

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ
НА МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦАХ**

УДК 543.544.3+543.51

**ХРОМАТОГРАФИЧЕСКИЙ РЕЖИМ ВЫТЕСНЕНИЯ
КОНЦЕНТРАЦИОННЫХ ВОЛН В КИНЕТИКЕ
МНОГОКОМПОНЕНТНОГО МАССОПЕРЕНОСА В СРЕДЕ
БИ-ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СОРБЕНТОВ-НАНОКОМПОЗИТОВ**

© 2020 г. А. И. Калиничев*

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук,
Ленинский пр., 31, 4, Москва, 119071 Россия*

**e-mail: kalin_phyche@mail.ru*

Поступила в редакцию 10.02.2019 г.

После доработки 31.05.2019 г.

Принята к публикации 11.06.2019 г.

Представлены результаты теоретического компьютерного моделирования-исследования сорбционной кинетики много- $n(6)$ -компонентного массо-переноса (ММП) в современных комбинированных матрицах нанокмозитов (НК)-сорбентов, где активные нуль-зарядные наночастицы (НЧ⁰), например, металла (Me⁰) внедрены в процессе синтеза внутрь исходной матрицы ионита (как пример), образуя агломераты наночастиц НЧ⁰-“наносайты”. Продемонстрированы визуально примеры много ($n = 6$)-компонентных $\{X_n(L, T)\}$ -концентрационных волн, распространяющихся вдоль расстояния (L) с течением времени (T) при процессах ММП через планарную матрицу селективных би-функциональных НК сорбентов. Продемонстрированы варианты вытеснительного режима (ВР) для ММП при движении $\{X_n(L, T)\}$ -концентрационных волн для двух принципиальных сорбирующихся селективных компонентов в НК сорбенте в зависимости от различных параметров ММП процесса: $X_{1,2,6}^0$ -входных концентраций в НК сорбенте и двух $K_S^{1,2}$ -параметров селективности сорбирующихся 1,2-компонентов.

Ключевые слова: НК-сорбенты, НК-модель, агломераты наночастиц, наносайты, концентрационные волны, взаимодействие сорбат–сорбент компонентов

DOI: 10.31857/S0044185620010106

ВВЕДЕНИЕ

В данной работе рассматривается кинетика много- $n(6)$ -компонентного массопереноса (ММП) для “расширенной” сорбционной системы с увеличенной термодинамической варианностью ($^{mod}k^{(2)} = 6$) для шести компонентов-ионов $\{X_n = {}_6(L, T)\} = \{(R_k p_i)_{m(1,2)}^+; p_{i(3,4)}^+; An_5^-$ (анионы) и ключевой k -й компонент $R_{k(6)}^0$ -“наносайты”}. (Здесь справа от символов приведены индексы, обозначающие номер компонента в рассмотренной ММП НК-системе.) Такая $^{mod}k^{(2)}(6)$ -вариантная композиция является принципиально расширенной по сравнению с рассмотренными ранее предшествующими НК-моделями [1–5], где предшествующая варианность $^{prev}k^{(1)} = 5$ в НК-сорбенте является принципиально меньшей: $^{prev}k^{(1)}(5) < ^{mod}k^{(2)}(6)$.

Компоненты упомянутой концентрационной $\{X_n\}$ -композиции включены в ММП процесс внутри комбинированной бифункциональной матри-

цы НК-сорбента, представленной на рис. 1. Агломераты НЧ⁰(Me⁰) образуют в НК-матрице активные “наносайты” адсорбции, определенные далее как “наносайты” с переменной концентрацией $[R_{k(6)}^0]$ [1–5]. В результате экспериментального синтеза внутри НК-матрицы расположены агломераты нуль-заряженных наночастиц (НЧ⁰), где для примера НЧ⁰ представлен как металл⁰ (Me⁰) в матрице НК-ионита (рис. 1) [6].

Агломераты НЧ⁰ (Me⁰ для ионитов [6]) обычно внедряются в изучаемую, результирующую, комбинированную, планарную (L) матрицу–мембрану НК-сорбента (рис. 1), образованную в результате предварительного экспериментального синтеза при внедрении НЧ⁰ внутрь НК-матрицы [6].

На рис. 1а (схематически (“условно”), в виде одной фронтальной волны) показано распространение многокомпонентных $X_n(L, T)$ -концентрационных волн в НК-матрице мембраны, где

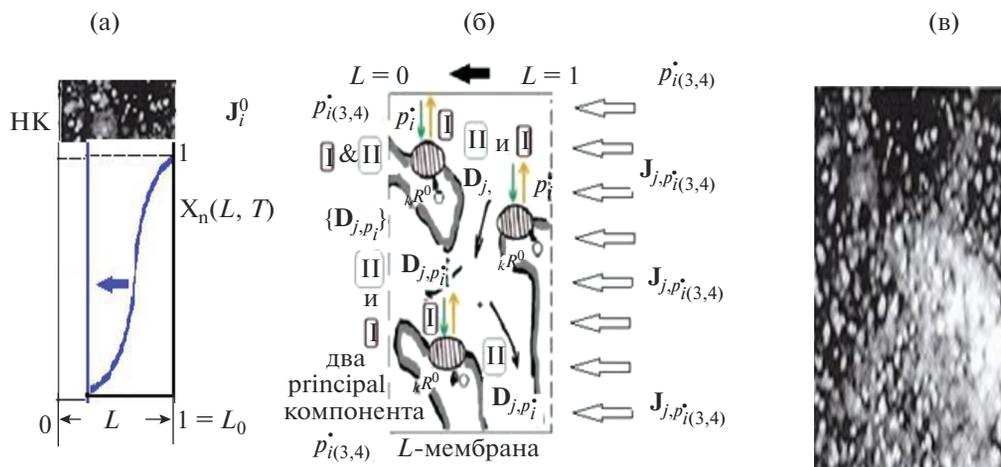


Рис. 1. Движение X_n -волн к выходу ($L = 0$) ← через НК L -мембрану (←) от входа ($L = 1$), (а). Схема ММП в НК-модели с вариантностью $\text{mod}k^{(2)} = 6$ (б); СЭМ-микро-фото НК-матрицы ионита, КУ-23 [6] (в).

схематический профиль волны-фронта, $X_n(L, T)$ движется через планарную L -матрицу НК мембраны к выходу (слева, где $L = 0$) от входа (справа, где $L = 1$) (рис. 1а, 1б).

Диффузионно-подвижные ($\mathbf{D}_{3,4} > 0$) принципиальные ($p_{i(3,4)}$) — компоненты сорбата входят потоком, J_i^0 (вместе с анионами $j = \text{An}_5^-$) в направлении стрелки (рис. 1а, 1б). На рис. 1б изображен ММП процесс внутри бифункциональной среды НК L -матрицы:

1. Не обладающие диффузионной подвижностью ($\mathbf{D}_{1,2,6} = 0$) **1, 2, 6**-компоненты упомянутой $\{X_n\}$ -композиции являются участниками химических реакций (1), (2) с компонентами-участниками:

R_k^0 ; $p_{i(3,4)}^+$; $(R_k p_i)_{m(1,2)}$ (см. реакции (1), (2), ниже), где стадии адсорбции (Iа) — десорбции (Iд) изображены (вертикальными стрелками ($\downarrow \uparrow$) возле “наносайтов” (представленными схематически “штрихованными областями” на схеме рис. 1б).

Такое поведение участников ($(R_k p_i)_{(1,2)}$; $p_{i(3,4)}^+$; $R_{k(6)}^0$) реакций (1), (2) сопровождается “трансформацией их масс” и соответствует селективному ММП маршруту (I), где (Iа) есть стадия адсорбции для реакций (1) и (2), а (Iд) есть стадия десорбции для этих (1), (2) реакций (см. рис. 1б, 2). Реакции “адсорбции-десорбции” (1) и (2) реализуются на внедренных в синтезированную НК матрицу (рис. 1а–1в) фиксированных агломератов нуль зарядных наночастиц (НЧ⁰) в НК (рис. 1в, экспериментальное СЭМ микрофото [6]).

