УДК 532.516; 544.6

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ СФЕРИЧЕСКОЙ МИКРОГРАНУЛЫ В СИЛЬНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Куцепалов А.С., Шелистов В.С., Франц Е.А., Демёхин Е.А.

## MODELING OF A SPHERICAL MICROGRANULE'S MOTION IN A STRONG ELECTRIC FIELD

Kutsepalov A.S., Shelistov V.S., Frantz E.A., Demekhin E.A.

<sup>\*</sup> Kuban State University, Krasnodar, 350040, Russia e-mail: shelistov v@mail.ru

Abstract. The motion of a microgranule, impermeable for anions, suspended in an electrolyte, under electrophoresis of the first and second kind is investigated in the paper. Mathematical model of such a movement is described by the system of Nernst–Planck–Poisson–Stokes equations in spherical coordinates with boundary conditions on the granule's surface and in the infinitely distant area. Besides, the system's behavior is described by four dimensionless parameters. In order to solve this problem, a stream function is introduced. The algorithm of the solution is based on eigenfunction expansion (those are Gegenbauer and Legendre polynomials) and Fourier transform on the corresponding functions. The algorithm uses a second-order central finite-difference scheme over a nonuniform grid and a semi-implicit third-order Runge-Kutta method. Our numerical simulation has shown a good correspondence with experimental data, particularly for the velocity dependence on the strength of the electric field and for determination of characteristic zones of the problem. It should be noted that the calculations take into account the influence of both the double electric layer and electroconvection. Determination of the conditions (i.e. the values of parameters) when the regime loses stability is our main result; the instability results in electrokinetic vortex formation both behind and in front of the microgranule.

Keywords: electrophoresis, microparticle, electrolyte, Nernst–Planck–Poisson–Stokes equation system, numerical simulation

## Введение

В последние несколько десятилетий проблема движения проводящих микрочастиц в электрическом поле получила новым импульс к изучению благодаря открытию принципиально нового класса электрокинетических явлений. Ранее считалось, что явление электрофореза связано только с нарушением электронейтральности в электрическом двойном слое на поверхности частицы. При невысоких напряжённостях поля хорошо работает теория электрофореза Смолуховского, согласно которой скорость электрофореза не зависит ни от формы, ни от размера частицы, а пропорциональна напряжённости внешнего поля  $E_{\infty}$ . Однако оказалось, что при достаточно высоких напряжённостях поля у поверхности частицы, проводящей только один сорт ионов, кроме двойного слоя образуется ещё и область пространственного заряда. В этом случае классическая теория электрофореза Смолуховского даёт скорость электрофореза в десятки раз меньше, чем наблюдаемая в экспериментах. Кроме того, было выяснено, что в этом случае скорость электрофореза пропорциональна радиусу частицы и квадрату напряжённости внешнего поля. Это новое явление было открыто С. С. Духиным и Н. А. Мищук [1–4]

Куцепалов Александр Сергеевич, аспирант кафедры вычислительной математики и информатики Кубанского государственного университета; e-mail: alex.kuzepalov@gmail.com.

Шелистов Владимир Сергеевич, канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник научно-исследовательской части Кубанского государственного университета; e-mail: shelistov v@mail.ru.

Франц Елизавета Александровна, магистрант кафедры математического моделирования Кубанского государственного университета; e-mail: gandizel@mail.ru.

Демёхин Евгений Афанасьевич, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры вычислительной математики и информатики Кубанского государственного университета; e-mail: edemekhi@gmail.com.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (13-08-96536-р\_юг\_а, 14-08-00789-а, 14-08-01171-а) и администрации Краснодарского края (13-08-96536-р\_юг\_а)



Рис. 1. Полупроницаемая частица в растворе электролита под действием внешнего электрического поля

и получило название электрофореза 2-го рода.

В настоящее время существует большое количество и теоретических и экспериментальных работ по результатам исследования этого явления. В частности, в работах [5,6] полуаналитически объяснены наблюдаемые эффекты, а в работах [7–9] предложено аналитическое решение подобных задач. Однако электрофорез остаётся недостаточно изученным явлением: имеются только грубые оценки для скорости частицы, но нет численных решений системы, описывающей процесс.

