

И. Л. ДОРОШЕВИЧ

БГУИР (г. Минск, Республика Беларусь)

## РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ БИНАРНОЙ СМЕСИ «ПАР АТОМОВ ЖЕЛЕЗА – АЗОТ»

Важной характеристикой кинетической составляющей в модели процесса нуклеации атомов пара металла в отдельную наночастицу в плазме является коэффициент диффузии. Поскольку процесс формирования наночастицы происходит в буферном газе, то, как показал анализ литературы [1, 2], в этом случае диффузия практически полностью определяется соударениями частиц разных сортов и поэтому зависит главным образом от потенциала, связанного с подобными соударениями. Следовательно, в качестве коэффициента диффузии атомов металлического пара в разреженном буферном газе необходимо рассматривать коэффициент диффузии бинарной смеси «металлический пар – буферный газ». Выражение для коэффициента диффузии  $D_{12}$  бинарной смеси в первом приближении методов Чепмена – Каулинга и Кихары имеет вид [2]:

$$D_{12} = \frac{3\sqrt{2\pi kT m_{12}}}{16\pi n m_{12} \sigma_{12}^2 \Omega_{12}^{(1,1)*}(T^*)} = \frac{3}{16n \sigma_{12}^2 \Omega_{12}^{(1,1)*}(T^*)} \cdot \sqrt{\frac{2kT}{\pi m_{12}}}, \quad (1)$$

где  $m_{12}$  – приведенная масса атомов массой  $m_1$  и  $m_2$ :  $m_{12} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ ;

$\sigma_{12}$  – характеристическое расстояние, зависящее от выбранного закона межмолекулярных сил между молекулами газа и металла;

$\Omega_{12}^{(1,1)*}(T^*)$  – приведенный интеграл столкновений для диффузии, значение которого определяется выбором закона межмолекулярного взаимодействия сталкивающихся молекул и приведенной температурой  $T^*$ , равной

$$T^* = \frac{kT}{\varepsilon_{12}},$$

где  $\varepsilon_{12}$  – характеристическая энергия, зависящая от выбранного закона межмолекулярных сил между молекулами газа и металла.

Для вычисления параметров  $\varepsilon_{12}$  и  $\sigma_{12}$  парного взаимодействия молекулы буферного газа с атомом металла использовались комбинаторные соотношения, устанавливающие значения параметров смеси через параметры взаимодействия однородных молекул [2]:

$$\varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2}, \quad \sigma_{12} = \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2},$$

где  $\varepsilon_1$  и  $\sigma_1$  – параметры потенциальной энергии парного взаимодействия для металла,  $\varepsilon_2$  и  $\sigma_2$  – для буферного газа.

Для расчета коэффициента диффузии

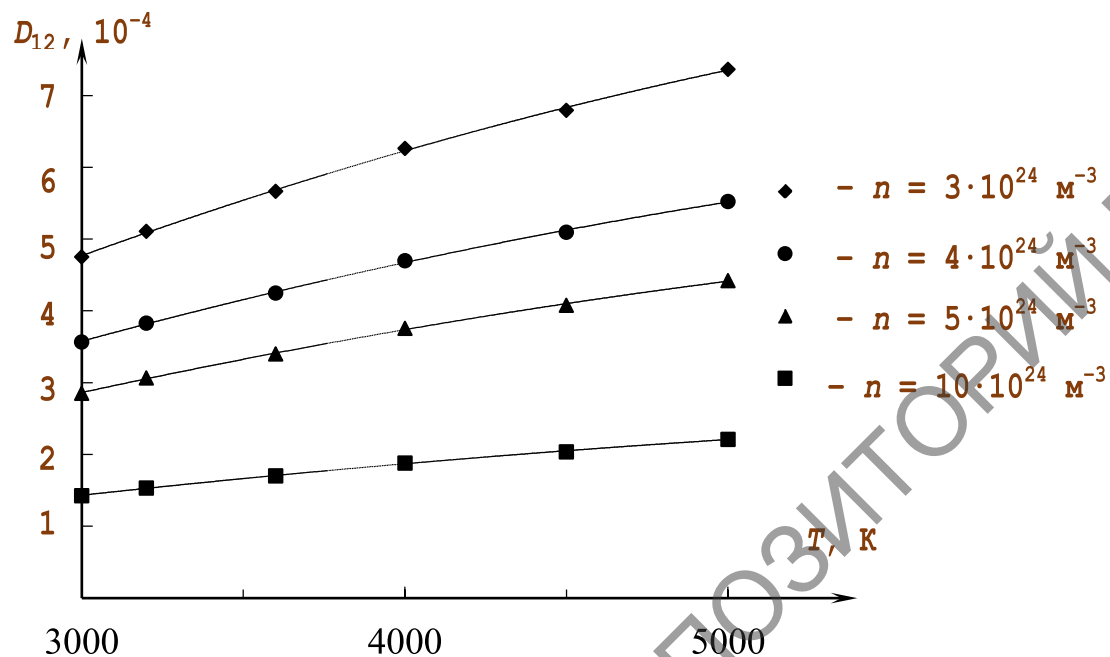


Рисунок – Значение коэффициента диффузии бинарной смеси «пар атомов железа – азот» при различных температурах и концентрациях. Штриховые линии добавлены для визуализации

Результаты расчета коэффициента  $d_{12}$  для бинарной смеси «пар атомов железа – азот» при различных температурах представлены в таблице.

**Таблица – Коэффициент  $d_{12}$  для бинарной смеси «пар атомов железа – азот» при различных температурах**

$T, K$	3000	3200	3600	4000	4500	5000
$d_{12}, 10^{21} (m \cdot c)^{-1}$	2,06	2,16	2,37	2,53	2,75	2,94



#### Список использованных источников

1. Рид, Р. Свойства газов и жидкостей: Справочное пособие / Р. Рид, Дж. Праусниц, Т. Шервуд; пер. с англ.; под ред. Б. И. Соколова. – 3-е изд., перераб. и доп. – Л.: Химия, 1982. – 592 с.: ил. – Нью-Йорк, 1977.
2. Ферцигер, Дж. Математическая теория процессов переноса в газах / Дж. Ферцигер, Г. Капер; пер. с англ.; под ред. Д.Н. Зубарева, А.Г. Башкирова. – М.: Мир, 1976. – 555 с.
3. Дорошевич, И.Л. Расчет параметров потенциальной энергии Леннард-Джонса для атомов железа / И.Л. Дорошевич // Инновационные технологии обучения физико-математическим дисциплинам : материалы VII Междунар. науч.-практ. интернет-конф., Мозырь, 24–27 марта 2015 г. / УО МГПУ им. И. П. Шамякина; редкол.: И. Н. Ковальчук (отв. ред.) [и др.]. – Мозырь, 2015. – С. 181–183.
4. Эткинс, П. Физическая химия: в 2 т. / П. Эткинс; пер. с англ. К.П. Бутина. – М.: Мир, 1980. – Т. 2. – 584 с.
5. Васильева, И.А. Теплофизические свойства веществ : учеб. пособие / И.А. Васильева, Д.П. Волков, Ю.П. Заричняк. – СПб. : СПбГУ ИТМО, 2004. – 80 с.