Подробнее селективный ММП маршрут (I), где проходит “трансформация масс” участников реакций (1), (2) и его соответствующий механизм: “сток–источник” (описываемый в неравновесной термодинамике) [7], обсуждается детально с

помощью рис. 2 (в разделе “механизм сток–источник”).

2. Диффузионно-подвижные ($\mathbf{D}_{3,4} > 0$) принципиальные (целевые) $p_{i(3,4)}$ -компоненты сорбата вместе с несорбирующимися $j = \text{An}_5^-$ -анионами (для которых $\mathbf{D}_5 > 0$) являются участниками многодиффузионного $\{\mathbf{D}_{3-5} > 0\}$ маршрута (II) в бифункциональном НК-сорбенте [1–5].

На рис. 1в, в качестве примера би-функциональной структуры НК показано СЭМ микрофото НК-матрицы, где “светлые точки” показывают агломераты НЧ⁰ ($\text{Me}^0 = \text{Ag}^0$) в матрице ионита-НК: Ag^0 -КУ-23 (рис. 1.12 [6]).

В статье приведены результаты теоретического компьютерного исследования в кинетическом ММП процессе с распространением концентрационных $X_n(L, T)$ -волн внутри мембраны комбинированного НК-ионита КУ-23 (где НЧ⁰ = $\text{Me}^0 = \text{Ag}^0$) [6]. Процесс распространения X_n -волн-профилей ММП в НК L -мембране (рис. 1а) проходит в горизонтальном направлении к выходу ($L = 0$, слева) вдоль черной стрелки (налево направо) от входа (где $L = 1$). На рис. 1а, 1б изображены $J_{p,j}$ — потоки масс диффундирующих ($\mathbf{D}_{3,4} > 0$) $p_{i(3,4)}$ -принципиальных (целевых) компонентов сорбата в НК-матрице проходят через среду бифункциональной, комбинированной НК-матрицы (рис. 1а, 1б). При этом процесс ММП осуществляется путем распространения в НК среде многокомпонентных $\{X_n(L, T)\}$ -концентрационных волн-профилей (фронтальный режим, рис. 1а, 1б) налево (к выходу, $L = 0$) справа (от входа, $L = 1$), т.е. вдоль “черной стрелки” на рис. 1а, 1б.

В последней части статьи (на рис. 3–6) показано визуально “горизонтальное” распространение ММП процесса в НК путем движения через пла-

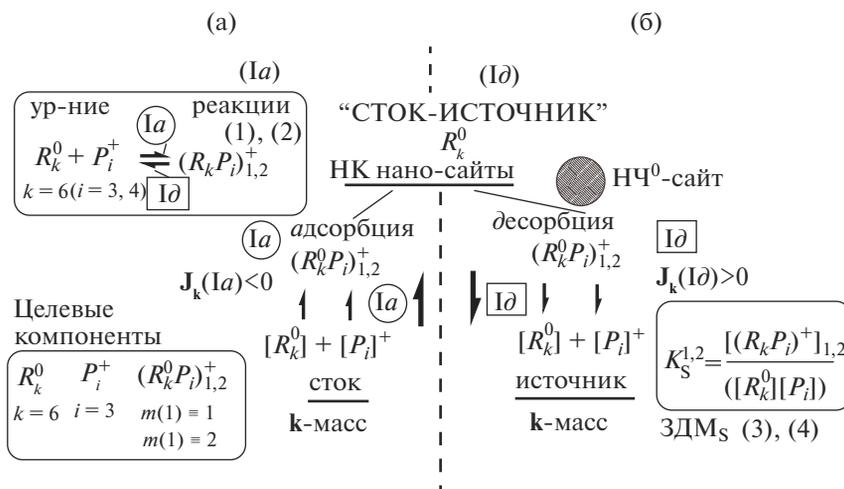


Рис. 2. Механизм “*k*-сток (Ia, слева от вертикали-пунктира)” и “*k*-источник (Ib, справа от вертикали-пунктира)” для реакций (1), (2) (слева, вверху в рамке) и (3), (4) ЗДМ_S-соотношений (справа, внизу в рамке). Пояснения в тексте.

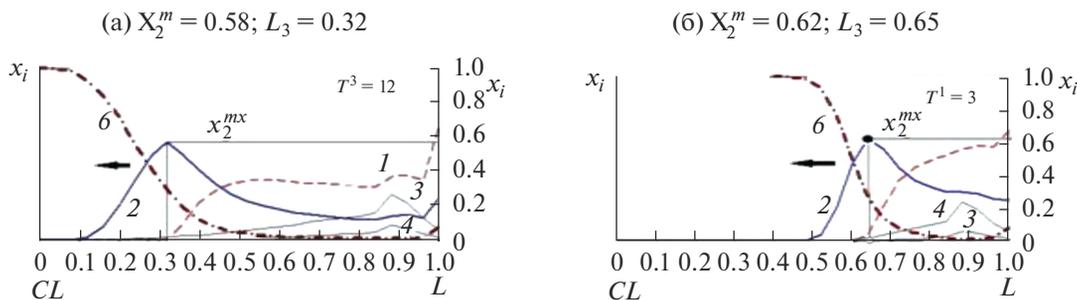


Рис. 3. (вариант IА). Кадры-фреймы движения. $X_{1,2,6}(L, T)$ -волн (налево, к (а) $T^3 \leftarrow$ справа, от (б) T^1). ВР распространения 1,2,6-волн через НК L -мембрану: 1 – вытеснитель (пунктир); интегральная 6 – волна (штрих-пунктир). Параметры: L ; ($T^3 > T^1$); $K_S^{1,2}$; $\{D_{3-5}\}$; $X_{1,2}^0$; X_n – безразмерные; ${}_{1A} K_S^{1,2}$ (400; 50).

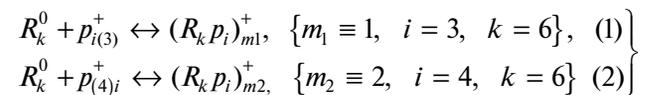
нарную НК L -мембрану с течением времени T концентрационных $\{X_n(L, T)\}$ -волн-профилей (соответственно схеме на рис. 1а, 1б), образующихся в процессе ММП. Расчет $\{X_n(L, T)\}$ -концентрационных волн осуществляется компьютерным численным моделированием на основе подхода термодинамики неравновесных ММП процессов [7].

Представленные схемы на рис. 1а, 1б разработанной здесь комбинированной, бифункциональной ${}^{\text{mod}k(2)}(6)$ -“НК-модели” реализуют две возможности процесса ММП в НК-сорбенте на двух (I и II) со-маршрутах (см. рис. 1):

1) “трансформация масс” за счет двух (1), (2)-реакций адсорбции–десорбции на селективном ММП (I)-маршруте в НК (рис. 1б, 2), с участием $R_{k(6)}^0$ -“наносайтов” в НК (которые показаны “штрихом” на рис. 1б, 2);

2) многодиффузионный ($D_{i(3,4),5} > 0$, ММП со-маршрут, (II), рис. 1б) для ранее упомянутой кон-

центрационной композиции: $\{X_n = 6\} = \{(R_k p_i)_{(1,2)}^+\}$; $p_{i(3,4)}^+$; ($j = An_5^-$); и концентрации $R_{k(6)}^0$ -“наносайтов”, рис. 1. В рассматриваемой здесь $n(6)$ -компонентной системе ММП в НК для подвижных ($D_{3,4} > 0$) принципиальных $p_{i(3,4)}^+$ -компонентов сорбата (см. рис. 1б), имеют место: “селективные две реакции (1) и (2) “адсорбции–десорбции” вместе с соответствующими двумя соотношениями (3) и (4) закона действующих масс (ЗДМ_S), где $K_S^{1,2}$ – два параметра селективности для принципиальных компонентов: $p_{i(3,4)}^+$ -сорбата и $\{(R_k p_i)_{(1,2)}^+\}$; $R_{k(6)}^0$ -сорбента (где $m_{1,2} \equiv 1, 2$) в НК-сорбенте, т.е.



