مجله علوم و فنون هسته‌ای، جلد ۱۰۰، شماره ۲، تابستان ۱۴۰۱

Journal of Nuclear Science and Technology
Vol. 100, No. 3, 2022

پیش‌بینی ضرایب هدایت حرارتی، ویسکوزیته و نفوذ ایزوتوپی گازهای رقیق زنون، هگزافلوراید تلوریم و هگزافلوراید اورانیم با استفاده از دیدگاه میکروسکوپی

صادق یوسفی نسب*[۱،۲]، سیدجابر صفدری[۱،۲]، مسعود خواجه نوری[۲]، محمدحسن ملاح [۱،۲]، محمدحسین عسکری[۲]

۱. پژوهشکده چرخه سوخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، صندوق پستی: ۸۴۸۶-۱۱۳۶۵، تهران- ایران
۲. شرکت فن‌آوری‌های پیشرفته ایران، سازمان انرژی اتمی، صندوق پستی :۵۵۴۳۱-۱۴۳۹۹، تهران- ایران

*Email: syousefy@aeoi.org.ir

مقاله‌ی فنی

تاریخ دریافت مقاله: ۱۳۹۹/۷/۲۱ تاریخ پذیرش مقاله: ۱۳۹۹/۱۱/۱۱

چکیده

در صنعت جداسازی، تعیین ضرایب انتقال هم‌چون هدایت حرارتی، ویسکوزیته و نفوذ ایزوتوپ‌های زنون، هگزافلوراید تلوریم و هگزافلوراید اورانیم از اهمیت خاصی برخوردار است. به طور کلی برای بررسی رفتار گاز دو دیدگاه وجود دارد: دیدگاه ماکروسکوپی و دیدگاه میکروسکوپی. مدل ماکروسکوپی، رفتار گاز را به صورت محیط پیوسته در نظر می‌گیرد و مدل میکروسکوپی، گاز را به صورت ذرات مجزا در نظر گرفته و برای هر ذره، یک موقعیت و سرعت در زمانی خاص در نظر می‌گیرد. در این مقاله ضرایب هدایت حرارتی، ویسکوزیته و نفوذ گازهای تک‌جزیی، دوجزیی، چندجزیی و ایزوتوپی با استفاده از خواص میکروسکوپی گازها استخراج و سپس مقدار این ضرایب برای تمامی ایزوتوپ‌های زنون، هگزافلوراید تلوریم و هگزافلوراید اورانیم تعیین شده است. هم‌چنین توسط این روابط استخراج شده برای ضرایب انتقال، نرم‌افزار COT POD تهیه شده است. با توجه به عدم دسترسی به نتایج تجربی برای صحت‌سنجی ایزوتوپی، نتایج حاصل از روابط میکروسکوپیک حاصله از نرم‌افزار با نتایج تجربی مخلوط گازهای مختلف شامل سیستم دوجزیی هلیم و نئون و سیستم چندجزیی نئون، آرگون و کریپتون مورد مقایسه قرار گرفته است که نتایج حاصل از این مقایسه توافق خوبی با یک‌دیگر دارند.

کلیدواژه‌ها: ضریب هدایت حرارتی، ضریب ویسکوزیته، ضریب نفوذ،گازهای ایزوتوپی، گازهای چندجزیی

Prediction of thermal conductivity, viscosity and diffusion coefficients of isotopes of xenon, tellurium hexafluoride and uranium hexafluoride dilute gases using a microscopic perspective

S. Yousefi-Nasab*[1,2], S.J. Safdari[1,2], M. Khajenoori[2], M.H. Mallah[1,2], M.H. Askari[2]
1. Nuclear Fuel Cycle Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, P.O.Box: 11365-8486, Tehran - Iran
2. Advanced Technologies Company of Iran, AEOI, P.O. Box: 14399-55431, Tehran - Iran

Technical Paper
Received 12.10.2020, Accepted 30.1.2021

Abstract

In the enrichment industry, it is very important to study the transport coefficients such as thermal conductivity, viscosity and diffusion coefficients of isotope gases such as xenon, tellurium hexafluoride and uranium hexafluoride. In general, there are two perspectives for studying the behavior of gas: the macroscopic and the microscopic perspective. The macroscopic model considers the behavior of a gas as continuous and the microscopic model, considers the gas as separate particles and for each particle, a position and velocity at a specific time. In this paper, the thermal conductivity, viscosity and diffusion coefficients of single-component, binary mixture, multicomponent and isotopic gases are investigated using the microscopic properties of gases. Then the values of these coefficients are determined for all isotopes of xenon, tellurium hexafluoride and uranium hexafluoride. The COT POD software has also been prepared by these relationships extracted for transport coefficients. Due to the lack of experimental results for isotopic validation, the results of microscopic relationships obtained from the software are compared with the experimental results of a mixture of different gases including helium and neon and then neon, argon and krypton multi-component systems. Results have a good agreement with each other.

Keywords: Thermal conductivity coefficient, Viscosity coefficient, Diffusion coefficient, Isotopic gases, Multicomponent gases

۱. مقدمه

یکی از نخستین گام‌ها جهت جداسازی و شناخت رفتار گاز در سیستم‌های چندجزیی، داشتن اطلاعات در مورد خواص شیمیایی و فیزیکی گاز است. کمیت‌هایی که وضعیت ماده را در مقیاس بزرگ توصیف می‌کنند، کمیت‌های ماکروسکوپی نامیده می‌شوند. این کمیت‌ها به بررسی رفتار تک‌تک ذرات نمی‌پردازند و تنها وضعیت کل سیستم را توصیف می‌کنند و توسط حواس هم قابل درک هستند (همانند فشار و دما)؛ امکان اندازه‌گیری آن‌ها وجود دارد [۱-۲].

در دیدگاه میکروسکوپی جزییات رفتار تک‌تک مولکول‌ها برای بررسی یک پدیده مورد استفاده قرار می‌گیرد. به عبارت دیگر در این دیدگاه، گاز متشکل از مجموعه‌ای از ذرات درنظر گرفته می‌شود و سپس مکان، سرعت، شتاب، انرژی جنبشی و سایر مشخصات آن ذرات توصیف می‌شود. در واقع دیدگاه میکروسکوپی، اساس مکانیک آماری می‌باشد [۳].

مطابق قرارداد، معیار پیوسته بودن یا نبودن یک گاز، عدد نادسن است؛ در محدوده عدد نادسن کوچک‌تر از ۰/۱، گاز پیوسته فرض شده و در اعداد نادسن بیش‌تر از این مقدار، گاز به صورت گاز رقیق عمل می‌کند. از گازهای هگزافلوراید اورانیم، زنون و هگزافلوراید تلوریم در جداسازی ایزوتوپ‌های آن‌ها در صنعت استفاده می‌شود که برای این امر استفاده از روش جداسازی با ماشین‌های سانتریفیوژ بسیار مرسوم است. به دلیل فشار پایین درون ماشین‌های سانتریفیوژ و در نتیجه حاکم بودن جریان گازهای رقیق در آن‌ها، می‌توان از خواص میکروسکوپیک برای محاسبه خواص جریان استفاده کرد تا خواص ماکروسکوپیک گاز برای گازهای رقیق با دقت بالایی محاسبه شود [۴-۶]. بررسی ضرایب انتقال هم‌چون هدایت حرارتی، ویسکوزیته و نفوذ گازهای چندجزیی و ایزوتوپی از اهمیت خاصی برخوردار است.

