



КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИОННЫХ ЭЛЕКТРОХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ ПРОЦЕССОВ ПРИ БИПОЛЯРНОМ ИМПУЛЬСНОМ ЭЛЕКТРОЛИЗЕ

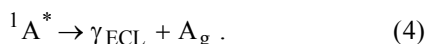
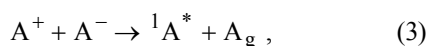
СВИРЬ И. Б., КЛИМЕНКО А. В.

Представляется оригинальная программа для решения математических моделей, описывающих диффузионный массоперенос в электрохемилюминесцентной ячейке с плоскими электродами при биполярном импульсном электролизе. Достоинствами программы являются: простота и доступность для пользователя – легкий ввод и изменение физико-химических и временных параметров на всех этапах электролиза; наглядность – вывод на экран монитора динамически изменяющихся и двумерных графиков рассчитанных профилей концентраций всех частиц, присутствующих в растворе, и их численное значение в любой указанной точке пространства между электродами, а также численных значений интенсивности свечения; точность результатов и абсолютная устойчивость решений.

1. Физико-химическая модель

Электролиз растворов-электролитов сложных органических и металлоорганических соединений – электрохемилюминофоров – может сопровождаться эмиссией света из приэлектродной области, а именно электрохемилюминесценцией (ЭХЛ) [1-4]. Во многих случаях кванты ЭХЛ (E^{ECL}) испускаются при излучательной дезактивации синглет-возбужденных молекул ($^1\text{A}^*$) электрохемилюминофора (A_g) – продуктов сильно экзотермических реакций переноса электрона между электрогенерированными частицами: анион- (A^-) и катион-радикалами (A^+).

Физико-химическую модель ЭХЛ можно представить в виде схемы реакций:



Из приведенной схемы видно, что процесс испускания света при электролизе обусловлен последовательностью разделенных в пространстве ЭХЛ ячейки и во времени электролиза – электрохимические реакции (1) и (2); гомогенная бимолекулярная (3) и внутримолекулярная реакция (4). Реакции (1) и (2) являются фарадеевскими одноэлектродными процессами восстановления и окисления органического

деполяризатора A_g . Реакция (3) является химической, следующей за электродной и осложняющей электрохимическую стадию. Быстрая реакция (3) контролируется скоростью диффузионного или конвективного массопереноса реагентов в приэлектродную область. Реакция (4) служит количественной характеристикой испускающих свет реакций и отвечает также за формирование спектра ЭХЛ, совпадающего, как правило, со спектром флуоресценции люминофора.

Рассмотрим диффузионную кинетику массопереноса в ЭХЛ ячейке при импульсном электролизе. Рабочий электрод в ЭХЛ ячейке электризуется биполярными импульсами напряжения с амплитудами, достаточными для образования восстановленных и окисленных форм органолюминофора. Данную модель электролиза можно разделить на три временные фазы: первая – анодная (реакция (1)), когда к электроду приложен положительный импульс напряжения; затем пауза и – катодная фаза (реакции (2)-(4)).

2. Математические модели

Анодная фаза

Во время анодной ступенчатой поляризации рабочего электрода – подготовительной фазы длительностью T_1 диффузионный массоперенос катион-радикалов будет описываться уравнениями:

$$\frac{\partial C^+(x,t)}{\partial t} = D_+ \frac{\partial^2 C^+(x,t)}{\partial x^2} - \frac{C^+(x,t)}{\tau_+}; \quad (5)$$

$$C^+(x,t) + C_g(x,t) = C_0. \quad (6)$$

Уравнение (6) характеризует закон сохранения массы, а также наличие в растворе только двух частиц в течение T_1 . В (5) и (6): C^+ и C_g – концентрации частиц A^+ и A_g соответственно; D_+ – коэффициент диффузии катион-радикалов; C_0 – начальная концентрация люминофора A_g ; τ_+ – время жизни A^+ .

