

## ارائه مدل جدید برای محاسبه ضریب نفوذ برخی گازها در آب

افشین همتا، احمد رهبر کلیشمی\*

دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران، نارمک، تهران

دریافت: ۹۳/۲/۱۵ پذیرش: ۹۴/۲/۲

### چکیده

ضریب نفوذ مهم‌ترین پارامتر موثر در انتقال جرم می‌باشد. برای طراحی عملیات انتقال جرم دانستن ضرایب نفوذ بسیار اهمیت دارد. خصوصیات فیزیکی حلال و حل‌شونده خصوصیتی است که با کم‌ترین هزینه در اختیار می‌باشد؛ بنابراین مدل‌سازی انجام شده، بر اساس رابطه Wilke\_Chang که همراه با اصلاحاتی تجربی بوده، شعاع مولکول حل‌شونده (R) و پارامتر  $\xi$  اضافه شده است. با توجه به اهمیت پیش‌بینی ضریب نفوذ  $CO_2$  در آب، اصلاحات تجربی، با تمرکز بر نفوذ  $CO_2$  در آب صورت گرفت. نتایج نشان می‌دهد که برای نفوذ گازهای  $CO_2$ ،  $O_2$  و  $N_2$ ، رابطه ویک چنگ به طور متوسط ۹٪ و رابطه ارائه شده در این تحقیق ۳/۸٪ خطا دارد؛ همچنین رابطه ویک چنگ برای نفوذ  $CO_2$  در آب دارای ۶/۵٪ خطا بوده در حالی که رابطه ارائه شده، این میزان خطا را به ۲/۷٪ کاهش داده است. تحقیق حاضر یک رابطه ساده و قابل اطمینان برای تخمین ضریب نفوذ برخی گازها در آب را ارائه می‌دهد که نسبت به مدل‌های پیشین خطای بسیار کم‌تری دارد.

**کلمات کلیدی:** ضریب نفوذ، کربن دی‌اکسید، آب، مدل Wilke\_Chang

### مقدمه

برای طراحی‌های صنعتی در فرایندهای شیمیایی همچون تقطیر، جذب و ... دانستن ضرایب نفوذ بسیار اهمیت دارد [۱]. در اغلب عملیات انتقال جرم جداسازی اجزای یک فاز، به کمک تماس آن فاز با یک فاز نامحلول در آن صورت می‌پذیرد. شدت انتقال هر جزء به ضریب انتقال جرم و دور بودن سیستم از حالت تعادل بستگی خواهد داشت [۲]. ضریب نفوذ برای یک سیستم شیمیایی خاص را می‌توان به صورت تجربی

\*AhmadRahbar@iust.ac.ir

به دست آورد که به دست آوردن آن متضمن صرف هزینه و وقت زیادی است؛ به طور کلی، ضریب نفوذ یک جزء در جزء دیگر به شرایط عملیاتی، اجزاء سازنده و طبیعت اجزاء بستگی دارد.

متاسفانه نظریه سینتیکی نفوذ در مایعات، به خوبی گازهای رقیق توسعه نیافته‌اند و در حال حاضر نمی‌توان پیش بینی تحلیلی دقیق از ضرایب نفوذ ارائه داد؛ در نتیجه درک ما از نفوذ مایعات عمدتاً به مدل‌های نسبتاً ابتدایی هیدرودینامیکی و حالت فعال وابسته است [۳].

با توجه به اهمیت پدیده نفوذ و لزوم دانستن ضریب نفوذ در مایعات، این پدیده از سال‌ها پیش مورد مطالعه قرار گرفته و روابطی برای محاسبه ضریب نفوذ در مایعات ارائه شده است ولی متاسفانه، هیچکدام از مدل‌ها توانایی پیش‌بینی ضریب نفوذ برای همه سیستم‌ها شامل یک جزء مایع را ندارند [۴]. تمام مدل‌های ارائه شده دارای مزایا و معایبی بوده و با توجه به فرضیات صورت گرفته کاربردهای آن‌ها محدود شده است. به عنوان مثال مدل ویک - چنگ برای تخمین ضریب نفوذ گازها در آب تا ۱۶۷٪ خطا دارد. اگرچه کوچمن<sup>۱</sup> در سال ۲۰۰۲ مدلی بر اساس تئوری استوکس - انیشتن ارائه کرده که این میزان خطا را تا ۱۰٪ نیز کاهش داده است [۱] ولی تاکنون هیچ مدل جامعی برای محدوده وسیعی از دما برای نفوذ گازهای مختلف در آب ارائه نشده است.

