

# КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОСПРОИЗВЕДЕНИЯ ОБРАЗА ДВОЙНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО СЛОЯ ИСТОЧНИКА ПИТАНИЯ

Л.М. Макаров<sup>1\*</sup>, С.В. Протасеня<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный университет телекоммуникаций им. проф. М.А. Бонч-Бруевича,

Санкт-Петербург, 193232, Российская Федерация

\*Адрес для переписки: saitvodabur@yandex.ru

## Информация о статье

УДК 519.61

Язык статьи – русский

**Ссылка для цитирования:** Макаров Л.М., Протасеня С.В. Компьютерное моделирование воспроизведения образа двойного электрического слоя источника питания // Труды учебных заведений связи. 2018. Т. 4. № 4. С. 68–76. DOI: 10.31854/1813-324X-2018-4-4-68-76

**Аннотация:** Декларируя наличие теоретических основ выбора и разработки типичных конструкций гальванических элементов и аккумуляторов, актуализируется проблема моделирования источников питания, обладающих набором сравнительных показателей, получаемых вычислительными средствами на основе фундаментальных термодинамических показателей состояния атомарной конструкции электродов и электролита. Установлены процедуры создания компьютерной модели воспроизведения образа двойного электрического слоя, по установленным показателям, обеспечивающих априорное конструирование различных источников питания.

**Ключевые слова:** потенциал источника питания, компьютерная модель, атомарная конструкция, двойной электрический слой.

Общие представления о микромире формировались средствами физических исследований, напрямую, а иногда и опосредованно, устанавливающих закономерности физического мира. Наряду с развитием методов и средств постижения природных явлений проявляется интерес к созданию важных для практики изделий, изготовление которых требует глубоких знаний физики, физической химии. Можно сказать, что именно эти две научные дисциплины, в содружестве с математикой, прошли длинный исторический путь развития, чтобы сформировать основы квантовой теории.

Представления об электрических явлениях в различных материалах, основу которых составляют типичные атомарные конструкции периодической системы элементов Д.И. Менделеева, формируют базовые понятия об электронике, об электротехнике. В список базовых понятий включаются понятия об электромагнитном поле, системах генерации полевых эффектов, электропроводности физических сред.

Обозначая единичными символами химических элементов различные вещества, выделяют простые вещества, которые состоят из атомов одного вида. Такие вещества содержат равное количество

протонов и нейтронов в атоме. Атомарные конструкции, построенные по такому принципу, называются типичными, или иначе, нормальными. Типичные представители проводников тока представлены рядом металлов. К простым веществам относятся металлы (*Ba, K, Na, Mg, Ag*), а также неметаллы (*S, P, Si, Cl<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>*). В этом перечне все металлы обозначаются единичными символами: *K, Ba, Ca, Al, V, Mg* и т. д., а неметаллы – либо простыми символами: *C, S, P* или могут иметь различные индексы, которые указывают на их молекулярное строение: *H<sub>2</sub>, Cl<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, J<sub>2</sub>, P<sub>4</sub>, S<sub>8</sub>*.

Использование символики химических элементов позволяет воспроизводить запись химического взаимодействия веществ посредством химического уравнения. В таком уравнении отображается процесс химической реакции – взаимодействия веществ с использованием химических формул веществ и числовых коэффициентов. Формальная запись химического уравнения выполняется по правилам математического баланса, постулирующего равенство исходных компонентов финишному продукту химической реакции. Последовательность элементов символьной записи, представленных атомарными конструкциями химических

элементов, декларирует наличие отношений. Определяя такие отношения как сочетания различных атомарных конструкций химических элементов, создается образ реального материального объекта или потока событий, характеризуемого химической реакцией.

Другими словами, набор из последовательности атомов химических элементов создает представление о развертке событий. Например, представление о химической формуле воды создается на основе атомарной конструкции: *H-H-O*. Для серной кислоты аналогичные представления устанавливаются в виде: *H-H-S-O-O-O-O*. Такие представления соотносят с простым форматом позиционирования материального объекта. Наиболее развит формат представления химических формул с учетом стереохимического строения веществ: вода –  $H_2O$  и кислота –  $H_2SO_4$ . Опираясь на понятия атомарных конструкций, посредством которых позиционируются различные объекты и процессы, устанавливается вариативность химических реакций. Это свойство проявляется в смене физических эффектов, сопровождающихся поглощением или выделением теплоты, изменениями агрегатного состояния и окраски веществ.

Соединение понятий электротехники и физической среды формирует общие представления об электрохимии, которая значительное внимание уделяет изучению создания источников тока, иначе говоря – источников напряжения. Рассматривая эти понятия как синонимы, электрохимия актуализирует проблему создания источников питания для огромного количества электронных устройств.

Конструкция, представленная набором двух проводников первого рода и контактной проводящей средой второго рода, называется электрохимической системой. В электрохимической системе возможно создание ионообменных потоков – электродных реакций окисления и восстановления (присоединение или отдача электрона). Ионопроводящую среду в электрохимической системе называют электролитом. Ионообменный поток создается посредством электронного проводника – электрода, находящегося в контакте с ионным проводником. Электрод, реализующий электрохимическую реакцию восстановления, называется катодом, а электрод, где воспроизводится электрохимическая реакция окисления – анодом. Электрохимическая реакция, реализуемая в конструкции, предусматривающей контакт пары электродов с электролитом, является основой создания гальванического элемента.

