

معادله پیوستگی در مختصات کارتزین و غیره:

Rectangular :

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \left(\frac{\partial N_{Ax}}{\partial x} + \frac{\partial N_{Ay}}{\partial y} + \frac{\partial N_{Az}}{\partial z} \right) = R_A$$

Cylindrical :

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r N_{Ar}) + \frac{1}{r} \frac{\partial N_{A\theta}}{\partial \theta} + \frac{\partial N_{Az}}{\partial z} \right) = R_A$$

Spherical :

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 N_{Ar}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (N_{A\theta} \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial N_{A\Phi}}{\partial \Phi} \right) = R_A$$

بسط معادلات پیوستگی در حالت ثابت ماندن ضریب نفوذ مولکولی و دانسیته:

Rectangular :

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \left(v_x^* \frac{\partial C_A}{\partial x} + v_y^* \frac{\partial C_A}{\partial y} + v_z^* \frac{\partial C_A}{\partial z} \right) = R_A$$

$$+ D_{AB} \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right)$$

Cylindrical :

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \left(v_r^* \frac{\partial C_A}{\partial r} + v_\theta^* \frac{1}{r} \frac{\partial C_A}{\partial \theta} + v_z^* \frac{\partial C_A}{\partial z} \right) = R_A$$

$$+ D_{AB} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 C_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right]$$

Spherical :

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \left(v_r^* \frac{\partial C_A}{\partial r} + v_\theta^* \frac{1}{r} \frac{\partial C_A}{\partial \theta} + v_\phi^* \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial C_A}{\partial \Phi} \right) = R_A + D_{AB} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) \right.$$

$$\left. + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial C_A}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 C_A}{\partial \Phi^2} \right]$$

می توان برای انواع شار جرمی در مختصات مختلف استفاده نمود:

$$N_{A,\theta} = J_{A,\theta} + x_A (N_{A,\theta} + N_{B,\theta})$$

$$\text{Or : } N_{A,\theta} = x_A (N_{A,\theta} + N_{B,\theta}) - CD_{AB} \frac{\partial x_A}{\partial \theta}$$

Also :

$$N_{A,r} = J_{A,r} + x_A (N_{A,r} + N_{B,r})$$

$$\text{Or : } N_{A,r} = x_A (N_{A,r} + N_{B,r}) - CD_{AB} \frac{\partial x_A}{\partial r}$$

انتقال جرم پایدار از سطوح کروی

فرض کنید یک شیء کروی با محیط انتقال جرم صورت می دهد یعنی ماده A پس از ترک سطح جامد در گاز B که خود ساکن فرض می شود نفوذ می کند. شرایط مرزی و معادله اولیه (در غیاب واکنش) به شکل زیر خواهد بود:

$$(@r = r_s \rightarrow x_A = x_{A,r_s}) \& (@r = r_o \rightarrow x_A = x_{A,b})$$

$$\left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 N_{A,r}) \right) = 0$$

$$r^2 N_{A,r} = \text{constant} = r_s^2 N_{A,r_s}$$

$$\text{شدت انتقال جرم از سطح کره} = N_{A,r_s}$$

از آنجا که در این مورد گاز B خود نفوذ نمی کند بنابراین در خواهیم داشت:

$$N_{A,r} = x_A(N_{A,r}) - CD_{AB} \frac{\partial x_A}{\partial r}$$

همچنین با توجه به شرایط پایدار میتوان مشتق نسبی را به مشتق عادی تبدیل نمود

$$N_{A,r} = x_A(N_{A,r}) - CD_{AB} \frac{dx_A}{dr}$$

با جابجایی این رابطه و جاگذاری در معادلات داریم:

$$N_{A,r}(x_A - 1) = CD_{AB} \frac{dx_A}{dr}$$

$$N_{A,r} = \frac{CD_{AB}}{x_A - 1} \frac{dx_A}{dr}$$

$$r^2 N_{A,r} = \frac{CD_{AB}}{x_A - 1} \frac{dx_A}{dr} r^2$$

$$\frac{CD_{AB}}{x_A - 1} \frac{dx_A}{dr} r^2 = N_{A,r_s} r_s$$

با توجه به ثابت بودن طرف دوم معادله فوق از این معادله انتگرال می گیریم:

$$SUPPOSE : \frac{N_{A,r_s} r_s}{CD_{AB}} = k$$

$$\frac{dx_A}{x_A - 1} = \frac{kdr}{r^2}$$

$$\frac{-dx_A}{1 - x_A} = \frac{kdr}{r^2}$$

$$\ln(1 - x_A) = -\frac{k}{r} + c$$

$$\ln(x_B) = -\frac{k}{r} + c$$

$$\ln(x_{B,s}) = -\frac{k}{r_s} + c$$

$$\ln\left(\frac{x_B}{x_{B,s}}\right) = -\frac{k}{r} + \frac{k}{r_s}$$

اگر در رابطه فوق شرط مرزی دوم نیز جاگذاری شود:

$$\frac{1}{-\frac{1}{r} + \frac{1}{r_s}} \ln\left(\frac{x_B}{x_{B,s}}\right) = \frac{1}{-\frac{1}{r_b} + \frac{1}{r_s}} \ln\left(\frac{x_{B,b}}{x_{B,s}}\right)$$

$$\ln\left(\frac{x_B}{x_{B,s}}\right)^{\frac{1}{-\frac{1}{r} + \frac{1}{r_s}}} = \ln\left(\frac{x_{B,b}}{x_{B,s}}\right)^{\frac{1}{-\frac{1}{r_b} + \frac{1}{r_s}}}$$

$$\left(\frac{x_B}{x_{B,s}}\right)^{\frac{1}{-\frac{1}{r} + \frac{1}{r_s}}} = \left(\frac{x_{B,b}}{x_{B,s}}\right)^{\frac{1}{-\frac{1}{r_b} + \frac{1}{r_s}}}$$