и соответствующие ЗДМ_S-соотношения:

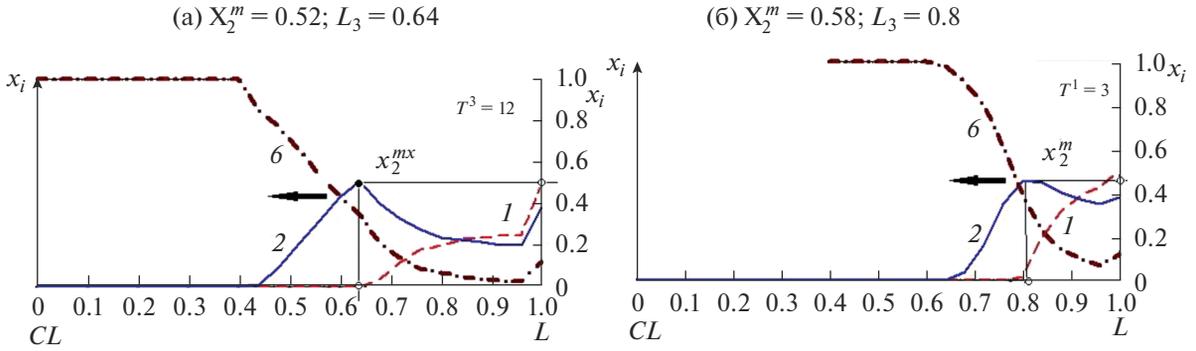


Рис. 4. (вариант 2А). Кадры-фреймы движения $X_{1,2,6}(L, T)$ -волн (налево, к (а) $T^3 \leftarrow$ справа, от (б) T^1). ВР распространения **1,2,6**-волн через НК L -мембрану: **1** – вытеснитель (пунктир); интегральная **6** – волна (штрих-пунктир). Параметры: L ; ($T^3 > T^1$); $K_S^{1,2}$; $\{D_{3-5}\}$; $X_{1,2}^0$; X_n – безразмерные; ${}_{2A}K_S^{1,2}$ (400; 50).

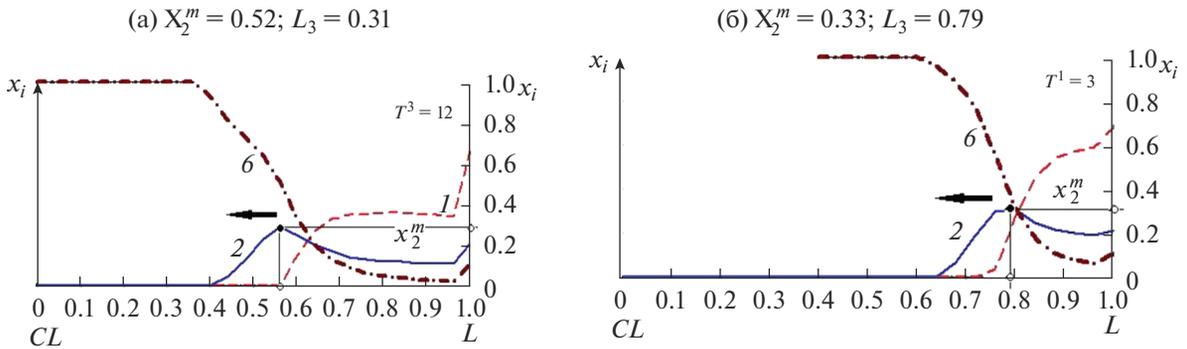


Рис. 5. (вариант 3В). Кадры-фреймы движения $X_{1,2,6}(L, T)$ -волн (налево, к (а) $T^3 \leftarrow$ справа, от (б) T^1). ВР распространения **1,2,6**-волн через НК L -мембрану: **1** – вытеснитель (пунктир); интегральная **6** – волна (штрих-пунктир). Параметры: L ; ($T^3 > T^1$); $K_S^{1,2}$; $\{D_{3-5}\}$; $X_{1,2}^0$; X_n – безразмерные; ${}_{3B}K_S^{1,2}$ (320; 40).

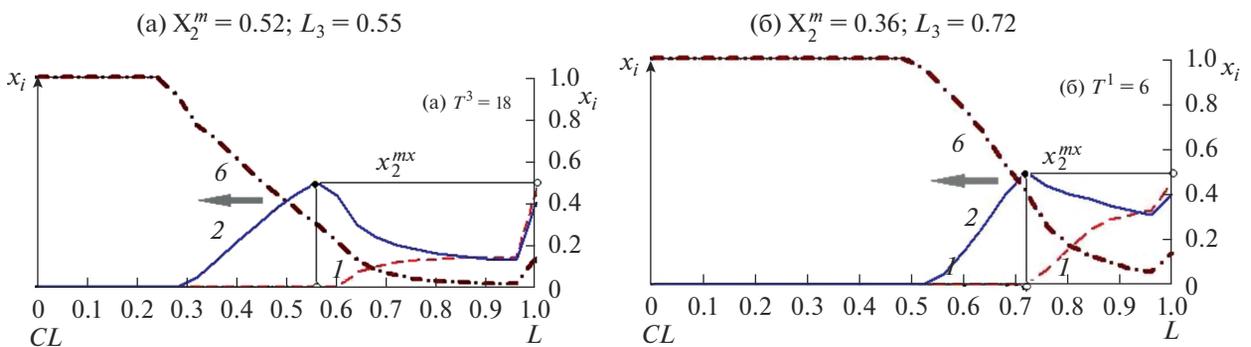


Рис. 6. (вариант 4В) Кадры-фреймы движения $X_{1,2,6}(L, T)$ -волн (налево, к (а) $T^3 \leftarrow$ справа, от (б) T^1). ВР распространения **1,2,6**-волн через НК L -мембрану: **1** – вытеснитель (пунктир); интегральная **6** – волна (штрих-пунктир). Параметры: L ; ($T^3 > T^1$); $K_S^{1,2}$; $\{D_{3-5}\}$; $X_{1,2}^0$; X_n – безразмерные; ${}_{4B}K_S^{1,2}$ (320; 40).

$$\left. \begin{aligned} K_s^1 &= \frac{[R_k p_i]_{m1}}{[R_k^0] [p_{i(3)}]}, \quad \{m_1 \equiv 1, \quad i = 3, \quad k = 6\}, \quad (3) \\ K_s^2 &= \frac{[R_k p_i]_{m2}}{[R_k^0] [p_{i(4)}]}, \quad \{m_2 \equiv 2, \quad i = 4, \quad k = 6\}, \quad (4) \end{aligned} \right\}$$

где $m_1 \equiv 1, m_2 \equiv 2$ и $K_s^{m1} \equiv K_s^1, K_s^{m2} \equiv K_s^2$ – два коэффициента, характеризующие селективность (S) целевых компонентов: “ $p_{i(3,4)}$ –сорбат и $(R_k p_i)_{m(1,2)}$ –НК-сорбент” в ММП НК-процессе, а “[] – квадратные скобки” означают соответствующие переменные концентрации компонентов: $[p_{i(3,4)}]; [R_k^0]; [(R_k p_i)]_{(1,2)}$ (см. также рис. 2).

Далее парные соотношения реакций (1) и (2), а также сопутствующие ЗДМ_S-соотношения (3), (4) для $[p_i]$ -сорбат; $[R_k p_i]_{(1,2)}$ -сорбент, и $[R_k^0]_{(6)}$ – концентраций “наносайтов” (рис. 1б, 1в) в рассматриваемой “расширенной” (по сравнению с предыдущей – k^{prev} (5) [1–5]) k^{mod} (6) – НК-модели имеют место, где наличествуют две ((1), (2)-реакции и соответствующие (3), (4) – ЗДМ_S соотношения (см. принципиальную схему k^{mod} (6) – НК-модели на рис. 2).