کیفیت یک مدل، از مقایسه آن با مقادیر آزمایشگاهی به دست می‌آید؛ بدین صورت که هر قدر اختلاف آن دو کم‌تر باشد مدل به دست آمده ارزش بیشتری دارد.

تاکنون اکثر مدل‌های ارائه شده، بر پایه مدل استوکس - انیشتن هستند و اکثر مدل‌های ضریب نفوذ، تصحیحی بر این معادله می‌باشند [۵]. چرا که معادله استوکس انیشتن با وجود خطای زیاد در پیش بینی ضریب نفوذ، بر پایه تئوری بنیان نهاده شده است.

## مدل‌های پیش‌بینی ضریب نفوذ

### استوکس - انیشتن

بر طبق معادله انیشتن ضریب نفوذ یک ماده در حلال با معادله  $D_{AB} = \frac{KT}{\xi}$  داده می‌شود که  $\xi$  ضریب اصطکاک و  $K$  ثابت استفان بولتزمن و  $T$  دمای مطلق (بر حسب کلوین) است.

این معادله وقتی با معادله استوکس ترکیب شود، نیروی اصطکاک را به عنوان نیروی دراگ بر یک کره متحرک در حلال پیوسته توصیف می‌کند در نتیجه معادله فوق به صورت  $D_{AB} = \frac{KT}{6\pi\mu_B R_A}$  نوشته خواهد شد [۶]. در این رابطه  $\mu_B$  ویسکوزیته حلال و  $R_A$  شعاع مولکول نفوذ کننده است.

در تئوری استوکس - انیشتن، معادلات اصلی بر پایه حرکت جسم حل شده کروی در حلال پیوسته می‌باشد. این تئوری برای نفوذ مولکول‌های حل شونده در داخل حلالی که مولکول‌های کوچک تری نسبت به حل شونده داشته باشد نتایج بهتری می‌دهد؛ چرا که تحت این شرایط حلال به عنوان یک سیال مداوم عمل کرده و به فرض معادله استوکس نزدیک می‌گردد.

<sup>1</sup>Kooijman

در این تئوری فرض بر این است که نفوذ حل شونده تنها بر اساس یک حرکت چرخشی تصادفی می‌باشد و ارتباط بین حل شونده و مولکول‌های مجاور در نظر گرفته نمی‌شود. تحت این شرایط قانون فوق پیش‌بینی می‌کند که نفوذ، با ویسکوزیته و شعاع هیدرودینامیکی جزء نفوذکننده کنترل می‌شود [۷].

### ویک - چنگ<sup>۱</sup>

در این مدل، ضریب  $\frac{T}{D\mu_B}$  به عنوان ضریب نفوذ ( $F$ ) تعیین شده و نشان داده شده است که  $F$  مستقل از دماست که البته می‌تواند تابعی از حجم مولی حل شونده باشد [۸]. در این رابطه  $\mu_B$  ویسکوزیته حلال است. ویک و چنگ برای ارائه مدل خود، ادعا کردند که ضریب نفوذ برای مواد با حجم مولی‌های کم در تابع لگاریتمی با شیب حدود ۰/۷ و برای مواد با حجم مولی‌های زیاد، با شیب ۰/۳ تغییر می‌کند. آنها همچنین نشان دادند که  $\frac{D\mu_B}{T}$  بر حسب  $M^{0.5}$  یک رابطه خطی دارد ( $M$  جرم مولکولی حلال می‌باشد) و در نهایت معادله خود را به صورت رابطه (۱) ارائه کردند:

$$D = 7.4 \times 10^{-8} \times \frac{T\sqrt{\phi M_B}}{v^{0.6}\mu_B} \quad (1)$$

که در رابطه (۱) ضریب  $\phi$ ، تصحیحی برای حلال بوده که مقدار آن برای آب برابر ۲/۶ گزارش گردیده است.  $\mu_B$  ویسکوزیته حلال و  $v$  حجم مولی حل شونده است [۸].

### مدل‌سازی

از عوامل مهم و تاثیرگذار در محاسبه میزان انتقال جرم، ضریب نفوذ ( $D$ ) می‌باشد؛ ضریب نفوذ پارامتری است که توانایی و سرعت نفوذ را بیان می‌کند. این ضریب وابسته به غلظت حل شونده است. ضریب نفوذی که به صورت یک عدد ثابت ارائه می‌گردد در واقع ضریب نفوذ در غلظت کم (رقت بینهایت) حل شونده می‌باشد [۶]. برای پیش‌بینی ضریب نفوذ، باید با مکانیسم نفوذ آشنا بوده و عوامل موثر بر آن را بشناسیم. به نظر می‌رسد با در نظر گرفتن دما و فشار سیستم و همچنین خواص فیزیکی حلال و حل شونده، بتوان ضریب نفوذ را پیش‌بینی نمود. بدین منظور برای مدل‌سازی بهتر، تاثیر هر یک از این پارامترها را مورد بررسی قرار می‌دهیم.

