

D-384

UNIVERZITET U NOVOM SADU

PRIRODNO MATEMATIČKI FAKULTET

INSTITUT ZA FIZIKU

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ПРИМЉЕНО:	25 VI 1990
ОРГАНИЗ.ЈЕД.	БРОЈ
0603	9/23

KOEFICIJENT DIFUZIJE U MASENO HETEROGENIM STRUKTURAMA

Mentor:
Dr. Ljiljana Mašković

Kandidat:
Slobodan Spremo

Sadržaj

1. UVOD	1
2. MIKROTEORIJSKE VREDNOSTI KOEFICIJENTA DIFUZIJE	3
3. MAKROSKOPSKE VREDNOSTI KOEFICIJENTA DIFUZIJE	6
3.1. Metodi teorijske analize	7
3.2. Vrednosti koeficijenta difuzije na visokim temperaturama	13
3.3. Vrednosti koeficijenta difuzije na niskim temperaturama	14
4. EKSPERIMENTALNE POTVRDE DOBIJENIH TEORIJSKIH REZULTATA ZA KOEFICIJENT DIFUZIJE	22
5. ZAKLJUČAK	25
LITERATURA	26

1. UVOD

Pojave vezane za kretanje molekula u nekom molekulskom sistemu opisuju se transportnim karakteristikama. Jedna od najvažnijih transportnih karakteristika sistema je koeficijent difuzije.

Difuzija je pojava koja se najlakše uočava kod gasova /1/, i koja ima za rezultat prodiranje (difundovanje) jednog u drugi dva različita gasa koji su u dodiru. Difuzija se ne ograničava samo na gasove, nego se dešava i u tečnostima i čvrstim telima. Difuzija je posledica haotičnog molekularnog kretanja, i do nje dolazi uvek kada postoji gradijent koncentracije određene molekularne vrste, tj., kada se broj određenih čestica po jedinici zapremine na jednoj strani neke površine razlikuje od njihovog broja na drugoj strani. Pojava se može opisati kao transport čestica materije (molekula) kroz datu površinu. Do difuzije će doći i kada u nekom gasu postoji gradijent temperature, a prema tome i gradijent u termalnoj brzini. Treba naglasiti da masena i toplotna difuzija ne dovode do prenosa mase i toplote, odvojeno, već istovremeno, mada su pojedini od ovih efekata dominantni, usled čega se oni drugi u razmatranjima obično zanemaruju.

Predmet ovog rada je analiza koeficijenta difuzije u maseno heterogenim strukturama. Pod maseno heterogenim strukturama podrazumevamo strukture sastavljene od molekula nejednakih masa. Takve supstance su različite smeše, a i čitav niz polimernih materijala. Kao što je poznato neravnomerna raspodela masa u strukturi dovodi do narušavanja translatorne invarijantnosti. Na osnovu ovoga, jasno je da heterogene strukture ne održavaju moment impulsa, pa se ne mogu analizirati poznatim metodama koji se primenjuju kod translatorno invarijantnih struktura. Teorijska analiza fizičkih karakteristika ovakvih struktura je iz tih razloga znatno otežana. U tu svrhu činjen je niz pokušaja /2,3,4,5/. Primena statističkih metoda analize omogućila je pronalaženje relativno jednostavnih kriterijuma za procenu fizičkih karakteristika materijala sastavljenih od različitih masa.

Zbog široke lepeze mogućih struktura, pa samim tim i primene, polimerni materijali (sintetičke plastične mase i izolacioni materijali, vlakna i prediva, veštačke gume, smola i adhezivi) predstavljaju za primenu najzanimljivije maseno heterogene strukture.

Tehnika sinteze novih materijala je izuzetno napredovala poslednjih godina. Kompozitni i polimerni materijali sve češće bivaju sintetizovani od molekula različitih masa.

Po obimu proizvodnje polimernih materijala u USA su dostigli nivo industrije svih metala zajedno sa tri puta većom stopom rasta u poslednjih trideset godina /6/. Njihova velika prednost je mala specifična težina i relativno niska cena. U poslednjoj deceniji ostvaren je spektakularni prodor u industriji polimera pronalascima, razvojem i masovnom proizvodnjom veoma jakih, stabilnih i trajnih kompozitnih plastičnih masa, visoko elastičnih



elastomera i biokompatibilnih materijala, a već je na pomolu nova tehnološka revolucija u elektrotehnici.

U prvom delu ovog rada biće izračunate mikroteorijske vrednosti koeficijenta difuzije u strukturama sa neravnomernom raspodelom masa. Korišćenjem metoda Grinovih funkcija i metoda translatornih operatora, biće ispitani zakoni disperzije fononskih pobuđenja u jednodimenzionalnim maseno heterogenim strukturama.

Drugi deo rada biće posvećen nalaženju makroskopskih vrednosti koeficijenta difuzije u visokotemperaturskoj aproksimaciji, primenom statističkog metoda dinamičke raspodele masa. U ovom delu rada biće tražene i vrednosti koeficijenta difuzije na niskim temperaturama pri kontinualnoj i diskretnoj raspodeli masa.

U trećem delu navešćemo eksperimentalne potvrde za koeficijent difuzije dobijen u okviru navedene teorije. Biće pokazano da se i eksperimentalno dobijene vrednosti za koeficijent difuzije ponašaju na isti način u zavisnosti od temperature kao i u teoriji.

2. MIKROTEORIJSKE VREDNOSTI KOEFICIJENTA DIFUZIJE

Teorijski metodi analize koji će ovde biti primenjeni za ispitivanje koeficijenta difuzije maseno heterogenih struktura, kao osnovne transportne karakteristike, sastoje se od metoda Grinovih funkcija /7/, i metoda translatornih operatora. Biće razmatrana mikroteorija koeficijenta difuzije fononskog gasa u posmatranoj strukturi.

Ako mase molekula zavise od njihovog položaja n , onda se Hamiltonijan mehaničkih oscilacija ovakve strukture zapisuje u obliku:

$$H = \sum_n \frac{p_n^2}{2M_n} + \sum_n \frac{c}{2} (u_n - u_{n-1})^2 \quad (2.1.)$$

U ovom izrazu M_n su molekulske mase, u_n su molekulske pomeraji, c -Hukova konstanta elastičnosti i $p_n = M_n \dot{u}_n$ su molekulske impulsi.

Koeficijent difuzije posmatranog sistema biće određen kao apsolutna vrednost statističke srednje vrednosti:

$$D_n = \left\langle \left\langle u_n(0) \frac{p_n(0)}{M_n} \right\rangle \right\rangle \quad (2.2.)$$

Da bi se odredila srednja vrednost koja figuriše u (2.2.) biće analizirana dvovremenska Grinova funkcija:

$$\Gamma_{nm}(t) = \theta(t) \left\langle \left[\frac{p_n(t)}{M_n}, u_n(0) \right] \right\rangle \equiv \left\langle \left\langle \frac{p_n}{M_n} | u_m \right\rangle \right\rangle \quad (2.3.)$$

gde je $\theta(t)$ - Hevisajdova step funkcija.

