

Cinética Química

Prof. James Moraes de Almeida



MINISTÉRIO DA
EDUCAÇÃO

MINISTÉRIO DA
CIÊNCIA, TECNOLOGIA
E INOVAÇÃO



Transporte em gases

- E os coeficientes das equações?

- $J(\text{matéria}) = -D \frac{dN}{dz}$

- $D = \frac{1}{3} \lambda \bar{c}$

- $J(\text{energia}) = -\kappa \frac{dT}{dz}$

- $\kappa = \frac{1}{3} \lambda \bar{c} C_{V,m}[A]$, onde $[A]$ é a concentração molar.

- $J(\text{momento}) = -\eta \frac{dv_z}{dx}$

- $\eta = \frac{1}{3} M \lambda \bar{c} [A]$, sendo M a massa molar.

Transporte em gases

Table 20.2* Transport properties of gases at 1 atm

	$\kappa/(\text{J K}^{-1} \text{m}^{-1} \text{s}^{-1})$	$\eta/\mu\text{P}^\dagger$	
	273 K	273 K	293 K
Ar	0.0163	210	223
CO ₂	0.0145	136	147
He	0.1442	187	196
N ₂	0.0240	166	176

* More values are given in the *Data section*.

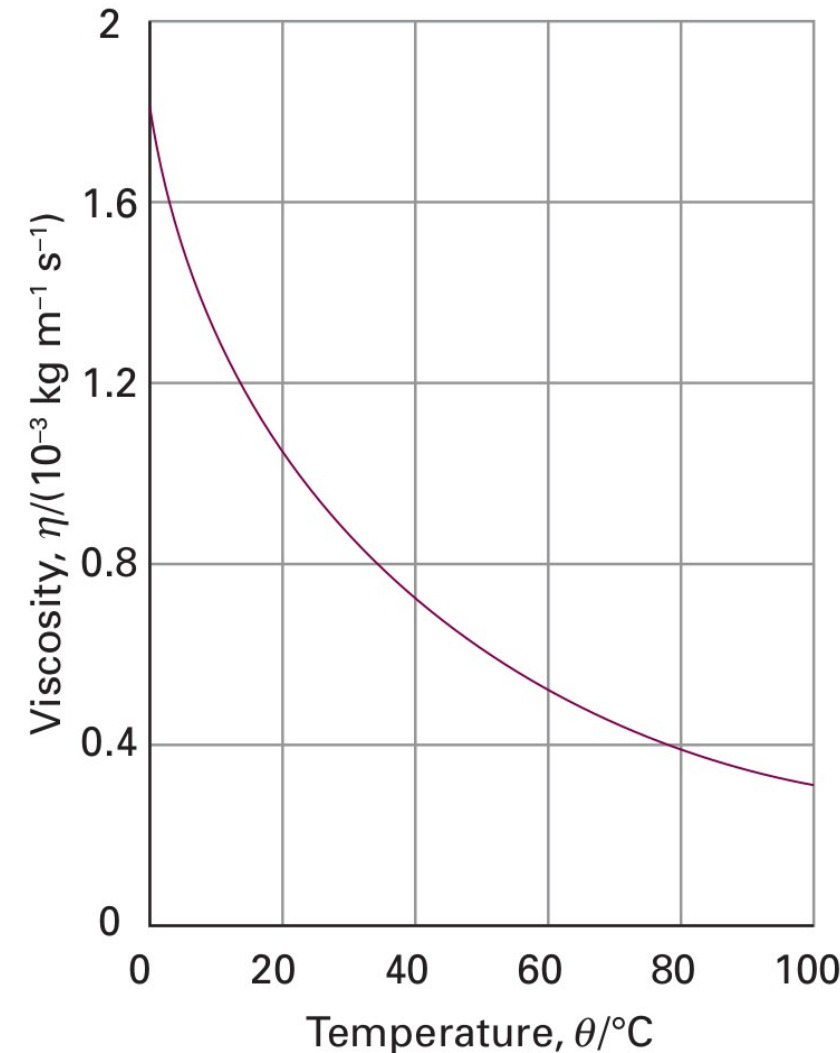
$^\dagger 1 \mu\text{P} = 10^{-7} \text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$.

Transporte em gases

- Porque a viscosidade em gases aumenta com a temperatura?
 - As colisões não são muito frequentes em gases.
 - Livre caminho médio de ~ 100 nm.
 - Uma colisão a cada ~ 1 ns.
 - O aumento da temperatura leva a um aumento no número de colisões.
 - Isso acaba dificultando o fluxo na direção preferencial.
 - Parte da energia cinética é perdida para movimentos aleatórios nas outras direções.

