Вестник МГУ, серия 2: химия, т.38, No.4 (1997) 273-277

УДК 539.219.3

АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ДИФФУЗИИ ГАЗОВ В АКТИВНЫХ СРЕДАХ ПРИ СЛОЖНЫХ КРАЕВЫХ УСЛОВИЯХ

И.Н.Бекман
(Кафедра радиохимии)

Рассмотрена феноменологическая теория диффузии газа в микрогетерогенной среде при условии существенного превышения концентрации активных центров над концентрацией растворенного газа. Для произвольных начальных и граничных условий в рамках одноканального приближения варианта Генри 1 - Генри 2 модели "двойной сорбции" методом Фурье проведено аналитическое решение задачи диффузии низкомолекулярной примеси в пластине. Получены выражения для концентрационных профилей подвижной и неподвижной фаз, а также для зависимостей от времени потоков газа в, из или через пластину, которые могут быть использованы для обработки результатов основных методов газовой диффузии.

В настоящей работе приведены результаты математического анализа процесса нестационарной диффузии газов в твердых телах при наличии обратимой химической реакции 1-го порядка взаимодействия молекул диффузанта с активными центрами, равномерно распределенными по объему образца. Твердое тело трактуется как разбавленная дисперсия активных центров или точечных дефектов "неограниченной" емкости. В ходе диффузии неподвижные активные центры захватывают молекулы газа (т.е. действуют как “ловушки”) и на некоторое время выводят их из диффузионного процесса. В теории диффузии подобная ситуация называется одноканальным диффузионным приближением варианта Генри 1-Генри 2 модели "двойной" сорбции [1]. Решения будут даны для плоского образца при произвольных начальных и граничных условиях.

Для описания нестационарной диффузии газа в микрогетерогенной пластине толщиной l необходимо решить систему дифференциальных уравнений вида:

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} - k_1^* C_1 + k_2^* C_2 , \qquad (1а)$$

$$\frac{\partial C_2}{\partial t} = k_1^* C_1 + k_2^* C_2 \quad , \qquad (1б)$$

при начальных условиях:

$$C_1(x,0)=C_1(x), \qquad (2а)$$

$$C_2(x,0)=C_2(x) \qquad (2б)$$

и граничных условиях:

$$C_1(0,t)=\varphi_1(t), \qquad (3а)$$

$$C_1(l,t)=\varphi_2(t) \qquad (3б)$$

для одномерной диффузии в неограниченной пластине толщиной l.

Следует заметить, что при задании граничных условий (3) мы рассмотрели только подвижную фазу. Условия для неподвижной фазы появляются автоматически из решения Ур.1б

$$C_2(x,t) = C_2(x)e^{-k_2^* t} + k_1^* e^{-k_2^* t}\int_0^t e^{k_2^* \tau} C_1(x,\tau)d\tau \ , \qquad (4)$$

Займемся решением системы (1) при обобщенных краевых условиях (2 и 3). Решение уравнения (1б) получается сразу. Подставив выражение (4) в (1а), умножив его на $\exp(k_2^* t)$ и продифференцировав результат по t, получим:

$$\frac{\partial^2 C_1}{\partial t^2} + \left(k_1^* + k_2^*\right)\frac{\partial C_1}{\partial t} = k_2^* D \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} + D\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2}\right) \qquad (5)$$

Это выражение удобно представить в виде

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} + \tau^* \frac{\partial^2 C_1}{\partial t^2} - \frac{D_{\text{эт}}}{k_2^*}\frac{\partial^3 C_1}{\partial t \partial x^2} = D_{\text{эт}} \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} \qquad (6)$$

где время релаксации $\tau^*=(k_1^*+k_2^*)^{-1}$, $D_{\text{эф}}=D/(1+K_x)=Dk_2^*\tau^*$, $K_x=k_1^*/k_2^*$-константа равновесия реакции захвата. Уравнение (7) наглядно демонстрирует отличие случая классической (т.е. ненарушенной) диффузии от диффузии в дефектных средах.

Строго говоря, уравнение (6) не эквивалентно системе (1), так как в нем отсутствует информация о начальном распределении концентрации газа в ловушках. Однако уравнение (6) удобно для вычисления декрементов затухания диффузионной волны (α_i).