Jednačine kretanja za operatore p i u su:

$$\dot{p}_n = \frac{1}{i\hbar} [p_n, H] = c(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) \quad (2.4.)$$

$$\dot{u}_n = \frac{1}{i\hbar} [u_n, H] = \frac{p_n}{M} \quad (2.5.)$$

Ako se (2.3.) diferencira po vremenu i iskoriste jednačine kretanja (2.4.) i (2.5.) posle Furije transformacije vreme - frekvencija, dobija se sledeća jednačina:

$$-i\omega\Gamma_{nm}(\omega) = -\frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\delta_{nm}}{M_n} + \frac{c}{M_n} \left[\langle\langle u_{n+1}|u_m \rangle\rangle_\omega + \langle\langle u_{n-1}|u_m \rangle\rangle_\omega - 2\langle\langle u_n|u_m \rangle\rangle_\omega \right] \quad (2.6.)$$

gde je δ_{nm} - Kronekerov simbol.

Sada se mora ispitati Grinova funkcija:

$$G_{nm}(t) = \theta(t) \langle [u_n(t), u_m(0)] \rangle \equiv \langle\langle u_n|u_m \rangle\rangle \quad (2.7.)$$

Analognim postupkom kao i kod funkcije Γ dobijamo:

$$-i\omega G_{nm}(\omega) \equiv -i\omega \langle\langle u_n|u_m \rangle\rangle_\omega = \Gamma_{nm}(\omega) \quad (2.8.)$$

Kombinovanjem (2.8.) i (2.6.) dobija se jednačina za određivanje funkcije Γ :

$$\Gamma_{n+1,m}(\omega) + \Gamma_{n-1,m}(\omega) - 2\Gamma_{nm}(\omega) + \frac{\omega^2}{c} M_n \Gamma_{nm}(\omega) = \frac{\hbar}{2\pi} \frac{\omega}{c} \delta_{nm} \quad (2.9.)$$

Ovu diferencijalnu jednačinu rešavamo primenom translatorskih operatora sa osobinom:

$${}_n\hat{\tau}_1 f(n) = f(n+1); \quad ({}_n\hat{\tau}_1)^s = {}_n\hat{\tau}_{s1}; \quad {}_n\hat{\tau}_1^{-1} = {}_n\hat{\tau}_{-1} \quad (2.10.)$$

Na osnovu ovoga diferencijalnu jednačinu (2.9.) pišemo kao:

$$\left({}_n\hat{T} + \frac{\omega^2}{c} \hat{M}_n \right) \Gamma_{nm}(\omega) = \frac{\hbar}{2\pi} \frac{\omega}{c} \delta_{nm} \quad (2.11.)$$

gde je:

$${}_n\hat{T} = {}_n\hat{\tau}_1 + {}_n\hat{\tau}_{-1} - 2 \quad (2.12.)$$

a promenljiva masa M_n se tretira kao multiplikativni operator. Ako iskoristimo identitet:

$${}_n\hat{T} + \frac{\omega^2}{c} \hat{M}_n = \frac{\omega^2}{c} M_n \left(1 + \frac{c}{\omega^2} \hat{M}_n^{-1} {}_n\hat{T} \right)$$

onda je inverzni operator operatoru sa leve strane jednakosti dat sledećim izrazom:

$$\left(\hat{T} + \frac{\omega^2}{c} \hat{M}_n \right)^{-1} = \left(1 + \frac{c}{\omega^2} \hat{M}_n^{-1} \hat{T} \right)^{-1} \hat{M}_n^{-1} \frac{c}{\omega^2} = \frac{c}{\omega^2} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \left(\frac{c}{\omega^2} \right)^n (\hat{M}_n^{-1} \hat{T}) \hat{M}_n^{-1} \quad (2.13)$$

Na osnovu ovoga rešenje jednačine (2.11.) je:

$$\Gamma_{nm}(\omega) = \frac{\hbar}{2\pi} \frac{1}{\omega} \left(\hat{M}_n^{-1} - \frac{c}{\omega^2} \hat{M}_n^{-1} \hat{T} \hat{M}_n^{-1} + \frac{c^2}{\omega^4} \hat{M}_n^{-1} \hat{T} \hat{M}_n^{-1} \hat{T} \hat{M}_n^{-1} - \dots \right) \delta_{nm} \quad (2.14)$$

Prilikom izračunavanja funkcije Γ biće uzeta samo prva tri člana reda (2.14.). U dobijenom rezultatu posmatramo samo članove sa $n = m$, gde se dobija:

$$\Gamma_{nn}(\omega) = \frac{i}{2\pi} Q_n \frac{\omega^3}{\omega^4 - 2\alpha\omega^2 - \beta^2} \quad (2.15)$$

gde je:

$$Q_n = \frac{\hbar}{iM_n}; \quad \alpha = \frac{c}{M_n}; \quad \beta^2 = \frac{c^2}{M_n} \left(\frac{1}{M_{n+1}} + \frac{1}{M_{n-1}} \right) \quad (2.16)$$

Dalje se funkcija (2.15.) rastavi na proste razlomke i na svaki član primeni teorema o spektralnoj intenzivnosti Grinove funkcije (2.3.). Sumiranjem članova dobijenih na opisani način nalazi se da je:

$$\left\langle u_n(0) \frac{p_n(0)}{M_n} \right\rangle = -\frac{Q_n}{2} = -\frac{\hbar}{2M_n i}$$

odakle sledi na osnovu (2.2.):

$$D_n = \frac{\hbar}{2M_n} \quad (2.17)$$

Dobijeni izraz predstavlja mikroskopsku vrednost koeficijenta difuzije.

Kao što se vidi koeficijent difuzije fononskog gasa, računat u okviru izložene mikroteorije, ne zavisi od temperature, ali zavisi od raspodele masa M_n , tj. koeficijent difuzije se menja od tačke do tačke u strukturi.

3. MAKROSKOPSKE VREDNOSTI KOEFICIJENTA DIFUZIJE

Dobijena mikroteorijska vrednost koeficijenta difuzije (2.17.) ne može biti podvrgnuta direktnim eksperimentalnim merenjima, pa kao takva nema mnogo značaja za neposrednu primenu. Da bi dobili eksperimentalno merljivu vrednost koeficijenta difuzije (makroskopska vrednost koeficijenta difuzije) iskoristićemo statističke metode analize, koji daju verovatnoću raspodela masa u heterogenim strukturama. Kombinacijom ovih statističkih metoda i metoda mikroteorijske analize može se dobiti srednja vrednost koeficijenta difuzije, odnosno njegova makroskopska vrednost /8/.

Novi metod analize maseno heterogenih struktura, bazira se na probabilističko-statističkim razmatranjima. Ovo je potrebno zbog toga što su heterogene strukture, koje se mogu nazvati i strukture sa narušenom simetrijom, translatoorno neinvarijantne, pa ih nije moguće analizirati poznatim metodama koje se koriste u uređenim strukturama (npr. kod kristala). Ovde se analizira takva heterogena struktura koja se sastoji od molekula različitih masa, a koji se, po pretpostavci, nalaze na istim rastojanjima. Za to je potrebno naći najverovatniju raspodelu masa, i tada se za fizičke karakteristike zavisne od mase mogu naći njihove srednje (očekivane) vrednosti.

Ovaj statistički metod /2/ analize se sastoji iz dva dela. Prvi deo se odnosi na stohastičku raspodelu masa, koja je bazirana na uslovu održanja mase i ukupnog broja molekula. Drugi deo metode je dinamička raspodela masa koja se bazira na uslovu održanja ukupne energije i ukupnog broja molekula. Pri ovome se podrazumeva održanje ukupne oscilatorne energije heterogene strukture.

