CAP.C203　移動現象第三

第2回
「対流を伴う物質移動」

物質理工学院 応用化学系　下山　裕介

2018.10.15

「移動現象第三」

第１回 9/25 「定常拡散と非定常拡散」

第２回 10/2 「対流を伴う物質移動」

第３回 10/16 「反応を伴う物質移動」

第４回 10/23 「物質移動係数と境界層理論」

第５回 10/30 演習

第６回 11/6 「分離操作における物質移動①」

第７回 11/13 「分離操作における物質移動②」

第８回 11/20 到達度確認試験

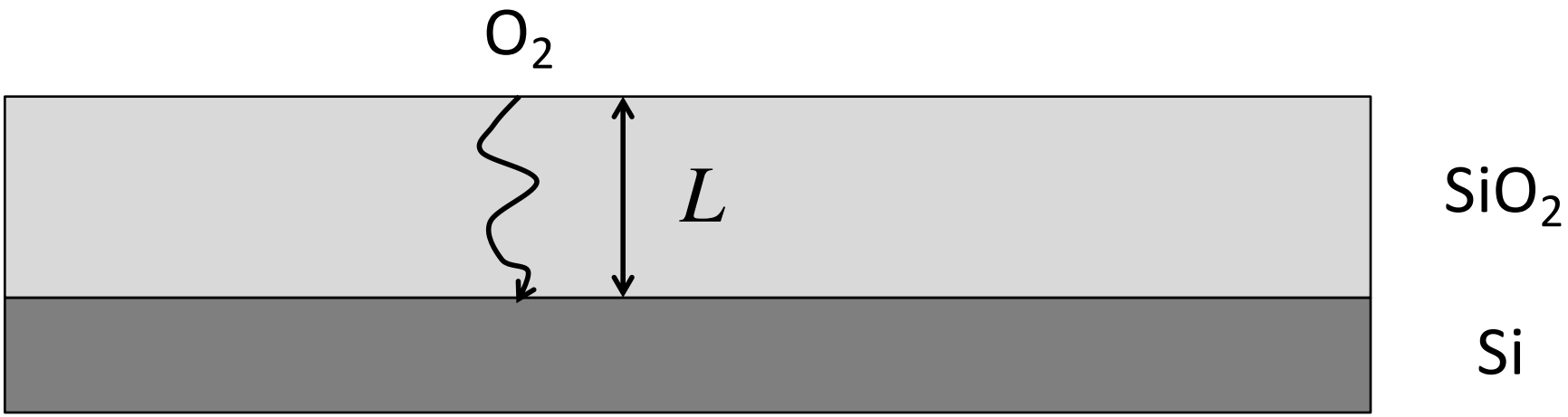
非定常拡散（1次元）

演習 1-4.

半導体製造プロセスにおいては，下図に示すようなSi基板上にSiO_2薄膜を形成する過程がある．ここでは，SiO_2層におけるO2の拡散距離を把握する必要がある（SiO_2の膜厚さを制御するため）．

SiO_2表面におけるO_2濃度を，0.096 mol m^{-3}，SiO_2 / Si界面におけるO_2濃度を0 mol m^{-3}，O_2拡散位置でのSiO_2密度を37770 mol m^{-3}とする．

また，SiO_2層中のO_2の拡散係数は，2.7 ×10^{-13} m^2 s^{-1}である．7 時間後のO_2の拡散距離Lを求めよ．



非定常拡散（1次元）

演習 1-4.（解答）

対流を伴う物質移動

- 拡散方程式を用いた物質移動解析（解く方法）

（蓄積項）　（対流項）　（拡散項）　（反応による消失項）

$$\frac{\partial c_{\mathrm{A}}}{\partial t} + u\frac{\partial c_{\mathrm{A}}}{\partial x} = D_{\mathrm{AB}}\left(\frac{\partial^2 c_{\mathrm{A}}}{\partial x^2}\right) + r_{\mathrm{A}}$$

対流を伴う定常拡散（反応を伴わない）では，

“定常”拡散のため，（蓄積項）＝0

反応を伴わないため，（消失項）＝0

$$u\frac{\partial c_{\mathrm{A}}}{\partial x} = D_{\mathrm{AB}}\left(\frac{\partial^2 c_{\mathrm{A}}}{\partial x^2}\right)$$

