

СТРУКТУРА И КИНЕТИКА ФРОНТА РАЗРЯДА ИНТЕРКАЛЯЦИОННОЙ СИСТЕМЫ

Г. С. Бокун, В. С. Вихренко, Р. Н. Ласовский

*Белорусский государственный технологический университет,
ул. Свердлова, 13а, 220050, Минск, Беларусь*

Во многих случаях в автономных источниках энергии, способных ее накапливать и хранить, в качестве рабочих тел используются интеркаляционные соединения (например, водородосодержащие металлы или их оксиды, литий-аккумулирующие составы и др.). В процессе эксплуатации эти соединения подвергаются многократным процессам перезарядки, и их исследование представляет значительный интерес. Для обеспечения стабильности генерируемой разности потенциалов используются условия, при которых в процессе разряда происходит фазовый переход между состояниями интеркалянта с высокой и низкой концентрацией, обусловленный специфическим взаимодействием между ионами интеркалянта.

Ранее прямым моделированием по методу Монте-Карло было показано [1], что в рамках модели решеточного флюида с притяжением между ближайшими соседями при температурах ниже критической в процессе разряда профиль концентрации частиц интеркалянта образует своеобразную «ступеньку», в которой можно выделить три области: конденсированная фаза, переходной слой (фронт разряда) и разреженная фаза. Фронт разряда, характерный размер которого составляет несколько нанометров, движется вдоль системы, практически не изменяя своего профиля и сопрягаясь в области малых концентраций интеркалянта с диффузионной зоной.

В настоящем сообщении излагается метод построения решения уравнения неразрывности, описывающего, совместно с замыкающим уравнением термоактивационного типа для потока частиц, кинетику процесса интеркаляции. В приближении среднего поля величина энергетического барьера, преодолеваемого частицами при переходе между соседними узлами, пропорциональна плотности частиц в соответствующих узлах и энергии межчастичного взаимодействия. В целом получается сильно нелинейная по концентрации частиц система дифференциальных уравнений, для решения которой использована разностная схема. Полученное решение находится в хорошем соответствии с результатами моделирования по методу Монте-Карло, что позволяет существенно расширить возможности исследования характеристик разряда, так как реализация метода Монте-Карло требует значительных вычислительных ресурсов.

1. Ласовский Р. Н. Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информатики. 13, 49 (2005).