

9. Hoyle F. In: R. Jastrow and A.J.W. Cameron (eds) Origin of the Solar System. – Academic Press, New York, 1963. – P. 63–71.
10. Стаття ТСН.ua: <http://ru.tsn.ua/ukrayina/v-kosmose-nashli-dve-planety-kotorye-vrashchayutsya-zadom-napered.html>.

Надійшла до редколегії 29.12.09

УДК 621.793.1:539.23

А.С. Долгов, Н.В. Стеценко

Национальный аэрокосмический университет  
им. Н.Е. Жуковского «Харьковский авиационный институт»

## КИНЕТИКА ПОВЕРХНОСТНОГО МОНОСЛОЯ

Выполнен анализ кинетики атомов в поверхностном моноатомном слое. Используется одномерная модель миграции атомов на поверхности с учетом межатомного взаимодействия произвольного масштаба. На основе анализа системы кинетических уравнений для вероятностей атомных конфигураций различных видов установлены точные свойства равновесных микрораспределений на поверхности в условиях обмена с внешней средой, либо в отсутствие такового. Обсуждается влияние особенностей микрораспределений на эмиссионные свойства поверхности.

*Ключевые слова:* монослой, диффузия, взаимодействие, кинетика, миграция, поверхность

Виконано аналіз кінетики атомів у поверхневому моноатомному прошарку. Використовується одновимірна модель міграції атомів на поверхні з урахуванням міжатомної взаємодії довільного масштабу. На основі аналізу системи кінетичних рівнянь для ймовірностей атомних конфігурацій різних видів установлені точні властивості рівноважних мікророзподілень на поверхні в умовах обміну із зовнішнім середовищем, або у відсутності такого. Обмірковується вплив особливостей мікророзподілень на емісійні властивості поверхні.

*Ключові слова:* монопрошарок, дифузія, взаємодія, кінетика, міграція, поверхня.

The analysis of atom kinetics in the surface monoatomic layer has been developed. One-dimensional model of surface atom migration has been used subject to the atom interaction within the arbitrary scale. Making use the analysis of kinetic equation systems for the atom configuration possibilities of different types the exact equilibrium distribution features on the surface have been established within environmental conditions or without them. Microdistribution features' influence to the emission surface features have been discussed.

*Keywords:* monolayer, diffusion, interaction, kinetics, migration, surface

**Введение.** Наличие покрытия на поверхности твердого образца (подложки) – весьма распространенное, почти всеобщее свойство реальных систем. Названные поверхностные слои (пленки) либо формируются в тех или иных неконтролируемых процессах, либо являются результатом целенаправленного воздействия на поверхность ради придания ей требуемых свойств.

Технологии нанесения покрытий к настоящему времени преимущественно ориентированы на создание достаточно толстых по атомным масштабам пленок, однако общая тенденция миниатюризации конструктивных элементов различных устройств определяет необходимость изучения свойств весьма тонких пленок, характеристики которых заведомо отличны от соответствующих параметров макроскопических образцов. Отдельного внимания требуют пленки минимальной толщины (моноатомные), где количество слоев покрытия не превышает единицу. Моно-

слои возникают вследствие преобладания связи атомов пленки и подложки по сравнению с масштабом сцепления атомов пленки между собой (в частности, хемадсорбция), а также как результат установившегося равновесия между осаждением и реиспарением атомов при наличии потока частиц на поверхность [1; 2]. Дополнительная мотивация к изучению монослоев возникает в связи с все возрастающим интересом к наноструктурам и нанотехнологиям (например, [3; 4]).

В тех разработках применительно к указанному объекту, которые ориентированы на отыскание значимых в прикладном отношении результатов, как правило, присутствуют априорные аппроксимации макроскопического характера (диффузия атомов и др.).

Однако, чем меньше похож интересующий объект на сплошную безграничную среду, тем меньше оснований для использования макроскопических категорий в качестве инструментария теоретического анализа. Последовательный анализ предполагает микроскопический подход, что и является принципиальной особенностью излагаемых ниже построений. Разумеется, реализация поставленной задачи сопряжена с серьезными трудностями, что предопределяет некоторую дополнительную схематизацию анализа и отдельное рассмотрение специальных вариантов.