$x = 0$;　$y = y_{\mathrm{A0}}$

$x = L$;　$y = y_{\mathrm{AL}} = 0$

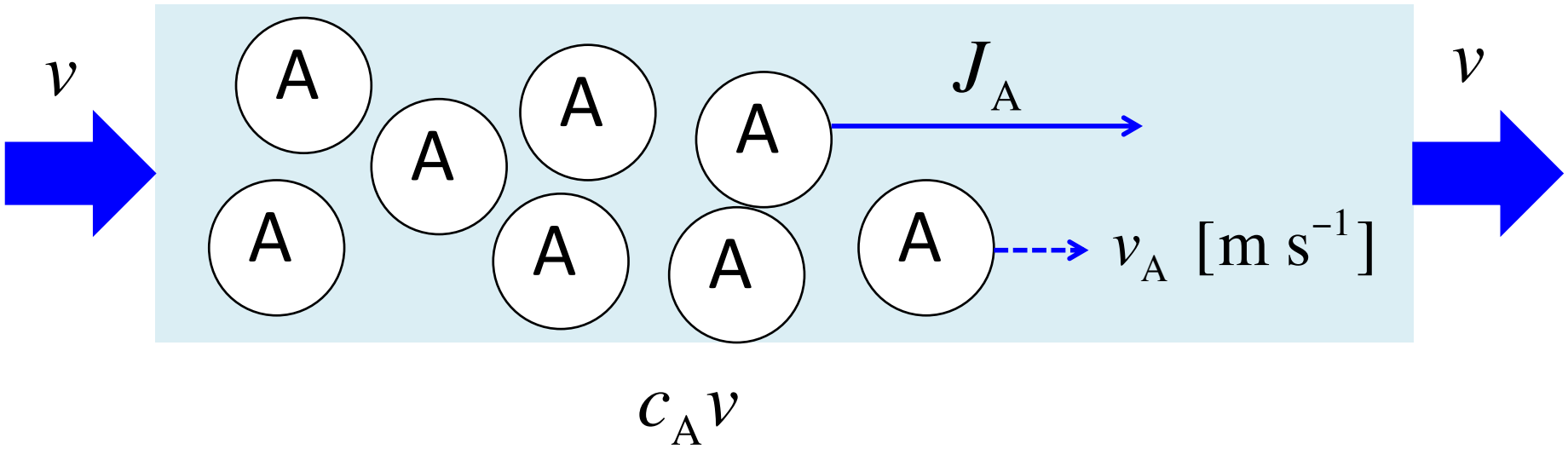
を境界条件として解く.

対流を伴う物質移動

- 物質移動流束

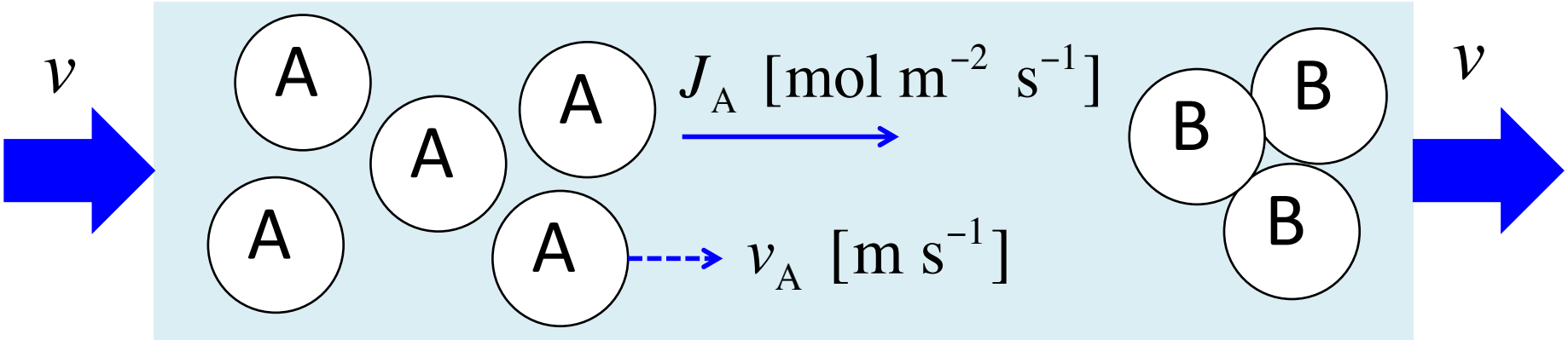
Fickの法則による（濃度勾配による）拡散流束 [mol m^{-2} s^{-1}]と，流体自身の流速 v [m s^{-1}]によって，分子Aが輸送される流束（対流項）[mol m^{-2} s^{-1}]との和である.

$$N_{\mathrm{A}} = J_{\mathrm{A}} + c_{\mathrm{A}} v = c_{\mathrm{A}} v_{\mathrm{A}}$$



対流を伴う物質移動

- 分子Aと分子Bの2成分系において



流体（分子A, Bを含む系）のモル密度 [mol m^{-3}]　$c = c_A + c_B$

モル平均速度 [m s^{-1}]　$v = x_A v_A + x_B v_B$

対流を伴う物質移動

演習 2-1.

