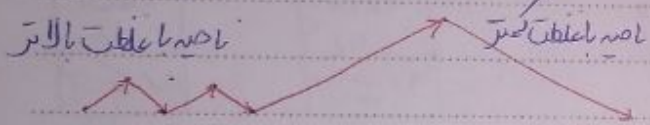
فصل دوم: نفوذ مولکولی

مکانیسم های انتقال جرم ← نفوذ مولکولی
مکانیسم های انتقال جرم ← جابجایی

هر مولکول که دارای دمایی بالاتر از صفر مطلق باشد دارای انرژی گرمایی است که موجب تحرک مولکول می‌شود و ضمن تحرک مولکول ها سبب می‌شود که یک مولکول در میان مولکول های دیگر نفوذ کرده و مسافتی را طی کند این پدیده در نهایت باعث می‌شود که در نهایت در یک مایع متحلل مولکول ها از ناحیه با غلظت بیشتر به ناحیه با غلظت کمتر رفته و غلظت در تمام نقاط یکنواخت گردد به این پدیده نفوذ مولکولی گفته می‌شود پدیده نفوذ مولکولی بر اساس نظریه جنبشی مولکول ها صورت می‌گیرد بر اساس این نظریه هر مولکول در یک مسیر متحلل و با یک سرعت متحلل حرکت کرده و در اثر برخورد با مولکول های دیگر در یک جهت دیگر و با یک سرعت دیگر به مسیر خود ادامه می دهد به میانگین مسافتی که یک مولکول طی می‌کند تا به مولکول دیگر برخورد کند را اصطلاحاً پویش آزاد متوسط (mean free path) گفته می‌شود



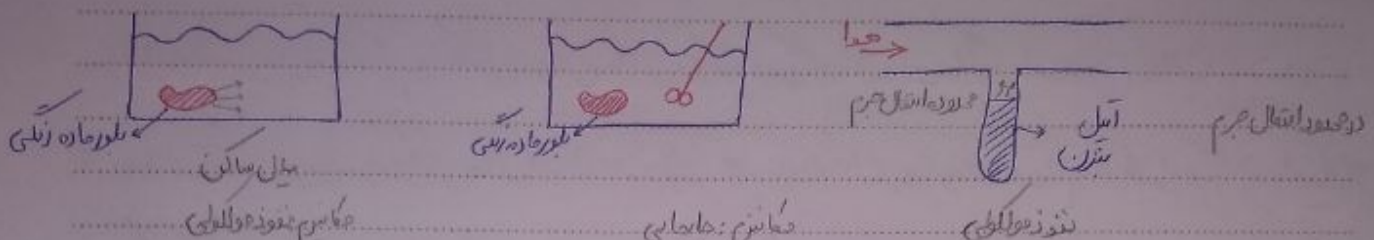
پدیده نفوذ مولکولی ذاتاً پدیده ای کند است به طوریکه در جامدات در هر یک دقیقه یک مولکول تنها یک هزارم میلی متر را می‌تواند طی کند در مایعات این مقدار به ۰٫۵ میلی متر و در گازها به ۱۰۰ میلی متر می‌رسد