### تاثیر فشار

بوروس<sup>۲</sup> و همکاران با اندازه‌گیری ضریب نفوذ کربن دی‌اکسید در آب، در فشارهای متفاوت نشان دادند که ضریب نفوذ تقریباً مستقل از فشار است [۹]. همچنین اکازاکی<sup>۳</sup> و همکاران ضریب نفوذ کربن دی‌اکسید در

<sup>1</sup>Wilke Chang

<sup>2</sup>Burruss

<sup>3</sup>Okazaki

آب را در فشارهای مختلف به دست آورده و نتیجه کار خود را با کار کیکاوا<sup>۱</sup> و رابطه ویک چنگ مقایسه نمودند که به نتایج مشابه بوریوس رسیدند [۱۰]. بنابراین می‌توان به این نتیجه رسید که فشار تقریباً تأثیری بر ضریب نفوذ گاز کربن دی اکسید در آب نداشته و می‌توان از آن صرف نظر کرد.

### تأثیر پیوند هیدروژنی

پیوند هیدروژنی بین اتم‌های هیدروژن و اتم‌هایی که الکترونگاتیوی بالایی دارند برقرار می‌شود؛ بنابراین این پیوند در ترکیباتی دیده می‌شود که در آن، هم هیدروژن و هم عناصری با الکترونگاتیوی بالا وجود داشته باشد. البته شایان ذکر است که نفوذ یک حل شونده کوچک در یک حلال مایع که تشکیل پیوند هیدروژنی می‌دهد هنوز به طور کامل شناخته نشده است [۶].

مولکول آب شامل یک اتم اکسیژن نسبتاً بزرگ است که با یک جفت اتم هیدروژن کوچک ترکیب شده و دارای پیوندهای O-H با زاویه ۱۰۴/۵۲ درجه می‌باشد. به دلیل هندسه مولکول‌های آب که بسیار قطبی است (بار نسبی منفی روی اکسیژن و بار نسبی مثبت در نزدیکی اتم‌های هیدروژن)، آب این توانایی را دارد که هم گیرنده پیوند هیدروژنی و هم دهنده آن باشد. به همین دلیل برای شناخت بهتر پدیده نفوذ و پیش‌بینی بهتر آن، به هنگام نفوذ گازها در مایعات قطبی و همچنین مطالعه تأثیر پیوند هیدروژنی، نفوذ گازهای مختلف در آب مورد بررسی قرار گرفت.

### کربن دی اکسید

مولکول‌های کربن دی اکسید، خطی و دارای تقارن بوده که از یک اتم کربن و دو اتم اکسیژن تشکیل شده است؛ این ساختمان هندسی CO<sub>2</sub> باعث گردیده که مولکول‌های آن غیر قطبی باشد. افزایش کربن دی اکسید در جو، به علت اثر گلخانه‌ای، به عنوان یکی از دلایل گرمای جهانی شناخته شده است؛ به همین دلیل برای تثبیت میزان CO<sub>2</sub> در اتمسفر پروژه‌های جمع‌آوری و ذخیره‌سازی کربن دی اکسید هم اکنون در حال اجراست که یکی از این روش‌ها ذخیره‌سازی CO<sub>2</sub> در آب است. برای پیش‌بینی نتیجه کار به هنگام تزریق CO<sub>2</sub> نیاز به مدل‌سازی داریم که انجام مدل‌سازی به نوبه خود نیاز به تخمین ضریب نفوذ دارد [۱۱]. بنابراین در این پژوهش رابطه جدید، با تمرکز بر نفوذ کربن دی اکسید در آب، ارائه گردیده است.

برای بعضی سیستم‌ها نیروی بین مولکولی همچون پیوند هیدروژنی نفوذ را کم می‌کند؛ بعضی محققین نفوذ آهسته‌تر را این‌گونه تفسیر می‌کنند که در حضور پیوند هیدروژنی، با نفوذ یک کمپلکس مواجه هستیم که بزرگ‌تر از مولکول‌های حلال و حل شونده است [۶] که این توده نفوذ کننده را می‌توان با تعداد مولکول‌هایی که اطراف حل شونده را احاطه کرده متناسب دانست که آن را با پارامتر  $\xi$  نشان می‌دهیم. طبق تئوری‌های آیرینگ<sup>۲</sup> ضریب نفوذ با  $\xi$  نسبت عکس دارد [۱۲].