流体のモル密度とモル平均速度の積と，各分子の物質移動流束の関係を求めよ.

対流を伴う物質移動

演習 2-1.（解答）

対流を伴う物質移動

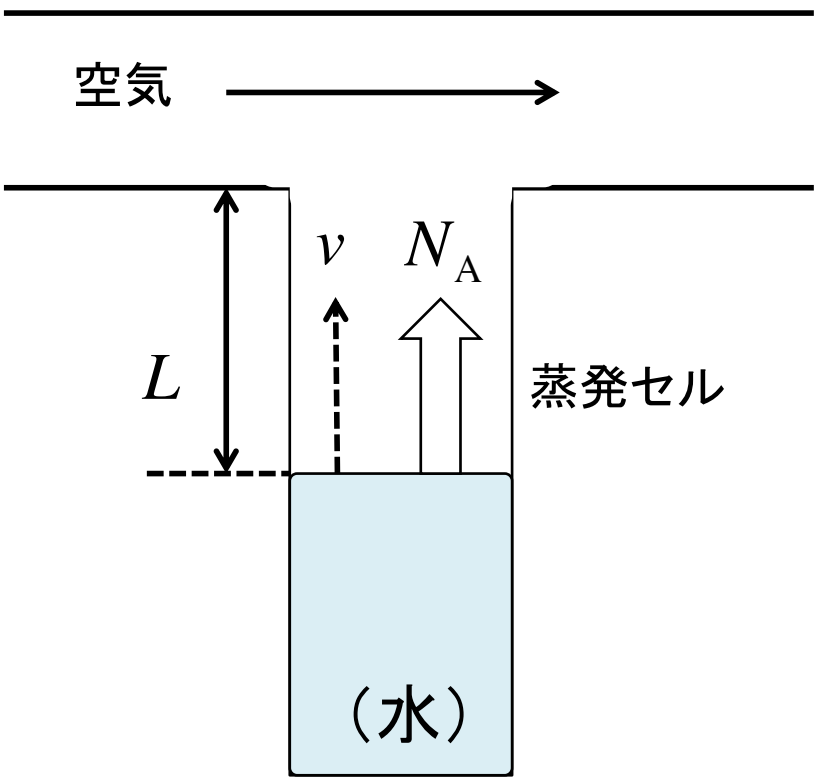
➢ 一方拡散（1次元における対流と拡散）

静止している流体 (B) 中を，もう1つの成分 (A)のみが拡散していく物質移動.

右図のような，蒸発セルに入ったの水について，空気中への蒸発について考える.

>>> 蒸発セル内において，液面の水蒸気(A)は，静止している空気 (B) 中を拡散していく.

（空気中への水の蒸発）



対流を伴う物質移動

➢ 一方拡散（1次元における対流と拡散）

静止している流体 (B) 中を，もう1つの成分 (A)のみが拡散していく物質移動.

