

ВЛИЯНИЕ ХАРАКТЕРА МЕЖЧАСТИЧНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ТЕРМОДИФфуЗИОННЫЙ МАССОПЕРЕНОС В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ И НА ИХ ПОВЕРХНОСТЯХ

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

Белорусский государственный технологический университет,
Минск, Беларусь

Термодиффузия является одним из механизмов массопереноса, который может быть использован для доставки частиц реагирующих веществ в зону реакции. В ряде случаев термодиффузия может оказаться более эффективным механизмом переноса массы по сравнению с обычной диффузией, и поэтому необходимо более глубокое понимание влияния на нее различных факторов.

Рассмотрена система взаимодействующих частиц на плоской квадратной решетке, моделирующая поверхность кристалла. Исследовано влияние типа взаимодействия (притяжение или отталкивание между ближайшими соседями) на коэффициент термодиффузии. Выполнено компьютерное моделирование по методу Монте-Карло, а также получено статистико-механическое выражение для коэффициента термодиффузии.

При компьютерном моделировании использовано выражение для плотности потока числа частиц в виде суммы двух слагаемых, представляющих первый закон Фика и эффект Соре. В периодическом температурном поле суммарный поток числа частиц равен нулю, и отношение градиентов температуры и плотности пропорционально отношению коэффициентов диффузии и термодиффузии. Это позволяет определить коэффициент термодиффузии, если коэффициент диффузии известен. Изучению последнего посвящены многочисленные работы (см. [1,2]).

Отношение коэффициентов термодиффузии и химической диффузии сильно зависит от термодинамических условий, в особенности от температуры. При повышении температуры это отношение уменьшается.

В системах с межчастичным притяжением это отношение быстро увеличивается при понижении температуры и по мере приближения к критической точке фазового перехода типа жидкость-газ, что связано с известным эффектом критического замедления химической диффузии. При этих условиях термодиффузия, не подверженная эффекту

критического замедления, может рассматриваться как основной механизм массопереноса.

В системах с межчастичным отталкиванием при понижении температуры отношение коэффициентов термо- и химической диффузии сначала возрастает, а затем начинает убывать, что обусловлено формированием упорядоченной фазы (типа шахматной доски) в таких системах.

Сопоставление результатов вычислений по статистико-механическим зависимостям с данными моделирования по методу Монте-Карло показывает, что специфические статистические эффекты памяти значительно более существенны при термодиффузии, чем при химической диффузии.

Литература

1. Bokun G.S., Groda Ya.G., Uebing C., Vikhrenko V.S. *The selfconsistent diagram approximation for lattice systems: diffusion properties of interacting lattice gases* // *Physica A*. – 2000. – Vol. 296. – P. 83–105.
2. Argyrakis P., Groda Ya.G., Bokun G.S., Vikhrenko V.S. *Thermodynamics and diffusion of a lattice gas on a simple cubic lattice* // *Phys. Rev. E* – 2001. – Vol. 64. – Art. no. 066108.

СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И СВОЙСТВА ИНТЕРКАЛАТОВ НА ОСНОВЕ КСЕРОГЕЛЯ ОКСИДА ВАНАДИЯ (V)

Захарова Г.С., Волков В.Л.

Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Интеркалаты относятся к слоистым соединениям структуры «сэндвича», где катионы или молекулы-гости находятся между металл-кислородными слоями. В качестве матрицы для данных веществ может быть использован ксерогель оксида ванадия (V) $V_2O_5 \cdot nH_2O$ ($H_2V_{12}O_{31} \cdot nH_2O$), который уже является интеркалатом. Он состоит из сдвоенных V-O плоскостей, между которыми расположены ионы гидроксония и молекулы воды. Протоны этого ксерогеля легко вступают в ионный обмен и вытесняются простыми или комплексными катионами, а вода – молекулами органических растворителей. Ионы ванадия ксерогеля $H_2V_{12}O_{31} \cdot nH_2O$ частично замещаются другими d-элементами с образованием целого класса интеркалатов общей формулы $H_2V_{12-y}T_yO_{31} \cdot nH_2O$, где T=Mo, W, Cr, Ti. Наиболее эффективный метод синтеза данных соединений состоит из приготовления соответствующих