

สารบัญ

หน้า

สารบัญ	(1)
สารบัญตาราง	(3)
สารบัญภาพ	(4)
คำอธิบายสัญลักษณ์และคำย่อ	(9)
คำนำ	1
วัตถุประสงค์	4
ขอบเขตการวิจัย	4
การตรวจเอกสาร	5
แบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับกระบวนการแพร่	9
แบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับกระบวนการที่มีปฏิกิริยาไม่ผันกลับอันดับหนึ่ง	12
แบบจำลองไร้มิติสำหรับกระบวนการที่มีปฏิกิริยาไม่ผันกลับอันดับหนึ่ง	13
แบบจำลองสำหรับปฏิกิริยาแบบชนิดสามโซน	17
อุปกรณ์และวิธีการ	21
อุปกรณ์	21
วิธีการ	21
วิธีวิเคราะห์เชิงปริมาณของการใช้งานได้ของฟังก์ชันเดลตา	21
ผลและวิจารณ์	30
การวิเคราะห์การใช้งานได้ของฟังก์ชันเดลตา สำหรับกระบวนการแพร่เท่านั้น	33
การวิเคราะห์การใช้งานได้ของฟังก์ชันเดลตา กรณีที่มีปฏิกิริยาไม่ผันกลับอันดับหนึ่ง	36
สรุปผล	43
ข้อเสนอแนะ	44
เอกสารและสิ่งอ้างอิง	45
ภาคผนวก	48
ภาคผนวก ก ลักษณะและการทำงานของระบบปฏิกิริยา TAP-2	49
ภาคผนวก ข ขั้นตอนการคำนวณและระเบียบวิธี MOL (method of lines)	58
ภาคผนวก ค การหาผลเฉลยเชิงวิเคราะห์ กรณีการแพร่	72

สารบัญ (ต่อ)

หน้า

ภาคผนวก ง การหาผลเฉลี่ยเชิงวิเคราะห์ กรณีที่มีปฏิกริยาไม่ผันกลับอันดับหนึ่ง	80
ภาคผนวก จ ภาพกรณีที่มีปฏิกริยาไม่ผันกลับอันดับหนึ่งของปฏิกรณ์แบบ ชนิดหนึ่งโซน สามโซนและโซนบาง	90
ประวัติการศึกษาและการทำงาน	105

สารบัญตาราง

ตารางที่		หน้า
1	แสดงการเปรียบเทียบการคำนวณค่า $\tau_{res,nondelta}$ กรณีการแพร่ (คำนวณจากสมการที่ 45) และจากการจำลองแบบเชิงตัวเลขด้วยระเบียบวิธี MOL (ซึ่งอธิบายรายละเอียดในในภาคผนวก ข)	31
2	แสดงการเปรียบเทียบการคำนวณค่า $\tau_{res,nondelta}$ กรณีปฏิกิริยาไม่ผัน กลับอันดับหนึ่ง (คำนวณจากสมการที่ 61) และจากการจำลองแบบเชิงตัวเลขด้วยระเบียบวิธี MOL (ซึ่งอธิบายรายละเอียดในในภาคผนวก ข)	32
3	แสดงการเปรียบเทียบการคำนวณค่า d_1 จากผลเฉลยเชิงวิเคราะห์ (Analytical Solution) และจากการจำลองแบบเชิงตัวเลขด้วยระเบียบวิธี MOL (ซึ่งอธิบายรายละเอียดในในภาคผนวก ข)	33