3.1. METODI TEORIJSKE ANALIZE

Stohastička raspodela mase

Posmatra se smeša sa N molekula. Ukupna masa smeše je μ . Mase molekula su međusobno različite, ali se svaka od njih može predstaviti kao celobrojni umnožak neke elementarne mase m_0 . Očigledno je da je m_0 blisko atomskoj jedinici mase ($m_0 \cong 1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$). Na osnovu ovoga molekulske mase M_ν se mogu predstaviti kao:

$$M_\nu = \nu m_0; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, \nu_{\max} \quad (3.1.1.)$$

Gornja granica indeksa ν (ν_{\max}) određuje se na osnovu granične pretpostavke da cela posmatrana struktura predstavlja jedan jedini gigantski molekul sa masom μ .

$$\nu_{\max} = \frac{\mu}{m_0} > N \quad (3.1.2.)$$

Broj molekula sa masom M_ν biće označen sa N_ν . S obzirom na ovo važi sledeća relacija:

$$\sum_{\nu=1}^{\nu_{\max}} N_\nu M_\nu = \mu \quad (3.1.3.)$$

Takođe važi relacija:

$$\sum_{\nu=1}^{\nu_{\max}} N_\nu = N \quad (3.1.4.)$$

Pre dalje analize pogodno je uvesti takvu masu M_0 koja se N puta sadrži u ukupnoj masi strukture μ . Znači:

$$M_0 = \frac{\mu}{N} \quad (3.1.5.)$$

Iz dobijenog izraza se vidi da M_0 , na izvestan način, predstavlja aritmetičku sredinu molekulskih masa koje su zastupljene u heterogenoj smeši.

Stohastička raspodela masa za opisani slučaj tražiće se metodama statističke fizike, a to znači da treba formirati statističku verovatnoću sistema molekula, koja predstavlja broj mikrostanja kojima se opisuje makrostanje. Koristeći Stirlingovu formulu statistička verovatnoća se može pisati kao :

$$P = \frac{N!}{\prod_{\nu=1}^{\nu_{\max}} N_{\nu}!} \approx \frac{N^N}{\prod_{\nu=1}^{\nu_{\max}} N_{\nu}^{N_{\nu}}} \quad (3.1.6.)$$

S obzirom na uslove održanja (3.1.3.) i (3.1.4.) treba formirati funkcional:

$$\Phi = \ln P - \alpha N - \beta \mu = N \ln N - \sum_{\nu=1}^{\nu_{\max}} (N_{\nu} \ln N_{\nu} + \alpha N_{\nu} + \beta N_{\nu} M_{\nu}) \quad (3.1.7.)$$

varirati ga po N_{ν} i varijaciju izjednačiti sa nulom. Tako se dobija najverovatnija raspodela mase. Lagranžeovi množitelji α i β naknadno se određuju iz (3.1.3.) i (3.1.4.).

Kada se varijacija Φ izjednači sa nulom dobijemo:

$$N_{\nu} = e^{-(\alpha+1)-\beta M_{\nu}} \quad (3.1.8.)$$

Kada (3.1.8.) uvrstimo u (3.1.4.) dobijemo:

$$W_{\nu} = \frac{N_{\nu}}{N} = \frac{e^{-\beta M_{\nu}}}{\sum_{\nu=1}^{\nu_{\max}} e^{-\beta M_{\nu}}} \quad (3.1.9.)$$

Da bi se odredio koeficijent β vrednost N_{ν} iz (3.1.9.) uvrštavamo u (3.1.3.), tako da se dobija:

$$\frac{d}{d\beta} \ln \sum_{\nu=1}^{\nu_{\max}} e^{-\beta M_{\nu}} = -M_0 \quad (3.1.10.)$$

Na ovom mestu upotrebicemo kontinualnu aproksimaciju:

$$M_{\nu} \rightarrow M; \quad \sum_{\nu=1}^{\nu_{\max}} \rightarrow \int_0^{\infty} dM \quad (3.1.11.)$$

Ovde je M kontinualna varijabla koja se menja u intervalu $[0, \infty)$. Na osnovu (3.1.11.) relacija (3.1.10.) postaje:

$$\frac{d}{d\beta} \ln \int_0^{\infty} e^{-\beta M} dM = -M_0$$

odakle sledi vrednost Lagranžeovog množitelja β :

$$\beta = \frac{1}{M_0} \quad (3.1.12.)$$

Ako se β uvrsti u (3.1.9.) i u dobijenom izrazu izvrši kontinualna aproksimacija (3.1.11.) dobija se verovatnoća raspodele masa u obliku:

$$W(M) = \frac{1}{M_0} e^{-\frac{M}{M_0}}; \quad \int_0^{\infty} W(M) dM = 1 \quad (3.1.13.)$$

Najverovatniju masu posmatranog sistema dobijamo kao matematičko očekivanje mase M po verovatnoćama $W(M)$, tj. :

$$M_s = \int_0^{\infty} MW(M) dM = M_0 = \frac{\mu}{N} \quad (3.1.14.)$$

Kao što se vidi ako se problem raspodele masa razmatra čisto stohastički, što znači bez uvođenja bilo kakvih karakteristika sistema u račun, onda je najverovatnija masa M_s upravo jednaka masi M_0 , koja predstavlja količnik ukupne mase sistema i broja molekula u sistemu. Ovaj rezultat biće dalje korišćen da bi se odredila realna dinamička raspodela masa posmatranog heterogenog sistema.

Na kraju ovog dela korisno je prokomentarisati rezultat (3.1.14.). On je dobijen na bazi čistog probabilističkog pristupa (bez uključivanja dinamičkih parametara) pa zahteva objašnjenja koja bi ga bliže povezala sa realnošću. U tom cilju vršimo sledeći misaoni eksperiment. Iz rezervoara molekula u kome su zastupljene sve mase u beskonačno velikom broju, izvlače se veoma veliki broj puta uzorci mase μ sa brojem molekula N , pa se prebrojava koliko kojih molekula ima u kom uzorku. Srednji rezultat ovog velikog broja merenja (prema dobijenom rezultatu (3.1.14.)) bio bi sledeći: najveći broj uzoraka sastavljen je od molekula približno jednakih masa veličine μ/N . Ovaj stohastički rezultat odgovara onome što srećemo u prirodi, a to je da je najveći broj prirodnih sistema obrazovan od molekula jednakih masa (kristali, mnogi gasovi...).

Dinamička raspodela masa

Pretpostavićemo da heterogena smeša koja je stohastički analizirana u prethodnom paragrafu predstavlja čvrstu supstancu koja ne poseduje osobinu translatorne invarijantnosti, pa se ne može tretirati metodama teorije kristala. Sa druge strane svaki od molekula čvrste supstance ima svoj ravnotežni položaj koji je dobio na osnovu neke uložene energije $\theta_C = k_B T_C$, koja ga je učvrstila u tom položaju. Molekul osciluje oko svog ravnotežnog položaja i kao takav predstavlja linearni oscilator. Pošto se, kako je već naglašeno, sistem ne može analizirati metodama teorije translatorno invarijantnih struktura ovde će biti analiziran statistički.

Pre nego što pređemo na dalju analizu definišaćemo modelnu energiju molekula. Pošto molekul osciluje njegova oscilatorna energija je:

$$E_{osc} = M_v \frac{\dot{u}_v^2 + u_v^2 \Omega_v^2}{2} \quad (3.1.15.)$$

gde je u - molekulski pomeraj, a Ω frekvencija oscilatora.