Диффундирующие ($D_{3,4}$) целевые $\{p_{i(3,4)}\}$ -компоненты сорбата, вступают в “парные” реакции (1) и (2), а именно: “прямые” (адсорбция →, *вправо*), и затем “обратные” (десорбция ←, *влево*) реакции с активными” $R_{k(6)}^0$ -наносайтами”, в комбинированных матрицах НК-сорбента (рис. 1б и (1), (2) реакции).

В результате парных (← обратные) стадий десорбции в (1) и (2) – реакциях для $(R_k^0 p_i)_{(1,2)}^+$ -компонентов – “комплексов” при десорбции в НК-сорбенте образуются фиксированные $R_{k(6)}^0$ -наносайты, выполняющие роль сорбента (1^c слагаемое в (1), (2)), а также принципиальные, подвижные ($D_{3,4} > 0$), $p_{i(3,4)}$ -компоненты сорбата (вторые слагаемые в (1), (2) реакциях).

Два ЗДМ_S-соотношения (3), (4) задают два $K_s^{m(1,2)}$ -коэффициента селективности, которые определяют вытеснительное поведение принципиальных $X_{1,2,6}(L, T)$ -концентрационных волн, показанное в движении ($\kappa T^3(a) \leftarrow$ от $T^1(b)$) на четырех вариантах рис. 3–6 (варианты 1, 2А–3, 4В) как результат компьютерного моделирования – исследования для принципиальных 1,2,6-компонентов фиксированных ($D_{1,2,6} = 0$) в НК-сорбенте.

На втором много-диффузионном $\{D_{3-5}\}$ ММП НК (II)-со-маршруте, сопутствующем “трансформации масс” на селективном (I)-маршруте

(рис. 1б и рис. 2), проходит процесс многокомпонентной $\{D_{3-5}\}$ -диффузии, а именно, диффузия ($D_{3,4} > 0$) подвижных $p_{i(3,4)}$ -компонентов сорбата, совместно с несорбирующимися, но диффундирующими анионами ($An_5^-, D_5 > 0$) в порах НК L -мембраны (где многодиффузионный $\{D_{3-5} > 0\}$, II со-маршрут, рис. 1б).

Диффузионные J_{p_i} -потоки ($p_{i(3,4)}^+$ -компонентов сорбата, рис. 1б) в порах НК-сорбента-мембраны описываются классическими соотношениями Нернста–Планка [1–5, 7] с учетом влияния электрического поля.

Диффузионный ММП со-маршрут, II (рис. 1б) для подвижных ($D_{3,4} > 0$) принципиальных $p_{i(3,4)}^+$ -компонентов сорбата (рис. 1б) включает несорбирующиеся (но диффундирующие, $D_5 > 0$ (An_5^- -анионы), где в качестве одного из примеров НК здесь рассматривается шести-компонентная $k^{mod}(6)$ -НК-модель ионита, содержащая в матрице НК агломераты нуль-зарядных нано-частиц (НЧ)⁰ металла (Me^0 , рис. 1в).

Кардинальным для рассматриваемого процесса ММП является компонент $R_{k(6)}^0$ –“наносайты” [1–5], которому в рассматриваемой здесь $n(6^{th})$ -компонентной $^{mod}k^{(2)}(6)$ -НК-модели целенаправленно приписывается роль активных $R_{k(6)}^0$ -наносайтов сорбента (рис. 1б, заштрихованы). Агломераты НЧ⁰ (активные центры $R_{k(6)}^0$ -наносайты) введены здесь в рассмотрение в НК-модели (как и ранее в [1–5]) целенаправленно, и названы “наносайтами” расположенными равномерно в матрице НК (рис. 1в).

Наносайты обозначены для $^{mod}k^{(2)}(6)$ -НК-модели в системе ММП НК под наибольшим номером: шестой (k)-компонент ($R_{k(6)}^0$). Принципиальный шестой компонент $R_{k(6)}^0$ (“наносайты”) выделен на рис. 1б (штрихованные “области”), а также и на рис. 2. Ключевой $R_{k(6)}^0$ -компонент играет роль сорбента для принципиальных подвижных ($D_{3,4} > 0$) $p_{i(3,4)}^+$ -компонентов сорбата, фиксирован в НК-матрице, и потому не диффундирует ($D_6 = 0$) в процессе ММП в НК (см. $R_{k(6)}^0$, рис. 1, 2).

Тем не менее следует подчеркнуть, что концентрационные $X_{k(6)}(L, T)$ -волны фиксированного (т.е. $D_6 = 0$) $R_{k(6)}^0$ -компонента распространяются в НК-матрице (см. рис. 3–6). Такое a -типичное распространение концентрационных $X_{k(6)}(L, T)$ -волн будет визуально представлено в заключение и объяснения будут даны.

Процесс ММП в НК рассматривается в данной системе шестикомпонентной $\{X_n\}$ -композиции с учетом “адсорбции (Ia)–десорбции (Id)” на ММП (I)-маршруте диффундирующих и сорбирующихся $p_{i(3,4)}^+$ -принципиальных компонентов (см. рис. 2).

Комбинированный процесс с двумя: (I, $K_S^{1,2}$ -селективный) и (II, $\{D_{3-5}\}$ -многодиффузионный) сомаршрутами ММП в НК изображен схематически на рис. 1б, 2, где соответственно “штрихованные области” есть активные $R_{k(6)}^0$ -“наносайты” (т.е. НЧ⁰-агломераты).

Применение разработанных ранее [1–5] и усовершенствованной здесь бифункциональной НК-модели ММП с расширением (в отличие от прежней термодинамической ${}^{\text{prev}}k^{(1)}(5)$ -вариантности с одной “парой” принципиальных $\{p_3$ и $(R_k p_3)_1^+$ “сорбат–сорбент” компонентов [1–5] до усовершенствованной здесь $k^{\text{mod}}(6)$ -НК-модели с двумя парами компонентов, а именно, с двумя парами диффундирующих $p_{i(3,4)}$ (где $D_{3,4} > 0$) и фиксированных $\{(R_k p_i)_{1,2}^+\}$ (где $D_{1,2} = 0$)-компонент. Таким образом, два подвижных $p_{i(3,4)}^+$ -сорбат компонента и два фиксированных $(R_k p_i)_{1,2}^+$ -компонента вместе с $R_{k(6)}^0$ -наносайтами сорбента составляют группу принципиальных 1-4,6-компонентов в $k^{\text{mod}}(6)$ -НК-модели (рис. 1б). Один диффузионно-подвижный пятый (5-й An_5^- -компонент – анионы) из упомянутой $\{X_n = 6\}$ -композиции не участвует в сорбционном ММП процессе (селективный маршрут, I) в НК. Однако, этот An_5^- -компонент играет важную роль в ММП процессе: он диффузионно подвижен ($D_5 > 0$) и участвует в стремлении ММП НК-системы концентраций к поддержанию электро-нейтральности в порах НК.

Участие принципиальных компонентов: $(R_{k(6)} p_i)_{1,2}^+$, $p_{i(3,4)}^+$ и $R_{k(6)}^0$ с учетом ЗДМ_S-соотношений (3), (4) приводит к $\{K_S^{1,2}\}$ -селективной сорбционной “трансформации масс” для принципиальных пяти: ($p_{i(3,4)}^+$ -сорбат, $(R_k p_i)_{1,2}^+$ -сорбент и ключевой $R_{k(6)}^0$ -компонентов (рис. 2).

Далее будет показано, что “трансформация масс” на селективном (I) ММП маршруте (посредством двух (1) и (2), реакций (со стадиями: адсорбции(Ia)–десорбции(Id), и двух соответствующих ЗДМ_S, (3) и (4)-соотношений, см. рис. 2) приводит к необычному распространению $X_{1,2,6}$ -концент-рационных волн недиффундирующих **1,2,6**-

компонентов (где $D_{1,2,6} = 0$) через НК матрицу (см. рис. 3–6).

