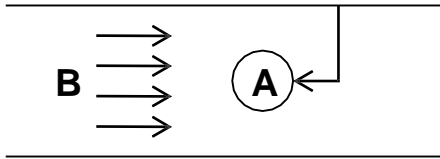


## ➤ Damlaların (Habbelerin) Buharlaştırılması Yöntemi

Bu metodun uygulanabilmesi için bileşenlerden birisinin deney sıcaklığında sıvı veya süblimleşebilen katı olması gerekir. Benzen, Toluen gibi bir çok organik sıvı ile naftalin, iyot gibi süblimleşen katıların moleküler yayınma katsayıları bulunabilir. Oluşturulan küresel katı veya sıvının bir tele asılarak tamamen buharlaşması için geçen süreden bulunur. Yayınma mekanizması A bileşeninin B durgun bileşeni içinde yayınması şeklinde gerçekleşmektedir.



$$\begin{aligned} \text{Küre alanı} &= 2\pi r^2 \\ \text{Küre hacmi} &= \frac{4}{3}\pi r^3 \end{aligned}$$

$$\text{A bileşeninin buharlaşma akısı} = N_A = -\frac{\rho_A}{M_A} \frac{1}{A} \frac{\partial V}{\partial t}$$

(zamanla damlanın boyutu azaldığından – işareti konmuştur.)

$$-\frac{\rho_A}{M_A} \frac{\partial r}{\partial t} = \frac{D_{AB}P}{RTr(P_B)_{LM}} (P_{A0} - P_{AL}) \quad (\text{eşitliğinden } (P_{AL}=0) \text{ alınır})$$

$$D_{AB} = \frac{\rho_A \times r_0^2 \times R \times T}{2 \times M_A \times t \times P \times \ln \left[ \frac{P}{P - P_{A0}} \right]}$$

Elde edilir. Burada  $r_0$  kürenin başlangıçtaki yarı çapı,  $t$  ise küre şeklindeki damlanın tamamen buharlaşması için geçen süredir.

## Teorik Tahmin Yöntemleri

### ➤ Kinetik Teori Yardımıyla Tahmin

- Gaz moleküllerini rigid , birbirleriyle çarpışmaları esnek olan küreler olarak kabul edilir.
- Moleküller aralarındaki çekme ve itme kuvvetleri ihmal edilir.
- A ve B moleküllerin Kütleleri birbirine eşit olarak kabul edilir.

Yukarıdaki kabullenmeler göz önüne alınarak kinetik teori yardımıyla iki bileşenli gaz sistemlere ait moleküler difüzyon katsayısı aşağıdaki bağıntılar yardımıyla yaklaşık olarak hesaplanabilmektedir.

$$D_{AB} = \frac{1}{3} V_{\text{ort}} \lambda \quad \text{veya} \quad D_{AB} = \frac{2}{3} \left( \frac{k^3}{\pi^3} \right)^{1/2} \frac{T^{3/2}}{M_A^{1/2} P d_A^2}$$

Burada  $V_{\text{ort}}$  moleküllerin ortalama hızı,  $\lambda$  moleküllerin ortalama serbest yolu,  $k$  Boltzmann sabiti,  $M_A$  A bileşeninin mol tartısı,  $d_A$  ise A bileşenin molekül çapıdır.

## Teorik Tahmin Yöntemleri

### ➤ Chapman – Enskog Teorisi Yardımıyla

Gazların kinetik teorisinden gidilerek elde edilen bu teori yardımıyla Moleküler arası çekme ve itme kuvvetleri ile moleküllerin çaplarının birbirinden farklı olabileceğini de göz önüne alınarak iki bileşenli gaz sistemlerine ait moleküler difüzyon katsayısı aşağıdaki bağıntı yardımıyla hesaplanabilmektedir.

$$D_{AB} = 1,858 \times 10^{-3} T^{3/2} \frac{\left( \frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{1/2}}{P \sigma_{AB}^2 \Omega_{D,AB}}$$

Burada

$\sigma_{AB}$  = Lennard – Jones Potansiyel parametresi, °A

(Karakteristik uzunluk, her iki molekülün çaplarının aritmetik ortalaması.)

$\Omega_{D,AB}$  = Difüzyon esnasında meydana gelen çarpışmaların bir integrali ve  $k.T/\varepsilon_{AB}$  nin fonksiyonudur. Boyutsuzdur.

