-5} \cdot 2,03 \cdot 10^{-5}}{(|+1| \cdot 1,33 \cdot 10^{-5} + |-1| \cdot 2,03 \cdot 10^{-5})} \right]$$

$$D_{NaCl}^0 = 1,607 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 / \text{s}$$

Valor  
Tabelado

$$DR = \left| \frac{1,607 \cdot 10^{-5} - 1,612 \cdot 10^{-5}}{1,612 \cdot 10^{-5}} \right| \cdot 100\% = 0,31\%$$



$$Z_1 = +2$$

$$Z_2 = -2$$

$$D_1 = 0,71 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

$$D_2 = 1,06 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

\*Tabela 1.8:

Coefficiente de difusão iônica em diluição infinita em água a 25 °C.

Cátions	$D_i$ ( $\text{cm}^2 / \text{s} \times 10^5$ )	Ânions	$D_i$ ( $\text{cm}^2 / \text{s} \times 10^5$ )
H <sup>+</sup>	9,31	OH <sup>-</sup>	5,28
Li <sup>+</sup>	1,03	F <sup>-</sup>	1,47
Na <sup>+</sup>	1,33	Cl <sup>-</sup>	2,03
K <sup>+</sup>	1,96	Br <sup>-</sup>	2,08
Rb <sup>+</sup>	2,07	I <sup>-</sup>	2,05
Cs <sup>+</sup>	2,06	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	1,90
Ag <sup>+</sup>	1,65	CH <sub>3</sub> COO <sup>-</sup>	1,09
NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	1,96	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> COO <sup>-</sup>	0,95
Ca <sup>2+</sup>	0,79	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	1,06
Mg <sup>2+</sup>	0,71	CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	0,92
La <sup>3+</sup>	0,62	Fe(CN) <sub>6</sub> <sup>3-</sup>	0,98

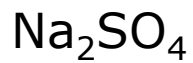
\* Fonte: Cussler, E. L. *Diffusion: Mass Transfer in fluid systems*, Cambridge, Cambridge University Press, 1984.

$$D_{\text{MgSO}_4}^0 \equiv \left[ \frac{(|+2| + |-2|) \cdot 0,71 \cdot 10^{-5} \cdot 1,06 \cdot 10^{-5}}{(|+2| \cdot 0,71 \cdot 10^{-5} + |-2| \cdot 1,06 \cdot 10^{-5})} \right]$$

Valor  
Tabelado

$$D_{\text{MgSO}_4}^0 = 0,850 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 / \text{s}$$

$$DR = \left| \frac{0,850 \cdot 10^{-5} - 0,849 \cdot 10^{-5}}{0,849 \cdot 10^{-5}} \right| \cdot 100\% = 0,11\%$$



$$Z_1 = +1$$

$$Z_2 = -2$$

$$D_1 = 1,33 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

$$D_2 = 1,06 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

\*Tabela 1.8:

Coefficiente de difusão iônica em diluição infinita em água a 25 °C.

Cátions	$D_i$ ( $\text{cm}^2 / \text{s} \times 10^5$ )	Ânions	$D_i$ ( $\text{cm}^2 / \text{s} \times 10^5$ )
H <sup>+</sup>	9,31	OH <sup>-</sup>	5,28
Li <sup>+</sup>	1,03	F <sup>-</sup>	1,47
Na <sup>+</sup>	1,33	Cl <sup>-</sup>	2,03
K <sup>+</sup>	1,96	Br <sup>-</sup>	2,08
Rb <sup>+</sup>	2,07	I <sup>-</sup>	2,05
Cs <sup>+</sup>	2,06	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	1,90
Ag <sup>+</sup>	1,65	CH <sub>3</sub> COO <sup>-</sup>	1,09
NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	1,96	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> COO <sup>-</sup>	0,95
Ca <sup>2+</sup>	0,79	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	1,06
Mg <sup>2+</sup>	0,71	CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	0,92
La <sup>3+</sup>	0,62	Fe(CN) <sub>6</sub> <sup>3-</sup>	0,98

\* Fonte: Cussler, E. L. *Diffusion: Mass Transfer in fluid systems*, Cambridge, Cambridge University Press, 1984.

$$D_{\text{Na}_2\text{SO}_4}^0 \equiv \left[ \frac{(|+1| + |-2|) \cdot 1,33 \cdot 10^{-5} \cdot 1,06 \cdot 10^{-5}}{(|+1| \cdot 1,33 \cdot 10^{-5} + |-2| \cdot 1,06 \cdot 10^{-5})} \right]$$

$$D_{\text{Na}_2\text{SO}_4}^0 = 1,226 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 / \text{s}$$

Valor  
Tabelado

$$DR = \frac{|1,226 \cdot 10^{-5} - 1,23 \cdot 10^{-5}|}{1,23 \cdot 10^{-5}} \cdot 100\% = 0,003\%$$



$$Z_1 = +2$$

$$Z_2 = -1$$

$$D_1 = 0,71 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

$$D_2 = 2,03 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$$

\*Tabela 1.8:

Coefficiente de difusão iônica em diluição infinita em água a 25 °C.