В самом общем понимании такой подход декларирует важность исследования границы двух сред, образуемой металлом и электролитом. В качестве первой среды обычно рассматривается проводник, вторая среда представляется некоторым раствором. Для первой среды характерно использовать

электропроводящие материалы, которые принято относить к проводникам первого рода.

Гальванический элемент – это источник электрического тока, в конструкции которого предусмотрено взаимодействие двух металлов, обладающих разными электродными потенциалами.

Натурные исследования убедительно свидетельствуют, что разность потенциалов между металлом, погруженным в раствор своей соли с концентрацией ионов металла 1 моль/л, и стандартным водородным электродом при стандартных условиях называется стандартным электродным потенциалом металла ( $U_0$ ).

Понятие о стандартном электродном потенциале устанавливается на принципе сравнения с базовым электродным потенциалом, в качестве которого принят водород. Ряд типичных электродных потенциалов можно представить в виде: *Li, K, Ca, Na, Mg, Al, Mn, Zn, Fe, Ni, Sn, Pb, H, Cu, Hg, Ag, Pt, Au*. Стандартные потенциалы являются количественной мерой окислительно-восстановительной способности системы. Позиционирование металлов проведено с учетом стандартного потенциала относительно водорода. При этом такой расчет адекватен лишь для водных растворов, поскольку в водных растворах такие металлы способны образовывать ионы. Это ограничение значительно влияет на выбор конструкционных материалов для большого количества источников питания, создаваемых на основе искусственно создаваемых компонент, обладающих более высокими эксплуатационными показателями. Принимая во внимание актуальность проблемы построения единого метрологического подхода к созданию конструкции источника питания, не зависимо от химических свойств электролита, разрабатываются модели.

Такая направленность исследований хорошо известна. Теоретические основы создания гальванического элемента известны по работам Гельмгольца-Перрена 1878 г. [1]. В основе этой теоретической разработки модели находится представление о некотором источнике напряжения, реализуемого на основе конструкции плоского конденсатора. Такая конструкция обладает двумя обкладками. Полагая, что одна обкладка представлена твердой поверхностью, а другая обкладка помещается в раствор электролита на некотором удалении от первой обкладки. Электродный потенциал создается на границе раздела сред: металл – электролит. Физический процесс возникновения электродного потенциала обусловлен ионообменным потоком заряженных частиц через границу раздела и спецификой адсорбции ионов на электродах. На границе раздела создается двойной электрический слой (ДЭС).

С точки зрения физики, очевидно, что на внутренней обкладке находятся заряды, инициализи-

рованные поверхностью твердого тела. На наружной обкладке также инициализируются заряды, которые находятся в жидкости (электролите). В первом приближении полагают, что количество потенциалопределяющих ионов и противоионов в двойном электрическом слое равно. Протяженность ДЭС полагается незначительной и соответствует примерно двум молекулярным слоям.

Простота воспроизведения физических основ в модели гальванического элемента позволила достаточно быстро установить основные особенности формирования ДЭС, что в последствии способствовало развитию новых взглядов. В первую очередь рассматривается возможность создания описания динамики процесса формирования ДЭС. Выделяя этот аспект, допускалась возможность создания некоторой простой модели, на подобие известной модели Гельмгольца-Перрена. Многочисленные натурные исследования несколько прояснили существо проблемы, однако возможность построения простой модели развития событий в электродном пространстве не осуществилась.

Определенные успехи в создании теоретических основ описания событий в ДЭС продемонстрировала теория Гуи-Чепмена (1915 г.), фактически подтвердившая наличие экспоненциальной зависимости убывания потенциала ДЭС [2]. Установлено, что в области ДЭС концентрация ионов, инициализируемых твердым телом, изменяется от минимального значения до типичного значения, соответствующего концентрации в растворе. Наряду с этим, отмечено, что концентрация противоионов, обладающая максимальным значением величины вблизи поверхности раздела фаз, уменьшается до величины, равной концентрации ионов противоположного заряда. Экспериментальные и теоретические исследования с большой долей вероятности указывали на наличие некоторого процесса «растворения» ДЭС в электролите.

На этой основе, в последующем развивалась модель Штерна (1924 г.), которая декларировала наличие сложной структуры ДЭС. Основные положения этой теории сформировали представление как минимум о двух слоях ДЭС: плотного и диффузного. Хорошая аргументация физических пояснений, представленная в модели, используется и в настоящее время. В основе модели выделен плотный слой, который идентифицировался с поверхностью твердого тела, ионы которого являлись потенциалопределяющими. В противоположность этому ионы в растворе идентифицировались как противоионы.

Созданная теория объясняла образование ДЭС посредством эффекта избирательной адсорбции ионов из раствора с поверхностью электрода – твердого тела. Образующиеся в зоне контакта противоионы удерживаются электрическими силами и располагаются на некотором расстоянии от

твердого тела. В плотной части ДЭС происходит почти линейное падение потенциала, в то время как в диффузной части ДЭС наблюдается экспоненциальный характер падения потенциала и концентрации противоионов. Диффузная область ДЭС называется слоем Гуи [2].

В декартовой системе координат профиль вариативных процессов позволяет теоретически закрепить понятие о плоскости движения фаз термином дзета-потенциал ( $\xi$ ) (рисунок 1).

