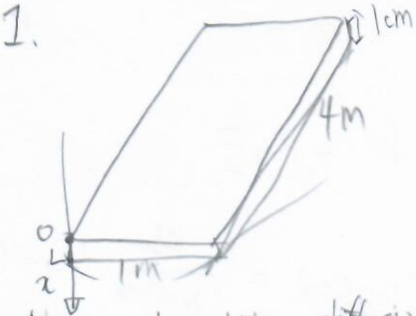
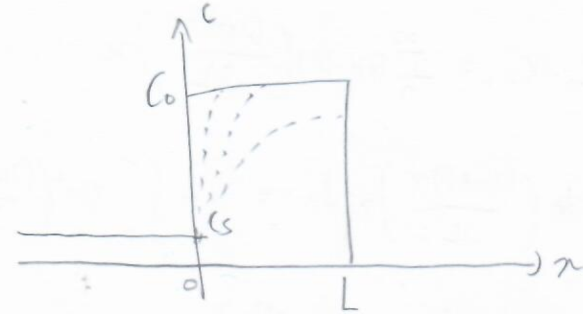
Problem Set #3

20202876
이순형

1.





(a) Non-steady state diffusion은 Fick's 2nd law를 따른다.

또한, 위의 plate에서 아랫면은 막혀있고 옆면은 넓이가 작기 때문에 무시할 수 있다고 가정한다.

따라서 x에 대해서 1차원적으로 생각이 가능하다.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

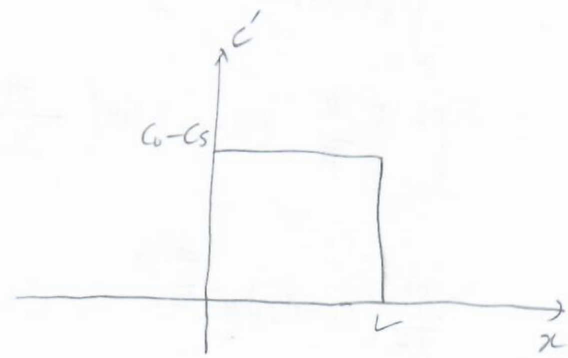
Boundary condition

$$C(0<x<L, t=0) = C_0 \quad , \quad C_0 = 100\ ppm \ , \ C_s = 5\ ppm \ , \ L = 1cm$$

$$C(x=0, t) = C_s$$

$$\frac{\partial C}{\partial x}(x=L, t) = 0$$

(b). 계산의 용이함을 위해 y축을 C_s 만큼 평행이동후 계산



위 (a)의 식 $\frac{\partial e}{\partial t} = D\frac{\partial^2 e}{\partial x^2}$ 에서

separation of variable $e(x,t) = X(x)T(t)$

$$\frac{1}{DT}\frac{dT}{dt} = \frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2} = -\lambda^2$$

$$\Rightarrow T(t) = e^{-\lambda^2 Dt} \quad , \quad X(x) = A\cos\lambda x + B\sin\lambda x$$

$$\therefore e(x,t) = \sum_n (A\cos\lambda_n x + B\sin\lambda_n x)e^{-\lambda_n^2 Dt}$$

B.C. $e(x=0, t) = 0$ (평행이동 버전의 B.C.)를 대입, $\sum_n A e^{-\lambda_n^2 Dt} = 0$, 즉 $A=0$

B.C. $\frac{\partial e}{\partial x}(x=L, t) = 0$를 적용 $\left.\frac{\partial e}{\partial x}\right|_{x=L} = \sum_n \lambda_n B_n \cos\lambda_n L\, e^{-\lambda_n^2 Dt} = 0$

$$\cos\lambda_n L = 0 \qquad \lambda_n L = \frac{(2n+1)\pi}{2} \qquad \lambda_n = \frac{(2n+1)\pi}{2L}$$

$$\therefore\ c(x,t) = \sum_{n}^{\infty} B_n \sin\left(\frac{(2n+1)\pi}{2L}\right)x\, e^{-\frac{(2n+1)^2\pi^2}{4L^2}Dt}$$

orthogonality theorem을 이용해 Bn을 구한다.

$$\text{B.C.}\quad c(x,0) = C_0 - C_s = \sum_{n}^{\infty} B_n \sin\left(\frac{(2n+1)\pi}{2L}\right)x$$

$$(C_0-C_s)\int_0^L \sin\left(\frac{(2m+1)\pi}{2L}\right)x\,dx = B_m \int_0^L \sin^2\left(\frac{(2m+1)\pi}{2L}\right)x\,dx = B_m\frac{L}{2}$$

$$B_m = \frac{2}{L}(C_0-C_s)\int_0^L \sin\left(\frac{(2m+1)\pi}{2L}\right)x\,dx = \frac{2}{L}\cdot\frac{2L}{(2m+1)\pi}(C_0-C_s) = \frac{4}{(2m+1)\pi}(C_0-C_s)$$

$$\therefore\ c(x,t) = \sum_{n}^{\infty}\frac{4}{(2n+1)\pi}(C_0-C_s)\sin\left(\frac{(2n+1)\pi}{2L}\right)x\, e^{-\frac{(2n+1)^2\pi^2 Dt}{4L^2}}$$

