

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА В КОНЦЕНТРИРОВАННЫХ РАСТВОРАХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДВУХСКОРОСТНОГО МЕТОДА

Волгин В.М.^а, Любимов В.В.^а, Гнидина И.В.^а, Давыдов А.Д.^б, Кабанова Т.Б.^б

^а*Тульский государственный университет, 300012, Тула, пр. Ленина, 92,
e-mail: volgin@tsu.tula.ru*

^б*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН,
119071, Москва, Ленинский пр., 31*

Высококонцентрированные растворы электролитов, а также расплавы электролитов и твердые электролиты получили достаточно широкое рас-пространение в различных электрохимических системах, так как позволяют существенно повысить характеристики таких систем. Для моделирования процессов в концентрированных растворах электролитов используются: (1) гидродинамическая модель гомогенных многокомпонентных смесей и (2) модель многокомпонентной диффузии Стефана-Максвелла, которые имеют ряд недостатков. В последние годы развивается так называемый “двухскоростной подход” (bi-velocity approach) моделирования процессов переноса в концентрированных растворах. В рамках двухскоростного подхода постулируется, что скорость любого компонента раствора может быть представлена в виде суммы двух скоростей: скорости диффузионно-миграционного переноса компонента, которая зависит от градиента электрохимического потенциала и которая не зависит от выбора системы координат; скорости переноса всего раствора, которая является одинаковой для всех компонентов раствора и зависит от выбора системы координат.

Целью настоящей работы является развитие двухскоростного подхода к моделированию процессов переноса в концентрированных растворах и сравнительный анализ различных подходов для моделирования процессов переноса в сложных электрохимических системах.

Разработана математическая модель ионного переноса в концентрированных растворах электролитов с использованием двухскоростного подхода, включающая в себя уравнения Нернста-Планка в приближении электронейтральности среды и закон сохранения объема. В рамках двухскоростного метода получены соотношения для диффузионно-миграционных потоков компонентов раствора, а также для общей для всех компонентов гидродинамической скорости. Разработана схема численного решения, базирующаяся на консервативном методе конечных объемов. Приведены результаты моделирования для ряда электрохимических систем.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ.