

Разработка программы для расчета коэффициента диффузии

Дипломник: Свистельник Л.А.

Руководитель работы: Бажанов В.И.

Физический эксперимент

Membranes	$Wt./S$ mg/cm^2	L_p $= J_v/RT\Delta C \times 10^{14}$ $cm^3/sec dyn$	ω_T $= J_T/RT\Delta c_T \times 10^{15}$ $mol/sec dyn$	g $= L_p/\omega_T \bar{V}_w = J_s/RT\Delta c_s \times 10^{19}$ $mol/sec dyn$	ω_s $mol/sec dyn$	Water content $\varphi_w \%$
Triacetin/Porvic	74	0,17	0,043	2,1	1,60	7
TBP/Paper	9,1	1,36	0,42	1,8	1,53	6
PEA/Paper	8,0	0,19	0,10	1,1	2,20	1,8-2,0
Cellulose Acetate	5,8	3,18	0,70	2,5	20,0	10
Polyvinyl Alcohol	4,9	94	4,17	12,5	-	31
Cellophane	3,1	1940	13,54	80	-	39

Диффузия

$$J = -D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (1)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (2)$$

$$D = \frac{1}{3} u d \quad (3)$$

Модель мембраны с малым влагосодержанием

1. Одинаковые расстояния между «вакансиями», равные d .
2. «Вакансии» расположены в узлах кубической решетки с расстоянием a .
3. Направления движения молекул диффузанта от одного узла решетки к другому являются равновероятными.

Расчетные формулы

$$\frac{\Delta N}{\Delta t} = DS \frac{C}{\delta} \quad (4)$$

$$C = \frac{1}{a^3} \quad (5)$$

$$\bar{F}(t) = N' \int_0^I f\left(t - i \frac{a}{u}\right) di = \frac{u}{a} N' (F(t) - F(t - Ia / u)) \quad (6)$$

$$D = \frac{N'K}{N} ua = \gamma ua \quad (7)$$

Результаты

$$\gamma = 10$$

$$u_0 = \sqrt{3kT / m} \quad (8)$$

$$u = u_0 \exp(-E / RT) \quad (9)$$

$$D = \gamma a \sqrt{3kT / m} \exp(-E / RT) \quad (10)$$

$$E = 7,7 \text{ ккал/моль} \quad a = 0,5 \text{ нм} (0,3 \text{ нм для воды})$$

$$D_{\text{экс}} = 8,1 \cdot 10^{-12} \text{ м}^2 / \text{с} \quad D_{\text{рез}} = 8,1 \cdot 10^{-12} \text{ м}^2 / \text{с}$$

Выводы

1. Предложена модель процесса диффузии молекул воды в мембранах.
2. Методом Монте-Карло рассчитан коэффициент γ в формуле для коэффициента диффузии.
3. С использованием γ рассчитан коэффициент диффузии для мембраны из ацетата целлюлозы, который в пределах 5% совпал с экспериментальной величиной.