처음 평행이동 만큼 다시 더해주면 $\boxed{c(x,t) = \sum_{n}^{\infty}\frac{4}{(2n+1)\pi}(C_0-C_s)\sin\left(\frac{(2n+1)\pi}{2L}\right)x\, e^{-\frac{(2n+1)^2\pi^2 Dt}{4L^2}} + C_s}$

(c). $\sqrt{Dt}$ 값이 L에 비해 많이 클 것이므로 1st term appoximation을 이용한다

$\int_0^L c(x,t)\,dx = \frac{C_0}{2}\cdot L$ 를 만족하는 t를 찾으면 된다.

$$\int_0^L \left[\frac{4}{\pi}(C_0-C_s)\sin\left(\frac{\pi}{2L}\right)x\cdot e^{-\frac{\pi^2 Dt}{4L^2}} + C_s\right]dx = \frac{C_0}{2}L$$

$$\frac{8L}{\pi^2}(C_0-C_s)e^{-\frac{\pi^2 Dt}{4L^2}} + C_sL = \frac{C_0}{2}L$$

$$e^{-\frac{\pi^2 Dt}{4L^2}} = \frac{\pi^2\left(\frac{C_0}{2}-C_s\right)}{8(C_0-C_s)} \rightarrow -\frac{\pi^2 Dt}{4L^2} = \ln\left(\frac{\pi^2}{8}\cdot\frac{\frac{C_0}{2}-C_s}{C_0-C_s}\right)$$

($C_0 = 100\text{ppm}$, $C_s = 5\text{ppm}$, $D = 4\times10^{-7}\text{cm}^2\text{s}^{-1}$, $L = 1\text{cm}$)

$$t = 544293\text{ s} = 151.2\text{ h}$$

(d).

(b), (c)에서 유도한 식은 D가 농도와 상관없이 일정한 상태를 가정하였다.
D가 농도가 증가할수록 증가하는 함수라면, 시간이 지남에 따라 농도가 C_0보다 감소할
것이고 D 값은 시간에 따라 계속 감소할 것이다. (위치에 따라 다르겠지만 평균적인 D는 감소할 것이다.)

따라서 특정 상태에 도달하기 위한 시간을 t라고 하면

$D_1 t_1 = \overline{D_2(c)}\, t_2$ $\quad \overline{D_2} < D_1$ 이므로 $t_2 > t_1$ 일 것이다

즉, 시간이 더 오래걸릴 것이다.

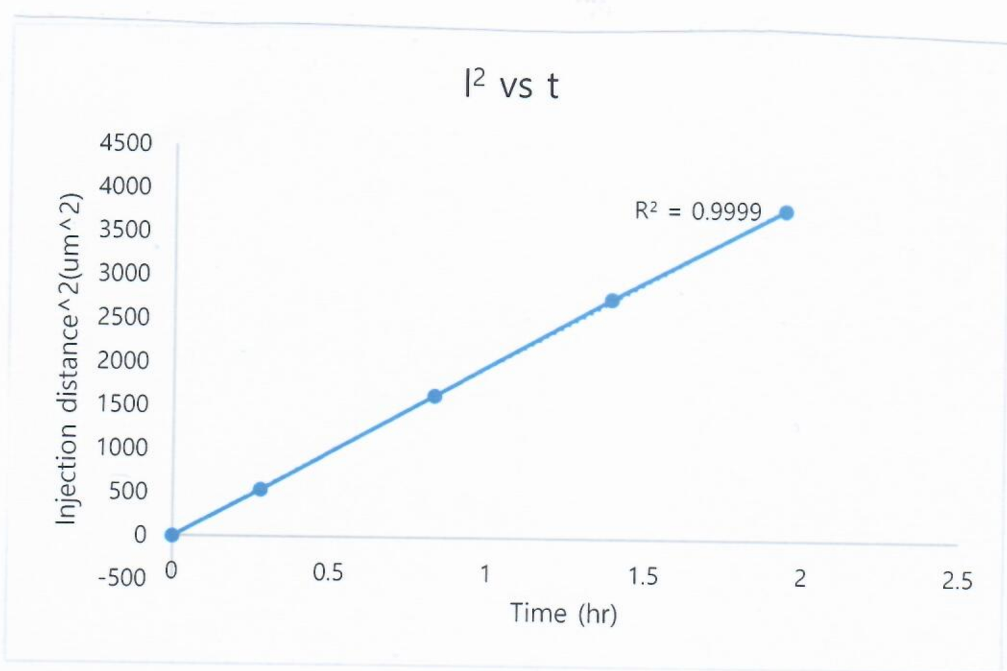
2. length of simulation : 100 μm diffusion coefficient : $1.195 \times 10^{-9}\ cm^2/s$ (at 1173K)
Initial composition : 0.01
Boundary ″ : 0.05

(a)

Injection time (h)	Injection distance (μm)
0.28	23.23
0.83	40.40
1.39	52.53
1.94	61.62

Semi-infinite한 case로 erf를 따를 것이고 따라서 특정 농도에서 $\frac{x}{\sqrt{Dt}}$는 일정한 값을 가질 것이다

$$\frac{x}{\sqrt{Dt}} = k \qquad x^2 = kDt \qquad D \propto x^2 = l^2$$



(b).