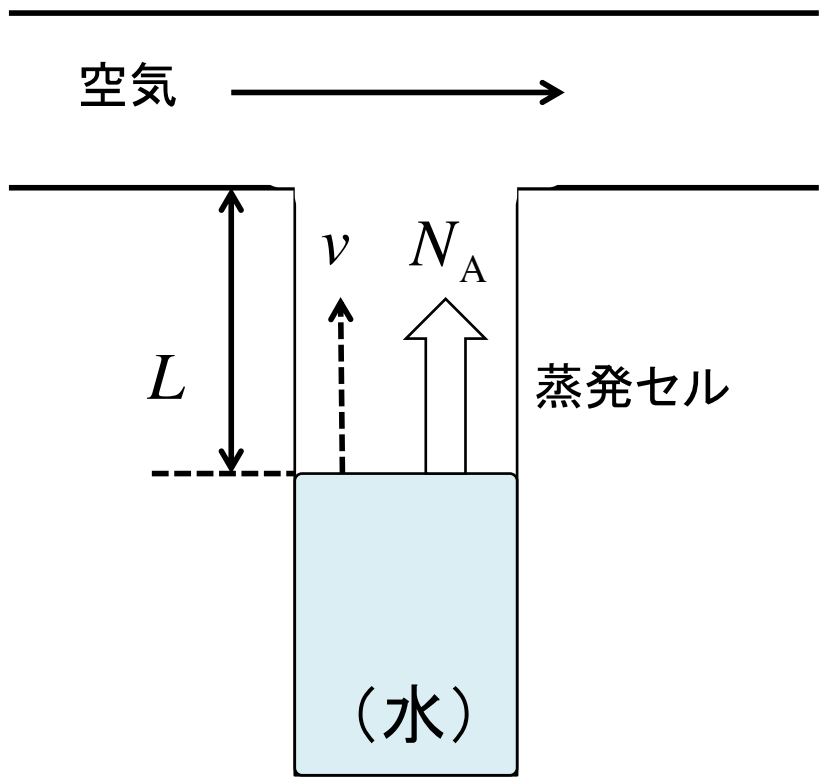
$$N_A = J_A + c_A v = -D_{AB}\frac{\partial c_A}{\partial x} + c_A v$$

$$= -cD_{AB}\frac{\partial y_A}{\partial x} + c_A v$$

N_A（物質移動流束）

$=J_A$（拡散項）$+c_A v$（対流項）

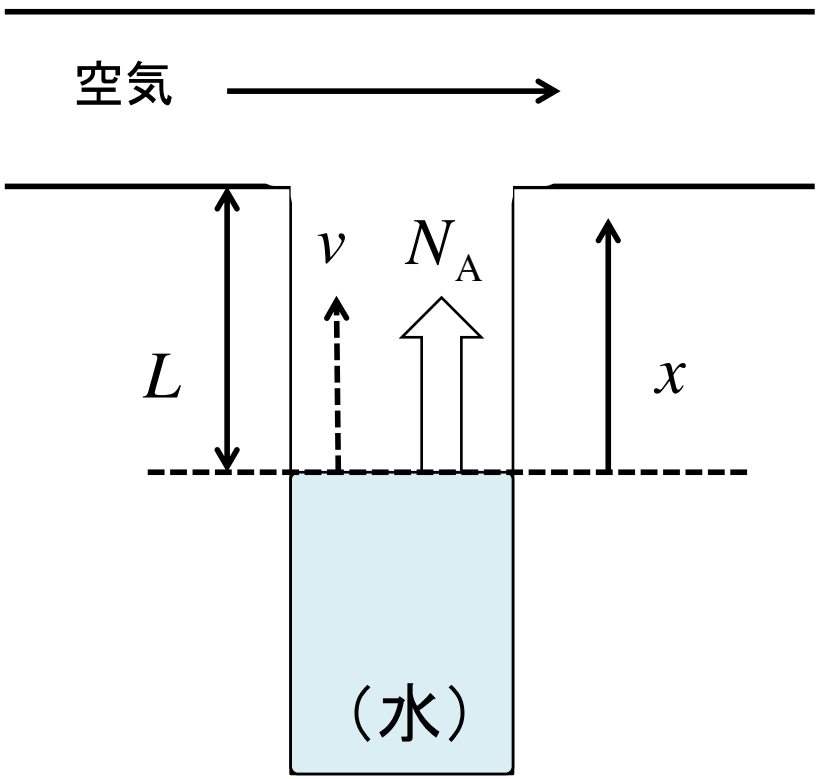
（空気中への水の蒸発）



対流を伴う物質移動

演習 2-2.

右図の蒸発セルにおける水の蒸発について，水蒸気の物質移動流束 N_Aは，拡散流束 J_A の何倍になるか，水蒸気のモル分率 y_A を用いて求めよ.



