تعیین سینتیک رشد کریستالها با استفاده از مدل حد واسط و مقایسه آن با مدل آرنیوس

علیرضا سرشار[۱] — مهرداد منطقیان[۲] — ایرج ناصر[۳]

۱و۲. گروه مهندسی شیمی – دانشکده فنی و مهندسی – دانشگاه تربیت مدرس

Emails: {sarshar, manteghi}@ modares.ac.ir

۳. واحد علوم و تحقیقات – دانشگاه آزاد اسلامی

Email: {i.naser}@ namvaran.com

چکیده

سینتیک رشد کریستالها با استفاده از مدل آرنیوس و مدل حد واسط برای چند سیستم مجزا تعیین شد. بر مبنای هر دو مدل درجه رشد کریستالها (g) حاصله در هر سیستم توافق کامل داشتند ولی مقادیر حاصله از این دو مدل برای انرژی اکتیواسیون رشد کریستالها (E_g) در هر سیستم تفاوت داشتند. ازآنجا که مدل حد واسط تکامل یافته مدل آرنیوس می باشد، انتظار می رود مقدار E_g حاصل از این مدل به مقدار واقعی نزدیک تر باشد. برمبنای رابطه $R_g = K_g.T^m.\exp(-\frac{E_g}{RT}).\Delta\omega^g$ مقادیر k_g برای این سیستمها بین 1.55×10^5 $(kg/m^2.min)$ و 6.47×10^{-21}، مقادیر E_g بین $(kj/gmole)$ 57.7 و 28.6، مقادیر m بین 8.25 و 1.95– و مقادیر g بین 1.33 و 1.26 بدست آمدند.

واژه های کلیدی: مدل حد واسط؛ مدل آرنیوس؛ کریستالیزاسیون؛ سینتیک رشد؛ روش مشتقات اولیه

مقدمه

روش مشتقات اولیه برای تعیین پارامترهای سینتیک رشد کریستالها نخستین بار توسط Garside[1] عنوان شد و سپس توسط Tavare[2] , Palwe[3] تکامل یافت. در این روش از مقادیر اولیه مشتقات دما و فوق اشباع نسبت به زمان برای پیدا کردن پارامترهای سینتیک رشد کریستالها استفاده می شود. با نادیده گرفتن عوامل غیر خطی کننده سینتیک رشد و برای سادگی عملیات، تابعیت سرعت رشد(R_g) با دما به صورت مدل آرنیوس بیان می شود.

تئوری

اگر بتوانیم فرض کنیم که هسته زایی در سیستم وجود نداشته باشد، تابعیت نرخ رشد کریستالها(R_g) با دما و فوق اشباع را میتوان به صورتهای زیر که اولی مدل آرنیوس و دومی مدل حد واسط میباشد بیان کرد[1,10]:

$$R_g = K_g.\exp(-\frac{E_g}{RT}).\Delta\omega^g \qquad (1)$$

$$R_g = K_g.T^m.\exp(-\frac{E_g}{RT}).\Delta\omega^g \qquad (2)$$

عموما به دلیل ساده بودن، تابعیت دمایی سینتیک رشد کریستالها را با مدل آرنیوس بیان می کنند. در این مقاله برای اولین بار تابعیت دمایی سینتیک رشد کریستالها به صورت مدل حد واسط در نظر گرفته شده و پارامترهای سینتیک رشد بدست آمدند. با نوشتن معادله بیلان جرم، روابط 1 و 2 به صورت زیر در می آیند:

$$M_T^{\bullet} = A_T \times R_g = A_T.K_g.\exp(-\frac{E_g}{RT}).\Delta\omega^g \qquad (3)$$

$$M_T^{\bullet} = A_T \times R_g = A_T.K_g.T^m.\exp(-\frac{E_g}{RT}).\Delta\omega^g \qquad (4)$$