نام	مبلغ به ریال	بانک / شعبه	شماره چک	ملاحظات

www.afaghcp.ir

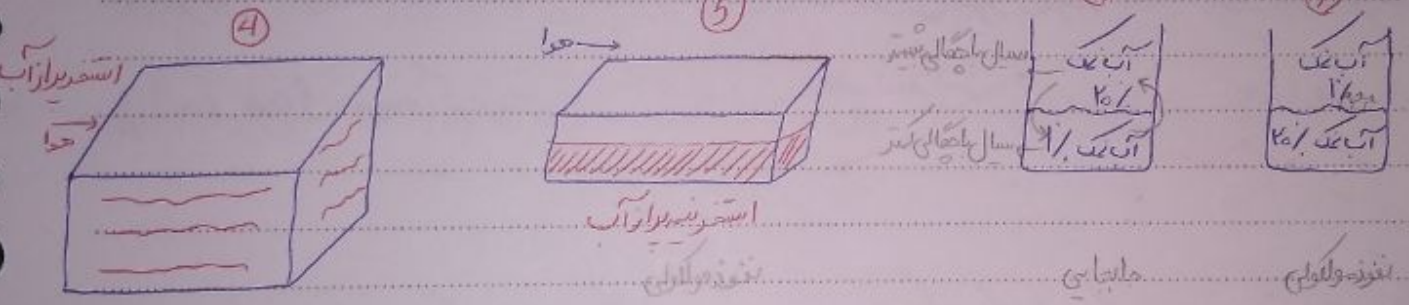
مکانیسم انتقال جرم در سیالات ساکن نفوذ مولکولی اما در سیال دارای حرکت مکانیسم جابجایی نیز وارد می‌شود که مکانیسم غالب نیز محسوب می‌شود به عبارت دیگر هرگاه در پدیده‌ی انتقال جرم حرکت به مفهوم سیالاتی وجود داشته باشد (یعنی بتوان دبی را اندازه‌گیری کرد) مکانیسم حاکم جابجایی خواهد بود

① ② ③



در حضور انتقال جرم ... مکانیسم حاکم نفوذ مولکولی ... مکانیسم: جابجایی ... مکانیسم حاکم نفوذ مولکولی

④ ⑤ ⑥ ⑦



نفوذ مولکولی ... جابجایی ... نفوذ مولکولی ... جابجایی

مورد ۶: در این حالت سیال با چگالی بیشتر بالا بوده و سیال با چگالی کمتر پایین می‌باشد و همین امر سبب می‌شود تا بصورت خود به خودی سیال با چگالی بیشتر پایین آمده و سیال با چگالی کمتر بالا رود بنابراین چون در محدوده انتقال جرم حرکت داریم مکانیسم غالب جابجایی است

نام	مبلغ به ریال	بانک / شعبه	شماره چک	ملاحظات

www.afaghcp.ir

علاوه‌کاه وجود آن که در این حالت هوا دارای حرکت سیالاتی است اما از آنجا که دو شده انتقال جرم حرکت آن احساس نمی‌شود بنابراین

مکانیسم نفوذ مولکولی است.

نکته: در مکانیزم نفوذ مولکولی منشاء حرکت اختلاف غلظت در یک فاز و به طور کلی تر اختلاف پتانسیل شیمیایی در بین ۲ یا چند فاز است. اما

در مکانیزم جابجایی منشاء حرکت اختلاف فشار می‌باشد

پتانسیل شیمیایی: $\mu_i = \left[\frac{\partial(nG)}{\partial n_i}\right]_{T,P,n_{j\neq i}}$

هوا غلظت آب 2٪

آب در دریا = آب در هوا

دریا غلظت آب 99,99٪

(۴) $\frac{m_1}{V} + \frac{m_2}{V} + \frac{m_3}{V} + \dots = \frac{m_t}{V}$

محاسبات:

(۱) غلظت مولی جزء i: $C_i = \frac{n_i}{V_{m^3}}$

(۱) چگالی جزء i: $\rho_i = \frac{m_i}{V_{m^3}}$

(۴) $\rho_t = \sum \rho_i$

(۲) غلظت مولی کل: $C_t = \frac{n_t}{V}$

(۲) چگالی کل: $\rho_t = \frac{m_t}{V}$ (جرم کل)

(۴) $C_t = \sum C_i$

(۳) $= \frac{n_1}{V} + \frac{n_2}{V} + \dots = \frac{n_t}{V}$

نام	مبلغ به ریال	بانک / شعبه	شماره چک	ملاحظات

www.afaghcp.ir

کسر جرمی: $w_i = \frac{m_i}{m_t}$ (جرم جزء i / جرم کل)

