

# МОДЕЛЬ ДЛИТЕЛЬНОГО ЗАМЕДЛЕНИЯ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ НА ПОВЕРХНОСТИ ТВЁРДОГО КАТАЛИЗАТОРА

Толчинский Ю.А., Ковальчук А.А.

*Национальный технический университет  
"Харьковский политехнический институт",  
г. Харьков*

Процессы замедления каталитических реакций условно можно разделить на: быстрые и медленные. Причина быстрых, наличие рельефа на поверхности по концентрациям и кластеризация поверхности. Причина медленных, уменьшение активности каталитических мест или их числа.

Рассматривается объемлющая модель длительного замедления, причиной которой является проникновение “горячих” молекул газовой смеси, составляющих “хвост” максвеловского распределения, в объём катализатора и имеет кумулятивный характер. Она состоит из моделей отдельных сторон этого процесса и включает в себя: модель диссоциативного проникновения газовых молекул в объём, включающая больше угловое рассеяние и каналирование; модель генерирования точечных дефектов в кристалле по типу Шоттки и Френкеля с термализацией дефектов; модель многокомпонентной диффузии дефектов по вакансионному и межузельному механизмам. При описании диффузии учитывается корреляционный фактор и не идеальность её через химический потенциал, а также диффузия по границам зёрен. Предусматривается наличие генетической структуры нанопор и дислокаций, выступающих в роли источников и стоков вакансий и примесных атомов; модель термоупругих деформаций, возникающих из-за разницы тепловых и упругих модулей плёнки катализатора и подложки. Из-за чего плёнка деформируется как выпуклая или вогнутая мембраны, порождая фоновое поле напряжений для внутренней диффузии.

В рассматриваемой объемлющей модели считается, что имеется диффузия вдоль дислокационных трубок, в трубки и из них. Расположение и состояние дислокаций и нанопор считается квазиравновесным так, что состояние пластического течения не достигается. Целью решения уравнений модели является нахождение концентрации примесных атомов и плотности их потока с обратной стороны каталитической поверхности. Накопление этих атомов приводит к двум эффектам: изменяет структуру решёток приповерхностных слоёв катализатора (каталитическая активность мест уменьшается); переключает часть свободных связей поверхностного слоя на связи с примесными атомами, делая их каталитически не активными (количество активных мест уменьшается).

Рассматриваемая модель представляет попытку установить связь между длительным замедлением скорости каталитической реакции и предысторией микроструктуры катализатора.