

ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΜΟΝΟΔΙΑΣΤΑΤΩΝ ΚΑΙ ΔΙΣΔΙΑΣΤΑΤΩΝ ΜΟΝΤΕΛΩΝ ΜΕ ΑΞΟΝΟΣΥΜΜΕΤΡΙΑ ΓΙΑ ΤΗΝ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΗΛΕΚΤΡΟΧΗΜΙΚΩΝ ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΩΝ ΜΕΤΡΗΣΕΩΝ ΚΑΙ ΤΟΝ ΠΡΟΣΔΙΟΡΙΣΜΟ ΚΙΝΗΤΙΚΩΝ ΜΕΓΕΘΩΝ

Μ. Αντωνίου¹, Α. Καραντώνης^{1,*}

¹ Εργαστήριο Φυσικοχημείας, Σχολή Χημικών Μηχανικών, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Αθήνα, Ελλάδα

*antkar@mail.ntua.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η ανάλυση του μηχανισμού και ο προσδιορισμός των κινητικών σταθερών ηλεκτροχημικών αντιδράσεων βασίζεται στη ανάλυση κυρίως ηλεκτρικών πειραματικών δεδομένων (π.χ. βολταμμετρίας, αμπερομετρίας, εμπέδισης κ.λ.π.). Η ανάλυση απαιτεί τον εντοπισμό μίας κύριας παρατηρούμενης τιμής, π.χ. ένταση ή πλάτος κορυφής, και της εξάρτησής της από μία παράμετρο ελέγχου όπως η ταχύτητα σάρωσης ή συχνότητα μεταβολής του δυναμικού. Τέλος, ο προσδιορισμός της φυσικοχημικής ποσότητας, όπως η κινητική σταθερά, γίνεται βάσει αναλυτικών σχέσεων της εξάρτησης της παρατηρούμενης τιμής από την παράμετρο ελέγχου και βασίζονται πολύ συχνά στη θεώρηση μεταβολών μόνο σε μία διάσταση (1D μοντέλα). Έτσι, αν και οι πειραματικές μετρήσεις περιλαμβάνουν εκατοντάδες, ίσως και χιλιάδες, πειραματικά σημεία, μόνο ένα από αυτά χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό της ποσότητας που ενδιαφέρει. Όμως, η αυξημένη διαθέσιμη υπολογιστική ισχύς και η δυνατότητα μοντελοποίησης, μέσω υπολογιστή, πολύπλοκων γεωμετριών και πολύπλοκων αντιδράσεων επιτρέπει τη σύγκριση πειράματος και θεωρίας λαμβάνοντας υπόψη ολόκληρο το πλήθος δεδομένων μίας πειραματικής καμπύλης κι όχι μόνο την μία χαρακτηριστική τιμή. Στην εργασία αυτή γίνεται μία σύγκριση υπολογιστικών αποτελεσμάτων τυπικών ηλεκτροχημικών τεχνικών για ηλεκτροχημικά συστήματα δύο διαστάσεων με αξονική συμμετρία με αυτά της μίας διάστασης, καθώς και των αναλυτικών ή ημιαναλυτικών σχέσεων που τα περιγράφουν. Εντοπίζονται οι συνθήκες υπό τις οποίες τα αξονοσυμμετρικά συστήματα δύο διαστάσεων περιγράφονται ικανοποιητικά από μονοδιάστατες προσεγγίσεις καθώς και τα φυσικοχημικά φαινόμενα στα οποία οφείλονται οι αποκλίσεις. Τέλος, παρουσιάζεται η μορφή των αποκλίσεων όπως αποτυπώνεται σε προσομοιώσεις πειραματικών δεδομένων.

ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ: Προσομοίωση ηλεκτροχημικών μετρήσεων, μονοδιάστατα μοντέλα, μοντέλα δύο διαστάσεων με αξονοσυμμετρία

ΑΝΑΦΟΡΕΣ

- [1] Speiser B. (2014) Numerical Simulations in Electrochemistry. In: Kreysa G., Ota K., Savinell R.F. (eds) Encyclopedia of Applied Electrochemistry. Springer, New York, NY.
- [2] Franco A.A., (2013). *RSC Adv.*, 3: 13027-13058.
- [3] Savéant J-M (2006) Elements of Molecular and Biomolecular Electrochemistry. Wiley, Hoboken, New Jersey.