

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ ГЕЛЕЙ ОКСИГИДРАТА ЦИРКОНИЯ В УСЛОВИЯХ САМОПРОИЗВОЛЬНОГО ПУЛЬСАЦИОННОГО ЭЛЕКТРОТОКА

Б.А. Марков, Ю.И. Сухарев, И.Ю. Лебедева

В настоящей работе рассматривается математическая модель формирования оксигидратного геля на основе электрофоретической модели. Приводятся данные эксперимента (измерения самопроизвольного тока, вызываемого поляризованным двойным электрическим слоем геля (ДЭС)), которые позволяют утверждать, что данная модель не противоречит эксперименту.

Ключевые слова: оксигидрат циркония, пульсации, потоковые выплески ионов, поляризация, двойной электрический слой, конформационная нестабильность, толчковые возмущения, математическая модель.

Введение

Рассмотрим самые общие коллоидно-физические представления с тем, чтобы рассмотреть поведение ионных потоков в объёме коллоида. Заметим [1], что макромолекулярные коллоидные конструкции оксигидратов окружены поляризованным диффузным двойным электрическим слоем (ДЭС). В гель нередко вводят электролит, например, раствор собственной соли, и, как это установлено (например, в [2]), происходит взаимодействие геля оксигидрата как с раствором собственной соли, так и с молекулами воды. Это взаимодействие может приводить к образованию и поглощению определённого количества ионов диффузной частью ДЭС.

Таким образом, в гелевых образцах может наблюдаться сложная система движения – как линейно-перемещательного, так и колебательного, как крупных молекулярных образований (микроэлектрофорез [3-9]), так и ионного потокового движения внутри или вокруг этих макромолекулярных фрагментов.

Экспериментальная часть

Гели оксигидрата циркония (ГОЦ) синтезировали из солей оксихлорида циркония путем добавления в систему раствора едкого натра или аммиака при определенных условиях: pH = 9,25; количество вводимого циркония $n = 0,00094$ моль.

Электроток, возникающий в системе, измеряли на специальном электронном оборудовании [8] с частотой опроса системы 5 раз в секунду. Эксперимент проводили в течение 6 часов. Процесс термостатировали ($T = 303$ К).

Результаты эксперимента и их анализ

Экспериментально обнаружено (рис. 1, а, б, в), что между электродами возникает пульсационный ток. В оксигидратных гелевых системах (оксигидрата циркония) (ГОЦ), как нами показано ранее [1-5], колебательно-вращательные ионно-молекулярные потоки вызываются огромным множеством относительно редких стохастических трансформаций макромолекул геля (конформерные переходы при 298 К), которые, оставаясь координатно малоподвижными (если рассматривать координату их центра масс) в пространстве ячейки (вследствие своей огромной массы), непрерывно «накачивают» постоянно возобновляемые (колебательные) ионно-диффузионные потоки в геометрически вытянутом объеме геля. Эти потоки образуются из геометрически видоизменяющихся ДЭС, окружающих конформеры. В этом состоит смысл и своеобразие диффузии Арнольда [9] в гелях. Эти переходы можно рассматривать как периодические толчки или возмущения гелевой системы.

Известно [10], что в общем случае любая динамическая система имеет неустранимую область стохастичности в фазовом пространстве. Фактически это классические представления Ланжевена [10]. Гамильтониан такой колебательно-вращательной ионно-молекулярной коллоидно-химической системы можно записать в форме

$$H = H_0(I) + \varepsilon V(I, \theta, t), \quad (1)$$

здесь I, θ – N_0 -мерные векторы. Такая система имеет $N = N_0 + 1/2$ степеней свободы, причем $1/2$ относится к переменной t (время). В общем случае часть гамильтониана $H_0(I)$ имеет сепаратрисы, поэтому возмущение εV , разрушая их, образует стохастические слои при любых ε . Дальнейшая судьба стохастических траекторий определяется тем, какова топология слабого хаоса коллоидно-химической системы в фазовом пространстве.

