

Análisis de la velocidad de difusión molecular de una mezcla binaria alcohol – agua

Fecha de Recepción: 5 junio del 2023

Fecha de corrección: 18 agosto del 2023

Merfy Adriana Rivera Méndez, Gladis Yussely Anzueto Herrera, Melany Elizabeth Monroy Cruz, David Sebastián Chacón de León, Amanda María Denise Ochoa, Angela Sofia Colón Cerezo¹

RESUMEN

Este artículo se propone determinar las velocidades de difusión para una mezcla de dos líquidos utilizando de base teórica la difusión molecular, así como la difusividad de los líquidos y sus velocidades. El sistema es alcohol que se transfiere del gas al líquido y agua que se transfiere del líquido al gas. Las velocidades de flujo molares de alcohol y agua son iguales y de sentido contrario. Este caso surge de la aplicación de la ecuación de Hirschfelder modificada para la resolución de cuatro pruebas del sistema, en donde cada corrida se encuentra en diferentes condiciones de mezcla de alcohol-agua para así determinar las velocidades de difusión de cada una. El modelo de Hirschfelder utiliza como variables la difusividad volumétrica (D_v) reportada por la literatura de los líquidos involucrados, las condiciones de presión y temperatura involucradas en el sistema y la relación de las integrales de colisión (ΩD) reportadas por la literatura los líquidos en cuestión para determinar la difusividad en las condiciones finales. Y con esto de base determinar las velocidades de difusión de cada corrida.

Palabras claves: difusividad volumétrica, velocidad de difusión, mezcla binaria.

ABSTRACT

This article aims to determine the diffusion speeds for a mixture of two liquids using molecular diffusion as a theoretical basis, as well as the diffusivity of liquids and their speeds. The system is alcohol that is transferred from gas to liquid and water that is transferred from liquid to gas. The molar flow rates of alcohol and water are equal and in reverse. This case arises from the application of the modified Hirschfelder equation to solve four tests of the

system, where each run is under different conditions of the alcohol-water mixture to determine the diffusion rates of each one. The Hirschfelder model uses as variables the volumetric diffusivity (D_v) reported by the literature of the liquids involved, the pressure and temperature conditions involved in the system and the relationship of the collision integrals (ΩD) reported by the literature the liquids in question to determine the diffusivity in the final conditions. And with this as a basis, determine the diffusion speeds of each run.

Keywords: volumetric diffusivity, diffusion rate, binary mix.

INTRODUCCIÓN

Cuando un sistema contiene dos o más componentes cuyas concentraciones varían de un punto a otro, presenta una tendencia natural a transferir la masa, haciendo mínimas las diferencias de concentración dentro del sistema.

La masa puede transferirse por medio del movimiento molecular fortuito en los fluidos en reposo o puede transferirse de una superficie a un fluido en movimiento, ayudado por las características dinámicas del flujo. (Ullauri, 2010).

Muchos de los problemas de cálculo relacionados con los procesos de transferencia de masa, requieren de la utilización de métodos numéricos, cálculo de funciones complejas, resolución de ecuaciones y funciones matemáticas complejas tal como la conocida ecuación de Hirschfelder modificada la cual busca determinar una estimación de la difusividad.

¹ Estudiantes destacados de último año de Ingeniería Química de la Universidad Mariano Gálvez de Guatemala, Merfy Adriana Rivera Méndez, mriveram3@miumg.edu.gt Gladis Yussely Anzueto Herrera, ganzuetoh@miumg.edu.gt Melany Elizabeth Monroy Cruz, mmonroyc1@miumg.edu.gt David Sebastián Chacón de León, dchacond@miumg.edu.gt Amanda María Denise Ochoa, aocchoa@miumg.edu.gt Angela Sofia Colón Cerezo acolonc@miumg.edu.gt

Análisis de la velocidad de difusión molecular de una mezcla binaria alcohol – agua

Fecha de Recepción: 5 junio del 2023

Fecha de corrección: 18 agosto del 2023

La difusividad (también llamado coeficiente de difusión) es la constante de proporcionalidad que aparece en la ley de Fick de la difusión, relacionando la densidad de flujo molar A_j con el gradiente de concentración ∇C_A .

La velocidad de difusión de una sustancia a través de una membrana viene determinada por la Ley de Fick, dicha velocidad de difusión simple está directamente relacionada con la concentración del soluto, cuanto más concentrado está el soluto más rápido ocurre la difusión. La velocidad de difusión es el proceso en el que cada molécula individual se mueve en línea recta hasta que choca con algo y luego rebota y sigue otra dirección las moléculas continúan moviéndose aunque se hayan distribuido uniformemente por un espacio dado; sin embargo, con la misma rapidez con la que algunas moléculas se mueven, de izquierda a derecha y otra se mueven de derecha izquierda, de modo que se mantiene un equilibrio. (Welty, Wicks, Wilson, & Rorrer, 2008).

MARCO TEÓRICO

Difusión Molecular

La difusión molecular aparece al existir una distribución espacial de concentración de materia. La difusión de materia tiene el sentido en el que la concentración disminuye. La difusión molecular es un fenómeno irreversible. Es el movimiento térmico de todas las partículas a temperaturas por encima del cero absoluto. La velocidad de este movimiento es una función de la temperatura, la viscosidad del fluido y el tamaño de las partículas. Difusión explica el flujo neto de moléculas de una región de mayor concentración a una de menor concentración, pero también la difusión se produce cuando no hay gradiente de concentración. (Anderson, 2011).

Según la teoría de Maxwell y Stefan la velocidad relativa de las moléculas de A es inversamente proporcional al producto de las concentraciones de A y B. (Masciarelli, Stancich, & Stoppani, 2012).

$$(v_A - v_B) = \beta \cdot \frac{1}{C_A \cdot C_B} \cdot \frac{(-dC_A)}{dz}$$

El signo menos se debe a que el movimiento global se efectúa siempre en el sentido de las concentraciones decrecientes. (Masciarelli et al., 2012).

Velocidad de Difusión

La difusión es el movimiento neto de sustancia (líquida o gaseosa) de un área de alta concentración a una de baja concentración. Para que tenga lugar el fenómeno de la difusión, la distribución espacial de moléculas no debe ser homogénea, debe existir una diferencia, o bien un gradiente de concentración entre dos puntos del medio. La velocidad de difusión simple está directamente relacionada con la concentración del soluto; cuanto más concentrado esté el soluto, más rápida es la difusión. (Simon, 2018).

La velocidad a la que se produce la difusión depende de una variedad de factores:

Temperatura

De todos los factores que influyen en la velocidad de difusión, la temperatura es la más importante. La temperatura tiene el mayor efecto sobre la velocidad de difusión y es el factor de cambio más fácil. El aumento de la temperatura aumenta la velocidad de difusión mediante la adición de energía a cada partícula. Esto es porque las partículas con más energía pueden moverse a través del material huésped más fácilmente. Del mismo modo, reducir la temperatura bajará la velocidad de difusión mediante la reducción de la energía de cada partícula. (Simon, 2018)

Diferencia de concentración

La velocidad de difusión depende de la diferencia entre las concentraciones de todo el material huésped, dando como resultado mayor velocidad de diferencia por las mayores diferencias de concentración. (Simon, 2018)

Distancia de difusión

La velocidad de difusión es inversamente proporcional a la distancia a través de la cual el material se difunde. Es decir, las distancias más pequeñas resultan en velocidades de difusión más

Canalización del Conocimiento Científico

Análisis de la velocidad de difusión molecular de una mezcla binaria alcohol – agua

Fecha de Recepción: 5 junio del 2023

rápidas y las distancias más grandes resultan en velocidades de difusión más lentas. (Simon, 2018)

Difusión y materiales huéspedes

La velocidad de difusión también depende del material con que se está difundiendo y del material a través del cual lo hace. A una cierta temperatura, todas las partículas tienen la misma energía promedio. Esto significa que los átomos más ligeros, como el hidrógeno, el carbono, el oxígeno y el nitrógeno viajan más rápido y son más móviles que los átomos más grandes, tales como el cobre o el hierro. (Simon, 2018)

Mezcla Alcohol-Agua

La mezcla de Agua y Alcohol es un fenómeno físico, ya que no produce una reacción química entre los elementos que la componen y es un fenómeno que puede revertirse fácilmente, la mezcla entre el agua y el alcohol puede revertirse mediante el uso de técnicas de separación física como lo es el destilado.