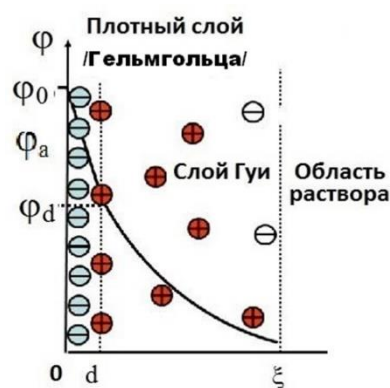


Рис. 1. Схема распределения зарядов на границе раздела фаз

В физическом отношении следует допустить вариации дисперсной фазы и дисперсионной среды относительно друг друга, причем совершенно по независимым причинам. Динамика такого процесса формирует противоположные, постоянно смещающиеся заряженные среды. Границу раздела сред называют плоскостью скольжения, которая обычно проходит по диффузной области. Принимая во внимание вариативный характер смены состояний, плоскость скольжения может находиться на разном расстоянии от поверхности раздела фаз.

Существующая в настоящее время концепция о структуре ДЭС полагает, что полное падение общего поверхностного потенциала  $\phi$  складывается из падения адсорбционного потенциала  $\phi_a$  в плотной части ДЭС и падения потенциала диффузного слоя  $\phi_d$  в его диффузной части. Потенциал  $\phi$  снижается по мере удаления от поверхности по параметру  $L$ . Причем в адсорбционном слое наблюдается линейное уменьшение  $\phi$ . Нарушение линейной зависимости происходит на границе между адсорбционным и диффузным слоями противоионов (линия  $d$ ). В диффузном слое  $\phi$  снижается по экспоненте.

Электрокинетический потенциал является важнейшей характеристикой коллоидной системы, а фактически – характеристикой двойного электрического слоя, поскольку он не зависит от параметров системы, в которой находится золь (радиус, длина, форма пор диафрагмы). Электрокинетический потенциал является однозначной характеристикой электрических свойств данной границы

раздела и определяется экспериментально из электрокинетических явлений, связанных с относительным перемещением фаз.

Обсуждение структуры ДЭС предусматривает использование нескольких различных терминов и понятий. Можно говорить о конструкции плоского конденсатора и обсуждать емкость, подразумевая некоторый показатель длительного использования накопленного заряда. А можно обсуждать конфигурацию пространства расположения зарядов в области раздела фаз. Совмещая эти суждения, представляется целесообразным закрепить полученные знания в формате графического образа, в определенной степени иллюстрирующего процесс образования электрического потенциала.

В самом общем случае при контакте твердого тела (электрода) с электролитом образуется фазовый потенциал. Собственно говоря, этот потенциал отождествляет наличие электродного потенциала, обнаруживаемого на границе раздела сред (ДЭС). Выделяя понятие о контактной разности потенциалов, следует полагать наличие потенциала, величину которого измеряют в единицах напряжения – вольтах (В). В этом смысле гальваническая разность потенциалов всегда будет соответствовать контактной разности потенциалов.

Следует отметить, что понимание процесса образования разности потенциалов, с учетом особенностей атомарной конструкции электрода, необходимо расширить. Действительно, столь очевидные понятия о ДЭС хорошо известны в термодинамике, где рассматривается функция состояния системы, отождествляемая с термодинамическим потенциалом. Это понятие несколько завуалировано терминологией электрохимии, основанной на представлении валентности. Выделяя значимость термодинамического показателя состояния системы, представляется необходимым построение обобщенного понятия: «контактная разность потенциалов & термодинамический показатель». Введение в рассмотрение термодинамического потенциала представляется целесообразным при формировании оценки произведенной работы по изменению структуры или состояния системы, что и отражается в несколько завуалированной форме в понятии «химическая валентность».

В электрохимической реакции, где акцентируется внимание на ДЭС, большое внимание уделяется атомарной конструкции твердого тела (электрода). В частности, значительное внимание уделяется количеству электронов на внешней орбитали атома. Это понятие формирует представление об окислительных и восстановительных свойствах в области контакта электрод – электролит. В физике атомарных конструкций это понятие отождествляется потенциалом ионизации атома или иначе – энергией ионизации. Величина энер-

гии ионизации указывает на возможность удаления из конструкции атома одного электрона, расположенного на последней орбитали. Взаимная обусловленность потенциала ионизации и энергии ионизации задается выражением:  $E = Ue$ , эВ, где  $e$  – заряд электрона.

С позиции теоретической физики отрыв от атома первого электрона характеризуется первым ионизационным потенциалом ( $J_1$ ), второго – вторым ( $J_2$ ) и далее по аналогии. Установлено на практике, что последовательные потенциалы ионизации в атоме возрастают, так как каждый следующий электрон необходимо отрывать от иона с возрастающим на единицу положительным зарядом (таблица 1).

ТАБЛИЦА 1. Потенциалы ионизации типичной группы атомов, эВ/атом

Элемент	$J_1$	$J_2$	$J_3$	$J_4$	$J_5$	$J_6$	$J_7$	$J_8$
Литий	5,39	75,6	122,4	-	-	-	-	-
Бериллий	9,32	18,2	158,3	217,7	-	-	-	-
Бор	8,30	25,1	37,9	259,3	340,1	-	-	-
Углерод	11,26	24,4	47,9	64,5	392,0	489,8	-	-
Азот	14,53	29,6	47,5	77,4	97,9	551,9	666,8	-
Кислород	13,60	35,1	54,9	77,4	113,9	138,1	739,1	871,1
Фтор	17,40	35,0	62,7	87,2	114,2	157,1	185,1	953,6
Неон	21,60	41,1	63,0	97,0	126,3	157,9		

Следует отметить, что понятие потенциала ионизации создается на типичной модели атома, декларирующей наличие ядра и электронных орбиталей. Такая атомарная конструкция характеризуется набором физических параметров, где важное значение придается заряду ядра и радиусу атома. Именно эти параметры позволяют ввести в рассмотрение некоторый процесс – работу по отделению от атомарной конструкции первоначально одного внешнего электрона. Последовательное применение такой операции порождает ряд значений, характеризующих работу, выраженную в единицах энергии. Этот тезис многократно проверялся, а некоторые результаты исследований показаны в таблице 1.