کسر مولی: $x_i = \frac{n_i}{n_t}$

تبدیل کسر مولی و جرمی به یکدیگر

$$x_i^* = \frac{w_i/mw_i}{\sum w_i/mw_i}$$

جرم مولکولی = M_w

$$w_i^{H_2O} = \frac{x_i \times mw_i}{\sum x_i \times mw_i}$$

* اثبات

$$x_A = \frac{n_A}{n_A+n_B+n_C+\cdots} = \frac{\frac{m_A}{mw_A}+m_t}{\frac{m_A}{mw_A}+m_t + \frac{m_B}{mw_B}+m_t + \cdots}$$

سرعت جزء i: $v_i = \frac{\text{حجم جزء i } (m^3)}{\text{زمان } (t) \times \text{سطح مقطع } (m^2)} = m/s$

اثبات تبیین دو اتمان

اثبات: $\sum (\frac{\rho_i}{\rho}) \times v_i$

سرعت متوسط

سرعت متوسط جرمی: $v = \frac{\sum \rho_i v_i}{\rho_t} = \sum w_i v_i$

سرعت متوسط مولی: $v^* = \frac{\sum c_i v_i}{c_t} = \sum x_i v_i$

اثبات: $\sum (\frac{c_i}{c}) v_i$

می دانیم:

$$w_i = \frac{\rho_i}{\rho_t} = \frac{\frac{m_i}{V}}{\frac{m_t}{V}} = \frac{m_i}{m_t}$$

$$x_i = \frac{c_i}{c_t} = \frac{\frac{c_i}{V}}{\frac{c_t}{V}} = \frac{c_i}{c_t}$$

نام	مبلغ به ریال	بانک / شعبه	شماره چک	ملاحظات

www.afaghcp.ir

HW: مخلوط از مادهٔ A و مادهٔ B با $w_A = 0.75$ وجود دارد. اگر سرعت A برابر $30\ m/s$ و سرعت B برابر $40\ m/s$ باشد، سرعت متوسط جرمی را بیابید.

$V = \sum w_i V_i = 0.75 \times 30 + 0.25 \times (-40)$

$w_B = 1 - 0.75 = 0.25$

سرعت متوسط مولی را بیابید.

نکته: [در رابطه‌ی سرعت متوسط مولی حتماً باستی کسر مولی اجزاء قرارداده شود در رابطه‌ی سرعت متوسط جرمی کسر جرمی اجزاء و چنانچه از درس گذشته می‌دانیم هرگاه با یک مخلوط گازی سروکار داشته باشیم به طوریکه درصد اجزاء داده شده است چنانچه با یک مخلوط گازی سروکار داشته باشیم درصدها مولی هستند و چنانچه با یک مخلوط مایع یا جامد سروکار داشته باشیم درصدها جرمی خواهند بود.]

مثال: سرعت متوسط مولی را در شرایط زیر محاسبه کنید چنانچه درهر دو مورد ماده A با سرعت $25\ m/s$ و ماده B با سرعت $40\ m/s$ حرکت کند؟

$V = \sum w_i \times V_i$ سرعت متوسط جرمی

$V^* = \sum x_i \times V_i$ سرعت متوسط مولی

حرف (الف) "گاز"

الف) گاز: هوا ← A: ۲۱٪ O_2 ، B: ۷۹٪ N_2 ← درصد مولی هستند ← چون گاز است

(الف) $x_A = 0.21$ ، $x_B = 0.79$

$V^* = \sum x_i V_i = x_A V_A + x_B V_B = 0.21 \times 40 + 0.79 \times 25$

حرف (ب)

ب) محلول آب و آمونیاک ← A: ۳۰٪ H_2O ، B: ۷۰٪ NH_3 ($M_{WB} = 17$) ← درصدها جرمی هستند ← چون مایع است

(ب) $w_A = 0.3$ ، $w_B = 0.7$ ← $x_B > x_A$ ← داریم

$x_i = \dfrac{w_i / M_{Wi}}{\sum w_i / M_{Wi}}$

$x_A = \dfrac{w_A / M_{WA}}{\frac{w_A}{M_{WA}} + \frac{w_B}{M_{WB}}} = \dfrac{0.3/18}{0.3/18 + 0.7/17} = 0.29$