Таким образом, мы получили дифференциальное уравнение для диффузии в дефектной среде, которое будем решать методом разделения переменных Фурье. С этой целью введем в уравнение (6) подстановку:

$$C = e^{i\omega x - \alpha t} \qquad (7)$$

Получим:

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} = -\alpha e^{-\alpha t} e^{i\omega x}; \frac{\partial^2 C_1}{\partial t^2} = \alpha^2 e^{-\alpha t} e^{i\omega x};$$

$$\frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} = -\omega^2 e^{-\alpha t} e^{-i\omega x}; \frac{\partial C_1}{\partial t}\left(\frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2}\right) = \alpha\omega^2 e^{-\alpha t} e^{i\omega t};$$

$$\alpha^2 e^{-\alpha t} e^{i\omega x} - \left(k_1^* + k_2^*\right)\alpha e^{i\omega x - \alpha t} = k_2^* D\left(-\omega^2 e^{i\omega x - \alpha t}\right) + D\alpha\omega^2 e^{i\omega x - \alpha t},$$

откуда после сокращения на уравнение (7) получим

$$\alpha^2 - \left(k_1^* + k_2^*\right)\alpha = -k_2^* D\omega^2 + D\alpha\omega^2, \qquad (8)$$

$$\omega^2 = \frac{\alpha^2 - \left(k_1^* + k_2^*\right)\alpha}{D\left(\alpha - k_2^*\right)}. \qquad (9)$$

Тогда декременты затухания

$$\alpha_1 = 0{,}5(k_1^* + k_2^* + D\omega^2) - A, \qquad (10а)$$

$$\alpha_2 = 0{,}5(k_1^* + k_2^* + D\omega^2) + A, \qquad (10б)$$

где $A=[k_1^* k_2^* + 0{,}25(k_1^* - k_2^* + D\omega^2)^2]^{1/2}$ $0<\alpha<\infty$;

$0<\alpha_1<k_2^*$; $(k_1^*+k_2^*) <\alpha_2<\infty$

Займемся теперь непосредственно уравнением (6). Решение для подвижной фазы будем искать в виде:

$$C_1(x,t) = C_{1\infty}(x,t) + \tilde{C}_1(x,t) \qquad (11)$$

где $C_{1\infty}(x,t)$ - решение для стационарного состояния диффузии при переменных граничных условиях, а $\tilde{C}_1(x,t)$ - решение для нестационарного состояния при нулевых граничных условиях, но при сложных начальных: $\tilde{C}_1(x,t)=C_{10}(x)-C_{1\infty}(x,0)$. Очевидно, что

$$C_{1\infty}(x,t) = \varphi_1(t) + \frac{x}{1}\left[\varphi_2(t) - \varphi_1(t)\right]. \qquad (12)$$

Тогда

$$\widetilde{C}_1(x,0) = C_{10}(x) - \varphi_1(0) - \frac{x}{1}\left[\varphi_2(0) - \varphi_1(0)\right] \qquad (13)$$

Аналогичные выражения можно получить и для концентрации иммобилизованных молекул газа.

Таким образом, нам предстоит решить систему уравнений:

$$\frac{\partial \widetilde{C}_1}{\partial t} = D\frac{\partial^2 \widetilde{C}_1}{\partial x^2} - k_1^* \widetilde{C}_1 + k_2^* C_2 \qquad (14а)$$

$$\frac{\partial C_2}{\partial t} = k_1^* \widetilde{C}_1 - k_2^* C_2 \qquad (14б)$$

с краевыми условиями:

$$\widetilde{C}_1(x,0) = C_{10}(x) - \varphi_1(0) - \frac{x}{1}\left[\varphi_2(0) - \varphi_1(0)\right], \qquad (15а)$$

$$C_2(x,0) = C_{20}(x) - \left[\varphi_2(0) - \varphi_1(0)\frac{x}{1}\right]\frac{k_1^*}{\mathrm{k}_2^*}, \qquad (15б)$$

$$\widetilde{C}_1(0,t)=0 \qquad (16а)$$

$$\widetilde{C}_1(l,t)=0 \qquad (16б)$$

где $\widetilde{C}_1$(x,0) и C_2 отражают концентрации молекул газа в подвижном и неподвижном состояниях соответственно.

