

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СТРУКТУРЫ ПОРИСТОЙ СРЕДЫ НА ПРОТЕКАНИЕ ПРОЦЕССОВ ХИМИЧЕСКОГО РЕАГИРОВАНИЯ

*Директор Л.Б., Зайченко В.М., Майков И.Л.**

*ИВТ РАН, Москва
director@oivtran.iitp.ru

На ход физико-химических процессов в пористых средах существенно влияют геометрические особенности пористой структуры. Пористые материалы обладают сложной нерегулярной стохастической структурой, что проявляется в случайном характере локального распределения фаз, локальных полей концентраций, давлений, скоростей и т.д. Процесс химического реагирования в полидисперсной среде развивается в условиях диффузионного и фильтрационного переноса газов и жидкостей, сопровождается фазовыми превращениями, явлениями спекания и тепловой деформации, изменяющими структурные характеристики вещества. Эти обстоятельства наряду со сложными кинетическими схемами превращений и неопределенностью значений кинетических констант создают значительные трудности при создании математических моделей реагирования в пористых средах.

В работе [1] получены зависимости изменения внутренней реакционной поверхности от степени метаморфизма пористого каркаса для монодисперсной системы частиц с использованием модели хаотично расположенных сфер [2]. Для описания пористой структуры введен структурный параметр θ_0 (при $\theta_0 = 1$ — регулярная упаковка, $\theta_0 < 1$ — перекрывающиеся частицы, $\theta_0 > 1$ — несоприкасающиеся частицы).

В настоящей работе рассматривается макрочастица, состоящая из случайной системы сферических, пересекающихся микрочастиц. Эволюция частиц в процессе пиролиза метана в общем случае зависит от внутренних параметров Z_k , включающих радиус частицы, состав, внутреннюю пористость и т.д., которые могут изменяться не только вследствие гетерогенных реакций, но и в результате других процессов.

Для описания динамики полидисперсной системы частиц в процессе пиролиза используется кинетическое уравнение.

В работе получено общее выражение, связывающее зависимость изменения внутренней реакционной поверхности от степени метаморфизма пористого каркаса для произвольного начального распределения частиц по размерам с обобщением модели хаотично расположенных сфер [2] для полидисперсной среды.

Проведено сравнение зависимостей степени метаморфизма пористого каркаса от безразмерного времени для различных начальных распределений: монодисперсного, равномерного и нормального логарифмического с различной дисперсией.

Показано, что полидисперсная среда может быть описана эффективным структурным параметром, величина которого всегда больше анало-

гичного параметра для монодисперсной среды, что соответствует более рыхлой структуре и меньшей начальной поверхности реагирования.

Разработана рекурсивная математическая модель и программа расчета процесса реагирования в пористой среде (процесс пиролиза метана) с учетом изменения функции распределения частиц по радиусам. Проведено сравнение с экспериментальными результатами.

1. Director L.B., Maikov I.L., Zaichenko V.M. // Proc. 12th Int. Heat Transfer Conference, Grenoble, France, 2002. P.929–934.
2. Хейфец Л.И., Неймарк А.В. Многофазные процессы в пористых средах. М.: Химия, 1982.