Title: Advanced Mass Transfer

Text Book :

Diffusion Mass Transfer

by: Skelland

References:

Transport Phenomena by: Bird
Element of Transport Phenomena
by: Leighton & Sisson
Chemical Engineering Vol.1
by: Colson Richardson
Heat and Mass Transfer
by: Eckert & Dracke
Analysis of Heat & Mass Transfer
by: Eckert & Dracke
Mass Transfer by: Kays

Points:

Homework	**10%**
Midterm	**40%**
Project	**15%**
Final	**35%**

Total	**100%**

چند تعریف از غلظت:

غلظت جرمی = جرم جزء مورد نظر در واحد حجم مخلوط یا محلول

غلظت مولی = تعداد مول جزء مورد نظر در واحد حجم مخلوط یا محلول

جزء جرمی=نسبت جرم جزء مورد نظر به کل جرم مخلوط یا محلول

جزء مولی= نسبت تعداد مول جزء مورد نظر به کل مول مخلوط یا محلول

علامات مورد استفاده جهت نمایش غلظت های فوق در مورد جزء (i) به شرح زیر می باشند

غلظت جرمی	غلظت مولی	جزء جرمی	جزء مولی
ρ_i	c_i	ω_i	x_i

بین انواع تعریف غلظت روابط زیر و همچنین روابط ارائه شده در جدول ۱ برقرار میباشد

$$c_i = \frac{\rho_i}{M_i} \leftrightarrow \omega_i = \frac{\rho_i}{\rho} \leftrightarrow x_i = \frac{c_i}{c} \qquad 1$$

در مخلوطی که نفوذ مولکولی در آن صورت می گیرد ذرات مختلف دارای سرعت مختلف می باشند

در چنین شرایطی اگر **n** ذره در مخلوط موجود باشند، سرعت متوسط جرمی از رابطه زیر به دست می آید

$$\upsilon = \frac{\sum_{i=1}^{n} \rho_i \upsilon_i}{\sum_{i=1}^{n} \rho_i} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \rho_i \upsilon_i}{\rho} \qquad 2$$

همچنین سرعت متوسط مولی از رابطه زیر به دست می آید

$$\upsilon^* = \frac{\sum_{i=1}^{n} c_i \upsilon_i}{\sum_{i=1}^{n} c_i} = \frac{\sum_{i=1}^{n} c_i \upsilon_i}{c} \qquad 3$$

از روابط فوق نتیجه می‌شود که Cv^* شدت کلی عبور مولها از واحد سطح عمود بر بردار v^* می‌باشد و ρv شدت کلی عبورجرم از واحد سطح عمود بر بردار v خواهد بود.

بطوری که ملاحظه می‌شود،این شدتها توسط یک ناظر در خارج سیستم احساس و اندازه گیری می‌شود

مثلا v همان سرعتی است که توسط لوله پیتوت (pitot tube) اندازه گیری میشود. گاهی سرعت متوسط دیگری نیز با تعریف زیر و بعنوان سرعت متوسط حجمی بکار میرود

$$\upsilon^{\bullet} = \sum_{i=1}^{n} \rho_i \upsilon_i \left(\frac{\overline{V}_i}{M_i}\right) = \sum_{i=1}^{n} C_i \; v_i \quad \overline{V}_i \qquad 4$$

در اینجا n، تعداد ذرات، حجم مولی جزیی i است، M_i جرم مولکولی و v_i سرعت ماده i می‌باشد. در مبحث نفوذ می‌بینیم که نیروی محرکه غلظت با تعریف خاصی از سرعت که همانا سرعت i نسبت به سرعت متوسط مواد می‌باشد ، تناسب دارد

سرعت نسبی جزء i نسبت به سرعت متوسط جرمی $v_i - v =$

سرعت نسبی جزء i نسبت به سرعت متوسط مولی $v_i - v^* =$

خلاصه ای از تعاریف سرعت در جدول شماره یک آورده شده است

TABLE 16.1–1

NOTATION FOR CONCENTRATIONS IN BINARY SYSTEMS

Basic definitions	$\rho = \rho_A + \rho_B$ = mass density of solution (g/cm^3)	(A)
	$\rho_A = c_A M_A$ = mass concentration of A (g of A/cm^3 of solution)	(B)
	$\omega_A = \dfrac{\rho_A}{\rho}$ = mass fraction of A	(C)
	$c = c_A + c_B$ = molar density of solution (g-moles/cm^3)	(D)
	$c_A = \dfrac{\rho_A}{M_A}$ = molar concentration of A (g-moles of A/cm^3 of solution)	(E)
	$x_A = \dfrac{c_A}{c}$ = mole fraction of A	(F)
	$M = \dfrac{\rho}{c}$ = number-mean molecular weight of mixture	(G)

Additional relations, for reference only	$x_A + x_B = 1$	(H)	$\omega_A + \omega_B = 1$	(I)
	$x_A M_A + x_B M_B = M$	(J)	$\dfrac{\omega_A}{M_A} + \dfrac{\omega_B}{M_B} = \dfrac{1}{M}$	(K)
	$x_A = \dfrac{\dfrac{\omega_A}{M_A}}{\dfrac{\omega_A}{M_A} + \dfrac{\omega_B}{M_B}}$	(L)	$\omega_A = \dfrac{x_A M_A}{x_A M_A + x_B M_B}$	(M)
	$dx_A = \dfrac{d\omega_A}{M_A M_B\left(\dfrac{\omega_A}{M_A} + \dfrac{\omega_B}{M_B}\right)^2}$	(N)	$d\omega_A = \dfrac{M_A M_B\, dx_A}{(x_A M_A + x_B M_B)^2}$	(O)

TABLE 16.1–2

NOTATION FOR VELOCITIES IN BINARY SYSTEMS

Basic definitions	v_A = velocity of species A relative to stationary coordinates	(A)
	$v_A - v$ = diffusion velocity of species A relative to v	(B)
	$v_A - v^*$ = diffusion velocity of species A relative to v^*	(C)
	v = mass average velocity $= (1/\rho)(\rho_A v_A + \rho_B v_B) = \omega_A v_A + \omega_B v_B$	(D)
	v^* = molar average velocity $= (1/c)(c_A v_A + c_B v_B) = x_A v_A + x_B v_B$	(E)
Additional relations	$v - v^* = \omega_A(v_A - v^*) + \omega_B(v_B - v^*)$	(F)
	$v^* - v = x_A(v_A - v) + x_B(v_B - v)$	(G)

TABLE 16.1-3

MASS AND MOLAR FLUXES IN BINARY SYSTEMS

	Quantity	With Respect to Stationary Axes	With Respect to v	With Respect to v^*
Basic definitions	Velocity of species A (cm sec^{-1})	v_A (A)	$v_A - v$ (B)	$v_A - v^*$ (C)
	Mass flux of species A (g cm^{-2} sec^{-1})	$n_A = \rho_A v_A$ (D)	$j_A = \rho_A(v_A - v)$ (E)	$j_A^* = \rho_A(v_A - v^*)$ (F)
	Molar flux of species A (g-moles cm^{-2} sec^{-1})	$N_A = c_A v_A$ (G)	$J_A = c_A(v_A - v)$ (H)	$J_A^* = c_A(v_A - v^*)$ (I)
Relations among the fluxes, for reference only	Sum of mass fluxes (g cm^{-2} sec^{-1})	$n_A + n_B = \rho v$ (J)	$j_A + j_B = 0$ (K)	$j_A^* + j_B^* = \rho(v - v^*)$ (L)
	Sum of molar fluxes (g-moles cm^{-2} sec^{-1})	$N_A + N_B = cv^*$ (M)	$J_A + J_B = c(v^* - v)$ (N)	$J_A^* + J_B^* = 0$ (O)
	Fluxes in terms of n_A and n_B	$N_A = \dfrac{n_A}{M_A}$ (P)	$j_A = n_A - \omega_A(n_A + n_B)$ (Q)	$j_A^* = n_A - x_A\left(n_A + \dfrac{M_A}{M_B} n_B\right)$ (R)
	Fluxes in terms of N_A and N_B	$n_A = N_A M_A$ (S)	$J_A = N_A - \omega_A\left(N_A + \dfrac{M_B}{M_A} N_B\right)$ (T)	$J_A^* = N_A - x_A(N_A + N_B)$ (U)
	Fluxes in terms of j_A and v	$n_A = j_A + \rho_A v$ (V)	$J_A = \dfrac{j_A}{M_A}$ (W)	$j_A^* = \dfrac{M}{M_B} j_A$ (X)
	Fluxes in terms of J_A^* and v^*	$N_A = J_A^* + c_A v^*$ (Y)	$J_A = \dfrac{M_B}{M} J_A^*$ (Z)	$j_A^* = J_A^* M_A$ (AA)