Рисунки 3–6 демонстрируют движение $X_{1,2,6}(L, T)$ -концентрационных волн (см. кривые **1** (пунктир), **2** (сплошная) и **6** (штрих-пунктир) во времени, а именно: $k(a) \leftarrow$ (от б)) и в пространстве вдоль L по горизонтали ((т.е. *налево-справа*) к выходу, (где $L = 0$) от входа, ($L = 1$) (см. рис. 3–6).

На основе разработанной ${}^{\text{mod}}k^{(2)}(6)$ -НК-модели, и соответствующего механизма трансформации масс: “ k -сток”–“ k -источник” (рис. 2), а также системы шести уравнений материального ММП баланса ($n = 6$, см. уравнения *ниже*) неравновесной термодинамики [7] реализовано компьютерное решение системы шести кинетических уравнений (5) массопереноса в частных производных, включенных в данное здесь численное моделирование-исследование ММП НК-процесса.

Численное компьютерное моделирование (на основе математического метода “прогонки” с применением метода обращения математических шести-компонентных матриц и многократных итераций [1–5]) осуществлено для представленной вначале статьи $n(6)$ -компонентной сорбционной НК ММП системы, которая основана на описании процесса шестью кинетическими дифференциальными уравнениями материального баланса. (Система уравнений баланса масс с меньшей варианностью ${}^{\text{prev}}k^{(1)} = 5$ дана ранее в [1–5].)

При компьютерном моделировании в данной работе в систему дифференциальных $n(6)$ -уравнений (5) материального баланса включены принципиальные характеристики и параметры (безразмерные) усовершенствованной и расширенной ${}^{\text{mod}}k^{(2)}(6)$ -НК-модели (рис. 2–6).

МЕХАНИЗМ СТОК–ИСТОЧНИК И ТРАНСФОРМАЦИЯ МАСС

На рис. 1б, 2 изображены две стадии двух реакций (1) и (2): адсорбции (“прямая” стадия, Ia → “слева-вверх” на рис. 2), и десорбции (“обратная” стадия, Id ← “слева-вверх” на рис. 2) для селективного ММП (I)-маршрута, включая два принципиальных $p_{i(3,4)}^+$ -компонента сорбата (стадии Ia, Id на рис. 2).

Дополнительно на рис. 2 представлены уравнения двух реакций (1), (2) (с индексами $\{i_{3,4}; m_1, 2$, где $m_1 \equiv 1; m_2 \equiv 2\}$) и соответствующих ЗДМ_S соотношений (3), (4) для $K_S^{1,2}$ -параметров селективности. На рис. 2, возле уравнений (1), (2) (вверху, *слева в рамке*) указано соответствие стрелок в уравнениях реакций (1), (2) – двум упомянутым стадиям: Ia, адсорбции (*слева* от “вертикали-

пунктира”) и I_d , десорбции (*справа* от “вертикали-пунктира” на рис. 2).

В результате использования двух реакций (1), (2) (маршрут **I**, рис. 1б, 2) для каждого из двух целевых $p_{i(3,4)}$ -компонентов сорбата происходят две стадии реакций (1), (2) изображенных (для $m_{1,2}$ -компонентов) на рис. 2 (*вверху* в рамке): “адсорбция” ($I_a \rightarrow$), и “десорбция” ($I_d \leftarrow$).

На рис. 2 приведена схема работы механизма: “ k -сток (I_a) – k -источник (I_d)” на примере уравнений реакций (1), (2) и соответствующих $K_S^{1,2}$ -ЗДМ_S соотношений (3), (4) (на рис. 2 соотношения (3), (4) изображены *справа внизу* в рамке).

В двух реакциях (1) и (2) при участии $R_{k(6)}^0$, компонента в результате адсорбции (при переходе адсорбция (I_a , (1), (2) на рис. 2, *вверху*, и концентрация $[R_{k(6)}^0]$ – “убывает”). При этом компонент $R_{k(6)}^0$ играет роль: “ k -стока (I_a) на рис. 2, и “темная стрелка” *вверх, слева от вертикали-пунктира*), где происходит перенос массы из “свободного” $R_{k(6)}^0$ -компонента в “связанные, $(R_k p_i)_{m(1,2)}^+$ -комплексы” (рис. 2, (I_a), *слева от вертикали*). Затем обратно при десорбции (I_d) происходит перенос массы в направлении от $(R_k p_i)_{m(1,2)}^+$ -комплексы” к $R_{k(6)}^0$ (“темная стрелка” *вниз справа от вертикали-пунктира*, см. рис. 2, стадия (I_d)-десорбция).

“Трансформация k -масс” на маршруте (**I**) происходит для любой из стадий (I_a и I_d , рис. 2, *вверху* в рамке) для “селективных реакций (1) и (2) (см. *вверху слева* в рамке) с учетом соответствующих ” $K_S^{1,2}$ -ЗДМ_S соотношений (3), (4) (представленных на рис. 2, *внизу справа* в рамке) для каждой пары: $\{m_1; i_3\}$, реакция (1) или $\{m_2; i_4\}$, реакция (2) из четырех участников ММП НК $\{m_{(1,2)}; p_{i(3,4)}\}$ сорбционного процесса, описываемого (3), (4) ЗДМ_S соотношениями и уравнениями реакций (1), (2) (см. рис. 2).

Обратный переход при десорбции (I_d) в уравнениях реакций (1), (2) (рис. 2, *вверху слева* в рамке) от “ $(R_k p_i)_{m(1,2)}$ -компонентов” в “свободные” $R_{k(6)}^0$; $(p_i)^+$ -компоненты в уравнениях (1), (2) ведет к тому, что $[R_{k(6)}^0]$ – “возрастает” (I_d) и тогда к нему применяется термин [7] “ k -источник”, (I_d) на рис. 2.

Совместный механизм “сток–источник” [7] наглядно изображен на рис. 2 для $m_{1,2}$ -компонентов (где “ k -сток” (I_a)-*слева*, от вертикали-пунктира), а “ k -источник” (I_d)-*справа* от вертикали-пунктира на рис. 2.

Как было указано ранее, действия механизма “ k -сток– k -источник” для уравнений реакции (2)

и ЗДМ_S соотношения (4) демонстрируются на том же рис. 2. В итоге созданная $n(6^m)$ -компонентная $k^{\text{mod}}(6)$ -модель ММП в НК приобретает механизм “трансформации масс”, называемый в неравновесной термодинамике [7] “сток (I_a)–источник (I_d)”, и наглядно представленный здесь на рис. 2.

В соответствии с вышеприведенным объяснением “темные стрелки” (направленные “вверх”, слева от вертикали-пунктира) показывают уменьшение массы $R_{k(6)}^0$ -компонента, за счет перехода части k -массы в состав $(R_k p_i)_{m(1,2)}^0$ – “комплексов”.

Наоборот, “темные стрелки” (направленные “вниз”, справа от вертикали-пунктира, рис. 2) показывают увеличение массы $R_{k(6)}^0$ -компонента, за счет I_d (десорбции и “распада $(R_k p_i)_{m(1,2)}^0$ -комплексов”), и следовательно показывают соответствующий переход части k -массы обратно в “свободное состояние” $R_{k(6)}^0$ -компонента (см. рис. 2, *слева* (I_a) и *справа* (I_d) от “вертикали-пунктира”).

