# Описание теоретической модели гидродинамического и диффузионного переноса заряда в преобразующих молекулярно-электронных элементах

Рассмотрим преобразующий элемент, рабочей жидкостью которого является водный раствор йодида калия или лития с небольшой добавкой молекулярного йода. Молекулярный йод находится в растворе в форме ионов трийодида . На электродах протекает следующая электрохимическая реакция:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1) |

В каждой элементарной реакции происходит перенос двух электронов чрез поверхность электрода. Таким образом, электрический ток можно считать найденным, если определен поток ионов три-иодида через поверхность электрода. Этот факт используется в модели конвективной диффузии, позволяющей рассматривать перенос только ионов типа трийодида, с тем, чтобы упростить математические проблемы. Тогда транспорт ионов триодида без электрической миграции описывается уравнением конвективной диффузии:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2) |

c – концентрация ионов , - коэффициент диффузии.

Гидродинамическая скорость  определяется из решения уравнения Навье-Стокса и условия несжимаемости жидкости:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3) |

– вязкость,  - давление,  - внешняя объемная сила.

Граничные условия на поверхности имеют вид условия «прилипания» жидкости на твердых поверхностях, а также условий на концентрацию активного компонента:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4) |

Первое уравнение – условие отсутствия реакций на диэлектрической поверхности. Второе – условие предельного тока. Третье уравнение, хотя и имеет ограничения по применимости, является общепринятым упрощением [9], [10], [11], справедливость которого доказана для малых сигналов, а также в области низких частот. Отметим, что даже на высоких частотах данное упрощение применимо, если нас интересуют только катодные токи, как в большинстве практических задач.

Рассмотрим следующую геометрию: тонкий плоский канал с четыремя электродами, нанесенными на одну из его стенок. Введем систему координат с началом на поверхности, содержащей электроды, как это показано на Рисунке 1., предположим, что все электроды имеют одинаковую ширину и высоту расстояние между электродами – толщина канала, в котором протекает жидкость и которую будем считать малой по сравнению с длиной канала и его размером в направлении ортогональном потоку жидкости.

|  |
| --- |
|  |
| Рисунок 1.1 – схема моделируемой ячейки |

[1] V. M. Volgin and A. D. Davydov, “Mass-transfer problems in the electrochemical systems,” *Russ. J. Electrochem.*, vol. 48, no. 6, pp. 565–569, 2012.

[2] V. Agafonov and E. Egorov, “Influence of the electrical field on the vibrating signal conversion in electrochemical (MET) motion sensor,” *Int. J. Electrochem. Sci.*, vol. 11, no. 3, pp. 2205–2218, 2016.

[3] Z. Sun, V. Agafonov, and E. Egorov, “The influence of the boundary condition on anodes for solution of convection-diffusion equation with the application to a four-electrode electrochemical cell,” *J. Electroanal. Chem.*, vol. 661, no. 1, pp. 157–161, 2011.