U okviru modela koji se predlaže veličina $\frac{\dot{u}_v^2 + u_v^2 \Omega_v^2}{2}$ zamenjuje se kvadratom brzine stvaranja supstance, koja se statistički posmatrano može predstaviti kao odnos ukupne energije utrošene za stvaranje čvrste supstance $Q_C = N\theta_C$ i ukupne mase supstance μ , koja se stohastički posmatrano, a prema rezultatima prethodnog paragrafa može predstaviti kao $\mu = NM_S$. Znači:

$$\frac{\dot{u}_v^2 + u_v^2 \Omega_v^2}{2} \rightarrow \frac{Q_C}{\mu} = \frac{\theta_C}{M_S} \quad (3.1.16.)$$

Smatrajući da molekul mase M_v može da zauzme na različitim temperaturama takve nivoe energije, koji predstavljaju celobrojni umnožak veličine $M_v\theta_C/M_S$, za modelnu energiju oscilatora dalje koristimo izraz:

$$E_{osc} \rightarrow E_{vk} = M_v \frac{\theta_C}{M_S} k; \quad k = 0,1,2,3,\dots \quad (3.1.17.)$$

Broj molekula koji poseduje energiju E_{vk} označićemo sa n_{vk} . Pošto je broj molekula mase M_v jednak N_v , važi:

$$\sum_k n_{vk} = N_v \quad (3.1.18.)$$

Ukupnu unutrašnju energiju pod sistema koji sačinjavaju molekuli mase M_v , označićemo sa:

$$U_v = \sum_k E_{vk} n_{vk} \quad (3.1.19.)$$

Statistička verovatnoća pod sistema molekula mase M_v data je sa:

$$P_v = \frac{N_v!}{\prod_k n_{vk}!} \approx \frac{N_v^{N_v}}{\prod_k n_{vk}^{n_{vk}}} \quad (3.1.20.)$$

Najverovatniju raspodelu molekula dobijamo variranjem funkcionala:

$$\Phi_v = \ln P_v - \alpha_v N_v - \gamma U_v = N_v \ln N_v - \sum_k (n_{vk} \ln n_{vk} + \alpha_v n_{vk} + \gamma E_{vk} n_{vk}) \quad (3.1.21.)$$

gde su α i γ Lagranževovi množitelji. Tako nalazimo:

$$n_{vk} = e^{-(\alpha_v+1)} e^{-\gamma E_{vk}} \quad (3.1.22.)$$

Ako se (3.1.22.) uvrsti u (3.1.18.) dobija se:

$$\frac{n_{vk}}{N_v} = W_{vk} = (1 - e^{-\gamma \theta_c \frac{M_v}{M_s}}) e^{-\gamma \theta_c \frac{M_v}{M} k} \quad (3.1.23.)$$

Lagranžev množitelj γ predstavlja recipročnu vrednost temperature, tj. :

$$\gamma = \frac{1}{\theta} = \frac{1}{k_B T} \quad (3.1.24.)$$

Kada izraz (3.1.24.) uvrstimo u (3.1.23.) dolazimo do sledećeg izraza, koji karakteriše verovatnoću da molekul mase M_v na temperaturi θ ima energiju E_{vk} :

$$\frac{n_{vk}}{N_v} = W_{vk} = (1 - e^{-\frac{\theta_c M_v}{\theta M_s}}) e^{-\frac{\theta_c M_v}{\theta M} k} \quad (3.1.25.)$$

Kao i u prethodnom paragrafu prećićemo na kontinualne varijable:

$$\begin{aligned} \frac{M_v}{M_s} &\rightarrow \frac{M}{M_s} \equiv y; \quad y \in [0, \infty) \\ k &\rightarrow x; \quad x \in [0, \infty) \\ W_{vk} &\rightarrow W(y, x) \end{aligned} \quad (3.1.26.)$$

pa formula (3.1.25.) postaje:

$$W(y, x) = (1 - e^{-\frac{\theta_c}{\theta} y}) e^{-\frac{\theta_c}{\theta} xy} \quad (3.1.27.)$$

Ako se uzme da je:

$$\frac{\theta_c}{\theta} \ll 1 \quad (3.1.28.)$$

za verovatnoću dobijamo približan izraz:

$$W(x, y) = \frac{\theta_c}{\theta} y e^{-\frac{\theta_c}{\theta} xy} \quad (3.1.29.)$$

Varijabla x određiće se iz uslova normiranja:

$$\int_0^{\infty} W(x, y) dy = 1 \quad (3.1.30.)$$

a s obzirom na (3.1.29.):

$$x = \sqrt{\frac{\theta}{\theta_c}} = \sqrt{\frac{T}{T_c}} \quad (3.1.31.)$$

Na osnovu ovoga konačni oblik dinamičke raspodele masa je:

$$W(y) = \frac{T_c}{T} y e^{-\sqrt{\frac{T_c}{T}} y}; \quad y = \frac{M}{M_s} \quad (3.1.32.)$$

Kao što se vidi, verovatnoća zavisi od temperature. Kako je ova vrednost dobijena u visokotemperaturskoj aproksimaciji ($\frac{\theta_c}{\theta} \ll 1$), jasno je da se odnosi na opseg viših i visokih temperatura.

3.2. VREDNOSTI KOEFICIJENTA DIFUZIJE NA VISOKIM TEMPERATURAMA

Dobijeni izraz za verovatnoću (3.1.32.) koji predstavlja raspodelu masa na višim i visokim temperaturama biće iskorišćen da se nađe srednja vrednost koeficijenta difuzije. Traži se makroskopska vrednost koeficijenta difuzije koja će očigledno zavisiti od temperature.

Da bi se našao makroskopski koeficijent difuzije maseno heterogene strukture, iskoristićemo izraz za koeficijent difuzije fononskog gasa (2.17.) koji treba usrednjiti po verovatnoćama (3.1.32.). Prethodno treba preći na kontinuum u formuli (2.17.):

$$M_n \rightarrow M; \quad D_n \rightarrow D(M) \quad (3.2.1.)$$

tako da formula (2.17.) postaje:

$$D(M) = \frac{\hbar}{2M} = \frac{\hbar}{2M_s} \frac{1}{y} = \frac{N\hbar}{2\mu} \frac{1}{y} \quad (3.2.2.)$$

Makroskopski koeficijent difuzije je matematičko očekivanje veličine $D(M)$ po verovatnoćama $W(y)$, što se, s obzirom na (1.32.) i (2.19.) svodi na:

$$\bar{D}(T) = \int_0^{\infty} D(M)W(y)dy = \frac{N\hbar}{2\mu} \frac{T_c}{T} \int e^{-y\sqrt{\frac{T_c}{T}}} dy \quad (3.2.3.)$$

odakle je konačan rezultat za srednju vrednost koeficijenta difuzije:

$$\bar{D}(T) = \frac{N\hbar}{2\mu} \sqrt{\frac{T_c}{T}} \quad (3.2.4.)$$

Vidi se da srednja vrednost koeficijenta difuzije zavisi od temperature. Ova vrednost se odnosi na više i visoke temperature. Sa porastom temperature opada makroskopska vrednost koeficijenta difuzije, po zakonu " $T^{-1/2}$ ".

Koristeći izraz za verovatnoću (3.1.32.) moguće je odrediti srednje vrednosti gotovo svih dinamičkih karakteristika sistema koje zavise od mase.

3.3. VREDNOSTI KOEFICIJENTA DIFUZIJE NA NISKIM TEMPERATURAMA

U delu 3.2. je na osnovu datog modela raspodele masa izračunat koeficijent difuzije, koji je na zadovoljavajući način opisivao ponašanje difuzionih karakteristika u heterogenim strukturama, na visokim temperaturama. Kako je od velikog praktičnog značaja i ponašanje polimernih i kompozitnih materijala kao i drugih heterogenih struktura na niskim temperaturama, ovde će biti izneti relativno jednostavni kriterijumi za procenu difuzionih karakteristika ovakvih struktura u kontinualnoj i diskretnoj slici.