<sup>1</sup>Kikkawa

<sup>2</sup>Eyring

بنابراین می‌توان نوشت:

$$D \propto \frac{\sqrt{\varphi M_B T}}{\mu_B \xi R_A} \quad (2)$$

که در رابطه (۲)،  $R_A$  شعاع مولکول نفوذ کننده می‌باشد.

اگر فرض کنیم مولکول‌ها کروی باشند داریم:

$$R_A = \left( \frac{3V_A}{4\pi N} \right)^{1/3} \quad (3)$$

در رابطه ۳،  $V_A$  حجم مولی حلال و  $N$  عدد آووگادرو است.

همچنین می‌توان  $\xi$  را با استفاده از رابطه زیر تخمین زد [۴].

$$\xi = 6 \left( \frac{V_A}{V_B} \right)^{1/6} \quad (4)$$

با قرار دادن مقادیر  $R_A$  و  $\xi$  در رابطه (۲) داریم:

$$D \propto \frac{\sqrt{\varphi M_B T} V_B^{1/6}}{\mu_B V_A^{0.5}} \quad (5)$$

نتایج مدل‌سازی که به صورت تئوری به دست آمده نشان می‌دهد که ضریب نفوذ با  $V_A^{0.5}$  نسبت عکس دارد در صورتی که در رابطه ویک - چنگ  $D$  با  $V_A^{-0.6}$  متناسب است.

## نتایج و بحث

با در نظر گرفتن مدل به دست آمده برای ضرایب نفوذ تجربی، رابطه نهایی به صورت زیر ارائه می‌گردد:

$$D = 1.3 \times 10^{-15} \frac{\sqrt{\varphi M_B T}}{\mu_B \xi R_A} \quad (6)$$

در این رابطه  $T$  دما بر حسب کلین،  $M_B$  جرم مولکولی حلال ( $\frac{gr}{mol}$ )،  $\mu_B$  ویسکوزیته حلال (برحسب سانتی‌پواز) و  $R_A$  شعاع مولکول حل شونده است. ضریب نفوذ ( $D$ ) در رابطه ۶ بر حسب  $\frac{cm^2}{s}$  می‌باشد. در جدول (۱) ضریب نفوذ کربن دی‌اکسید در آب داده شده است که در آن، ضریب نفوذ به دست آمده از رابطه (۱) با ضریب نفوذ به دست آمده از رابطه (۶) مقایسه شده است.

برای به دست آوردن ضریب نفوذ از ویسکوزیته ارائه شده توسط کستین و همکاران استفاده شد [۱۳]. در جدول (۱)،  $D(New)$  و  $D(W_C)$  به ترتیب ضرایب نفوذ بدست آمده از رابطه (۶) و رابطه (۱) بوده و  $D_{exp}$  ضریب نفوذ تجربی است. همچنین  $AD\%$  درصد خطای مطلق آن‌ها با مقادیر تجربی است که با استفاده از رابطه (۷) به دست آمده است. در این جدول دما ( $T$ ) برحسب کلین ذکر شده است. با توجه به جدول (۱)، رابطه (۶) در پیش‌بینی ضریب نفوذ کربن دی‌اکسید در آب موفق‌تر از رابطه (۱) عمل کرده است؛ به طوری که رابطه (۱) به طور متوسط دارای ۶/۵ درصد خطا و رابطه ۶ دارای ۲/۷ درصد خطا است.