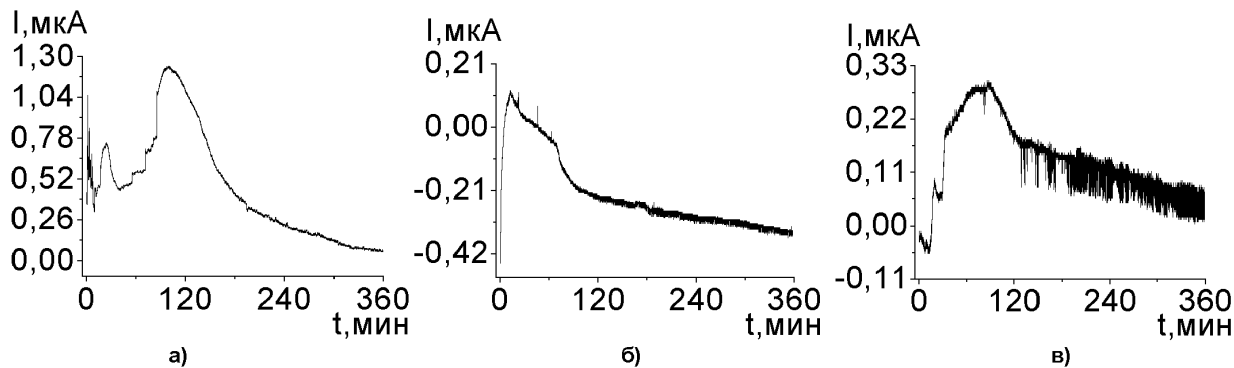


Рис. 1. Изменение тока поляризации гелей ГОЦ, магнитное поле отсутствует; три параллельных образца синтезировали при pH = 9,25; длина электрохимической ячейки $L = 7$ см; количество ГОЦ в ячейке $n = 0,00094$ моль

Попробуем аналитически описать явление токовых выделов, построив алгоритмическую модель данной задачи пока без магнитного поля.

Синхронизация периодических оксигидратных систем

Синхронизация нелинейных колебаний – одно из фундаментальных явлений природы. Его можно рассматривать как простейший пример самоорганизации взаимодействующих нелинейных систем. Под синхронизацией в гелевой системе мы понимаем установление некоторых соотношений между характерными временами токовых выделов, частотами или фазами колебаний парциальных подсистем в результате их взаимодействия.

С формально-математической точки зрения эффект синхронизации состоит в том, что два характерных собственных временных масштаба взаимодействующих колебательных систем, которые в отсутствие связи являются независимыми, при взаимодействии оказываются целочисленно кратными или рационально связанными. При этом важно, что эта кратность оказывается фиксированной в некоторой конечной области значений параметров системы, называемой областью синхронизации [10]. Это может быть и объем гелевой фазы в удлиненной электрохимической ячейке. Размеры этой области пока оценивать не будем.

Отсюда следует важнейшая особенность явления синхронизации оксигидратного геля: в любом нормальном сечении электрохимической ячейки ионно-молекулярные потоки (или сечения Пуанкаре) структурно очень близки (практически инвариантны).

Попробуем построить математическую модель этого явления в достаточно общем виде.

Математическая задача моделирования

Пусть к свежеприготовленному гелю добавлен электролит – например, раствор собственной соли. Ионы разных знаков будут оседать (адсорбироваться) на больших фрагментах коллоидных частиц, компенсируя заряды друг друга. Таким образом, в сравнительно свободном перемещении частиц будет участвовать лишь небольшое количество из общего числа ионов, или влияние электрического поля на движение заряженных частиц будет невелико. Нас интересует принципиальная возможность явления, а не точный количественный результат, определение тех или иных параметров. Следовательно, будем считать, что все параметры, связанные с движением ионов или постоянны, или линейны (линеаризованы). Ограничимся поэтому простой линейной моделью. Как будет показано ниже, этот подход не лишен определённого предсказательного смысла.