Механизм “сток–источник” [7] на (**I**)-маршруте ММП влияет на направления $J_k(\mathbf{I})$, $J_p(\mathbf{I})$; $J_{m(1,2)}(\mathbf{I})$ -потоков масс компонентов следующим образом (см. рис. 2):

а) на этапе адсорбции (I_a) в реакциях (1), (2) соотношения для потоков $k_{(6)}$, i_3 , $m_{1,2}$ -компонентов принимают вид: $J_k(\mathbf{I}_a) < 0$; $J_{i(3,4)}(\mathbf{I}_a) < 0$; $J_{m(1,2)}(\mathbf{I}_a) > 0$, (см. рис. 2, *слева от вертикали-пунктира*, I_a – “сток” k -масс);

б) на этапе десорбции (I_d) в реакциях (1), (2) соотношения для потоков $k_{(6)}$, i_4 , $m_{1,2}$ -компонентов принимают вид: $J_{k(6)}(\mathbf{I}_d) > 0$; $J_{i(3,4)}(\mathbf{I}_d) > 0$; $J_{m(1,2)}(\mathbf{I}_d) < 0$ (см. рис. 2, *справа от вертикали-пунктира*, “источник” k -масс).

Ключевой и принципиальный для моделирования ММП в НК $R_{k(6)}^0$ -компонент (“наносайты”) замыкает рассматриваемую $n(6)$ -компонентную ММП НК систему и определяет наличие “адсорбции (I_a)–десорбции (I_d)” на рис. 2. Естественно, что $R_{k(6)}^0$ -компонент определяет возможность реализации компьютерного расчета с использованием важнейшего механизма неравновесной термодинамики “ k -сток (*слева от вертикали* (адсорбция, I_a , темная стрелка *вверх*) и k -источник (*справа от вертикали* (десорбция, I_d), темная стрелка *вниз*)” (рис. 2).

Далее компьютерный расчет системы шести кинетических дифференциальных уравнений (5) ММП в НК планарной матрице-мембране (рис. 1б, 2) с учетом реакций (1), (2) и ЗДМ_S (3), (4) соотношений представляет, как результат – распространяющиеся $X_{1-6}(L, T)$ -концентрационные волны

(во времени T , и в L -пространстве). Компьютерные результаты для диффузионно подвижных ($\mathbf{D}_{3-5} > 0$) расчетных принципиальных волн $X_{3,4}$ представлены на рис. 3 (и опущены на дальнейших рис. 4–6, чтобы не затемнять движение a -типичных $X_{1,2,6}(L, T)$ -концентрационных волн).

В процессе компьютерного моделирования (т.е. численного расчета по системе дифференциальных уравнений (5) материального баланса, в расчет включаются механизмы $k^{(2)}$ (6)-НК-модели, такие как упомянутые “трансформация масс” в реакциях (1) и (2), “ k -сток и k -источник”, (рис. 2) с наличием двух ММП селективного, (I) и много $\{\mathbf{D}_{3-5}\}$ -диффузионного (II)-со-маршрутов) в бифункциональной НК матрице (рис. 1б, 2).

В результате перечисленных механизмов и уравнений в среде, НК-матрице распространяются недиффундирующие (поскольку $\mathbf{D}_{1,2,6} = 0$), и принципиальные $\{X_{1,2,6}(L, T)\}$ -концентрационные волны, которые по типу их движения можно назвать “ a -типичными” или “необычными” (рис. 3–6): $T^{1,3}$ -серия; распространяющиеся атипичные $X_{1,2,6}(L, T)$ -концентрационные волны.

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ МАТЕРИАЛЬНОГО БАЛАНСА В НК И ВОЛНОВАЯ (W)-КОНЦЕПЦИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ВОЛН

На основе разработанной $\text{mod}k^{(2)}$ (6)-модели и система n (6)-уравнений материального баланса (5) неравновесной термодинамики [7] для НК реализовано численное компьютерное решение (на основе математического метода “прогонки” с применением обращения математических матриц и многократных итераций [1–5]) для представленной n (6)-компонентной сорбционной НК системы ММП, которая основана на описании процесса n (6)-кинетическими дифференциальными уравнениями (5) материального баланса.

Вышеупомянутая расширенная система дифференциальных n (6)-уравнений материального баланса для $\text{mod}k^{(2)}$ -НК модели принимает вид

$$\underbrace{\frac{\partial X_n}{\partial T}}_{\text{Изменение } n\text{-масс}} = \underbrace{-\text{div}(J_n)}_{\text{Диффуз. (II) со-маршрут}} + \underbrace{S_n^m}_{\text{Селективный (I) маршрут}}, \quad (5)$$

$$n = m_{1,2} \equiv 1, 2; \quad p_{i(3,4)}^+; \quad \text{An}_5^-; \quad k = 6$$

$$\{X_n\} = \{R_k p_i^+_{(1,2)}; \quad P_{i(3,4)}^+; \quad \text{An}_5^-; \quad R_{k(6)}^0\}$$

$\{X_n\}$ -композиция.

Для предыдущих $\text{prev}k^{(1)}$ -НК-моделей соответствующие дифференциальные уравнения приведены в работах [1–5]. При компьютерном моделировании в данной работе в дифференциальные n (6)-уравнения материального баланса включены принципиальные характеристики и (безразмер-

ные) параметры расширенной и усовершенствованной $\text{mod}k^{(2)}$ -модели НК (см. следующий раздел и подписи к рис. 3–6).

В представлении результатов рассматриваемой задачи ММП в НК сорбентах используется фундаментальная волновая (W)-концепция термодинамики неравновесных процессов [7–9]. Здесь уместно определить понятие “распространение (концентрационных) волн”, следуя фундаментальной работе [10], как: “распространение возмущения (здесь концентраций) в среде (НК-матрице) с течением времени (T)”.

Для компьютерных расчетов много- n (6)-компонентных $\{X_n(L, T)\}$ -концентрационных волн распределений в планарной НК L -мембране используются: система (5) дифференциальных n (6)-уравнений, (где $n = 1, 2, k(6)$), механизм преобразования масс “сток”(слева)-“источник” (справа) на рис. 2, (выше), определяемый соотношениями (ЗДМ₅, (3), (4)); фундаментальные уравнения Нернста–Планка для J_n -потоков масс” (рис. 1б); соотношение электро-нейтральности и ряд других.

В данной работе на основе волновой (W)-концепции изучается взаимодействие многокомпонентных, $\{X_n(L, T)\}$ -концентрационных волн n (6)-компонентов при их распространении через планарную НК L -мембрану (см. схему на рис. 1а, 1б, а также рис. 3–6).

Здесь, а также, особенно, в устных презентациях [1–5, 11, 12] распространение взаимодействующих $\{X_n(L, T)\}$ -концентрационных волн n (6)-компонентов демонстрируется на основе разработанного и использованного ранее метода визуализации [1–5, 11–13], в котором после компьютерной обработки численных результатов моделирования создаются многоцветные научные компьютерные анимации (НКА.avi-видеофайлы), с использованием различных цветов (по возможности) для каждого из рассматриваемых n (6)-компонентов в многоцветных “НКА.avi”-видео-файлах.

Для демонстрации результатов расчетов, которые содержат распространяющиеся в среде НК-сорбента много(n)-компонентные $\{X_n\}$ -концентрационные волны (см. рис. 3–6 (для вариантов 1, 2 (А, рис. 3, 4) и 3, 4 (В, рис. 5, 6)) разработан метод визуализации для $\{X_n\}$ -распространяющихся волн посредством создания научных компьютерных анимаций (“НКА.avi”-видео-файлов), и их демонстрации в устных презентациях (для научных аудиторий во время семинаров и конференций) [1, 11–13]. Упомянутый метод визуализации используется около 15 лет на научных семинарах, а также на международных и всероссийских конференциях [1, 11–13].

Фундаментальная феноменологическая (W)- “волновая” концепция многокомпонентных $\{X_n(L, T)\}$ -расстояние, T -время}-концентрационных волн (см.

пример для рассматриваемого кинетического ММП НК-процесса на рис. 3–6) широко используется в термодинамике неравновесных процессов во многих научных областях для теоретического описания много-компонентного транспорта в кинетике и динамике ММП для сорбционных систем. Волновая (W)-концепция распространяющихся $\{X_n(L, T)\}$ -волн, и ее использование в много-компонентной кинетике и динамике сорбции подробно рассматривается в работах [1–5, 8, 9, 11–13].