สารบัญภาพ

ภาพที่	หน้า
1 ระบบปฏิกรณ์แทป	5
2 ปฏิกรณ์แทปชนิดหนึ่งโซน	6
3 ปฏิกรณ์แทปชนิดสามโซน	7
4 ปฏิกรณ์แทปชนิดโซนบาง	7
5 อัตราการไหลขาเข้าของก๊าซที่เป็นฟังก์ชันเดลตาที่เวลา 0^+	11
6 อัตราการไหลขาเข้าของก๊าซเป็นฟังก์ชันสามเหลี่ยม	12
7 เปรียบเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซกรณีที่แทนอัตราการไหลขาเข้าด้วยฟังก์ชันที่ไม่ใช่เดลตาแบบฟังก์ชันสามเหลี่ยมที่ $t_{open}/t_{res,delta}$ เท่ากับ 0.36	34
8 เปรียบเทียบการหาค่า $\Delta_{D_{eA}}$ ที่ขึ้นกับ $t_{open}/t_{res,nd}$ จากการใช้นิพจน์ของเวลาเฉลี่ยที่ก๊าซอยู่ภายในปฏิกรณ์และการใช้วิธีเทียบโค้ง	34
9 การเปรียบเทียบอัตราการไหลขาออกกรณีที่อัตราการไหลขาเข้าเป็นฟังก์ชันสามเหลี่ยม เมื่อวิธีการแปลผลเป็นวิธีเทียบโค้งและการใช้นิพจน์ของเวลาเฉลี่ยที่ก๊าซอยู่ภายในปฏิกรณ์ที่ค่า t_{open} มีค่าประมาณ 1,000 ไมโครวินาที	35
10 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 1% ของปฏิกรณ์แทปหนึ่งโซน	36
11 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 50% ของปฏิกรณ์แทปหนึ่งโซน	37
12 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 99% ของปฏิกรณ์แทปหนึ่งโซน	37
13 เปรียบเทียบ Δ_{k_A} จากวิธีเทียบโค้งทั้ง 2 แบบ การใช้พื้นที่ใต้โค้งอัตราการไหลขาออก และการวิเคราะห์โดยใช้นิพจน์ของเวลาเฉลี่ยของก๊าซที่อยู่ในปฏิกรณ์ กับค่าการแปลงผันของปฏิกรณ์แทปชนิดหนึ่งโซน ที่เวลาการเปิดของวาล์วพัลส์ t_{open} เท่ากับ 500 ไมโครวินาที	38
14 เปรียบเทียบ Δ_{k_A} จากวิธีเทียบโค้งทั้ง 2 แบบ และการใช้พื้นที่ใต้โค้งอัตราการไหลขาออก กับค่าการแปลงผันของปฏิกรณ์แทปชนิดสามโซน ที่เวลาการเปิดของวาล์วพัลส์ t_{open} เท่ากับ 500 ไมโครวินาที	39

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่	หน้า	
15	แสดงความสัมพันธ์ของอัตราการไหลขาออกเมื่ออัตราการไหลขาเข้าเป็นฟังก์ชันสามเหลี่ยม วิธีเทียบโค้งทั้ง 2 แบบ การใช้พื้นที่ใต้โค้งอัตราการไหลขาออกและการใช้นิพจน์ของเวลาเฉลี่ยของก๊าซที่อยู่ในปฏิกรณ์ เมื่อค่าการแปลงผันเท่ากับ 1% ของปฏิกรณ์แทปหนึ่งโซน ที่เวลาการเปิดของวาล์วพัลส์ t_{open} เท่ากับ 500 ไมโครวินาที	40
16	แสดงความสัมพันธ์ของอัตราการไหลขาออกเมื่ออัตราการไหลขาเข้าเป็นฟังก์ชันสามเหลี่ยม วิธีเทียบโค้งทั้ง 2 แบบ การใช้พื้นที่ใต้โค้งอัตราการไหลขาออกและการใช้นิพจน์ของเวลาเฉลี่ยของก๊าซที่อยู่ในปฏิกรณ์ เมื่อค่าการแปลงผันเท่ากับ 50% ของปฏิกรณ์แทปหนึ่งโซน ที่เวลาการเปิดของวาล์วพัลส์ t_{open} เท่ากับ 500 ไมโครวินาที	41
17	แสดงความสัมพันธ์ของอัตราการไหลขาออกเมื่ออัตราการไหลขาเข้าเป็นฟังก์ชันสามเหลี่ยม วิธีเทียบโค้งทั้ง 2 แบบ การใช้พื้นที่ใต้โค้งอัตราการไหลขาออกและการใช้นิพจน์ของเวลาเฉลี่ยของก๊าซที่อยู่ในปฏิกรณ์ เมื่อค่าการแปลงผันเท่ากับ 99% ของปฏิกรณ์แทปหนึ่งโซน ที่เวลาการเปิดของวาล์วพัลส์ t_{open} เท่ากับ 500 ไมโครวินาที	41
18	แสดงความสัมพันธ์ของอัตราการไหลขาออกเป็นโค้งมาตรฐานที่มีพื้นที่ใต้โค้งเท่ากับหนึ่ง เมื่ออัตราการไหลขาเข้าเป็นฟังก์ชันสามเหลี่ยม จากวิธีเทียบโค้งแบบรูปร่าง การใช้นิพจน์ของเวลาเฉลี่ยของก๊าซที่อยู่ในปฏิกรณ์ เมื่อค่าการแปลงผันเท่ากับ 99% ของปฏิกรณ์แทปหนึ่งโซน ที่เวลาการเปิดของวาล์วพัลส์ t_{open} เท่ากับ 500 ไมโครวินาที	42
ภาพผนวกที่		
ก 1	ระบบปฏิกรณ์ TAP-2	50
ก 2	ระบบสุญญากาศในระบบปฏิกรณ์ TAP-2	52
ก 3	ระบบปฏิกรณ์ TAP-2: (1) พัลส์วาล์วความเร็วสูง (2) มานิโฟลด์ (3) ปฏิกรณ์ (4) แมสสเปกโตรมิเตอร์ (5) วาล์วสุญญากาศ (6) วาล์วควบคุมการไหลโดยมือ (7) สวิตช์ไฟฟ้า	54