Начальные условия:

$$t = 0; \quad x \geq 0: \quad C_g = C_0; \quad C^+ = 0.$$

Граничные условия:

$$0 < t \leq T_1; \quad x = 0: \quad D_g \frac{\partial C_g(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=0} = k_{\text{het}}^a C_g(x,t) \Big|_{x=0}; \quad (7)$$

$$D_g \frac{\partial C^+(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=0} = -D_+ \frac{\partial C^+(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=0}; \quad (8)$$

$$x \rightarrow \infty: \quad C_g(x,t) \rightarrow C_0; \quad (9)$$

$$C^+(x,t) \rightarrow 0, \quad (10)$$

где D_g – коэффициент диффузии частиц A_g ; k_{het}^a – константа скорости гетерогенного взаимодействия во время анодной фазы.

Пауза

Для создания оптимальных распределений концентраций частиц в электрохимической ячейке иногда вводят паузы между двумя поляризующими импульсами. В том случае, когда на границе могут происходить обратные redox-реакции (восстановление окисленных частиц или окисление восстановленных частиц), которые могут, вероятно, улучшить условия образования эмиттера ЭХЛ (учёт конечного времени переключения в устройстве возбуждения, перевод частиц вдали от поверхности электрода и сохранение

их, создание условий более эффективного подвода нейтральных частиц к поверхности электрода, сдвиг зоны рекомбинации вглубь раствора), всё это можно учесть введением паузы между двумя поляризующими импульсами. Паузы могут быть с перезарядом двойного электрического слоя (1-й тип паузы) и без перезаряда ДЭС (2-й тип паузы). Система уравнений та же, что и в анодной фазе – (5), (6).

1-й тип паузы позволяет учесть в расчетах конечное время переформирования емкости ДЭС на границе рабочий электрод-раствор. При этом зона ЭХЛ-реакций отодвигается от рабочего электрода, что обычно повышает интенсивность свечения [1]. Поведение частиц во время паузы можно описать уравнениями (5) и (6), аналогичными анодной фазе.

Начальные условия:

$$t = T_1; x \geq 0: {}_2C_g(x, t) = {}_1C_g(x, t); \quad (11)$$

$${}_2C^+(x, t) = {}_1C^+(x, t). \quad (12)$$

Граничные условия:

$$T_2 > t > T_1, x = 0:$$

$$D_+ \frac{\partial C^+(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=0} = k_{\text{het}}^b C^+(x, t) \Big|_{x=0}, \quad (13)$$

где k_{het}^b – константа скорости гетерогенных взаимодействий во время паузы. Индекс слева означает номер фазы электролиза. Условия (8)-(10) сохраняются из анодной фазы.

2-й тип паузы – без перезарядки ДЭС. Поведение частиц во время такой паузы можно описать уравнениями (5) и (6), аналогичными анодной фазе, однако с другими граничными условиями.

Начальные условия имеют вид (11), (12).

Граничные условия:

$$t > T_1; x = 0:$$

$$D_g \frac{\partial C_g(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=0} = D_+ \frac{\partial C^+(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0; \quad (14)$$

условия при $x \rightarrow \infty$ имеют вид (9), (10).

Катодная фаза

Во время катодной фазы диффузионный массоперенос катион-радикалов будет описываться уравнениями:

$$\frac{\partial C^+(x, t)}{\partial t} = D_+ \frac{\partial^2 C^+(x, t)}{\partial x^2} - \frac{C^+(x, t)}{\tau_+} - k_{\text{bi}} C^+(x, t) \cdot C^-(x, t); \quad (15)$$

$$\frac{\partial C^-(x, t)}{\partial t} = D_- \frac{\partial^2 C^-(x, t)}{\partial x^2} - \frac{C^-(x, t)}{\tau_-} - k_{\text{bi}} C^+(x, t) \cdot C^-(x, t); \quad (16)$$

$$\frac{\partial C^*(x, t)}{\partial t} = D_* \frac{\partial^2 C^*(x, t)}{\partial x^2} - \frac{C^*(x, t)}{\tau_*} + k_{\text{bi}} C^+(x, t) \cdot C^-(x, t); \quad (17)$$

$$C^+(x, t) + C^-(x, t) + C_g(x, t) + C^*(x, t) = C_0, \quad (18)$$

где C^- и C^* – концентрации частиц A^- и ${}^1A^*$, а D_- и D_* – коэффициенты диффузии A^- и ${}^1A^*$; τ_- и τ_* – время жизни частиц A^- и ${}^1A^*$, k_{bi} – константа скорости бимолекулярных взаимодействий.

Начальные условия:

$$t = T_2; x \geq 0: {}_3C_g(x, t) = {}_2C_g(x, t);$$

$${}_3C^+(x, t) = {}_2C^+(x, t);$$

$${}_3C^-(x, t) = {}_2C^-(x, t) = 0;$$

$${}_3C^*(x, t) = {}_2C^*(x, t) = 0.$$

Граничные условия:

$$t > T_2; x \geq 0: D_- \frac{\partial C^-(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=0} = -D_g \frac{\partial C_g(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=0}; \quad (19)$$

$$D_- \frac{\partial C^-(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=0} = -k_{\text{het}}^k C_g(x, t) \Big|_{x=0} - k_{\text{het}}^{\text{ka}} C^+(x, t) \Big|_{x=0}; \quad (20)$$

$$D_+ \frac{\partial C^+(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=0} = k_{\text{het}}^{\text{ka}} C^+(x, t) \Big|_{x=0}; \quad (21)$$

$$C^*(x, t) \Big|_{x=0} = 0. \quad (22)$$

$$x \rightarrow \infty: C^-(x, t) \rightarrow 0;$$

$$C^*(x, t) \rightarrow 0;$$

где k_{het}^k и $k_{\text{het}}^{\text{ka}}$ – константы скоростей гетерогенных реакций во время катодной фазы. Условия (9) и (10) сохраняются.

3. Численное моделирование

Анодная фаза

Для решения уравнения (5) применялась чисто неявная схема. Соответствующее конечно-разностное уравнение имеет вид

$$\frac{C_i^{+j+1} - C_i^{+j}}{\Delta t} = D_+ \frac{C_{i-1}^{+j+1} - 2C_i^{+j+1} + C_{i+1}^{+j+1}}{\Delta x^2} - \frac{C_i^{+j+1}}{\tau_+}. \quad (23)$$

Решение ищется в области $x \in [0; 1]$, $t \in [0; T_1]$, где l таково, что $C^+(l, t)$ достаточно мало (условие (10)).

Запишем в виде конечно-разностного уравнения граничное условие при $x=0$. Для этого сначала из уравнения (6) выразим $C_g(x, t)$ и подставим в (7). После элементарных преобразований получим:

$$D_g \frac{\partial C^+(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=0} = k_{\text{het}}^a (C^+(x, t) - C_0) \Big|_{x=0};$$

$$D_g \frac{C_1^{+j+1} - C_0^{+j+1}}{\Delta x} = k_{\text{het}}^a (C_0^{+j+1} - C_0).$$

Значения C_n^{+j} , $j = \overline{1, m}$ определяются из условия (10):

$$C_n^{+j} = 0, j = \overline{1, m}.$$

Таким образом, для получения значений $C^+(x, t)$ на $(j+1)$ -м слое по времени необходимо решить систему из n линейных уравнений:

$$\left(1 + \frac{\Delta x k_{\text{het}}^a}{D_g} \right) C_0^{+j+1} - C_1^{+j+1} = \frac{\Delta x k_{\text{het}}^a}{D_g} C_0; \quad (24)$$

$$s C_{i-1}^{+j+1} - \left(1 + 2s + \frac{\Delta t}{\tau_+} \right) C_i^{+j+1} + s C_{i+1}^{+j+1} = -C_i^{+j}, \quad (25)$$

$$sC_{n-2}^{+j+1} - \left(1 + 2s + \frac{\Delta t}{\tau_+}\right) C_{n-1}^{+j+1} = -C_{n-1}^{+j}, \quad (26)$$

$$\text{где } s = \frac{D_+ \Delta t}{\Delta x^2}.$$

Значения $Cg_i^j, i = \overline{0, n-1}, j = \overline{1, m}$ вычисляются по формуле

$$Cg_i^j = C_0 - C_i^{+j}. \quad (27)$$

Решение системы уравнений (20)-(22) производилось методом Гаусса.

Пауза

Поиск решения производится в области $x \in [0; 1], t \in [T_1; T_2]$. Конечно-разностное уравнение, соответствующее выражению (5), имеет вид (23).

1-й тип паузы

Граничное условие при $x=0$:

$$D_+ \frac{C_1^{+j+1} - C_0^{+j+1}}{\Delta x} = k_{\text{het}}^b C_0^{+j+1}. \quad (28)$$

Перепишем (28) в виде

$$\left(1 + \frac{k_{\text{het}}^b \Delta x}{D_+}\right) C_0^{+j+1} - C_1^{+j+1} = 0. \quad (29)$$

Тогда система линейных алгебраических уравнений для перехода с j -го на $(j+1)$ -й слой по времени будет иметь вид уравнений (25), (26), (29).

2-й тип паузы

Запишем граничное условие

$$D_+ \frac{\partial C^+(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0$$

в разностном виде:

$$D_+ \frac{C_1^{+j+1} - C_0^{+j+1}}{\Delta x} = 0, \quad (30)$$

откуда

$$C_0^{+j+1} - C_1^{+j+1} = 0. \quad (31)$$

Система уравнений для определения $C_i^{+j+1}, i = \overline{0, n-1}$ будет состоять из уравнений (31), (25), (26). Значения $Cg_i^j, i = \overline{0, n-1}, j = \overline{1, m}$ во время паузы вычисляются по формуле (27).

Катодная фаза

Граничные условия (20)-(22), а также уравнение (18) позволяют сначала решить систему из двух уравнений (15) и (16), а затем решить (13). Запишем конечно-разностные уравнения, соответствующие дифференциальным уравнениям (15) и (16):

$$\frac{C_i^{+j+1} - C_i^{+j}}{\Delta t} = D_+ \frac{C_{i-1}^{+j+1} - 2C_i^{+j+1} + C_{i+1}^{+j+1}}{\Delta x^2} - \frac{C_i^{+j+1}}{\tau_+} - k_{bi} C_i^{+j+1} \cdot C_i^{-j+1}, \quad (32)$$

$$\frac{C_i^{-j+1} - C_i^{-j}}{\Delta t} = D_- \frac{C_{i-1}^{-j+1} - 2C_i^{-j+1} + C_{i+1}^{-j+1}}{\Delta x^2} - \frac{C_i^{-j+1}}{\tau_-} - k_{bi} C_i^{-j+1} \cdot C_i^{+j+1}. \quad (33)$$

Граничное условие (21):

$$D_+ \frac{C_1^{+j+1} - C_0^{+j+1}}{\Delta x} = k_{\text{het}}^a C_0^{+j+1}$$

или

28

$$\left(1 + \frac{\Delta x k_{\text{het}}^a}{D_+}\right) C_0^{+j+1} - C_1^{+j+1} = 0. \quad (34)$$

Используя (18) и (22), перепишем граничное условие (20) в виде:

$$D_- \frac{\partial C^-(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=0} = -k_{\text{het}}^k (C_0 - C^+(x, t) - C^-(x, t)) \Big|_{x=0} - k_{\text{het}}^{ka} C^+(x, t) \Big|_{x=0}.$$

Соответствующее разностное уравнение:

$$D_- \frac{C_1^{-j+1} - C_0^{-j+1}}{\Delta x} = k_{\text{het}}^k C_0^{-j+1} + (k_{\text{het}}^k - k_{\text{het}}^{ka}) C_0^{+j+1} - k_{\text{het}}^k C_0.$$