La destilación para separar alcohol de agua implica una transferencia de masa. La solubilidad del alcohol en agua está estrechamente influenciada por la presencia de los grupos OH, ya que estos interactúan fácilmente con las moléculas del agua mediante la formación de puentes de hidrógeno. Los alcoholes menores es decir metanol, etanol y propanol son completamente solubles en agua. Sin embargo, al ascender en la serie, el grupo hidroxilo, va perdiendo la importancia con relación al grupo alquilo. (Cáceres, 2017).

RESULTADOS

Tabla de Datos Medidos

No. De Corrida	Alcohol en el exterior de la película (% molar)	Alcohol en el interior de la película (% molar)
1	80	10
2	70	20
3	60	30
4	50	40

Con base en la difusividad volumétrica de $0.15\text{cm}^2/\text{s}$ reportada en literatura para una mezcla alcohol – agua en fase de vapor, a una temperatura de 298K,

Fecha de corrección: 18 agosto del 2023

se procedió a corregir por temperatura, mediante la ecuación de Hirschfelder modificada, a 368K.

$$0.15 \frac{\text{cm}^2}{\text{s}} \times \frac{1\text{m}^2}{1 \times 10^4 \text{cm}^2} \times \frac{3600\text{s}}{1\text{h}} = 0.054 \frac{\text{m}^2}{\text{h}}$$

$$D_{v_{T_2, P_2}} = D_{v_{T_1, P_1}} \left(\frac{P_1}{P_2} \right) \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\Omega_{DT_1}}{\Omega_{DT_2}}$$

Debido a que la presión se mantiene constante para ambas temperaturas y a que la relación de las integrales de colisión tiende a 1, se puede prescindir de ellas en la ecuación. Además de esto la relación de temperaturas se elevan a 1.75, ya que este valor se utiliza para extrapolar datos a temperatura ambiente según lo indica (McCabe, Smith, & Harriot, 2007).

La ecuación de Hirschfelder queda de la siguiente manera:

$$D_{v_{T_2, P_2}} = D_{v_{T_1, P_1}} \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^{1.75}$$

$$D_v = 0.054 \times \left(\frac{368}{298} \right)^{1.75} = 0.0781 \frac{\text{m}^2}{\text{h}}$$

$$A = 10\text{m}^2$$

$$B_T = 1 \times 10^{-4}\text{m}$$

A 368 K, la densidad molar de la mezcla es:

$$\rho_M = 0.0331 \frac{\text{kgmol}}{\text{m}^3}$$

Fundamentado en los datos anteriores, se procede a calcular la velocidad de difusión del alcohol y agua a distintas concentraciones, por medio de la ecuación

$$N_A = \frac{D_v \rho_M}{B_T} (y_{Ai} - y_A)$$

Tras realizar el cálculo de la velocidad de difusión se utilizó el área y la masa molar de cada componente en la mezcla para obtener la velocidad de difusión del alcohol y agua por separado.

Corrida 1

Análisis de la velocidad de difusión molecular de una mezcla binaria alcohol – agua

Fecha de Recepción: 5 junio del 2023

$$y_A = 0.80$$

$$y_{Ai} = 0.10$$

$$N_A = \frac{0.0781 \frac{\text{m}^2}{\text{h}} \times 0.0331 \frac{\text{kgmol}}{\text{m}^3}}{10^{-4} \text{m}} (0.80 - 0.10)$$

$$N_A = 18.10 \frac{\text{kgmol}}{\text{h} \cdot \text{m}^2}$$

$$18.10 \frac{\text{kgmol}}{\text{h} \cdot \text{m}^2} \times 10 \text{m}^2 \times 46 = 8326 \frac{\text{kgalcohol}}{\text{h}}$$

$$18.10 \frac{\text{kgmol}}{\text{h} \cdot \text{m}^2} \times 10 \text{m}^2 \times 18 = 3258 \frac{\text{kgagua}}{\text{h}}$$

Corrida 2

$$y_A = 0.70$$

$$y_{Ai} = 0.20$$

$$N_A = \frac{0.0781 \frac{\text{m}^2}{\text{h}} \times 0.0331 \frac{\text{kgmol}}{\text{m}^3}}{10^{-4} \text{m}} (0.70 - 0.20)$$

$$N_A = 12.925 \frac{\text{kgmol}}{\text{h} \cdot \text{m}^2}$$

$$12.925 \frac{\text{kgmol}}{\text{h} \cdot \text{m}^2} \times 10 \text{m}^2 \times 46 = 5945.5 \frac{\text{kgalcohol}}{\text{h}}$$

$$12.925 \frac{\text{kgmol}}{\text{h} \cdot \text{m}^2} \times 10 \text{m}^2 \times 18 = 2326.5 \frac{\text{kgagua}}{\text{h}}$$

