

ДИФфуЗИЯ В СВЕРХКРИТИЧЕСКИХ ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ РЕШЕТОЧНЫХ СИСТЕМАХ

Г.С. Бокун, В.С. Вихренко, Д.В. Гапанюк, Я.Г. Грода

Белорусский государственный технологический университет,
Республика Беларусь, 220050, г. Минск, ул. Свердлова 13а
Тел.: +375-17-227-30-35, e-mail: vvikhre@bstu.unibel.by

Решеточные системы рассматриваются как относительно простые модели реальных объектов, таких как твердые электролиты, интеркаляционные соединения, адсорбированные слои на поверхности твердых тел и другие, где взаимодействие примесной (которая рассматривается в решеточном приближении) и базисной подсистем может быть приближенно принято в расчет перенормировкой взаимодействий между примесными частицами. Ввиду широкого практического использования реальных прототипов моделируемых систем и хорошего отображения их свойств решеточными моделями исследованию последних посвящено большое количество работ, но основные усилия были направлены на изучение однокомпонентных системы. Вместе с тем, уже двухкомпонентные системы проявляют качественные отличия в равновесных свойствах и кинетическом поведении, присущие и произвольным многокомпонентным системам.

Как и в обычных флюидах, термодинамика двухкомпонентных решеточных систем характеризуется более сложной фазовой диаграммой и наличием критической кривой вместо критической точки однокомпонентной системы. Наличие двух химических потенциалов обуславливает более сложное влияние термодинамики системы на поведение диффузионных характеристик. Для системы заряженных частиц взаимосвязь между флуктуациями концентрации и химическими емкостями также оказывается более сложной по сравнению с однокомпонентным решеточным газом.

Рассмотрены различные типы коэффициентов диффузии (кинетический, химический, самодиффузии) и взаимосвязи между ними. Химическими коэффициентами диффузии, входящие в первый закон Фика, представлены произведением кинетических коэффициентов диффузии и термодинамических факторов. Для систем заряженных частиц последние тесно связаны с химическими емкостями. Исследовано влияние типа потенциалов взаимодействия на эти характеристики.

Термодинамические факторы, определяемые производными химических потенциалов по концентрациям компонентов, отражают термодинамическую составляющую диффузионных процессов. Динамическая составляющая определяется кинетическими коэффициентами диффузии. В свою очередь, сами кинетические коэффициенты диффузии содержат статические и динамические вклады, первые из которых выражаются статическими корреляционными функциями потоков и концентраций, тогда как вторые определены интегралами по времени корреляционной функции приведенных потоков частиц, и таким образом они отражают эффекты памяти. Как и для однокомпонентных систем [1–3], используются различные возможности для исследования составляющих диффузионных процессов, а именно, аналитические соотношения, полученные в рамках теории линейной реакции, и моделирование по методу Монте-Карло.

1. Bokun G.S., Groda Ya.G., Uebing C., Vikhrenko V.S., *Physica A*. Vol. 296, 83 (2001).
2. Groda Ya.G., Argyrakis P., Bokun G.S., Vikhrenko V.S., *Eur. Phys. J. B* 32 (2003) 527.
3. Argyrakis P., Groda Y.G., Bokun G.S., Vikhrenko V.S. // *Phys. Rev. E*. – 2001. – V. 64. – art. no. 066108.