## 1. Постановка задачи

В данной работе исследуется движение проводящей сферической микрогранулы радиуса  $\tilde{a}$  в растворе бинарного электролита под действием внешнего электрического поля напряженности  $E_{\infty}$  (рис. 1). Здесь и далее тильдой помечены размерные величины, а величины без тильды считаются безразмерными. Задача исследуется исходя из нескольких предположений: 1) напряжённость внешнего поля  $E_{\infty}$  достаточно велика для того, чтобы происходил электрофорез 2-го рода; 2) толщина слоя Дебая  $\lambda_D$  много меньше толщины области пространственного заряда, которая, в свою очередь, много меньше радиуса гранулы.

Так как рассматриваемая частица имеет сферическую форму, то систему уравнений Нернста–Планка–Пуассона–Стокса имеет смысл записать в сферической системе координат с началом в центре частицы и считать движущейся со скоростью частицы. Задача симметрична, поэтому ограничимся зависимостью только от одного угла и записью уравнений в двумерной постановке.

Молярный поток катионов и анионов бинарного электролита описывается уравнениями Нернста—Планка

$$\frac{\partial \tilde{c}^{+}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{U} \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial \tilde{c}^{+}}{\partial \theta} + \tilde{V} \frac{\partial \tilde{c}^{+}}{\partial \tilde{r}} = \\
= \frac{\tilde{D}\tilde{F}}{\tilde{R}\tilde{T}} \frac{1}{\tilde{r}^{2}} \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \tilde{c}^{+} \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial\theta} \right) + \\
+ \frac{\tilde{D}\tilde{F}}{\tilde{R}\tilde{T}} \frac{1}{\tilde{r}^{2}} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left( \tilde{r}^{2} \tilde{c}^{+} \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{r}} \right) + \\
+ \frac{\tilde{D}}{\tilde{r}^{2}} \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial \tilde{c}^{+}}{\partial\theta} \right) + \\
+ \frac{\tilde{D}}{\tilde{r}^{2}} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left( \tilde{r}^{2} \frac{\partial \tilde{c}^{+}}{\partial \tilde{r}} \right), \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial \tilde{c}^{-}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{U} \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial \tilde{c}^{-}}{\partial \theta} + \tilde{V} \frac{\partial \tilde{c}^{-}}{\partial \tilde{r}} = \\
= -\frac{\tilde{D}\tilde{F}}{\tilde{R}\tilde{T}} \frac{1}{\tilde{r}^{2}} \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin\theta \tilde{c}^{-} \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial \theta} \right) - \\
- \frac{\tilde{D}\tilde{F}}{\tilde{R}\tilde{T}} \frac{1}{\tilde{r}^{2}} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left( \tilde{r}^{2} \tilde{c}^{-} \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{r}} \right) + \\
+ \frac{\tilde{D}}{\tilde{r}^{2}} \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin\theta \frac{\partial \tilde{c}^{-}}{\partial \theta} \right) + \\
+ \frac{\tilde{D}}{\tilde{r}^{2}} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left( \tilde{r}^{2} \frac{\partial \tilde{c}^{-}}{\partial \tilde{r}} \right). \quad (1.2)$$

Здесь уравнения записаны в размерном виде. В уравнениях  $\tilde{r}$  — радиус гранулы,  $\tilde{\theta}$  — зенитный угол,  $\tilde{c}^+$  и  $\tilde{c}^-$  — молярные концентрации катионов и анионов соответственно,  $\tilde{\Phi}$  — электростатический потенциал,  $\ddot{e}X\tilde{U}, \tilde{V}\ddot{e}B$  — вектор скорости,  $\tilde{D}$  — коэффициенты диффузии катионов и анионов, предпологаемые равными,  $\tilde{F}$  — постоянная Фарадея,  $\tilde{R}$  — универсальная газовая постоянная,  $\tilde{T}$  — абсолютная температура.

Также выполняется уравнение Пуассона для электростатического потенциала

$$\frac{1}{\tilde{r}^2} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\tilde{r}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left( \tilde{r}^2 \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{r}} \right) = \frac{\tilde{F}}{\tilde{\varepsilon}} (\tilde{c}^- - \tilde{c}^+). \quad (1.3)$$

Здесь  $\tilde{\varepsilon}$  — диэлектрическая постоянная среды.