Преобразуем последнее выражение к виду:

$$\left(1 + \frac{k_{\text{het}}^k \Delta x}{D_-}\right) C_0^{-j+1} - C_1^{-j+1} + \frac{(k_{\text{het}}^k - k_{\text{het}}^{ka}) \Delta x}{D_-} C_0^{+j+1} = \frac{k_{\text{het}}^k \Delta x}{D_-} C_0. \quad (35)$$

Используя (34) и (35), а также после элементарных преобразований (32) и (33), запишем следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} &\left(1 + \frac{\Delta x k_{\text{het}}^{ka}}{D_+}\right) C_0^{+j+1} - C_0^{+j+1} = 0; \\ &s_+ C_{i-1}^{+j+1} - \left(1 + 2s_+ + \frac{\Delta t}{\tau_+} + \Delta t k_{bi} C_i^{-j+1}\right) C_i^{+j+1} + \\ &+ s_+ C_{i+1}^{+j+1} + C_i^{+j} = 0, \quad i = \overline{1, n-2}; \\ &s_+ C_{n-2}^{+j+1} - \left(1 + 2s_+ + \frac{\Delta t}{\tau_+} + \Delta t k_{bi} C_{n-1}^{-j+1}\right) C_{n-1}^{+j+1} + \\ &+ C_{n-1}^{+j} = 0; \end{aligned} \quad (36)$$

$$\begin{aligned} &\left(1 + \frac{\Delta x k_{\text{het}}^k}{D_-}\right) C_0^{-j+1} - C_1^{-j+1} + \frac{(k_{\text{het}}^k - k_{\text{het}}^{ka}) \Delta x}{D_-} C_0^{+j+1} - \\ &- \frac{k_{\text{het}}^k \Delta x}{D_-} C_0 = 0; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &s_- C_{i-1}^{-j+1} - \left(1 + 2s_- + \frac{\Delta t}{\tau_-} + \Delta t k_{bi} C_i^{+j+1}\right) C_i^{-j+1} + \\ &+ s_- C_{i+1}^{-j+1} + C_i^{-j} = 0, \quad i = \overline{1, n-2}; \\ &s_- C_{n-2}^{-j+1} - \left(1 + 2s_- + \frac{\Delta t}{\tau_-} + \Delta t k_{bi} C_{n-1}^{+j+1}\right) C_{n-1}^{-j+1} + C_{n-1}^{-j} = 0, \end{aligned}$$

$$\text{где } s_+ = \frac{D_+ \Delta t}{\Delta x^2}, \quad a \quad s_- = \frac{D_- \Delta t}{\Delta x^2}.$$

Полученная система из $2m$ нелинейных уравнений решается методом Ньютона, который состоит в следующем. Пусть имеется система уравнений, в общем случае нелинейная:

$$\Phi(\bar{x}) = 0; \quad \bar{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$$

и задано некоторое начальное приближение $\bar{x}^{(0)}$. Тогда итерационная формула метода Ньютона имеет вид

$$\bar{x}^{(k+1)} = \bar{x}^{(k)} - \left[\left(\frac{\partial \bar{\Phi}(\bar{x})}{\partial \bar{x}} \right)^{(k)} \right]^{-1} \bar{\Phi}(\bar{x}^{(k)}), \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

где $\left(\frac{\partial \bar{\Phi}(\bar{x})}{\partial \bar{x}} \right)^{(k)}$ – матрица первых частных производных вектор-функции $\bar{\Phi}(\bar{x})$ по переменным x_i , $i = \overline{1, n}$ на k -й итерации. Условием окончания итерационных вычислений является неравенство

$$\| \bar{\Phi}(\bar{x}^{(k)}) \| \leq \varepsilon,$$

здесь ε – заданная точность вычислений.

При решении системы уравнений (36) в качестве начального приближения использовались значения $C^+(x, t)$ и $C^-(x, t)$ на j -м слое по времени.