Согласно [11], потоки зарядов I_+ и I_- в отсутствие градиентов температуры и химических потенциалов определяются соотношениями:

$$I_+ = L_{11} \text{grad } \varphi + L_{12} \text{grad } P, \quad I_- = \tilde{L}_{11} \text{grad } \varphi + \tilde{L}_{12} \text{grad } P, \quad (2)$$

где φ – электрический потенциал, P – осмотическое давление, которое возникает в силу «сетчатости» структуры электроосмотического потока положительно заряженных частиц, \tilde{L}_{11} и \tilde{L}_{12} – соответствующие коэффициенты для отрицательно заряженных ионов.

Токи I_+ и I_- могут быть различными, и это может приводить к накоплению заряда.

Уравнение непрерывности для концентраций с выделенной отдельно диффузией имеют вид:

$$\frac{\partial n_+}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_+ = D\Delta n_+, \quad \frac{\partial n_-}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_- = D\Delta n_-, \quad (3)$$

где \vec{j}_+ и \vec{j}_- плотности токов ионов соответствующих знаков, $D\Delta n$ – вклад, обусловленный диффузией, D – коэффициент диффузии, Δ – оператор Лапласа, n_{\pm} – концентрация заряженных положительно и отрицательно частиц. Заметим, что j и I имеют разные размерности. Поэтому разделим I_+ и I_- на площадь сечения, которую будем считать постоянной, и из (3) получим соотношения:

$$\vec{j}_+ = l_{11} \operatorname{grad} \varphi + l_{12} \operatorname{grad} P, \quad \vec{j}_- = l_{21} \operatorname{grad} \varphi + l_{22} \operatorname{grad} P, \quad (4)$$

где все коэффициенты даются в отношении к площади поперечного сечения.

Подставим выражения для плотностей токов (4) в уравнения непрерывности (3):

$$\frac{\partial n_+}{\partial t} + l_{11}\Delta\varphi + l_{12}\Delta P = D\Delta n_+, \quad \frac{\partial n_-}{\partial t} + l_{21}\Delta\varphi + l_{22}\Delta P = D\Delta n_-. \quad (5)$$

Осмотическое давление P определяется формулой $P = inRT$, где i – некое число, n – концентрация вещества, создающего осмотическое давление, $R = k_B N_A$ – универсальная газовая постоянная, T – температура. В условиях эксперимента изменяется только концентрация, следовательно, мы можем считать, что давление прямо пропорционально разности концентраций ионов, $P = \alpha(n_+ - n_-)$.

$$\frac{\partial n_+}{\partial t} + l_{11}\Delta\varphi + \tilde{l}_{12}\Delta(n_+ - n_-) = D\Delta n_+, \quad \frac{\partial n_-}{\partial t} + l_{21}\Delta\varphi + \tilde{l}_{22}\Delta(n_+ - n_-) = D\Delta n_-, \quad (6)$$

где постоянный множитель α учтён в новых коэффициентах \tilde{l}_{12} и \tilde{l}_{22} .

Уравнение Пуассона (без краевых условий) имеет вид: $\Delta\varphi = 4\pi(n_+ - n_-)$. Подставляя это выражение в (6), имеем:

$$\begin{cases} \frac{\partial n_+}{\partial t} + \tilde{l}_{11}(n_+ - n_-) + \tilde{l}_{12}\Delta(n_+ - n_-) = D\Delta n_+, \\ \frac{\partial n_-}{\partial t} + \tilde{l}_{21}(n_+ - n_-) + \tilde{l}_{22}\Delta(n_+ - n_-) = D\Delta n_-. \end{cases} \quad (7)$$

Вычтем уравнения (7) друг из друга и введём обозначение $u = n_+ - n_-$. В результате получим уравнение $\frac{\partial u}{\partial t} + (\tilde{l}_{11} - \tilde{l}_{21})u + (\tilde{l}_{12} - \tilde{l}_{22})\Delta u = D\Delta u$. Добавив к этому уравнению краевые и начальные условия, получим замкнутую краевую задачу.