Следуя этим представлениям, делается вывод о возможности модификации атомарной конструкции, но с условием совершения работы. Развивая это представление, нетрудно представить физический процесс взаимодействия отдельных атомарных конструкций, помещенных в электролит. В таком случае величину работы следует оценивать по отношению к некоторому известному процессу, в котором действует аналогичный физический принцип.

По существу, независимо от свойств электролита, создание конструкции из двух электродов, подсоединенных некоторым образом к электропроводящей среде, инициализирует воспроизведение процесса образования ДЭС, а, следовательно, и



электродного потенциала. Создание ДЭС осуществляется с учетом индивидуальных особенностей атомарной конструкции химического элемента. Одним из таких индивидуальных показателей является потенциал ионизации, который так же, как и электродный потенциал, определен посредством эксперимента. Естественная физическая сущность этих показателей очевидна. Именно на основе сбалансированного рассмотрения этих показателей представляется возможным создать образ фазового потенциала.

Действительно, на поверхности электрода, представляющего твердое тело, в точке контакта со средой электролита инициализируется избыточный электрический заряд, который естественно компенсируется ионами с противоположным знаком. Этот самопроизвольный эффект на границе раздела сред порождает ДЭС. Электрический потенциал на границе раздела сред возникает как следствие создания контактной системы: твердое тело – электролит. В такой системе произвольно запускается процесс по минимизации поверхностной энергии контакта, естественно, с учетом свойств твердого тела и электролита.

ДЭС – тонкий поверхностный слой из пространственно распределенных электрических зарядов противоположных знаков, сосредоточенный на границе раздела фаз. Теоретические основы электрохимии убедительно свидетельствуют о том, что в электрическую энергию можно превратить энергию только окислительно-восстановительного процесса. Следуя этому понятию, декларируем о наличии возможности создания гальванического элемента, в конструкции которого происходит превращение химической энергии в электрическую. Ведущими конструктивными составляющими гальванического элемента являются пара электродов и электролит. На одном из электродов реализуется реакция окисления, а на другом электроде – реакция восстановления. Воспроизведение химических реакций требует наличия двух видов проводников: первого и второго рода. В качестве основы электрода всегда рассматривается металл – проводник первого рода. Напротив, электролит всегда рассматривается как проводник второго рода. Наличие в системе гальванического элемента двух проводников разного рода и инициализирует ДЭС, что и обнаруживается в натурном эксперименте. С позиции физики это является следствием перехода электронов из одной среды в другую. Атомарная энергия связи в конденсированных средах определяется величиной работы выхода, другими словами, энергией отрыва электрона от атома. Величина работы, которую необходимо совершить, чтобы удалить один внешний электрон с атомарной орбитали, определяется как энергия ионизации атома. Типичные значения энергии ионизации определяются в серии натурных лабораторных исследований. Такие значения известны

практически для всех атомарных конструкций, которые определяются по схеме:

$$M_e - e^- \Rightarrow M_e^+ + E, \quad (1)$$

где  $E$  – работа, соответствующая перемещению электрона от ядра атома в бесконечность, эВ или кДж/моль.

С другой стороны, выделение особенностей атомарной конструкции твердого тела, как электрода, также требует проведения натурных исследований. Цель таких исследований – проверка электрода на способность в участие окислительной или восстановительной реакции.

Очевидно, что в случае внесения металла в раствор электролита, содержащего ионы этого металла, через некоторое время установится электрохимическое равновесие. При этом следует учитывать, что если химический потенциал ионов металла  $\mu_m$  больше химического потенциала  $\mu_a$  аналогичных ионов в растворе электролита, то ионы перейдут из металла в раствор. В этом случае поверхность металла – электрода приобретет отрицательный заряд. Аналогичное явление будет наблюдаться при обратной схеме распределения зарядов на поверхности металла и ионов раствора. Для этого случая поверхность металла приобретет положительный заряд. Образование зарядов на поверхности электродов инициализирует формирование электрического потенциала  $U$ . Наличие этого феномена можно интерпретировать формально, воспользовавшись выражением Нернста:

$$U = \frac{RT}{Fn} \ln \frac{a_{\text{пов.}}}{a_{\text{раст.}}}, \quad (2)$$

где  $n$  – заряд иона;  $F$  – число Фарадея;  $a_{\text{пов.}}$  и  $a_{\text{раст.}}$  – активности ионов у поверхности и в растворе.