Рассмотрим уравнение (17). Соответствующее ему разностное уравнение имеет вид

$$\frac{C_i^{*j+1} - C_i^{*j}}{\Delta t} = D_* \frac{C_{i-1}^{*j+1} - 2C_i^{*j+1} + C_{i+1}^{*j+1}}{\Delta x^2} - \frac{C_i^{*j+1}}{\tau_*} + k_{bi} C_i^{+j+1} \cdot C_i^{-j+1}. \quad (37)$$

Преобразуя уравнение (37), а также используя граничные условия для $C^*(x, t)$, запишем систему конечно-разностных уравнений, аппроксимирующую дифференциальное уравнение (13):

$$\begin{aligned} \left(1 + 2s_* + \frac{\Delta t}{\tau_*} \right) C_1^{*j+1} - s_* C_2^{*j+1} &= C_1^{*j} + k_{bi} \Delta t C_1^{+j+1} \cdot C_1^{-j+1}, \\ s_* C_{i-1}^{*j+1} - \left(1 + 2s_* + \frac{\Delta t}{\tau_*} \right) C_i^{*j+1} + s_* C_{i+1}^{*j+1} &= -C_i^{*j} - \\ - k_{bi} \Delta t C_i^{+j+1} \cdot C_i^{-j+1}, \quad i &= \overline{2, n-2}; \\ s_* C_{n-2}^{*j+1} - \left(1 + 2s_* + \frac{\Delta t}{\tau_*} \right) C_{n-1}^{*j+1} &= -C_{n-1}^{*j} - k_{bi} \Delta t C_{n-1}^{+j+1} \cdot C_{n-1}^{-j+1}, \end{aligned}$$

$$\text{где } s_* = \frac{D_* \Delta t}{\Delta x^2}.$$

Полученная система из $(n-1)$ линейных уравнений решается методом Гаусса.

4. Результаты и выводы

Разработана оригинальная математическая программа для решения описанных математических моделей, представляющих собой дифференциальные уравнения второго порядка в частных производных параболического типа. Программа разработана с использованием среды разработки приложений Inprise Delphi 4.5. Меню программы (рис. 1) позволяет изменять физико-химические параметры модели и отслеживать влияние данных параметров на вычисляемые концентрации всех частиц, присутствующих в растворе, а также на изменение интенсивности ЭХЛ. Для любой указанной (с помощью соответствующего пункта меню) точки пространства (координата x) выводятся вычисленные значения концентраций всех частиц. В меню выбирается также тип задаваемой паузы.

Результаты численного моделирования анодной фазы мы сравнивали с аналитическим решением для $C^+(x, t)$ [5]:

$$C^+(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[\exp\left(-x \sqrt{\frac{k}{D_+}}\right) \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{D_+ t}} - \sqrt{kt}\right) + \exp\left(x \sqrt{\frac{k}{D_+}}\right) \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{D_+ t}} + \sqrt{kt}\right) \right],$$

где $\operatorname{erfc}(z) = 1 - \operatorname{erf}(z)$, $k = \frac{1}{\tau_+}$.