شدت جرمی و مولی

از نظر ناظری که خارج از سیستم قرار دارد شدت جرمی ومولی عبور ماده i برابر است با:

شدت عبور جرم i از واحد سطح عمود بر v_i در واحد زمان

$$n_i=\rho_i v_i$$

و شدت عبور مول i از واحد سطح عمود بر v_i در واحد زمان

$$N_i = C_i v_i$$

از نظر ناظری که همراه با سیستم با سرعت v حرکت میکند شدت جرمی ومولی عبور ماده i برابر است با:

شدت عبور جرم i از واحد سطح عمود بر v_i در واحد زمان

$$i_i=\rho_i(v_i-v)$$

شدت عبور مول i از واحد سطح عمود بر v_i در واحد زمان

$$I_i=C_i(v_i-v)$$

از نظر ناظری که همراه با سیستم با سرعت v^* حرکت میکند شدت جرمی ومولی عبور ماده i برابر است با:

شدت عبور جرم i از واحد سطح عمود بر vi در واحد زمان

$$j_i=\rho_i(v_i-v^*)$$

شدت عبور مول i از واحد سطح عمود بر v_iدر واحد زمان

$$J_i=C_i(v_i-v^*)$$

مهمترین این روابط که به سادگی قابل اثبات است رابطه $N_i=J_i+x_i(N_t)$ میباشد و در این رابطه N_t مجموع جبری N_i هااست

قانون اول فیک

بر اساس این قانون، شدت مولی نفوذ مولکولی مواد با مشتق مکانی غلظت آنها متناسب است

$$J_A = -cD_{AB} \frac{\partial x_A}{\partial z} \quad 8$$

$$J_i = -c\ D_{iM} \frac{\partial x_i}{\partial z} \quad 6$$

برای سیستمهای دو جزیی روابط فوق بصورت زیر درمی آیند

$$J_A = -D_{AB} \frac{\partial c_A}{\partial z} \quad 7$$

$$J_i = -D_{iM} \frac{\partial c_i}{\partial z} \quad 5$$

نفوذ می‌تواند همزمان در سه جهت صورت گیرد

$$J_i = -D_{iM} \nabla c_i \qquad 9$$

$$J_i = -c\ D_{iM} \nabla x_i \qquad 10$$

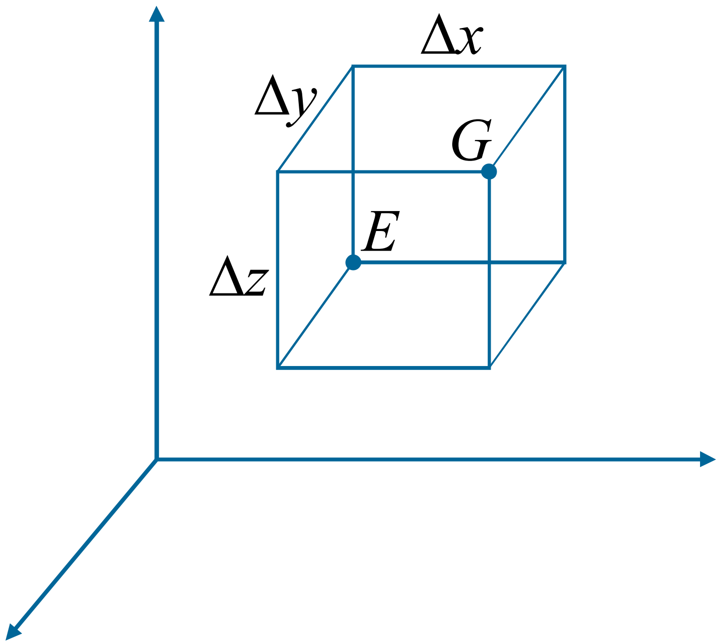
$$J_A = -D_{AB} \nabla c_A \qquad 11$$

$$J_A = -c D_{AB} \nabla x_A \qquad 12$$

$$\nabla c_i = \frac{\partial\ c_i}{\partial\ x} + \frac{\partial\ c_i}{\partial\ y} + \frac{\partial\ c_i}{\partial\ z} \qquad 13$$

نفوذ مولکولی در حالت ناپایدار، قانون دوم فیک

سیستمی را از دو جزء A و B که در آن هیچ‌گونه عامل حرکت جز نفوذ مولکولی وجود ندارد در نظر بگیرید:



E(x,y,z,t)

G(Δx+x , Δy+y , Δz+z, Δt+t)

(شدت تولید در داخل المان) + (شدت خروج از المان)–(شدت ورود به المان) = شدت انباشتگی در المان

اگر شدت جریان جرمی جزء A را به درون المان بنویسیم :

شدت جرمی تولید جزء A در واحد زمان : $M_A.R_A.\,\Delta x\,\Delta y\,\Delta z$

A شدت انباشتگی جزء : $\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \theta} = \frac{\partial(\rho V)}{\partial \theta} = \Delta x \Delta y \Delta z \frac{\partial \rho}{\partial \theta}$

$$\dot{\mathbf{m}} = N.A.Mw \quad \Longrightarrow$$

x شدت ورود در جهت : $N_{AX}.\Delta y.\Delta z.M_A$

x شدت خروج در جهت : $(N_{AX})_{x+\Delta x}\Delta y.\Delta z.M_A$

y شدت ورود در جهت : $N_{Ay}.\Delta x.\Delta z.M_A$

y شدت خروج در جهت : $(N_{Ay})_{y+\Delta y}.\Delta x.\Delta z.M_A$

z شدت ورود در جهت : $N_{AZ}.\Delta x.\Delta y.M_A$

z شدت خروج در جهت : $(N_{AZ})_{Z+\Delta Z}.\Delta x.\Delta y.M_A$

(شدت انباشتگی + شدت ورود - شدت خروج = شدت تولید)

اگر پارامتر های نوشته شده را در معادله اصلی جا گذاری نمائیم :

$$M_A\left\{\left[(N_{AX})_{X+\Delta X}-(N_{AX})\right]\Delta y.\Delta z+\left[(N_{Ay})_{y+\Delta y}-(N_{Ay})\right]\Delta x.\Delta z+\left[(N_{AZ})_{Z+\Delta Z}-(N_{AZ})\right]\Delta x.\Delta y\right\}$$

$$+\Delta x\Delta y\Delta z\frac{\partial\rho_A}{\partial\theta}=M_A R_A\Delta x\Delta y\Delta z$$

اگر معادله فوق را بر $\Delta x.\ \Delta y.\ \Delta z$ تقسیم کرده حد آن را برای حالتی که Δx و Δy و Δz به سمت صفر میل میکند تعیین نماییم در این صورت خواهیم داشت:

$$**M_A\left(\frac{\partial N_{AX}}{\partial x}+\frac{\partial N_{Ay}}{\partial y}+\frac{\partial N_{Az}}{\partial z}\right)+\frac{\partial\rho_A}{\partial\theta}=M_A R_A$$