演習 2-2.（解答）

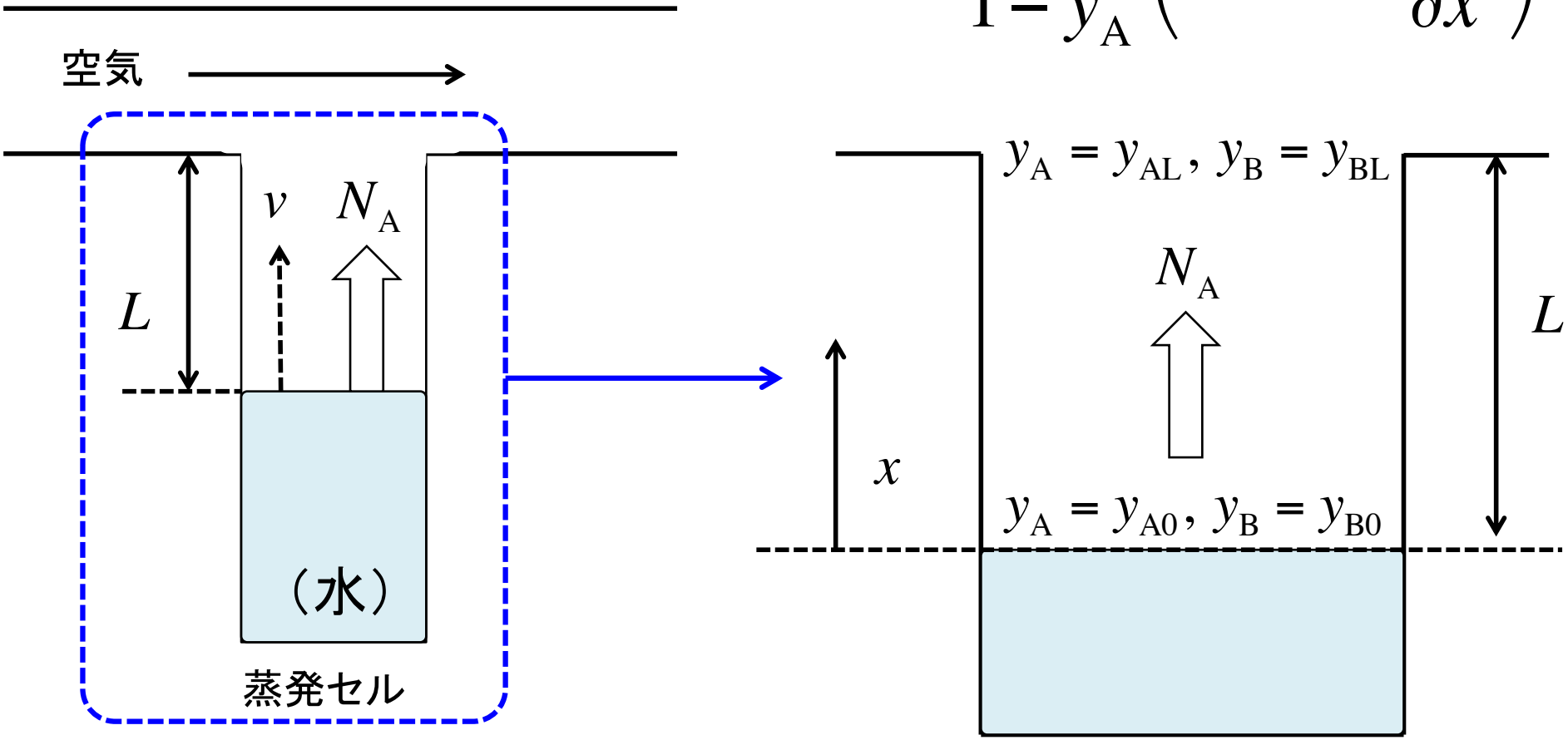
演習 2-2.（解答）

対流を伴う物質移動

- 水の蒸発における物質移動

（空気中への水の蒸発）

$$N_A = \frac{1}{1-y_A}\left(-cD_{AB}\frac{\partial y_A}{\partial x}\right)$$

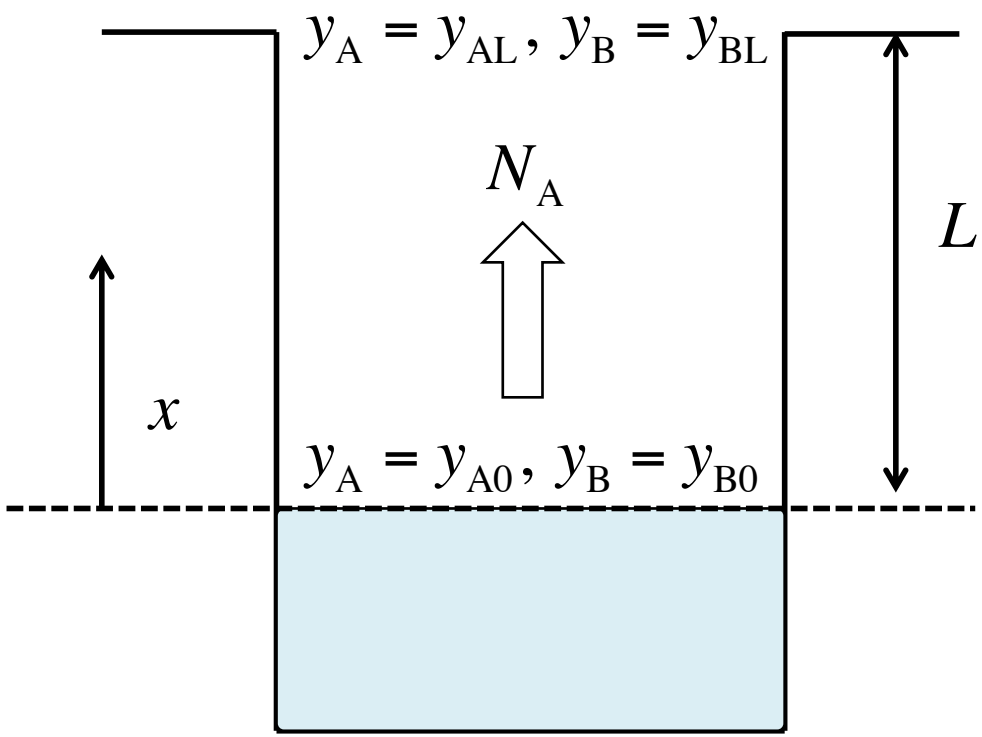


微分形では求めにくい

対流を伴う物質移動

- 水の蒸発における物質移動

$$N_A = \frac{1}{1-y_A}\left(-cD_{AB}\frac{\partial y_A}{\partial x}\right)$$