جدول ۱. مقایسه داده های تجربی ضریب نفوذ با رابطه Wilke Chang و رابطه جدید

T[K]	$D_{exp} \times 10^5$	$D(W\_C) \times 10^5$	$D(New) \times 10^5$	%AD(W_C)	%AD(New)	Ref
۲۷۸	۱/۰۷	۱/۱۱۶۵	۱/۰۳۳۴	۴/۳۴۸۲	۳/۴۲۲۶	[۱۴]
۲۷۹	۱	۱/۱۲۸۲	۱/۰۴۴۲	۱۲/۸۱۹	۴/۴۱۷۴	[۱۵]
۲۷۹/۵	۱/۰۸	۱/۱۳۳۱	۱/۰۴۸۸	۴/۹۲۰۴	۲/۸۹۳	[۴]
۲۸۳	۱/۲۵	۱/۳۲۱۲	۱/۲۲۲۸	۵/۶۹۸۳	۲/۱۷۳	[۱۵]
۲۸۸	۱/۴۵	۱/۵۴۳۸	۱/۴۲۸۹	۶/۴۷۱۹	۱/۴۵۷	[۱۴]
۲۸۹	۱/۵	۱/۵۹۰۳	۱/۴۷۱۸	۶/۰۱۸۵	۱/۸۷۶۷	[۱۵]
۲۹۰	۱/۵۵	۱/۶۳۸۵	۱/۵۱۶۵	۵/۷۰۸۵	۲/۱۶۳۶	[۱۵]
۲۹۱	۱/۶	۱/۶۸۶۳	۱/۵۶۰۷	۵/۳۹۳	۲/۴۵۵۵	[۱۵]
۲۹۳	۱/۶۲	۱/۷۸۴۳	۱/۶۵۱۴	۱۰/۱۴۱۸	۱/۹۳۹۶	[۴]
۲۹۴	۱/۷۵	۱/۸۳۴۷	۱/۶۹۸۱	۴/۸۳۹۹	۲/۹۶۷۵	[۱۵]
۲۹۷	۱/۸۵	۱/۹۸۹۷	۱/۸۴۱۵	۷/۵۵۲۲	۰/۴۵۷۱	[۴]
۲۹۸	۱/۹۱	۲/۰۴۲۷	۱/۸۹۰۵	۶/۹۴۵۵	۱/۰۱۸۷	[۹]
۳۰۳	۲/۲۹	۲/۳۱۸۹	۲/۱۴۶۲	۱/۲۶۳۴	۶/۲۷۷۶	[۴]
۳۰۸	۲/۴۳	۲/۶۱۳۵	۲/۴۱۸۹	۷/۵۵۳	۰/۴۵۶۴	[۱۴]
۳۱۰	۲/۵	۲/۷۳۵۹	۲/۵۳۲۲	۹/۴۳۷۴	۱/۲۸۱۷۷	[۱۶]
۳۱۳	۲/۷۵	۲/۹۲۶۲	۲/۷۰۸۳	۶/۴۰۵۸	۱/۵۱۸۲	[۴]
۳۲۰	۳	۳/۳۹۱۸	۳/۱۳۹۲	۱۳/۰۵۹۶	۴/۶۴۰۱	[۱۶]
۳۲۳	۳/۲۴	۳/۴۲۳۶	۳/۱۶۸۶	۵/۶۶۶۲	۲/۲۰۲۷	[۴]
۳۲۵	۳/۶۱	۳/۶۲۴۸	۳/۳۵۴۹	۰/۴۰۹۹	۷/۰۶۷۵	[۴]
۳۳۰	۳/۶	۳/۸۰۴۲	۳/۵۲۰۹	۵/۶۷۲۱	۲/۱۹۷۲	[۱۶]
۳۳۳	۳/۸	۴/۱۵۷	۳/۸۴۷۴	۹/۳۹۴۸	۱/۲۴۸۲	[۱۶]
۳۳۸	۴/۲۹	۴/۴۱۶۴	۴/۰۸۷۵	۲/۹۴۶۱	۴/۷۲۰۳	[۴]
۳۴۰	۴/۴	۴/۷۸۱۴	۴/۴۲۵۳	۸/۶۶۸۶	۰/۵۷۶۱	[۱۶]
۳۵۰	۵	۵/۰۶۳۲	۴/۶۸۶۲	۱/۲۶۴۹	۶/۲۷۶۳	[۱۶]

$$\%AD = \frac{D_{exp} - D_{calc}}{D_{exp}} \times 100 \quad (V)$$

در این پژوهش به منظور پیش‌بینی بهتر پدیده نفوذ، تاثیر پیوند هیدروژنی بر میزان نفوذ، با اضافه کردن پارامتر  $\xi$  بررسی شده است و نتایج نشان می‌دهد که با افزایش  $\xi$  میزان نفوذ گازها در آب کاهش می‌یابد. در واقع وجود پیوند هیدروژنی، مانعی در برابر نفوذ ذرات به حساب آمده و در مواردی که پیوندهای هیدروژنی وجود ندارد میزان نفوذ بیشتر است. همچنین رابطه ارائه شده نشان می‌دهد که شعاع مولکول نفوذ کننده، نسبت معکوس با میزان نفوذ داشته و با افزایش شعاع، میزان نفوذ به صورت خطی کاهش می‌یابد. همان‌طور