Будем считать, что поток ионов движется к электроду и создает мгновенную разность потенциалов на нем (в замкнутом контуре проводника первого рода, рис. 1). Следовательно, на границе области необходимо поставить краевое условие конвекции – условие третьего рода,

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} - \lambda u \right) \Big|_{x=0} = 0, \quad \text{где } \lambda \text{ – число, так как мы будем считать, что электрод расположен при } x = 0.$$

Всю область, в которой мы будем решать задачу, мы будем считать неограниченной, $x \in [0; +\infty)$. Такие геометрические размеры удобно приписать области, так как все явления, указанные в вводной части и которые мы можем зафиксировать, происходят лишь в узком слое близ электрода, длиной примерно 10^{-3} см. В сравнении с геометрическими размерами электрохимической ячейки (около 10^{-7} см, [12]) характерный размер можно считать малым, а всю область – бесконечно большой. Что касается начального условия, то можно считать, что оно нам известно и представляет собой функцию $u|_{t=0} = u_0(x)$. Таким образом, задача окончательно принимает вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + au = (D-b)\Delta u, & x \in [0; +\infty), t \in [0; +\infty), \\ \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0} = \lambda u \Big|_{x=0}, u \Big|_{x \rightarrow +\infty} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x \rightarrow +\infty} = 0, \\ u \Big|_{t=0} = u_0(x), \end{cases} \quad (8)$$

где $a = \tilde{l}_{11} - \tilde{l}_{21}$, $b = \tilde{l}_{12} - \tilde{l}_{22}$. Далее – $D - b = B$.

Заметим, что в (8) разность $D - b$ может быть и положительна, и отрицательна. Положительная разность означает, что диффузия ионов подавляет разделение зарядов в силу осмотического давления. Отрицательная – означает, что осмотическое давление более сильно, чем диффузия, и, если есть хоть небольшое отклонение разности зарядов от нуля, то эта разность будет нарастать.

Мы ограничимся рассмотрением случая, когда $D - b > 0$. Число a по смыслу задачи положительно. Отметим, что задача (8) хорошо исследована, теоремы единственности, существования и способ построения решения можно найти в [10].

Ток – градиент разности концентраций: $\vec{j} = grad(n_+ - n_-)$. На границе области $j = \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0}$.

Сначала рассмотрим такую модельную задачу: пусть начальное отклонение $u_0 = A\delta(x - x_0)$, где $x_0 > 0$. Тогда вся задача (8) принимает вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + au = B\Delta u, B > 0, a > 0, x \in [0; \infty), t \in [0; +\infty), \\ \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0} = \lambda u \Big|_{x=0}, \quad \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x \rightarrow +\infty} = 0, u \Big|_{x \rightarrow +\infty} = 0, \\ u \Big|_{t=0} = A\delta(x - x_0). \end{cases} \quad (9)$$

Будем искать решение в виде: $u = v \exp(-at)$, где v – новая неизвестная функция. Решение (9) относительно функции v может быть представлено в виде [10]:

$$v(x, t) = \frac{A}{\sqrt{4\pi Bt}} \left\{ \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{4Bt}\right) + \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{4Bt}\right) - 2\lambda \int_0^{+\infty} \exp\left(-\frac{(x + x_0 + \xi)^2}{4Bt} - \lambda\xi\right) d\xi \right\}.$$

Мы можем зарегистрировать ток только при $x = 0$, следовательно, для сравнения с экспериментом необходимо найти $v(x, t) = \frac{A}{\sqrt{\pi Bt}} \left\{ \exp\left(-\frac{x_0^2}{4Bt}\right) - \lambda \int_0^{+\infty} \exp\left(-\frac{(x_0 + \xi)^2}{4Bt} - \lambda\xi\right) d\xi \right\}$. Вычисляя интеграл, получим:

$$v(x, t) = \frac{A}{\sqrt{\pi Bt}} \left\{ \exp\left(-\frac{x_0^2}{4Bt}\right) - \frac{\lambda}{2} \left(1 + erf\left(\frac{x_0}{4\lambda Bt} + \frac{1}{2}\right)\right) \exp(-\lambda x_0 - \lambda^2 Bt) \right\}.$$

Заметим, что второе слагаемое достаточно быстро убывает с ростом времени, а так как промежуток времени в экспериментах обычно не мал, то слагаемым можно пренебречь – по крайней мере, для несложных и достаточно грубых оценок.

