

Stoffübertragung

Diffusion und Stoffübergang

Grundbegriffe, Größen, Formelzeichen, Kenngrößen

DIN

5491

Mass transfer (diffusion and transport of matter);
basic concepts, quantities, symbols, dimensionless parameters

1. Grundbegriffe

1.1. Stoffübertragung

Nach dieser Norm ist Stoffübertragung der gemeinsame Name für Diffusion (siehe Abschnitt 1.2) und Stoffübergang (siehe Abschnitt 1.3). Das System oder jede Phase (siehe DIN 1310) des Systems kann fest, flüssig oder gasförmig sein.

Zur Vereinfachung werden in dieser Norm nur isotrope Zweistoffsysteme behandelt, bei denen Temperatur und Druck überall gleich sind.

1.2. Diffusion

Diffusion ist der Materietransport, der als Folge von Konzentrationsgefällen in einem System ohne Phasengrenzen auftritt und zu einem Konzentrationsausgleich führt.

Unter den Voraussetzungen des Abschnitts 1.1 sind die als Ursache der Diffusion anzusehenden Gefälle der chemischen Potentiale der beiden Stoffe den Konzentrationsgefällen proportional. Da es hier nur ein unabhängiges Konzentrationsgefälle und nur einen unabhängigen Diffusionsvorgang gibt, läßt sich die Diffusion durch einen einzigen Koeffizienten beschreiben. Zusätzlich wird vereinfachend ein System vorausgesetzt, das makroskopisch in Ruhe ist, so daß man von der Konvektion absehen kann (siehe Absatz 6). Dann ist bei eindimensionaler Diffusion in Richtung der Ortskoordinate s nach dem Fickschen Gesetz die Massenstromdichte I_i des Stoffes i ($i = 1, 2$) in jedem Volumenelement proportional dem negativen Wert von $\partial \rho_i / \partial s$, worin ρ_i die lokale Massenkonzentration (lokale Partialdichte) des Stoffes i und $\partial / \partial s$ die lokale Ableitung nach der Ortskoordinate bedeuten. Der Diffusionskoeffizient D ist definiert durch die folgende Gleichung:

$$I_i = \rho_i v_i = -D \partial \rho_i / \partial s. \quad (1)$$

Hierbei ist v_i die mittlere lokale Geschwindigkeit des Stoffes i . Der Diffusionskoeffizient D hängt von der Temperatur, vom Druck und von der Zusammensetzung des Volumenelementes ab.

Man kann anstelle von Gleichung (1) auch schreiben:

$$J_i = c_i v_i = -D \partial c_i / \partial s. \quad (2)$$

Darin bedeutet J_i die Stoffmengenstromdichte und c_i die lokale Stoffmengenkonzentration (lokale Molarität) des Stoffes i .

Der Zusammenhang zwischen den Gleichungen (1) und (2) ist durch

$$I_i / J_i = \rho_i / c_i = M_i \quad (3)$$

gegeben, wobei M_i die stoffmengenbezogene (molare) Masse des Stoffes i bedeutet (siehe auch DIN 5498).

Der auf Grund der Diffusion eine Fläche A senkrecht zu s durchsetzende Massenstrom \dot{m}_i des Stoffes i ergibt sich durch Integration von Gleichung (1) zu

$$\dot{m}_i = \int_A I_i dA. \quad (4)$$

Entsprechend gilt nach Gleichung (2) für den Stoffmengenstrom \dot{n}_i des Stoffes i :

$$\dot{n}_i = \int_A J_i dA. \quad (5)$$

Bei Berücksichtigung der Konvektion muß in den Gleichungen (1) und (2) an die Stelle der Geschwindigkeit v_i die Relativgeschwindigkeit $v_i - w$ treten. Darin ist w eine mittlere Geschwindigkeit, definiert durch die Gleichung

$$w = \rho_1 \tilde{V}_1 v_1 + \rho_2 \tilde{V}_2 v_2 = c_1 V_1 v_1 + c_2 V_2 v_2. \quad (6)$$

In dieser Gleichung ist \tilde{V}_i das partielle massenbezogene (partielle spezifische) Volumen und V_i das partielle stoffmengenbezogene (partielle molare) Volumen des Stoffes i . Die Größe w ist ein Maß für die Konvektion.

Bei dreidimensionaler Diffusion sind in den bisherigen Gleichungen die skalaren Größen I_i, J_i, v_i, A, w durch die Vektoren $\vec{I}_i, \vec{J}_i, \vec{v}_i, \vec{A}, \vec{w}$ und die skalaren Größen $\partial \rho_i / \partial s, \partial c_i / \partial s$ durch die Vektoren $\text{grad } \rho_i, \text{grad } c_i$ zu ersetzen. Die Verallgemeinerung von Gleichung (2) lautet also beispielsweise:

$$\vec{J}_i = c_i (\vec{v}_i - \vec{w}) = -D \text{grad } c_i. \quad (7)$$

1.3. Stoffübergang

Stoffübergang ist der Materietransport, der in einem System mit Phasengrenzen durch eine Grenzfläche stattfindet; die Grenzfläche trennt zwei Phasen voneinander, die insgesamt miteinander nicht im Gleichgewicht sind und relativ zueinander in Bewegung sein können.

Unter den Voraussetzungen des Abschnitts 1.1 spielt sich der Stoffübergang in einem zweiphasigen Zweistoffsystem bei konstanter Temperatur und konstantem Druck ab. In diesem Falle wird das heterogene Gleichgewicht zwischen den beiden Phasen durch die

Fortsetzung Seite 2

Ausschuß für Einheiten und Formelgrößen (AEF) im Deutschen Normenausschuß (DNA)