**Исходная модель.** Мы ограничиваемся обсуждением одномерных структур. Разумеется, это связано со стремлением к относительной простоте анализа и обеспечением возможности отыскания достаточно прозрачных законченных результатов. Однако, дело не только в этом. Последние годы или даже уже десятилетия – время активизации интереса к низкоразмерным структурам, какие встречаются в ряде случаев и обнаруживают самостоятельный, часто неожиданный комплекс свойств. В частности, имеются публикации ([5; 6] и др.), где экспериментально показывается и теоретически обосновывается сильная анизотропия (фактическая одномерность) процессов миграции атомов. Кроме того, известны ситуации, когда поверхностная миграция реализуется по коридорам, создаваемых примесями или особенностями матрицы. Еще один вариант одномерности: «всасывание» примесей в тонкие нанотрубки [7].

Особенности заполнения монослоя могут быть представлены в терминах вероятностей заполнения тех или иных узлов.

Для одномерной цепи возможных позиций поверхностных атомов уравнения кинетики могут записываться так

$$\frac{d\phi}{d\tau}(n) = \phi_{010}(n-1) + \nu\phi_{110}(n-1) + \phi_{010}(n+1) + \nu\phi_{011}(n+1) - \phi_{110}(n) - \phi_{011}(n) - 2\phi_{010}(n), \quad (1)$$

где  $\tau$  – безразмерное время;  $n$  – номер узла;  $\phi$  – символ вероятности той или иной конфигурации, центрированной на последовательности позиций, обозначенной соответствующим номером;  $\nu$  – фактор взаимодействия.

Каждое из слагаемых (1) представляет вариант механизма изменения числа частиц в позиции  $n$ . Параметр  $\nu$ , в силу стохастического характера перескоков атомов из одной позиции в соседнюю, имеет вид фактора Гиббса

$$\nu = \exp\left(-\frac{U}{KT}\right), \quad (2)$$

где  $U$  – энергия взаимодействия между атомами, находящимися в соседних позициях. Заметим, что  $\nu > 1$ , если атомы отталкиваются и  $\nu < 1$  для случая притяжения.

Дополнительно стоит обратить внимание на то, что в области высоких температур значение  $\nu$  приближается к единице, а в случае  $T \rightarrow 0$  становится несопоставимым с единицей.

Система уравнений (1) незамкнута, так как вероятности заполнения узлов  $\phi$  зависят от вероятностей тройных конфигураций. Если же ввести в рассмотрение уравнения для величин  $\phi_{010}$ ,  $\phi_{110}$  и т. д., то это повлечет за собой появление пяти-узельных вероятностей и т. д. Возникающая дважды бесконечная система уравнений не может быть замкнута, что, однако, не исключает возможностей результативного анализа и обращения к более сложным объектам, содержащим усовершенствования исходной схемы.

**Континуальное приближение.** В предположении о достаточной гладкости зависимостей  $\phi = \phi(n)$  совокупность уравнений (1) с учетом слагаемых вплоть до второго порядка малости и с использованием аппроксимаций вида

$$\phi_{110}(n) \approx \phi_1(n-1)\phi_1(n)\phi_1(n+1), \phi_0 \equiv 1 - \phi_1 \quad (3)$$

сводится к уравнению диффузионного типа (индекс опущен)

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial n} \left\{ D \frac{\partial \phi}{\partial n} \right\}, \quad (4)$$

где роль коэффициента диффузии играет величина

$$D = 1 + (\nu - 1)(4\phi - 3\phi^2). \quad (5)$$

Легко видеть, что функция  $D = D(\phi)$  немонотонна, приобретая значения – единица при  $\phi \rightarrow 0$  (отсутствие взаимовлияния мигрирующих атомов вследствие низкой плотности пленки) и  $\nu$ , если  $\phi \rightarrow 1$ . В последнем случае – каждый атом почти гарантированно имеет близких соседей, в силу чего перемещения в структуре имеют вакансионный характер (аналог дырочной проводимости).