در سال ۱۹۸۴ پوژار و همکارانش در یک محدوده دمایی ۱۰۰ تا ۳۰۰ کلوین و در یک فشار ۱ اتمسفر، بر اساس تئوری جنبشی گازها، ضرایب نفوذ مخلوط گازهای دوتایی هلیوم، آرگون، کربن دی اکسید، اکسیژن و نیتروژن را محاسبه کردند [۷]. ضرایب نفوذ اکثر گازهای مخلوط دوتایی نیز توسط مارِرو و همکارانش، با یک رابطه نیمه‌تجربی جمع‌آوری، ارزیابی و بررسی شده‌اند و نمودارهای انحرافی برای اکثر این سیستم‌ها در نظر گرفته شد. برای تمامی این مخلوط‌های گازی دوتایی ضرایب نفوذ در یک دامنه دمایی بسیار گسترده از دمای بسیار پایین تا ۱۰۰۰۰ کلوین تعیین شده است [۸]. در سال ۱۹۵۰ لیندسی هدایت حرارتی مربوط به ده گاز و مخلوط‌های دوتایی و سه‌تایی انتخاب شده از آن‌ها را توسط یک سلول استوانه‌ای نقره‌ای متحدالمرکز در دامنه دمایی ۱۰۰ تا ۵۴۰ درجه سانتی‌گراد اندازه‌گیری کردند که شامل گازهای هلیوم، نیتروژن، دی اکسید کربن، متیل اتر و متیل فرمت بودند [۹]. اودوتک در سال ۲۰۱۳ مدلی برای ضرایب هدایت حرارتی مخلوط‌های دوتایی گازها به‌دست آورد. تئوری ارایه شده بر اساس فرضیات نوسانات تصادفی بین دو آرایش احتمالی مخلوط گاز دوتایی است. نتایج به‌دست آمده از مدل جدید با نتایج تجربی تست شده مقایسه شده است. این مدل در تجزیه و تحلیل‌هایی مانند مسایل احتراق که معادلات اصلی در آن پیچیده است بسیار مفید است [۱۰]. کستین و همکارانش در سال ۱۹۷۸ داده‌های آزمایشی جدیدی برای ویسکوزیته مخلوط‌های دوتایی زنون با گازهای تک‌هسته‌ای باقی‌مانده، هلیوم، نئون، آرگون و کریپتون ارایه کردند. اندازه‌گیری‌ها در ویسکومتر دیسکی نوسانی با دقت بالا در فشار اتمسفریک و در محدوده دمایی ۲۵ تا ۵۰۰ درجه سانتی‌گراد انجام شد. سپس ضرایب نفوذ دوتایی از ویسکوزیته مخلوط اندازه‌گیری شده محاسبه و با نتایج تجربی موجود مقایسه شد. انحراف معیار به صورت ۲± درصد برآورد شد [۱۱].

ریچارد در سال ۱۹۵۸ نشان داد که اولین تقریب برای ویسکوزیته مخلوط تقریباً معادل عبارات تجربی شناخته شده قبلی است. تقریب اول دارای میانگین خطای ۲/۶ درصد بود و درحالی که تقریب دوم این خطا را به ۰/۵ درصد کاهش می‌دهد [۱۲].

در این مقاله، به دلیل فقدان اطلاعات مربوط به خواص گازهای ایزوتوپی هگزافلوراید اورانیم، هگزافلوراید تلوریم و زنون، در ابتدا از طریق حل معادلات تئوری مربوط به ضرایب هدایت حرارتی، ویسکوزیته و نفوذ گازهای رقیق تک‌جزیی، دوجزیی، چندجزیی و ایزوتوپی با استفاده از خواص میکروسکوپی آن‌ها، به محاسبه مقادیر این کمیت‌های انتقالی برای گازهای ایزوتوپی مذکور پرداخته می‌شود. سپس نرم‌افزار COT POD[1] معرفی می‌شود و به صحت‌سنجی اطلاعات تعیین شده با داده‌های موجود و تعمیم آن به گازهای مورد نظر پرداخته می‌شود.

۲. ارتباط کمیت‌های میکروسکوپیک و ماکروسکوپیک

۱.۲ ضریب نفوذ

ضریب نفوذ جزء A در B در یک مخلوط گازی به شرایط عملیاتی، اجزاء سازنده و طبیعت اجزاء بستگی دارد. با استفاده از

1. Calculation of Transport Properties of Dilute Gases

تئوری‌های پیشرفته ضریب نفوذ جزء A در B در گازها تا حدودی قابل پیش‌بینی است. ضریب نفوذ یک مخلوط دوتایی می‌تواند با توجه به تقریب مرتبه اول برای f_i° به صورت زیر تعیین گردد [۴].

$$[D_{12}]_1 = 0.002628 \frac{\sqrt{T^3 (M_1 + M_2)/2M_1M_2}}{P\sigma_{12}^2 \Omega_{12}^{(1,1)*}(T_{12}^*)} \quad (1)$$

که در این رابطه P فشار برحسب اتمسفر، T_{12}^* دمای کاهش یافته $(T_{12}^* = k_B T / \varepsilon_{12})$، M_1 و M_2 جرم مولکولی گونه‌های ۱ و ۲، σ_{12} فاصله برهم‌کنش و $\Omega_{12}^{(1,1)*}$ انتگرال برخورد می‌باشد که تابعی از دما و پتانسیل بین مولکولی است و با استفاده از میدان نیروهایی هم‌چون لنارد- جونز[1] قابل پیش‌بینی است. تابع برخورد براساس زاویه انعکاس و فاصله تأثیرپذیری برای برخورد مولکول‌ها با یک‌دیگر برای هر گاز قابل محاسبه است. روابط مورد نیاز برای محاسبه انتگرال برخورد به صورت زیر است:

$$\Omega^{(l,s)*} = \frac{[\Omega^{(l,s)}]}{[\Omega^{(l,s)}]_{rig\ sph}} = \frac{\Omega^{(l,s)}\sqrt{2\pi m_r / k_T T}}{\frac{1}{2}(s+1)![1-\frac{1}{2}\frac{(1+(-)^l}{1+l}]\pi\sigma^2} \quad (2)$$

که

$$\Omega^{(l,s)}(T) = \sqrt{k_B T / 2\pi m_r}\int_0^{\infty} e^{-\gamma^2}\gamma^{2s+3}Q^{(l)}(g)d\gamma \quad (3)$$

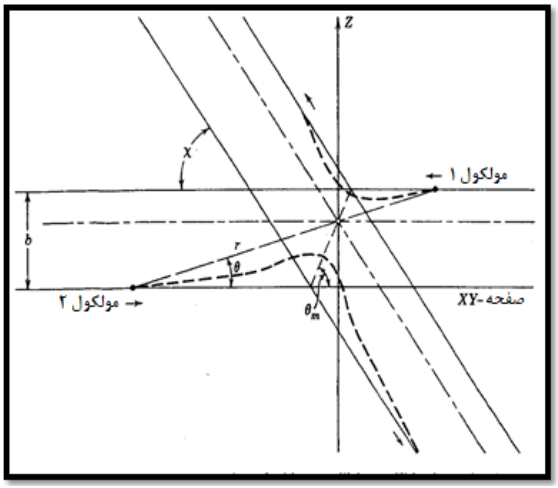
$$\gamma^2 = \frac{1}{2}\frac{m_r g^2}{k_B T}, g = \frac{p^2}{m^2} - \frac{p_1}{m_1} \quad (4)$$

$$Q^{(l)}(g) = 2\pi\int_0^{\infty}(1-\cos^l x)bdb \quad (5)$$

$$x(g,b) = \pi - 2b\int_{r_m}^{\infty}\frac{dr/r^2}{\sqrt{1-\frac{b^2}{r^2}-\frac{\varphi(r)}{\frac{1}{2}m_r g^2}}} \quad (6)$$

g سرعت نسبی بین دو مولکول، χ زاویه پراکندگی، r فاصله بین دو مولکول و m_r جرم کاهش یافته r فاصله بین مولکولی، φ تابع پراکندگی، m جرم هر مولکول، k_B ثابت بولتزمن، p ممنتوم و b پارامتر تأثیر نامیده می‌شوند که این پارامتر کم‌ترین فاصله بین دو مولکول است که می‌تواند احتمال برخورد مماسی در آن رخ دهد. در شکل ۱ نحوه برخورد دو مولکول و شکل گرفتن زاویه انعکاس و پارامتر تأثیر در یک مختصات مرکز جرم نشان داده شده است [۵].

