Εξίσωση Chapman - Enskog.

$$D_{AB} = \frac{1.858\,10^{-7}}{P\,\sigma_{AB}^{2}\,\Omega_{D,AB}} \sqrt{T^3\left(\frac{1}{M_A}+\frac{1}{M_B}\right)} \quad (1)$$

$A = H_2$ $M_A = 2$ $\left.\begin{matrix}\\ \end{matrix}\right\}$ $\frac{g}{gmol}$ $P = 1\,atm$

$B = NH_3$ $M_B = 17$ $\left.\begin{matrix}\\ \end{matrix}\right\}$ $\frac{g}{gmol}$ $T = 298\,K$

Πίνακας Π. Σ.1 (eclass)

Για H_2: $\sigma_A = 2,968\,\text{Å}$

$\varepsilon_A/k = 33.3\,K$

Για NH_3: ΔΕΝ ΥΠΑΡΧΟΥΝ ΔΕΔΟΜΕΝΑ

- $\sigma_B = 2.44\left(\frac{T_c}{P_c}\right)^{1/3} = 2.44\left(\frac{405.4}{111.5}\right)^{1/3} =$
$= 3.75\,\text{Å}$
- $\varepsilon_B/k = 0.75\,T_c = 304\,K$

Άρα $\sigma_{AB} = \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2} = 3.359\,\text{Å}$

$$\frac{\varepsilon_{AB}}{k} = \sqrt{\frac{\varepsilon_A}{k}\cdot\frac{\varepsilon_B}{k}} = 100.6\,K$$

Είναι $\frac{KT}{\varepsilon_{AB}} = \frac{1}{100.6} * 298 = 2.962$

και από Πίνακα Π.2.2 (eclass)

$\Omega_D = 0.9576$ για $\frac{KT}{\varepsilon_{AB}} = 2.9$

$\Omega_D = 0.9440$ για $\frac{KT}{\varepsilon_{AB}} = 3$

Άρα για για μέση τιμή $\Omega_D \simeq 0.95$

$$(1) \rightarrow D_{AB} = \frac{1.858\,10^{-7}}{1 * 3.354^2 * 0.95} \sqrt{298^3 \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{17}\right)}$$

$$\rightarrow D_{AB} = 0.67\,10^{-4}\ m^2/s$$

- Από τον Πίνακα Π.3.1. (eclass)

$D_{H_2-NH_3} = 0.849\,10^{-4}\ \frac{m^2}{s}$ @ 293 K.

- Θερμοκρασιακή διόρθωση

$$D_{AB_{298}} = D_{AB_{293}} \left(\frac{298}{293}\right)^{1.8} = 0.875\,10^{-4}\ \frac{m}{s}$$

- Απόκλιση $= \frac{0.875 - 0.67}{0.875} = 23,3\%$