Самым примечательным свойством выражения (5) является то, что для достаточно малых значений  $\nu$  величина  $D$  в области значений  $\phi$ , удаленных от краев диапазона – 0 и 1 – переходит в область отрицательных чисел. Это значит, что преобладающее движение адсорбированных атомов в этих условиях соответствует не выравниванию плотности, а, напротив, уплотнению ограниченных сгустков за счет обеднения примыкающих участков. Это вариант восходящей диффузии.

Отрицательные значения  $D$  реализуются только при немалом уровне притяжения между соседствующими атомами (в рамках модели, когда  $\nu < \frac{1}{4}$ ). Однако,

смысл параметра  $\nu$  таков (2), что при достаточно низких температурах значение  $\nu$  понижается вплоть до сколь угодно низких значений при произвольно малом уровне притягивательного взаимодействия. Тем самым выявляется, что достаточно сильное охлаждение ведет к распаду исходного распределения на плотные изолированные сгустки при любых, пусть и весьма слабых уровнях притяжения атомов в соседних позициях.

Провисание  $D(\phi)$  в область отрицательных значений определяет наличие двух значений  $\phi_+, \phi_-$ , когда  $D = 0$ . Нижнее равновесное значение  $\phi_-$  – это точка бифуркации, так как на участках, где  $\phi < \phi_-$ , уравнение (4) определяет обычное

диффузионное выравнивание, а превышение  $\phi$  над уровнем  $\phi_-$  задает режим коллапсирования имеющегося распределения, отвечающее сжатию вплоть до уровня  $\phi_+$ .

Конечно, количественные характеристики зависимости (5) не следует воспринимать буквально. В силу приближенности аппроксимации (3) и ограничений континуального приближения уравнение (4) вместе с (5) гарантирует только качественные тенденции процессов формирования равновесных распределений на поверхности.

**Равновесное состояние в отсутствие испарения.** Характерной особенностью равновесных состояний, где нет обмена с окружающей средой, является неизменность среднего уровня заполнения  $\phi_1$ , какой играет роль параметра, численное значение которого ( $0 < \phi < 1$ ) задано предысторией и свойствами матрицы. Строгий подход требует использования уравнений для  $\phi_1$ ,  $\phi_{11}$ ,  $\phi_{10}$ ,  $\phi_{111}$  и т. д. Ранее было показано ([8] и др.), что формируемая таким образом бесконечная система уравнений определяет точное соответствие между вероятностью заполнения позиции  $\phi_1$  и вероятностью наличия ближайшего соседства  $\phi_{11}$ . Установлено, что

$$\phi_{11} = \frac{\nu + 2(1-\nu)\phi_1 - \left\{ \nu \left[ \nu + 4(1-\nu)\phi_1(1-\phi_1) \right] \right\}^{\frac{1}{2}}}{2(1-\nu)} \quad (6)$$

Соотношение (6) позволяет найти и вероятности возникновения последовательностей произвольной длины по рекуррентному правилу

$$\phi_{\underbrace{1 \dots 1}_p} = \frac{\phi_{11}}{\phi_1} \phi_{\underbrace{1 \dots 1}_{(p-1)}} \quad (7)$$

Точные соотношения (6; 7) дополняют приближенные построения предыдущего пункта, определяя более детальную информацию об особенностях возникающих сгустков и их распределении.

**Макроскопически однородные распределения в условиях обмена с примыкающей средой.** Более общая, нежели в предыдущих пунктах, ситуация соответствует наличию обмена атомами с окружающей средой: частицы интересующего вида могут поступать из примыкающего к поверхности объема и, соответственно, уходить с поверхности (испаряться) в окружающее пространство. Баланс названных альтернативных процессов задает уровень заполнения поверхностного монослоя. Таким образом, в этих условиях величина  $\phi_1$  не принадлежит к числу параметров ситуации, а является функцией интенсивности воздействия и в теоретическом анализе подлежит определению.