به همین ترتیب برای جزء B می توان نوشت:

$$M_B\left(\frac{\partial N_{BX}}{\partial x}+\frac{\partial N_{By}}{\partial y}+\frac{\partial N_{Bz}}{\partial z}\right)+\frac{\partial\rho_B}{\partial\theta}=M_B R_B$$

و از جمع جبری دو معادله بالا می توان نوشت:

$$\frac{\partial(M_A N_A + M_B N_B)x}{\partial x} + \frac{\partial(M_A N_A + M_B N_B)y}{\partial y} + \frac{\partial(M_A N_A + M_B N_B)z}{\partial z} + \frac{\partial \rho}{\partial \theta} = 0$$

توجه:

$$M_A R_A = -M_B R_B$$

$$\rho_A + \rho_B = \rho$$

$$M_A N_{Ax} = u_x \rho_A + M_A J_{Ax}$$

در اینجا U_x سرعت متوسط جرمی در جهت xها بوده و از رابطه زیر بدست می آید:

$$\rho u_x = u_{Ax} \rho_A + u_{Bx} \rho_B = M_A N_{Ax} + M_B N_{Bx}$$

بنا براین:

$$\frac{\partial}{\partial x}(M_A N_A + M_B N_B)_x = \frac{\partial}{\partial x}(\rho u_x) = \rho \frac{\partial u_x}{\partial x} + (u_x)\frac{\partial \rho}{\partial x}$$

و همین طور:

$$\frac{\partial}{\partial y}(M_A N_A + M_B N_B)_y = \frac{\partial}{\partial y}(\rho u_y) = \rho \frac{\partial u_y}{\partial y} + (u_y)\frac{\partial \rho}{\partial y}$$

$$\frac{\partial}{\partial z}(M_A N_A + M_B N_B)_z = \frac{\partial}{\partial z}(\rho u_z) = \rho \frac{\partial u_z}{\partial z}(u_z)\frac{\partial \rho}{\partial z}$$

و در نتیجه:

$$\rho(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z}) + u_x \frac{\partial \rho}{\partial x} + u_y \frac{\partial \rho}{\partial y} + u_z \frac{\partial \rho}{\partial z} + \frac{\partial \rho}{\partial \theta} = 0$$

معادله فوق معادله پیوستگی برای کل مواد است.در حالتی که جرم ویژه محلول ثابت باشد خواهیم داشت :

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0$$

برای یافتن معادله پیوستگی جزء A می توان نوشت:

$$M_A.N_{Ax}=u_x\rho_A+M_AJ_{Ax}$$

$$M_A\frac{\partial N_{Ax}}{\partial x}=u_x\frac{\partial \rho_A}{\partial x}+\rho_A\frac{\partial u_x}{\partial x}+M_A\frac{\partial J_{Ax}}{\partial x}=u_x\frac{\partial \rho_A}{\partial x}+\rho_A\frac{\partial u_x}{\partial x}-M_AD_{AB}\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2}$$

که اگر این مقادیر را در معادله ** جایگزین کنیم خواهیم داشت:

$$u_x\frac{\partial \rho_A}{\partial x}+u_y\frac{\partial \rho_A}{\partial y}+u_z\frac{\partial \rho_A}{\partial z}+\rho_A\underbrace{\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}+\frac{\partial u_z}{\partial z}\right)}_{0}-M_AD_{AB}\left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2}\right)+\frac{\partial \rho_A}{\partial \theta}=M_AR_A$$

معادله پیوستگی

پس از تقسیم طرفین بر M_A خواهیم داشت:

$$\xrightarrow{\frac{\rho_A}{M_A}=C_A} u_x\frac{\partial C_A}{\partial x}+u_y\frac{\partial C_A}{\partial y}+u_z\frac{\partial C_A}{\partial z}+\frac{\partial C_A}{\partial \theta}=D_{AB}\left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2}\right)+R_A$$

در حالت خاصی که سرعت برابر صفر باشد و واکنش شیمیایی نیز نداشته باشد:

$$\frac{\partial C_A}{\partial \theta} = D_{AB}\left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2}\right) = D_{AB} \nabla^2 C_A$$

این معادله اکثرا در مورد انتقال جرم در جامدات به کار می رود ولی دربعضی حالات خاص برای محاسبه انتقال جرم در سیالات نیز قابل استفاده است.

معادله پیوستگی در مختصات کارتزین و غیره:

$$\mathrm{Rectangular}:$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial t}+\left(\frac{\partial N_{Ax}}{\partial x}+\frac{\partial N_{Ay}}{\partial y}+\frac{\partial N_{Az}}{\partial z}\right)=R_A$$

$$\mathit{Cylindrical}:$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial t}+\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rN_{Ar})+\frac{1}{r}\frac{\partial N_{A\theta}}{\partial \theta}+\frac{\partial N_{Az}}{\partial z}\right)=R_A$$

$$\mathit{Spherical}:$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial t}+\left(\begin{array}{l}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2 N_{Ar})+\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta} \\ (N_{A\theta}\sin\theta)+\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial N_{A\Phi}}{\partial \Phi}\end{array}\right)=R_A$$

بسط معادلات پیوستگی در حالت ثابت ماندن ضریب نفوذ مولکولی و دانسیته:

Rectangular:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t}+\left(v_x^*\frac{\partial C_A}{\partial x}+v_y^*\frac{\partial C_A}{\partial y}+v_z^*\frac{\partial C_A}{\partial z}\right)=R_A$$

$$+D_{AB}\left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2}\right)$$

Cylindrical:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t}+\left(v_r^*\frac{\partial C_A}{\partial r}+v_\theta^*\frac{1}{r}\frac{\partial C_A}{\partial \theta}+v_z^*\frac{\partial C_A}{\partial z}\right)=R_A$$

$$+D_{AB}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial C_A}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 C_A}{\partial \theta^2}+\frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2}\right]$$

Spherical:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t}+\left(v_r^*\frac{\partial C_A}{\partial r}+v_\theta^*\frac{1}{r}\frac{\partial C_A}{\partial \theta}+v_\Phi^*\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial C_A}{\partial \Phi}\right)=R_A+D_{AB}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial C_A}{\partial r}\right)\right.$$

$$\left.+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial C_A}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 C_A}{\partial\Phi^2}\right]$$

می‌توان برای انواع شار جرمی در مختصات مختلف استفاده نمود:

$$N_{A,\theta} = J_{A,\theta} + x_A(N_{A,\theta} + N_{B,\theta})$$

$$\text{Or}: N_{A,\theta} = x_A(N_{A,\theta} + N_{B,\theta}) - CD_{AB}\frac{\partial x_A}{\partial \theta}$$

$$Also:$$

$$N_{A,r} = J_{A,r} + x_A(N_{A,r} + N_{B,r})$$

$$\text{Or}: N_{A,r} = x_A(N_{A,r} + N_{B,r}) - CD_{AB}\frac{\partial x_A}{\partial r}$$

انتقال جرم پایدار از سطوح کروی

فرض کنید یک شیء کروی با محیط انتقال جرم صورت می‌دهد یعنی ماده A پس از ترک سطح جامد در گاز B که خود ساکن فرض می‌شود نفوذ می‌کند.

