



DETERMINACIÓN DE DIFUSIVIDAD EFECTIVA MEDIANTE DIFUSIÓN TRANSITORIA EN MEDIO SEMIINFINITO

OBJETIVO

Medir experimentalmente el coeficiente de difusión de un colorante orgánico en un gel.

ANTECEDENTES

La transferencia de masa en un medio semi-infinito tiene importancia en Ingeniería Química desde el punto de vista práctico. Ya que los procesos de difusión en líquidos y sólidos son relativamente lentos, la sustancia que se difunde sólo alcanza a penetrar una distancia corta en el medio. Por este motivo, se puede considerar que el medio se extiende infinitamente más allá de la interfase.

En este experimento, un gel constituye el medio semi-infinito donde se difunde el soluto (un colorante orgánico). En $t = 0$, la superficie del gel (interfase) se expone a una concentración fija del colorante, y éste comienza a difundirse hacia dentro del gel. La concentración de colorante es función de la posición y del tiempo, $C_A(x, t)$. A medida que transcurre el tiempo, aumenta la cantidad total de colorante $W(t)$ que ha entrado en el gel, y la rapidez con que lo hace depende de la difusividad.

La medición de la cantidad total de soluto que se ha difundido en el medio es un proceso destructivo, ya que se tiene que fundir el gel y homogeneizarlo. Por esta razón, se trabaja con varias muestras; cada una corresponderá a un valor diferente de t .

MODELO MATEMÁTICO

Ecuación diferencial	$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \mathcal{D}_A \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2}$
Condiciones de frontera	$C_A = C_0 \quad \text{para } x \leq 0 \text{ y } t > 0$ $C_A = 0 \quad \text{para } x = \infty \text{ y } t > 0$
Condición inicial	$C_A = 0 \quad \text{para } t \leq 0 \text{ y todo } x$

La solución de esta ecuación diferencial se obtiene por el método de combinación de variables. Si se definen las variables adimensionales:

$$\eta = \frac{x}{\sqrt{4\mathcal{D}_A t}} \quad \text{y} \quad \psi = \frac{C_A(x, t)}{C_0}$$

el modelo se transforma en:



Ecuación diferencial	$\frac{d^2\psi}{d\eta^2} + 2\eta \frac{d\psi}{d\eta} = 0$
Condiciones de frontera	$\begin{aligned} \psi &= 1 && \text{para } \eta = 0 \\ \psi &= 0 && \text{para } \eta = \infty \end{aligned}$

La solución a esta ecuación diferencial es

$$\psi = 1 - \operatorname{erf}(\eta) \quad \text{o bien} \quad \frac{C_A(x,t)}{C_0} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{4\mathcal{D}_A t}}\right)$$

donde $\operatorname{erf}(\)$ es la función error.

La cantidad total de soluto que ha entrado al medio se puede obtener integrando el perfil de concentraciones:

$$W(t) = A \int_0^\infty C_A(x,t) dx$$

donde A es el área de la sección transversal (constante) que está siendo cruzada por el soluto. Efectuando la integración se tiene que:

$$W(t) = AC_0 \sqrt{\frac{4\mathcal{D}_A t}{\pi}}$$

Elevando al cuadrado esta ecuación, se tiene que

$$W^2 = \frac{4\mathcal{D}_A A^2 C_0^2}{\pi} t$$

por lo que una gráfica de W^2 contra t debe ser una línea recta de cuya pendiente se puede calcular el coeficiente de difusión \mathcal{D}_A .

EQUIPO Y REACTIVOS

(lista no necesariamente exhaustiva)

- Espectrofotómetro o fotómetro de filtros
- 8 tubos de ensaye con tapa roscada
- 10 tubos de ensaye
- 2 matraces volumétricos de 50 ml
- Gradilla
- Pipeta volumétrica de 10 ml
- Pipeta de 10 ml



- Grenetina
- Agua destilada
- Colorante vegetal para alimentos
- Hielo

RIESGOS ADICIONALES DE SEGURIDAD

Ninguno en particular.

MANEJO DE RESIDUOS

No se generan residuos peligrosos. Para descartar el gel empleado, se calienta para fundirlo, se diluye con agua, y se elimina por el drenaje.

PROCEDIMIENTO

1. Preparar una solución stock del colorante diluyendo 4 gotas del colorante concentrado en 50 ml de agua destilada. Llamar a la concentración de esta solución $C_s = 1$.
2. Preparar una solución patrón para la curva de calibración, transfiriendo exactamente 10.0 ml de esta solución a otro matraz volumétrico y aforando a 50 ml.
3. Determinar la longitud de onda en el espectrofotómetro a la cual la absorbancia de la solución patrón sea máxima (usar agua destilada como blanco). Esta longitud de onda se utilizará para la curva de calibración y para leer todas las muestras.
4. Usando esta solución patrón, preparar una serie de diluciones de acuerdo a la siguiente tabla.

Tubo	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Solución patrón (ml)	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0	4.5	5.0
Agua destilada (ml)	4.5	4.0	3.5	3.0	2.5	2.0	1.5	1.0	0.5	0.0

5. Leer la absorbancia de cada una de las diluciones para la curva de calibración.
6. Preparar 50 ml de solución de grenetina al 4%. La grenetina en polvo debe agregarse al agua y dejarse hidratar por unos minutos, para luego calentar suavemente para que se funda y se forme una solución homogénea.
7. Etiquetar los tubos con tapa como 0, 0.5, 1, 2, 3, 4, 5 y 6.
8. Agregar 5 ml de la solución de grenetina a cada uno de los 8 tubos con tapa y colocar verticalmente en una charola con hielo para que se solidifique la grenetina.
9. Una vez solidificado el gel, agregar 4 ml de solución stock a cada uno de los tubos excepto el tubo 0 (nótese que $C_0 = C_s = 1$). Registrar la hora.
10. Mantener los tubos en refrigeración o en agua con hielo.



11. Cada 24 horas (12 para el tubo 0.5) se vacía el líquido colorante del tubo correspondiente y se enjuaga cuidadosamente, sin dañar el gel. El colorante que se ha alcanzado a difundir en el gel quedará atrapado. Registrar la hora a la que se enjuagó el tubo.
12. Cuando se hayan enjuagado todos los tubos, calentarlos suavemente a baño maría para fundir el gel y leer la absorbancia usando el contenido del tubo 0 como blanco.

CÁLCULOS Y OBSERVACIONES

Reportar la absorbancia de las diluciones para calibración y la gráfica de calibración (concentración contra absorbancia) con su regresión correspondiente.

Reportar las absorbancias de las muestras y su correspondiente concentración.

Graficar W^2 contra t con su correspondiente regresión, y detallar los cálculos para determinar \mathcal{D}_A .

Con el valor calculado de \mathcal{D}_A , predecir la cantidad total de colorante difundido de acuerdo al modelo, en función del tiempo, y graficar junto con los datos experimentales de W . Al graficar, usar símbolos sin línea para los datos experimentales y una línea para el modelo.

Comentar esta última gráfica, indicando si hay concordancia entre el modelo y los datos experimentales. En caso contrario, proponer posibles explicaciones para las desviaciones.