Уравнения вида (1) и соответствующие уравнения для многоузельных вероятностей должны быть дополнены слагаемыми, представляющими названные дополнительные обстоятельства.

Для реализации макроскопического равновесия в слое должно быть обеспечено детальное равновесие между конфигурациями на поверхности, что представляет соотношение (6), и обращение в ноль упомянутых дополнительных слагаемых с учетом соответствий вида (7). Последнее требование определяет равенство

$$g\phi_1(1-\phi_1) = \alpha \left[ \nu^2 \phi_{11}^2 + 2\nu\phi_{11}(\phi_1 - \phi_{11}) + (\phi_1 - \phi_{11})^2 \right], \quad (8)$$

где  $g$  – поток осаждающихся частиц на поверхность в соответствующем масштабе;  $\alpha$  – зависящий от температуры параметр интенсивности реиспарения, слагаемые в квадратных скобках соответствуют набору вариантов ухода с поверхности с учетом их статистического веса.

Требование совместности соотношений (6) и (8) определяет равновесные значения  $\phi_1$ ,  $\phi_{11}$ , и согласно (7) все особенности размещений атомов на поверхности. Получается

$$\phi_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{\frac{g}{\alpha} - \nu}{\left( \left( \frac{g}{\alpha} - \nu \right)^2 + 4 \frac{g}{\alpha} \nu^2 \right)^{\frac{1}{2}}} . \quad (9)$$

Формула (9) задает некоторый набор качественно различающихся вариантов распределения атомов в слое.

Выражение (9) обращается в нуль, когда  $\frac{g}{\alpha} \rightarrow 0$  и в единицу в условиях  $\frac{g}{\alpha} \rightarrow \infty$  и (или)  $\nu \rightarrow 0$ .

Общая тенденция уплотнения поверхностного слоя с увеличением интенсивности потока извне  $g$  в некоторых случаях нарушается. Так в области параметров  $\nu \gg \frac{g}{\alpha} \gg 1$  рост потока на поверхность приводит к обеднению поверхностного слоя.

Специальный случай  $\frac{g}{\alpha} = \nu$  определяет возникновение регулярной структуры с правильным чередованием заполненных и пустых позиций.

В общем случае изменение температуры обуславливает соответствующее изменение параметров  $g, \alpha, \nu$ , что отвечает радикальным перестройкам поверхностного монослоя, связанным с изменением средней степени заполнения возможных позиций и перераспределением размеров сгустков.

**Макроскопически неоднородные распределения в условиях осаждения извне.** Здесь продолжается обсуждение физической ситуации, заявленной в предыдущем пункте. Однако, предположение о возможности макроскопической неоднородности пространственного распределения при однородном внешнем воздействии серьезно усложняет анализ. Определенные сведения качественного характера можно получить при использовании континуальной аппроксимации исходных уравнений и операции расщепления вида (3). Стационарному режиму соответствует уравнение

$$\frac{d^2 \phi}{dn^2} = \alpha [1 - (1 - \nu) \phi]^2 \phi - g(1 - \phi) . \quad (10)$$

Уравнение (10) – нелинейное дифференциальное уравнение того вида, решение которого находится двумя последовательными квадратурными операциями.

Тривиальный случай  $\phi = const$  также адекватен уравнению (10). При этом получается выражение, какое фактически является огрубленным представлением формулы (9). (При  $\nu = 1$  результаты совпадают).

Нетривиальные решения (10) определяют пространственно неоднородные распределения плотности сгустков двух типов: локализованные и периодические. Первый вариант отвечает локальному опусканию концентрации относительно уровня, отвечающего однородному распределению. Второй допускает значительный диапазон варьирования количественных параметров возникающей «гребенки» - шага и амплитуды. Во всех случаях предсказываемые значения плотности пленки не превышает уровня однородности.

Использование макроскопических категорий приводит к утрате ряда деталей распределений, какие выявляет последовательно микроскопический анализ, но не входит в противоречие с основными предсказаниями качественного характера. Не претендуя на детальность, континуальный подход дополняет информацию об особенностях монокристаллических покрытий и расширяет круг изучаемых состояний.