Так как на границе $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0} = \lambda u \Big|_{x=0}$, ток $j = \frac{\partial u}{\partial x}$, то $j = \frac{v(t)e^{-at}}{\lambda}$ и мы можем написать:

$$j \approx \frac{A}{\lambda\sqrt{\pi Bt}} \exp\left(-\frac{x_0^2}{4Bt} - at\right).$$

Исходя из графиков экспериментальных кривых зависимостей регистрируемого тока или ионных потоков от времени и, считая, что он содержит только «последствия» возникшей флуктуации заряда, мы можем вычислить коэффициенты a и $x_0^2/4B$. Обозначим их как $K_1 = x_0^2/4B$ и $K_2 = -a$, и будем подбирать методом наименьших квадратов. При этом следует отметить, что коэффициент K_2 вряд ли может быть отрицателен, так как это будет соот-

ветствовать случаю, когда заряды при движении под действием электрического поля (т.е. при движении к компенсации) стали бы разделяться. Положительный коэффициент K_1 соответствует случаю разделения зарядов под действием осмотического давления.

Подбор коэффициентов K_1, K_2 методом наименьших квадратов показан на примере рис. 2.

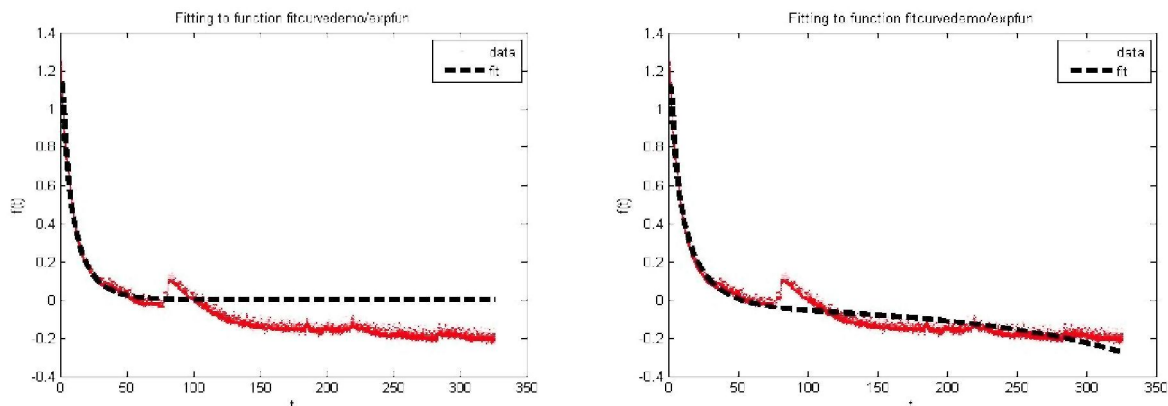


Рис. 2. Подбор коэффициентов методом наименьших квадратов. Пунктирная линия - подбор, серые точки - экспериментальные данные. По оси абсцисс отложено время в минутах, по оси ординат обоих графиков - значения токов в безразмерных единицах

Первый график соответствует подбору по формуле $j \approx \frac{A}{\lambda\sqrt{\pi Bt}} \exp\left(-\frac{x_0^2}{4Bt} - at\right)$. Второй график - $\frac{Ae^{-at}}{\lambda\sqrt{\pi Bt}} \left\{ \exp\left(-\frac{x_0^2}{4Bt}\right) - \frac{\lambda}{2} \left(1 + \operatorname{erf}\left(\frac{x_0}{4\lambda Bt} + \frac{1}{2}\right)\right) \exp(-\lambda x_0 - \lambda^2 Bt) \right\}$.