$x_B = 1 - x_A = 1 - 0.29$

① $x_B = 0.71$

$x_B = \dfrac{w_B / M_{WA}}{\frac{w_A}{M_{WA}} + \frac{w_B}{M_{WB}}} = \dfrac{0.7/17}{0.3/18 + 0.7/17}$ ①

نام	مبلغ به ریال	بانک / شعبه	شماره چک	ملاحظات

www.afaghcp.ir

جواب الف)

$\begin{cases} \%_{V_1} = 21\% \longrightarrow x_A = 0.21 \\ \%_{V_2} = 79\% \longrightarrow x_B = 0.79 \end{cases}$

$w_i = \frac{x_i \times m w_i}{\sum x_i \times m w_i}$

$w_A = \frac{x_A \times m w_A}{x_A \times m w_A + x_B \times m w_B} \rightarrow 32$

$w_A = \checkmark$

$w_B = 1 - w_A = \checkmark$

$V^* = \sum x_i \times V_i$

$= 0.21 \times 20 + 0.79 \times 4$

$= \checkmark$

$V^* = x_A V_A + x_B V_B$

$= 0.21 \times 10 + 0.79 \times 15$

$V = w_A \times V_A + w_B \times V_B$

تمرین: سؤال فوق را دوباره حل کنید در صورتی که سرعت متوسط جرمی خواسته شود

شار یا فلاکس (Flux): مقدار جرم یا مول منتقل شده از واحد سطح در واحد زمان را که عمود بر جهت جریان انتقال جرم است به ترتیب شار جرمی یا شار مولی می نامند.

شار جرمی و مولی را با استفاده از دو رابطه زیر بیست می آورند

$N_i = C_i V_i$ (شار مولی) — C_i: غلظت مولی جزء i — V_i: سرعت جزء i

$\frac{mole}{m^2 \cdot s} = \frac{mole}{m^3} \times \frac{m}{s} = \frac{mole}{m^2 \cdot s}$

$n_i = \rho_i V_i$ (شار جرمی) — ρ_i: چگالی جزء i — V_i: سرعت جزء i

شار نفوذی نسبت به سرعت متوسط (مولی)

(۲) $N_i = C_i (V_i - V^* + V^*)$

(۳) $\Rightarrow N_i = C_i (V_i - V^*) + C_i V^*$

$N_i = J_i + C_i V^*$ — $C_i = x_i \cdot C_t$

J_i: شار نفوذی (مطلق) — $C_i (V_i - V^*)$: مقدار سنجی شود J_i — $C_i V^*$: شار ناشی از حرکت توده‌ای سیار مجتمع

$N_i = C_i V_i$

① شار کل $N = C_t V^*$

نام	مبلغ به ریال	بانک / شعبه	شماره چک	ملاحظات

www.aiaghcp.ir

② $N_t = \sum N_i$ سه کل

④ $C_i = x_i \times C_t$

$C_i V^* \longrightarrow N_t = C_t \cdot V^*$

$C_i = x_i \cdot C_t$

$C_i V^* = x_i C_t V^* \longrightarrow \sum N_i \Longrightarrow C_i V^* = x_i \sum N_i$

$\Longrightarrow N_i = J_i + x_i \sum N_i$

Adding ② → $N_A = J_A + x_A \sum N_i$ بیاریم

① $N_A = C_A V_A$

$N_A = J_A + x_A \sum N_i$

① $J_i = C_i (V_i - V^*)$

$J_A = C_A (V_A - V^*)$

فرمول های مهم:

تبادل نوع N_i نشان دهنده کل جهت مول ها از است

خارج می شود. این جا عدد مثال خارج شده در یک جهت تقابل

چیا شد. خواهیم تا زنده ی کوتاه بین تعداد کل مولکول

بررسی کنیم تعدادی مراد با توجه به ... تقابل

$(\sum N_i - x_i)$ و تعدادی از ... خارج شده در ... (...)

