

6.2 MATERIALS I MÈTODES

6.2.1 DESCRIPCIÓ DELS EQUIPS DE MESURA

Les proves han estat efectuades a les instal·lacions descrites en el capítol 4.1. El corrent gasós amb el solut a absorbir fou generat injectant una quantitat coneguda del gas provenint d'una bombona, a la canonada d'entrada al tub venturi. La llargada de tram recte d'aquesta canonada és de 16 diàmetres, per la qual cosa la mescla està assegurada. A més a més, el gas és injectat a la canonada principal mitjançant dos tubs en forma de creu i amb 10 forats cadascun, de forma que s'afavoreix la dispersió inicial.

Els gasos emprats foren diòxid de sofre, amoníac i sulfur d'hidrogen. També s'intentà treballar amb òxids nitrosos, malgrat que la baixa pressió de vapor d'aquest feu impossible la seva manipulació. Tot i que es pretenia experimentar també amb clorur d'hidrogen, va ser descartat

posteriorment per l'elevada corrosió que provoca en ambients on la humitat relativa és elevada.

El càlcul del rendiment d'absorció fou efectuat mitjançant la diferència entre la concentració del gas a absorbir injectat (en ppm v/v), i la del que surt per la xemeneia d'expulsió de gasos:

$$\% R = \frac{C_{\text{gas}}^{\text{entrada}} - C_{\text{gas}}^{\text{sortida}}}{C_{\text{gas}}^{\text{entrada}}} \quad (6.2.1)$$

6.2.1.1 DETERMINACIÓ DE LA CONCENTRACIÓ INICIAL DEL GAS A ABSORBIR

La concentració del gas a l'entrada de la planta pilot fou regulada i mesurada mitjançant la dil·lució d'un petit cabal de solut gasós pur en un cabal d'aire aspirat pel ventilador de la planta descrit en el capítol 2.1.1. Aquesta addició fou regulada mitjançant una vàlvula manoreductora situada a la sortida de la bombona d'acer que conté el gas. Una canonada d'acer inoxidable de 8 mm de diàmetre nominal transporta el gas fins l'entrada de la canonada principal. Aquest cabal es fa circular per un rotàmetre abans d'entrar a la canonada que el portarà cap al tub venturi. De fet es disposaren de dos rotàmetres, l'un calibrat per la mesura de clorur d'hidrogen a una pressió de 3 Bar (manomètrics) i a 20°C i amb una escala de 6 a 56 l/min; l'altre fou calibrat per la mesura de sulfur d'hidrogen a 1 Bar (manomètric) i a 20°C amb una escala de 0.6 a 2 l/min. Aquests dos dispositius permeteren originar un rang molt ampli de concentracions inicials, de forma que es pogueren experimentar condicions molt properes a les trobades a nivell industrial. L'únic inconvenient fou que en la majoria dels casos ni

s'utilitzaren les pressions ni tant sols els gasos en què foren calibrats aquests rotàmetres, ja que no existien en el mercat dispositius específics per a les mesures a efectuar en el present treball. Per aquest motiu, el cabal injectat a la línia d'aspiració del tub venturi fou calculat mitjançant l'aplicació de dos factors de correcció:

$$f_p = \sqrt{\frac{P_{\text{real}}}{P_{\text{calibratge}}}} \quad f_{\gamma} = \sqrt{\frac{\gamma_{\text{calibratge}}}{\gamma_{\text{real}}}} \quad (6.2.2)$$

On el subíndex calibratge correspon a les dades referents al gas pel qual fou calibrat el rotàmetre, i el subíndex real correspon a les propietats del gas assajat. Així, el cabal vehiculat a través del rotàmetre fou calculat segons:

$$F_{A|\text{real}} = \frac{F_{A|\text{calculat}}}{f_p f_{\gamma}} \quad (6.2.3)$$

essent $F_{A|\text{calculat}}$ el cabal de gas a absorbir necessari per aconseguir una determinada concentració inicial. Aquesta fou calculada segons:

$$f_{A|\text{calculat}} = \frac{F_G \gamma_{\text{gas}} \gamma_{\text{entrada}}}{60000} \quad (6.2.4)$$