В обширных обзорах [8, 9] представлена феноменологическая волновая (W)-концепция, которая имеет широкую область применения в таких областях исследования как процессы перколяции, механика жидкости, газовая динамика, теория горения, и даже движение транспорта и ряда других.

Интерференция-взаимодействие не-диффундирующих (ввиду отсутствия диффузии, $D_{1,2,6} = 0$), но при этом распространяющихся $\{X_{1,2,6}(L, T)\}$ -концентрационных волн приносит в рассмотренных фронтальных режимах: на рис. 3, 4 (варианты 1, 2А и на рис. 5, 6 (варианты 3, 4В) “хроматографический” вытеснительный режим (ВР)” в поведение двух интерферирующих волн, а именно: поведение $X_1(L, T)$ -волны 1-вытеснителя (пунктир), и $X_2(L, T)$ -концентрационной волны вытесняемого 2-компонента (сплошная) на рис. 3, 4 и на рис. 5, 6.

Воздействие разработанной $mod k^{(2)}$ -НК ММП модели фундаментально важно для исследования интерференции “необычных, распространяющихся не за счет диффузии, (т.к. $D_{m(1,2),6} = 0$) атипичных $\{X_{1,2,6}(L, T)\}$ -концентрационных волн, а за счет комбинации “трансформации масс” (1), (2) и сопутствующего механизма: “*k-сток (Ia, слева)* и *k-источник (Iд, справа)*” (рис. 2). Такие “необычные, недиффундирующие (но тем не менее, распространяющиеся) $X_{1,2,6}(L, T)$ -волны рассчитаны в результате примененной здесь разработанной ММП НК $mod k^{(2)}$ - (6) модели (рис. 1б, 2) и компьютерного численного моделирования.

Для расчетов много ($n = 6$)-компонентных $\{X_n(L, T)\}$ -концентрационных волн-распределений в планарной НК L -мембране ($n = 1, 2, \dots, 6$, на рис. 3, 4 (варианты 1, 2А) и на рис. 5, 6 (варианты 3, 4В) используется механизм преобразования масс “*k-сток (слева)* и *k-источник (справа)*” на рис. 2) с учетом соотношений (ЗДМС, (3), (4)), а также фундаментальные уравнения Нернста–Планка для J_n -потоков масс” (рис. 1а, 1б); соотношение электро-нейтральности и ряд других [1–5].

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ММП В НК И ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты компьютерного расчета представлены далее на рис. 3–6 наглядно и визуально в виде

отдельных остановленных для двух произвольных моментов времени (T^1, T^3) “видео-кадров”-одинаковых по размеру-рамке изображения (названных здесь “кадрами-фреймами”) и скопированных из компьютерных расчетных “НКА.avi анимаций”, созданных на основе компьютерной обработки расчетов в данной работе при моделировании для различных величин исходных параметров ММП процесса: $K_S^{1,2}$ -коэффициентов селективности и концентраций $X_{1,2}^0$ на входе (где $L = 1$) в НК-матрицу (см. подписи к рис. 3–6). Компьютерное моделирование и рассмотрение результатов для шестикомпонентных кинетических ММП НК-процессов проведено для четырех вариантов: 1, 2 (А, рис. 3, 4), а также 3, 4 (В, рис. 5, 6).

В компьютерном моделировании кинетического ММП процесса через планарную НК-мембрану (рис. 1б) реализуется переменная $[R_{k(6)}^0]$ -концентрация, где волновые X_6 -кривые, (штрих-пунктир) показаны в принципиальной интегральной $X_{k(6)}(L, T)$ -концентрационной $k(6)$ -волне “наносайтов” (штрих-пунктир, кривые 6) на рис. 3–6, для вариантов: 1, 2А и 3, 4В.

Концентрационная $X_6(L, T)$ -волна в области безразмерных нормированных концентраций ($1 \geq X_6(L, T) \geq 0$) для “свободных” $R_{k(6)}^0$ -“наносайтов” (рис. 3–6, кривые 6, штрих-пунктир) носит интегральный характер с плавным, ниспадающим (от 1 до 0) $X_{k(6)}(L, T)$ -профилем (см. интегральные кривые, 6, штрих-пунктир на рис. 3–6).

Компьютерное моделирование показывает кардинальное влияние величин параметров селективности (K_S^1) вытеснителя (1) при сравнении вариантов 1, 2А (где $A K_S^1 = 400$, рис. 3, 4) с вариантами 3, 4В (где $B K_S^1 = 320$, рис. 5, 6). Хроматографический Вытесненный эффект для концентрационных волн $X_{1,2}$ вытеснителя (1) и вытесняемого (2) компонентов очевиден и гораздо больше при большем значении селективности $A K_S^1$ (рис. 3, 4), чем при меньшем $B K_S^1$ (рис. 5, 6).

При одинаковых значениях K_S^1 -селективности 1-вытеснителя (т.е. при сравнении вариантов: $A K_S^1 = 400$ (А, варианты 1 и 2) и $B K_S^1 = 320$ (В, варианты 3 и 4) эффект вытеснения тем больше, чем больше X_1^0 -входная концентрация вытеснителя (1). Таким образом, при сравнении вариантов 1А и 2А (ср. рис. 3 и 4) или 3В и 4В (ср. рис. 5 и 6) очевидно что, чем больше X_A^0 -концентрация (рис. 3 и 4, где $X_{1A}^0 > X_{2A}^0$) или X_B^0 -концентрация (рис. 5 и 6, где $X_{3B}^0 > X_{4B}^0$), тем быстрее проходит

обсуждаемый процесс ММП в НК, т.е. сравнение рис. 3–6 показывает:

$${}_{1A}L_{2m}(T^3) = 0.32 \text{ (рис. 3)} < {}_{2A}L_{2m} = 0.63 \text{ (рис. 4),}$$

и

$${}_{3B}L_{2m}(T^3) = 0.52 \text{ (рис. 5)} < {}_{4B}L_{2m} = 0.57 \text{ (рис. 6)}.$$

Самым медленным ВР является (вариант 4В, рис. 6) процесс ММП в НК с меньшей селективностью ${}_B K_S^1(320)$ и с наименьшей входной концентрацией ${}_4 X_1^0(0.45)$, где ${}_{4B}L_{2m} = 0.57$ и ${}_{4B}T^3 = 18$ (рис. 6, вариант 4В).

Самым быстрым ВР является (вариант 1А, рис. 3) процесс ММП в НК с большей селективностью ${}_{1A} K_S^1(400)$ и с большей входной концентрацией: ${}_{1A} X_1^0(0.67)$, где ${}_{1A}L_{2m} = 0.32$ и ${}_{1A}T^3 = 12$ (рис. 3, вариант 1А).

На парных рис. 3а, 3б–6а, 6б представлены “кадры-фреймы” движения $X_{1,2,6}(L, T)$ -волн для временных интервалов $(T^3 - T^1)$. Вытеснительный режим (ВР) распространения **1,2,6**-концентрационных волн через НК L -мембрану: **1**-вытеснитель, (пунктир); интегральная **6**-волна (штрих-пунктир). Движение–распространение X_n -волн в течение ВР проходит на парных рисунках 3а, 3б–6а, 6б: $\kappa(a) \leftarrow$ от (б) (т.е. *налево* \leftarrow *справа*). Значения общих параметров κ вариантам 1, 2А (рис. 3, 4)–3, 4В (рис. 5, 6): $\{D_{35}\} = \{0.11; 0.055; 0.02\}$.

На рис. 3, 4 виден *сильный* эффект вытеснения, для селективности $\{{}_A K_S^{1,2} = 400; 50\}$; в то время как для меньшей селективности $\{{}_B K_S^{1,2} = \{320; 40\}$ на рис. 5, 6 виден *слабый* эффект вытеснения.

Влияние величин входных концентраций компонентов на вытеснительный режим концентрационных волн в матрице НК для четырех вариантов, 1, 2А и 3, 4В) компьютерного моделирования.