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพผนวกที่	หน้า
ก 4 ลักษณะผลตอบแทนแบบซึ่งแสดงชุดของการฉีดก๊าซและผลตอบแทนที่ได้จาก แมสสเปกโตรมิเตอร์	56
ข 1 ขั้นตอนการจำลองแบบการทดลองผลตอบแทนแบบ	60
ข 2 แนวทางการจำลองแบบ	62
ข 3 ความสัมพันธ์ตามจุดของพิกัดในแนวแกนของปฏิกรณ์แบบ	66
ข 4 ความสัมพันธ์ตามจุดของอัตราการผลิตก๊าซที่เข้าของก๊าซที่เป็นฟังก์ชันเคลตา	68
ข 5 ความสัมพันธ์ตามจุดของอัตราการผลิตก๊าซที่เข้าของก๊าซที่เป็นฟังก์ชันสามเหลี่ยม	69
ข 6 ความสัมพันธ์ตามจุดที่ทางออกของปฏิกรณ์แบบ	71
จ 1 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 1% ของปฏิกรณ์แบบ หนึ่งโซน	91
จ 2 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 5% ของปฏิกรณ์แบบ หนึ่งโซน	91
จ 3 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 25% ของปฏิกรณ์แบบ หนึ่งโซน	92
จ 4 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 50% ของปฏิกรณ์แบบ หนึ่งโซน	92
จ 5 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 75% ของปฏิกรณ์แบบ หนึ่งโซน	93
จ 6 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 90% ของปฏิกรณ์แบบ หนึ่งโซน	93
จ 7 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 95% ของปฏิกรณ์แบบ หนึ่งโซน	94
จ 8 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 99% ของปฏิกรณ์แบบ หนึ่งโซน	94

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพผนวกที่	หน้า
จ 9 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 1% ของปฏิกรณ์แบบสามโซน	95
จ 10 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 5% ของปฏิกรณ์แบบสามโซน	95
จ 11 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 25% ของปฏิกรณ์แบบสามโซน	96
จ 12 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 50% ของปฏิกรณ์แบบสามโซน	96
จ 13 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 75% ของปฏิกรณ์แบบสามโซน	97
จ 14 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 90% ของปฏิกรณ์แบบสามโซน	97
จ 15 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 95% ของปฏิกรณ์แบบสามโซน	98
จ 16 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 99% ของปฏิกรณ์แบบสามโซน	98
จ 17 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 1% ของปฏิกรณ์แบบโซนบาง	99
จ 18 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 5% ของปฏิกรณ์แบบโซนบาง	99
จ 19 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 25% ของปฏิกรณ์แบบโซนบาง	100
จ 20 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 50% ของปฏิกรณ์แบบโซนบาง	100
จ 21 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 75% ของปฏิกรณ์แบบโซนบาง	101

