نشریه تحقیقاتی فنی ـ مهندسی‌استقلال، دانشگاه صنعتی اصفهان، شماره ۱۴ اسفندماه ۱۳۷۲

پاسخ به

یادداشتی برمقاله شبیه سازی دیفیوژن گاز درلوله‌های موئینه و جامدات‌متخلخل

غلامرضاآریانپور* - محمد حسن عباسی**

ضمن ابراز تشکر از دقت و اظهار نظر نویسنده محترم یادداشت، ذکر نکات زیر را ضروری می‌دانیم:

۱- همانگونه که در مقدمه مقاله تصریح شده، در دیفیوژن گاز در محیطهای متخلخل رژیم دیفیوژن ممکن است معمولی[1] ($r \gg \lambda$)، ملکولی یا نودسن[2] ($\lambda \gg r$) ویا هر دو باشد. در شبیه سازی انجام شده رژیم دیفیوژن نودسن بوده که از آن با عنوان دیفیوژن ملکولی هم نام برده شده است. در این‌رژیم دیفیوژن، هرذره مستقل از سایر ذرات و با برخوردهای متوالی با دیواره مسیر حرکت می‌کند

---

* فارغ التحصیل کارشناسی ارشد دانشکده مهندسی مواد - دانشگاه صنعتی اصفهان

** استادیار دانشکده مهندسی مواد - دانشگاه صنعتی اصفهان

1. Ordinary

2. Molecular or Knudsen

[DOR: 20.1001.1.2251600.1372.14.1.7.2]

و از آنجا که برخوردهای بین ملکولی ناچیز و در برابر برخوردهای ذرات با دیواره مسیر حرکت قابل صرفنظر کردن است، لذا حرکت ذرات هر گاز متأثر از وجود سایر ملکولها نخواهد بود.اینکه بیان شده وقتی دیفیوژن به تنهایی حاکم است که اختلاف فشار کل در دوطرف جامد وجود نداشته باشد، کاملاً صحیح است و بطور کلی فلاکس یا شار انتقال گازی مثل A در یک مخلوط گازی A - B در محیطی متخلخل و در شرایط ایزوترم از رابطه زیر پیروی می کند [۱]:

$$N_A = -D_{Aeff} \nabla C_A + X_A \delta_A N - X_A \gamma_A (C_T Bo/\mu) \Delta P$$

که جمله سوم رابطه فوق همان مکانیزم انتقال هیدرودینامیکی است. امادرشرایطی که رژیم دیفیوژن نودسن حاکم گردد (فشارپایین یا خلل وفرج ریز)، رابطه کلی فوق بصورت زیرخلاصه می شود [۱]:

$$N_A \approx - D_{AK} \nabla C_A$$

که در این رابطه D_{AK} ضریب دیفیوژن نودسن است. همانطور که اشاره شد، این از آنجا ناشی می‌شود که ذرات گاز A مستقلاً و در اثر برخوردهای پی‌درپی با دیواره مسیر حرکت می کنند و وجود ذرات دیگر مثل ذرات گاز B در حرکت آنها بی‌تأثیر است و می توان حتی ذرات گاز B را غایب دانست. بنابراین در شرایط دیفیوژن نودسن، چنانچه در طرف دیگر جامد گازی مثل B داشته باشیم و فشار جزئی A در آن صفر باشد و یا اینکه خلاء باشد فلاکس یا شار ذرات A فرقی نخواهد کرد و بعبارت دیگر انتقال هیدرودینامیکی در برابر انتقال دیفیوژنی قابل صرفنظر کردن است و بر شبیه سازی تأثیری نمی گذارد.

۲- در شرایطی که رژیم دیفیوژن نودسن حاکم باشد، هر ذره گاز بصورت پرش های پراکنده از یک نقطه روی دیواره مسیر به نقطه ای دیگر حرکت می کند[1]. ذره پس از هر برخورد برای یک پریود زمانی کوچک جذب سطح می شود و سپس در جهتی مستقل از جهت برخورد از دیواره جدا

1. Random Walk

[DOR: 20.1001.1.2251600.1372.14.1.7.2]

می‌شود [۲]. لذا همواره احتمال انعکاس ذره بعد از یک برخورد در جهتی که آن را برگرداند وجود دارد و این طور نیست که تصور کنیم هر ذره ای که در برخورد به سطح جامد وارد خلل و فرج شد باحتمال صددرصد به انتهای مسیر رسیده و عبور خواهد کرد. اگر چنین بود فقط میزان تخلخل تعیین کننده بود و اندازه خلل و فرج و پیچیدگی آن نقشی نداشت.

۳- پس از برقراری حالت یکنواخت[1] شیب غلظت در جامد خطی خواهد بود. لذا شار دیفیوژن که متناسب با این شیب است در هر مقطعی از جامد ثابت خواهد بود و منحصر به x=0 نخواهد بود.

۴- رابطه (۲) مقاله از تحقیقات پولارد[2] و پرزنت[3] [۳] گرفته شده و شرط اعمال شده توسط این محققین همان شرط ($\lambda \gg L \gg r$) است. در واقع هدف این محقیقن از اعمال این شرط تعیین موقعیت λ و r و L نسبت بهم بوده است و شرط $r/L \gg \lambda$ اصولاً صحیح نیست چون λ کمیتی با بعد طول است و r/L کمیتی بدون بعد است.

۵- اینکه رابطه (۳) وقتی حاصل می شود که $r/\lambda \to 0$ کاملاً صحیح است. اما بایستی توجه داشت که شرایط لازم برای به سمت صفر رفتن r/λ یکی آن است که اندازه خلل و فرج کوچک باشد ($r \to 0$) و دیگری آن است که برای یک مسیر دیفیوژن با اندازه مشخص λ خیلی بزرگ شود ($\lambda \to \infty$) که این با کاهش دانسیته ملکولی و فشار ممکن می گردد. رابطه داده شده برای λ هم چنین چیزی را پیش بینی می کند. در بحث مقاله چون مسیری با شعاع مشخص در نظر گرفته شده، لذا برای حاکم شدن رژیم دیفیوژن نودسن باید λ یعنی راه آزاد متوسط ذرات گاز خیلی بزرگ باشد. در حقیقت شرط $r \gg \lambda$ مد نظر بوده نه آنکه واقعاً λ به چند متر برسد.

۶- در مورد رابطه (۳) و اینکه چرا D از D_k کمتر است، بهتر است به اصل مقاله [۳] مراجعه گردد. اما اینکه در مورد $r/L = 1/3$ در مقاله ما بحثی صورت گرفته است، هدف آن بوده که تأکید کرده باشیم در محدوده $r/L = 0$ تا تقریباً $r/L = 1/3$ نتایج شبیه سازی با نتایج معادله (۸) تطابق خوبی دارد و در نتیجه معادله (۸) در محدوده تقریبی $r/L < 1/3$ معادله مناسب و خوبی برای پیش بینی کسر عبور کرده (f) است.

---

1. Steady State
2. Pollard
3. Present

[DOR: 20.1001.1.2251600.1372.14.1.7.2]

مراجع

1. Szekely, J., Evans, J.W. and Sohn, H.Y., *Gas-Solid Reactions*, Academic Press, 1976.

2. Knudsen, M., "The Law of the Molecular Flow and Viscosity of Gases Moving Through Tubes", *Ann. Physik*, 28, pp. 75-130, 1909.

3. Pollard, W.G. and Present, R.D.,"On Gaseous Self-Diffusion in Long Capillary Tubes", *Phy. Rev.*, 73, 7, pp. 762-774, 1948.

[DOR: 20.1001.1.2251600.1372.14.1.7.2]