Решение системы (14) будем искать в виде:

$$\widetilde{C}_1(x,t)=A_n Sin\omega x\, e^{-\alpha_n t} + B_n Cos\omega\, e^{-\alpha_n t} \qquad (17)$$

Константы A_n, B_n и ω найдем из граничных и начальных условий. Из нулевых граничных условий сразу имеем:

$$B_n=0 \text{ и } \omega_n=n\pi/l\,, \qquad (18)$$

тогда уравнение (17) запишется в виде:

$$\widetilde{C}_1(x,t)=(A_1 e^{-\alpha_1 t} + A_2 e^{-\alpha_2 t})Sin\frac{n\pi}{l}x\,, \qquad (19)$$

при t=0

$$\widetilde{C}_1(x,0)=(A_1+A_2)Sin\frac{n\pi}{l}x\,,$$

где $\widetilde{C}_1(x,0)$ определяется начальным условием (13).

Применим теорему Фурье:

$$A_1 + A_2 = \frac{2}{1}\int_0^1 \widetilde{C}_1(x,0) Sin\frac{n\pi x}{1}dx = \psi_1, \qquad (20)$$

тогда

$$\widetilde{C}_1(x,0) = \psi_1 Sin\frac{n\pi x}{1}, \qquad (21)$$

аналогично

$$\frac{2}{1}\int_0^1 C_2(x,0) Sin\frac{n\pi x}{1}dx = \psi_2 \qquad (22)$$

и

$$C_2(x,0) = \psi_2 Sin\frac{n\pi x}{l}, \qquad (23)$$

Подставив (19) в систему (14), получим:

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} = -\left(A_1\alpha_1 e^{-\alpha_1 t} + A_2\alpha_2 e^{-\alpha_2 t}\right)\frac{e^{i\omega x} - e^{-i\omega x}}{2}.$$

При $t \to 0$ имеем:

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} = -\left(A_1\alpha_1 + A_2\alpha_2\right)\frac{e^{i\omega x} - e^{-i\omega x}}{2}, \qquad (24а)$$

$$\frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} = -\left(A_1 + A_2\right)\omega^2 \frac{e^{i\omega x} - e^{-i\omega x}}{2}. \qquad (24б)$$

Подставив эти выражения в (14) и сократив на $\mathrm{Sin}\dfrac{n\pi x}{l} = \dfrac{e^{i\omega x} - e^{-i\omega x}}{2}$, получим систему уравнений для определения A_1 и A_2:

$-(A_1\alpha_1+A_2\alpha_2)=-D(A_1+A_2)\omega^2-k_1^*\Psi_1+k_2^*\Psi_2,$

$A_1+A_2=\Psi_1,$

откуда

$$A_1 = \frac{\Psi_1\left(\alpha_2 - D\omega^2 - k_1^*\right) + k_2^*\Psi_2}{2A} = \frac{\Psi_1\left(-\alpha_1 + k_2^*\right) + k_2^*\Psi_2}{2A}, \qquad (26а)$$

$$A_2 = \frac{\Psi_1\left(2A - \alpha_2 + D\omega^2 + k_1^*\right) - k_2^*\Psi_2}{2A} = \frac{\Psi_1\left(\alpha_2 - k_2^*\right) - k_2^*\Psi_2}{2A}. \qquad (26б)$$

Таким образом, уравнения (19), (26), (15), (20), (22), (10) дают решение для $C_1(x,t)$. Подставив его в уравнение (4) найдем выражение для C_2.

Рассмотрим теперь некоторые частные случаи.

При постоянных краевых условиях:

$C_1(x,0)=C_1(0),$ (27а)

$C_2(x,0)=C_2(0,)$ (27б)

$C(0,t)=C_1^0,$ (27в)

$C(l,t)=C_1^l$ (27г)

стационарное распределение концентрации подвижной фазы

$$C_1(x,\infty) = C_1^0 + (C_1^l - C_1^0)\frac{x}{l}, \qquad (28а)$$

стационарное распределение неподвижной фазы

$$C_2(x,\infty) = \left[C_1^0 + (C_1^l - C_1^0)\frac{x}{1}\right]\frac{k_1^*}{k_2^*}. \qquad (28б)$$

Теперь начальные условия имеют вид

$$\Psi_1 = \frac{2}{l}\int_0^l \left\{C_1(0) - \left[C_1^0 + \left(C_1^l - C_1^0\right)\frac{x}{l}\right]\mathrm{Sin}\frac{n\pi}{l}x\,dx\right\} = \frac{2}{n\pi}\left(C_1(0)B_1 - B_2\right), \qquad (29а)$$

$$\psi_2 = \frac{2}{1}\int_0^1 \left\{ C_2(0) - \left[C_1^0 + \left(C_1^1 - C_1^0\right)\frac{x}{1} \right] \frac{k_1^*}{k_2^*} \right\} Sin\frac{n\pi}{1} xdx = \frac{2}{n\pi}\left(C_2(0)B_1 - K_x B_2\right), \qquad (29б)$$

где B_1=1-Cos nπ; $B_2 = C_1^0 - C_1^l$Cos nπ.