El cabal de gas aspirat pel ventilador, F_G fou determinat mitjançant la mesura de velocitat amb un tub de pitot. Les lectures de pressió dinàmica d'aquest, efectuades mitjançant un manòmetre de tub en forma de U que conté éter etílic com a fluid manomètric, foren efectuades en el centre de la canonada d'impulsió del ventilador, a una distància suficient de qualsevol pertorbació (7 diàmetres segons especificació del dispositiu de mesura). Aquestes mesures en el centre

de la canonada permeteren avaluar la velocitat màxima de circulació del gas segons:

$$U_{G_{\max}} \approx 0.95 \sqrt{\rho_{\text{din}} \frac{1.013}{P} \frac{T}{288}} \quad (6.2.5)$$

on ρ_{din} és la pressió dinàmica mesura pel tub venturi, P és la pressió absoluta a la que circula el gas per la canonada (Bar) i T la temperatura ambient (K). Sabent que per a canonades cilíndriques i en règim turbulent, i tal i com es descriu a l'apartat 5.2.2.2 (equació 5.2.18), es pot establir una relació simple entre la velocitat màxima de circulació i la velocitat mitjana, necessària pel càlcul del cabal de gas impulsat pel ventilador segons:

$$F_G \approx U_{Gm} \frac{P}{4} d_c^2 3600 \quad (6.2.6)$$

6.2.1.2 DETERMINACIÓ DE LA CONCENTRACIÓ FINAL DEL GAS A ABSORBIR

La concentració del gas a la sortida de la planta pilot fou mesurada en continu mitjançant un sensor electroquímic GAS^{PLUS} directament connectat a la canonada d'impulsió del ventilador. Aquest sistema funciona mitjançant elèctrodes selectius per a gasos individuals, de forma que un cop detectat el gas aquest és oxidat o reduït (depenent del tipus de gas). Mitjançant un elèctrode de referència i el potencial d'oxido - reducció del gas, s'avalua la concentració d'aquest, obtenint-se un senyal de sortida normalitzat de 4-20 mA apte per a transmissió i control. Cada gas utilitza un elèctrode específic i a més a més presenta rangs limitats de mesura.

Les característiques tècniques d'aquest dispositiu, així com les possibles interferències pels gasos analitzats, són reflectides en la taula 6.2.1.

Taula 6.2.1: Característiques tècniques dels sensors emprats en la mesura de la concentració de gas contaminant a la sortida de l'absorbidor.

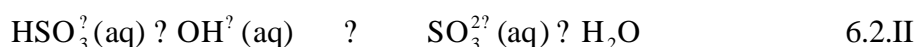
Gas	Interferències	Precisió	T ^a treball	Camp Mesura
NH ₃	CO, HCN, HF, H ₂ S, NO ₂	±2% Span	-40 a 32°C	0 a 50 ppm
H ₂ S	NH ₃ , CO, H ₂ , HCl, HCN, HF, NO ₂	±2% Span	-40 a 50°C	0 a 50 ppm
SO ₂	NH ₃ , CO, Cl ₂ , HCl, NCN, HF, H ₂ S, NO ₂	±2% Span	-40 a 50°C	0 a 50 ppm

Tot i que els sensors són calibrats per l'empresa subministradora, són susceptibles de descalibratge després d'un cert nombre d'hores de funcionament, de forma que periòdicament foren calibrats mitjançant l'anàlisi del corrent gasós de sortida a partir de mètodes normalitzats. Així, en el cas del diòxid de sofre s'utilitzà el mètode EPA n° 6 'Determinació d'emissions de diòxid de sofre procedents de focus estacionaris', i pel sulfur d'hidrogen s'utilitzà el mètode EPA n° 15 'Determinació d'emissions de sulfur d'hidrogen, sulfur de carbonil i disulfur de carboni procedents de focus estacionaris'. Pel que fa a l'amoníac, no existeix actualment cap mètode oficial de la EPA, trobant-se els mètodes existents en fase d'avaluació, per aquest motiu s'utilitzà un mètode procedent de la *Texas Air Control Board*.