Kontinualna raspodela masa

Model kontinualne raspodele masa koji će biti izložen, trebalo bi ne samo da pruži adekvatan opis na niskim temperaturama, već i da omogući procenu transportnih karakteristika i na visokim temperaturama.

Opseg temperatura na kojima će se vršiti analiza je od apsolutne nule do Debajevskih temperatura (150 K).

Počecemo od energije vezanih oscilatora, da bi formulisali model. Ona je data sa:

$$E(k) = \hbar v k \quad (3.3.1.)$$

gde je k - talasni vektor, v - brzina zvuka koja je data kao: $v = a \sqrt{\frac{c_H}{M}}$, c_H je Hukova konstanta, a je konstanta rešetke i M masa molekula.

Ako se sistem sastoji od čestica različitih masa, onda energetski nivoi praktično zavise i od k i od M . Da bismo odredili zavisnost energije od mase, zanemaricemo disperziju, i kao modelnu energiju uzećemo srednju vrednost energije (3.3.1.), po Debajevskoj sferi:

$$E_{MOD} = \hbar v \bar{k}; \quad \bar{k} = \frac{\int d^3 \bar{k} k}{\int d^3 k} = \frac{\int_0^{k_D} dk k^3}{\int_0^{k_D} dk k^2} = \frac{3}{4} k_D \quad (3.3.2.)$$

gde je k_D -Debajevski talasni vektor.

Ova aproksimacija odgovara niskim temperaturama, jer vrednost $\frac{3}{4} k_D$ odgovara temperaturama reda 100 K.

Pošto su u heterogenim strukturama mase različite, nivoi energije po kojima se ređaju molekuli su:

$$\varepsilon_i = \frac{c}{\sqrt{M_i}}; \quad c = \frac{3}{8} h \sqrt{c_H} \quad (3.3.3.)$$

gde je približno uzeto da je $k_{Da} \sim \bar{u}$.

Ako posmatramo skup od N molekula različitih masa, od kojih N_i molekula ima masu M_i , verovatnoća njihovog nalaženja može se napisati u obliku:

$$P = \frac{N!}{N_1! N_2! \dots N_i! \dots N_n!} \approx \frac{N^N}{\prod_i N_i^{N_i}} \quad (3.3.4.)$$

Zakoni održanja broja čestica i energije su:

$$N = \sum_i N_i = \text{const.} \quad (3.3.5.)$$

$$u = \sum_i N_i \varepsilon_i = \text{const.} \quad (3.3.6.)$$

Najverovatniju raspodelu dobićemo izjednačavajući sa nulom varijaciju funkcije:

$$\Phi = \ln P - \alpha N - \beta u \quad (3.3.7.)$$

gde su α i β Lagranževovi množitelji, pa je rezultat:

$$N_i = e^{-(\alpha+1)} e^{-\beta \varepsilon_i} \quad (3.3.8.)$$

Na osnovu (3.3.5.) poslednja formula se može napisati kao:

$$N_i = \frac{N e^{-\beta \varepsilon_i}}{\sum_i e^{-\beta \varepsilon_i}}; \quad \varepsilon_i = \frac{c}{\sqrt{M_i}}; \quad \beta = \frac{1}{\theta} = \frac{1}{k_B T} \quad (3.3.9.)$$

odakle je verovatnoća da u eksperimentu registrujemo molekul mase M_i sa energijom ε_i data sa:

$$W_i = \frac{N_i}{N} = \frac{e^{-\beta \varepsilon_i}}{\sum_i e^{-\beta \varepsilon_i}} \quad (3.3.10.)$$

Njena vrednost u kontinualnoj aproksimaciji, gde ćemo smatrati da se mase menjaju od minimalne vrednosti M_0 do maksimalne M_M , iznosi:



$$W(\theta) = \frac{e^{\frac{c}{\theta\sqrt{M}}}}{\int_{M_0}^{M_M} dMe^{\frac{c}{\theta\sqrt{M}}}} \quad (3.3.11.)$$

Da bi se dobijeni izraz za verovatnoću mogao koristiti za izračunavanje difuzionog koeficijenta na niskim temperaturama, potrebno je izvršiti aproksimaciju, jer osnovnu poteškoću u proračunu čini funkcija: $e^{\frac{c}{\theta\sqrt{M}}} = e^{\frac{const.}{\sqrt{M}}}$. Potrebno je funkciju $\frac{1}{\sqrt{M}}$ u (3.3.11.) aproksimirati linearnom funkcijom (trapezno pravilo):

$$\frac{1}{\sqrt{M}} = b - aM; \quad a = \frac{\sqrt{M_M} - \sqrt{M_0}}{\sqrt{M_M M_0} \left(\frac{M_M}{M_0} - 1 \right)} \frac{1}{M_0}; \quad b = \frac{M_M^{\frac{3}{2}} - M_0^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{M_M M_0} \left(\frac{M_M}{M_0} - 1 \right)} \frac{1}{M_0}$$

Koristeći krajnje tačke intervala M_0 i M_M dolazi se do aproksimacije:

$$\frac{1}{\sqrt{M}} = \frac{M_M^{\frac{3}{2}} - M_0^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{M_M M_0} \left(\frac{M_M}{M_0} - 1 \right)} \frac{1}{M_0} - \frac{M_M^{\frac{1}{2}} - M_0^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{M_M M_0} \left(\frac{M_M}{M_0} - 1 \right)} \frac{M}{M_0} \quad (3.3.12.)$$

Zamenom (3.3.12.) u (3.3.11.) dobija se:

$$W = \frac{e^{BE_0 x}}{\int_1^{\frac{M_M}{M_0}} dx e^{BE_0 x}} \quad (3.3.13.)$$

ovde je uzeto:

$$E_0 = c \frac{M_M^{\frac{1}{2}} - M_0^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{M_M M_0} \left(\frac{M_M}{M_0} - 1 \right)} = \frac{3}{8} h \sqrt{c_H} \frac{M_M^{\frac{1}{2}} - M_0^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{M_M M_0} \left(\frac{M_M}{M_0} - 1 \right)}; \quad x = \frac{M}{M_0}; \quad x \in \left(1, \frac{M_M}{M_0} \right)$$

Formula (3.3.13.) predstavlja približanu formulu za verovatnoću, na osnovu koje se može naći srednja vrednost recipročne mase, $\frac{1}{M}$, koja figuriše u formuli za srednju vrednost koeficijenta difuzije, $\bar{D} = \frac{\hbar}{2M}$.

Srednju vrednost recipročne mase u kontinualnoj aproksimaciji računacemo po formuli:

$$\frac{\bar{1}}{M} = \frac{\int_0^{\frac{M_M}{M_0}} dx M^{-1} e^{Zx}}{\int_0^{\frac{M_M}{M_0}} dx e^{Zx}}; \quad Z = \beta E_0 = \frac{E_0}{\theta} \quad (3.3.14.)$$

Odavde se pri $M_0 \ll M_M$ dobija da recipročna masa raste sa temperaturom:

$$\frac{\bar{1}}{M} = 2 \frac{M_0}{M_M^2} \frac{\theta^2}{E_0^2} \quad (3.3.15.)$$

Na osnovu (3.3.15.) srednja vrednost koeficijenta difuzije je:

$$\bar{D} = 2\hbar \frac{M_0}{M_M^2} \frac{\theta^2}{E_0^2}$$

Može se zaključiti, da na niskim temperaturama u kontinualnoj aproksimaciji, makroskopski koeficijent difuzije raste sa temperaturom. Ovo ponašanje je obrnuto ponašanju na visokim temperaturama.