Corrida 3

$$y_A = 0.60$$

$$y_{Ai} = 0.30$$

Fecha de corrección: 18 agosto del 2023

$$N_A = \frac{0.0781 \frac{\text{m}^2}{\text{h}} \times 0.0331 \frac{\text{kgmol}}{\text{m}^3}}{10^{-4} \text{m}} (0.60 - 0.30)$$

$$N_A = 7.75 \frac{\text{kgmol}}{\text{h} \cdot \text{m}^2}$$

$$7.75 \frac{\text{kgmol}}{\text{h} \cdot \text{m}^2} \times 10 \text{m}^2 \times 46 = 3565 \frac{\text{kgalcohol}}{\text{h}}$$

$$7.75 \frac{\text{kgmol}}{\text{h} \cdot \text{m}^2} \times 10 \text{m}^2 \times 18 = 1395 \frac{\text{kgagua}}{\text{h}}$$

Corrida 4

$$y_A = 0.50$$

$$y_{Ai} = 0.40$$

$$N_A = \frac{0.0781 \frac{\text{m}^2}{\text{h}} \times 0.0331 \frac{\text{kgmol}}{\text{m}^3}}{10^{-4} \text{m}} (0.50 - 0.40)$$

$$N_A = 2.585 \frac{\text{kgmol}}{\text{h} \cdot \text{m}^2}$$

$$2.585 \frac{\text{kgmol}}{\text{h} \cdot \text{m}^2} \times 10 \text{m}^2 \times 46 = 1189.10 \frac{\text{kgalcohol}}{\text{h}}$$

$$2.585 \frac{\text{kgmol}}{\text{h} \cdot \text{m}^2} \times 10 \text{m}^2 \times 18 = 465.30 \frac{\text{kgagua}}{\text{h}}$$

Análisis de la velocidad de difusión molecular de una mezcla binaria alcohol – agua

Fecha de Recepción: 5 junio del 2023

Fecha de corrección: 18 agosto del 2023

Gráfica No. 1 – Velocidad de Difusión



En la Gráfica No. 1 puede observarse que la velocidad de difusión es inversamente proporcional al porcentaje molar de alcohol en el interior de la película, y en consecuencia proporcional al porcentaje molar de alcohol en el exterior de esta.

CONCLUSIONES

1. La ecuación de Hirschfelder modificada permite determinar una difusividad volumétrica a baja temperatura con base a las condiciones establecidas.
2. La disminución de porcentaje molar de alcohol en el exterior de la película es proporcional a la velocidad de difusión (gráfica 1).

REFERENCIAS

- Anderson, J. (2011). *DIFUSION MOLECULAR* (p. 2). p. 2. Retrieved from https://www.academia.edu/7801432/DIFUSION_MOLECULAR
- Cáceres, D. (2017). MEZCLA DE ALCOHOL ETÍLICO CON AGUA. Retrieved August 30, 2021, from <https://www.clubensayos.com/Ciencia/Tema-1-MEZCLA-DE-ALCOHOL-ETÍLICO-CON-AGUA/3880060.html>
- Masciarelli, R., Stancich, S., & Stoppani, F. (2012). Cátedra de Ing. De las Reacciones. *Transferencia de Materia*, 1–31.
- McCabe, W. L., Smith, J. C., & Harriot, P. (2007). *Operaciones Unitarias En Ingeniería Química* (7th ed.; McGraw Hill, Ed.).
- Simon, J. (2018). Cuatro cosas que afectan la

Análisis de la velocidad de difusión molecular de una mezcla binaria alcohol – agua

Fecha de Recepción: 5 junio del 2023

Fecha de corrección: 18 agosto del 2023

velocidad de difusión. Retrieved August 31, 2021, from Leaf Group Ltd website:
<https://www.geniolandia.com/13095360/cuatro-cosas-que-afectan-la-velocidad-de-difusion>

Ullauri, P.G. (2010). Transporte de Masa. *Recitela*, pp 101 - 102.

Welty, J. R., Wicks, C. E., Wilson, R. E., & Rorrer, G. L. (2008). *Fundamentals of Momentum, Heat, and Mass Transfer* (5th ed.). John Wiley & Sons, Inc.