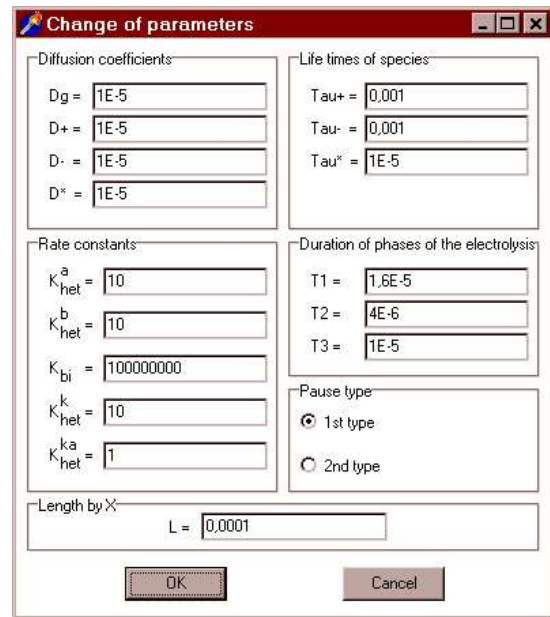


Рис. 1. Вид программного окна изменения физико-химических и временных параметров

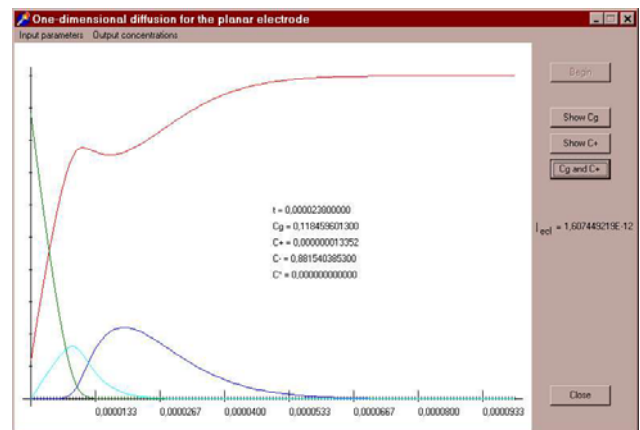


Рис. 2. Окно с результатами численного моделирования

Результаты аналитического и численного решения полностью совпадают [5,6].

Во время катодной фазы электролиза интегральная по объему и времени интенсивность ЭХЛ рассчитывалась по уравнению [7]:

$$I_{ECL} = \Phi_{ECL} \cdot S_W \int_0^{\tau_{\infty}} \int_0^x C^*(x, t) dx dt,$$

где Φ_{ECL} – эффективность ЭХЛ [1]; S_W – рабочая площадь электрода, $C^*(x, t)$ определялась в процессе решения уравнения (17).

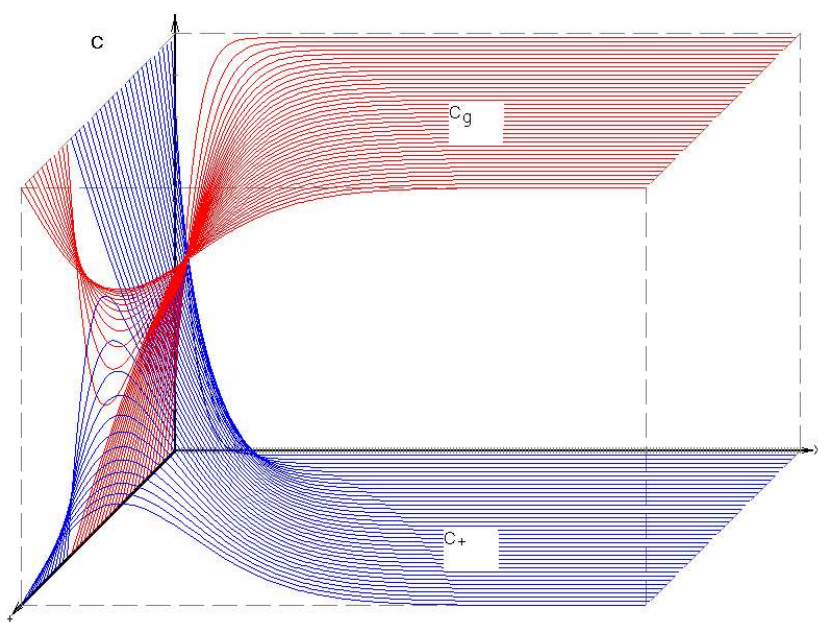


Рис. 3. Координатно-временное распределение концентраций катионов (C^+) и органолюминофора (C_g) в течение анодной фазы и паузы типа 1