x 軸方向のいずれの距離においても物質移動流束は一定である.

$$\frac{dN_A}{dx} = 0$$

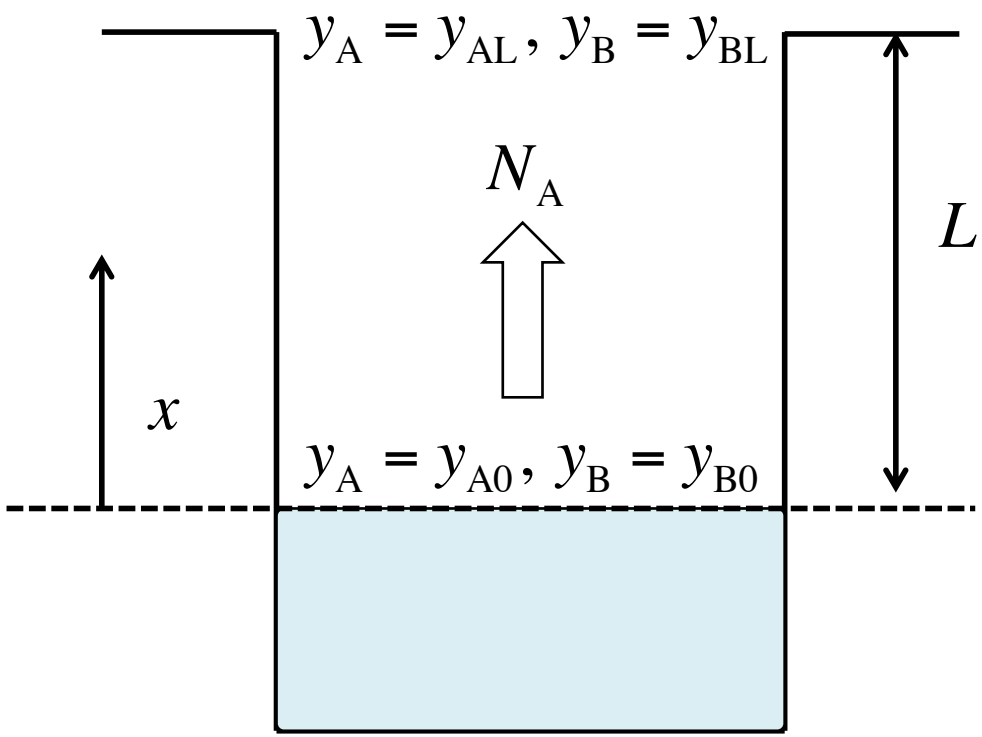
$$\frac{N_A}{cD_{AB}} = -\frac{1}{1-y_A}\frac{\partial y_A}{\partial x} = \text{const.}$$

$$\frac{N_A}{cD_{AB}}\int_0^L dx = -\int_{y_{A0}}^{y_{AL}} \frac{1}{1-y_A}\frac{\partial y_A}{\partial x}$$