$\varepsilon_{AB}$  = Moleküller arası etkileşim enerjisidir. [erg]

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

$$\sigma_{AB} = \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2}$$

## Yarı Teorik (Ampirik) Tahmin Yöntemleri

### ➤ Fuller – Schettler – Gidding Bağıntısı

yükseklikteki sıcaklıklarda polar olmayan gaz çiftleri ile, biri polar diğeri polar olmayan gaz çiftleri için Deneysel olarak bulunmuş bir çok moleküler difüzyon katsayıları kullanılarak elde edilmiştir. Bu bağıntı orta kullanılır.

$$D_{AB} = 1 \times 10^{-3} \times T^{1.75} \frac{\left( \frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{1/2}}{P \times \left[ (\Sigma V_A)^{1/3} + (\Sigma V_B)^{1/3} \right]^2}$$

Burada  $D_{AB}$  moleküler difüzyon katsayısı [ $\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ ],  $P$  Basınç [atm],  $T$  mutlak sıcaklık [K],  $\Sigma V$  atomik hacmi [ $\text{cm}^3 \text{g-mol}^{-1}$ ]. göstermektedir

## Yarı Teorik (Ampirik) Tahmin Yöntemleri

### ➤ Gilliland Bağıntısı

İki bileşenli gaz sistemlerinde moleküler difüzyon katsayılarının hesaplanmasında kullanılan bu bağıntıda ise, difüzyon hacim birimleri yerine daha kullanışlı bir değişken olan gazların kaynama noktalarındaki molar hacimler kullanılmıştır.

$$D_{AB} = 4.3 \times 10^{-3} \times T^{3/2} \frac{\left( \frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{1/2}}{P \times \left[ (V_{b,A})^{1/3} + (V_{b,B})^{1/3} \right]^2}$$

şeklindedir. Burada  $D_{AB}$  moleküler difüzyon katsayısı [ $\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ ],  $P$  Basınç [atm],  $T$  sıcaklık [K],  $V_b$  normal kaynama noktasındaki molar hacim [ $\text{cm}^3 \text{gmol}^{-1}$ ].

## Yarı Teorik (Ampirik) Tahmin Yöntemleri

**Örnek:** Bütanol (A), hava (B) içerisinde 1 atmosfer basınç ve 25,9 °C sıcaklıkta difüzyonlanmaktadır. Bu ikili gaz sistemine ait difüzyon katsayısı verilen şartlarda deneysel olarak  $0.087 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$  olarak ölçülmüştür. Aşağıdaki verileri kullanarak bu ikili gaz sistemine ait difüzyon katsayısını;

- a.) Chapman-Enskog ,
- b.) Fuller-Schettler-Giddings,
- c.) Gilliland,
- d.) Chen-Othmer

bağıntılarını kullanarak hesaplayınız. Deneysel ve Teorik sonuçları karşılaştırınız.

### **Bütanol (A)**

$$M_A=74.1 \text{ [g gmol}^{-1}\text{]}$$

$$T_{b,A}=117 \text{ [}^\circ\text{C]}$$

$$T_{c,A}= 289 \text{ [}^\circ\text{C]}$$

$$V_{c,A}=294,5 \text{ [cm}^3 \text{ gmol}^{-1}\text{]}$$

### **Hava (B)**

$$M_B=29 \text{ [g gmol}^{-1}\text{]}$$

$$\sigma_B=3.711 \text{ [Å]}$$

$$T_{c,B}= -140,5 \text{ [}^\circ\text{C]}$$

$$\varepsilon_B/k=78.6 \text{ [K]}$$

$$V_{b,B}=29.9 \text{ [cm}^3 \text{ gmol}^{-1}\text{]}$$

$$\Sigma V_B=20.1 \text{ [cm}^3 \text{ gmol}^{-1}\text{]}$$

$$V_{c,B}=90,52 \text{ [cm}^3 \text{ gmol}^{-1}\text{]}$$

## Yarı Teorik (Ampirik) Tahmin Yöntemleri

### NKN\* atomik Hacimler [cm<sup>3</sup> gmol<sup>-1</sup>]

C için NKN atomik hacim	14.8
H için NKN atomik hacim	3.7
O için NKN atomik hacim	7.4

### Atomik Difüzyon Hacimler [cm<sup>3</sup> gmol<sup>-1</sup>]

C için Atomik Difüzyon Hacmi	16.50
H için Atomik Difüzyon Hacmi	1.98
O için Atomik Difüzyon Hacmi	5.48

\*Normal Kaynama Noktasındaki

### Neufeld $\Omega_{AB}$ parametreleri

A = 1,06036	E = 1,03587
B = 0,15610	F = 1,52966
C = 0,19300	G = 1,76474
D = 0,47635	H = 3,98411

### Lennard-Jones Potansiyellerinden elde edilen çarpışma integrallerinin değeri

$T^* = k T / \epsilon_{AB}$	$\Omega_{D,AB}$	$T^* = k T / \epsilon_{AB}$	$\Omega_{D,AB}$
1.40	1.233	1.60	1.167
1.45	1.215	1.65	1.153
1.50	1.198	1.70	1.140
1.55	1.182	1.75	1.128

### Cevap

Bağıntı	$D_{AB}$ [cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]	% Hata
Chapman-Enskog	0.0831	4.83
Fuller ve Ç.A.	0.0902	-3.68
Gilliand	0.0800	8.75
Chen-Othmer	0,0825	5,17