1. Lenard-Jones Force Field



شکل ۱. برخورد دو ذره ۱ و ۲ به یک‌دیگر در دستگاه مرکز جرم و شکل گرفتن پارامترهای زاویه انعکاس (χ) و پارامتر تأثیر (b).

مقادیر انتگرال‌های فوق قبلاً توسط محققینی چون هلشفیلدر محاسبه شده است و به صورت جدول می‌توان براساس مقدار دمای کاهش یافته، مقادیر انتگرال‌های برخورد مربوط به هر گاز را تعیین کرد. برای یک مخلوط دوتایی، مقدار σ_{12} به صورت زیر قابل محاسبه است:

$$\sigma_{12} = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2) \quad (7)$$

در دست‌یابی به مقادیر Ω_D نیاز به محاسبه E_{AB} (ماکزیمم انرژی جذب) می‌باشد که طبق تعریف برابر است با:

$$(\frac{\varepsilon}{k_B})_{12} = \left((\frac{\varepsilon}{k_B})_1 \times (\frac{\varepsilon}{k_B})_2\right)^{1/2} \quad (8)$$

در این رابطه ε انرژی برهم‌کنش و k_B ثابت بولتزمن است. زمانی که معادله ضریب نفوذ مخلوط دوتایی برای یک جزء منفرد نوشته شود، رابطه ضریب خود- نفوذی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$[D]_1 = 0.002628 \frac{\sqrt{T^3/M}}{P\sigma^2\Omega^{(1,1)*}(T^*)} \quad (9)$$

به‌طور مشخص، اگر مولکول‌های یک گاز همگی از لحاظ فیزیکی یکسان باشند، اندازه‌گیری نفوذ درونی آن‌ها غیرممکن است. ولی با این حال می‌توان به صورت تجربی کمیت‌هایی را اندازه‌گیری کرد که خیلی نزدیک به ضرایب خود- نفوذی می‌باشند. هم‌چنین نشان داده می‌شود که تحت شرایط خاصی، یک شکل محدودکننده و خاص برای ضریب نفوذ، ضریب خود-

نفوذی نامیده می‌شود. نفوذ بین ایزوتوپی یکی از این حالت‌های خاص به شمار می‌رود. اگر یک شکل ایزوتوپی از یک گاز اجازه داده شود که به ایزوتوپی دیگری از آن گاز نفوذ کند، رویه نفوذ می‌تواند توسط روش دنبال‌کننده استاندارد[1] دنبال شود. از آن جایی که در ایزوتوپ‌ها، تعداد نوترون‌های درون هسته اتمی الزاماً از نیروهای بین مولکولی تأثیر نمی‌گیرند، در نتیجه می‌توان گفت در ایزوتوپ‌های یک گاز همواره روابط $\sigma_{12}=\sigma_1=\sigma_2$ و $\varepsilon_{12}=\varepsilon_1=\varepsilon_2$ حاکم است. بنابراین اگر مولکول‌ها ایزوتوپی به اندازه کافی بزرگ باشند، اندازه $2M_1M_2/(M_1+M_2)$ در رابطه ضریب نفوذ مخلوط دوتایی خیلی نزدیک به M_1 یا M_2است. در نتیجه رابطه ضریب نفوذ مخلوط دوتایی برای ایزوتوپ‌های سنگین مستقیماً به رابطه ضریب خود- نفوذی تبدیل می‌شود. ضریب نفوذ در سیستم‌های چند جزیی نیز مطابق رابطه زیر تعریف می‌گردد:

$$D_{ij}=\frac{1}{M_j}\left(\sum \chi_k M_k\right)\frac{k^{ji}-k^{ii}}{|k|} \qquad (10)$$

با فرض $k_{ii}=0$، $|k|$ از روی k_{ij} مشخص می‌شود، و k_{ij} به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$k_{ij}=\frac{x_i}{[D_{ij}]_1}+\frac{M_j}{M_i}\left(\sum\frac{x_k}{[D_{ik}]_1}\right);i\neq j \qquad (11)$$

$$k^{ji}=(-1)^{i+j}\begin{bmatrix} 0 & \cdots & k_{1,i-1} & k_{1,i+1} & \cdots & k_{1,\nu} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ k_{j-1,1} & \cdots & k_{j-1,i-1} & k_{j-1,i+1} & \cdots & k_{j-1,\nu} \\ k_{j+1,1} & \cdots & k_{j+1,i-1} & k_{j+1,i+1} & \cdots & k_{j+1,\nu} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ k_{\nu,1} & \cdots & k_{\nu,i-1} & k_{\nu,i+1} & \cdots & k_{\nu,\nu} \end{bmatrix} \qquad (12)$$

در نتیجه می‌توان گفت در سیستم‌های چندجزیی، در صورتی که گاز ایزوتوپی با جرم مولکولی بالا (تقریباً بزرگ‌تر از ۱۰۰) باشد، مقدار ضریب نفوذ دوتایی مورد استفاده در رابطه (۱۰) همان ضریب خودنفوذی می‌باشد. همچنین در سیستم‌های چندجزیی مقدار ضریب خودنفوذی نسبت به سایر ضرایب به دلیل ناچیز بودن اثر میدان‌های نیرویی مولکول‌های یکسان بر یک‌دیگر نسبت به مولکول‌های غیریکسان، ناچیز در نظر گرفته می‌شود.

1. Standard Tracer

۲.۲ ضریب هدایت حرارتی[2]

ضریب هدایت حرارتی برای یک ماده خالص تک اتمی برحسب اولین تقریب به صورت زیر قابل محاسبه است:

$$[K]_1\times10^{7}=1989.1\frac{\sqrt{T/M}}{\sigma^2\Omega^{(2,2)*}(T^*)}=\frac{15}{4}\frac{R}{M}[\mu]_1\times10^{7}\left(cal/cm.s.k\right) \qquad (13)$$

که R ثابت جهانی گازها می‌باشد. بنابراین در اولین تقریب، ضریب هدایت حرارتی متناسب با ضریب ویسکوزیته است. ضریب هدایت حرارتی برای یک گاز مخلوط دوتایی برحسب اولین تقریب به صورت زیر قابل محاسبه است [۱۳]:

$$[K_{12}]_1=1989.1\times10^{-7}\frac{\sqrt{T(M_1+M_2)/2M_1M_2}}{\sigma_{12}^2\Omega_{12}^{(2,2)*}(T_{12}^*)} \qquad (14)$$

براساس ضریب هدایت حرارتی دوتایی و همچنین هدایت حرارتی مربوط به گاز خالص، ضریب هدایت حرارتی از یک مخلوط دوتایی از گازهای تک اتمی می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$\frac{1}{[K_{mix}]_1}=\frac{X_K+Y_K}{1+Z_K}=X_K\left[\frac{1+\left(Y_K/X_K\right)}{1+Z_K}\right] \qquad (15)$$

که

$$X_K=\frac{x_1^2}{[K_1]_1}+\frac{2x_1x_2}{[K_{12}]_1}+\frac{x_2^2}{[K_2]_1} \qquad (16)$$

$$Y_\mu=\frac{x_1^2}{[K_1]_1}U^{(1)}+\frac{2x_1x_2}{[K_{12}]_1}U^{(Y)}+\frac{x_2^2}{[K_2]_1}U^{(2)} \qquad (17)$$

$$Z_\mu=x_1^2U^{(1)}+2x_1x_2U^{(Z)}+x_2^2U^{(2)} \qquad (18)$$

$$U^{(1)}=\frac{4}{15}A_{12}^*-\frac{1}{12}\left(\frac{12}{5}B_{12}^*+1\right)\frac{M_1}{M_2}+\frac{1}{2}\frac{(M_1-M_2)^2}{M_1M_2} \qquad (19)$$

$$U^{(2)}=\frac{4}{15}A_{12}^*-\frac{1}{12}\left(\frac{12}{5}B_{12}^*+1\right)\frac{M_2}{M_1}+\frac{1}{2}\frac{(M_2-M_1)^2}{M_1M_2} \qquad (20)$$

$$U^{(Y)}=\frac{4}{15}A_{12}^*\left(\frac{(M_2+M_1)^2}{4M_1M_2}\right)\frac{[K_{12}]_1^2}{[K_1][K_2]_1}-\frac{1}{2}\left(\frac{12}{5}B_{12}^*+1\right)-\frac{5}{32A_{12}^*}\left(\frac{12}{5}B_{12}^*-5\right)\frac{(M_2-M_1)^2}{M_1M_2} \qquad (21)$$