کل ... های خارج شده ... از این ... باشد

قانون اول فیک

نام	مبلغ به ریال	بانک / شعبه	شماره چک	ملاحظات

www.afarghcp.ir

مثال: سیالی متشکل از سه جزء A، B و C در جهت Z در حال حرکت می باشند در صورتی که غلظت مولی اجزا به ترتیب ۲، ۳ و ۴ درصد مول بر سانتی متر مکعب و سرعت مولی مطلق جزء A به ترتیب ۲، ۲/۵ و ۱ سانتی متر بر ثانیه باشد سرعت مولی جزء B (J_B) برابر با چه مقدار است؟ جواب ←

حاشیه

پنج شنبه
2 Apr 2015
۱۳ جمادی الثانیه ۱۴۳۶

۱۳

قانون اول فیک:

① فروردین ۱۳۹۴ رابطه کل غلظت کل

$$J_A = -C D_{AB} \frac{dx_A}{dz}$$

D_{AB} یا D_{BA}: ضریب نفوذ

$\frac{dx_A}{dz}$: تغییرات کسر مولی جزء A نسبت به مکان

$C_A = C \cdot x_A$

② رابطه: اگر غلظت کل ثابت باشد ← ثابت هم

$$J_A = -D_{AB} \frac{dC_A}{dz}$$

نکته: در رابطه‌ی قانون اول فیک C که همان غلظت کل می باشد بعد از مشتق قرار دارد و تنها زمانی که غلظت کل ثابت باشد C می تواند وارد مشتق شود در رابطه‌ی ② برقرار می شود

تمرین: نفوذ مولکولی در سیالات توسط قانون فیک بصورت $J_A = -D_{AB} \frac{dC_A}{dz}$ بیان می شود این رابطه در کدام مورد صحیح است؟

الف) در هر محلول ب) تنها برای گازها ج) تنها در محلول های با غلظت کل ثابت د) تنها برای محلول های با غلظت کل متغیر نسبت به مکان

فروردین ۱۳۹۴

جمعه
3 Apr 2015
۱۴ جمادی الثانیه ۱۴۳۶

۱۴

مثال) در یک سیستم چند جزئی J_A و N_A چگونه به هم ربط داده می شود؟

① $N_A = J_A + \Sigma N_i$

② $N_A = J_A - \Sigma N_i$

③ $N_A = J_A - x_A \Sigma N_i$

④ $N_A = J_A + x_A \Sigma N_i$

نکته: قانون فیک براساس شار جرمی بصورت زیر تعریف می شود:

$$J_A = -D_{AB} \rho \frac{dw_A}{dz}$$

۱۳ روز علیت (تعلیل) ۱۴ سالروز وفات حضرت ام البنین سلام الله علیها - روز تکریم مادران و همسران شهدا

نام	مبلغ به ریال	بانک / شعبه	شماره چک	ملاحظات

www.afaghcp.ir

② $j_i = c_i(v_i - v^*) \longrightarrow J_B = c_B(v_B - v^*) \Rightarrow 3 \times (\frac{2}{3} - \frac{1}{9}) = -\frac{11}{9} \frac{mol}{cm^2 \cdot s}$

① $v^* = \sum x_i v_i = \frac{\sum c_i v_i}{c} = \frac{c_A v_A + c_B v_B + c_C v_C}{c_A + c_B + c_C} = \frac{3 \times 2 + 3 \times \frac{2}{3} + 4 \times 1}{3+3+4} \Rightarrow v^* = \frac{10}{9} \frac{cm}{s}$

$\sum c_i$

// نکته ۲: قانون اول فیک برای یک سیستم چند جزئی به صورت زیر تعریف می‌گردد: (آسان)