که در جدول (۱) مشاهده می‌شود رابطه جدید نتایج بهتری نسبت به رابطه ویک - چنگ برای نفوذ کربن دی اکسید در آب ارائه می‌دهد. رابطه جدید برای نفوذ  $CO_2$  در آب، حداقل و حداکثر میزان خطا را به ترتیب برابر  $0/4564$  و  $7/0675$  درصد ارائه داده است در حالی که این مقادیر برای رابطه ویک - چنگ برابر  $0/4099$  و  $13/0596$  درصد است. به طور متوسط رابطه ویک - چنگ برای نفوذ کربن دی اکسید در آب ضریب نفوذی با حدود  $6/5$  درصد خطا و برای نیتروژن  $11$  درصد، نیتروژن دی اکسید  $23$  درصد و برای اکسیژن  $10$  درصد خطا ارائه می‌دهد. این مقادیر برای رابطه اصلاح شده، به ترتیب برای  $CO_2$ ،  $N_2$ ،  $NO_2$  و  $O_2$  برابر با  $2/7$ ،  $6$ ،  $17$  و  $2/7$  درصد است.

برای اطمینان از عمومیت داشتن رابطه (۶) در پیش‌بینی ضریب نفوذ دیگر گازها در آب، نفوذ گازهایی همچون اکسیژن، نیتروژن و نیتروژن دی اکسید در آب نیز مورد مطالعه قرار گرفت که نتایج در جدول ۲ ذکر گردیده است.

داده‌های تجربی برای ضریب نفوذ اکسیژن، نیتروژن و نیتروژن دی اکسید در جدول ۲ ذکر شده و میزان خطای به‌دست آمده از مدل جدید و مدل ویک - چنگ برای هر داده مشخص شده است. طبق نتایج به‌دست آمده حداقل خطای رابطه ویک - چنگ برای تخمین ضریب نفوذ اکسیژن، نیتروژن و نیتروژن دی-اکسید به ترتیب برابر  $5/6058$ ،  $0/2377$  و  $22/937$  درصد و حداکثر خطای موجود  $15/8482$ ،  $22/0823$  و  $23/598$  درصد است در حالی که رابطه جدید، حداقل میزان خطا را به ترتیب تا  $0/1002$ ،  $0/0841$  و  $16/9643$  درصد کاهش داده است. همچنین این مدل پیش‌بینی داده‌های تجربی را به ترتیب برای ضریب نفوذ اکسیژن، نیتروژن و نیتروژن دی اکسید حداکثر با  $4/9933$ ،  $12/024$  و  $17/5932$  درصد خطا پیش‌بینی کرده است که نشان دهنده اصلاح رابطه، برای نفوذ گازهای ذکر شده در آب می‌باشد.

### نتیجه گیری

مقادیر ضریب نفوذ در طراحی فرایندهای شیمیایی بسیار با اهمیت هستند. روش‌های آزمایشگاهی برای به‌دست آوردن این ضرایب بسیار زمان بر و پر هزینه می‌باشد بنابراین در طراحی اولیه، نیاز به یک تخمین خوب از ضرایب نفوذ داریم. خصوصیات فیزیکی حلال و حل‌شونده همچون دانسیته، جرم مولکولی و حجم مولی خصوصیات است که با کم‌ترین هزینه در اختیار است؛ بنابراین رابطه‌ای براساس خصوصیات فیزیکی حلال و حل‌شونده ارائه شده است.

در این پژوهش، به منظور ارائه رابطه‌ای برای پیش‌بینی ضریب نفوذ گازها در آب، تاثیر پارامترهای فشار، شعاع مولکول نفوذ کننده و تعداد مولکول‌های اطراف حل‌شونده بر ضریب نفوذ گازها در آب بررسی گردید و برای انجام اصلاحات تجربی، ضریب نفوذ گازهای کربن دی اکسید، نیتروژن، نیتروژن دی اکسید و اکسیژن در آب مطالعه شد. نتایج به‌دست آمده حاکی از آن است که مدل ارائه شده در این مقاله، می‌تواند به عنوان رابطه‌ای ساده و قابل اطمینان برای تخمین ضریب نفوذ گازها در آب به‌کار رود.