2. The Coefficient of Thermal Conductivity

$$U^{(Z)}=\frac{4}{15}A_{12}^{*}\left[\left(\frac{(M_2+M_1)^2}{4M_1M_2}\right)\left(\frac{[K_{12}]_1}{[K_1]_1}+\frac{[K_{12}]_1}{[K_2]_1}\right)-1\right]-\frac{1}{2}\left(\frac{12}{5}B_{12}^{*}+1\right)$$

(۲۲)

که x_i درصد مولی جزء i و ثوابت A^* و B^* به صورت زیر محاسبه می‌شوند:

$$A^{*}=\Omega^{(2,2)*}\Big/\Omega^{(1,1)*} \qquad (۲۳)$$

$$B^{*}=\left\{5\Omega^{(1,2)*}-4\Omega^{(1,3)*}\Big/\Omega^{(1,1)*}\right\} \qquad (۲۴)$$

برای مخلوطی از ایزوتوپ‌های سنگین با یک تقریب خوبی این عبارت به رابطه زیر کاهش پیدا می‌کند:

$$\frac{1}{\sqrt{[K_{mix}]_1}}=\frac{x_1}{\sqrt{[K_1]_1}}+\frac{x_2}{\sqrt{[K_2]_1}} \qquad (۲۵)$$

پارامتر $[K_{12}]_1$ با استفاده از رابطه زیر با ضریب نفوذ مخلوط دوتایی مرتبط می‌گردد:

$$[K_{12}]_1=\frac{25}{8}\frac{P[D_{12}]_1}{A_{12}^{*}T} \qquad (۲۶)$$

برای محاسبه ضریب انتقال حرارت چندجزیی $[K'_{mix}]_1$ می‌توان از روابط زیر استفاده کرد [۴].

$$[K'_{mix}]_1=4\frac{A}{B} \qquad (۲۷)$$

که

$$A=\begin{bmatrix} L_{11}^{00} & \cdots & L_{1\upsilon}^{00} & L_{11}^{01} & \cdots & L_{1\upsilon}^{01} & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ L_{\upsilon 1}^{00} & \cdots & L_{\nu\upsilon}^{00} & L_{\upsilon 1}^{01} & \cdots & L_{\nu\upsilon}^{01} & 0 \\ L_{11}^{01} & \cdots & L_{1\upsilon}^{01} & L_{11}^{11} & \cdots & L_{1\upsilon}^{11} & x_1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ L_{\upsilon 1}^{01} & \cdots & L_{\nu\upsilon}^{01} & L_{\upsilon 1}^{11} & \cdots & L_{\nu\upsilon}^{11} & x_\nu \\ 0 & \cdots & 0 & x_1 & \cdots & x_\nu & 0 \end{bmatrix}$$

$$B=\begin{bmatrix} L_{11}^{00} & \cdots & L_{1\upsilon}^{00} & L_{11}^{01} & \cdots & L_{1\upsilon}^{01} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ L_{\upsilon 1}^{00} & \cdots & L_{\nu\upsilon}^{00} & L_{\upsilon 1}^{01} & \cdots & L_{\nu\upsilon}^{01} \\ L_{11}^{10} & \cdots & L_{1\upsilon}^{10} & L_{11}^{11} & \cdots & L_{1\upsilon}^{11} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ L_{\upsilon 1}^{10} & \cdots & L_{\nu\upsilon}^{10} & L_{\upsilon 1}^{11} & \cdots & L_{\nu\upsilon}^{11} \end{bmatrix} \qquad (۲۸)$$

در ماتریس‌های فوق، $L_{ij}^{mm'}$ به صورت زیر قابل تعیین می‌باشد:

$$L_{ij}^{00}=0$$

$$L_{ij}^{00}=\frac{2x_ix_j}{A_{ij}^{*}[K_{ij}]_1}+\sum_{k\neq i}\frac{2x_ix_kM_j}{M_iA_{ik}^{*}[K_{ik}]_1}=\frac{16T}{25P}\left[\frac{x_ix_j}{[D_{ij}]_1}+\sum_{k\neq i}\frac{x_jx_kM_j}{M_i[D_{ik}]_1}\right] \qquad i\neq j$$

$$L_{ii}^{01}=5\sum_{k\neq i}\frac{x_ix_kM_k\left(\frac{6}{5}C_{ik}^{*}-1\right)}{(M_i+M_k)A_{ik}^{*}[K_{ik}]_1}=\frac{8T}{5P}\sum_{k\neq i}\frac{x_ix_kM_k\left(\frac{6}{5}C_{ik}^{*}-1\right)}{(M_i+M_k)[D_{ik}]_1}=$$

$$L_{ij}^{01}=-5x_ix_j\frac{M_i\left(\frac{6}{5}C_{ij}^{*}-1\right)}{(M_i+M_j)A_{ij}^{*}[K_{ij}]_1}=-\frac{8T}{5P}x_ix_j\frac{M_i\left(\frac{6}{5}C_{ik}^{*}-1\right)}{(M_i+M_j)[D_{ij}]_1} \qquad i\neq j$$

$$L_{ij}^{10}=\frac{M_i}{M_j}L_{ij}^{01}$$

$$L_{ii}^{11}=-\frac{4x_i^2}{[K_i]_1}-\sum_{k\neq i}\frac{2x_ix_k\left[\frac{15}{2}M_i^2+\frac{25}{4}M_k^2-3M_k^2B_{ik}^{*}+4M_iM_kA_{ik}^{*}\right]}{(M_i+M_k)^2A_{ik}^{*}[K_{ik}]_1}=-\frac{4x_i^2}{[K_i]_1}-\frac{16T}{25P}\sum_{k\neq i}\frac{x_ix_k\left[\frac{15}{2}M_i^2+\frac{25}{4}M_k^2-3M_k^2B_{ik}^{*}+4M_iM_j\right]}{(M_i+M_k)^2[D_{ik}]_1}$$

$$L_{ij}^{11}=\frac{2x_ix_jM_iM_j}{(M_i+M_j)^2A_{ij}^{*}[K_{ij}]_1}\left[\frac{55}{4}-3B_{ij}^{*}-4A_{ij}^{*}\right]=\frac{16T}{25P}\frac{x_ix_jM_iM_j}{(M_i+M_k)^2[D_{ik}]_1}\left[\frac{55}{4}-3B_{ij}^{*}-4A_{ij}^{*}\right] \qquad i\neq j$$

(۲۹)

ثابت C^* نیز به صورت زیر قابل محاسبه است [۴]:

$$C^{*}=\Omega^{(1,2)*}\Big/\Omega^{(1,1)*} \qquad (۳۰)$$

۳.۲ ضریب ویسکوزیته

ضریب ویسکوزیته برای یک ماده خالص یا یک مخلوط می‌تواند برای هر مرتبه از تقریب رابطه چاپمن-انسکاگ از معادله زیر قابل محاسبه است [۴].

$$\mu = \frac{1}{15}\sum_j \frac{m_j^2}{2k_B T}\int B_j(W_j)V_j^4 f_j^{[0]}dV_j \qquad (۳۱)$$