**Ресурсы управления свойствами монослоя.** Варьирование средней плотности поверхностной монокристаллической пленки и ее микроскопической структуры обеспечивается воздействием на основные факторы, задающие названные характеристики. Формула (9) указывает два основных фактора воздействия: поток осаждаемых частиц, представленный значением  $g$ , и температура, неявно присутствующая во всех параметрах ситуации. Ясно, что увеличением потока (давления паров у поверхности) можно, как правило (выше упомянуты исключения), добиться существования практически плотной поверхностной пленки, которая приобретает при этом трансляционные характеристики твердого тела пониженной размерности. Уменьшение  $g$  ведет к снижению средней плотности вплоть до полного опустошения поверхности при  $g = 0$  (устранение воздействия). Структура неполного покрытия определяется подстановкой значения  $\phi$  в выражение (6) и использованием соответствий (7), и варьируется от набора изолированных крупных кластеров до совокупности одиночных адатомов.

Другой упомянутый выше фактор – температура – влияет на свойства равновесного монослоя не менее значительно. Для достаточно высоких температур (также при слабом взаимодействии адатомов)  $\nu \approx 1$ . При этом

$$\phi \approx \frac{g}{g + \alpha}, \phi_1 \approx \frac{g^2}{(g + \alpha)^2}, \dots$$

Так как при умеренных, обычных для практики уровнях воздействия величина  $g$  наверняка сильно уступает  $\alpha$ , то видим, что формулы (11) соответствуют реализации разреженного решеточного газа адатомов.

В общем случае варьирование температуры изменяет соотношение между  $\frac{g}{\alpha}$  и  $\nu$  неограниченно, причем как изменение средней плотности  $\phi$ , так и структуры распределения  $\phi$ ,  $\phi_{11}$ , ... весьма остро откликаются на умеренное изменение температуры, что приобретает характер скачка, резкого перехода между состояниями газа изолированных атомов и кластеризацией.

Еще одна возможность воздействия на монослой связана с динамическими свойствами структурных составляющих пленки. В общем случае поверхностное

образование представлено фракцией изолированных атомов, мелкими – двухузельными, трехузельными кластерами и более длинными изолированными цепочками. Каждый из этих вариантов обладает некоторым набором собственных частот. Общая форма плотности частот для подобной структуры – это предмет отдельного обсуждения; здесь же достаточно отметить, что наборы частот для кластеров разных размеров различны, причем частичное наложение частотных мод для различающихся цепочек подчиняется некоторым правилам. Например, цепочки, скажем из 8-и и 9-ти атомов, имеют только одну общую частоту, отвечающую колебаниям этих элементов как целого. Таким образом, инфракрасное воздействие на поверхность определенной длины волны возбуждает колебания в некоторых кластерах и не воспринимается иными, внешне весьма сходными. Достаточно интенсивное воздействие приводит к разрушению отдельных, т. е. резонирующих на данной частоте кластеров. Тем самым открываются возможности селективного воздействия только на кластеры определенного вида, что создает предпосылки целенаправленного изменения распределения сгустков по размерам и внутренней структуре.

Можно также указать, что экспериментальное определение интенсивности разных частотных мод (возможно, по эффективности поглощения внешнего вынуждающего воздействия) создает возможности анализа распределения на поверхности и также, в определенной мере, поверхностных характеристик подложки.

**Эмиссионные свойства поверхности с монослоем.** Так как в общем случае монослой представлен набором кластеров разных размеров, начиная с одиночного, то оказывается, что поверхность представлена мозаикой участков двух видов: пятна покрытия и зоны обнажения матрицы. Соответствующим образом на поверхности представлены, по крайней мере, два набора характеристик поверхности – геометрических, динамических, оптических и др. Значительный, возможно преобладающий, прикладной интерес к обсуждаемому объекту связан с эмиссионными свойствами поверхности. В таком направлении были ориентированы и пионерские разработки [9]. В этой связи следует отметить, что представленный выше анализ равновесных состояний в условиях обмена с окружающей средой при определенном переосмыслении используемых параметров может быть распространен и на объекты, где поступление материала (активатора) на поверхность происходит за счет капиллярных сил. При этом роль «внешней среды» играет объем пористой подложки («губки»), пропитанной активирующим эмиссию веществом.