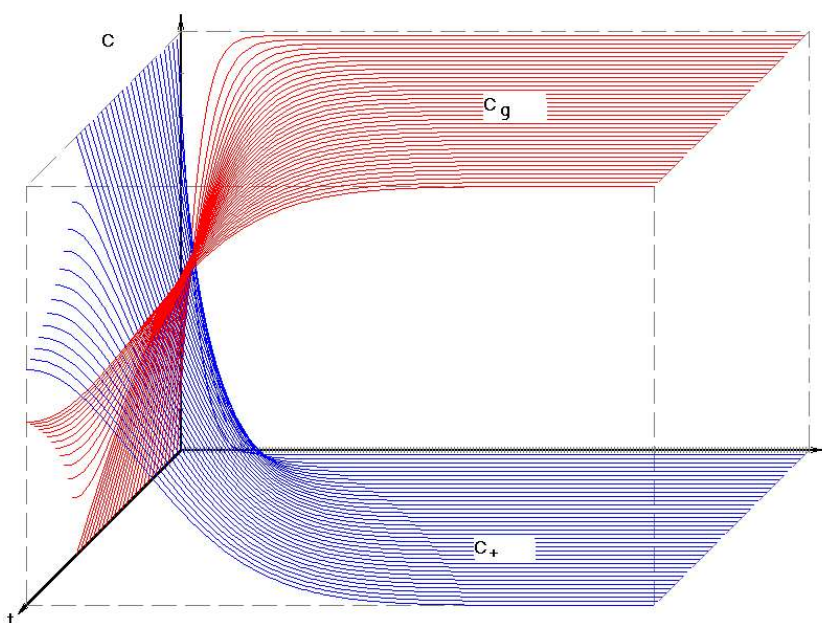


Рис. 4. Координатно-временное распределение концентраций катионов (C^+) и органолюминофора (C_g) в течение анодной фазы и паузы типа 2

Результаты проведенных расчетов в рамках рассматриваемых моделей свидетельствуют о возможности реализации ЭХЛ в описанной системе. Представленная программа дает принципиально новые возможности для пользователя — электрохимика, а именно: легкий ввод и изменение физико-химических и временных параметров на всех этапах электролиза (рис. 1); наглядность — вывод на экран монитора динамично изменяющихся (рис. 2) и двумерных графиков (рис. 3, 4) рассчитанных профилей концентраций всех частиц, присутствующих в растворе, и их численное значение в любой указанной точке пространства между электродами, а также численных значений интенсивности свечения; точность результатов и абсолютную устойчивость решений.

Литература: 1. Бых А.И., Васильев Р.Ф., Рожницкий Н.Н. Итоги науки и техники. ВИНТИ. Сер. Радиационная химия. Фотохимия. 1979. №2. 135с. 2. Бых А.И., Рожницкий Н.Н. Изв. АН СССР. Сер. Физ. 1983. № 47. С. 1360. 3. Бых А.И., Рожницкий Н.Н. Изв. АН СССР. Сер. Физ. 1987. № 51. С. 584. 4. Faulkner L.R., Bard A.J. In; Electroanalytical Chem. #10/ Ed. A.J. Bard. N.-Y.: Marcel Dekker. 1977. P. 1-95. 5. Бых А.И., Головенко В.М., Рожницкий Н.Н. Электрохимия. 1987. Т. 27. Вып. 8. С. 1089. 6. Бых А.И., Свирь И.Б. / Электромагнитные волны и электронные системы. 1998. №4. С. 32. 7. Рожницкий Н.Н., Головенко В.М. / Электрохимия. 1991. Т. 27. Вып. 2. С. 197.

Поступила в редколлегию 05.04.99

Рецензент: д-р техн. наук, проф. Стоян Ю.Г.

Свирь Ирина Борисовна, канд. физ.-мат. наук, докторант кафедры биомедицинской электроники ХТУРЭ. Научные интересы: численное моделирование электрохимических процессов. Адрес: Украина, 61726, Харьков, пр. Ленина, 14, тел. 40-93-64.

Клименко Алексей Викторович, студент ф-та прикладной математики и менеджмента ХТУРЭ. Научные интересы: аналитическое и численное решение уравнений математической физики. Адрес: Украина, 61726, Харьков, пр. Ленина, 14, тел. 40-93-64.