ТАБЛИЦА 2. Типичные показатели водородного ряда активности металлов

Атом	Потенциал $U$ , В	Энергия $E$ , эВ
Литий	-3,050	5,390
Калий	-2,925	4,339
Рубидий	-2,925	4,176
Цезий	-2,923	3,893
Барий	-2,910	5,210
Стронций	-2,890	5,692
Кальций	-2,870	6,111
Натрий	-2,710	5,138
Магний	-2,360	7,644
Алюминий	-1,660	5,987

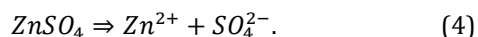
Электрической характеристикой ДЭС является потенциал ( $U$ ), который практически не зависит от концентрации электролита и характеризует природу поверхности частиц электрода. Его можно рассматривать как работу, которую нужно совер-

шить, чтобы перенести элементарный заряд из бесконечно удаленной точки объема раствора к поверхности твердой фазы.

Если потенциал  $U_1$  одного металла ( $M_1$ ) меньше потенциала  $U_2$  другого металла ( $M_2$ ):  $U_1 < U_2$ , то электроны будут переходить из одного металла ( $M_1$ ) в другой ( $M_2$ ). Металл  $M_1$ , который покидают электроны, заряжается положительно, а металл  $M_2$ , который принимает электрон, приобретает отрицательный заряд. Очевидно, в этом случае обнаруживается контактный потенциал, определяемый выражением:

$$DE = U_2 - U_1. \quad (3)$$

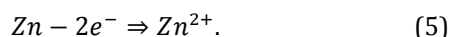
Рассмотрим классический пример. Имеется цинковая пластина, соприкасающаяся с раствором сульфата цинка ( $ZnSO_4$ ). Формально имеем контакт двух сред. В водном растворе сульфат цинка диссоциирует на ионы:



Одновременно с этим происходит поляризация молекул воды. В растворе ионы электрода (металлический цинк) удерживаются в структуре металла благодаря энергии кристаллической решетки ( $E_{\text{крист}}$ ). С другой стороны ионы в растворе удерживаются благодаря энергии сольватации ( $E_{\text{сольв}}$ ).

Создание контактного слоя «металл – раствор электролита» инициализирует процесс взаимодействия ионов на поверхности металла с полярными молекулами воды. Следствием этого процесса является образование гидратной оболочки. Связь гидратированного иона металла с остальными ионами кристаллической решетки ослабевает. Если такой ион обладает достаточной энергией, то осуществляется отрыв от атомарной конструкции металла и переход в раствор. Потеря электронов инициализирует понижение заряда атомарной конструкции. Цинковая пластина приобретает отрицательный заряд. Массовость такого исхода естественно определяется не только энергией активации атомных орбиталей, но и площадью электрода.

В целом можно сказать, что в раствор переходит множество ионов металла. Однако с ростом концентрации ионов металла в растворе ослабевает процесс инъекции ионов, поскольку увеличивается размер ДЭС. По истечении некоторого времени наступает процесс равновесного состояния:  $Zn^{2+} = Zn^{2+}$ . Однако отрицательный заряд на электроде (цинк) остается постоянным:



Величина электродного потенциала цинка оценивается по отношению к водородному показателю и соответствует  $U = -0,763$  В. Аналогичные рассуждения для медной пластины позволяют установить потенциал медного электрода, который

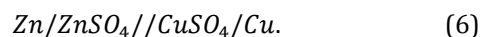
равен  $U = +0,337$  В. Используя полученные значения электродных потенциалов, можно создать гальванический элемент. Традиционно конструкции гальванических элементов воспроизводят в виде схемы.

В построчной записи слева направо записывается химический символ электрода или полуэлемента, обладающего меньшим значением электродного потенциала (на аноде). В правой части схемы по аналогии записывают химический символ элемента или полуэлемента, обладающего большим значением электродного потенциала (на катоде).

На первом месте в строчной записи указывается твердая фаза – металл или редокс-потенциал электрода. Затем указываются вещества, составляющие основу электролита. В большинстве случаев это жидкая фаза. В записи фазы отделяются друг от друга вертикальной чертой, если в одной фазе включены несколько компонент, то химическая запись структуры вещества проводится через запятую.

При записи символов электродов сперва указывают твердую фазу (например, металл, в случае металлического электрода или редокс-электрода), а затем – вещества, растворенные в жидкой фазе.

Фазы отделяются друг от друга одной вертикальной чертой. Если в одной фазе содержится несколько компонентов, то они записываются через запятую. Граница раздела между растворами двух электродов изображается двумя сплошными линиями. Это правило действует и для случая разделения растворов солевым мостиком. Применим рассмотренные принципы записи к гальваническому элементу на основе двух электродов (цинка и меди), получим выражение:



В таком случае напряжение гальванического элемента определяется следующим образом:

$$U = u_{Cu} - u_{Zn} + \frac{RT}{2F} \ln \frac{[Cu^{2+}]}{[Zn^{2+}]}, \quad (7)$$

где  $u_{Cu}$  – стандартный электродный потенциал меди, равный потенциалу электрода при активности иона металла, равной 1 моль/л;  $u_{Zn}$  – стандартный электродный потенциал цинка, равный потенциалу электрода при активности иона металла, равной 1 моль/л;  $R$  – универсальная газовая постоянная, равная 8,314 Дж/(моль·К);  $F$  – постоянная Фарадея ( $F = 96484,56$  Кл/моль);  $T = -273,16$  К<sup>0</sup>;  $Cu^{2+}$  и  $Zn^{2+}$  – активности ионов соответственно окислительной и восстановленной форм вещества, участвующего в полуреакции. С учетом ранее сделанных вычислений имеем:

$$U = U_2 - U_1 = +0,337 - (-0,763) = 1,1 \text{ В}. \quad (8)$$

Полученный результат свидетельствует о наличии электродвижущей силы (ЭДС) источника нап-