Количественные параметры механизма термоэлектронной эмиссии задаются эффективными геометрическими и материальными характеристиками участков поверхности, размер которых не ниже шага решетки. Таким образом, следует обозначить три различающихся варианта условий эмиттирования: участки, свободные от покрытия, участки плотного покрытия и пограничные, т. е. те, где занятый узел соседствует с незаполненной позицией. Вклады названных составляющих в эмиссионный ток могут быть выяснены только на базе микроскопического анализа, определяющего все особенности относительного размещения атомов на поверхности.

В терминах использованной выше модели плотность тока эмиссии (макроскопическая однородность) в соответствии с формулой Ричардсона-Дэшмана [10] представляется выражением

$$j = AT^2 \left\{ \phi_{11} e^{-\frac{V_{11}}{KT}} + \phi_{00} e^{-\frac{V_{00}}{KT}} + 2\phi_{10} e^{-\frac{V_{10}}{KT}} \right\}, \quad (12)$$

где символом  $V$  обозначена работа выхода на участке, вид которого обозначен тем же индексом, что и вероятности соответствующих конфигураций. Удвоение последнего слагаемого определяется наличием двух физически идентичных в условиях однородности подвариантов условий эмиттирования, отвечающих размещениям 10 и 01.

В общем случае разброс значений  $V$  может быть значительным, что определяет сколь угодно большое различие соответствующих экспоненциальных множителей. Поэтому каждое из слагаемых (12) может в тех или иных режимах оказаться и преобладающим, и пренебрежимым. Выражение (12) сводится к обычному виду формулы Ричардсона, когда  $\phi_{11} \rightarrow 1, \phi_{00} \rightarrow 1, \phi_{10} \rightarrow \frac{1}{2}$  (предельное значение для этой величины) и когда все значения  $V_{ik}$  одинаковы. (Заметим, что  $\phi_{11} + 2\phi_{10} + \phi_{00} \equiv 1$ ).

Формула (12) указывает на отклонение температурной зависимости эмиттирования с активированной поверхности от предсказаний базисного соотношения вследствие уменьшения  $\phi_{11}$  при повышении температуры, т. е. вследствие расширения области, свободной от активатора.

Результатирующее выражение (12) позволяет также истолковать немонотонность зависимости эффективной работы выхода от степени заполнения поверхности активатором. Это может иметь место, когда особо благоприятен выход электронов в области границ кластеров ( $V_{01} < V_{11} < V_{00}$ ). Заполнение поверхности активатором сопряжено вначале с увеличением как  $\phi_{11}$ , так и  $\phi_{10}$ , что ведет к снижению работы выхода. Однако по достижению уровня заполнения  $\phi_1 > \frac{1}{2}$  дальнейшее увеличение степени покрытия соответствует приближению  $\phi_{11}$  к  $\phi_1$  с соответствующим убыванием  $\phi_{01}$ . Тем самым наиболее благоприятные для эмиссии условия соответствуют неполному покрытию поверхности (ориентировано в диапазоне 0,5...1). При этом в наилучшем режиме эффективная работа выхода может быть ниже этой величины для чистого активатора, что также наблюдается для реальных эмиттеров.

**Заключение.** Выполненные построения дают развернутую информацию о свойствах поверхностного примесного монослоя и его эволюциях. Предсказания количественного характера имеют определенные ограничения, связанные с одномерностью анализа. Однако, некоторые дополнительные проработки, не представленные в данной публикации, показывают, что более сложная двумерная поверхностная структура имеет ряд элементов сходства с одномерным объектом (например, формула (6), имеющая ключевое значение в рамках данной работы, сохраняет свое значение и в двумерном анализе). В работе использованы и операции, вводящие в рассмотрение макроскопические по сути категории (континуальное приближение) и последовательно микроскопический подход. Эта двойственность, возможно, создает впечатление некоторой эклектичности. Но, по нашему мнению, различие методов анализа – это отражение сложности, многоуровневости изучаемых объектов, что и предполагает целесообразность использования различных приемов анализа.

