

曹发和¹, 朱泽洁¹, 叶珍妮¹, 张勤号¹

¹浙江大学化学系, 杭州, 310027, 中国

Abstract

电化学反应是一种典型界面过程, 涉及电极界面处电荷转移和溶液中传质过程。近些年不断发展的超微电极以及基于超微电极的扫描电化学探针等现代电化学技术, 因其扩散方式与传统平板电极一维模型不同, 无法通过拉普拉斯变化给出数学解析, 使动力学参数获取变得困难。借助于COMSOL多物理场的耦合功能, 分别在溶液与电极界面应用Fick定律和Butler-Volmer方程, 可以获得精确的数值解, 复杂电化学反应体系的动力学解析也成为可能。

课题组应用Transport of Diluted Species模块, 构建3D几何模型, 并分别对几何模型中的domain, boundaries进行数学描述, 包括溶液Transport properties和Initial Values, 电极界面的Flux以及边界处半无限扩散条件Concentration。应用Free Tetrahedral构建孔空间Mesh网点, 并对电极耦合处应用Scale细化。利用COMSOL 5.2中的参数扫描功能, 结合Stationary计算, 即可获得扫描电化学显微镜中探针扫描基底电极时, 不同大小深浅缺陷对应的稳态电流理论值。改变基底缺陷大小, 可获得系列扫描曲线, 与实验结果比对, 即可获得扫描电化学显微镜空间扫描成像的空间分辨率。实验和模拟结果表面, 结合半径为0.7 μm 的超微电极, 距离1微米的面扫描成像谱图, 基底的缺陷孔径为0.36~0.50 μm , 深度介于0.42~0.92 μm 。这是扫描电化学显微镜空间分辨率的第一次定量报道。

参考文献:

1. Z.N. Yang, Z.J. Zhu, Q.H. Zhang, X.Y. Liu, J.Q. Zhang, F.H. Cao, In situ SECM mapping of pitting corrosion in stainless steel using submicron Pt ultramicroelectrode and quantitative spatial resolution analysis, *Corrosion Science*, <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2018.08.014>
2. Z.J. Zhu, Z.N. Ye, Q.H. Zhang, J.Q. Zhang, F.H. Cao, Novel dual Pt-Pt/IrOx ultramicroelectrode for pH imaging using SECM in both potentiometric and amperometric modes, *Electrochemistry Communications*, 88 (2018) 47-51.