

PROBLEMAS TEMA 4: LEYES DE TRANSPORTE MOLECULAR

1. Cálculo de difusividad en fase gas (I)

Se pide evaluar el coeficiente de difusión del dióxido de carbono en aire a 20 °C y presión atmosférica. Comparar el valor obtenido con el valor experimental de $1,55 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ a la misma temperatura. Emplear la ecuación de Hirschfelder.

Solución: $D_{\text{CO}_2, \text{Aire}} = 1,47 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s};$
(Con parámetros de *The properties of gases and liquids* $D_{\text{CO}_2, \text{Aire}} = 1,5 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$)

2. Cálculo de difusividad en fase líquida (I)

El tratamiento de aguas residuales implica en ocasiones el tratamiento con cloro gas. Se pide determinar el coeficiente de difusión líquida de cloro elemental en una solución a dilución infinita a 289 K utilizando la ecuación de Wilke-Chang. Comparar los resultados con el valor experimental $1,26 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ a la misma temperatura.

Solución: $D_{\text{Cl}_2, \text{Agua}} = 1,24 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s};$
(Con $\phi_W = 2,26$, $\mu_W = 1,13 \text{ cP}$, $D_{\text{Cl}_2, \text{Agua}} = 1,177 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$)

3. Cálculo de difusividad en fase líquida (II)

En ocasiones se añade benceno al etanol para su desnaturalización. Estimar el coeficiente de difusión en fase líquida de benceno en etanol y de etanol en benceno a 288 K utilizando la ecuación de Wilke-Chang. Se conoce que a la temperatura solicitada los valores de la viscosidad dinámica son $\mu_{\text{C}_6\text{H}_6} = 0,75 \text{ cP}$, $\mu_{\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}} = 1,3 \text{ cP}$, así como que los valores de los volúmenes molares del soluto a su temperatura de ebullición son $V_{B, \text{C}_6\text{H}_6} = 95,8 \text{ cm}^3/\text{mol}$, $V_{B, \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}} = 59,2 \text{ cm}^3/\text{mol}$.

Solución: $D_{\text{C}_6\text{H}_6 \text{ en } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}} = 8,85 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}; D_{\text{C}_2\text{H}_5\text{OH en } \text{C}_6\text{H}_6} = 2,18 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$

Anexo

Table K.2 Lennard-Jones force constants calculated from viscosity data[†]

Compound	Formula	ϵ_A/k , in (K)	σ , in Å
Acetylene	C ₂ H ₂	185	4.221
Air		97	3.617
Argon	A	124	3.418
Arsine	AsH ₃	281	4.06
Benzene	C ₆ H ₆	440	5.270
Bromine	Br ₂	520	4.268
<i>i</i> -Butane	C ₄ H ₁₀	313	5.341
<i>n</i> -Butane	C ₄ H ₁₀	410	4.997
Carbon dioxide	CO ₂	190	3.996

Appendix K

Lennard-Jones Constants

Table K.1 The collision integrals, Ω_μ and Ω_D based on the Lennard-Jones potential[†]

kT/ϵ	$\Omega_\mu = \Omega_k$ (for viscosity and thermal conductivity)	Ω_D (for mass diffusivity)	kT/ϵ	$\Omega_\mu = \Omega_k$ (for viscosity and thermal conductivity)	Ω_D (for mass diffusivity)
0.30	2.785	2.662	1.75	1.234	1.128
0.35	2.628	2.476	1.80	1.221	1.116
0.40	2.492	2.318	1.85	1.209	1.105
0.45	2.368	2.184	1.90	1.197	1.094
0.50	2.257	2.066	1.95	1.186	1.084
0.55	2.156	1.966	2.00	1.175	1.075
0.60	2.065	1.877	2.10	1.156	1.057
0.65	1.982	1.798	2.20	1.138	1.041
0.70	1.908	1.729	2.30	1.122	1.026
0.75	1.841	1.667	2.40	1.107	1.012
0.80	1.780	1.612	2.50	1.093	0.9996
0.85	1.725	1.562	2.60	1.081	0.9878
0.90	1.675	1.517	2.70	1.069	0.9770
0.95	1.629	1.476	2.80	1.058	0.9672
1.00	1.587	1.439	2.90	1.048	0.9576
1.05	1.549	1.406	3.00	1.039	0.9490
1.10	1.514	1.375	3.10	1.030	0.9406
1.15	1.482	1.346	3.20	1.022	0.9328
1.20	1.452	1.320	3.30	1.014	0.9256
1.25	1.424	1.296	3.40	1.007	0.9186
1.30	1.399	1.273	3.50	0.9999	0.9120
1.35	1.375	1.253	3.60	0.9932	0.9058
1.40	1.353	1.233	3.70	0.9870	0.8998
1.45	1.333	1.215	3.80	0.9811	0.8942
1.50	1.314	1.198	3.90	0.9755	0.8888
1.55	1.296	1.182	4.00	0.9700	0.8836
1.60	1.279	1.167	4.10	0.9649	0.8788
1.65	1.264	1.153	4.20	0.9600	0.8740
			4.30	0.9553	0.8694

(continued)

686 Appendix I

T (K)	ρ (kg/m ³)	c_p (J/kg × K)	$\mu \times 10^6$ (Pa × s)	$\nu \times 10^6$ (m ² /s)	k (W/m × K)	$\alpha \times 10^6$ (m ² /s)	Pr	$g\beta\rho^2/\mu^2 \times 10^{-9}$ (1/K · m ³)
Water								
273	999.3	4226	1794	1.795	0.558	0.132	13.6	
293	998.2	4182	993	0.995	0.597	0.143	6.96	2.035
313	992.2	4175	658	0.663	0.633	0.153	4.33	8.833
333	983.2	4181	472	0.480	0.658	0.160	3.00	22.75
353	971.8	4194	352	0.362	0.673	0.165	2.57	46.68
373	958.4	4211	278	0.290	0.682	0.169	1.72	85.09
473	862.8	4501	139	0.161	0.665	0.171	0.94	517.2
573	712.5	5694	92.2	0.129	0.564	0.139	0.93	1766.0

Table 24.4 Molecular volumes at normal boiling point for some commonly encountered compounds

Compound	Molecular volume, in cm ³ /g mol	Compound	Molecular volume, in cm ³ /g mol
Hydrogen, H ₂	14.3	Nitric oxide, NO	23.6
Oxygen, O ₂	25.6	Nitrous oxide, N ₂ O	36.4
Nitrogen, N ₂	31.2	Ammonia, NH ₃	25.8
Air	29.9	Water, H ₂ O	18.9
Carbon monoxide, CO	30.7	Hydrogen sulfide, H ₂ S	32.9
Carbon dioxide, CO ₂	34.0	Bromine, Br ₂	53.2
Carbonyl sulfide, COS	51.5	Chlorine, Cl ₂	48.4
Sulfur dioxide, SO ₂	44.8	Iodine, I ₂	71.5