شرایط مرزی و معادله اولیه (در غیاب واکنش) به شکل زیر خواهد بود:

$$(@r = r_s \rightarrow x_A = x_{A,r_S})\ \&\ (@r = r_o \rightarrow x_A = x_{A,b})$$

$$\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2 N_{A,r})\right) = o$$

$$r^2 N_{A,r} = cons\tan t = r_s{}^2 N_{A,r_S}$$

شدت انتقال جرم از سطح کره $= N_{A,r_S}$

از آنجا که در این مورد گاز B خود نفوذ نمی‌کند بنابراین درخواهیم داشت:

$$N_{A,r} = x_A(N_{A,r}) - CD_{AB}\frac{\partial x_A}{\partial r}$$

همچنین با توجه به شرایط پایدار میتوان مشتق نسبی را به مشتق عادی تبدیل نمود

$$N_{A,r} = x_A(N_{A,r}) - CD_{AB}\frac{dx_A}{dr}$$

با جابجایی این رابطه و جاگذاری در معادلات داریم:

$$N_{A,r}(x_A - 1) = CD_{AB}\frac{dx_A}{dr}$$

$$N_{A,r} = \frac{CD_{AB}}{x_A - 1}\frac{dx_A}{dr}$$

$$r^2 N_{A,r} = \frac{CD_{AB}}{x_A - 1}\frac{dx_A}{dr}r^2$$

$$\frac{CD_{AB}}{x_A - 1}\frac{dx_A}{dr}r^2 = N_{A,r_S} r_s$$

با توجه به ثابت بودن طرف دوم معادله فوق از این معادله انتگرال می‌گیریم:

$$SUPPOSE:\frac{N_{A,r_S}r_s}{CD_{AB}}=k$$

$$\frac{dx_A}{x_A-1}=\frac{kdr}{r^2}$$

$$\frac{-dx_A}{1-x_A}=\frac{kdr}{r^2}$$

$$\ln(1-x_A)=-\frac{k}{r}+c$$

$$\ln(x_B)=-\frac{k}{r}+c$$

$$\ln(x_{B,s})=-\frac{k}{r_s}+c$$

$$\ln(\frac{x_B}{x_{B,s}})=-\frac{k}{r}+\frac{k}{r_s}$$

اگر در رابطه فوق شرط مرزی دوم نیز جاگذاری شود:

$$\frac{1}{-\frac{1}{r}+\frac{1}{r_s}}\ln\left(\frac{x_B}{x_{B,s}}\right)=\frac{1}{-\frac{1}{r_b}+\frac{1}{r_s}}\ln\left(\frac{x_{B,b}}{x_{B,s}}\right)$$

$$\ln\left(\frac{x_B}{x_{B,s}}\right)^{\frac{1}{-\frac{1}{r}+\frac{1}{r_S}}}=\ln\left(\frac{x_{B,b}}{x_{B,s}}\right)^{\frac{1}{-\frac{1}{r_b}+\frac{1}{r_S}}}$$

$$\left(\frac{x_B}{x_{B,s}}\right)=\left(\frac{x_{B,b}}{x_{B,s}}\right)^{\frac{\frac{1}{r}-\frac{1}{r_S}}{\frac{1}{r_b}-\frac{1}{r_S}}}$$

تعیین ضریب نفوذ مولکولی

روابط متعددی جهت تعیین ضریب نفوذ مولکولی درگازها و مایعات ارائه شده است

معادله‌ی Chapman-Enskog یکی از این روابط است:

$$D_{AB} = 0.0018583 \frac{\sqrt{T^3\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}\right)}}{P r_{AB}^{2} f} \qquad 28$$

D_{AB} = **ضریب نفوذ ملکولی بر حسب** cm^2/s

T= دما بر حسب درجه کلوین

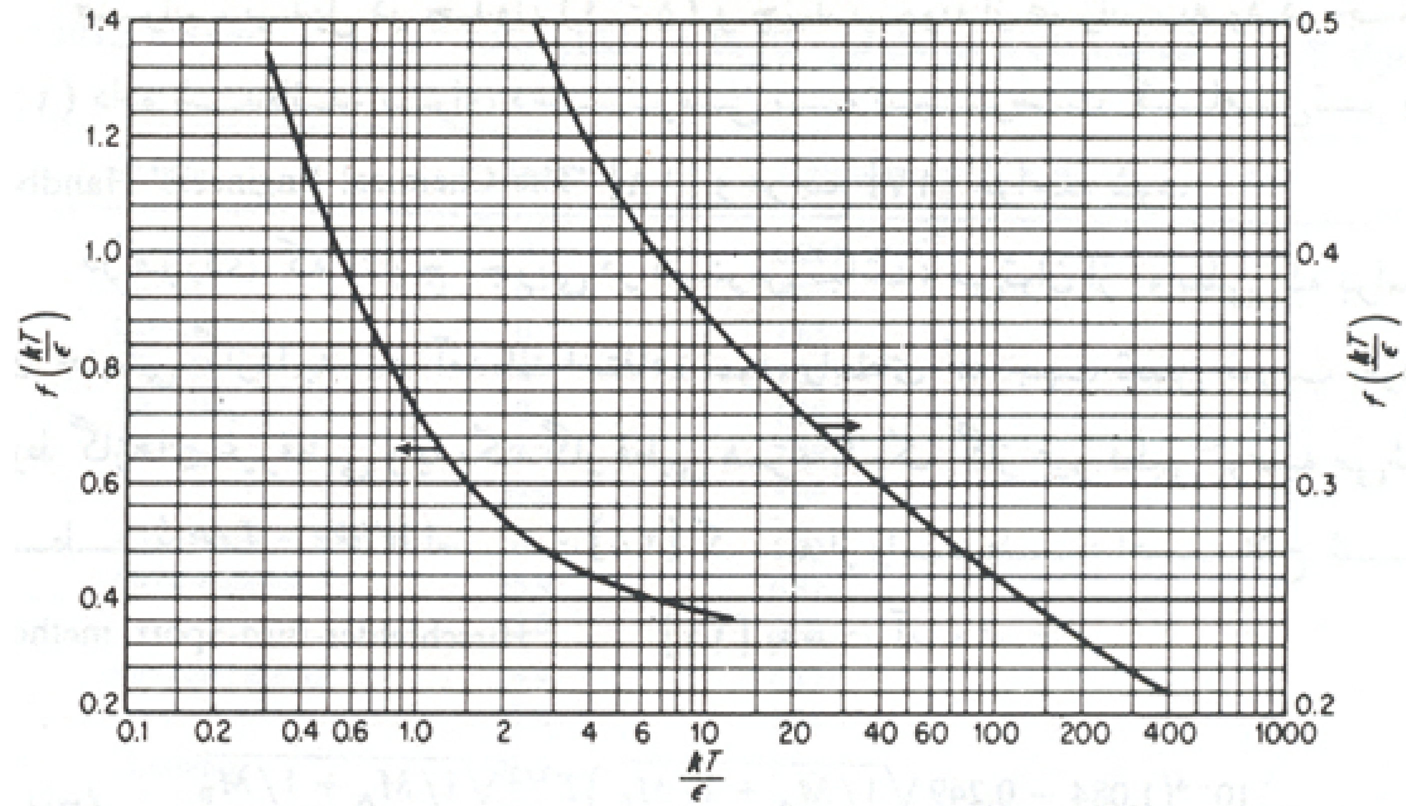
P= فشار بر حسب آتمسفر

$\varepsilon_{AB} = \sqrt{\varepsilon_A . \varepsilon_B}$ **: جدایش مولکولی در زمان برخورد بر حسب nm با شعاع‌های فرضی برای A,B**

$$r_{AB} = \frac{r_A + r_B}{2}$$

: انرژی جذب مولکولی A,B

و f تابع برخورد است که در شکل بعدی به صورت تابعی از kT/ε_{AB} ارائه شده است



شکل۱ -تابع برخورد در نفوذ ملکولی

جهت تخمین ضریب نفوذ مولکولی در مایعات رابطه زیر ارائه شده است:

$$D_{AB} = 0.74 * 10^{-7} \frac{(\Psi_B . M_B)^{0.5} T}{\mu \overline{V}_B^{\,0.6}} \qquad 29$$

$$D_{AB} \rightarrow molecular\, diffusivity, cm^2 / s$$

$$\Psi_B \rightarrow association\, parameter\ for\, B$$

$$\Psi_A = \begin{cases} 2.6\, for\ water \\ 1.9\, for\ methanol \\ 1\, for\ non-polars \end{cases}$$

$$\overline{V}_A \rightarrow molar\ volume\ of\ A, cm^3 / gmole$$

انتقال جرم در حالت پایدار و در حالت ساکن

اگر سیستم انتقال جرم را دو جزئی فرض نماییم ، سیستم پایدار، انتقال جرم تنها در جهت Z و D_{AB} ثابت می باشد.