Cátions	$D_i$ ( $\text{cm}^2 / \text{s} \times 10^5$ )	Ânions	$D_i$ ( $\text{cm}^2 / \text{s} \times 10^5$ )
H <sup>+</sup>	9,31	OH <sup>-</sup>	5,28
Li <sup>+</sup>	1,03	F <sup>-</sup>	1,47
Na <sup>+</sup>	1,33	Cl <sup>-</sup>	2,03
K <sup>+</sup>	1,96	Br <sup>-</sup>	2,06
Rb <sup>+</sup>	2,07	I <sup>-</sup>	2,05
Cs <sup>+</sup>	2,06	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	1,90
Ag <sup>+</sup>	1,65	CH <sub>3</sub> COO <sup>-</sup>	1,09
NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	1,96	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> COO <sup>-</sup>	0,95
Ca <sup>2+</sup>	0,79	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	1,06
Mg <sup>2+</sup>	0,71	CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	0,92
La <sup>3+</sup>	0,62	Fe(CN) <sub>6</sub> <sup>3-</sup>	0,98

\* Fonte: Cussler, E. L. *Diffusion: Mass Transfer in fluid systems*, Cambridge, Cambridge University Press, 1984.

$$D_{\text{MgCl}_2}^0 \equiv \left[ \frac{(|+2| + |-1|) \cdot 0,71 \cdot 10^{-5} \cdot 2,03 \cdot 10^{-5}}{(|+2| \cdot 0,71 \cdot 10^{-5} + |-1| \cdot 2,03 \cdot 10^{-5})} \right]$$

Valor  
Tabelado

$$D_{\text{MgCl}_2}^0 = 1,253 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 / \text{s}$$

$$DR = \frac{|1,253 \cdot 10^{-5} - 1,251 \cdot 10^{-5}|}{1,251 \cdot 10^{-5}} \cdot 100\% \cong 0,002\%$$

# 4- DIFUSÃO DE ELETRÓLITOS EM SOLUÇÕES LÍQUIDAS CONCENTRADAS:

## CORRELAÇÃO DE *Gordon* (1977):

$$D_A = D_A^0 \cdot \left| 1 + \sum_{i=1}^{10} A_i \cdot m^i \right| \cdot \left( \frac{1}{\bar{c}_w \cdot \bar{V}_w} \right) \cdot \left( \frac{\mu_w}{\mu_{AB}} \right)$$

$$m = \frac{1000 \cdot w_A}{M_A \cdot (1 - w_A)}$$

$$\sum_{i=1}^{10} A_i \cdot m^i = A_1 \cdot m^1 + A_2 \cdot m^2 + \dots + A_{10} \cdot m^{10}$$

$$\bar{c}_w \cdot \bar{V}_w = 1 \Leftrightarrow m < 4$$



$$D_A = D_A^0 \cdot \left( 1 + \sum_{i=1}^{10} A_i \cdot m^i \right) \cdot \left( \frac{1}{\bar{c}_w \cdot \bar{V}_w} \right) \cdot \left( \frac{\mu_w}{\mu_{AB}} \right)$$

$m \rightarrow$  MOLALIDADE (gmol SOLUÇÃO / Kg SOLVENTE)

$w_A \rightarrow$  FRAÇÃO MÁSSICA DO SOLUTO (Kg SOLUTO / Kg SOLUÇÃO)

$M_A \rightarrow$  MASSA MOLECULAR DO SOLUTO (g/gmol)

$\mu_{AB} \rightarrow$  VISCOSIDADE DA SOLUÇÃO ELETROLÍTICA (cP)

$\mu_w \rightarrow$  VISCOSIDADE DA ÁGUA (cP)

$V_w \rightarrow$  VOLUME. PARCIAL MOLAL DA ÁGUA NA SOLUÇÃO (cm<sup>3</sup>/gmol)

$A_i \rightarrow$  CONSTANTE PARA O ELETRÓLITO (TABELADO)

$D_A^0 \rightarrow$  COEF. DIF. A DILUIÇÃO INFINITA DO SOLUTO EM ÁGUA A 25°C (TABELADO)

<sup>a</sup> Tabela 1.9:  
Coeficiente de difusão à diluição infinita em água a 25 °C.

Compostos	$D_A^0$ ( $\text{cm}^2/\text{s} \times 10^5$ )	Compostos	$D_A^0$ ( $\text{cm}^2/\text{s} \times 10^5$ )
HCl	3,339	NH <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>	1,928
HBr	3,403	NH <sub>4</sub> Cl	1,996
LiCl	1,368	MgCl <sub>2</sub>	1,251
LiBr	1,379	CaCl <sub>2</sub>	1,336
NaCl	1,612	SrCl <sub>2</sub>	1,336
NaI	1,616	BaCl <sub>2</sub>	1,387
NaBr	1,627	Li <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	1,041
KCl	1,996	Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	1,230
KBr	2,018	Cs <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	1,569
KI	2,001	(NH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	1,527
RbCl	2,057	MgSO <sub>4</sub>	0,849
LiNO <sub>3</sub>	1,337	ZnSO <sub>4</sub>	0,849
AgNO <sub>3</sub>	1,768	LaCl <sub>3</sub>	1,294
KNO <sub>3</sub>	1,931	K <sub>4</sub> Fe(CN) <sub>6</sub>	1,473

<sup>a</sup> Fonte: Robinson, R. A. and Stokes, R. H. *Electrolyte Solutions*, London, Butterworths Publications, 1955.