Движение жидкости под действием электрического поля описывается уравнением Навье–Стокса, где в качестве массовых сил взяты силы Кулона. Так как размер гранулы мал, то мало и число Рейнольдса, что позволяет пренебречь инерционными членами и воспользоваться приближением Стокса

$$-\frac{1}{\tilde{r}}\frac{\partial\tilde{P}}{\partial\theta} + \frac{\partial^{2}\tilde{U}}{\partial\tilde{r}^{2}} + \frac{2}{\tilde{r}}\frac{\partial\tilde{U}}{\partial\tilde{r}} + \frac{1}{\tilde{r}^{2}}\frac{\partial^{2}\tilde{U}}{\partial\theta^{2}} + \\ + \frac{\operatorname{ctg}\theta}{\tilde{r}^{2}}\frac{\partial\tilde{U}}{\partial\theta} - \frac{\tilde{U}}{\tilde{r}^{2}\sin^{2}\theta} + \frac{2}{\tilde{r}^{2}}\frac{\partial\tilde{V}}{\partial\theta} = \\ = \tilde{\rho}\frac{1}{\tilde{r}}\frac{\partial\tilde{\Phi}}{\partial\theta}, \quad (1.4)$$

$$-\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{r}} + \frac{\partial^2 \tilde{V}}{\partial \tilde{r}^2} + \frac{2}{\tilde{r}} \frac{\partial \tilde{V}}{\partial \tilde{r}} + \frac{1}{\tilde{r}^2} \frac{\partial^2 \tilde{V}}{\partial \theta^2} - \frac{2\tilde{V}}{\tilde{r}^2} + \frac{\operatorname{ctg}\theta}{\tilde{r}^2} \frac{\partial \tilde{V}}{\partial \theta} - \frac{2\operatorname{ctg}\theta\tilde{U}}{\tilde{r}^2} - \frac{2}{\tilde{r}^2} \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \theta} = \\ = \tilde{\rho} \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{r}}, \quad (1.5)$$

где  $\tilde{\rho} = (\tilde{c}^+ - \tilde{c}^-)$  — плотность заряда, P — давление, а  $\mu$  — динамическая вязкость.

Вектор скорости несжимаемой жидкости подчиняется уравнению сохранения массы, принимающему в сферических координатах следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \tilde{r} \tilde{U} \right) + \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left( \sin \theta \tilde{r}^2 \tilde{V} \right) = 0. \quad (1.6)$$

Для полной постановки задачи необходимо задать граничные условия. В рассматриваемой геометрии границами являются поверхность гранулы и бесконечно удалённая область. Микрогранула считается непроницаемой для анионов, на её поверхности задается постоянная концентрация катионов. Потенциал на проводящей поверхности равен постоянной, которую без ограничения общности можно положить равной нулю. Выполняются условия прилипания:

$$\tilde{r} = \tilde{a}: \quad \tilde{c}^{+} = \tilde{p}, \\ -\frac{\tilde{F}\tilde{c}^{-}}{\tilde{R}\tilde{T}}\frac{\partial\tilde{\Phi}}{\partial\tilde{r}} + \frac{\partial\tilde{c}^{-}}{\partial\tilde{r}} = 0, \quad (1.7)$$
$$\tilde{\Phi} = 0, \quad \tilde{U} = 0, \quad \tilde{V} = 0.$$

Вдали от гранулы концентрация ионов стремится к равновесной, электрическое поле — к внешнему наложенному, скорость жидкости — к скорости гранулы

$$\begin{split} \tilde{r} \to \infty : \tilde{c}^+ \to \tilde{c}_{\infty}, \quad \tilde{c}^- \to \tilde{c}_{\infty}, \\ \tilde{\Phi} \to -E_{\infty} \tilde{r} \cos \theta, \quad (1.8) \\ \tilde{U} \to -\tilde{U}_{\infty} \sin \theta, \quad \tilde{V} \to -\tilde{U}_{\infty} \cos \theta. \end{split}$$

Плотность электрического тока на поверхности гранулы задается соотношением

$$\tilde{j} = \frac{\tilde{D}\tilde{F}^2\tilde{c}^+}{\tilde{R}\tilde{T}}\frac{\partial\tilde{\Phi}}{\partial r} + \tilde{D}\tilde{F}\frac{\partial\tilde{c}^+}{\partial r}.$$

Толщина двойного и<br/>онного слоя принимается в виде  $\tilde{\lambda}_D=\sqrt{\tilde{\varepsilon}\tilde{R}\tilde{T}/\tilde{F}^2\tilde{c}_\infty}.$ 