ряжения, при условии наличия ионов меди и цинка. Равные концентрации ионов инициализируют электрохимический процесс источника напряжения (гальванического элемента), ЭДС которого равна разности стандартных электродных потенциалов. При этом представляется возможным определить продолжительность рабочего периода источника напряжения. Для формирования аргументированного суждения по этому вопросу следует принять во внимание, что на аноде постоянно происходит процесс окисления цинка. Концентрация ионов цинка, при необратимой работе источника напряжения, постоянно увеличивается. При этом концентрация ионов меди уменьшается. Согласно уравнению (7) логарифм отношения концентраций в таком процессе принимает отрицательные значения. Это является свидетельством того, что разность потенциалов стремится к нулю. Финишным событием такого рабочего процесса является полное растворение цинкового анода. Такое событие характерно для гальванических элементов, создаваемых на основе разных электродов и электролитов. Типичный перечень источников напряжения представлен в таблице 3.

ТАБЛИЦА 3. Набор гальванических источников напряжения

Тип элемента	Катод	Электролит	Анод	Напряжение, В
Марганцево-цинковый	$MnO_2$	$KOH$	$Zn$	1,56
Марганцево-оловянный	$MnO_2$	$KOH$	$Sn$	1,65
Марганцево-магниевоый	$MnO_2$	$MgBr_2$	$Mg$	2,00
Свинцово-цинковый	$PbO_2$	$H_2SO_4$	$Zn$	2,55
Свинцово-кадмиевый	$PbO_2$	$H_2SO_4$	$Cd$	2,42
Свинцово-хлорный	$PbO_2$	$HClO_4$	$Pb$	1,92
Ртутно-цинковый	$HgO$	$KOH$	$Zn$	1,36
Ртутно-кадмиевый	$HgO_2$	$KOH$	$Cd$	1,92
Окисно-ртутно-оловянный	$HgO_2$	$KOH$	$Sn$	1,30
Хром-цинковый	$K_2Cr_2O_7$	$H_2SO_4$	$Zn$	1,9

Физический процесс создания электродного потенциала обладает фундаментальным первичным понятием ионизации – эндотермическим процессом образования ионов из нейтральных атомов или молекул. Установлено, что положительно заряженный ион образуется при условии, что электрон, находящийся на внешней орбитали атома, получает дополнительную порцию энергии. Эта порция энергии должна обеспечить преодоление потенциального барьера отрыва электрона от атома, что соответствует ионизационному потенциалу. По аналогии создается суждение об отрицательном ионе, который образуется при захвате дополнительного электрона атомом с выбросом энергии.

Исключительно энергетическая формулировка физического атомарного процесса способствует формированию понятия сопряженности с процес-

сом образования электродного потенциала, где также присутствует механизм перемещения электрона. В строгом соответствии с ранее изложенными концепциями современная физика рассматривает последовательный процесс ионизации и создания ДЭС. Это означает, что первоначально допускается оценивать работу по перемещению только одного электрона с внешней орбитали атома, и, только потом можно обсуждать величину энергетических затрат для отрыва последующего электрона. На этих представлениях формируется понятие о нескольких зонах, прилегающих к области контакта электрода с электролитом. Другими словами, процесс трансформации атомарной конструкции должен рассматриваться как последовательный набор простых процедур. Такое понятие полностью соответствует классической модели атома, в которой процедура атомной ионизации полностью детерминирована, а, следовательно, определена в терминах некоторой модели, например, информационной.

Математическая модель атомарной конструкции, созданной на основе типовых химических элементов и воспроизводимая с учетом постулатов квантовой теории, создается по выражению:

$$E(t) = (\mu_e + \mu_u)\cos(t) - \mu_u \cos\left(\frac{\mu_e + \mu_u}{\mu_u} t\right)$$

$$U(t) = (\mu_e + \mu_u)\sin(t) - \mu_u \sin\left(\frac{\mu_e + \mu_u}{\mu_u} t\right) \quad (9)$$

В математической модели представлены два сопряженных процесса, что соответствует действительности. Сопряженный образ создается на значениях показателей:  $\mu_e$  и  $\mu_u$  отождествляемых с потенциалом ионизации и электродным показателем, соответственно. Выберем в качестве вычислительной среды EXCEL. Относительная простота написания макросов позволяет воспроизвести вариативные образы фазового потенциала. Создадим графический образ ДЭС для атома лития  $Li$ . Воспользуемся данными таблицы 2 и выражения (9). Положим,  $\mu_e = 5,39$  эВ и  $\mu_u = -3,05$  В (рисунк 2).

Представленный выборочный набор образов ДЭС, для атомарных конструкций левее водорода, обладает небольшими различиями. Относительно малоразличимые образы соотносятся с литием и барием, в то время как более удаленная от начала водородного ряда атомная конструкция магния обладает существенными отличиями. Отметим, что такие построения можно дополнить процедурами точного сопоставления образов, что будет способствовать пониманию комплементарности энергетических процессов: ионизации и поляризации.

Созданная модель позволяет воспроизвести образы ДЭС и для сложных химических соединений, представленных типичными гальваническими элементами (см. таблицу 3).

