

NO + CO reakcijos modeliavimas

VYTENIS ŠUMSKAS

Vilniaus universitetas

Naugarduko 24, LT-03225, Vilnius, Lietuva

El-paštas: vytenis.sumskas@mif.stud.vu.lt

Darbe pateikiamas modelis, kuriame nagrinėjama anglies monoksido (CO) oksidavimo su azoto monoksidu (NO) reakcija virš sudėtinio katalizatoriaus. Koncentracijoms $u = (u_1, u_2, u_3, u_4, u_5)$ gaunamas reakcijos-difuzijos uždavinys su lygtimis, kiekvienam $i = 1, \dots, 5$ turinčiomis pavidalą

$$\partial_t u_i = L_i(u) + f_i(u),$$

čia f_i žymi netiesinius reakcijos narius, gaunamus iš cheminės kinetikos dėsnų, o L_i žymi difuzinius narius, gaunamus remiantis paviršinės difuzijos mechanizmais (pvz. [2]) ir turinčius pavidalą

$$L_i(u) = \frac{\partial}{\partial x} J_i(u),$$

$$J_i(u) = \kappa_i \left(\left(s - \sum_m u_m \right) \frac{\partial u_i}{\partial x} - u_i \frac{\partial \left(s - \sum_m u_m \right)}{\partial x} \right),$$

čia κ_i - paviršinės difuzijos konstanta, s - paviršinis tankis.

Katalizatoriaus paviršių padalinus į aktyvią (ten koncentracijas žymėsime u_{i2}) ir neaktyvią (u_{i1}) sritis bei ribą tarp jų pažymėjus x_* , uždavinys papildomas masės tvermės dėsniumi bei su juo susietomis specialiomis neklasikinėmis suderinamumo sąlygomis:

$$J_{i1}(u)|_{x_*=+0} = J_{i2}(u)|_{x_*=-0} = \lambda_{2,i1} u_{i1}|_{x_*=+0} \left(s_2 - \sum_m u_{m2} \right) \Big|_{x_*=-0} - \lambda_{1,i2} u_{i2}|_{x_*=-0} \left(s_1 - \sum_m u_{m1} \right) \Big|_{x_*=+0},$$

čia $\lambda_{1,i2}, \lambda_{2,i1}$ - konstantos, nusakančios molekulių peršokimo per x_* greitį, o papildomais indeksais (1 bei 2) žymimi dydžiai ant atitinkamai neaktyvaus bei aktyvaus katalizatoriaus paviršiaus.

Pranešime pateikiamos sprendinio savybės, grindžiamos skaitiniais tyrimais. Tolimesni skaičiavimai atliekami naudojant skaitinius metodus.

LITERATŪRA

- [1] V.P. Zhdanov, B. Kasemo. Mechanisms and kinetics of the NO-CO reaction on Rh. *Surf. Sci. Rep.*, 29:31-90, 1997.
- [2] A.N. Gorban, H.P. Sargsyan, H.A. Wahab. Quasichemical Models of Multicomponent Nonlinear Diffusion. *Math. Model. Nat. Phenom.*, 6:184-262, 2011.
- [3] V. Skakauskas, P. Katauskis. Numerical study of CO oxidation by N2O reaction over supported catalysts. *Journal of mathematical chemistry*, 54:1306-1320, 2016.