مولی $J_A = -C D_{AB} \nabla x_A$

جرمی $J_A = -\rho D_{AB} \nabla w_A$

در غلظت کل ثابت $\Rightarrow J_A = -D_{AB} \nabla C_A$

سیستم کارتزین $\nabla \vec{O}^{w_A} \rightarrow \frac{\partial O^{w_A}}{\partial x} + \frac{\partial O^{w_A}}{\partial y} + \frac{\partial O^{w_A}}{\partial z}$

مفهومی ۴

$N_A = J_A + x_A \sum N_i$

N_A: شار مطلق نفوذ — J_A: شار نفوذ (نسبت به سرعت متوسط) — $x_A \sum N_i$: شار دهنده شار ناشی از حرکت توده‌ای میکروسکوپیک

یک اتاق پر از جمعیت را در نظر بگیرید که تعدادی بچه، تعدادی انسان بزرگ و تعدادی پیرمرد هستند. شار مطلق خروج بچه‌ها از کل این را بخواهیم محاسبه کنیم تعداد بچه‌هایی که همراه با صف جمعیت (توده‌ی جمعیت) از کلاس خارج می‌شوند مقدار مربوط به حرکت توده‌ای (قسمت دوم فرمول) است و تعدادی از بچه‌ها که از صف جلو زده و مورد در خود را به سرعت می‌رساند همان شار نفوذ است که حاصل جمع این دو با هم تعداد کل بچه‌های خارج شده در واحد زمان از واحد سطح (درب اتاق) نشان می‌دهد در مورد افراد پیر J_A می‌تواند منفی باشد زیرا تعدادی برمیگردند (هنوز صبر کنند تا از دحام جلوی درب خروجی کم شود)

مثال) سیالی متشکل از ۳ جزء A، B و C در جهت z در حال حرکت می‌باشد در صورتیکه غلظت مولی اجزا به ترتیب ۲ و ۳ و ۴ $\frac{mol}{cm^3}$ و سرعت مولی مطلق هر جزء به ترتیب ۲، $\frac{2}{3}$ و $1 \frac{cm}{s}$ باشد شار مولی نفوذی جزء B (J_B) چقدر است؟

نام	مبلغ به ریال	بانک / شعبه	شماره چک	ملاحظات

www.afaghcp.ir

$A: \longrightarrow C_A = 2\ mol/cm^3 \quad V_A = 2$

$B: \longrightarrow C_B = 2\ mol/cm^3 \quad V_B = 1/2$

$C: \longrightarrow C_C = 4\ mol/cm^3 \quad V_C = 1$

$J_B = C_B (V_B - V^*)$

$V^* = \sum x_i V_i \;\&\; \frac{\sum C_i V_i}{C} \longrightarrow \sum C_i$

$\frac{\sum C_i V_i}{C}$ ثابت $= \sum C_i V_i$

$C_i = x_i \cdot C \Rightarrow x_i = \frac{C_i}{C}$

$V^* = \frac{\sum C_i V_i}{\sum C_i \leftarrow C} = \frac{C_A V_A + C_B V_B + C_C V_C}{C_A + C_B + C_C}$

$V^* = \frac{2\times 2 + 2\times \frac{1}{2} + 4\times 1}{2+2+4} = \frac{10}{9}$

$J_B = 2\left(\frac{2}{3} \times \frac{10}{9}\right) = 2\times\left(\frac{6}{9} - \frac{10}{9}\right) = -\frac{4}{3}$

$-\frac{4}{9}$

نکته ۱: برای یک مخلوط چند جزئی همواره حاصل جمع شار نسبی (نسبت به سرعت متوسط) اجزاء برابر با صفر است یعنی $\sum J_i = 0$ می باشد.

اثبات (Hw)

نکته ۲: برای یک سیستم ۲ جزئی می توان اثبات نمود که $D_{AB} = D_{BA}$ می باشد.

(Hw) $\sum J_i = 0$ $\quad D_{AB} = D_{BA}$ اثبات (Hw)

سرد زده

نام	مبلغ به ریال	بانک / شعبه	شماره چک	ملاحظات

www.afaghcp.ir