W_j سرعت بی‌بُعد است و V_j نیز سرعت ماکروسکوپی جزء j می‌باشد. اولین تقریب ویسکوزیته برای یک گاز خالص به صورت زیر قابل محاسبه است:

$$[\mu]_1 = 266.93\times10^{-7}\frac{\sqrt{MT}}{\sigma^2\Omega^{(2,2)*}T^*}\left(\frac{g}{cm\ \sec}\right) \qquad (۳۲)$$

ویسکوزیته تعداد زیادی از گازها در فشار اتمسفریک به صورت یک تابعی از دما اندازه‌گیری شده‌اند. از این اطلاعات این امر میسر می‌شود تا اطلاعات خاصی از نیروهای بین مولکولی در یک گاز تعیین شود. روند کار به این صورت می‌باشد که در ابتدا یک تابع پتانسیل به شکل کلی $\phi(r)=\varepsilon f(\frac{r}{\sigma})$ انتخاب می‌شود و سپس $\Omega^{(2,2)*}$ مورد ارزیابی قرار می‌گیرد. معادله مربوط به تعیین ویسکوزیته می‌تواند با اطلاعات تجربی مربوط به ویسکوزیته مورد استفاده قرار گیرد و پارامترهای ε و σ در یک تابع پتانسیل فرض شده تعیین گردند.

حال ضریب ویسکوزیته گونه ۱ نسبت به گونه ۲ در یک مخلوط دوجزیی نیز به صورت زیر تعیین می‌شود:

$$[\mu_{12}]_1 = 266.93\times10^{-7}\frac{\sqrt{2M_1M_2T/(M_1+M_2)}}{\sigma_{12}^2\Omega_{12}^{(2,2)*}T_{12}^*} \qquad (۳۳)$$

حال می‌توان ویسکوزیته یک مخلوط دوتایی را برحسب ضریب ویسکوزته گاز خالص و دو به دو به صورت زیر تعیین کرد:

$$\frac{1}{[\mu_{mix}]_1} = \frac{X_\mu + Y_\mu}{1+Z_\mu} = X_\mu\left[\frac{1+\left(Y_\mu/X_\mu\right)}{1+Z_\mu}\right] \qquad (۳۴)$$

که

$$X_\mu = \frac{x_1^2}{[\mu_1]_1} + \frac{2x_1x_2}{[\mu_{12}]_1} + \frac{x_2^2}{[\mu_2]_1} \qquad (۳۵)$$

$$Y_\mu = \frac{3}{5}A_{12}^*\left\{\frac{x_1^2}{[\mu_1]_1}\left(\frac{M_1}{M_2}\right) + \frac{2x_1x_2}{[\mu_{12}]_1}\left(\frac{(M_1+M_2)^2}{4M_1M_2}\right)\left(\frac{[\mu_{12}]_1^2}{[\mu_1]_1[\mu_2]_1}\right) + \frac{x_2^2}{[\mu_2]_1}\left(\frac{M_2}{M_1}\right)\right\} \qquad (۳۶)$$

$$Z_\mu = \frac{3}{5}A_{12}^*\left\{x_1^2\left(\frac{M_1}{M_2}\right) + x_2^2 + 2x_1x_2\left[\left(\frac{(M_1+M_2)^2}{4M_1M_2}\right)\left(\frac{[\mu_{12}]_1}{[\mu_1]_1} + \frac{[\mu_{12}]_1}{[\mu_2]_1}\right) - 1\right] + x_2^2\left(\frac{M_2}{M_1}\right)\right\} \qquad (۳۷)$$

در حالت کلی ضریب $\left[\frac{1+\left(Y_\mu/X_\mu\right)}{1+Z_\mu}\right]$ خیلی از مقدار یک متفاوت است و ممکن است تا ۵۰ درصد بر جواب‌های نهایی تأثیر بگذارد. اگر وزن مولکولی جزء ۱ و ۲ خیلی متفاوت از یک دیگر نباشند، و اگر نیروهای بین آن‌ها نیز خیلی نزدیک به یک دیگر باشد (مانند ایزوتوپ‌ها)، کمیت X_μ سهم غالب خواهد بود. برای یک مخلوط دوتایی از ایزوتوپ‌های سنگین ضریب ویسکوزیته با تقریب خوبی به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\frac{1}{\sqrt{[\mu_{mix}]_1}} = \frac{x_1}{\sqrt{[\mu_1]_1}} + \frac{x_2}{\sqrt{[\mu_2]_1}} \qquad (۳۸)$$

برای محاسبه ضریب ویسکوزیته مخلوط‌های چندتایی برطبق تئوری جنبشی مخلوط گازهای چندتایی کروی سخت، ضریب ویسکوزیته مخلوط ν- جزیی با رابطه زیر محاسبه می‌گردد:

$$[\mu]_1 = -\frac{\begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1\nu} & n_1/n \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2\nu} & n_2/n \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \cdot \\ \dot{H}_{\nu1} & \dot{H}_{\nu2} & \cdots & \dot{H}_{\nu\nu} & n_\nu/n \\ n_1/n & n_2/n & & n_\nu/n & 0 \end{bmatrix}}{\left|H_{ij}\right|} \qquad (۳۹)$$

H_{ij} برحسب ترم $\Omega^{(l,s)}$ به صورت زیر است.

$$H_{ij} = \frac{32}{15}\frac{n_i m_i}{n^2 m_j kT}\sum_l \frac{n_l m_l}{(m_i+m_l)^2}\begin{bmatrix} 5m_j(\delta_{ij}-\delta_{ji})\Omega_{il}^{(1,1)} \\ +3.2m_l(\delta_{ij}+\delta_{ji})\Omega_{il}^{(2,2)} \end{bmatrix} \qquad (۴۰)$$

روابط فوق به‌صورت زیر ساده می‌گردد:

$$[\mu_{mix}]_1 = -\frac{\begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1\nu} & x_1 \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2\nu} & x_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ H_{1\nu} & H_{2\nu} & \cdots & H_{\nu\nu} & x_\nu \\ x_1 & x_2 & & x_\nu & 0 \end{bmatrix}}{\begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1\nu} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2\nu} \\ \vdots & & & \vdots \\ H_{1\nu} & H_{2\nu} & \cdots & H_{\nu\nu} \end{bmatrix}} \quad (۴۱)$$

پارامترهای ماتریس فوق برحسب H_{ij} می‌باشد. این پارامتر برحسب μ_{ij} و D_{ij} با رابطه زیر معرفی می‌گردد:

$$H_{ii} = \frac{x_i^2}{[\mu_i]_1} + \sum_{\substack{k=1 \\ k\neq i}}^{\nu} \frac{2\Omega^{(2,2)*}/\Omega^{(1,1)*}\, x_k}{(M_i + M_k)} \frac{RT}{P[Dik]_1}\left[1 + \frac{3}{5}\frac{M_k}{M_i}A_{ik}^*\right] \quad (۴۲)$$

$$H_{ij} = -\frac{2x_i x_j}{(M_i + M_j)}\frac{RT}{P[D_{ij}]_1}\left[1 - \frac{3}{5}A_{ij}^*\right] \quad i \neq j \quad (۴۳)$$

در روابط فوق $[\mu_i]_1$ ضریب ویسکوزیته می‌باشد، $[D_{ik}]_1$ ضریب نفوذ دوتایی، x_i و M_i به ترتیب کسر مولی و جرم مولکولی جزء iام می‌باشند. با جای‌گذاری H_{ii} و H_{ij} در رابطه فوق رابطه نهایی به‌صورت زیر بازنویسی می‌گردد:

$$[\mu_{mix}]_1 = \sum_{i=1}^{\nu}\frac{x_i^2}{H_{ii}} - \sum_{i=1}^{\nu}\sum_{j=1}^{\nu}\frac{x_i x_j H_{ij}}{H_{ii}H_{jj}} + \sum_{i=1}^{\nu}\sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{\nu}\sum_{\substack{k=1 \\ k\neq i}}^{\nu}\frac{x_j x_k H_{ij} H_{ik}}{H_{ii}H_{jj}H_{kk}} \quad (۴۴)$$

