



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 una gran importancia 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 masa 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	$C_A = C_0$ para $x \leq 0$ y $t > 0$
	$C_A = 0$ para $x = \infty$ y $t > 0$
Condición inicial	$C_A = 0$ para $t \leq 0$ y todo x

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

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

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	$\psi = 1$ para $\eta = 0$
	$\psi = 0$ para $\eta = \infty$



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 masa 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. Sustituyendo el perfil de concentraciones y 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 debería ser una línea recta que pase por el origen. De la pendiente de esta recta se puede calcular el coeficiente de difusión \mathcal{D}_A .

MATERIALES Y REACTIVOS

(lista no necesariamente exhaustiva)

- 6 tubos de ensaye con tapa roscada (importante: todos deben ser de la misma medida)
- Gradilla
- 1 vaso de precipitado de 100 mL
- 2 pipetas de 5 mL
- Soporte universal con anillo, tela de asbesto, y mechero Bunsen
- Espectrofotómetro o fotómetro de filtros
- Solución de colorante vegetal para alimentos (de concentración conocida C_0)
- Grenetina
- Agua destilada
- Hielo

RIESGOS ADICIONALES DE SEGURIDAD

Ninguno. Todas las sustancias empleadas son inocuas.



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 patrón para la curva de calibración, transfiriendo exactamente 10.0 mL de la solución de colorante a un matraz volumétrico y aforando a 50 mL.
2. 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.
3. 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

4. Leer la absorbancia de cada una de las diluciones para la curva de calibración.
5. Preparar 50 mL de solución de grenetina al 4% peso. 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.
6. Numerar los tubos con tapa roscada del 0 al 5.
7. Agregar 6 mL de la solución de grenetina a cada uno de los 6 tubos con tapa y colocar verticalmente en una charola con hielo para que se solidifique la grenetina.
8. Una vez solidificado el gel, agregar 3 mL de solución stock a cada uno de los tubos excepto el tubo 0. Registrar la hora.
9. Mantener los tubos en refrigeración o en agua con hielo.
10. Cada 6 horas (aproximadamente, ver sugerencias más adelante) se vacía el líquido colorante de uno de los tubos y se enjuaga cuidadosamente, sin dañar el gel. El colorante que se ha alcanzado a difundir en el gel quedará atrapado. Registrar el tiempo que ha transcurrido desde que se agregó la solución colorante hasta el momento en que se enjuagó el tubo.
11. 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.

SUGERENCIAS PARA EL ÉXITO DE LA PRÁCTICA

- No es tan importante cada cuánto tiempo se enjuaguen los tubos, pero sí es importante saber con exactitud el tiempo que ha permanecido la solución colorante en contacto con el gel.



- Un dato necesario para los cálculos será el área de la sección transversal de los tubos. ¿Cómo se puede medir con exactitud?
- Una fotografía digital de los tubos inmediatamente después de agregarles la solución colorante y otra una vez enjuagados todos los tubos, son ilustrativas para el reporte.

CÁLCULOS

Con las absorbancias medidas de las muestras y la curva de calibración calcular la concentración de colorante en el gel. De esta concentración, y el volumen del gel se puede determinar la cantidad total de colorante que se ha difundido en el gel (W). Graficar W^2 contra t y aplicar una regresión lineal con intercepción cero. Determinar \mathcal{D}_A a partir de la pendiente de la regresión. **Reportar el valor de \mathcal{D}_A en cm^2/s .**

EVIDENCIAS ENTREGABLES

El reporte de la práctica puede ser elaborado en computadora, sí requiere portada y sólo se entrega un ejemplar por equipo. Estas hojas de instrucciones deben incluirse a continuación de la portada. Luego, incluir una breve investigación bibliográfica relevante a la práctica (aproximadamente dos páginas), la gráfica de calibración, una tabla con las absorbancias de las muestras y su respectiva concentración, la gráfica de W^2 en función de t , con su correspondiente regresión lineal, los cálculos detallados de para obtener \mathcal{D}_A (en cm^2/s) a partir de la pendiente de la regresión, y una conclusión individual de la práctica por cada integrante del equipo. Una vez revisado, su reporte deberá ser fotocopiado para que cada integrante tenga un ejemplar para su portafolio de evidencias.

EL REPORTE DE ESTA PRÁCTICA ES EVIDENCIA PARA LA UNIDAD 4