Соответствующие амплитуды имеют вид

$$A_1 = \frac{1}{n\pi A}\left[\left(C_1(0)B_1 - B_2\right)\left(-\alpha_1 + k_2^*\right) + k_2^*\left(C_2(0)B_1 - K_x B_2\right)\right], \qquad (30а)$$

$$A_2 = \frac{1}{n\pi A}\left[\left(C_1(0)B_1 - B_2\right)\left(\alpha_2 - k_2^*\right) - k_2^*\left(C_2(0)B_1 - K_x B_2\right)\right] \qquad (30б)$$

Диффузионные процессы описываются следующими выражениями:
распределение концентрации подвижного вида

$$C_1(x,t) = C_1^0 + \left(C_1^1 - C_1^0\right)\frac{x}{l} + + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n\pi A}\left\{\left[\left(C_1(0)B_1 - B_2\right)\left(-\alpha_1 + k_2^*\right) + k_2^*\left(C_2(0)B_1 - K_x B_2\right)\right]e^{-\alpha_1 t} + \right.$$

$$\left. + \left[\left(C_1(0)B_1 - B_2\right)\left(\alpha_2 - k_2^*\right) - k_2^*\left(C_2(0)B_1 - K_x B_2\right)\right]e^{-\alpha_2 t}\right\} Sin\frac{n\pi}{l}x, \qquad (31а)$$

распределение концентрации неподвижной фазы

$$C_2(x,t) = C_2(0)e^{-k_2^* t} + \left[C_1^0 + \left(C_1^l - C_1^0\right)\frac{x}{l}\right]\frac{k_1^*}{k_2^*}\left(1 - e^{-k_2^* t}\right) +$$

$$+ \sum_{n=1}^{\infty}\frac{k_1^*}{n\pi A}\left\{\left[\left(C_1(0)B_1 - B_2\right) + \frac{k_2^*}{k_2^* - \alpha_1}\left(C_2(0)B_1 - K_x B_2\right)\right]\left(e^{-\alpha_1 t} - e^{-k_2^* t}\right) - \right.$$

$$\left. - \left[\left(C_1(0)B_1 - B_2\right) + \frac{k_2^*}{k_2^* - \alpha_2}\left(C_2(0)B_1 - K_x B_2\right)\right]\left(e^{-\alpha_2 t} - e^{-k_2^* t}\right)\right] Sin\frac{n\pi}{l}x \right\}. \qquad (31б)$$

Полученные выражения могут быть использованы для вывода формул, необходимых для обработки результатов традиционных методов газовой диффузии.

В методе проницаемости изучается диффузия газа сквозь плоскую мембрану. Традиционные краевые условия имеют вид: $C_1(x,0)=C_2(x,0)=0$; $C_1(0,t)=C_{10}$; $C_1(l,t)=0$. Тогда $B_1=2$, $B_2=C_{10}$.

Диффузионные процессы описываются следующими выражениями:
распределение концентрации подвижного вида по толщине мембраны

$$C_1(x,t) = C_{10}\left\{1 - \frac{x}{l} + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n\pi A}\left[\left(\alpha_1 - k_1^* - k_2^*\right)e^{-\alpha_1 t} - \left(\alpha_2 - k_1^* - k_2^*\right)e^{-\alpha_2 t}\right] Sin\frac{n\pi}{l}x\right\}; \qquad (32)$$

распределение концентрации неподвижного вида по толщине мембраны

$$C_2(x,t) = C_{20}\left\{\left(1 - \frac{x}{l}\right)\left(1 - e^{-k_2^* t}\right)\frac{k_1^*}{k_2^*} + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{k_1^*}{n\pi A}\left[\frac{\alpha_1 - k_1^* - k_2^*}{k_2^* - \alpha_1}\left(e^{-\alpha_1 t} - e^{-k_2^* t}\right) - \frac{\alpha_2 - k_1^* - k_2^*}{k_2^* - \alpha_2}\left(e^{-\alpha_1 t} - e^{-k_2^* t}\right)\right]\right\} Sin\frac{n\pi}{l}x; \qquad (32б)$$