$$N_{AZ} = J_{AZ} + x_A \sum N_z$$

$$J_{AZ} = -D_{AB}\frac{\partial C_A}{\partial z} \quad \& \quad X_A = \frac{C_A}{C} \quad \& \quad \sum N_Z = N_{AZ} + N_{BZ}$$

$$\Rightarrow \quad N_{AZ} = -D_{AB}\frac{\partial C_A}{\partial z} + \frac{C_A}{C}\left(N_{AZ} + N_{BZ}\right) \quad \Rightarrow$$

$$N_{AZ} - \frac{C_A}{C}\left(N_{AZ} + N_{BZ}\right) = -D_{AB}\frac{dC_A}{dz} \quad \Rightarrow$$

$$\int \frac{dx}{a+bx} = \frac{1}{b}\ln[a+bx]+c$$

$$\int_{C_{A_1}}^{C_{A_i}} \frac{dC_A}{N_{AZ} - \frac{C_A}{C}(N_{AZ}+N_{BZ})} = \int_{Z_2}^{Z_2} \frac{-dZ}{D_{AB}} \Rightarrow$$

$$\cancel{-}\frac{C}{N_{AZ}+N_{BZ}} \ln\left[N_{AZ} - \frac{C_A}{C}(N_{AZ}+N_{BZ})\right]_{C_{A_1}}^{C_{A_2}} = \cancel{-}\frac{1}{D_{AB}}(Z_2 - Z_1) \Rightarrow$$

$$1 = \frac{1}{N_{AZ}+N_{BZ}} \cdot \frac{C * D_{AB}}{Z_2 - Z_1} \ln\left[\frac{N_{AZ} - \frac{C_{A_2}}{C}(N_{AZ}+N_{BZ})}{N_{AZ} - \frac{C_{A_1}}{C}(N_{AZ}+N_{BZ})}\right] \Rightarrow$$

$$1 = \frac{1}{N_{AZ}+N_{BZ}} \cdot \frac{C * D_{AB}}{Z_2 - Z_1} \ln\left[\frac{\frac{N_{AZ}}{(N_{AZ}+N_{BZ})} - \frac{C_{A_2}}{C}}{\frac{N_{AZ}}{(N_{AZ}+N_{BZ})} - \frac{C_{A_1}}{C}}\right] \Rightarrow$$

$\Rightarrow$ طرفين رابطه را در N_{AZ} ضرب ميكنيم $\Rightarrow$

رابطه كلي انتقال جرم :

$$N_{AZ} = \frac{N_{AZ}}{N_{AZ} + N_{BZ}} \cdot \frac{C * D_{AB}}{Z_2 - Z_1} \ln \left[\frac{\dfrac{N_{AZ}}{(N_{AZ} + N_{BZ})} - \dfrac{C_{A_2}}{C}}{\dfrac{N_{AZ}}{(N_{AZ} + N_{BZ})} - \dfrac{C_{A_1}}{C}} \right]$$

رابطه كلي انتقال جرم را براي گازها و مايعات مي توان بصورت زير نمايش داد :

الف) تعميم روابط انتقال جرم براي گازها

براي گازها :

$$C = \frac{P}{RT} \qquad C_A = \frac{P_A}{RT} \qquad \frac{C_A}{C} = \frac{P_A}{P} = y_i$$

$$\Rightarrow N_{AZ} = \frac{N_{AZ}}{N_{AZ} + N_{BZ}} \cdot \frac{P * D_{AB}}{RT\,(z_2 - z_1)} \ln \left[\frac{\dfrac{N_{AZ}}{(N_{AZ} + N_{BZ})} - \dfrac{P_{A_2}}{P}}{\dfrac{N_{AZ}}{(N_{AZ} + N_{BZ})} - \dfrac{P_{A_1}}{P}} \right]$$

ب) تعميم روابط انتقال جرم براي مايعات

براي مايعات :

$$\frac{C_A}{C} = x_i \qquad C_A = \frac{\rho_A}{M} \qquad C = \frac{\rho}{M}$$

$$\Rightarrow N_{AZ} = \frac{N_{AZ}}{N_{AZ} + N_{BZ}} \cdot \frac{D_{AB} * \left(\frac{\rho}{M}\right)_{ave}}{Z_2 - Z_1} \ln\left[\frac{\frac{N_{AZ}}{(N_{AZ} + N_{BZ})} - X_{A_2}}{\frac{N_{AZ}}{(N_{AZ} + N_{BZ})} - X_{A_1}}\right]$$

حالات خاص :

1) نفوذ از میان یک لایه ساکن

در این حالات جزء A از میان جزء ساکن B نفوذ مي کند ، یعنی $N_{BZ}=0$ که در این صورت :

$$N_{BZ}=0 \quad \Rightarrow \quad \frac{N_{AZ}}{N_{AZ}+\cancelto{0}{N_{BZ}}}=1$$

پس خواهیم داشت :

$$N_{AZ}=\frac{C * D_{AB}}{Z}\ln\left[\frac{1-\frac{C_{A2}}{C}}{1-\frac{C_{A1}}{C}}\right]$$

براي گازها :

$$N_{AZ} = \frac{P * D_{AB}}{RT\,(Z_2 - Z_1)} \ln \left[\frac{1 - y_{A_2}}{1 - y_{A_1}} \right]$$

براي مايعات :

$$N_{AZ} = \frac{D_{AB} * \left(\frac{\rho}{M} \right)_{ave}}{Z} \ln \left[\frac{1 - x_{A_2}}{1 - x_{A_1}} \right]$$

همچنين براي گازها مي توان نوشت :

$$\begin{cases} P_t = P_{A_1} + P_{B_1} \\ P_t = P_{A_2} + P_{B_2} \end{cases} \Rightarrow P_{A_1} + P_{B_1} = P_{A_2} + P_{B_2} \Rightarrow P_{A_1} - P_{A_2} = P_{B_2} - P_{B_1} \Rightarrow \frac{P_{A_1} - P_{A_2}}{P_{B_2} - P_{B_1}} = 1 \quad (1)$$

$$\frac{P_{B_2} - P_{B_1}}{\ln\left(\frac{P_{B_2}}{P_{B_1}}\right)} = P_{BM} \quad (2) \qquad ، \qquad \frac{C_A}{C} = \frac{P_A}{P}$$

$$\Rightarrow \quad N_{AZ} = \frac{P_t * D_{AB}}{RT\,(z_2 - z_1)} \ln\left[\frac{1 - \frac{P_{A_2}}{P_t}}{1 - \frac{P_{A_1}}{P_t}}\right] \Rightarrow$$

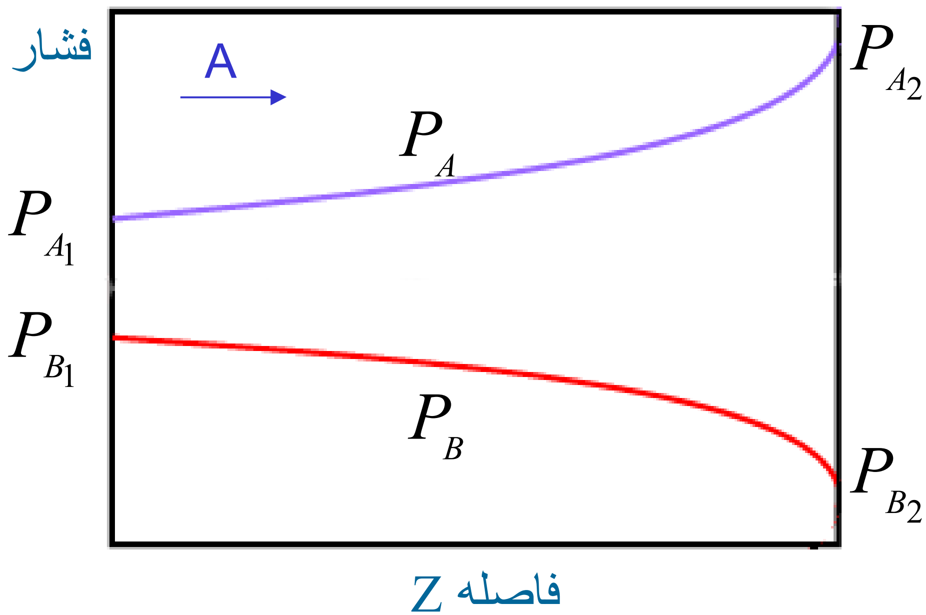
$$\Rightarrow \qquad N_{AZ} = \frac{P_t * D_{AB}}{RT\ (z_2 - z_1)} \ln \left[\frac{P_t - P_{A2}}{P_t - P_{A1}} \right] \qquad \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \qquad N_{AZ} = \frac{P_t * D_{AB}}{RT\ (z_2 - z_1)} \ln \frac{P_{B2}}{P_{B1}} \qquad \overset{1}{\Rightarrow}$$

