

творях позволили испытать некоторые составы твердых растворов в качестве материалов мембран ионоселективных электродов. Были изготовлены пленочные электроды с твердым контактом на основе  $\text{Ca}_{3-x}\text{Pb}_x\text{Nb}_2\text{O}_8$  ( $x=0.5$  и  $2.5$ ) Проведена электрохимическая аттестация и определены основные характеристики ИСЭ: рабочая область pH, область линейности и крутизна электродной функции, время отклика.

*Работа выполнена при частичной поддержке гранта Минобразования и CRDF, BRHE 2004 post-doctoral fellowship award Y2-C-05-14; гранта CRDF № EK-005-X1.*

## МЕТОД ИЗОТОПНОГО ОБМЕНА. СПОСОБЫ ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ.

*Ананьев М.В.<sup>1</sup>, Курумчин Э.Х.<sup>2</sup>, Вдовин Г. К.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Уральский государственный университет, Екатеринбург;

<sup>2</sup>Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург

Важным достоинством метода изотопного обмена является возможность получения информации о перераспределении неметалла в системе твердое тело – газ в условиях химического равновесия. В отличие от электрохимических методов, анализирующих лишь электрический отклик системы электрод/электролит, метод изотопного обмена позволяет определить полный поток кислорода на границе твердооксидный электролит - газ, а затем последовательно изучить воздействие различных факторов: состава газа или оксида, природы электродного материала, его структуры, температуры, давления газа, тока и др. на ее величину. Сопоставление с результатами электрохимических измерений в ряде случаев дает возможность выделить основной маршрут реакции кислорода с твёрдым телом.

В работе методом изотопного обмена изучали обмен кислорода ( $^{16}\text{O}$ ,  $^{18}\text{O}$ ) твердых растворов  $0.8\text{CeO}_2 \cdot 0.2\text{GdO}_{1.5}$  (кислородпроводящий электролит) и  $\text{SrCe}_{0.95}\text{Y}_{0.05}\text{O}_{3-\delta}$  (перспективный протонпроводящий оксид).

Для обработки были выбраны экспериментальные данные нескольких опытов при разных температурах и одном давлении кислорода в газе. Были использованы следующие модели: 1) модель экспоненциальной кинетики обмена, 2) модель Клира и Кучера для постоянного коэффициента диффузии кислорода, 3) двухслойная модель (в предположении, что коэффициент диффузии изотопа в «приповерхностной области» отличается от объемного), предложенная в работе [1]. Эти модели рассмотрены в [1], там же даны ссылки на первоисточник. Методы обработки были реализованы в среде Maple 9.0.

Сравнение результатов, полученных в рамках перечисленных выше моделей показало, что результаты хорошо коррелируют друг с другом.

По зависимостям скорости гетерообмена и коэффициента диффузии кислорода от температуры в аррениусовских координатах рассчитаны энергии активации процессов обмена и диффузии кислорода.

1. Ezin A.N., Tsidilkonski V.I., Kurumchin E. Kh. Solid State Ionics, 1996, v. 84, pp: 105.

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

*Никитин А. Н., Ряшко Л. Б.*

Уральский государственный университет, Екатеринбург

Реакция Белоусова-Жаботинского, по-видимому, является наиболее детально изученной колебательной реакцией. Важность этой реакции объясняется тем, что, несмотря на свою химическую сложность, она проста в математическом отношении по сравнению со многими биологическими осцилляторами. Колебательные химические процессы представляют интерес не только для химиков в связи со сложностью их механизма, но также для биологов по причине того, что многие биологические ферментативные и управляющие процессы являются процессами с обратной связью.

Количественно колебательные химические реакции описываются моделью системы дифференциальных уравнений. Наиболее известными являются модель брюсселятора для гипотетического химического процесса и модель Филда-Кёрёса-Нойеса, еще называемая орегонатором или ФКН-моделью, описывающая реакцию Белоусова-Жаботинского.

Более интересны в своем поведении системы, в которых химические колебательные реакции рассматриваются как часть процессов, происходящих в системе. В системах, где химические процессы сочетаются еще и с диффузией компонентов, диффузия может играть как стабилизирующую, так и дестабилизирующую роль, поэтому в физико-химических, биохимических процессах необходимо ее учитывать. Диффузионная неустойчивость приводит к возникновению в исследуемых системах пространственных структур.

Поскольку скорость химических реакций и концентрации являются макроскопическими величинами, для более полного рассмотрения системы необходимо учитывать их флуктуации. С учетом флуктуаций моделирование процесса может быть проведено численным решением системы стохастических дифференциальных уравнений (СДУ).

В данной работе составлена процедура, с помощью которой получены численные решения системы уравнений для различных параметров