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพผนวกที่	หน้า
จ 22 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 90% ของปฏิกรณ์แบบ โซนบาง	101
จ 23 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 95% ของปฏิกรณ์แบบ โซนบาง	102
จ 24 การเปรียบเทียบการหาค่า Δ_{k_A} สำหรับการแปลงผันเท่ากับ 99% ของปฏิกรณ์แบบ โซนบาง	102
จ 25 เปรียบเทียบ Δ_{k_A} จากวิธีเทียบโคงทั้ง 2 แบบ การใช้พื้นที่ได้โคงอัตราการไหลขา ออก และการวิเคราะห์โดยใช้นิพจน์ของเวลาเฉลี่ยของก๊าซที่อยู่ในปฏิกรณ์ กับค่า การแปลงผัน ของปฏิกรณ์แบบชนิดหนึ่งโซน ที่เวลาการเปิดของวาล์วพัลส์ t_{open} เท่ากับ 500 ไมโครวินาที	103
จ 26 เปรียบเทียบ Δ_{k_A} จากวิธีเทียบโคงทั้ง 2 แบบ และการใช้พื้นที่ได้โคงอัตราการ ไหลขาออกกับการแปลงผันของปฏิกรณ์แบบชนิดสามโซน ที่เวลาการเปิดของ วาล์วพัลส์ t_{open} เท่ากับ 500 ไมโครวินาที	103
จ 27 เปรียบเทียบ Δ_{k_A} จากวิธีเทียบโคงทั้ง 2 แบบ และการใช้พื้นที่ได้โคงอัตราการ ไหลขาออกกับการแปลงผันของปฏิกรณ์แบบชนิดโซนบาง ที่เวลาการเปิดของ วาล์วพัลส์ t_{open} เท่ากับ 500 ไมโครวินาที	104

คำอธิบายสัญลักษณ์และคำย่อ

A	=	พื้นที่หน้าตัดของเบ็ดตัวเร่งปฏิกิริยา (ตารางเซนติเมตร)
a_s	=	ความเข้มข้นของแอกทีฟไซต์ (โมลต่อตารางเซนติเมตร)
C_A	=	ความเข้มข้นของก๊าซทำปฏิกิริยา (โมลต่อลูกบาศก์เซนติเมตร)
C_A^*	=	ความเข้มข้นไร้มิติของก๊าซทำปฏิกิริยา นิยามโดย $C_A^* \equiv \frac{C_A}{N_{pA}/\varepsilon_b AL}$
$C_{A,i}^*$	=	ความเข้มข้นไร้มิติของก๊าซทำปฏิกิริยาที่ตำแหน่ง i
D_{eA}	=	สัมประสิทธิ์การแพร่ (ตารางเซนติเมตรต่อวินาที)
$D_{eA,real}$	=	สัมประสิทธิ์การแพร่จริง (ตารางเซนติเมตรต่อวินาที)
$D_{eA,est}$	=	สัมประสิทธิ์การแพร่ที่คำนวณได้ (ตารางเซนติเมตรต่อวินาที)
F_A	=	อัตราการไหลของก๊าซ A ที่ทางออก (โมลต่อวินาที)
F_A^*	=	อัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซ
$F_{A,delta}^*$	=	อัตราการไหลขาออกไร้มิติในกรณีที่อัตราการไหลขาเข้าเป็นฟังก์ชันเดลตา
$F_{A,nondelta}^*$	=	อัตราการไหลขาออกไร้มิติในกรณีที่อัตราการไหลขาเข้าไม่ใช่ ฟังก์ชันเดลตา
h_τ	=	ความแตกต่างของฟังก์ชันเวลาไร้มิติ
h_ε	=	ความแตกต่างของฟังก์ชันระยะทางไร้มิติ
k_A	=	ค่าคงที่ปฏิกิริยา (ลูกบาศก์เซนติเมตรต่อโมล.วินาที)
$k_{eA,real}$	=	ค่าคงที่ปฏิกิริยาจริง (ลูกบาศก์เซนติเมตรต่อโมล.วินาที)
$k_{eA,est}$	=	ค่าคงที่ปฏิกิริยาที่คำนวณได้ (ลูกบาศก์เซนติเมตรต่อโมล.วินาที)
k_A^*	=	ค่าคงที่ปฏิกิริยาไร้มิติ
$k_{eA,est}^*$	=	ค่าคงที่ปฏิกิริยาที่คำนวณได้ไร้มิติ
L	=	ความยาวของปฏิกรณ์ (เซนติเมตร)
M	=	มวลโมเลกุล (กรัมต่อโมล)
M_0^*	=	โมเมนต์อันดับศูนย์ของอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซ
M_1^*	=	โมเมนต์อันดับหนึ่งของอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซ
N_{pA}	=	จำนวนโมลของก๊าซทำปฏิกิริยาที่ถูกฉีดเข้าสู่ปฏิกรณ์แทป (โมล)
R_p	=	ความยาวรัศมีของตัวเร่งปฏิกิริยา (เซนติเมตร)
r	=	พิกัดตามแนวรัศมีตัวเร่งปฏิกิริยา (เซนติเมตร)
S_v	=	พื้นที่ผิวของตัวเร่งปฏิกิริยาต่อปริมาตรของตัวเร่งปฏิกิริยา (เซนติเมตร ⁻¹)