از آن‌جایی‌که المان‌های غیرقطری H_{ij} در مقایسه با المان های قطری H_{ii} بسیار کوچک است، لذا رابطه اولیه برای محاسبه ویسکوزیته یک مخلوط چندجزیی گازی توسط ترم اول رابطه فوق ارایه می‌گردد. برای صرف‌نظر کردن از المان‌های غیرقطری می‌بایست A^*=۵/۳ در نظر گرفته شود. با در نظر گرفتن فرضیات فوق، ضریب ویسکوزیته مخلوط به صورت زیر بازنویسی می‌گردد:

$$[\mu_{mix}]_1 = \sum_{i=1}^{\nu}\frac{x_i^2}{H_{ii}} = \sum_{i=1}^{\nu}\frac{x_i^2}{\frac{x_i^2}{[\mu_i]_1} + 1/3885\sum_{\substack{k=1 \\ k\neq i}}^{\nu} x_i x_k \frac{RT}{pM_i[D_{ik}]_1}} \quad (۴۵)$$

۳. نرم‌افزار COT POD

این نرم‌افزار شامل تمامی روابط مربوط به تعیین ضرایب انتقال گازهای رقیق می‌باشد که در متن این مقاله روابط مربوط به آن‌ها ارایه شد. زبان برنامه‌نویسی بخش حل‌گر این نرم‌افزار با زبان C++ نوشته شده و پوسته گرافیکی که کاربران با آن کار می‌کنند توسط Java نوشته شده و براساس چارچوب کار JavaFx تهیه شده است. با اجرای این نرم‌افزار، مقدار ضریب ویسکوزیته، ضریب هدایت حرارتی و ضریب نفوذ مربوط به هر جزء و هم‌چنین مخلوط گازی براساس ثوابت نیروی تعریف شده برای هر گاز در آن قابل تعیین می‌باشد.

۴. نتایج و بحث

تمامی روابط مربوط به محاسبه ضرایب هدایت حرارتی، ویسکوزیته و نفوذ برای گازهای تک‌جزیی، دوجزیی، چندجزیی و ایزوتوپی کدنویسی شده و یک نرم‌افزار جامع به نام COT POD تهیه شده است. در این قسمت، جهت صحت‌سنجی نتایج به دست آمده از این نرم‌افزار، براساس اطلاعات تجربی موجود برای گازهای چندجزیی، صحت‌سنجی صورت گرفته است. در جدول ۱، مقادیر کمیت‌های مورد نیاز جهت محاسبه ویسکوزیته مخلوط گازی نئون و هلیم با استفاده از پتانسیل لنارد- جونز آورده شده است [۱۳].

برای ضریب ویسکوزیته، نتایج پارامترهای خروجی حاصل از نرم‌افزار با نتایج تجربی در دمای ۲۰°C و فشار ۱ اتمسفر در جدول ۲ آورده شده است [۱]. درصد مقدار انحراف مطلق نتایج حاصل از روابط ضریب ویسکوزیته مذکور با نتایج تجربی به صورت زیر قابل محاسبه است [۶]:

$$AAD\% = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{Exp\,data - Cal\,data}{Exp\,data}\times 100 \quad (۴۶)$$

که در رابطه فوق n تعداد داده‌های مربوطه است.

جدول ۱. کمیت‌های مورد نیاز جهت محاسبه ویسکوزیته مخلوط نئون و هلیم [۷]

نوع گاز	نئون	هلیم
σ (Å)	۲/۳۳	۱/۹۰
ε/k (K)	۱۹۲	۲۳۲

جرم مولکولی (g/gmol)	۲۰٫۱۸۳	۴٫۰۰	

جدول ۲. صحت‌سنجی نرم‌افزار با نتایج تجربی برای ضریب ویسکوزیته مخلوط گازهای نئون و هلیم [۱]

AAD(%)	۱۰^۶× مقدار حاصل از نرم‌افزار (gr/cm.sec)	۱۰^۶× مقدار تجربی (gr/cm.sec)	کسر مولی هلیم	کسر مولی نئون
۹٫۰۴	۳۲۷٫۵۷	۳۰۰٫۴	۰٫۲۰۴۱	۰٫۷۹۵۹
۹٫۷۵	۳۲۶٫۰۷	۲۹۷٫۱	۰٫۲۶۵۹	۰٫۷۳۴۱
۱۶٫۲۸	۳۱۳٫۹۶	۲۷۰	۰٫۵۶۲۴	۰٫۴۳۷۶
۱۶٫۲۸	۳۱۲٫۹۲	۲۶۹٫۱	۰٫۵۷۸۱	۰٫۴۲۱۹
۲۰٫۷۳	۲۹۳٫۲۷	۲۴۲٫۹	۰٫۷۶۲۱	۰٫۲۳۷۹

هم‌چنین برای صحت‌سنجی روابط مربوط به ضریب هدایت حرارتی، کمیت‌های میکروسکوپی مربوط به مخلوط گازی نئون، آرگون و کریپتون با استفاده از تابع پتانسیل لنارد- جونز در جدول ۳ آورده شده است [۴].

که برای ضریب هدایت حرارتی نیز نتایج حاصل از نرم‌افزار به همراه نتایج تجربی آن در جدول ۴ آورده شده است. همان طوری که مشاهده می‌شود مقدار میانگین مطلق انحراف نتایج به‌دست آمده از نرم‌افزار COT POD نسبت به نتایج تست‌های تجربی، زیر ۳۰ درصد می‌باشد که این اختلاف می‌تواند نیز به علت انجام نتایج تجربی در سال‌های گذشته (۱۹۵۴) و یا انتخاب پتانسیل‌های مختلف برهم‌کنش غیرپیوندی (لنارد- جونز، اسکویرول و ...) به جای انتخاب توابع برهم‌کنش دقیق‌تر هم‌چون باکینگهام، مورس و ... باشد. در نتیجه با توجه به در نظر گرفتن مقداری خطا برای نتایج تست تجربی، می‌توان نتایج حاصله از نرم‌افزار را مورد قبول دانست. پس از صحت‌سنجی نرم‌افزار با نتایج تست تجربی، در ادامه ضرایب ویسکوزیته، هدایت حرارتی و نفوذ برای مخلوط ایزوتوپی گاز هگزافلوراید تلوریم، هگزافلوراید اورانیم و زنون در فشار ۱ اتمسفر و دمای ۲۰ سانتی‌گراد با استفاده از نرم‌افزار COT POD تعیین می‌شوند.

هدف اصلی مقایسه جهت اعتبارسنجی، مقایسه نتایج با نتایج آزمون آزمایشگاهی می‌باشد. به دلیل این‌که با توجه به جستجوهای صورت گرفته برای ایزوتوپ‌های گازهای هگزافلوراید اورانیم، هگزافلوراید تلوریم و زنون، اطلاعاتی در مورد مقایسه نتایج ضرایب انتقال آن‌ها با نتایج تست تجربی یافت نشد، لذا در این مقاله جهت اعتبارسنجی نرم‌افزار نوشته شده، از مقایسه نتایج مربوط به ضرایب انتقال با نتایج تست آزمایشگاهی گازهای چندجزیی مختلف شامل سیستم دوجزیی هلیم و نئون و سیستم چندجزیی نئون، آرگون و کریپتون استفاده شده است. نتایج مربوط به ضرایب ویسکوزیته و هدایت حرارتی برای هر ایزوتوپ گاز هگزافلوراید تلوریم در جدول ۵ آورده شده است. به دلیل تعداد زیاد ضریب نفوذ دوتایی ناشی از تعداد زیاد ایزوتوپ‌های‌گازها ($n(n-1)/2$)، فقط مقدار مربوط به ضریب نفوذ جزء مطلوب هر گاز در مخلوط ایزوتوپی آن ارایه می‌شود (n تعداد کل ایزوتوپ‌های هر گاز می‌باشد).