対流を伴う物質移動

- 水の蒸発における物質移動

$$N_A = \frac{1}{1-y_A}\left(-cD_{AB}\frac{\partial y_A}{\partial x}\right)$$



$$\frac{N_A}{cD_{AB}}\int_0^L dx = -\int_{y_{A0}}^{y_{AL}} \frac{1}{1-y_A}\frac{\partial y_A}{\partial x}$$

$$\frac{N_A L}{cD_{AB}} = \ln\frac{1-y_{AL}}{1-y_{A0}}$$

$$N_A = \frac{cD_{AB}}{L}\ln\frac{1-y_{AL}}{1-y_{A0}}$$

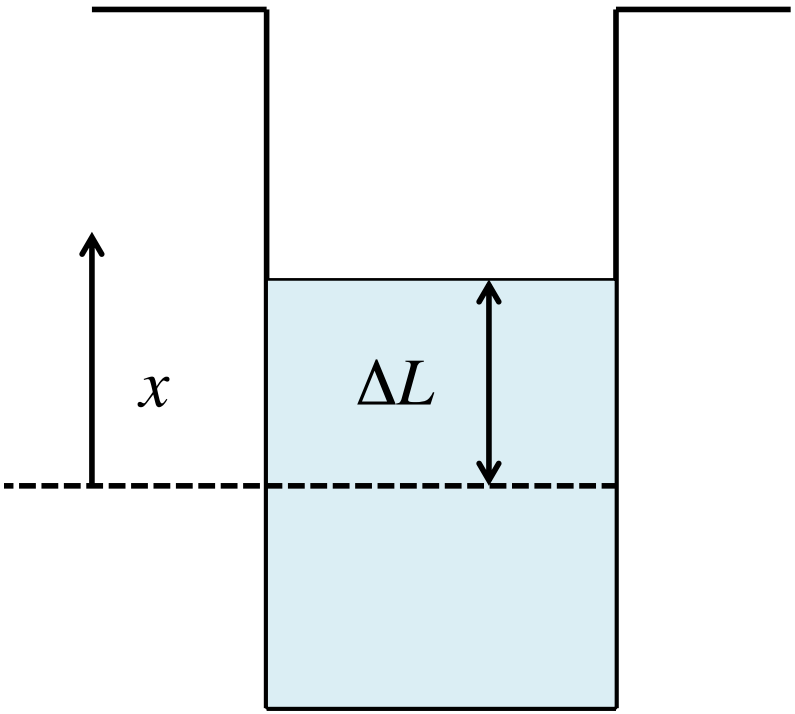
微分形と比較すると求めやすい.

対流を伴う物質移動

➢ 水の蒸発における物質移動

実験的に，水の蒸発における物質移動流束を求めるには，

>> 時間経過 t [s]における液面低下 ΔL [m]を測定する.



物質移動流束：

単位時間・単位面積に移動した物質の量 [mol or g]

c_A　成分Aのモル密度 [mol m^{-3}]