6.2.2 REGULACIÓ DEL pH DE LA DISSOLUCIÓ ABSORBIDORA

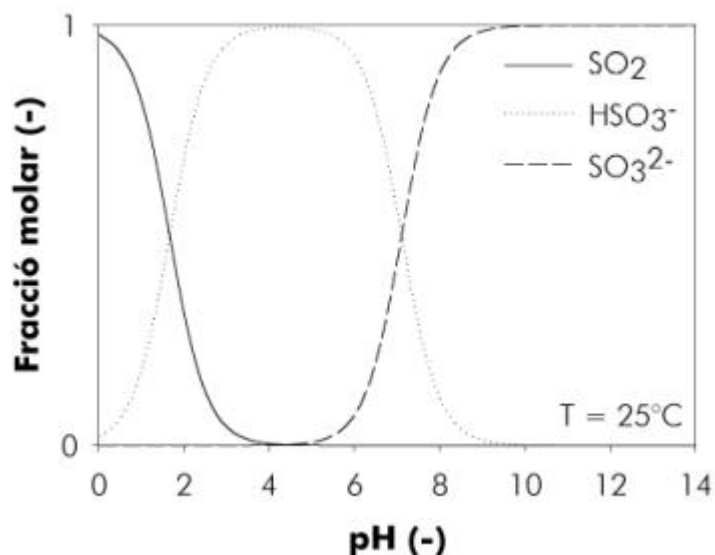
Donat que el sistema treballa en semi-continu, ja que la dissolució absorbent és recirculada a partir del contingut del tanc d'emmagatzematge, caldrà tenir força cura en la composició a l'interior d'aquest.

En el cas del procés d'absorció de gasos amb característiques àcides (diòxid de sofre i sulfur d'hidrogen), el líquid absorbent emprat fou una dissolució de hidròxid de sodi de concentracions superiors a 0.25 mol/l. En aquestes condicions, s'assegura un pH superior a 13, per la qual cosa l'única espècie iònica en la qual es troba el SO₂ absorbit és sulfit, tal i com s'observa en el diagrama de composició fraccionària per a l'àcid sulfurós en funció del pH (gràfic 6.2.1). Quan el SO₂ és absorbit en dissolucions fortament bàsiques, les reaccions que es donen en la fase líquida són:



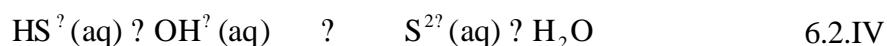
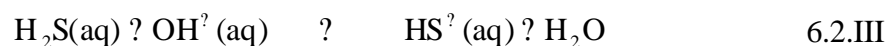
Les constants d'equilibri per aquestes reaccions són, com es de preveure ja que són reaccions tipus àcid - base, molt elevades tal i com es comentarà posteriorment. Tal i com s'observa en el gràfic 6.2.1, per a pH superior a 10, l'única espècie existent en solució és l'ió sulfit. De fet l'existència d'aquesta espècie és més que dubtosa ja que, tal i com assenyalen Johnson *et al.* (1954), el sistema és molt eficient en l'absorció a baixes temperatures de l'oxigen de l'aire, per tant la possibilitat

d'oxidar l'ió sulfit a sulfat és més que probable, donat que la totalitat del líquid és recirculat en un període de temps inferior a 10 minuts de funcionament (per a un cabal de 5 m³/h i considerant agitació perfecte).



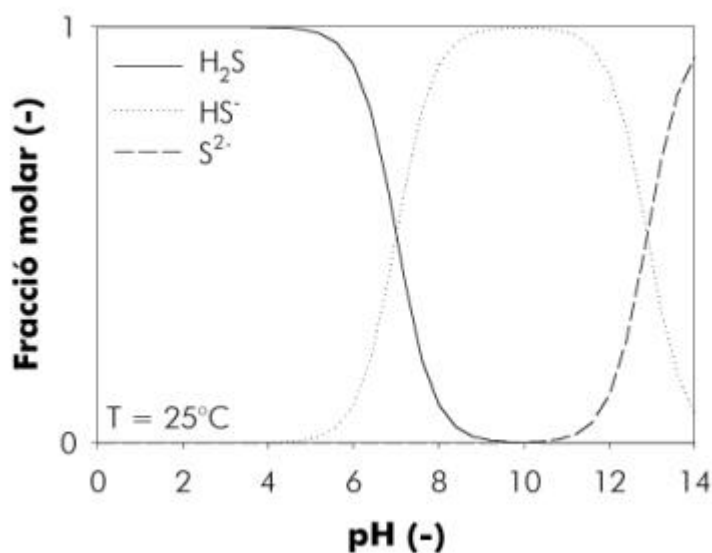
Gràfic 6.2.1: Composició fraccionària pel H₂SO₃ en funció del pH del medi