Движение–распространение X_n -волн в НК во времени (T): $\kappa T^3 \leftarrow$ от T^1

$${}_{1A} X_1^0(0.67) > {}_{2A} X_1^0(0.50)$$

1. А. ${}_{1A} K_S^1 = 400$; ${}_{1A}\{X_1^0 = 0.67; X_2^0 = 0.25\}$. Самый быстрый процесс

$$(a) X_2^{\text{mx}} = 0.57; L_2 = 0.32,$$

$$(б) X_2^{\text{mx}} = 0.62; L_2 = 0.63.$$

2. А. ${}_{2A} K_S^1(400)$; ${}_{2A}\{X_1^0 = 0.50, X_2^0 = 0.38\}$;

$$(a) X_2^{\text{mx}} = 0.51; L_{2m} = 0.64;$$

$$(б) X_2^{\text{mx}} = 0.46; L_{2m} = 0.81,$$

$${}_{3B} X_1^0(0.68) > {}_{4B} X_1^0(0.45).$$

3. В. ${}_{3B} K_S^1 = 320$; ${}_{3B}\{X_1^0 = 0.68; X_2^0 = 0.21\}$.

$$(a) X_2^{\text{mx}} = 0.31; L_{2m} = 0.52;$$

$$(б) X_2^{\text{mx}} = 0.35; L_{2m} = 0.76.$$

4. В. ${}_{4B} K_S^1(320)$; ${}_{4B}\{X_1^0 = 0.45; X_2^0 = 0.4\}$; самый медленный процесс $T^3 = 18$

$$(a) X_2^{\text{mx}} = 0.52; L_{2m} = 0.57;$$

$$(б) X_2^{\text{mx}} = 0.52; L_{2m} = 0.72.$$

ВЫВОДЫ

Применение фундаментальных концепций неравновесной термодинамики [7] с включением разработанной и “расширенной” $k^{\text{mod}}(6)$ -би-функциональной НК-модели (с увеличенной термодинамической вариантностью- $k^{\text{mod}}(6)$) приводит к неизвестному ранее (для би-функциональной НК-матрицы) результату: возникает вытеснительный режим (ВР) в кинетике ММП НК, когда в процессе участвуют две “пары” принципиальных компонентов: “сорбат ($p_{i(3,4)}$ -сорбат ($m_{1,2}$)), а именно $\{p_{i(3,4)}$ -сорбат и ($R_{k(6)}p_i$)-сорбент}. Кардинальное отличие расширенной бифункциональной $k^{\text{mod}}(6)$ – НК-модели от предшествующих k^{prev} (5) [1–5] дает возможность проводить исследование кинетики ММП в НК при *взаимодействии* сорбирующихся **1,2,6**-принципиальных компонентов, которое включает взаимодействие a -типичных (необычных) $X_{1,2,6}$ -концентрационных волн.

Результат моделирования с использованием би-функциональной ${}^{\text{mod}}k^{(2)}(6)$ -НК-модели и подхода неравновесной термодинамики показывает наличие вытеснительного режима (ВР) и его зависимость от определяющих параметров сорбционных НК ММП систем, а именно от величин $K_S^{1,2}$ -селективностей, а также от входных $X_{1,2}^0$ -концентраций для каждого из четырех вариантов на рис. 3–6 (варианты 1, 2А–3, 4В).

Показано a -типичное (*не-обычное*) поведение $X_{1,2,6}$ -концентрационных волн, где компоненты **1, 2, 6** не обладают диффузионной подвижностью ($D_{1,2,6} = 0$). Тем не менее, в отсутствии диффузии ($D_{1,2,6} = 0$) a -типичные $X_{1,2,6}$ – концентрационные волны распространяются в среде НК. Физический смысл распространения a -типичных $X_{1,2,6}$ -волн ($D_{1,2,6} = 0$) состоит в том, что движение $X_{1,2,6}$ -волн проходит за счет “трансформации масс” в реакциях адсорбции–десорбции (**1а** (*слева*) и **1б** (*справа*) на рис. 2), и за счет комбинации движения принципиальных диффундирующих ($D_{3,4} > 0$) $p_{i(3,4)}$ -компонентов сорбата совместно с “трансформацией масс” $\{(R_{ki})_{1,2} \text{ и } R_{k(6)}\}$ в сорбенте (на маршруте (**1**), см. (1), (2)-соотношения реакций на рис. 2), где происходит “трансформация k -масс” на основе механизма (“ k -сток и k -источ-

ник”, рис. 2) и соответствующее перемещение-распространение a -типичных $X_{1,2,6}$ -волн концентраций.

Многокомпонентные (и соответственно многоцветные) распространяющиеся и взаимодействующие $X_{1,2,6}$ -концентрационные волны в кинетике (и динамике [1, 4, 5, 11–13]) ММП процессов представлялись на демонстрационном экране в виде визуальных научных компьютерных анимаций (т.е. иначе “НКА.avi”-видео-файлов) для научных аудиторий в устных презентациях: как, например, на международных “IEx 2004–2008–2012” (Кембридж) [1, 11, 12], а также и на всероссийских конференциях, особенно в последнюю декаду (2008–2018 гг., например, Воронеж, ВГУ, ”Фрагран 2018”, окт., пленарный доклад [13]).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kalinitehev A.I.* // In: “IEX2012”. El. Book, Ed. by M. Cox. Lond. Soc. Chem. Ind. (SCI). S. Fundam. 2012. P. 1.
2. *Kalinitehev A.I.* // Prot. Met. & Phys. Chem. Surf. (Ed. Springer): 2013. V. 49. № 6. P. 627. Ed. <https://doi.org/10.1134/S2070205113060051>. <http://www.springerlink.com/openurl.asp?genre=article&ID>
3. *Kalinitehev A.I.* // Advances in Nanoparticles. 2013. V. 2. № 2. P. 1:(SCIRP). May 27. E-J-1. <https://doi.org/10.4236/anp.2013.22028> (Site.ID: 31894).
4. *Kalinitehev A.I.* // Review in “Nanotechnology Reviews” NTREV. (Ed. by Jae. Seung. Lee. S. Korea). 10.08.2014. V. 3. № 5. P. 465–496. online: 2014. <https://doi.org/10.1515/ntrev-2014-0007>
5. *Калиничев А.И.* // Сорбционные и хроматографические процессы. 2016. Т. 16. № 6. С. 748. (in English).
6. *Кравченко Т.А., Полянский Л.Н., Калиничев А.И. и др.* Нано Композиты Металл–Ионообменник. М.: “Наука”, 2009. 390 с.
7. *Хаазе Р.* Термодинамика необратимых процессов. (Гл. 2; 4). М.: “Мир”, 1967. 543 с.
8. *Helffferich F., Klein G.* Multicomponent Chromatography. Theory of Interference. N.Y., M. Dekker Inc., 1970. 360 p.
9. *Калиничев А.И.* // Успехи химии. 1996. V. 65. № 2. С. 103. <https://doi.org/10.1070/RC1996v065n02ABEH000201>
10. *Witham G.B.* Linear and Nonlinear Waves. Wiley & Sons Inc. N.Y. 1974. 625 p.
11. *Kalinitehev A., Hoell W.* // In: Proceedings. Book “IExThechnology for Today and Tomorrow”. S. Fundamentals. Ed. by M. Cox (UK), Soc. Chem. Ind. (SCI).www.soci.org. Lond. 2004. P. 349. Cambridge (4–8 July 2004).
12. *Kalinitehev A., Hoell W.* // In: Soc. Chem. Ind. (SCI), Lond. Proceedings. Book “Recent Advances in IEx Theory & Practice”. S. Fundam. Ed. by M. Cox (UK). Cambridge (9–11 July 2008). P. 85. www.soci.org, Lond. 2008.
13. *Калиничев А.И.* // Сорбционные и хроматографические процессы. 2018. Т. 18. № 5. С. 916.