

УДК 531.19

Р. Н. Ласовский, доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск);  
Т. Н. Пацаган, ст. науч. сотр., канд. физ.-мат. наук  
(ИФКС НАНУ, г. Львов)

## ДИФФУЗИЯ ЧАСТИЦ В ОДНОМЕРНЫХ КАНАЛАХ

Последовательность расчета электро-транспортных характеристик керамических электролитов может состоять в рассмотрении распределения концентрации носителей заряда, электрического потенциала и других характеристик в континуальном представлении с последующим переходом к решеточному приближению для обеспечения возможности получать конкретные оценки интересующих величин.

Рассмотрение в полном объеме трехмерных систем наталкивается на дополнительные трудности, обусловленные необходимостью решения многомерных дифференциальных уравнений в частных производных. В связи с этим целесообразно выбрать простейшую геометрию системы, которая позволила бы в максимальной мере абстрагироваться от особенностей сложной геометрической формы системы и сосредоточиться на изучении собственно физических процессов. В связи с этим используется плоская граница системы, когда в направлениях, параллельных этой границе, характеристики системы сохраняются постоянными, и исследуется распределения в зависимости от расстояния до границы. Тогда систему можно рассматривать как квази-одномерную, и неоднородности вблизи границы распространяются во многих случаях на расстояния нанометровых масштабов.

Моделирование выявило, что самодиффузия частиц вдоль одномерных каналов малых диаметров, не позволяющих частицам опережать друг друга, носит аномальный (субдиффузионный) характер как без учета взаимодействия между частицами, так и при учете кулоновского взаимодействия между ними, в то время как диффузия центра масс, соответствующая макроскопической диффузии под действием градиента концентрации или электропроводности системы, имеет классический характер и средний квадрат смещения центра масс пропорционален времени. Показано, что в каналах малой длины субдиффузионный режим с течением времени переходит в диффузионный и установлена минимальная длина канала, при которой этот переход не происходит. Исследовано влияние кулоновского взаимодействия и глубин ям потенциального рельефа системы на диффузионные характеристики.