براساس نتایج به دست آمده برای هر ایزوتوپ، ضرایب ویسکوزیته، هدایت حرارتی و نفوذ جزء مطلوب هگزافلوراید تلوریم (در این‌جا جزء مطلوب $^{234}TeF_6$ در نظر گرفته شده است) در مخلوط ایزوتوپی هگزافلوراید تلوریم به ترتیب 4.79×10^{-5} (g/cm.sec)، 2.874×10^{-6} (cal/cm.sec.deg) و 1.19×10^{-5} (m^2/sec) تعیین می‌شوند. به‌طور مشابه، ضرایب ویسکوزیته و هدایت حرارتی برای هر ایزوتوپ از گاز زنون در جدول ۶ ارایه شده است. ضریب ویسکوزیته، ضریب هدایت حرارتی و ضریب نفوذ ایزوتوپ مطلوب زنون (^{124}Xe) در مخلوط ایزوتوپی گاز زنون به ترتیب 2.58×10^{-5} (g/cm.sec)، 9.612×10^{-6} (cal/cm.sec.deg) و 8.77×10^{-6} (m^2/sec) تعیین می‌شوند. در انتها ضرایب ویسکوزیته و هدایت حرارتی برای تک‌تک ایزوتوپ‌های گاز هگزافلوراید اورانیم نیز در جدول ۷ ارایه شده است.

ضریب ویسکوزیته، ضریب هدایت حرارتی و ضریب نفوذ جزء مطلوب گاز هگزافلوراید اورانیم ($^{234}UF_6$) در مخلوط ایزوتوپی آن به ترتیب 22.486×10^{-5} (g/cm.sec)، 1.076×10^{-5} (cal/cm.sec.deg) و 4.74×10^{-5} (m^2/sec) تعیین می‌شوند.

جدول ۳. کمیت‌های مورد نیاز جهت محاسبه ضریب هدایت حرارتی مخلوط سه‌تایی نئون، آرگون و کریپتون [۴]

نوع گاز	نئون	آرگون	کریپتون
کسر مولی	۰٫۱۸۶۱	۰٫۱۴۴۹	۰٫۶۶۹۰
σ (Å)	۲٫۸۵۸	۳٫۴۶۵	۳٫۶۱
ε/k (K)	۲۷٫۵	۱۱۶	۱۹۰
جرم مولکولی (g/gmol)	۲۰٫۱۸۳	۳۹٫۹۴۸	۸۳٫۸

جدول ۴. صحت‌سنجی کد با نتایج تجربی ضریب هدایت حرارتی مخلوط سه تایی نئون، آرگون و کریپتون [۱]

AAD(%)	۱۰^۵× مقدار حاصل از نرم‌افزار (cal/cm.sec.deg)	۱۰^۵× مقدار تجربی (cal/cm.sec.deg)	کسر مولی کریپتون	کسر مولی آرگون	کسر مولی نئون

۰٫۱۳۸۷	۰٫۷۱۷۲	۰٫۱۴۴۱	۴٫۵۰	۳٫۱۱	۳۰٫۸۸
۰٫۱۸۶۱	۰٫۱۴۴۹	۰٫۶۶۹۰	۳٫۴۷	۲٫۷۶	۲۰٫۴۶
۰٫۳۰۱۹	۰٫۳۸۴۸	۰٫۳۱۳۳	۴٫۸۰	۳٫۷۱	۲۲٫۷۰
۰٫۴۵۳۷	۰٫۱۵۶۷	۰٫۳۸۹۶	۵٫۴۵	۴٫۳۷	۱۹٫۸۱
۰٫۵۹۸۴	۰٫۱۳۰۳	۰٫۲۷۱۵	۶٫۵۸	۵٫۱۷	۲۱٫۴۲
۰٫۱۲۷۹	۰٫۱۵۶۹	۰٫۷۱۵۲	۳٫۲۴	۲٫۴۱	۲۵٫۶۲

جدول ۵. ضرایب هدایت حرارتی و ویسکوزیته ایزوتوپ‌های هگزافلوراید تلوریم با استفاده از خواص میکروسکوپی [۱۴]

نوع ایزوتوپ	درصد فراوانی	$\sigma(\dot{A})$	ϵ/k(K)	جرم مولکولی (gr/mol)	۱۰^۶× ضریب ویسکوزیته (gr/cm.sec)	۱۰^۵× ضریب هدایت حرارتی (cal/cm.sec.deg)
$^{۲۳۴}TeF_۶$	۰٫۰۰۰۸۹	۳٫۷۳	۳۸۲٫۳	۲۳۴	۳۶۲٫۲۶۲	۱٫۱۳۹
$^{۲۳۶}TeF_۶$	۰٫۰۲۴۶	۳٫۷۳	۳۸۲٫۳	۲۳۶	۳۶۱٫۴۹۷	۱٫۱۴۱
$^{۲۳۷}TeF_۶$	۰٫۰۰۸۷	۳٫۷۳	۳۸۲٫۳	۲۳۷	۳۶۲٫۲۶۲	۱٫۱۳۹
$^{۲۳۸}TeF_۶$	۰٫۰۶۱۰	۳٫۷۳	۳۸۲٫۳	۲۳۸	۳۶۳٫۰۲۶	۱٫۱۳۷
$^{۲۳۹}TeF_۶$	۰٫۰۶۹۹	۳٫۷۳	۳۸۲٫۳	۲۳۹	۳۶۳٫۷۸۸	۱٫۱۳۴
$^{۲۴۰}TeF_۶$	۰٫۱۸۷۱	۳٫۷۳	۳۸۲٫۳	۲۴۰	۳۶۴٫۵۴۸	۱٫۱۳۱
$^{۲۴۲}TeF_۶$	۰٫۳۱۷۹	۳٫۷۳	۳۸۲٫۳	۲۴۲	۳۶۶٫۰۶۴	۱٫۱۲۷
$^{۲۴۴}TeF_۶$	۰٫۳۴۴۸	۳٫۷۳	۳۸۲٫۳	۲۴۴	۳۶۷٫۵۷۳	۱٫۱۲۲

جدول ۶. ضرایب هدایت حرارتی و ویسکوزیته ایزوتوپ های زنون با استفاده از خواص میکروسکوپی [۱۵]

نوع ایزوتوپ	درصد فراوانی	$\sigma(\dot{A})$	ϵ/k(K)	جرم مولکولی (gr/mol)	۱۰^۶× ضریب ویسکوزیته (gr/cm.sec)	۱۰^۵× ضریب هدایت حرارتی (cal/cm.sec.deg)
^{۱۲۴}Xe	۰٫۰۰۰۹۵	۴٫۰۴۷	۲۳۱	۱۲۴	۱۷۳٫۱۰۶	۱٫۰۱۶
^{۱۲۶}Xe	۰٫۰۰۰۸۹	۴٫۰۴۷	۲۳۱	۱۲۶	۱۷۴٫۴۹۷	۱٫۰۳۲
^{۱۲۸}Xe	۰٫۰۱۹۱۰	۴٫۰۴۷	۲۳۱	۱۲۸	۱۷۵٫۸۷۶	۱٫۰۲۴
^{۱۲۹}Xe	۰٫۲۶۴۰۱	۴٫۰۴۷	۲۳۱	۱۲۹	۱۷۶٫۵۶۲	۱٫۱۰۲
^{۱۳۰}Xe	۰٫۰۴۰۷۱	۴٫۰۴۷	۲۳۱	۱۳۰	۱۷۷٫۲۴۵	۱٫۱۰۱
^{۱۳۱}Xe	۰٫۲۱۲۳۲	۴٫۰۴۷	۲۳۱	۱۳۱	۱۷۷٫۹۲۵	۱٫۱۰۱
^{۱۳۲}Xe	۰٫۲۶۹۰۹	۴٫۰۴۷	۲۳۱	۱۳۲	۱۷۸٫۶۰۳	۱٫۱۰۱
^{۱۳۴}Xe	۰٫۱۰۴۳۶	۴٫۰۴۷	۲۳۱	۱۳۴	۱۷۹٫۹۵۱	۱٫۱۰۰
^{۱۳۶}Xe	۰٫۰۸۸۵۷	۴٫۰۴۷	۲۳۱	۱۳۶	۱۸۱٫۲۸۹	۰٫۹۹۳