تعیین ضریب نفوذ مولکولی

روابط متعددی جهت تعیین ضریب نفوذ مولکولی در گازها و مایعات ارائه شده است

معادله‌ی Chapman-Enskog یکی از این روابط است:

$$D_{AB} = 0.0018583 \frac{\sqrt{T^3 \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)}}{Pr_{AB}^2 f} \quad 28$$

D_{AB} = ضریب نفوذ مولکولی بر حسب cm^2/s

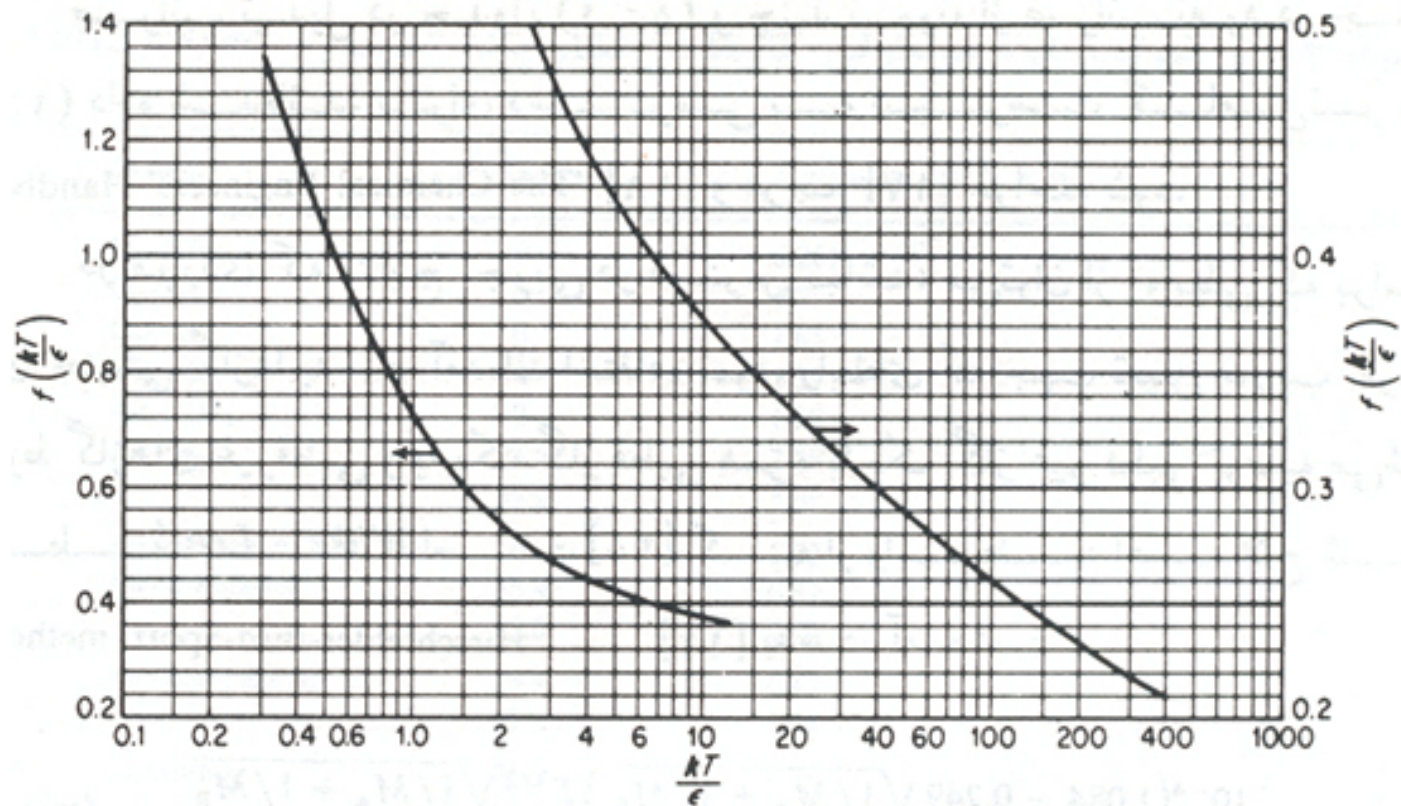
T = دما بر حسب درجه کلوین

P = فشار بر حسب اتمسفر

$\epsilon_{AB} = \sqrt{\epsilon_A \cdot \epsilon_B}$: جدایش مولکولی در زمان برخورد بر
حسب nm با شعاع‌های فرضی برای A,B

$r_{AB} = \frac{r_A + r_B}{2}$: انرژی جذب مولکولی A,B

و f تابع برخورد است که در شکل بعدی به صورت تابعی
از $\frac{kT}{\epsilon_{AB}}$ ارائه شده است



شکل ۱-تابع برخورد در نفوذ ملکولی