คำอธิบายสัญลักษณ์และคำย่อ (ต่อ)

t	=	เวลา (วินาที)
t_{res}	=	เวลาเฉลี่ยที่ก๊าซอยู่ในปฏิกรณ์ (วินาที)
$t_{res,delta}$	=	เวลาเฉลี่ยที่ก๊าซอยู่ในปฏิกรณ์ (วินาที) เมื่ออัตราการไหลขาเข้าเป็นฟังก์ชันเดลตา
t_{open}	=	ช่วงเวลาเปิดของวาล์วพัลส์ (วินาที)
X	=	ค่าการแปลงผัน
z	=	พิกัดตามแนวแกนปฏิกรณ์แทป (เซนติเมตร)

สัญลักษณ์อักษรกรีก

$\Delta_{D_{eA}}$	=	ความแตกต่างของสัมประสิทธิ์การแพร่ต่อสัมประสิทธิ์การแพร่จริง
Δ_{k_A}	=	ความแตกต่างของค่าคงที่ปฏิกิริยาต่อค่าคงที่ปฏิกิริยาจริง
$\delta(z-0^+)$	=	ฟังก์ชันเดลต้าที่พิกัด $z = 0^+$
$\delta(\xi-0^+)$	=	ฟังก์ชันเดลต้าที่พิกัด $\xi = 0^+$
$\delta(t-0^+)$	=	ฟังก์ชันเดลต้าที่พิกัด $t = 0^+$
$\delta(\tau-0^+)$	=	ฟังก์ชันเดลต้าที่พิกัด $\tau = 0^+$
$X(\tau)$	=	ฟังก์ชันขาเข้าที่ไม่ใช่ฟังก์ชันเดลตา
$X(s)$	=	ฟังก์ชันขาเข้าที่ไม่ใช่ฟังก์ชันเดลตาในโดเมนของลาปลาซ
ε_b	=	เศษส่วนช่องว่างของเบดตัวเร่งปฏิกิริยา
τ	=	พิกัดเวลาไร้มิตินิยามโดย $\tau \equiv \frac{tD_{eA}}{\varepsilon_b L^2}$
τ_b	=	ความคดเคี้ยวภายในเบดโดย $\tau_b = 1/\varepsilon_b$
τ_{res}	=	เวลาเฉลี่ยที่ก๊าซอยู่ในปฏิกรณ์ในเทอมไร้มิตินิยามโดย $\tau_{res} \equiv \frac{t_{res} D_{eA}}{\varepsilon_b L^2}$
$\tau_{res,delta}$	=	เวลาเฉลี่ยที่ก๊าซอยู่ในปฏิกรณ์ไร้มิติเมื่ออัตราการไหลขาเข้าเป็นฟังก์ชันเดลตา
$\tau_{res,nondelta}$	=	เวลาเฉลี่ยที่ก๊าซอยู่ในปฏิกรณ์ในไร้มิติเมื่ออัตราการไหลขาเข้าไม่ใช่ฟังก์ชันเดลตา
τ_{open}	=	ช่วงเวลาเปิดของวาล์วพัลส์ในเทอมไร้มิตินิยามโดย $\tau_{open} \equiv \frac{t_{open} D_{eA}}{\varepsilon_b L^2}$
ξ	=	พิกัดระยะทางไร้มิติตามความยาวของ ปฏิกรณ์ นิยามโดย $\xi \equiv \frac{z}{L}$