

ГРАНИЧНІ УМОВИ МОДЕЛЕЙ СТАЦІОНАРНОЇ ТА НЕСТАЦІОНАРНОЇ КІНЕТИКИ В ЕЛЕКТРОХІМІЧНИХ СИСТЕМАХ З ДИСКОВИМ ОБЕРТОВИМ ЕЛЕКТРОДОМ

*Ткачук М. М.*¹, Міщенчук В. В.¹, Боштан Ю. В.¹, Юзькова В. Д.²

¹ВДНЗ України «Буковинський державний медичний університет»

²Інститут післядипломної педагогічної освіти Чернівецької області
tmm777@rambler.ru

Актуальність. Серед задач, які стоять перед сучасною наукою, важливе місце займає ліквідація розриву між теорією і експериментом. Одним із шляхів такого зближення є моделювання результатів експерименту в рамках різних теоретичних підходів з використанням в якості критерію справедливості узгодженості модельного розрахунку із експериментом.

Мета роботи. В роботі ставиться завдання проаналізувати граничні умови, межі їх використання та похибки пов'язані з прийнятими на практиці наближеннями в сформульованій математичній моделі нестационарної та стаціонарної електрохімічної кінетики на обертовому дисковому електроді (ОДЕ), яка строго враховує масоперенос зумовлений дифузією, міграцією та конвекцією.

Завдання: 1) Визначити межі контролюючих параметрів системи (часу електролізу, площі поверхні робочого електрода, об'єму електроліту, швидкості обертання електрода) для яких реальний стаціонарний розподіл концентрацій компонентів не буде відрізнятися (в межах прийнятої точності) від розподілу, який встановлювався б в ідеалізованому "безкінечному резервуарі"; 2) Визначити оптимальну границю інтегрування по координаті, тобто віддаль від поверхні електрода, на якій можна (в межах прийнятої точності) вважати концентрації компонентів постійними і рівними об'ємним, та її залежність від контролюючих параметрів системи.

Результати роботи. 1). Відносна похибка у визначенні концентрації біля поверхні електрода, яка пов'язана з ефектом «виснаження» концентрації, є наслідком закону Фарадея і пов'язана із керуючими та характеристичними параметрами системи (час дослідження τ , об'єм системи V , площа робочого електрода A , електричний струм I , початкова концентрація електроактивного компонента $c_{i,0}$) наступним чином: $|\Delta c_i / c_{i,0}| = |(v_i I \tau) / (n F V c_{i,0})|$; 2). Основна зміна концентраційного профілю відбувається на незначних відстанях від електроду в приграничному шарі $0 \leq x \leq a$, через що необхідно збільшити кількість точок інтегрування в цих межах. Чисельне інтегрування по всьому проміжку $0 \leq x \leq L$ є невиправданим, оскільки на проміжку $a \leq x \leq L$ концентраційний профіль практично не змінюється. «Ефективна товщина» « a » дифузійного шару суттєво впливає на концентраційний розподіл (зокрема на значення концентрації біля поверхні, залежну від неї швидкість реакції і т. д.) і може бути джерелом похибок. Для потреб чисельного інтегрування ефективну товщину в залежності від прийнятої точності слід брати в межах $a_i = (2 \div 5) \cdot \delta_i$ (δ_i - характеристична товщина дифузійного шару, яка залежить від швидкості обертання ОДЕ ω , кінематичної в'язкості ν): $\delta_i = 1.6117 D_i^{1/3} \nu^{1/6} \omega^{-1/2} \{1 + 0.2980 (D_i / \nu)^{1/3} + 0.14514 (D_i / \nu)^{2/3}\}$; 3). Для забезпечення збіжності стаціонарного концентраційного розподілу до розподілу «безкінечно великого резервуару» характеристична довжина резервуару з розчином L повинна бути не меншою ніж $(200 \div 500) \cdot \delta_i$; Результати, які одержані в роботі, можна застосувати при теоретичному аналізі стаціонарних та нестационарних методів електрохімічного аналізу, а також при моделюванні стаціонарної та нестационарної макрокінетики на обертовому дисковому електроді.