Согласно  $\pi$ -теореме, запись уравнений (1.1)–(1.6) в безразмерном виде уменьшит число параметров системы. Если в качестве характерных масштабов взять радиус гранулы  $\tilde{a}$ , динамическую вязкость  $\tilde{\mu}$ , термодинамический потенциал  $\tilde{\Phi}_0 = \tilde{R}\tilde{T}/\tilde{F}$  и концентрацию ионов  $\tilde{c}_{\infty}$ , то получим следующую полную безразмерную постановку:

$$\frac{\partial c^{+}}{\partial t} + U \frac{1}{r} \frac{\partial c^{+}}{\partial \theta} + V \frac{\partial c^{+}}{\partial r} = \\
= \frac{1}{r^{2}} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[ \sin \theta \left( c^{+} \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} + \frac{\partial c^{+}}{\partial \theta} \right) \right] + \\
+ \frac{1}{r^{2}} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^{2} \frac{\partial c^{+}}{\partial r} + r^{2} c^{+} \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right], \quad (1.9)$$

$$\frac{\partial c^{-}}{\partial t} + U \frac{1}{r} \frac{\partial c^{-}}{\partial \theta} + V \frac{\partial c^{-}}{\partial r} = \\
= \frac{1}{r^{2}} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[ \sin \theta \left( c^{-} \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} + \frac{\partial c^{-}}{\partial \theta} \right) \right] + \\
+ \frac{1}{r^{2}} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^{2} \frac{\partial c^{-}}{\partial r} + r^{2} c^{-} \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right], \quad (1.10)$$

$$\frac{\nu^2}{r^2} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} \right) + \frac{\nu^2}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) = c^- - c^+, \quad (1.11)$$

$$-\frac{1}{r}\frac{\partial P}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial U}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 U}{\partial \theta^2} + \frac{\operatorname{ctg}\theta}{r^2}\frac{\partial U}{\partial \theta} - \frac{U}{r^2\sin^2\theta} + \frac{2}{r^2}\frac{\partial V}{\partial \theta} = \left(c^- - c^+\right)\frac{1}{r}\frac{\kappa}{\nu^2}\frac{\partial \Phi}{\partial \theta}, \quad (1.12)$$

$$-\frac{\partial P}{\partial r} + \frac{\partial^2 V}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial V}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 V}{\partial \theta^2} - \frac{2V}{r^2} + \frac{\operatorname{ctg}\theta}{r^2} \frac{\partial V}{\partial \theta} - \frac{2\operatorname{ctg}\theta U}{r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial U}{\partial \theta} = (c^- - c^+) \frac{1}{r} \frac{\kappa}{\nu^2} \frac{\partial \Phi}{\partial r}, \quad (1.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta r U \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left( \sin \theta r^2 V \right) = 0. \quad (1.14)$$

Краевые условия примут вид

$$r = 1: \quad c^{+} = p,$$
  
$$- c^{-} \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \frac{\partial c^{-}}{\partial r} = 0, \quad (1.15)$$
  
$$\Phi = 0, \quad U = 0, \quad V = 0;$$

$$r \to \infty : \quad c^+ \to c_{\infty}, \quad -c^- \to c_{\infty}, \Phi \to -E_{\infty} r \cos \theta, \qquad (1.16) U \to -U_{\infty} \sin \theta, \quad V \to -U_{\infty} \cos \theta.$$

Выражение для плотности тока запишется в виде

$$j = c^{+} \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \frac{\partial c^{+}}{\partial r}.$$
 (1.17)

Задача описывается четырьмя безразмерными параметрами: напряжённостью поля  $E_{\infty}$ , безразмерным числом Дебая  $\nu$ , коэффициентом сцепления  $\kappa$  между гидродинамической и электростатической частями системы и концентрацией ионов *p*. Диапазоны изменения параметров следующие:  $E_{\infty}$  от 1 до 500,  $\nu$  от  $10^{-5}$  до  $10^{-3}$ , а  $\kappa$  — от 0,01 до 0,25. Заметим, что  $\nu$  является малым параметром при старшей производной, что создаёт тонкий электрический двойной слой около границы гранулы. Малые параметры при старших производных в уравнениях Пуассона (1.9) и Стокса (1.10), (1.11) заметно усложняют численное решение системы.

Далее система приводится к удобному для решения виду. Вводится функция тока  $\Psi$ , делаются замены  $\eta = \cos \theta$ ,  $\rho = c^+ - c^-$  и  $K = c^+ + c^-$ , где  $c^+$  и  $c^-$  – концентрации катионов и анионов соответственно,  $\theta$  — зенитный угол. Причиной такого преобразования является поведение  $c^+$  и  $c^-$  вдали от микрогранулы:  $c^+ \to c^- \neq 1$  — эта область называется диффузионным слоем. Ожидаемое поведение K и  $\rho$  следующее:  $\rho \neq 0$  в очень узкой области около гранулы и  $\rho = 0$  сразу вне этой области. Этот факт должен быть принят во внимание при численном решении. Kизменяется от очень малых значений вблизи гранулы до K = 2 вдали.