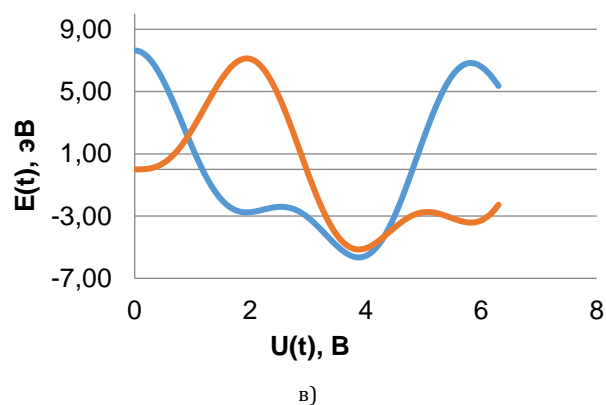
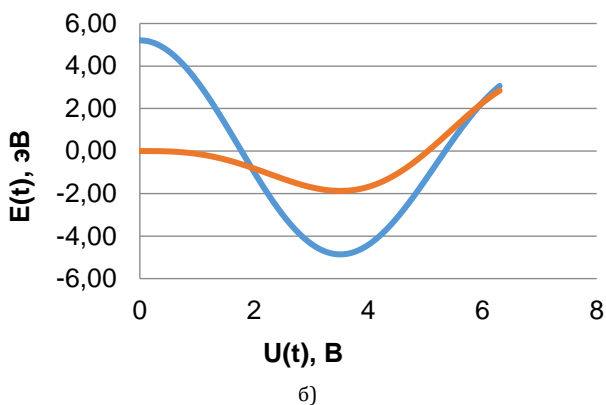
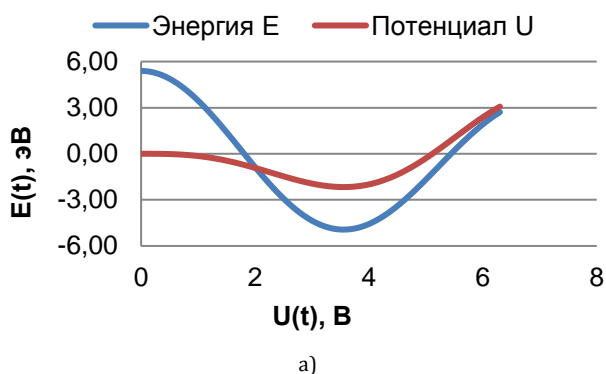


Рис. 2. Образы ДЭС нейтрального атома: а) лития; б) бария; в) магния

Воспользовавшись выражением (9), создадим для некоторых гальванических элементов образы ДЭС. Принимая во внимание, что конструкция гальванического элемента обладает двумя электродами ( $\mathcal{E}1$ ,  $\mathcal{E}2$ ), построение образа ДЭС проведено на разомкнутой цепи (рисунок 3).

Существующая методология разработки источников питания, на основе химических элементов, базируется на общих представлениях о закономерности образования электрического потенциала. Следуя этим представлениям, требуется достаточно длительное время как на создание пакета теоретических расчетов, с учетом особенностей электрохимических реакций, так и набора тест-процедур, в определенной мере отвечающих запросам современной электронной аппаратуры и условиям эксплуатации.

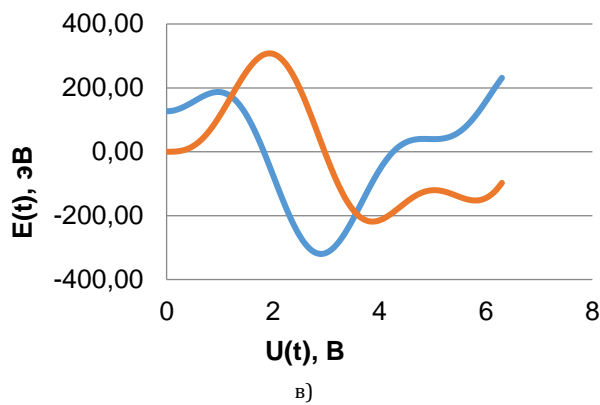
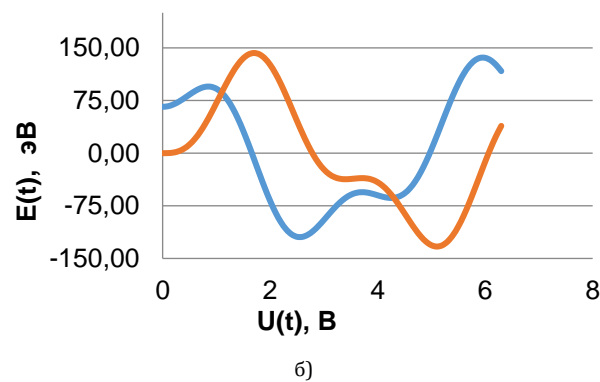
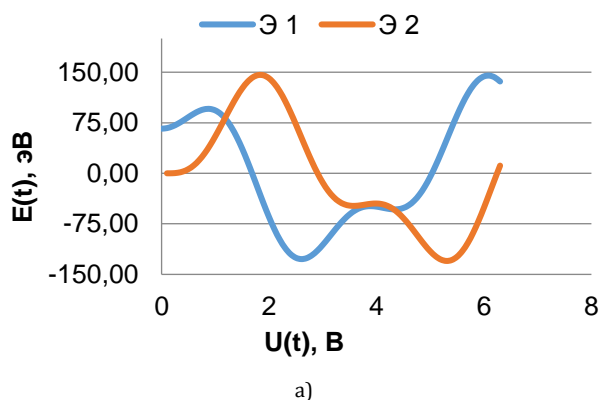


Рис. 3. Образ ДЭС элемента: а) марганцево-цинкового; б) марганцево-магниевого; в) свинцово-цинкового

Следуя известным теоретическим основам квантовой физики, представляется целесообразным создать методологическую основу эскизного проектирования источников питания. Информационные аспекты такого подхода к созданию источников питания обладают хорошей интерпретацией электрохимического процесса, реализуемого в разных по сложности конструкции источниках питания.

