

## Универсальные стадийные схемы каталитических реакций

© Алексеев\* Борис Васильевич, Кольцов<sup>+</sup> Николай Иванович

Кафедра физической химии и высокомолекулярных соединений. Чувашский государственный университет им. И.Н. Ульянова. Московский пр., 15. г. Чебоксары, 428015. Чувашская республика. Россия. Тел.: +7 (835) 245-24-68. E-mail: a402539@yandex.ru ; koltsovni@mail.ru

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** каталитические реакции, универсальные стадийные схемы.

### Аннотация

Для описания кинетических закономерностей каталитических реакций с участием одних и тех же реагентов и промежуточных веществ могут быть использованы механизмы, содержащие различные наборы стадий, число и вид которых может быть разным. В частности, дифференциальные уравнения, описывающие закономерности протекания реакции по различным механизмам, могут иметь эквивалентные (совпадающие по структуре и значениям) коэффициенты и характеризоваться одинаковыми решениями, то есть совпадающими нестационарными и стационарными режимами. В связи с этим встаёт проблема установления универсальных стадийных схем, которые применимы для определенных классов механизмов каталитических реакций. Эти механизмы представляют собой минимальный (универсальный) набор независимых стадий, описывающий закономерности протекания конкретной реакции в стационарных и нестационарных режимах. В данной статье приведен метод нахождения этих универсальных стадийных схем, описывающих закономерности протекания каталитических реакций в открытом изотермическом безградиентном реакторе в стационарных и нестационарных условиях, для определенных классов механизмов реакций. Для этого механизм реакции записывается в виде набора необратимых стадий (обратимые стадии разбиваются на прямую и обратную стадии). Затем анализируется зависимость структуры и значений коэффициентов соответствующей этому механизму системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) от состава стадий. Структура ОДУ полностью и однозначно определяется мономами, каждый из которых вычисляется в виде произведения концентраций реагентов одинаковых левых частей стадий по закону действующих масс. Коэффициенты при каждом из этих мономов представляют собой линейные комбинации констант скоростей стадий с одинаковой левой частью. Установлено, что для реакции, содержащей  $n$  реагентов, механизм которой содержит  $m$  различных левых частей стадий, универсальной стадийной схемой (состоящей из  $n \cdot m$  необратимых стадий) может служить схема, в которой каждой левой части исходного механизма соответствуют  $n$  необратимых стадий, правые части которых равны, соответственно,  $N \cdot X_1, N \cdot X_2, \dots, N \cdot X_n$ , где  $N$  – молекулярность левой части. Универсальность понимается в том смысле, что гарантируется эквивалентность системы ОДУ универсальной схемы системе ОДУ исходного механизма (или любого другого механизма, содержащего то же число реагентов и тот же набор различных левых частей). Эти системы ОДУ совпадают не только по структуре, но и количественно – коэффициенты ОДУ универсальной стадийной схемы являются линейными комбинациями коэффициентов исходного механизма (причем вид этих зависимостей может быть выписан в явном виде). Приведены примеры конкретных классов механизмов каталитических реакций, для которых с помощью разработанного метода установлены универсальные стадийные схемы.

### Выходные данные для цитирования русскоязычной версии статьи:

Алексеев Б.В., Кольцов Н.И. Универсальные стадийные схемы каталитических реакций. *Бутлеровские сообщения*. 2022. Т.72. №12. С.25-34. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-72-12-25

или

Boris V. Alekseev, Nikolay I. Kol'tsov. Universal stage schemes of catalytic reactions. *Butlerov Communications*. 2022. Vol.72. No.12. P.25-34. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-72-12-25. (Russian)