Поскольку на полюсах гранулы (соответствующих направлению действия электрического поля) решение системы имеет особенности, в алгоритме было использовано разложение по собственным функциям системы многочленам Лежандра и Гегенбауэра. При выполнении нелинейных операций был использован квазиспектральный метод, для реализации которого потребовалась разработка алгоритмов дискретных преобразований по указанным многочленам. По переменной r использовалась центральная разностная схема второго порядка точности, при этом сетка может выбираться либо равномерная, либо сгущающаяся вблизи гранулы, то есть около r = 1. Этот метод оказался удобным за счёт возможности использования произвольного растяжения сетки. Формирование в окрестности гранулы большого градиента концентраций потребовало сгущения узлов сетки в этой области. В то же время, на расстоянии порядка нескольких радиусов гранулы сетка может быть разрежена без существенного ухудшения точности. Для решения системы уравнений по времени t использовался полунеявный метод Рунге-Кутта третьего порядка, суть которого состоит в том, что наиболее неустойчивая часть уравнения вычисляется неявно, а остальные части — явно.



Рис. 2. Скорость движения частицы относительно неподвижной среды от напряжённости внешнего поля ( $\nu = 0, 2, \kappa = 0, 2$ ). Линия получена в рамках настоящего подхода, треугольники, кружки и квадраты — эксперименты

# 2. Результаты

Был создана программа для рассчёта значений функций  $\rho$  и K при последовательно увеличивающихся значениях безразмерного времени t. Входными данными программы являются:

- размеры микрогранулы;
- начальные значения времени и функций ρ и K (последние читаются из заданного пользователем файла);
- значения параметров модели  $(E_{\infty}, \nu, p, \kappa);$
- требуемая точность численного интегрирования;
- длина и количество интервалов безразмерного времени, через которые требуется записать в файл значения функций;
- имена выходных файлов.

По окончании расчёта каждого интервала времени в выходные файлы дописываются новые значения функций  $\rho$  и K. К ним требуется применить обратное преобразование, переводящее коэффициенты Галёркина на физическую плоскость. Это преобразование реализовано в виде отдельной программы. Последняя позволяет выбрать размеры сетки, на которой строятся функции.

Была проведена серия расчётов для большого количества начальных данных и анализ полученных результатов. Для больших значений  $\nu$  проводилось сравнение с теоретическими и асимптотическими данными. Результаты приведены на рис. 2. Даны экспериментальные зависимости [2–4] скорости частиц разных размеров от напряжённости поля. Данные приведены в описанных нормированных переменных и сравниваются с результатами численного моделирования. Видно, что все кривые экспериментальных данных накладываются на одну кривую, которая имеет тот же профиль, что и численные результаты. При больших значениях напряжённости поля полученные данные показывают хорошее соответствие экспериментальным.

На рис. За изображена частица и основные области решения: I — зона пространственного заряда, II — диффузионная область, III — зона, где пространственный заряд и диффузионный пограничный слой отсутствуют, она отделяется от I и II точкой  $x_0$  с углом  $\theta_0$ . Стрелками обозначено направление потока катионов к поверхности частицы. На рис. Зб приведено типичное распределение плотности заряда. Как видно из рисунка, границы вышеуказанных областей определяются достаточно чётко.





б) Распределение плотности заряда  $\rho$  для  $E_{\infty} = 30, \nu = 0.001, \kappa = 0.2$ 

Рис. 3

Анализ расчётов при малых значениях параметра  $\nu$  и больших значениях параметра  $E_{\infty}$  показал, что описанный режим теряет устойчивость. Обнаружено, что вихри начинают образовываться и впереди частицы.

На рис. 4 представлено распределение тока по поверхности частицы при  $\nu = 0.2$ для разных значений  $E_{\infty}$ : (1)  $E_{\infty} = 20$ ; (2)  $E_{\infty} = 30$ ; (3)  $E_{\infty} = 40$ ; (4)  $E_{\infty} = 50$ . Из графиков видно, что впереди частицы ( $\theta = 180^{\circ}$ ) ток меняется незначительно, а позади разница между значениями намного больше. Характерно, что ток меняет свое значение примерно в одном и том же месте ( $\theta = 70^{\circ}$ ). В этом месте начинается проявления механизма Духина — появление вихрей позади частицы.

