

Диффузионный перенос массы часто является основным содержанием процесса (испарения жидкости, смешения и разделения газов). В случае химических процессов, протекающих в промежуточных или диффузионных областях, кинетика диффузионного переноса массы частично или полностью определяет скорость процесса. Изучение диффузии в газовой или парогазовой фазах является одним из путей исследования сил взаимодействия между молекулами. Совершенствование существующих и создание новых процессов химической технологии предусматривает знание характеристик молекулярного переноса массы в газовой фазе, в том числе и знание коэффициентов взаимной диффузии, так как КВД входят в уравнения для расчета многочисленных процессов и аппаратов современной химической технологии, нанотехнологии [1,2].

Справочная литература содержит ограниченные сведения по значениям КВД, особенно в условиях повышенных давлений и температур. Описано много различных методов для замеров коэффициентов взаимной диффузии газов и паров различных органических соединений. Однако, при проведении экспериментов большинство из этих методов требует больших затрат времени. На основании последних достижений в теории хроматографии для быстрого и достаточно точного определения КВД нами выбран хроматографический метод. В настоящей работе приводятся результаты экспериментального определения коэффициентов взаимной диффузии и теоретически рассчитанных по методу Энско-Торна. Теоретические значения коэффициентов взаимной диффузии сравнены с экспериментальными данными. Сравнение показывает, что расчет этим методом в исследуемом диапазоне давлений и температур для изучаемых веществ получается приемлемым. Коэффициенты взаимной диффузии (КВД) паров жидкостей в гелий определяли хроматографическим методом 2 на газовом хроматографе Цвет-129 с ионизационно-пламенным детектором. Колонка прибора выполнена из нержавеющей стали с внутренним диаметром 3 мм и длиной 289 см. Скорость газо-носителя устанавливалась в пределах 0,2-0,5 см/сек. Жидкость объемом порядка $8 \cdot 10^{-2}$ - $10 \cdot 10^{-2}$ мкл вводилась непосредственно в колонку микрошприцем. При замерах под давлением на выходе из колонки устанавливали постоянный дроссель-трубку. Дифференциальное уравнение, описывающее изменения концентрации вещества, при времени порядка, в потоке имеет вид 2-4. = (1) Эффективный коэффициент диффузии связан с коэффициентом взаимной диффузии уравнением [2], [4]. (2) В уравнениях 1 и 2 с – концентрация; t - время; U - средняя скорость по поперечному сечению трубки; d - внутренний диаметр трубки. В работе [7] приведено решение уравнения (1), которое с учетом линейного диапазона чувствительности детектора имеет вид: (3) где h - высота хроматографического пика; A – постоянная; L - длина хроматографической колонки. Эффективный коэффициент диффузии определяли по уравнению (3), используя метод наименьших квадратов. Значения h и L снимали в 5-12 точках переднего профиля хроматографического

пика. Современные теоретические методы позволяют с хорошей точностью рассчитать коэффициенты взаимной диффузии бинарных смесей, что значительно легче и проще чем экспериментальное их измерение. Расчет КВД производился по выражению, предлагаемому теорией Энского для плотных газов, которую Торн [3] распространил на случай бинарных газовых смесей. КВД для сжатых газовых смесей связан с его величиной при атмосферном давлении выражением: (4) где $s_{12} = (s_1 + s_2)/2$; D_0 - коэффициент взаимной диффузии при нормальном давлении; p – давление; z коэффициент сжимаемости газовой смеси; s_1 и s_2 - диаметры молекул (идеализированы в виде твердых сфер) диффундирующих газов; n_1 и n_2 - плотности числа молекул газов. Исследуемые газы до давления 1,0 МПа ведут себя как идеальные, в чем можно убедиться на основе значений коэффициентов сжимаемости этих газов [3]. Следовательно, плотность числа молекул можно рассчитать по законам идеальных газов. В таблице 1 представлены экспериментальные значения КВД для системы пентан-гелий, также в этой таблице дано сравнение экспериментальных данных с теоретическими. В исследовании использовались пентан марки «Ч» и гелий марки «ВЧ».

Таблица 1 - Экспериментальные значения коэффициентов взаимной диффузии (см²/сек) для системы пентан – гелий и сравнение их с расчетными, определенными по теории Энскога-Торна

T, K	P, МПа	Δ, %	0,100	0,4000	±0,0144	0,4526	13,2	0,206	0,1901	±0,0034	0,2192	15,3	0,445	0,0900	±0,0040
353,5	0,100	0,4000	0,0995	10,5	0,446	0,08875	±0,00222	0,09923	11,8	0,609	0,06727	±0,00242	0,07203	7,1	0,706
353,5	0,4000	0,0900	0,05874	±0,00164	0,06181	5,2	0,794	0,06240	±0,00293	0,05470	12,3	0,956	0,04439	±0,00199	0,04504
353,5	1,46	1,04	0,03847	±0,00242	0,04121	7,12	391,6	0,100	0,4700	±0,0075	0,5333	13,5	0,183	0,2512	±0,0085
391,6	0,100	0,4000	0,2888	15,0	0,225	0,2090	±0,0056	0,2339	11,9	0,359	0,1283	±0,0076	0,1445	12,6	0,447
391,6	0,4000	0,0900	0,1074	±0,0029	0,1140	7,0	0,584	0,08191	±0,00459	0,08661	5,7	0,794	0,06343	±0,00121	0,06214
391,6	1,46	1,04	0,05142	±0,00108	0,05147	0,0	391,6	0,100	0,5301	±0,0138	0,6117	15,4	0,168	0,4734	±0,0090
391,6	0,4000	0,0900	0,5660	19,6	0,296	0,1812	±0,0034	0,2032	12,1	0,402	0,1343	±0,0052	0,1482	10,3	0,578
391,6	1,46	1,04	0,09546	±0,00497	0,1015	6,3	0,706	0,07980	±0,00223	0,08209	2,9	0,995	0,05773	±0,00352	0,05666

Приведенное сравнение показывает, что расчет коэффициентов взаимной диффузии методом Энскога-Торна в исследуемом диапазоне давлений и температур для изучаемых систем получается приемлемым для инженерных расчетов.