

УДК 538.93

До проблем математичного моделювання субдифузійного імпедансу в електролітичних системах

П.П. Костробій, д. ф.-м.н., професор

НУ «Львівська політехніка»

Б.М.Маркович, к.ф.-м.н., доцент

НУ «Львівська політехніка»

М.В. Токарчук, д.ф.-м.н., професор

НУ «Львівська політехніка»

Інститут фізики конденсованих систем НАН України

О.В. Візнович, асистент кафедри ПМ

НУ «Львівська політехніка»

oleksandraviznovych@gmail.com

Розглянуто модель субдифузійного імпедансу на основі рівняння Кеттано у дробових похідних. Розраховано діаграми Найквіста із зміною параметрів τ , α та D_α .

***Viznovych O.V.** To the problems of mathematical modeling subdiffusive impedance in the electrolytic systems. The model of subdiffusive impedance is considered on the basis of equalization of Kettano in fractional derivatives. The diagrams of Nyquist are expected with the change of parameters τ , α , and D_α .*

Ключові слова: ДІАГРАМА НЕЙКВІСТА, СУБДИФУЗІЯ, ІМПЕДАНС.

Key words: DIAGRAMS OF NEQUIST, SUBDYFFUSIYA, IMPEDANSE.

Дослідження фізичних процесів та їх мікроскопічні моделі у періодичних неорганічно/органічних клатратах є актуальними [1]. Зокрема, були отримані діаграми Найквіста, побудовані для напрямку, перпендикулярного до шарів розширеної матриці GaSe з інкапсульованим β – циклодекстрином, які свідчать про

особливість фракталізованої гостьової системи та аномальні процеси переносу. До аномальних явищ в електролітичних процесах відноситься субдифузія. Субдифузія характеризується часовою залежністю середнього квадрату зміщення частинки $\langle \Delta x^2 \rangle = 2D_\alpha t^\alpha / \Gamma(1+\alpha)$, де D_α є субдифузійний коефіцієнт, вимірний в одиницях m^2 / c^α і α є параметром субдифузії зі значенням в діапазоні $0 < \alpha < 1$. Для $\alpha = 1$ ми маємо звичайну дифузію. У роботі [2] для опису субдифузійних процесів було запропоновано рівняння Кеттано

$$\tau \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial t^2} + \frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D_\alpha \frac{\partial^{1-\alpha}}{\partial t^{1-\alpha}} \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2}, \quad (1)$$

у якому параметри D_α і τ (час на який потік затримується відносно градієнту концентрації $c(x,t)$) розглядаються як незалежні один від одного. Ми будемо моделювати [3] імпеданс електрохімічної системи $Z(i\omega)$, що знаходиться з співвідношення $Z(i\omega) = R_w \frac{C(0,i\omega)}{j(0,i\omega)}$, де R_w - опір Варбурга,

$j(0,i\omega)$ - потік заряду, ω - частота. На основі розв'язків рівняння Кеттано (1) із застосуванням перетворення Лапласа був розрахований імпеданс із зміною частоти $\omega \in (10^{-1}, 10^5)$, при $R_w = 1$, $L = 1$ і подані на рис.1-4. Ми провели розрахунки діаграм Найквіста коли $\alpha = 0.6$, $\alpha = 0.8$ при відповідних значеннях субдифузійного коефіцієнта $D_\alpha = 0.5$ і $D_\alpha = 1$ із зміною часу τ . Як бачимо із рисунків поведінка діаграм Найквіста із зміною параметрів τ , α та коефіцієнта дифузії D_α дуже сильно змінюється. Ми спостерігаємо певну стадійність процесів переносу носіїв заряду (електронів, дирок), яка якісно відтворює результати експериментальних досліджень [1]. Для виявлення такої поведінки параметрів τ, α, D_α і їх вплив на імпедансні залежності необхідний розвиток мікроскопічної теорії процесів переносу, яка б враховувала

характер взаємодії електронів у мультишарових наноструктурах при дії зовнішніх полів (магнітного, електромагнітного).

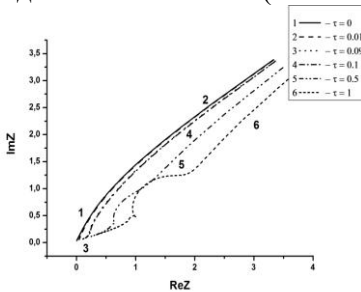


Рис.1. Діаграма Найквіста $D_\alpha = 0.5$ $\alpha = 0.6$ при різних значеннях τ .

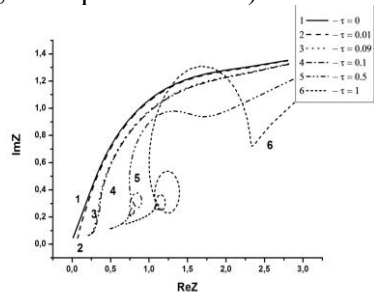


Рис.2. Діаграма Найквіста $D_\alpha = 0.5$ $\alpha = 0.8$ при різних значеннях τ .

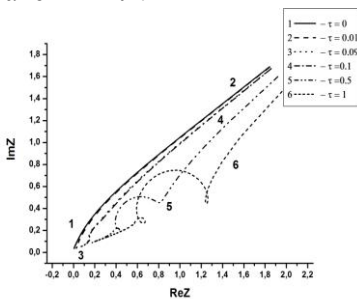


Рис.3. Діаграма Найквіста $D_\alpha = 1$ $\alpha = 0.6$ при різних значеннях τ .

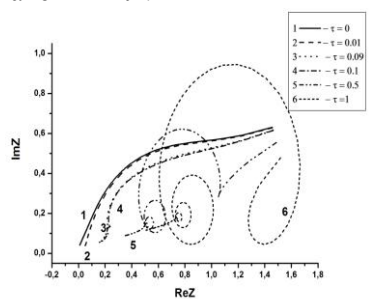


Рис.4. Діаграма Найквіста $D_\alpha = 1$ $\alpha = 0.8$ при різних значеннях τ .

1. Григорчак І.І., Костробій П.П., Стасюк І.В., Токарчук М.В., Величко О.В., Іващшин Ф.О., Маркович Б.М. Фізичні процеси та їх мікроскопічні моделі в періодичних неорганічно/органічних клатратах.- Львів, Вид. Растр-7, 2015, 285с.:
2. Kosztolowicz T. // J Phys. A: Math. Theor. — 2009. — Vol. 42. — P. 055004(1-14).
3. Kostrobij P.P., Grygorchak I.I., Ivaschyshyn F.O., Markovych B.M., Viznovych O., Tokarchuk M.V. // Math. Model.Comp., 2015, vol. 2, No 2. p. 154-159.