Изложенные разработки не завершают анализ кинетики монослоев, а, напротив, допускают или даже предполагают значительное развитие в направлении совершенствования модельных представлений, выяснения критериев адекватности формального анализа тем или иным реальным объектам, применения результатов к потребностям прикладного характера.



Выражаем благодарность за проявленный интерес к статье и помощь при подготовке данной статьи к публикации д.т.н., профессора Калинину Наталью Евграфовну.

### Библіографічні посилання

1. **Алферов Ж.И.** Напряженные субмонослойные гетероструктуры и гетероструктуры с квантовыми точками / Ж.И. Алферов, Д. Бимберг и др. // УФН. – 1995. – № 165.
2. **Наумов А.Г.** Субмонослойные пленки на поверхности металлов / А.Г. Наумов, А.Г. Федорус, А.П. Напартовия, Л.А. Вольтов // УФН. – 1977. – № 1. – Т. 122.
3. **Оуэнс Ф.** Нанотехнологии / Ф. Оуэнс, Ч. Пул-мл. – М.; 2009. – 336 с.
4. **Погребняк А.Д.** Структура и свойства твердых и сверхтвердых нанокompозитных покрытий / А.Д. Погребняк, А.П. Шпак и др. // УФН. – 2009. – № 35. – Т. 179.
5. **Koh S.J.** Self-Assembly of One-Dimensional Surface: Long-Range Interactions in the Growth of Ir and Pd on W(110) / S.J. Koh, G. Ehrlich // Phys.Rev.Lett. – 2001. – № 87.
6. **Tsivlin D.V.** Effect of mesoscopic relaxations on diffusion of Co adatoms on Cu(111) / D.V. Tsivlin, V.S. Stepanyuk, W. Hergert, J. Kirschner // Phys.Rev.B. – 2003. – № 68.
7. **Елецкий А.В.** Транспортные свойства углеродных нанотрубок / А.В. Елецкий // УФН. – 2009. – № 225. – Т.179.
8. **Долгов А.С.** Кинетика распределения атомов поверхностного моноатомного слоя / А.С. Долгов // Поверхность. – 1991. – № 2. – С. 20-24.
9. **Лэнгмюр И.** Силы вблизи поверхности молекул / И. Лэнгмюр // УФН. – 1930. – № 4. – Т.10.
10. **Модинос А.** Термо-, авто- и вторичная электронная спектроскопия твердых тел / А. Модинос – М., 1993.

Надійшла до редколегії 18.06.09

УДК 532.516

В.И. Елисеев\*, И.Р. Томасон\*\*

*\*Днепропетровский национальный университет имени Олеся Гончара*

*\*\*Институт транспортных систем и технологий НАН Украины*

### МАССООБМЕН В ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ ЯЧЕЙКЕ СВИНЦОВОГО АККУМУЛЯТОРА

На основе теории ионообмена рассмотрена задача о массообмене в электрохимической ячейке свинцово-кислотного аккумулятора. Предложен асимптотический метод решения, который позволяет получить численное значение компонентов и потенциалов в ячейке в пределах реального времени. Получены кривые распределения концентраций раствора.

*Ключевые слова:* свинцово-кислотный аккумулятор, массо- и ионообмен, методы решения уравнений ионообмена.

На основі теорії іонообміну розглянуто задачу про масообмін в електрохімічному осередку свинцево-кислотного акумулятора. Запропоновано асимптотичний метод рішення, що дає можливість набуття чисельних значень компонентів і потенціалів в осередку в межах реального часу. Отримано криві розподілу концентрацій розчину.

*Ключові слова:* кислотно-свинцевий акумулятор, масо- та іонообмін, методи розв'язання рівнянь іонообміну.

Based on the theory of the ion exchange, the problem of the mass transfer in the electrochemical cell of the lead-acid accumulator was considered. The asymptotic solution method, which allows to