El comportament del sulfur d'hidrogen quan reacciona en un medi fortament bàsic és similar al del diòxid de sofre. Les reaccions que es duen a terme quan el sulfur d'hidrogen és dissolt en un medi aquós, amb una concentració elevada d'hidròxid de sodi són:



La principal diferència és que l'ió hidrogensulfur presenta característiques àcides molt febles, essent doncs l'ió sulfur una base mitjanament forta. Aquest comportament es veu reflectit en el diagrama de composició fraccionària per l'àcid sulfhídric corresponent al gràfic 6.2.2. En aquest cas, per a valors de pH inferiors a 9 ja comença a ser possible la desorció del gas solut, donat que a més aquest

acostuma a estar present en la solució en grans quantitats (en forma de base conjugada), pel fet que l'operació és pràcticament discontinua per al líquid.



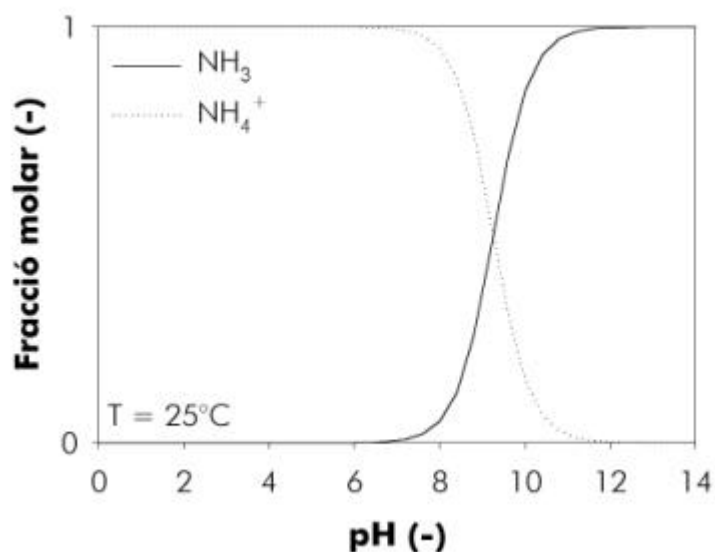
Gràfic 6.2.2: Composició fraccionària pel H₂S en funció del pH del medi

El pH de la dissolució fou mesurat cada 2 hores d'operació, per tal d'evitar treballar en condicions diferents de les d'excés d'agent absorbent. De la mateixa manera, la concentració de NaOH fou mesurada setmanalment mitjançant l'extracció d'una alíquota del tanc d'emmagatzematge i posterior valoració amb àcid clorhídric 0.1 M, utilitzant fenolftaleïna com a indicador.

Pel cas de l'absorció d'amoniac, el líquid absorbent fou una dissolució d'àcid sulfúric de concentració 0.4 mol/l. En aquest cas el procés reactiu ve descrit per:



L'amoniac pràcticament deixa d'estar present a la dissolució a partir de valors de pH inferiors a 7, tal i com s'observa en el diagrama de composició fraccionària corresponent al gràfic 6.2.3. El pH fou mesurat en els mateixos intervals de temps que en els casos anteriors, i també fou valorada la solució absorbent setmanalment mitjançant NaOH 0.1 M.



Gràfic 6.2.3: Composició fraccionària pel NH_3 en funció del pH del medi

6.2.3 DISSENY I PLANIFICACIÓ DELS EXPERIMENTS

Donada la gran quantitat de paràmetres a investigar, es fa necessari d'utilitzar alguna tècnica d'optimització de la distribució i quantitat d'experiments a efectuar. L'ús del disseny d'experiments conjuntament amb la modelització estadística en l'experimentació i en l'anàlisi de

dades, millora la qualitat, redueix el temps d'investigació, i en conseqüència estalvia costos (Rappaport *et al.*, 1998).

Malgrat que aquesta tècnica no és gaire popular en estudis propers a l'enginyeria química, els seus avantatges són clars. Les etapes en tot procediment de disseny i anàlisi d'experiments són (Frutos, 1992):

1. Reconeixement del problema. Definició del sistema

L'objectiu bàsic d'aquest model consisteix a determinar quins són els valors òptims d'un seguit de factors que afecten al procés d'absorció amb reacció química en un sistema jet-venturi 'scrubber'.