Оценки для первого графика дают: $A/\lambda\sqrt{\pi B} = 2,5183$, $a = 0,000923 \text{ с}^{-1}$, $x_0^2/4B = 46,062 \text{ с}$. Второй график позволяет оценить и величину λ , которая получается отрицательной (соответствует отталкиванию зарядов). Для второго графика: $A/\lambda\sqrt{\pi B} = 2,6198$, $a = 0,000595 \text{ с}^{-1}$, $x_0^2/4B = 37,806 \text{ с}$, $\lambda = -0,0957 \text{ м}^{-1}$.

Проведённый расчёт, как и сама модель, не отличается точностью, но даёт верные оценки, например, величины коэффициентов диффузии: как следует из [12], значение $x_0 \sim 10^{-3}$, см. При этом коэффициент диффузии ионов в геле оценивается величиной $D \sim 10^{-8}$, см²/с, что соответствует литературным данным [1].

Моментов разделения заряда может быть несколько. В этом случае u_1 можно искать в виде:

$$u_1 = \sum_{k=1}^N \left(\frac{A_k e^{-at}}{\lambda\sqrt{\pi Bt}} \left\{ \exp\left(-\frac{x_{0k}^2}{4Bt}\right) - \frac{\lambda}{2} \left(1 + \operatorname{erf}\left(\frac{x_{0k}}{4\lambda Bt} + \frac{1}{2}\right)\right) \exp(-\lambda x_{0k} - \lambda^2 Bt) \right\} \right).$$

Отметим, что расчёт графика при $N = 2$ был нами проведён. Достигнутая точность несколько больше, но принципиальных улучшений не было достигнуто. Оценка для параметров мало отличается от предложенных к рис. 2: $A_1/\lambda\sqrt{\pi B} = 2,5050$, $a = 0,000497 \text{ с}^{-1}$, $x_{01}^2/4B = 43,446 \text{ с}$, $\lambda = -0,0921 \text{ м}^{-1}$, $A_2/\lambda\sqrt{\pi B} = 0,8076$, $x_{02}^2/4B = 29,418 \text{ с}$.

Однако, проведенные расчеты удовлетворяют только некоторому усредненному асимптотическому не колебательному случаю, рис. 2. Реальная экспериментальная картина представлена целым набором периодических токовых выплесков во времени, не следующих из предложенной выше картины и требующих описания, которое не следует из предложенных выше вычислений. Это иное физико-химическое явление.

При движении к электроду поток зарядов как бы «оседает» на графитовых или платиновых электродах. Затем зарядовый поток «стекает», предварительно создав разность потенциалов (то есть электроток), и возвращается вновь в дисперсионную среду. Разность потенциалов исчезает, «рассасывается». Таким образом, возникают колебательные движения ионных потоков гелевых ДЭС, которые и формируют общую картину ионных потоковых выплесков тока.

Для учёта этого явления удобно записать задачу (9) в виде:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + au = B\Delta u, \quad B > 0, a > 0, \quad x \in [0; \infty), t \in [0; +\infty), \\ \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0} = -(\lambda + \varepsilon \sin(\omega t + \varphi))u \Big|_{x=0}, \quad \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x \rightarrow +\infty} = 0, \quad u \Big|_{x \rightarrow +\infty} = 0, \\ u \Big|_{t=0} = A\delta(x - x_0), \end{cases} \quad (10)$$

где ε - малая величина, параметр колебаний, ω - частота «приэлектродных» колебаний, φ - их фаза. Мы ограничимся самым простым описанием колебаний - с помощью гармонической функции, хотя это явление заслуживает отдельного и подробного рассмотрения.

Если $\lambda > \varepsilon$, то, используя подход [10], несложно доказать, что, если решение (10) существует, то оно единственно. Попробуем построить решение, доказав тем самым, что решение (10) существует.

