

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДРЕЙФА ДИПОЛЯ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВНЕШНЕГО ПЕРИОДИЧЕСКОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Ушаков И.А., Бутов В.Г., Тимченко С.Н.

Научный руководитель: Тимченко С.Н., к.т.н.

Томский политехнический университет, 634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30

E-mail: jiaozu@tpu.ru

Основной причиной малого практического использования обнаруженного явления селективного дрейфа [1] является недостаток теоретического обоснования влияния частот асимметричного электрического поля на эффективность процессов разделения ионов различных металлов щелочной группы в движущихся растворах [2]. В данной работе проведено сравнение ряда экспериментов по возбуждению явления селективного дрейфа гидратированных ионов под действием внешнего “асимметричного” электрического поля на движущийся водный раствор солей хлоридов бария и стронция с математической моделью процесса движения ионов под действием асимметричного электрического поля. Математическое моделирование процесса селективного дрейфа гидротированных ионов [1] различных металлов в водном растворе хлоридов этих металлов под действием внешнего периодического электрического поля является одним из важных аспектов его практического применения, так как позволяет существенно сократить объем необходимых экспериментальных исследований для нахождения оптимальных параметров процесса. Разработана одномерная модель движения сольватированных ионов под действием внешнего периодического электрического поля. В основу модели положено предположение о возможности разделения вращательной и поступательной компонент движения поляризованной системы гидратированных ионов. Поляризация и следовательно, деформация электронной оболочки приводит в конечном счете к образованию системы, подобной системе двух связанных разноименно заряженных ионов. Поляризованный аквакомплекс может образовать две системы, отличающиеся массами положительной части и следовательно, точкой расположения центра инерции диполя. Система ион-сольватная оболочка представлена в виде диполя, где ион представляет собой сплошной шар. Основу модели составляет уравнение движения центра масс системы ион-сольватная оболочка:

$$M \cdot \frac{d^2x}{dt^2} = p \cdot \frac{\partial E}{\partial x} \cdot \cos\alpha,$$

где M – масса системы, x – координата движения системы, t – время, p – дипольный момент, E – напряженность поля.

$$I \cdot \frac{d^2\alpha}{dt^2} = r \cdot p \cdot \frac{\partial E}{\partial x} \cdot \cos\alpha,$$

где I – момент инерции, α – угол поворота диполя, t – время, r – расстояние между центром масс системы и сольватной оболочкой, p – дипольный момент, E – напряженность поля.

Рассматривали, что на данный диполь действует напряженность электрического поля распределенного по радиусу разделительной ячейки:

$$E(r, t) = \begin{cases} 0, & 0 \leq r < R_1 \\ \frac{U(t)}{\ln \frac{R_2}{R_1} + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} \cdot \ln \frac{R_3}{R_2} + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_3} \cdot \ln \frac{R_4}{R_3}} \cdot \frac{1}{r}, & R_1 \leq r < R_2 \\ \frac{U(t)}{\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \cdot \ln \frac{R_2}{R_1} + \ln \frac{R_3}{R_2} + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_3} \cdot \ln \frac{R_4}{R_3}} \cdot \frac{1}{r}, & R_2 \leq r < R_3 \\ \frac{U(t)}{\frac{\varepsilon_3}{\varepsilon_1} \cdot \ln \frac{R_2}{R_1} + \frac{\varepsilon_3}{\varepsilon_2} \cdot \ln \frac{R_3}{R_2} + \ln \frac{R_4}{R_3}} \cdot \frac{1}{r}, & R_3 \leq r < R_4 \\ 0, & r \geq R_4 \end{cases}$$

Где $\varepsilon_1, R_1, \varepsilon_2, R_2, \varepsilon_3, R_3$ – диэлектрическая проницаемость и геометрические радиусы первого изолятора электрода №1, раствора, второго изолятора электрода №2 соответственно, $U(t)$ изменение напряжения на электродах от времени. При помощи разработанной модели движения ион-сольватная оболочка под действием асимметричного электрического поля получены результаты расчетов траекторий движения двухвалентных сольватированных ионов под действием внешнего периодического электрического поля.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. V. Shamanin, M. A. Kazaryan, S. N. Timchenko, I. A. Ushakov Mechanistic models of the ion-solvation shell system// [Bulletin of the Lebedev Physics Institute](#) -2017 – vol. 44 -iss. 9. – pp. 254-257.
2. Li Hongda , Kazaryan M. A. , Shamanin I. V. , Timchenko S. N. , Ushakov I. A. Electroinduced drift of solvated ions in salt solution of Ce and Ni // *Journal of Chemical Physics*. - 2018 - Vol. 130 - №. 8, Article number 111. - pp. 1-6.