2. Elecció dels factors i dels seus nivells

Els factors a estudiar són:

[gas]: Concentració inicial del solut gasós a absorbir (ppm v/v)

F_G : Cabal d'aire portador aspirat pel ventilador (m^3/h)

F_L : Cabal de líquid absorbent injectat a l'atomitzador (m^3/h)

Tot i que es podrien definir variables qualitatives pel tipus de configuració emprada, tipus de solut gasós i altres paràmetres geomètrics referits al coll del tub venturi i l'atomitzador, s'ha preferit elegir un nombre màxim de tres factors, ja que facilitava la discussió dels resultats obtinguts.

Els nivells dels factors estudiats depengueren del tipus de configuració i paràmetres geomètrics del coll i l'atomitzador. S'intentà en tots els casos disposar del domini experimental més ampli. Els dominis experimentals utilitzats en el present estudi, per a

cada gas experimentat poden observar-se en les taules 6.2.1 a la 6.2.3.

3. Selecció de la variable resposta

La variable que s'utilitza per a efectuar el seguiment i consecució dels objectius és el rendiment d'absorció del gas solut, definit per l'expressió 6.2.1.

4. Elecció del model i del disseny experimental

El model estadístic al qual es pretén ajustar les dades experimentals, correspon a la superfície de resposta de segon ordre o quadràtica completa:

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^K \beta_i X_i + \sum_{i=1}^K \beta_{ii} X_i^2 + \sum_{i=1}^{K-1} \sum_{j=i+1}^K \beta_{ij} X_i X_j \quad (6.2.6)$$

on y és la variable resposta, β són els coeficients del model i X_i representen els factors elegits i K és el nombre de factors. Aquestes expressions permeten la localització de màxims i mínims locals, facilitant la tasca d'elecció dels valors òptims dels factors. La determinació dels coeficients dels termes quadràtics del model no és possible amb un disseny factorial de dos nivells (2^K), ja que aquests no permeten mesurar els efectes de corbatura (Montgomery, 1991). La solució immediata és estendre els plans factorials a un nombre superior de nivells, passant a plans factorials 3^K . El problema inherent a l'augment en el nombre de nivells, és l'increment del nombre d'experiments a realitzar. Una possible solució consisteix en la utilització de plans compostos (Box i Wilson, 1951). Aquest tipus de disseny consisteix en:

- Un pla factorial 2^K per a $K < 5$ o bé un pla factorial 2^{K-1} per a $K > 5$
- $2K$ experiments en els eixos de coordenades

Un o diversos experiments en el centre del domini experimental

Una representació esquemàtica d'un disseny factorial de Box - Wilson de plans compostos central correspon a la figura 6.2.4 (les variables ja estan codificades):

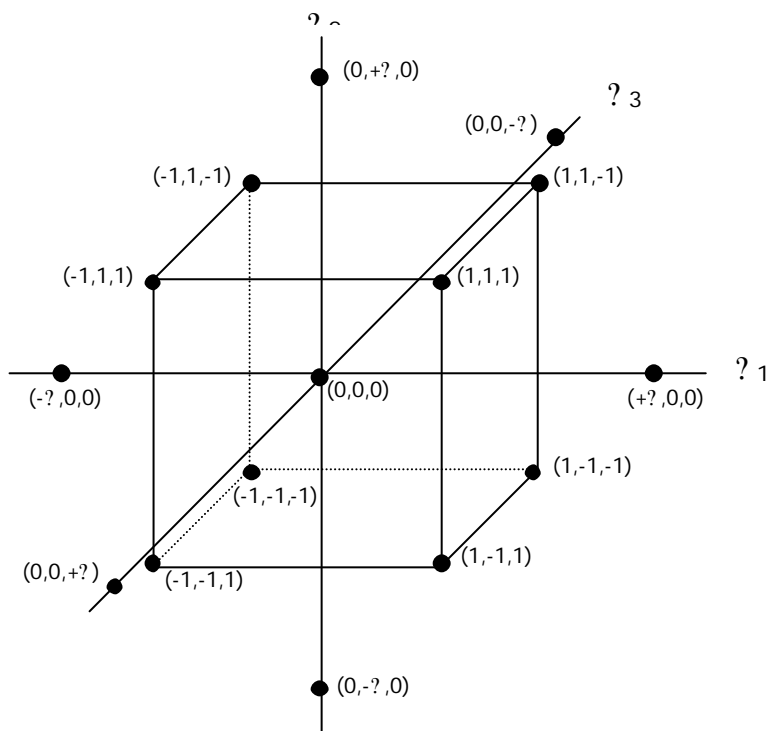


Figura 6.2.4: Distribució dels experiments en un disseny factorial central de plans compostos per a tres factors (codificat).

on el paràmetre α indica la màxima distància del punt central, i es calcula segons:

$$\alpha = \alpha_f n_f^{1/4} \tag{6.2.7}$$

on n_f és el nombre d'experiments en la part del disseny factorial (2^k).