Diskretna raspodela masa

Pošto se posmatra difuzioni proces, odnosno koeficijent difuzije u heterogenim strukturama u domenu niskih temperatura, u skladu s tim biće formulisan teorijski model diskretne raspodele masa.

Kao modelnu energiju koristicemo energiju sistema vezanih oscilatora, usrednjenu po Debajevskoj sferi. Kao što je poznato, Debajevskom impulsu $\hbar k_D$ odgovaraju temperature reda 150 K. Ta energija je:

$$E_{MOD} = \frac{3}{4} \hbar v k_D \quad (3.3.16.)$$

Ako se prepostavi da su mase date kao celobrojni umnožak mase protona m_0 , odnosno:

$$M_n = n m_0; \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (3.3.17.)$$

tada je modelna energija:

$$E_{MOD} \rightarrow E_n = E_0 n^{-\frac{1}{2}}; \quad E_0 = \frac{3}{8} h \sqrt{\frac{c_H}{m_0}} \quad (3.3.18.)$$

Znači, opšta teorija se pravi na bazi sukcesivnog porasta masa.

Posmatra se sistem od S molekula. Broj molekula sa masom M_n je S_n , pa je statistička verovatnoća sistema data sa:

$$P = \frac{S!}{\prod_{n=1}^N S_n!} \approx \frac{S^S}{\prod_{n=1}^N S_n^{S_n}} \quad (3.3.19.)$$

Zakoni održanja broja čestica i energije su:

$$\sum_{n=1}^N S_n = S = const. \quad (3.3.20.)$$

$$\sum_{n=1}^N E_n S_n = u_{TOT} = const. \quad (3.3.21.)$$

Kao što je poznato, najverovatnija raspodela dobija se variranjem funkcionala:

$$\Phi = \ln P - \alpha S - \beta u = S \ln S - \sum_{n=1}^N (S_n \ln S_n + \alpha S_n + \beta E_n S_n)$$

i izjednačavanjem njegove varijacije sa nulom, dobija se da je:

$$S_n = e^{-(\alpha+1)} e^{-\beta E_n} \quad (3.3.22.)$$

Ako se (3.3.22.) zameni u (3.3.20.) dobija se:

$$\frac{S_n}{S} \equiv W_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{\sum_{n=1}^N e^{-\beta E_n}}; \quad \beta = \frac{1}{\theta} = \frac{1}{k_B T} \quad (3.3.23.)$$

Otežavajuća okolnost u izračunavanju verovatnoće leži u izrazu za E_n , gde figuriše $\frac{1}{\sqrt{n}}$, što jako otežava proračun. Zbog toga ćemo koristiti trapezno pravilo, tj., funkciju $\frac{1}{\sqrt{n}}$ aproksimirati linearnom funkcijom:

$$\frac{1}{\sqrt{n}} = b - an \quad (3.3.24.)$$

Koeficijenti a i b se nalaze iz uslova:

$$b - aN = \frac{1}{\sqrt{N}}; \quad b - a = 1$$

odakle sledi:

$$a = \frac{1}{\sqrt{N}(1 + \sqrt{N})}; \quad b = 1 + a \quad (3.3.25.)$$

Ako se (3.3.25.) zameni u (3.3.23.) dobija se sledeći izraz za verovatnoću:

$$W_n = \frac{e^{nz}}{\sum_{n=1}^N e^{nz}}; \quad z = \beta E_0 a \quad (3.3.26.)$$

Izraz za energiju postaje:

$$E_n = E_0 n^{\frac{1}{2}} = E_0(1 + a) - E_0 an \quad (3.3.27.)$$

Za određivanje srednje vrednosti koeficijenta difuzije $\left(\bar{D} = \frac{\hbar}{2M}\right)$ u diskretnoj aproksimaciji, potrebno je naći srednju vrednost recipročne mase, $\frac{\bar{1}}{M}$, pomoću verovatnoće (3.3.26.).

Recipročna vrednost mase ($M = nm_0$) posmatranog sistema je:

$$\frac{1}{M} = \frac{1}{m_0 n} = \frac{1}{m_0} \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{1}{\sqrt{n}} \approx \frac{1}{m_0} [(1 + a) - an]^2 \quad (3.3.28.)$$

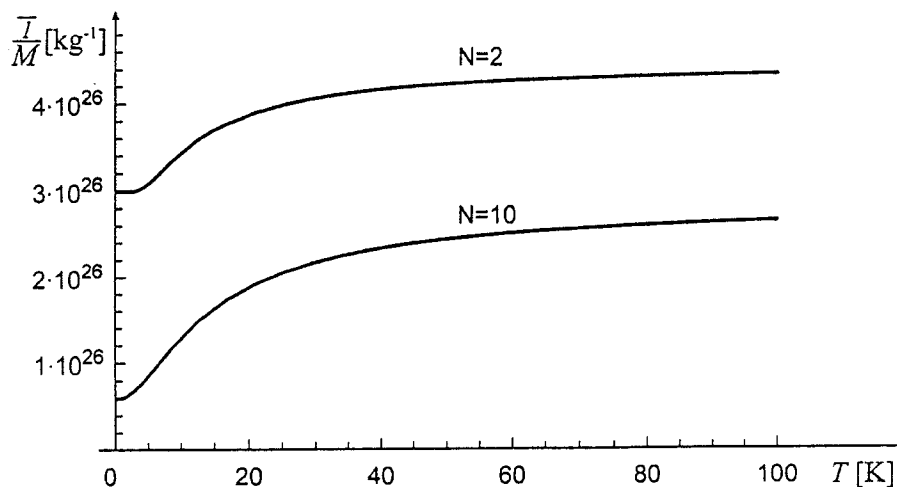
Srednja recipročna masa računa se po formuli:

$$\frac{\bar{1}}{M} = \frac{1}{m_0} \left[\sum_{n=1}^N (a + 1)^2 W_n - 2a(1 + a) \sum_{n=1}^N n W_n + a^2 \sum_{n=1}^N n^2 W_n \right] \quad (3.3.29.)$$

i dobija se vrednost:

$$\frac{\bar{I}}{M} = \frac{1}{m_0} \left\{ 1 - a^2 - 2a(a+1) \left(\frac{Ne^{Nz}}{e^{Nz}-1} - \frac{e^z}{e^z-1} \right) + \right. \\ \left. + a^2 \left[\frac{N^2 e^{Nz}}{e^{Nz}-1} + \frac{e^z}{(e^z-1)^2} + \frac{e^{(N+1)z}}{(e^z-1)^2 (e^{Nz}-1)} - \frac{(2N+1)e^{Nz}}{(e^z-1)(e^{Nz}-1)} \right] \right\} \quad (3.3.30)$$

Grafik zavisnosti recipročne mase od temperature dat je na slici 1.