$$\Rightarrow \qquad 1 * N_{AZ} = \frac{P_t * D_{AB}}{RT\ (z_2 - z_1)} \ln \frac{P_{B2}}{P_{B1}} * \frac{P_{A1} - P_{A2}}{P_{B2} - P_{B1}} \qquad \overset{2}{\Rightarrow}$$

$$\Rightarrow \quad N_{AZ} = \frac{P_t * D_{AB}}{RTZ * P_{BM}} (P_{A1} - P_{A2})$$

نمودار مربوط به نفوذ جزء A درون جزء B :



2) نفوذ متقابل با شدت مولی معادل در حالت پایا

این حالت اکثرا در عملیات تقطیر مشاهده می شود.در این حالت $N_A=-N_B$ و از معادله کلی قبل نمی توان استفاده نمود.

$$N_{AZ} = J_{AZ} + \frac{C_A}{C}\sum N_Z$$

$$N_{AZ} = -D_{AB}\frac{d_{CA}}{dz} + x_A(N_A + N_B)$$

$$N_{AZ} = -D_{AB}\frac{d_{CA}}{dz} \longrightarrow N_{AZ} = \frac{D_{AB}}{RTZ}(p_{A_1} - p_{A_2})$$

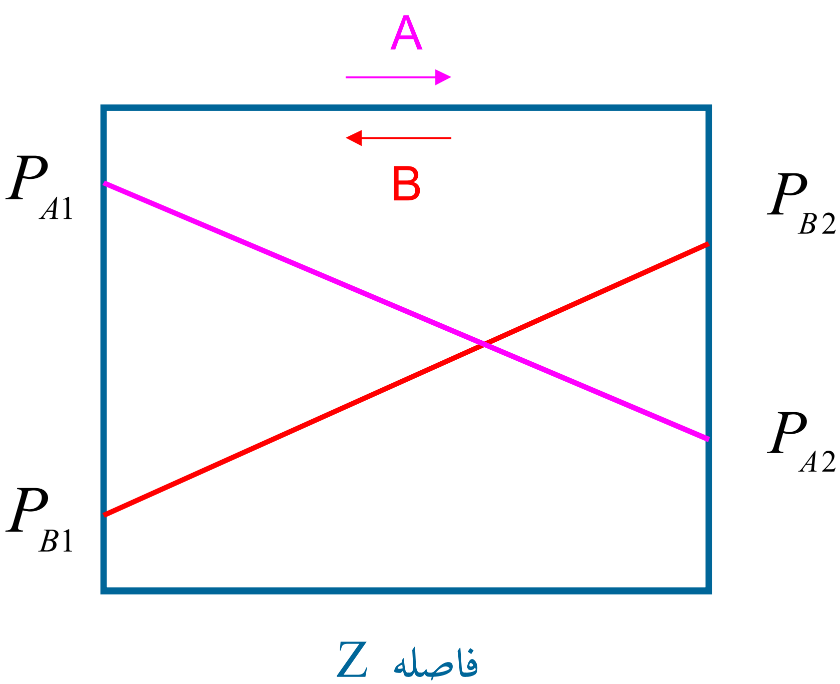
برای گازها:

$$N_{AZ} = \frac{D_{AB}.p}{RTZ}(\frac{p_{A1}}{p} - \frac{p_{A2}}{p}) = \frac{D_{AB}.p}{RTZ}(y_{A1} - y_{A2})$$

برای مایعات:

$$N_{AZ} = \frac{D_{AB} \cdot (\frac{\rho}{m})_{av}}{Z}(x_{A1} - x_{A2})$$

نمودارمربوط به نفوذ متقابل با شدت مولی مساوی :



Mass Transfer: Diffusion

Fick's First Law

Fluxes

$$ {}_{v}J_{AZ} = -D_{AB}\frac{dC_A}{dz} $$ ← **Flux relative to the volume average velocity**

$$ {}_{M}J_{AZ} = -CD_{AB}\frac{dx_A}{dz} $$ ← **Flux relative to the molar average velocity**

$$ {}_{m}J_{AZ} = -\rho D_{AB}\frac{d\omega_A}{dz} $$ ← **Flux relative to the mass average velocity**

Mass and molar concentrations

$$\rho_\alpha = \text{mass concentration of species } \alpha$$

$$\rho = \sum_{\alpha=1}^{N} \rho_a = \text{mass density of solution}$$

$$\omega_\alpha = \rho_\alpha / \rho = \text{mass fraction of species } \alpha$$

$$c_\alpha = \text{molar concentration of species } \alpha$$

$$c = \sum_{\alpha=1}^{N} c_a = \text{molar density of solution}$$

$$x_\alpha = c_\alpha / c = \text{molar fraction of species } \alpha$$

Fick's First Law

Mass average velocity

$$v_m = \frac{\sum_{i=1}^{n} \rho_i v_i}{\sum_{i=1}^{n} \rho_i}$$

Molar average velocity

$$v_M = \frac{\sum_{i=1}^{n} c_i v_i}{\sum_{i=1}^{n} c_i}$$

Volume average velocity

$$v_v = \sum_{i=1}^{n} \rho_i v_i \left(\frac{\overline{v}_i}{M_i}\right)$$

v_i =velocity of the *ith* species wrt a stationary coordinate

Mass average and molar averages velocity

- Mass average velocity

$$v = \frac{\sum_{a=1}^{N} \rho_a v_a}{\sum_{a=1}^{N} \rho_a} = \frac{\sum_{a=1}^{N} \rho_a v_a}{\rho} = \sum_{a=1}^{N} \omega_a v_a$$

- Molar average velocity

$$v^* = \frac{\sum_{a=1}^{N} c_a v_a}{\sum_{a=1}^{N} c_a} = \frac{\sum_{a=1}^{N} c_a v_a}{c} = \sum_{a=1}^{N} x_a v_a$$