Viscosidade em líquidos

- Nos líquidos as moléculas estão sempre interagindo com as vizinhas.
- Para elas “escaparem” dessas interações, elas devem ter uma energia maior que a de tal interação.
- Portanto, quanto maior a temperatura, maior energia cinética elas tem.
 - Com isso é mais fácil “escaparem”.
 - Diminuindo a viscosidade.



Viscosidade em líquidos

- Líquidos fora do regime turbulento seguem a lei de Hagen-Poiseuille.

- $$\Delta P = \frac{8\mu LQ}{\pi R^2} = \frac{8\pi\mu LQ}{A^2}$$

- ΔP é a diferença de pressão entre as duas pontas do cano.
- L é o comprimento do cano.
- μ é a viscosidade.
- Q é a taxa de fluxo volumétrico.
- R é o raio do cano.
- A é a área da sessão transversal do cano.

Viscosidade em líquidos

- Líquidos fora do regime turbulento seguem a lei de Hagen-Poiseuille.

- $$\Delta P = \frac{8\mu LQ}{\pi R^2} = \frac{8\pi\mu LQ}{A^2}$$

- ΔP é a diferença de pressão entre as duas pontas do cano.
- L é o comprimento do cano.
- μ é a viscosidade.
- Q é a taxa de fluxo volumétrico.
- R é o raio do cano.
- A é a área da sessão transversal do cano.
- Dedução: <https://www.youtube.com/watch?v=cVdJh8kl6Sw>

Viscosidade em líquidos

- $\Delta P = \frac{8\mu LQ}{\pi R^2} = \frac{8\pi\mu LQ}{A^2}$

-

Viscosidade em líquidos

- Líquidos fora do regime turbulento seguem a lei de Hagen-Poiseuille.

- $\Delta P = \frac{8\mu L Q}{\pi R^2} = \frac{8\pi\mu L Q}{A^2}$

- Como é o perfil de velocidades neste regime de fluxo?

- Parabólico.

- $v_x(r) = \frac{1}{4\mu} \left(-\frac{dp}{dx} \right) (R^2 - r^2)$

- Dedução:

<http://brennen.caltech.edu/fluidbook/basicfluidynamics/Navierstokesexactolutions/poiseuilleflow.pdf>

Viscosidade em líquidos

- Como calcular a viscosidade em dinâmica molecular clássica?

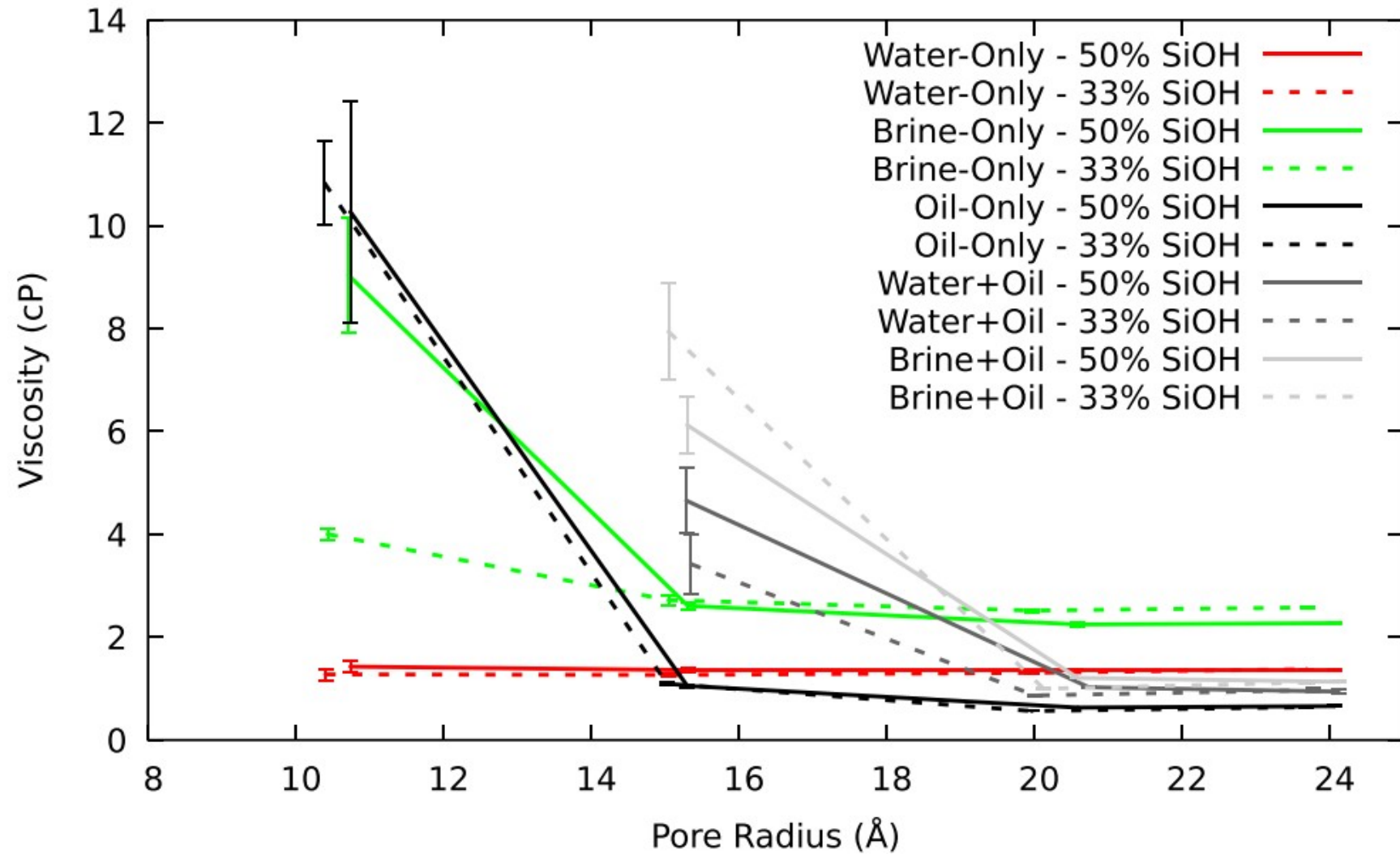
- $$\eta = - \frac{F_g(z)\rho}{\left(\frac{d^2 v(r)}{dr^2}\right)}$$

- Aplica-se uma força externa $F_g(z)$.
- Obtemos o perfil de velocidade.
- Calculamos a segunda derivada.

Viscosidade em líquidos

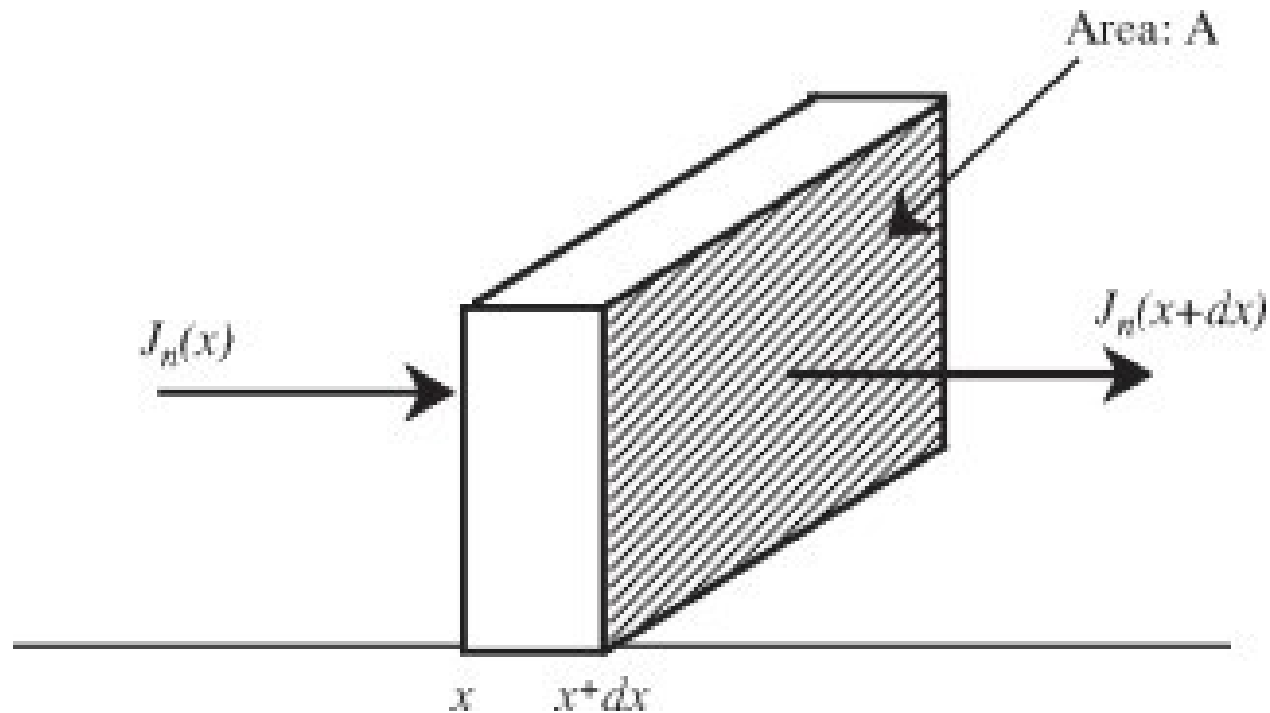
- Como calcular a viscosidade em dinâmica molecular clássica?