Slika 1. (Zavisnost inverzne mase od temperature)

Za $\theta=0$ imamo:

$$\frac{\bar{I}}{M}(\theta=0) = \frac{1}{Nm_0} \quad (3.3.31.)$$

Na osnovu (3.3.31.) srednja vrednost koeficijenta difuzije u diskretnoj aproksimaciji je:

$$\bar{D} = \frac{1}{2M} \hbar = \frac{\hbar}{2m_0} \left\{ 1 - a^2 - 2a(a+1) \left(\frac{Ne^{Nz}}{e^{Nz}-1} - \frac{e^z}{e^z-1} \right) + \right. \\ \left. + a^2 \left[\frac{N^2 e^{Nz}}{e^{Nz}-1} + \frac{e^z}{(e^z-1)^2} + \frac{e^{(N+1)z}}{(e^z-1)^2 (e^{Nz}-1)} - \frac{(2N+1)e^{Nz}}{(e^z-1)(e^{Nz}-1)} \right] \right\} \quad (3.3.32.)$$

odnosno:

$$D(\theta = 0) = \frac{2\hbar}{Nm_0} \quad (3.3.33.)$$

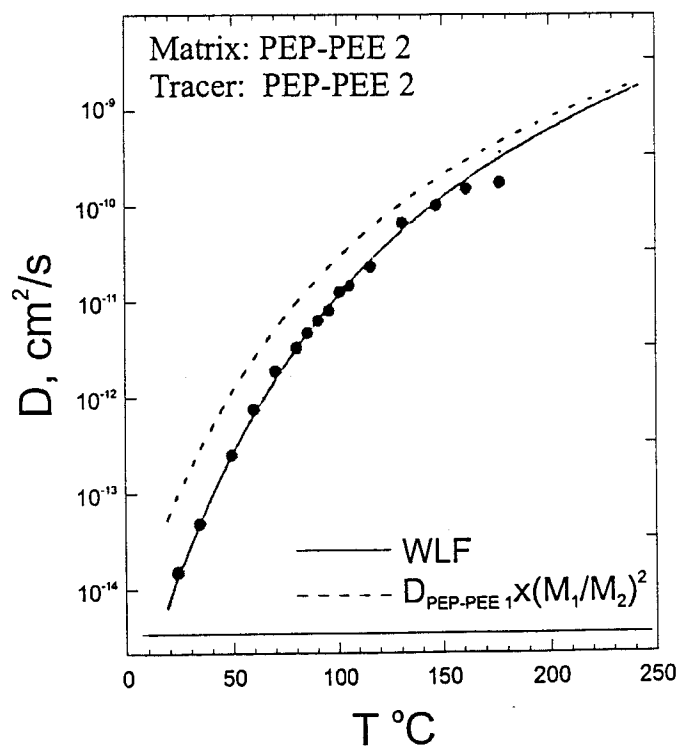
Kao što se vidi iz formule (3.3.30.), recipročna masa, pa samim tim i koeficijent difuzije (3.3.32.), rastu sa porastom temperature. Za veći broj različitih masa koeficijent difuzije ima nižu vrednost.

4. EKSPERIMENTALNE POTVRDE DOBIJENIH TEORIJSKIH REZULTATA ZA KOEFICIJENT DIFUZIJE

Dobijene teorijske vrednosti za koeficijent difuzije kod heterogenih struktura odražavaju njegovu zavisnost od temperature. Pokazano je da koeficijent difuzije na višim i visokim temperaturama opada po zakonu " $T^{-1/2}$ ", dok na niskim temperaturama raste sa porastom temperature. To je posebno značajno ako se uzme u obzir široka primena polimernih materijala.

U nizu eksperimentalnih radova je prikazana zavisnost koeficijenta difuzije od temperature za različita agregatna stanja polimera. Kako je predmet naših teorijskih analiza bila maseno heterogena struktura, to će za predmet poređenja biti najpogodnija polimerna supstanca. Zapaža se, u eksperimentalnim radovima, da na niskim temperaturama koeficijent difuzije raste sa porastom temperature, dok na višim i visokim opada.

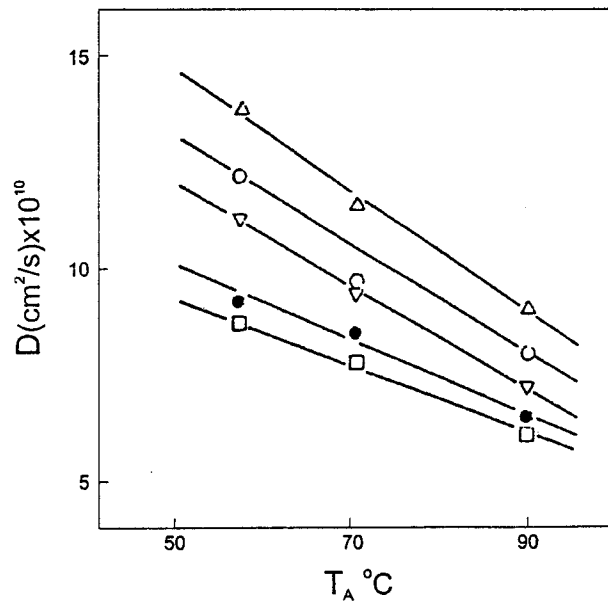
U radu /9/ je pokazano kako se koeficijent difuzije ponaša sa porastom temperature, u temperaturnom intervalu 0 - 200°C, slika 2:



Slika 2. (Zavisnost difuzije u PEP – PEE od temperature (puni kružići))

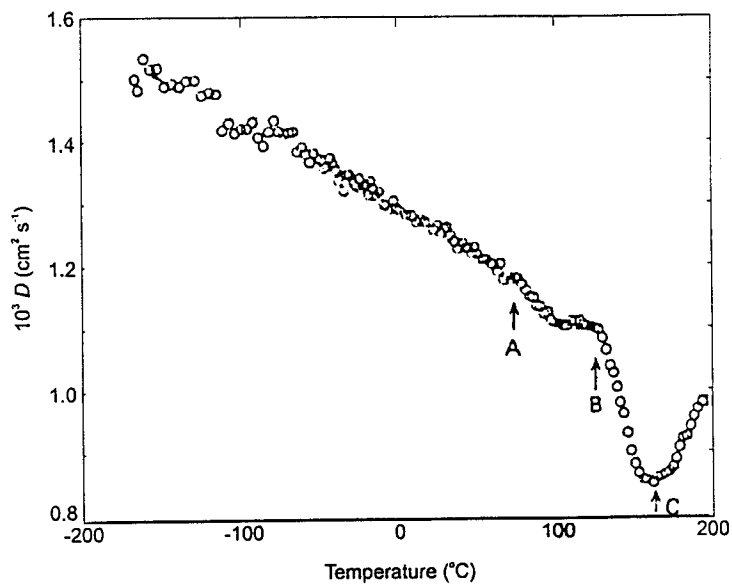
Ispitivanja su vršena na poli(etilenpropilen)-poli(etilenetilen)(PEP-PEE) blok kopolimeru. Primećen je rast koeficijenta difuzije do 150°C. Posle toga dolazi do stagnacije, a moguće, i do opadanja koeficijenta difuzije sa porastom temperature.

Kao što se vidi sa slike 3. u intervalu 56 – 90°C koeficijent difuzije opada sa porastom temperature.



Slika 3. (Koeficijent difuzije u zavisnosti od temperature anelacije T_A za razna vremena snimanja)

U radu /11/ ispitano je ponašanje koeficijenta difuzije kod PET (polietilen tereftalat) filma u veoma širokom temperaturnom opsegu (-200 – 200°C), slika 4.:



Slika 4. (Temperaturna zavisnost difuzije kod PET filma)

Ovde treba istaći da je merenje vršeno metodom fleš radiometrije. Ova metoda koristi nove i veoma precizne tehnike, posebno za analizu čvrstih polimernih supstanci.