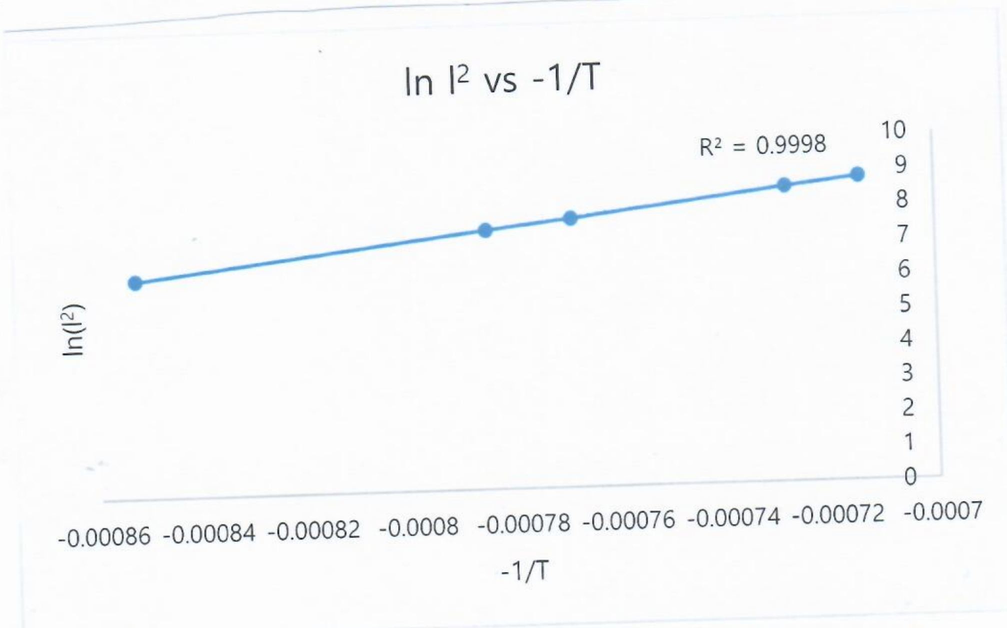
temperature	Injection distance after 0.28h
1173 ($D=1.195\times10^{-9}\,cm^2/s$)	23.23
1273 ($D=3.929\times10^{-9}\,cm^2/s$)	42.42
1300 ($D=5.251\times10^{-9}\,cm^2/s$)	48.48
1373 ($D=1.086\times10^{-8}\,cm^2/s$)	71.21
1473 ($D=2.614\times10^{-9}\,cm^2/s$)	113.64

dimension : 550 μm.

마찬가지로 $\frac{x}{\sqrt{Dt}}=k \quad \sqrt{Dt}=kx \quad Dt=k^2x^2, \quad D=a\exp\left(-\frac{Q}{RT}\right)$

$a\exp\left(-\frac{Q}{RT}\right)t=k^2x^2 \qquad -\frac{Q}{RT}=\ln\left(\frac{k^2}{ta}\right)+\ln x^2$

$\therefore -\frac{1}{T}\propto \ln x^2=\ln l^2$



(c). $D=D_0\exp\left(-\frac{Q}{RT}\right)=k\frac{x^2}{t}$ (Q : activation energy) $\left(\frac{x}{\sqrt{Dt}}=k\right)$

$\begin{cases} \text{at } 1173\,k,\ x=23.23,\ t=998\,s \\ \text{at } 1273\,k,\ x=42.42,\ t=998\,s \end{cases}$ 를 이용하여 Q를 구하면

$\exp\left(-\frac{1}{T_1}+\frac{1}{T_2}\right)\frac{Q}{R}=\frac{x_1^2}{x_2^2}\cdot\frac{t_2}{t_1} \qquad \frac{Q}{R}\left(-\frac{1}{T_1}+\frac{1}{T_2}\right)=\ln\left(\frac{x_1^2}{x_2^2}\cdot\frac{t_2}{t_1}\right)$

$Q=R\ln\left(\frac{x_1^2}{x_2^2}\cdot\frac{t_2}{t_1}\right)\Big/\left(-\frac{1}{T_1}+\frac{1}{T_2}\right) = 149516\ J$