Un dels avantatges d'aquest tipus de dissenys és que són rotables. Això indica que la variança de la resposta predita pel model per a qualsevol punt del disseny és únicament funció de la distància al punt des del centre del disseny, i no és funció de la direcció. És a dir la precisió del model serà la mateixa en totes direccions. Per contra, aquests dissenys no presenten ortogonalitat, és a dir, existeixen col·linealitats entre els coeficients del model. Segons Box *et al.* (1989), això es pot solucionar tot elegint el nombre adequat d'experiments en el punt central. Per al cas de tres factors el nombre d'experiments a efectuar és de 20. Aquesta seqüència d'experiments s'ha repetit per a cada combinació gas - configuració - tipus coll / atomitzador. Els valors codificats dels factors en l'aplicació del disseny d'experiments poden observar-se en la taula 6.2.4.

Taula 6.2.4: Codificació dels experiments a realitzar seguint el disseny factorial compost central.

	Factor		
	[gas] _i (ppm)	F _G (m ³ /h)	F _L (m ³ /h)
	Factor Codificat		
Nº Experiment	? ₁	? ₂	? ₃
1	+1	+1	+1
2	+1	+1	-1
3	+1	-1	+1
4	+1	-1	-1
5	-1	+1	+1
6	-1	+1	-1
7	-1	-1	+1
8	-1	-1	-1
9	+?	0	0
10	-?	0	0
11	0	+?	0

12	0	-?	0
13	0	0	+?
14	0	0	-?
15	0	0	0
16	0	0	0
17	0	0	0
18	0	0	0
19	0	0	0
20	0	0	0

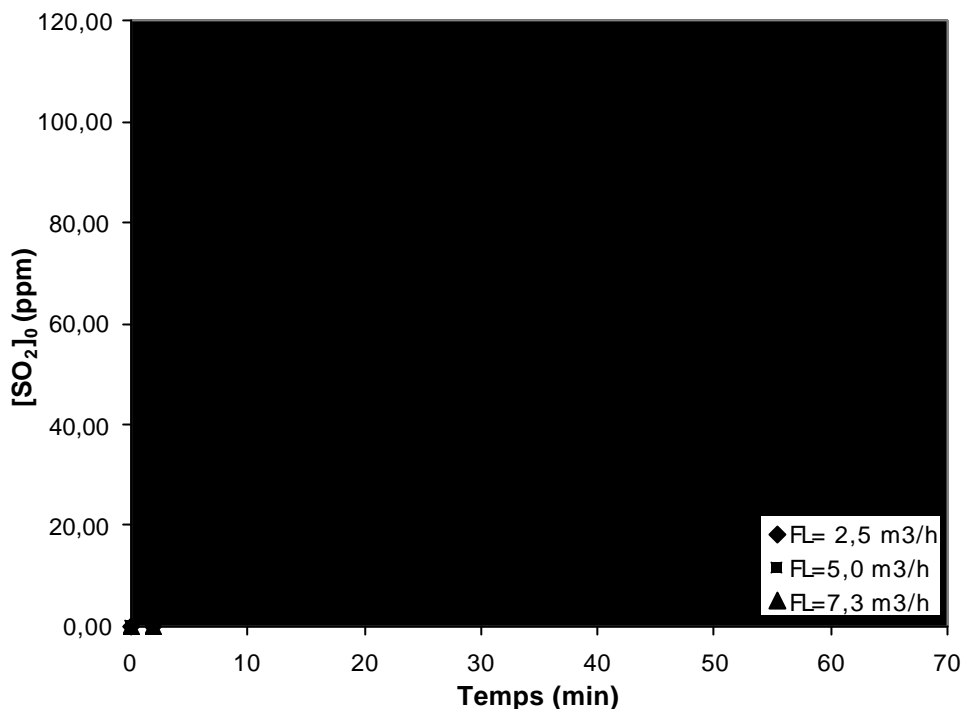
L'ordre d'execució dels experiments fou aleatoritzat per tal que les rèpliques siguin genuïnes, i disminuir el possible error experimental degut a interaccions de factors que no pertanyen a les experiències.