поток газа на выходе из мембраны (кривая "прорыва")

$$J = -SD\left.\frac{dC_1}{dx}\right|_{x=l} = \frac{C_{10}D}{l}\left\{1 - \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{A}\left[\left(\alpha_1 - k_1^* - k_2^*\right)e^{-\alpha_1 t} - \left(\alpha_2 - k_1^* - k_2^*\right)e^{-\alpha_2 t}\right]\right\}; \qquad (33)$$

количество газа, прошедшее через мембрану ко времени t:

$$q(t) = \int_0^t J(\tau)d\tau = \frac{SC_{10}D}{1}\left\{t - \sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\frac{21^2}{n^2\pi^2 D}\left[\frac{k_1^* + k_2^*}{k_2^*} - -\frac{\alpha_1 - k_1^* - k_2^*}{\alpha_1}e^{-\alpha_1 t} + \frac{\alpha_2 - k_1^* - k_2^*}{\alpha_2}e^{-\alpha_2 t}\right]\right\}, \qquad (34)$$

где S - площадь поверхности мембраны.

В <u>сорбционном методе</u> изучается диффузия газа из постоянного источника в плоскую двухстороннюю пластину. В этом случае краевые условия: $C_1(x,t)=0$; $C_2(x,0)=0$; $C_1^0=C_1^l=C_{10}$, тогда $B_1=2$; $D_2=2C_{10}$.

Диффузионные процессы описываются следующими выражениями:
распределение концентрации подвижного вида по толщине образца

$$C_1(x,t)=C_{10}\left\{1-\frac{2}{\pi}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{(2m+1)A}\left[\left(-\alpha_1+k_1^*+k_2^*\right)e^{-\alpha_1 t}+\left(\alpha_2-k_1^*-k_2^*\right)e^{-\alpha_2 t}\right]Sin\frac{(2m+1)\pi x}{1}\right\};\quad(35а)$$

концентрационный профиль неподвижного вида

$$C_2(x,t)=C_{10}\left\{\frac{k_1^*}{k_2^*}\left(1-e^{-k_2^* t}\right)+\sum_{m=0}^{\infty}\frac{2k_1^*C_{10}}{(2m+1)\pi A}\left[\frac{\alpha_1-k_1^*-k_2^*}{k_2^*-\alpha_1}\right.\right.\cdot$$

$$\left.\left.\cdot\left(e^{-\alpha_1 t}-e^{-k_2^* t}\right)-\frac{\alpha_2-k_1^*-k_2^*}{k_2^*-\alpha_2}\left(e^{-\alpha_2 t}-e^{-k_2^* t}\right)\right]Sin\frac{(2m+1)\pi x}{1}\right\},\qquad(35б)$$

поток газа в твердое тело

$$J(t)=\frac{DS}{1}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{4C_{10}}{A}\left\{\left(-\alpha_1+k_1^*+k_2^*\right)e^{-\alpha_1 t}+\left(\alpha_2-k_1^*-k_2^*\right)e^{-\alpha_2 t}\right\},\qquad(36)$$

количество газа в образце в момент времени t

$$G(t)=\int_0^1\left[C_1(x,t)+C_2(x,t)\right]dx=\frac{DS}{1^2}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{4C_{10}}{A}\cdot\left\{\left(\frac{\alpha_1-k_1^*-k_2^*}{\alpha_1}\right)\left(1-e^{-\alpha_1 t}\right)+\left(\frac{\alpha_2-k_1^*-k_2^*}{\alpha_2}\right)\left(1-e^{-\alpha_2 t}\right)\right\},\quad(37)$$

Следует заметить, что в сорбционном и десорбционном методах величины α_1, α_2 и A рассчитываются при значениях $\omega=(2m+1)\pi/l$, где $m=0,1,2,...$

В <u>десорбционном методе</u> измеряется газовыделение из пластины, предварительно насыщенной газом. В этом случае $C_1^0=C_1^l=0$, $C_1(x,0)=C_1(0)$, $C_2(x,0)=C_2(0)$. Тогда $B_1=B_2=0$.