Molecular mass and molar fluxes

- Molecular mass flux, with respect to
  - stationary axes

$$n_\alpha = \rho_\alpha v_\alpha$$

  - mass average velocity

$$j_\alpha = \rho_\alpha (v_\alpha - v)$$

  - molar average velocity

$$j_\alpha^* = \rho_\alpha (v_\alpha - v^*)$$

Molecular mass and molar fluxes

- Molecular molar flux, with respect to
  - stationary axes

$$N_\alpha = c_\alpha v_\alpha$$

  - mass average velocity

$$J_\alpha = c_\alpha (v_\alpha - v)$$

  - molar average velocity

$$J_\alpha^* = c_\alpha (v_\alpha - v^*)$$

Summary of mass and molar fluxes

- Equivalent forms of Fick's law of binary diffusion

$$j_A = -\rho D_{AB} \nabla \omega_A$$

$$J_A^* = -c D_{AB} \nabla x_A$$

$$n_A = \omega_A (n_A + n_B) - \rho D_{AB} \nabla \omega_A = \rho_A v - \rho D_{AB} \nabla \omega_A$$

$$N_A = x_A (N_A + N_B) - c D_{AB} \nabla x_A = c_A v^* - c D_{AB} \nabla x_A$$

Maxwell-Stefan equations for Multicomponent diffusion in gases at low pressure

- Maxwell-Stefan equations

$$\nabla x_\alpha = -\sum_{\beta=1}^{N} \frac{x_\alpha x_\beta}{D_{AB}} \left(v_\alpha - v_\beta \right) = -\sum_{\beta=1}^{N} \frac{1}{cD_{AB}} \left(x_\beta N_\alpha - x_\alpha N_\beta \right)$$

$$\alpha = 1,2,3,\ldots..N$$

Flux relative to a stationary coordinate, N_A

For a binary system:

$$N_A = {}_M J_{AZ} + x_A (N_A + N_B)$$

$$N_A = -CD_{AB} \frac{dx_A}{dz} + x_A (N_A + N_B)$$

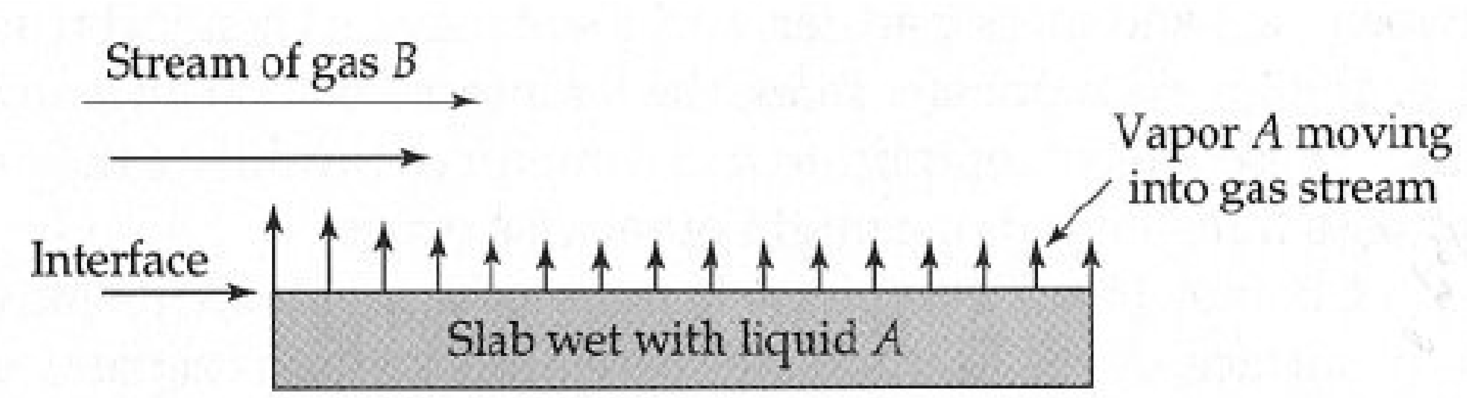
Total flux of A relative to a stationary point

Diffusion flux of A relative to the moving fluid

Convective flux of A relative to a stationary point

Definition of transfer coefficients in one phase. Some examples

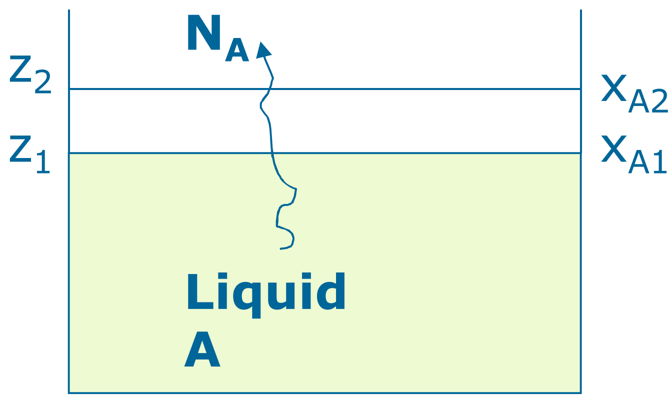
- Mass transfer across a plane boundary, drying of a saturated slab



Diffusion Cases

Unimolar diffusion (Diffusion of A through stagnant , non-diffusing B)

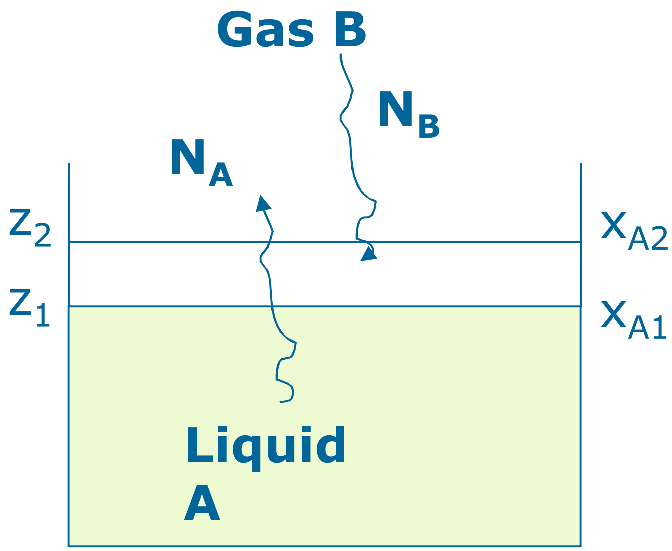
Gas B (stagnant, non-diffusing), N_B = 0



$$N_A = \frac{CD_{AB}}{\Delta z} \ln \frac{1 - x_{A_2}}{1 - x_{A_1}}$$

Diffusion Cases

Equimolar counter diffusion



$$N_A = -N_B$$

$$D_{AB} = D_{BA}$$

$$N_A = -\frac{CD_{AB}}{\Delta z}(x_{A_2} - x_{A_1}) \qquad N_B = +\frac{CD_{BA}}{\Delta z}(x_{B_2} - x_{B_1})$$

Diffusion Cases

Steady-state diffusion

$$N_A \neq N_B \neq 0$$

$$N_A = \frac{CD_{AB}}{\Delta z} \frac{N_A}{N_A + N_B} \ln \frac{\dfrac{N_A}{N_A + N_B} - x_{A_2}}{\dfrac{N_A}{N_A + N_B} - x_{A_1}}$$

Diffusion IN Gases

Case I: Unimolar diffusion

$$N_A = \frac{CD_{AB}}{\Delta z} \ln \frac{1-x_{A_2}}{1-x_{A_1}}$$

But **C = P_T/RT**

$$N_A = \frac{P_T D_{AB}}{RT\Delta z} \ln \frac{1-x_{A_2}}{1-x_{A_1}}$$

Diffusion IN Gases

Case II: Equimolar counter diffusion

$$N_A = -\frac{CD_{AB}}{\Delta z}\left(x_{A_2} - x_{A_1}\right)$$

But **$C = P_T/RT$**

$$N_A = -\frac{P_T D_{AB}}{RT\Delta z}\left(x_{A_2} - x_{A_1}\right)$$

Diffusion Coefficients of A IN Gas (B)

I. Experimental diffusivity data

Table 6.2-1 (Geankoplis)

II. Prediction using correlation

Correction of D_{AB}

$$\frac{D'_{AB}P'}{T'^{1.75}} = \frac{D''_{AB}P''}{T''^{1.75}}$$

Diffusion Coefficients of A IN Gas (B)

Fuller-Schettler-Giddings Correlation

$$D_{AB} = \frac{0.001T^{1.75}\left(\dfrac{1}{M_A} + \dfrac{1}{M_B}\right)^{1/2}}{P\left[\left(\sum v_A\right)^{1/3} + \left(\sum v_B\right)^{1/3}\right]^2}$$

Σv_A = sum of structural volume increments (Table 6.2-2)

