

ОКИСНЕННЯ ЧАДНОГО ГАЗУ НА ПОВЕРХНІ ПЛАТИНОВОГО КАТАЛІЗАТОРА: ВПЛИВ ДЕСОРБЦІЇ ВУГЛЕКИСЛОГО ГАЗУ

Костробій П.П., д.ф.-м.н., проф.; Рижка І.А., асист.

Національний університет «Львівська політехніка», Львів

Запропоновано та досліджено нову математичну модель окиснення чадного газу (CO) на поверхні платинового каталізатора (Pt). Модель побудована для механізму Лангмюра-Гіншелвуда [1] окиснення CO і враховує:

- двовимірність поверхні, на якій проходить реакція каталітичного окиснення [2,3];
- перебудову структури поверхні Pt-каталізатора [4] в процесі окиснення;
- скінченність швидкості десорбції продукту реакції окиснення (CO₂) з поверхні Pt [5];
- вплив температури підложки [6] каталізатора на процес окиснення.

Показано, що в області стійкості реакція окиснення демонструє осциляційну поведінку; досліджено вплив параметрів моделі на амплітуду та період коливань. Показано, що врахування скінченності швидкості десорбції вуглекислого газу CO₂ незначно впливає як на динаміку процесу окиснення, так і на область стійкості реакції. Результати моделювання [5] дозволяють стверджувати, що при моделюванні процесу окиснення CO на поверхні Pt(110) десорбцію продукту реакції можна вважати миттєвою.

1. Baxter R. J. Insight into why the Langmuir-Hinshelwood mechanism is generally preferred / Baxter R. J., Hu P. J. // Chem. Phys. – 2002. – Vol. 116, no. 11. – P. 4379-4381.
2. The anatomy of reaction diffusion fronts in the catalytic oxidation of carbon monoxide on Platinum (110) / Patchett A. J., Meissen F., Engel W. et al. // Surf. Sci. – 2000. – Vol. 454, no. 1. – P. 341-346.
3. Ryzha I. Carbon monoxide oxidation on the Pt-catalyst: modelling and stability / Ryzha I., Matseliukh M. // MMC. – 2017. – Vol. 4, no. 1. – P. 96-106.
4. Mechanism of the CO-induced (1×2)-(1×1) structural transformation of Pt(110) / Gritsch T., Coulman D., Behm R. J., Ertl G. // Phys. Rev. Lett. – 1989. – Vol. 6, no. 3. – P. 1086-1089.
5. Kostrobij P. Modeling of the effect of carbon dioxide desorption on carbon monoxide oxidation process on platinum catalyst surface / Kostrobij P., Ryzha I., Hnativ B. // MMC. – 2018. – Vol. 5, no. 1. – P. 27-33.
6. Connors K. A. Chemical Kinetics: The Study of Reaction Rates in Solution / Connors K. A. – New York: VCH Publishers, 1990. – 496 p.