Tabela 1.12:  
Constantes do somatório proposto na eq.(1.128).

Eletrólitos	A <sub>1</sub>	A <sub>2</sub>	A <sub>3</sub>	A <sub>4</sub>	A <sub>5</sub>	A <sub>6</sub>	A <sub>7</sub>	A <sub>8</sub>	A <sub>9</sub> ×10 <sup>3</sup>	A <sub>10</sub> ×10 <sup>4</sup>
NaOH	-0,8968	3,7902	-7,0085	7,1982	-4,4143	1,6811	-0,4006	0,0581	-4,682	1,610
NaCl	-0,9759	3,7828	-6,8350	7,0234	-4,3650	1,6969	-0,4154	0,0617	-5,115	1,806
KOH	-0,9465	4,3448	-8,0801	8,5962	-5,5595	2,2502	-0,5709	0,0880	-7,511	2,722
KCl	-1,0721	3,6216	-5,8292	5,1002	-2,5319	0,7105	-0,1047	0,0063	0,000	0,000
NH <sub>4</sub> Cl	-1,0335	3,3045	-5,0441	4,2596	-2,1118	0,6208	-0,1099	0,0104	-4,124	0,000
NH <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>	-1,3570	4,6305	-7,5998	7,5560	-4,5703	1,7395	-0,4174	0,0612	-5,000	1,748
MgCl <sub>2</sub>	-1,5686	7,6767	-13,496	13,653	-8,2091	2,9796	-0,6390	0,0744	-3,612	0,000
Mg(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-2,1324	12,811	-30,544	41,186	-33,445	16,869	-5,3202	1,0145	-106,940	47,74
CaCl <sub>2</sub>	-1,7010	7,6594	-13,226	13,259	-8,1607	3,1849	-0,7896	0,1203	-10,236	3,722
Ca(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	-2,2346	8,8924	-16,242	16,803	-10,523	4,1208	-1,0130	0,1516	-12,618	4,471
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	-2,3439	5,0669	-5,1111	2,5434	-0,5998	0,0535	0,000	0,0000	0,000	0,000
(NH <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	-2,5149	5,6704	-5,7900	2,8829	-0,6795	0,0606	0,000	0,0000	0,000	0,000

**EXEMPLO:** ESTIME O COEFICIENTE DE DIFUSÃO DO SAL DE COZINHA A 25°C EM ÁGUA. A FRAÇÃO MÁSSICA DO SAL É IGUAL A 0,15. COMPARE O VALOR OBTIDO COM O VALOR EXPERIMENTAL DE  $1,538 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$ .

DADOS:  $\mu_w = 0,894 \text{ cP}$ ;  $\mu_{AB} = 1,20 \text{ cP}$ ;  $D_A^0 = 1,612 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$  (TABELA 1.9)

Eletrólitos	A <sub>1</sub>	A <sub>2</sub>	A <sub>3</sub>	A <sub>4</sub>	A <sub>5</sub>	A <sub>6</sub>	A <sub>7</sub>	A <sub>8</sub>	A <sub>9</sub>	A <sub>10</sub>
									$\times 10^3$	$\times 10^4$
NaOH	-0,8968	3,7902	-7,0085	7,1982	-4,4143	1,6811	-0,4006	0,0581	-4,682	1,610
NaCl	-0,9759	3,7828	-6,8350	7,0234	-4,3650	1,6969	-0,4154	0,0617	-5,115	1,806

$$m = \frac{1000 \cdot w_A}{M_A \cdot (1 - w_A)} = \frac{1000 \cdot 0,15}{58,442 \cdot (1 - 0,15)} = 3,02$$

$$D_{NaCl} = D_{NaCl}^0 \cdot \left| 1 + \sum_{i=1}^{10} A_i \cdot m^i \right| \cdot \left( \frac{1}{c_w \cdot V_w} \right) \cdot \left( \frac{\mu_w}{\mu_{AB}} \right)$$

$$D_{NaCl} = 1,612 \cdot 10^{-5} \cdot \left| 1 - 0,9759 \cdot 3,02 + 3,7838 \cdot 3,02^2 - \dots \right| \cdot 1 \cdot \frac{0,894}{1,20} = 1,318 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$$

$$DR = \left| \frac{1,318 \cdot 10^{-5} - 1,538 \cdot 10^{-5}}{1,538 \cdot 10^{-5}} \right| \cdot 100\% \cong 0,002\%$$