5. Realització dels experiments

Els experiments foren realitzats en condicions ambientals, si es té en compte que la planta pilot es troba a la intempèrie. La temperatura ambient fou mesurada, ja que les oscil·lacions d'aquesta durant els períodes estacionals, i fins i tot durant el dia, són considerables. Aquesta temperatura pot afectar en gran mesura a la solubilitat en dissolucions aquoses dels soluts gasosos.

Tots els experiments s'efectuaren de forma que es deixà assolir un valor estacionari en el dispositiu de mesura a la sortida de la instal·lació, essent aquest valor estacionari el valor utilitzat per al càlcul del rendiment. Val a dir que en una primera sèrie d'experiments, s'observà que el temps necessari per assolir un valor estacionari era molt elevat. A mode d'exemple, el gràfic 6.2.5 presenta l'evolució de la concentració a la sortida del sistema jet-venturi 'scrubber', per a tres dels experiments realitzats.

És evident que el sistema format per la planta + sensor presenta uns valors de temps mort acceptables, de l'ordre de 2 minuts. La dinàmica del sensor tampoc sembla molt lenta, el problema ve donat pel temps d'estabilització necessari. Aquest problema, accentuat a baixos cabals de líquid, fou solucionat tot i considerar que s'ha assolit l'estat estacionari quan la diferència entre els dos valors de dues mesures consecutives (el temps de mostreig fou de 2 minuts), era inferior al 2% del valor absolut de la mesura. D'aquesta manera, s'aconseguí reduir considerablement la durada dels experiments. Tot i això, el factor limitant fou el temps necessari per retornar el sensor al zero de calibratge un cop finalitzat cada experiment. El temps de 'buidat' del sensor va arribar en alguns casos (els de major concentració) a ser superior a una hora. Malgrat que en el present estudi només es presenten les dades corresponents als dissenys descrits anteriorment (240 experiments), el nombre total d'experiments efectuats en la planta durant la realització d'aquest estudi sobrepassen amb escreix els 600.



Gràfic 6.2.5: Concentracions a la sortida del sistema jet-venturi 'scrubber' en funció del temps (SO_2 , configuració 1, $F_G=1100$ m³/h, coll de 150 mm, atomitzador A).

6. Anàlisi dels resultats

Tot i que les superfícies de resposta són la principal via d'obtenció d'informació en aquest tipus de models estadístics, cal una anàlisi acurada de la bondat del model, per comprovar si la fiabilitat de les prediccions és suficient. Aquesta comprovació s'efectuarà a partir de l'anàlisi de variança dels models complets.

7. Conclusions i recomanacions

A partir de la informació generada en l'anàlisi dels resultats, es poden extreure conclusions sobre els fenòmens involucrats, així com criteris de millora del sistema estudiat (recomanacions).

6.2.4 DETERMINACIÓ DE PARÀMETRES FÍSICS

Tal i com s'ha comentat en el capítol 6.1 i per tal de poder treballar amb els models dinàmics descrits, es fa necessària la determinació de certs paràmetres tals com constants d'equilibri, constants de solubilitat (Llei de Henry) i difusivitats de les diferents espècies que intervenen en els processos d'absorció, tant en la fase gas com en la líquida. Cal recordar que la planta pilot funciona en semi-continu, de forma que el corrent gasós és introduït de forma contínua al tub venturi, mentre que el líquid absorbent és recirculat a partir del volum del tanc d'emmagatzematge. Per aquest motiu, les propietats de la dissolució aquosa experimentaran variacions a mesura que les concentracions de les diferents espècies iòniques es veuen modificades.

6.2.4.1 DETERMINACIÓ DE LES CONSTANTS D'EQUILIBRI QUÍMIC

Les constants d'equilibri efectives en unitats de concentració molar foren determinades a partir de les constants termodinàmiques, tot i introduint els coeficients individuals d'activitat per a cada espècie. Aquests darrers incorporen l'efecte de la força iònica de la dissolució.