- $$\eta = - \frac{F_g(z)\rho}{\left(\frac{d^2 v(r)}{dr^2}\right)}$$



Difusão em líquidos

- Vamos observar a imagem abaixo:



Difusão em líquidos

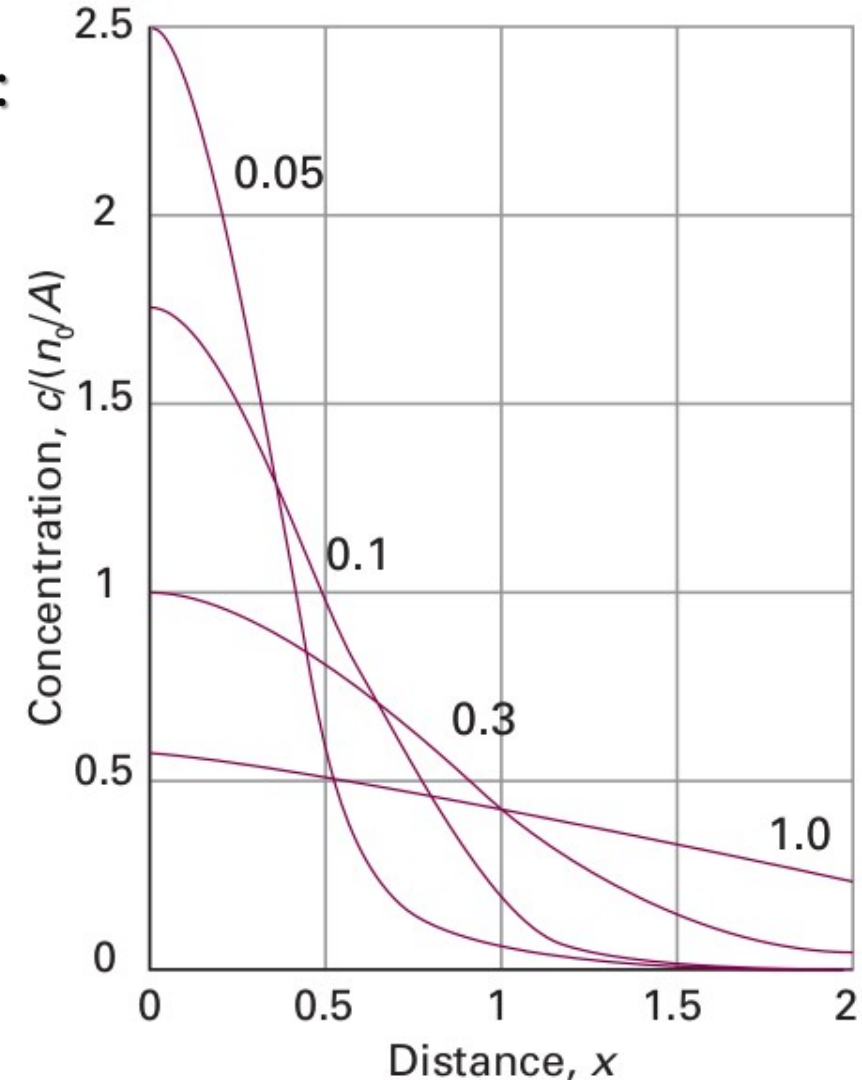
- Segunda lei de Fick:

- $$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2}$$

Difusão em líquidos

- Algumas soluções da segunda lei de Fick.
 - Caso do soluto estar todo em uma placa no plano yz:

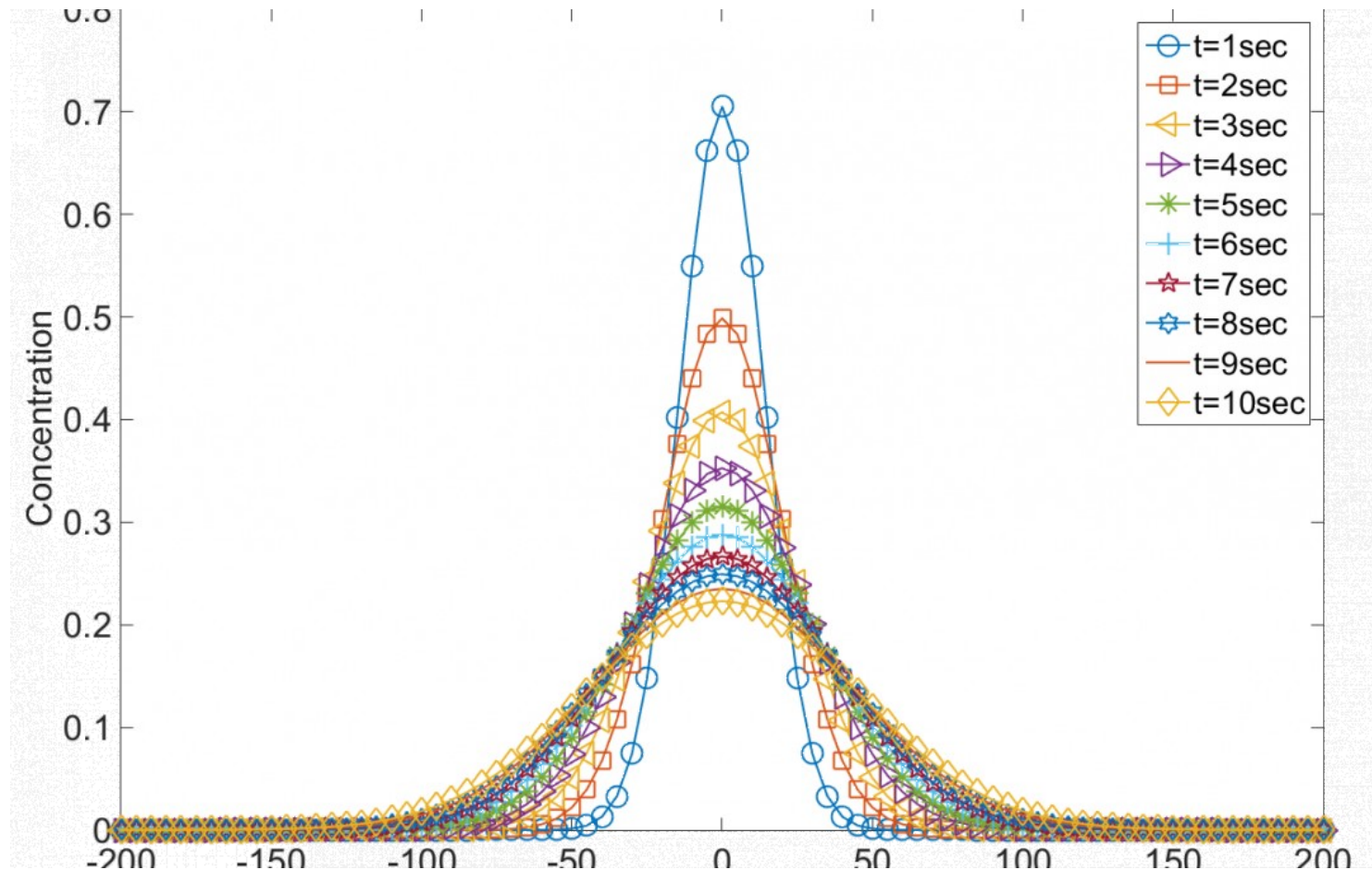
- $$c(x, t) = \frac{n_0}{A(\pi Dt)^{1/2}} e^{-x^2/4Dt}$$



Difusão em líquidos

- Algumas soluções da segunda lei de Fick.
 - Grão de soluto em um solvente:

$$c(x, t) = \frac{n_0}{8(\pi Dt)^{3/2}} e^{-r^2/4Dt}$$



Difusão em líquidos

- Para o caso do soluto no plano yz:
 - $c(x, t) = \frac{n_0}{A(\pi Dt)^{1/2}} e^{-x^2/4Dt}$
- Façam gráficos para diferentes:
 - Concentrações iniciais.
 - Coeficientes de difusão.
 - Tempo decorrido.
- Discutam os efeitos das alterações das variáveis em questão.

OBRIGADO

James Moraes de Almeida

ilum.cnpem.br



MINISTÉRIO DA
EDUCAÇÃO

MINISTÉRIO DA
CIÊNCIA, TECNOLOGIA
E INOVAÇÃO