M_A, M_B = molecular weights of A and B

D_{AB} [=] cm^2/s

# of Diffusivities

- For gas mixtures at low pressure (kinetic theory)

$$\frac{pD_{AB}}{(p_{cA}p_{cB})^{1/3}(T_{cA}T_{cB})^{5/12}(1/M_A+1/M_B)^{1/2}} = a\left(\frac{T}{\sqrt{T_{cA}T_{cB}}}\right)^b$$

- Diffusivities
  - are inversely proportional to the pressure
  - increases with increasing temperature
  - almost independent of composition

Theory of diffusion in gases at low density

- Self diffusivity

$$D_{AA^*} = \frac{2}{3\pi} \frac{\sqrt{\pi m_A \kappa T}}{\pi d_A^2} \frac{1}{\rho}$$

- For binary mixtures

$$D_{AB} = \frac{2}{3}\sqrt{\frac{\kappa T}{\pi}}\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{m_A}+\frac{1}{m_B}\right)} \cdot \frac{1}{\pi[0.5(d_A + d_B)]^2} \cdot \frac{1}{n}$$

Chapman-Enskog

$$cD_{AB} = \frac{3}{16}\sqrt{\frac{2RT}{\pi}\left(\frac{1}{M_A}+\frac{1}{M_B}\right)} \cdot \frac{1}{\tilde{N}\sigma_{AB}^2\Omega_{D,AB}}$$

Homework

1. Evaluate the diffusion coefficient of CO_2 in air at 20 °C and atmospheric pressure. Compare the value with the reported experimental data.

2. An open circular tank 8 m in diameter contains benzene at 22°C exposed to the atmosphere in such a manner that the liquid is covered with stagnant air film estimated to be 5 mm thick. The concentration of benzene beyond the stagnant film is negligible. The vapor pressure of benzene at 22 °C is 100 mmHg. How much benzene is lost from this tank per day?

Diffusion in Liquids

Case I: Unimolar diffusion

$$N_A = \frac{C_{AV} D_{AB}}{\Delta z} \ln \frac{1 - x_{A_2}}{1 - x_{A_1}}$$

Case II: Equimolar counter diffusion

$$N_A = -\frac{C_{AV} D_{AB}}{\Delta z} \left(x_{A_2} - x_{A_1} \right)$$

where $$C_{AV} = \left(\frac{\rho}{M} \right)_{AV} = \frac{\frac{\rho_1}{M_1} + \frac{\rho_2}{M_2}}{2}$$

Diffusion Coefficients of A in Liquids

I. Experimental diffusivity data

Table 6.3-1 (Geankoplis)

II. Prediction using correlation

Correction of D_{AB}

$$\frac{D'_{AB}\mu'}{T'} = \frac{D''\mu''}{T''}$$

Diffusion Coefficients of A in Liquids

Wilke-Chang Correlation

$$D_{AB} = 1.173x10^{-16}(\varphi\, M_B)^{1/2}\frac{T}{\mu_B V_A^{0.6}}$$

φ = association parameter

M_B = molecular weights of solvent B

D_{AB} [=] m^2/s

V_A = solute molar volume at the boiling point (Table 6.3-2)

μ_B = viscosity of B [=] Pa-s or kg/m-s

Diffusion in Solids

Case I: Fickian Diffusion

(No network f pore openings is present for the solid to travel)

Assumption: bulk flow term is small

General equation for gas/liquid diffusing in solid

$$N_A = -D_{AB}\frac{C_{A2} - C_{A1}}{\Delta z}$$

Diffusion in Solids

For Gases in Solids:

$$C_A = S\frac{m^3\ \cancel{\text{solute at STP }(0^\circ C\ \&\ 1\text{ atm})}}{m^3\ \text{solid - }\cancel{\text{atm partial P of A}}} * P_A(\cancel{atm}) * \frac{kgmole\ \text{A}}{22.414\ \ \cancel{\text{m}^3\ \text{solute at STP}}}$$

$$C_A = \frac{S * P_A}{22.414}\frac{kgmole\ \text{A}}{m^3\ \text{solid}}$$

$$C_A = \frac{S * P_A}{22.414}\frac{gmole\ \text{A}}{cm^3\ \text{solid}}$$

Diffusion in Solids

For Gases in Solids:

$$N_A = -\frac{D_{AB} S}{22.414\,\Delta z}(P_{A2} - P_{A1})$$

In terms of permeability : $P_M = D_{AB}\,S$

$$N_A = -\frac{P_M}{22.414\,\Delta Z}(P_{A2} - P_{A1})$$

Diffusion in Solids

Case II: Non-Fickian Diffusion

(Porous solids that have pores or interconnected voids in the solid)

General equation for gas/liquid diffusing in solid

$$N_A = -\frac{\varepsilon\, D_{AB}}{\tau\, \Delta z}(C_{A2} - C_{A1})$$

τ = tortuosity (actual path length)

ε = porosity (open void fraction)

$D_{Aeff} = \varepsilon\, D_{AB} / \tau$ [=] m^2/s

Diffusion in Solids

Case III: Knudsen Diffusion

(Diffusion in small pores , mean free path,λ, > diameter)

λ= average distance traveled by 2 molecules before collision

$$\lambda = \frac{3.2\mu}{P}\sqrt{\frac{RT}{2\pi M}}$$

Knudsen number:

$$N_{Kn} = \frac{\lambda}{2\bar{r}}$$

Average pore radius

Diffusion in Solids

Case 1: $N_{Kn} \leq \frac{1}{100}$ **Fickian (Fick's Law)**

Case 2: $N_{Kn} \geq 10$ **Knudsen diffusion**

Knudsen diffusivity

$$D_{KA} = 97.0\bar{r}\left(\frac{T}{M_A}\right)^{1/2}$$

$$N_A = -D_{KA}\frac{dC_A}{dz}$$

Diffusion in Solids

Case 3: $\frac{1}{100} < N_{Kn} < 10$ **Transition region (both Fickian and Knudsen)**

$$N_A = \frac{D_{AB} P_T}{\alpha \, RT \, \Delta z} \ln \frac{1 - \alpha \, x_{A2} + \frac{D_{AB}}{D_{KA}}}{1 - \alpha \, x_{A1} + \frac{D_{AB}}{D_{KA}}}$$

where $$\alpha = 1 + \frac{N_A}{N_B}$$

Example :

Calculate the binary diffusion coefficients of water vapor in air at 298.15 K and 1 atm.

Solution

The following parameters are given in standard references:

Air: $M_{Air} = 28.97$, $\sigma_{Air} = 3.62$ Å, $(\varepsilon_{Air}/k) = 97$ K

Water vapor: $M_{water} = 18.02$, $\sigma_{water} = 2.65$ Å, $(\varepsilon_{water}/k) = 356$ K

$$\sigma_{AB} = (3.62 + 2.65)/2 = 3.14$$

$$\varepsilon_{AB}/k = \sqrt{(97)(356)} = 185.8$$

$$T_D^* = (298.15)/(185.8) = 1.604$$

$$D_{AB} = \frac{1.858 \times 10^{-7}\, T^{3/2}\, (1/M_A + 1/M_B)^{1/2}}{(P/101325)\, \sigma_{AB}^2\, \Omega\, (T_D^*)} \quad [\mathrm{m^2\, s^{-1}}]$$

$$\sigma_{AB} = (\sigma_A + \sigma_B)/2$$

$$k/\varepsilon_{AB} = \sqrt{(k/\varepsilon_A)(k/\varepsilon_B)}$$

$$T_D^* = kT/\varepsilon_{AB}$$

$$D_{AB} = \frac{1.858 \times 10^{-7}(298.15)^{1.5}\sqrt{1/(28.97) + 1/(18.02)}}{(101325/101325)(3.14)^2(1.167)} = 2.50 \times 10^{-5}\,\mathrm{m}^2\,\mathrm{s}^{-1}$$

Mass Transfer Coefficients

(*Rate of mass transfer*) = (*Mass transfer coefficient*)(*Concentration driving force*)