Распределение газа по толщине образца описывается уравнениями:
а) для подвижного вида

$$C_1(x,t)=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{2}{\pi(2m+1)A}\left\{\left[\left(-\alpha_1+k_1^*\right)C_1(0)+k_2^*C_2(0)\right]e^{-\alpha_1 t}+\left[\left(\alpha_2-k_2^*\right)C_1(0)-k_2^*C_2(0)\right]e^{-\alpha_2 t}\right\}Sin\frac{(2m+1)\pi x}{1}$$

(38а)

б) для неподвижного вида:

$$C_2(x,t)=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{2k_1^*}{\pi(2m+1)A}\left\{\left(C_1(0)+\frac{k_2^*}{k_2^*-\alpha_1}C_2(0)\right)\left(e^{-\alpha_1 t}-e^{-k_2^* t}\right)-\right.$$

$$\left.-\left(C_1(0)+\frac{k_2^*C_2(0)}{k_2^*-\alpha_2}\right)\left(e^{-\alpha_2 t}-e^{-k_2^* t}\right)\right\}Sin\frac{(2m+1)\pi}{1}x+C_2(0)e^{-k_2^* t};\qquad(38б)$$

поток газа из образца

$$J(t)=\frac{DS}{l}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{4}{A}\left\{\left[\left(-\alpha_1+k_2^*\right)C_1(0)+k_2^*C_2(0)\right]e^{-\alpha_1 t}-\left[\left(-\alpha_2+k_2^*\right)C_1(0)+k_2^*C_2(0)\right]e^{-\alpha_2 t}\right\};\qquad(39)$$

количество газа, выделившееся из пластины к моменту времени t

$$M(t)=\left[C_1(0)+C_2(0)\right]S1+\frac{4S}{1}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{A\omega^2}\left\{\left[C_{10}\left(\alpha_1-k_1^*-k_2^*\right)-C_{20}\alpha_2\right]e^{-\alpha_1 t}-\right.$$

$$\left.-\left[C_1(0)\left(\alpha_2-k_1^*-k_2^*\right)-C_2(0)\alpha_1\right]e^{-\alpha_2 t}\right\};\qquad(40)$$

количество газа, оставшееся в образце к моменту времени t

$$G(t)=\frac{4S}{l}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{A\omega^{2}}\left\{\left[C_2(0)\alpha_2-C_1(0)(\alpha_1-k_1^{*}-k_2^{*})\right]e^{-\alpha_1 t}-\right.$$
$$\left.-\left[C_2(0)\alpha_1-C_1(0)(\alpha_2-k_1^{*}-k_2^{*})\right]e^{-\alpha_2 t}\right\} \qquad (41)$$

Полученные выражения положены в основу комплекса программ DIGS [2], предназначенного для обработки результатов изучения процессов диффузии газов в твердых телах. Рассмотренный здесь математический аппарат неоднократно использовался для интерпретации измерений нестационарной кинетики диффузии низкомолекулярных веществ в "активных" средах, осуществляемых с помощью таких методик, как метод концентрационных волн [3], импульсный вариант метода проницаемости [4], метод частотного зондирования [5], а также метод термодесорбционной спектроскопии [6]. Опыт применения комплекса DIGS показал, что одноканальное диффузионное приближение варианта Генри 1 - Генри 2 модели "двойной сорбции" адекватно описывает процессы миграции тяжелых инертных газов в материалах ядерного топлива [7], водорода в металлах [8], кислых газов в слое волоконных сорбентов [9] и низкомолекулярных газов в стеклообразных полимерах. При этом было обнаружено, что использование переменных граничных условий позволяет значительно повысить разрешающую способность известных диффузионных методик с точки зрения нахождения параметров захвата и увеличить точность определения как параметров взаимодействия газ - активный центр, так и коэффициента диффузии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бекман И.Н., Романовский И.П. //Усп. хим., 57, 1988. С.944.
2. Швыряев А.А., Бекман И.Н. // Диффузионные явления в полимерах. Черноголовка, 1985. С.44.
3. Shelekhin A.B., Beckman I.N.// J. Membr. Sci., 73. 1982. P.73.
4. Beckman I.N., Romanovskii I.P., Balek V.// Synthetic polymeric membranes. Berlin, N. Y., 1987. P.355.
5. Beckman I.N.,// Polymeric gas separation membranes /Ed. D.R.Paul, U.P.Yampol`skii/ Florida, 1994. 301.
6. Beckman I.N., Zheleznov A.V., Balek V.//J.Thermal. Analysis. 37. 1991. P.1479.
7. Бекман И.Н. Эманационно термический анализ. М., 1986. С.291.
8. Бекман И.Н. Взаимодействие водорода с металлами. М., 1987. С.143.
9. Зюзин А.Ю., Бельнов В.К., Бекман И.Н., Калинин Э.А., Сафонов М.С. ЖФХ. 66. 1992., С. 1281