Для этого в (10) проведём преобразование Лапласа по положительной части оси ОХ, решим полученное уравнение относительно t , и обратим преобразование Лапласа. В полученном интегральном соотношении перейдём к пределу $x \rightarrow 0$. В результате получим следующее интегральное уравнение:

$$u \Big|_{x=0} = \frac{A}{\sqrt{4\pi Bt}} \exp\left(-\frac{x_0^2}{4Bt} - at\right) - \int_0^t \frac{(\lambda + \varepsilon \sin(\omega\tau + \varphi))e^{-a\tau} u \Big|_{x=0}(\tau)}{\sqrt{4\pi B(t-\tau)}} d\tau.$$

Решение этого уравнения при $\lambda > \varepsilon$ существует и единственно [13]. Решение для случая $\varepsilon = 0$ приведено в [10], при небольших значениях ε решение несложно построить методом итераций.

Экспериментальные данные, результаты подбора неизвестных величин (в том числе и частоты колебаний, амплитуды колебаний и фазы) и приближение их приведены ниже, на рис. 3. Отметим, что полученные данные согласуются с результатами огромного числа проведенных экспериментов. Очевидная модельная приближенность рассмотрения явления требуют более пристального его изучения с точки зрения наноявлений.

Выводы

Пульсационный характер токовых (поточковых) выделений ОГЦ определяется конформационными перестройками оксигидратной матрицы. Следствием конформационной нестабильности является изменение поляризации ДЭС гелевых частиц, что проявляется в виде периодических выделений электротока.

Математическая модель учитывает толчковое периодическое возмущение гелевой системы, что определяет удлиненные, пиковые токовые выделения.

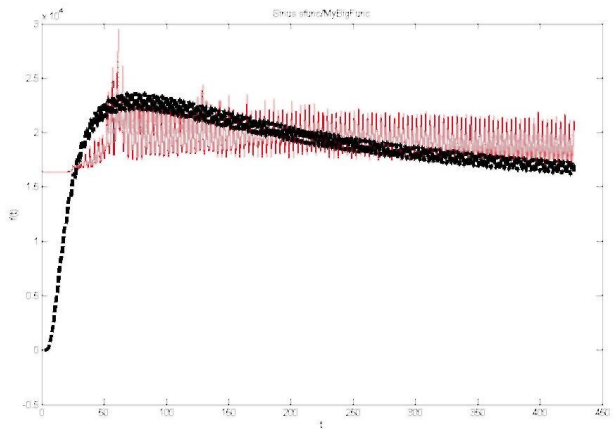


Рис. 3. Подбор коэффициентов методом наименьших квадратов с учётом колебаний. Пунктирная линия – подбор, серые точки – экспериментальные данные.

По оси абсцисс отложено время в минутах, по оси ординат обоих графиков – значения токов в безразмерных единицах.

$$A = 2,7962, \quad x_0 = 0,0001 \text{ м}, \quad \lambda = 1,2909, \quad B = D = 2 \cdot 10^{-12} \text{ м}^2/\text{с}, \quad a = 0,0005 \text{ м}^{-1}, \quad \varepsilon = 0,0986, \quad \omega = 0,034 \text{ с}^{-1}, \quad \varphi = 0,614$$

Литература

1. Фридрихсберг, Д.А. Курс коллоидной химии / Д.А. Фридрихсберг. - М.: Наука, 1974. - 378 с.
2. Сухарев, Ю.И. Нелинейность гелевых оксигидратных систем / Ю.И. Сухарев, Б.А. Марков. - Екатеринбург: УрО РАН, 2005. - 468 с.
3. Духин, С.С. Электрофорез / С.С. Духин, Б.В. Дерягин. - М.: Наука, 1976. - 328 с.
4. Сухарев, Ю.И. Электрофоретические исследования периодических сорбционных характеристик оксигидрата иттрия и циркония / Ю.И. Сухарев, И.Ю. Сухарева, А.М. Кострюкова и др.

// Известия Челябинского научного центра Уральского отделения Российской Академии наук. - 2003. - №4(21). - С. 121-125.