جدول ۲. مقایسه داده های تجربی ضریب نفوذ با رابطه Wilke Chang و رابطه جدید

Solute	solvent	T[K]	$D_{exp}$	$D(W\_C) \times 10^5$	$D(New) \times 10^5$	%AD(W_C)	%AD(New)	Ref
O <sub>2</sub>	Water	۲۷۳	۰/۹۷	۱/۱۰۲۴	۰/۹۹۱۸	۱۳/۶۵۴	۲/۲۴۷۲	[۱۷]
		۲۷۸	۱/۱۶	۱/۳۲۳۸	۱/۱۹۰۹	۱۴/۱۱۷۹	۲/۶۶۴۶	[۱۷]
		۲۸۳	۱/۳۶	۱/۵۶۶۵	۱/۴۰۹۳	۱۵/۱۸۱۵	۳/۶۲۱۴	[۱۷]
		۲۸۸	۱/۵۸	۱/۸۳۰۴	۱/۶۴۶۷	۱۵/۸۴۸۲	۴/۲۲۱۲	[۱۷]
		۲۹۳	۱/۸۵	۲/۱۱۵۵	۱/۹۰۳۲	۱۴/۳۵۰۷	۲/۸۷۴	[۱۷]
		۳۰۳	۲/۴۶	۲/۷۴۹۴	۲/۴۷۳۴	۱۱/۷۶۲۶	۰/۵۴۵۷	[۱۷]
		۳۰۸	۲/۷۹	۳/۰۹۸۶	۲/۷۸۷۷	۱۱/۰۶۲۶	۰/۰۸۴۱	[۱۷]
		۳۱۳	۳/۱۴	۳/۴۶۹۳	۳/۱۲۱۱	۱۰/۴۸۷۱	۰/۶۰۱۸	[۱۷]
		۳۱۸	۳/۵۲	۳/۸۵۹۴	۳/۴۷۲	۹/۶۴۱۸	۱/۳۶۲۳	[۱۷]
		۳۲۳	۳/۹۴	۴/۲۷۱۲	۳/۸۴۲۵	۸/۴۰۵۲	۲/۴۷۴۷	[۱۷]
		۳۲۸	۴/۳۷	۴/۷۰۴۵	۴/۲۳۲۳	۷/۶۵۳۵	۳/۱۵۱۱	[۱۷]
		۳۳۳	۴/۸۲	۵/۱۵۸۷	۴/۶۴۰۹	۷/۰۲۶۴	۳/۷۱۵۲	[۱۷]
		۳۳۸	۵/۳	۵/۶۳۵۶	۵/۰۷	۶/۳۳۱۵	۴/۳۴۰۴	[۱۷]
		۳۴۳	۵/۷۸	۶/۱۳۳۱	۵/۵۱۷۵	۶/۱۰۸۷	۴/۵۴۰۸	[۱۷]
		۳۴۸	۶/۲۷	۶/۶۵۱۶	۵/۹۸۴	۶/۰۸۵۶	۴/۵۶۱۶	[۱۷]
		۳۵۳	۶/۸۱	۷/۱۹۱۸	۶/۴۷	۵/۶۰۵۸	۴/۹۹۳۳	[۱۷]
		۳۵۸	۷/۲۶	۷/۷۵۲۱	۶/۹۷۴	۶/۷۷۷۷	۳/۹۳۸۹	[۱۷]
		۳۶۳	۷/۷۵	۸/۳۳۶۹	۷/۵۰۰۲	۷/۵۷۳۴	۳/۲۲۳۱	[۱۷]
		۳۶۸	۸/۲	۸/۹۳۹۹	۸/۰۴۲۷	۹/۰۲۳۵	۱/۹۱۸۶	[۱۷]
۳۷۳	۸/۶۵	۹/۵۶۵۷	۸/۶۰۵۶	۱۰/۵۸۶	۰/۵۱۲۸	[۱۷]		
N <sub>2</sub>	Water	۲۸۳	۱/۲۹	۱/۳۹۱۱	۱/۲۷۶۵	۷/۸۴۰۸	۱/۰۴۴۲	[۴]
		۲۸۸	۱/۳۵	۱/۶۲۵۵	۱/۴۹۱۶	۲۰/۴۱۰۴	۱۰/۴۸۹۸	[۴]
		۲۹۰/۵	۱/۶۲	۱/۷۲۸۲	۱/۵۸۵۸	۶/۶۷۶۶	۲/۱۱۲۴	[۴]
		۲۹۳	۱/۶۶	۱/۸۷۸۷	۱/۷۲۳۹	۱۳/۱۷۵۸	۳/۸۵۱۳	[۴]
		۲۹۴/۷	۲	۱/۹۳۶۴	۱/۷۷۶۸	۳/۱۸۰۷	۱۱/۱۵۷۶	[۴]
		۲۹۷	۲/۱	۲/۰۹۵	۱/۹۲۲۴	۰/۲۳۷۷	۸/۴۵۷۱	[۴]
		۲۹۸	۱/۸	۲/۱۵۰۸	۱/۹۷۳۶	۱۹/۴۸۶۳	۹/۶۴۱۹	[۴]
		۳۰۳	۲	۲/۴۴۱۶	۲/۲۴۰۵	۲۲/۰۸۲۳	۱۲/۰۲۴	[۴]
		۳۱۰	۲/۷	۲/۸۸۰۷	۲/۶۴۳۴	۶/۶۹۳۲	۲/۰۹۷۲	[۴]
۳۱۳	۲/۸۳	۳/۰۸۱	۲/۸۲۷۲	۸/۸۶۹۵	۰/۱۰۰۲	[۴]		
NO <sub>2</sub>	Water	۲۹۳	۱/۲۳	۱/۵۱۲۱	۱/۴۳۸۷	۲۲/۹۳۷	۱۶/۹۶۴۳	[۴]
		۳۰۳	۱/۵۹	۱/۹۶۵۲	۱/۸۶۹۷	۲۳/۵۹۸	۱۷/۵۹۳۲	[۴]