جدول ۷. ضرایب هدایت حرارتی و ویسکوزیته ایزوتوپ های هگزافلوراید اورانیم با استفاده از خواص میکروسکوپی [۱۶]

نوع ایزوتوپ	درصد فراوانی	$\sigma(\dot{A})$	ϵ/k(K)	جرم مولکولی (gr/mol)	۱۰^۶× ضریب ویسکوزیته (gr/cm.sec)	۱۰^۵× ضریب هدایت حرارتی (cal/cm.sec.deg)
$^{۲۳۴}UF_۶$	۰٫۰۰۰۲	۵٫۹۶۷	۲۳۶٫۸	۳۴۸	۱۳۵٫۱۹۲	۰٫۲۸۹۵
$^{۲۳۵}UF_۶$	۰٫۰۰۹	۵٫۹۶۷	۲۳۶٫۸	۳۴۹	۱۳۵٫۳۸۶	۰٫۲۸۹۱
$^{۲۳۶}UF_۶$	۰٫۰۰۴	۵٫۹۶۷	۲۳۶٫۸	۳۵۰	۱۳۵٫۵۸۰	۰٫۲۸۸۶
$^{۲۳۸}UF_۶$	۰٫۹۸۶۸	۵٫۹۶۷	۲۳۶٫۸	۳۵۲	۱۳۵٫۶۷	۰٫۲۸۷۸

۵. نتیجه‌گیری

در این مقاله، مقادیر ضرایب انتقال ویسکوزیته، هدایت حرارتی و نفوذ گازهای تک‌جزیی، دوجزیی، چندجزیی و ایزوتوپی با استفاده از روابط حاکم بر دیدگاه‌های میکروسکوپی مولکول‌های گاز توسط نرم‌افزار COT POD استخراج شدند. با توجه به اهمیت تعیین کردن مقادیر ضرایب انتقال گازهای ایزوتوپی در فرایند جداسازی ایزوتوپی آن‌ها، لذا مقادیر این ضرایب برای گازهای ایزوتوپی مهم در صنعت هسته‌ای هم‌چون گازهای زنون، هگزافلوراید تلوریم و هگزافلوراید اورانیم تعیین شدند. مقادیر پیش‌بینی شده ضرایب انتقال برای مخلوط گازی آرگون، کریپتون، هلیوم و نئون با نتایج تجربی موجود در مراجع صحت‌سنجی شد. مقدار بیش‌ترین اختلاف مطلق بین نتایج تست تجربی و نتایج حاصل از نرم‌افزار حدود ۳۰ درصد بود. هم چنین براساس روابط حاکم بر دیدگاه مولکولی ضریب

ویسکوزیته، هدایت حرارتی و نفوذ جزء مطلوب در مخلوط ایزوتوپی هگزافلوراید تلوریم ($^{۲۳۴}TeF_۶$) به ترتیب برابر $۴/۷۹\times۱۰^{-۵}$ g/cm.sec، $۲/۸۷۴\times۱۰^{-۶}$ cal/cm.sec.deg و $۱/۱۹\times۱۰^{-۵}$ $m^۲/sec$، به طور مشابه مقادیر ضریب ویسکوزیته، ضریب هدایت حرارتی و ضریب نفوذ جزء مطلوب در مخلوط ایزوتوپی زنون (^{۱۲۴}Xe) به ترتیب برابر $۲/۵۸\times۱۰^{-۵}$ g/cm.sec، $۹/۶۱۲\times۱۰^{-۶}$ cal/cm.sec.deg و $۸/۷۷\times۱۰^{-۶}$ $m^۲/sec$ و هم چنین ضریب ویسکوزیته، ضریب هدایت حرارتی و ضریب نفوذ جزء مطلوب در مخلوط ایزوتوپی هگزافلوراید اورانیم ($^{۲۳۴}UF_۶$) به ترتیب برابر $۲۲/۴۸۶\times۱۰^{-۵}$ g/cm.sec، $۱/۰۷۶\times۱۰^{-۵}$ cal/cm.sec.deg و $۴/۷۴\times۱۰^{-۵}$ $m^۲/sec$ تعیین شدند.

مراجع

1. E. Mason, S. Saxena, *Approximate formula for the thermal conductivity of gas mixtures,* J. Phys. Fluids, 361 (1958).
2. R.D. Present, *Kinetic Theory of Gases*, 2nd Ed. (New York: McGraw Book Company, 2008).
3. R.E. Criss, *Principles of Stable Isotope Distribution,* 3rd Ed. (Oxford University Press, 1999).
4. J.O. Hirschfelder, C.F. Curtiss, *The Molecular Theory of Gases and Liquids,* (Wiley, New York, NY, 1954).
5. G.A. Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows,* (Oxford University Press, New York, 1994).
6. M. Khajenoori, J. Safdari, *Modeling gas-granular flow in molecular using the DSMC method and continuum regions by Onsager's pancake equation with mass sources and sinks in a rotating cylinder,* J. Gran. Matt., **63**, 1 (2019).
7. L.A. Pozhar, V.N. Shchelkunov, *Mutual-diffusion coefficients of some binary gas mixture,* Journal of Engineering Physics, **46 (1)**, 35 (1984).
8. T.R. Marrero, E.A. Mason, *Gaseous diffusion coefficients,* Journal of Physical and Chemical Reference Data, **1(1)**, 3, (1972).
9. A.L. Lindsay, L.A. Bromley, *Thermal conductivity of gas mixtures,* Industrial & Engineering Chemistry, **42(8)**, 1508 (1950).
10. E. Udoetok, *Thermal conductivity of binary mixture of gases,* Frontiers in Heat and Mass Transfer, **4(2)**, (2013).
11. J. Ketsin, H.E. Khalifa, W.A. Wakeham, *The viscosity and diffusion coefficients of the binary mixtures of xenon with the other noble gases physics A:* statistical mechanics and its applications, **90(2)**, 215 (1978).
12. L.S. Richard, *Condensed Chemical Dictionary,* (Van Nostrand Reinhold Company, 2008).
13. R.S. Brokaw, *Approximate formulas for the viscosity and thermal conductivity of gas mixture*, The Journal of Chemical Physics, **29(2)**, 391 (1958).
14. L. Sosnin, *Centrifugal extraction of highly enriched ^{120}Te and ^{122}Te using the non-steady state method of separation,* J. Nucl. Inst. Meth. in Phys. Res., **480**, 36, (2002).
15. F. Saija, *High-pressure phase diagram of the exp-6 model: The case of Xe,* J. Phys. Review B., **72**, 024113 (2005).
16. H. Bahmanyar, *Mass Transfer,* (Tehran University Press, Tehran, 2009) (In Persian).

COPYRIGHTS
©2021 The author(s). This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution (CC BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, as long as the original authors and source are cited. No permission is required from the authors or the publishers.

استناد به این مقاله
صادق یوسفی نسب، سیدجابر صفدری، مسعود خواجه نوری، محمدحسن ملاح، محمدحسین عسکری (۱۴۰۱)، پیش‌بینی ضرایب هدایت حرارتی، ویسکوزیته و نفوذ ایزوتوپی گازهای رقیق زنون، هگزافلوراید تلوریم و هگزافلوراید اورانیم با استفاده از دیدگاه میکروسکوپی، ۱۰۰، ۱۷۴-۱۸۳

DOR: 20.1001.1.17351871.1401.43.2.20.5 **Url**: https://jonsat.nstri.ir/article_1397.html