Полученные результаты адекватно отражают существо квантовой теории и, в частности, в полной мере указывают на возможность проведения всего цикла априорного конструирования источника питания, с учетом заданных показателей.



**Список используемых источников**

1. Лукомский Ю.Я., Гамбург Ю.Д. Физико-химические основы электрохимии. Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2013. 448 с.
2. Беляев А. П., Кучук В. И. Физическая и коллоидная химия: учебник. М: ГЭОТАР-Медиа, 2018. 751 с.
3. Макаров Л.М., Протасеня С.В. Моделирование фрактального образа атома кремния в микроэлектронике // Труды учебных заведений связи. 2018. Т. 4. № 2. С. 91–98. DOI:10.31854/1813-324X-2018-2-91-98
4. Макаров Л.М. Априорные знания об атомах химических элементов // Проблемы современной науки и образования. 2018. № 5(125). С. 6–15. DOI:10.20861/2304-2338-2018-125-001
5. Макаров Л.М. Алгоритм позиционирования атомов химических элементов // European Research: Innovation in Science, Education and Technology (London, United Kingdom, 08–09 April 2018): collection of scientific articles XXXIX International scientific and practical conference. Иваново: Издательство: PROBLEMS OF SCIENCE. 2018. С. 9–16. DOI:10.20861/2410-2873-2018-39-003
6. Макаров Л.М., Поздняков А.В. Формализм позиционирования стабильных изотопов // Проблемы современной науки и образования. 2018. № 6(126). С. 119–124. DOI:10.20861/2304-2338-2018-126-005
7. Макаров Л.М. Метрическое пространство атомарных конструкций химических элементов // Наука, техника и образование. 2018. № 8(49). С. 5–9. DOI:10.20861/2312-8267-2018-49-001

\* \* \*

# COMPUTER SIMULATION OF IMAGE REPRODUCTION OF DOUBLE ELECTRIC LAYER OF A POWER SOURCE

**L. Makarov<sup>1\*</sup>, S. Protasenya<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>The Bonch-Bruевич Saint-Petersburg State University of Telecommunication, St. Petersburg, 193232, Russian Federation

**Article info**

Article in Russian

**For citation:** Makarov L., Protasenya S. Computer Simulation of Image Reproduction of Double Electric Layer of a Power Source. *Proceedings of Telecommunication Universities*. 2018;4(4):68–76. (in Russ.) Available from: <https://doi.org/10.31854/1813-324X-2018-4-4-68-76>

**Abstract:** Declaring existence of theoretical bases of the choice and development of typical designs of galvanic cells and accumulators, the problem of modeling of the power supplies possessing a set of the comparative indicators received by computing means on the basis of fundamental thermodynamic indicators of a condition of an atomic design of electrodes and electrolyte is updated. Procedures of creation of computer model of reproduction of an image of a double electric layer are established, on the established indicators, various power supplies providing a priori designing.

**Keywords:** the power source potential, a computer model, atomic structure, double electric layer.

**References**

1. Lukomskii Iu.Ia., Gamburg Iu.D. *Fiziko-khimicheskie osnovy elektrokhimii* [Physical and Chemical and Bases of Electrochemistry]. Dolgoprudnyi: Intellekt Publ.; 2013. 448 p. (in Russ.)
2. Beliaev A.P., Kuchuk V.I. *Fizicheskaia i kolloidnaia khimii: uchebnik* [Physical and Colloidal Chemistry: textbook]. Moscow: GEOTAR-Media Publ.; 2018. 751 p. (in Russ.)
3. Makarov L., Protasenia S. The Fractal Simulation Image of Atom of Silicon in Microelectronics. *Proceedings of Telecommunication Universities*. 2018;4(2):91–98. (in Russ.) Available from: <https://doi.org/10.31854/1813-324X-2018-2-91-98>
4. Makarov L.M. Aprioristic Knowledge of Atoms of Chemical Elements. *Problems of Modern Science and Education*. 2018;5(125):6–15. (in Russ.) Available from: <https://doi.org/110.20861/2304-2338-2018-125-001>
5. Makarov L.M. Algorithm of Positioning of Atoms of Chemical Elements. *European Research: Innovation in Science, Education and Technology, 08–09 April 2018, London, United Kingdom. Collection of scientific articles XXXIX International scientific and practical conference*. Ivanovo: PROBLEMS OF SCIENCE Publ; 2018. p.9–16. (in Russ.) Available from: <https://doi.org/10.20861/2410-2873-2018-39-003>
6. Makarov L.M., Pozdnyakov A.V. Formalism of Positioning of Stable Isotopes. *Problems of Modern Science and Education*. 2018;6(126):119–124. (in Russ.) Available from: <https://doi.org/10.20861/2304-2338-2018-126-005>
7. Makarov L.M. Metric Space of Atomic Designs of Chemical Elements. *Nauka, tekhnika i obrazovanie*. 2018;8(49):5–9. (in Russ.) Available from: <https://doi.org/10.20861/2312-8267-2018-49-001>