

ВЛИЯНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК НА КИНЕТИКУ ПРОЦЕССОВ В ИНТЕРКАЛЯЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЯХ

В.С. Выхренко, Я.Г. Грода, Р.Н. Ласовский

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

В интеркаляционных соединениях подсистема интеркалирующих частиц может в определенной степени рассматриваться независимо от базисной подсистемы, в которую они встраиваются. Взаимовлияние между подсистемами может быть учтено посредством перенормировки потенциалов межчастичного взаимодействия и энергии связи частиц интеркалянта с базисной подсистемой. Это позволяет при описании интеркаляционных систем широко использовать модели решетчатых газов.

Процессы миграции интеркалирующих частиц описываются в рамках законов диффузии или электропроводности. Основным кинетическим параметром является кинетический (или прыжковый) коэффициент диффузии, через который непосредственно выражается коэффициент электропроводности. Входящий в законы Фика коэффициент химической диффузии определяется частным от деления коэффициента кинетической диффузии на химическую емкость системы. Последняя является термодинамической характеристикой, поведение которой существенно зависит от типа межчастичного взаимодействия – притяжения или отталкивания. В первом случае химическая емкость в околокритической области характеризуется наличием максимума, что может приводить к резкому замедлению диффузионных процессов. Во втором случае поведение химической емкости обеспечивает интенсификацию диффузионных процессов.

В системах с изодородными энергетическими характеристиками взаимосвязь равновесных и кинетических параметров приводит к более широкому разнообразию кинетических свойств интеркаляционных соединений. Так, в двухуровневых системах химическая емкость, даже при отсутствии межчастичного взаимодействия, характеризуется наличием двух пиков на ее зависимости от концентрации частиц или химического потенциала, что приводит к усложнению поведения химического коэффициента диффузии. Учет межчастичных взаимодействий приводит к дополнительным особенностям в поведении как химической емкости, так и диффузионных характеристик.