Els coeficients d'activitat per a cada espècie iònica individual poden ser avaluats mitjançant l'equació de Davies modificada, derivada de la llei limitant de Debye - Huckel (Chang i Rochelle, 1981, 1982, 1985; Limiñana

et al., 1990; Bravo *et al.*, 1991; Díaz *et al.*, 1991; Schultes, 1998). Cal dir que Krissmann *et al.* (1998) proposaren una expressió alternativa, ja que l'expressió de Debye - Huckel presenta un elevat percentatge d'error quan les concentracions dels electròlits són superiors a 0.1 molal. Havent comprovat que pels rangs de concentració en què s'opera en el present treball, les desviacions observades no foren gaire important, s'utilitzà l'expressió de Davis modificada, donat que és molt més simple:

$$\log \gamma_j = 0.512 n_j^2 \frac{I^{1/2}}{1 + 0.312 c_{ij} I^{1/2}} + c_{2j} I \quad (6.2.8)$$

On c_{1j} i c_{2j} són dos paràmetres característics, els quals poden trobar-se a Pitzer (1991), n_j és la càrrega de l'ió j , I és la força iònica de la dissolució:

$$I = \frac{1}{2} \sum_j n_j^2 C_j \quad (6.2.9)$$

6.2.4.2 DETERMINACIÓ DE LA SOLUBILITAT FÍSICA DELS SOLUTS GASOSOS EN LA DISSOLUCIÓ AQUOSA

Els gasos emprats en el present estudi presenten diferents solubilitats, les quals han estat avaluades a partir dels valors de la solubilitat en aigua pura i corregint l'efecte de l'electròlit utilitzant el mètode de Van Krevelen i Hoftijzer (Danckwerts, 1970; Chang i Rochelle, 1981, 1985; Limiñana *et al.*, 1990; Bravo *et al.*, 1991; Díaz *et al.*, 1991; Schultes, 1998). Aquest mètode relaciona la constant de Henry en la solució amb aquella en aigua a la mateixa temperatura segons l'expressió:

$$\log \frac{C_{He}}{C_{He_w}} = K_s I \quad (6.2.10)$$

on K_s correspon a la suma de contribucions referides a les espècies iòniques positives o negatives presents i a les espècies gasoses:

$$K_s = f_+ + f_- + f_G \quad (6.2.11)$$

La solubilitat en aigua pura pels diferents gasos fou extreta d'Astarita (1983). La majoria de contribucions per a les espècies relacionades amb el present estudi poden trobar-se a Danckwerts (1970).

Aquesta és probablement una de les propietats més susceptible de variar al llarg del temps d'execució dels experiments. Els seu efecte serà avaluat posteriorment.

6.2.4.3 DETERMINACIÓ DELS COEFICIENTS DE DIFUSIÓ EFECTIUS

Pel que fa als coeficients de difusió efectius de les espècies iòniques en solució, foren avaluats a partir dels seus respectius valors a dilució infinita, considerant l'efecte dels electròlits dissolts. Cal tenir en compte que els fluxos difusionals no només depenen del gradient de concentració, sinó també del gradient de potencial elèctric existent en la dissolució (Rochelle, 1992). El coeficient de difusió efectiu pot relacionar-se amb el gradient de concentració a partir del coeficient de difusió a dilució infinita segons (Limiñana, *et al.*, 1990):

$$D_j = D_j^0 \left(\frac{C_j}{C_j^0} \right)^{n_j} \frac{D_j^0 C_j}{D_j^0 C_j} \quad (6.2.12)$$

Els valors de D_j^0 han estat avaluats mitjançant l'equació de Nerst (Reid *et al.*, 1987).

Quant als coeficients de difusió dels gasos en la dissolució aquosa, s'emprà l'equació de Wilke i Chang, derivada de la teoria cinètica de Stokes - Einstein (Reid *et al.*, 1987):

$$D_j = 7.4 \times 10^{-8} \frac{T(2.6M)^{1/2}}{\mu^{0.6}} \quad (6.2.13)$$

on M és el pes molecular pel solvent, i v és el volum molar del solut al seu punt d'ebullició normal.

Finalment, i donat que els gasos emprats no són purs sinó que es troben dissolts en aire, els seus respectius coeficients de difusió en la fase gasos foren avaluats a partir de l'equació descrita per Chapman (1952):

$$D_j = \frac{1.86 \times 10^{-23} T^{3/2} \frac{1}{M_j} \frac{1}{M_i}}{P s_{ij}^2} \quad (6.2.14)$$

on s_{ij} i v són dos paràmetres empírics avaluables segons el procediment descrit en Reid *et al.* (1987).