#### Заключение

Формализованная численная модель электрофореза является важным этапом при построении новой теории, способной, в отличие от существующей, правильно описывать наблюдаемые процессы. В частности, она позволяет исследовать отклик моделируемой системы от параметров.

Построенная в данной работе модель уточняет имеющиеся теоретические результаты. В методике расчётов электрофоретических эффектов впервые учитывается влияние как двойного ионного слоя, так и электроконвекции. Кроме того, созданный алгоритмический аппарат может применяться для расчётов, которые обходят недостатки теории, применяемой в настоящее время. Отметим также, что полученные результаты качественно соответствуют экспериментальным данным.

### Литература

- Dukhin S.S. Electrokinetic phenomena of second kind and their applications // Adv. Colloid Interface Sci. 1991. Vol. 35. Pp. 173–196.
- Mishchuk N.A. Electroosmosis of the second kind // Colloids and Surfaces A. 1995. Vol. 95. Pp. 119–131.
- Baran A.A., Mishchuk N.A., Prieve D.C. Superfast electrophoresis of conducting dispersed particles // J. Colloid Interface Sci. 1998. Vol. 207. Pp. 240–250.
- Mishchuk N.A., Dukhin S.S. Electrokinetic Phenomena of the Second Kind. In: Delgado A., Decker M. (eds.) Interfacial Electrokinetics and Electrophoresis, New York/Basel, 2002. P. 241– 275.
- 5. Ben Y., Chang H.-C. Nonlinear Smoluchowski slip velocity and micro-vortex generation // J. Fluid Film. 2002. Vol. 461. Pp. 229–238.
- Ben Y., Demekhin E.A., Chang H.-C. Nonlinear electrokinetics and "superfast" electrophoresis // J. Colloid Interface Sci. 2004. Vol. 276. Pp. 483– 497.
- Уртенов М.Х. Краевые задачи для систем уравнений Нернста-Планка-Пуассона (факторизация, декомпозиция, модели, численный анализ). Краснодар: Кубанский государственный университет, 1998. 126 с.
- Urtenov M.A.Kh. Decoupling of the Nernst-Planck and Poisson equations // J. Phys. Chem. 2007. V. 111. Pp. 14208–14222.
- 9. Заболоцкий В.И., Никоненко В.В. Перенос ионов в мембранах. М.: Наука, 1996. 392 с.



Рис. 4. Распределение тока по поверхности частицы.

### References

- Dukhin S.S. Electrokinetic phenomena of second kind and their applications. Adv. Colloid Interface Sci., 1991, vol. 35, pp. 173–196.
- Mishchuk N.A. Electroosmosis of the second kind. *Colloids and Surfaces A.*, 1995, vol. 95, pp. 119–131.
- Baran A.A., Mishchuk N.A., Prieve D.C. Superfast electrophoresis of conducting dispersed particles. J. Colloid Interface Sci., 1998, vol. 207, pp. 240–250.
- Mishchuk N.A., Dukhin S.S. Electrokinetic Phenomena of the Second Kind. In: Delgado A., Decker M. (eds.) *Interfacial Electrokinetics and Electrophoresis*, New York/Basel, 2002, pp. 241– 275.
- Ben Y., Chang H.-C. Nonlinear Smoluchowski slip velocity and micro-vortex generation. J. Fluid Film, 2002, vol. 461, pp. 229–238.

- Ben Y., Demekhin E.A., Chang H.-C. Nonlinear electrokinetics and "superfast" electrophoresis. J. Colloid Interface Sci., 2004, vol. 276, pp. 483– 497.
- Urtenov M.Kh. Kraevye zadachi dlya sistem uravneniy Nernsta–Planka–Puassona (faktorizaciya, dekompoziciya, modeli, chislenniy analiz) [Boundary-value problems for Nernst-Planck-Poisson systems of equations (factorization, decomposition, models, numerical analysis)]. Krasnodar, Kuban State University, 1998, 126 p. (In Russian)
- Urtenov M.A.Kh. Decoupling of the Nernst-Planck and Poisson equations. J. Phys. Chem., 2007, vol. 111, pp. 14208–14222.
- Zabolotskiy V.I., Nikonenko V.V. Perenos ionov v membranah [Ion transfer in membranes]. Moscow, Nauka Publ., 1996, 392 pp. (In Russian)

Статья поступила 11 декабря 2014 г.

© Куцепалов А.С., Шелистов В.С., Франц Е.А., Демёхин Е.А., 2015