（実験より）

$$N_A = \frac{c_A \Delta L}{t}$$

D_{AB}

（解析より）

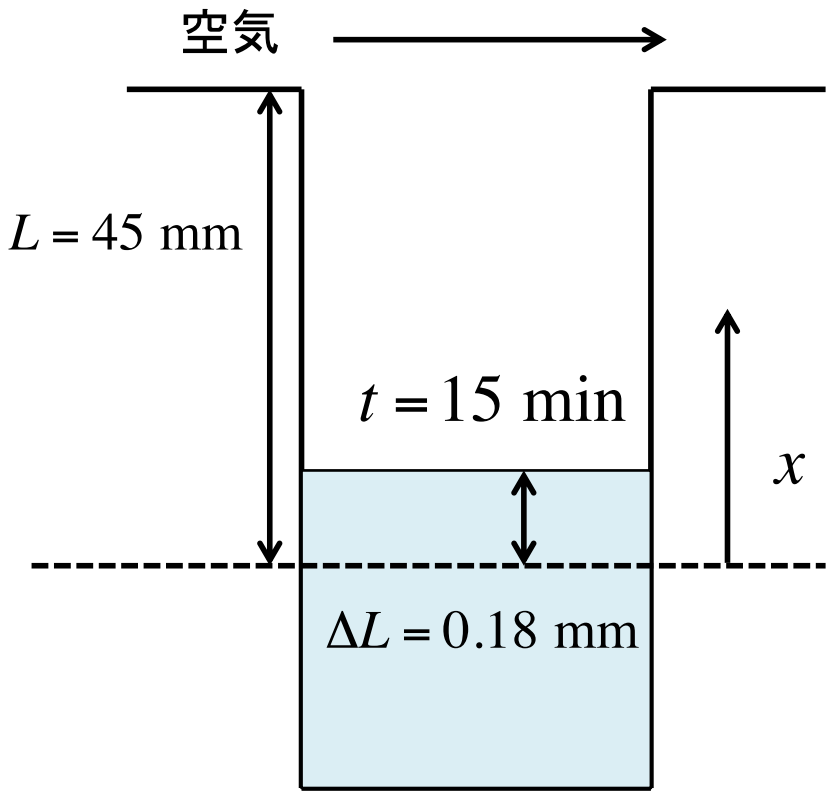
$$N_A = \frac{c D_{AB}}{L} \ln \frac{1 - y_{AL}}{1 - y_{A0}}$$

対流を伴う物質移動

演習 2-3.

温度30 ℃での蒸発セルにおいて，アセトン (Mw = 58.1 g mol^{-1}) の蒸発実験を行った結果，15分間で液面低下が0.18 mmであった．空気 (B)中におけるアセトン (A) の拡散係数を求めよ．蒸発セル中は，大気圧 (=1.013 × 10^5 Pa)とする．

セル中の流体（空気＋アセトン蒸気）は理想気体とし，セル出口（上部）では，空気のみとする．



アセトンの飽和蒸気圧: 21.65 kPa

アセトンの液体密度: 787 kg m^{-3}

気体定数; 8.314 J mol^{-1} K^{-1}

演習 2-3.（解答）

演習 2-3.（解答）

対流を伴う物質移動

演習 2-4. 蒸発による液面低下の時間変化

右図の蒸発セル内において，水が蒸発する場合，液面高さの L の時間 (t) 変化を表す式を，以下の記号を用いて求めよ.

L 液面高さ [m]

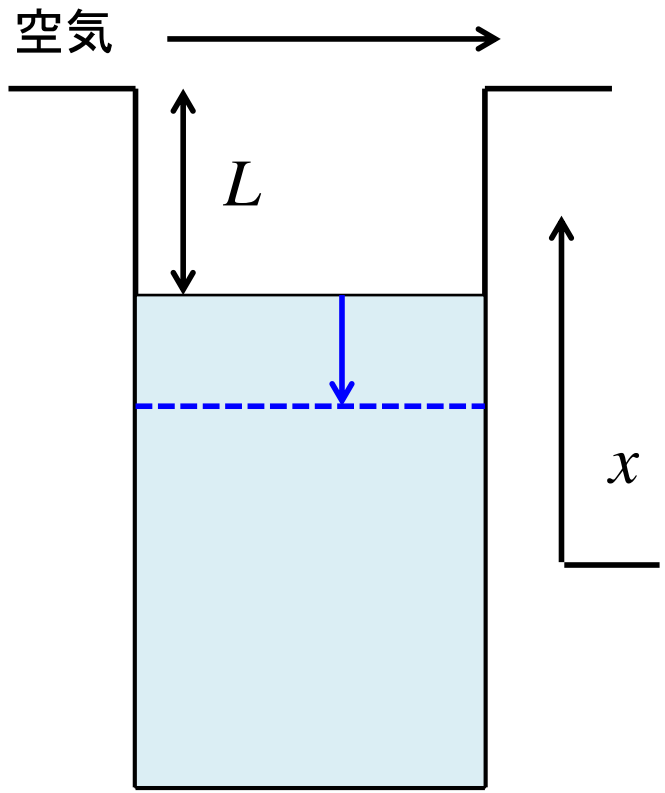
D_{AB} 空気中の水の拡散係数[m^2 s^{-1}]

c （空気＋水蒸気）の全モル密度[mol m^{-3}]

c_l 水のモル密度[mol m^{-3}]

y_{A0} x =0における水蒸気のモル分率 [-]

y_{AL} x =Lにおける水蒸気のモル分率 [-]



演習 2-4. （解答）

演習 2-4. （解答）