## منابع

1. Kooijman, H.A., A Modification of the Stokes-Einstein Equation for Diffusivities in Dilute Binary Mixtures. American Chemical Society, 2002. 41: p. 3326-3328.
2. Treybal, R.E., Mass-Transfer Operations, 3rd Edition. 1980: McGraw-Hill Book Company.
3. Bird, R.B., W.E. Stewart, and E.N. Lightfoot, Transport Phenomena. Second Edition ed. 2002, United States of America: John Wiley & Sons.
4. AKGERMAN, A. and J.L. GAINER, Predicting Gas-liquid Diffusivities. Chemical and Engineering Data, 1972. 17: p. 372-377
5. Bosse, D., Diffusion, Viscosity, and Thermodynamics in Liquid Systems, in Department of Mechanical and Process Engineering. 2005, Technical University of Kaiserslautern. p. 72.
6. Su, J.T., et al., The effect of hydrogen bonding on the diffusion of water in n-alkanes and n-alcohols measured with a novel single microdroplet method. CHEMICAL PHYSICS, 2010. 132(4): p. 1-8.
7. Prausnitz, J.M., R.N. Lichtenthaler, and E.G.d. Azevedo, Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria, 3rd Edition. 1998 :Prentice Hall.
8. Wilke, C. and P. Chang, Correlation of diffusion coefficient in dilute solutions. AIChE Journal, 1955. 1(2): p. 264-270.
9. Lu, W., et al., Determination of diffusion coefficients of carbon dioxide in water between 268 and 473 K in a high-pressure capillary optical cell with in situ Raman spectroscopic measurements. Geochimica et Cosmochimica Acta, 2013. 115: p. 183-204.
10. HIRAI, S., et al., Measurement of CO<sub>2</sub> diffusion coefficient and application of life in pressurized water. Energy :22 .1997 ,p. 363-367.
11. Mutoru, J.W., A. Leahy-Dios, and A. Firoozabadi, Modeling Infinite Dilution and Fickian Diffusion Coefficients of Carbon Dioxide in Water. American Institute of Chemical Engineers, 2011. 57: p. 1617-1627.
12. Stearn, A.E., E.M. Irish, and H. Eyring, A theory of diffusion in liquids. journal of Physical Chemistry, 1940. 44(8): p. 981-995.
13. Kestin, J., M. Sokolov, and W.A. Wakeham, Viscosity of liquid water in the range -8C to 150C. Journal of Physical and Chemical Reference Data, 1978. 7(3): p. 941-948.
14. JAHNE, B., G. HEINZ, and W. DIETRICH, Measurement of the Diffusion Coefficients of Sparingly Soluble Gases in Water. GEOPHYSICAL RESEARCH, 1987. 92: p. 10,767-10,776.
15. Holmen, K. and P. Liss, Models for air-water gas transfer: an experimental investigation. Tellus, 1984. 36B: p. 92-100.
16. Li, H., et al., Viscosities, thermal conductivities and diffusion coefficients of CO<sub>2</sub> mixtures: Review of experimental data and theoretical models. International Journal of Greenhouse Gas Control, 2011. 5: p. 1119-1139.
17. Simpson, J.H. and H.Y. Carr, Diffusion and Nuclear Spin Relaxation in Water. Physical Review, 1958. 111(5): p. 1201-1202.