5. Сухарев, Ю.И. Теоретическое рассмотрение электрофоретических периодических характеристик гелей оксигидрата иттрия и циркония / Ю.И. Сухарев, И.Ю. Сухарева, А.М. Кострюкова, Б.А. Марков // Известия Челябинского научного центра Уральского отделения Российской академии наук. - 2003. - № 4(21). - С. 125-130.

6. Марков, Б.А. Самоорганизация гелей в потенциале Леннард-Джонса / Б.А. Марков, Ю.И. Сухарев, И.Ю. Сухарева // Известия Челябинского научного центра Уральского отделения Российской академии наук. - 2004 - № 3(24). - С. 86-91.

7. Сухарев, Ю.И. Влияние электрического и магнитного полей на оптические свойства гелей оксигидрата иттрия / Ю.И. Сухарев, Е.П. Юдина, И.Ю. Сухарева // Известия Челябинского научного центра Уральского отделения Российской академии наук. - 2002. - № 4. - С. 127-132.

8. Sukharev, Yu.I. Spontaneous pulsating current in zirconium oxyhydrate gels / Yu.I. Sukharev, B.A. Markov, A.Yu. Prokhorova, I.Yu. Lebedeva // WSEAS TRANSACTIONS ON CIRCUITS AND SYSTEMS Issue 11 (ISSN: 1109-2734). - November, 2005 - V. 4. - P. 1477-1484.

9. Сухарев, Ю.И. Коллоидно-химический вариант механизма диффузии Арнольда / Ю.И. Сухарев // Вестник ЮУрГУ, Серия «Математика, физика, химия». - 2007. - Вып. 8. - № 3(75). - С. 89-94

10. Свешников, А.Г. Лекции по математической физике / А.Г. Свешников, А.Н. Боголюбов, В.В. Кравцов. - М.: Изд-во МГУ, 1993. - 352 с.

11. Анищенко, В.С. Нелинейные эффекты в хаотических и стохастических системах / В.С. Анищенко, В.В. Астахов, Т.К. Владивасова и др. - Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003. - 544 с.

12. Sukharev, Yuri I. Concerning the interconnections of self-organizing oxyhydrate gels and their experimental determination / Yuri I. Sukharev, T.G. Krupnova, E.P. Yudina *et al.* // Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects. - 2007. - 300. - С 281-286.

13. Гахов, Ф.Д. Уравнения типа свёртки / Ф.Д. Гахов, Ю.И. Черский. - М., 1978. - 300 с.

Поступила в редакцию 26 апреля 2008 г.

BEHAVIOR SIMULATION OF THE ZIRCONIUM OXYHYDRATE GELS IN THE CONDITIONS OF SPONTANEOUS OSCILLATORY CURRENT FLOW

The authors analyze the mathematical scheme of oxyhydrate gel formation on the basis of the electrophoretic model. They provide the experiment data (spontaneous current measurements provoked by the polarized double-electrical gel layer (DEL)) which proves that the scheme does not go against the experiment.

Keywords: zirconium oxyhydrate, pulsation, flow splashes of ions, polarization, double electrical layer, conformation instability, impact disturbance, mathematical model.

Markov Boris Anatolievich - Cand.Sc. (Physics and Mathematics), associate professor, Department of Mathematical Analysis, South Ural State University.

Марков Борис Анатольевич - кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра Математического анализа, Южно-Уральский государственный университет.

Sukharev Yuriy Ivanovich - Dr.Sc. (Chemistry), Professor, Head of the Department of Colloid and Coherent Chemistry, Dean of Faculty of Chemistry, Chelyabinsk State University.

Сухарев Юрий Иванович - доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой Коллоидной и когерентной химии, декан Химического факультета, Челябинский государственный университет.

e-mail: yuri_sukharev@mail.ru

Lebedeva Irina Yurievna - Cand.Sc. (Chemistry), senior lecturer, Department of General and Engineering Ecology, South Ural State University.

Лебедева Ирина Юрьевна - кандидат химических наук, старший преподаватель, кафедра Общей и инженерной экологии, Южно-Уральский государственный университет