Sa slike 4. se vidi ova preciznost merenja i posebno se ukazuje na višestruke promene u ponašanju analiziranog polimera (PET film) u zavisnosti od temperature. Koeficijent difuzije opada sa porastom temperature do 165°C, tako što u tom intervalu ima pregibe na 82°C, 130°C i 165°C. Tačka A sa slike 4. odgovara temperaturi prelaza u staklasto stanje. Tačka B bi mogla da predstavlja početak kristalizacije, koja se javlja usled kretanja molekula. Porast difuzije počinje od tačke C i nastaje usled povećanja kristalizacije.

Primer opadanja koeficijenta difuzije sa temperaturom po zakonu "1/T" dat je u radu /12/ i odnosi se na tripletne eksitone u antracenu. Temperatura se menja od 100 - 400°C.

Ovi primeri predstavljaju najznačajnije eksperimentalne rezultate o ponašanju koeficijenta difuzije. Navedeni eksperimentalni rezultati su u gotovo idealnom slaganju sa rezultatima dobijenim primenom statističkih metoda, gde je pokazano kako se koeficijent difuzije menja sa temperaturom.

Veliki interes za teorijske i eksperimentalne vrednosti koeficijenta difuzije leži u neophodnosti njegovog poznavanja, u prvom redu radi lakšeg objašnjenja različitih tehnoloških operacija, potom u nuklearnoj tehnici, gde se koriste razlike u brzini difuzije za izdvajanje izotopa. Posebno je značajno poznavanje koeficijenta difuzije u hemodijalizi kod polupropustljivih membrana.

5. ZAKLJUČAK

Teorijska analiza transportnih karakteristika, tj. koeficijenta difuzije u maseno heterogenim strukturama, izvršena je kombinovanom metodom (mikroteorijska analiza metodom Grinovih funkcija i statističko usrednjavanje po dinamičkoj raspodeli masa).

Pokazano je da vrednost koeficijenta difuzije na visokim i višim temperaturama opada sa porastom temperature po zakonu " $T^{-1/2}$ ". S obzirom na činjenicu da se dobijeni rezultati dobro slažu sa empirijskim podacima, može se smatrati da predloženi metod može naći širu primenu u teorijskim ispitivanjima i drugih fizičkih karakteristika maseno heterogenih struktura.

Dobijeni rezultati za koeficijent difuzije na niskim temperaturama pokazali su da vrednost koeficijenta difuzije raste sa porastom temperature. Kontinualna aproksimacija je dovela do rezultata koji su kompatibilni sa nizom eksperimentalnih podataka. Ovde treba posebno istaći činjenicu da srednja masa zavisi od temperature, mada to na prvi pogled zvuči paradoksalno. Zavisnost srednje mase od temperature treba shvatiti kao posledicu činjenice da na različitim temperaturama u fizičkim procesima dominiraju različite mase. Tako na primer na $T=0$ K je dominantna najveća masa, jer njoj odgovara najniži nivo energije koji je najbolje popunjen. Sa porastom temperature postaju aktuelni viši energetske nivoi koji odgovaraju nešto manjim masama. Diskretna analiza sistema sa heterogenim masama pružila je adekvatan opis koeficijenta difuzije na niskim temperaturama. Ova analiza može se koristiti za procenu teorijskih vrednosti koeficijenta difuzije i na visokim temperaturama. Korišćena je statistička analiza sistema u oblasti temperatura od $T=0$ K do Debajevskih temperatura $T \approx 150$ K. Ispostavilo se, poređenjem sa eksperimentom, da se interval temperature može povećati i do 400 K. Opšta teorija pravljen je na bazi sukcesivnog porasta masa ($M_n = nm_0$) i dala je dobre rezultate za koeficijent difuzije, koji raste sa porastom temperature.

LITERATURA

1. F.V.Sirs, UVOD U TERMODINAMIKU, KINETIČKU TEORIJU GASOVA I STATISTIČKU MEHANIKU, Beograd, (1969)
2. V. Jovović, G. Davidović, B.S. Tošić, Lj. D. Mašković, V. Kozmidis-Luburić and D. Ćirić, PHYSICA A, 223, 263-271, (1996)
3. Lj. Mašković, D. Mijatović, JOURNAL OF POLICE ACADEMY 2 (1997), 15-19.
4. B.S. Tošić, Lj.D. Mašković, U.F. Kozmidis-Luburić, V. Jovović, G. Davidović, PHYSICA A, 216, 478-488, (1995)
5. Lj. Mašković, V. Jovović, M. Pantić, BALKAN PHYS. Lett. (BPU), G(2), p.p. 106-112, (1998)
6. The World Almanac (Newspaper Enterprise Assoc: New York, 1980.)
7. D.N. Zubarev, SOV. PHYS. USPEKHI 3, 320 (1960)
8. D. Ćirić, V. Jovović, Lj. Mašković, M. Zeljković, Lj. Borojev, R. Gatalo, 21. JUPITER, 4139-4143, Beograd, (1995)
9. M. C. Dalvi and T.P. Lodge, MACROMOLEKULES, 27, 3487-3492, (1994)
10. C. Tsitsilianis, POLYMER COMMUNICATIONS, 30, 331-333, (1989)
11. N. Tsutsumi, T. Tokizawa and T. Kiyotsukuri, POLYMER COMMUNICATINS, 29, 28-30, (1998)
12. V. Ern, A. Suna, J. Tomkiewitz, P. Avakion and R.P. Groff, PHIS. REV., B5, 3222, (1972)

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA

- Redni broj:
RBR
- Identifikacioni broj:
IBR
- Tip dokumentacije: *Monografska dokumentacija*
TD
- Tip zapisa: *Tekstualni štampani materijal*
TZ
- Vrsta rada: *Diplomski rad*
VR
- Autor: *Slobodan Spremo, br. dos. 24/86*
AU
- Mentor: *Dr Ljiljana Mašković, vanr. prof. PMF Novi Sad*
MN
- Naslov rada: *Koeficijent difuzije u maseno-heterogenim strukturama*
NR
- Jezik publikacije: *Srpski (latinica)*
JP
- Jezik izvoda: *Srpski*
JI
- Zemlja publikovanja: *Jugoslavija*
ZP
- Uže geografsko područje: *Vojvodina*
UGP
- Godina: *1999.*
GO
- Izdavač: *Autorski reprint*
IZ
- Mesto i adresa: *Prirodno-matematički fakultet, Trg Dositeja Obradovića 4, 21000 Novi Sad*
MA
- Fizički opis rada: *(5/26/12/0/0/4/0)*
FO
- Naučna oblast: *Fizika*
NO
- Naučna disciplina: *Fizika polimera*
ND
- Predmetna odrednica/ključne reči:
Koeficijent difuzije, maseno-heterogene strukture
PO
- Čuva se: *Biblioteka Instituta za fiziku, PMF Novi Sad*
ČU
- Važna napomena: *Nema*
VN
- Izvod: *U radu je izvršena analiza difuzionih karakteristika u strukturama sa neravnomernom raspodelom masa. Izračunate su vrednosti koeficijenta difuzije na niskim i visokim temperaturama. Pokazano je da u oblasti niskih temperatura koeficijent difuzije raste sa temperaturom, dok u oblasti visokih temperatura opada, što je u saglasnosti sa eksperimentalnim podacima.*
IZ
- Datum prihvatanja teme od strane Veća: *26.05.1999.*
DP
- Datum odbrane: *29.06.1999.*
DO
- Članovi komisije:
Predsednik:
Dr. Vladimir Divjaković, redovni profesor, PMF, Novi Sad
Članovi:
Dr. Ljiljana Mašković, vanr. profesor, PMF, Novi Sad
Dr. Zoran Mijatović, doc., PMF, Novi Sad
KO