

УДК 536,46

[0000-0002-7236-7130] **В. В. Починок**, аспірант,
 [0000-0001-7113-9892] **В. М. Вязовик**, д.т.н., доцент
 e-mail: v.viazovyk@chdtu.edu.ua

Черкаський державний технологічний університет
 6-р Шевченка, 460, м. Черкаси, 18006, Україна

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ДИФУЗІЙНИХ ПРОЦЕСІВ ПІД ЧАС ЕЛЕКТРОННОКАТАЛІТИЧНОЇ ПЕРЕРОБКИ CO₂ В ОРГАНІЧНІ СПОЛУКИ

Сучасне суспільство викидає в навколишнє атмосферне повітря велику кількість різноманітних хімічних сполук, серед яких – CO₂, якого викидаються мільйони тонн. Одним із напрямів його переробки є електроннокаталітична переробка CO₂ в органічні сполуки. Важливою складовою цього методу є дифузійні процеси, які через нетривалий час існування частини сполук найкраще досліджувати за допомогою математичної моделі. Тому було складено і вирішено математичну модель дифузійних процесів на поверхні каталізатора при електроннокаталітичній переробці CO₂. В результаті моделювання отримано залежності коефіцієнта дифузії, швидкості дрейфу частинок, загального об'ємного коефіцієнта масовіддачі, а також швидкості масовіддачі.

Ключові слова: діоксид вуглецю, електроннокаталітична переробка, органічні сполуки, математична модель, дифузійні процеси.

Вуглекислий газ в атмосфері Землі є малою компонентою сучасної земної атмосфери. Станом на жовтень 2019 р. його концентрація в атмосферному повітрі становила близько 410 ppm [1, 2], тоді як на кінець жовтня 2020 р. вона становила близько 412,58 ppm і продовжує збільшуватися. В Україні, яка займає 27-е місце із 213 за кількістю викидів CO₂, станом на кінець жовтня 2020 р. ці викиди становлять близько 225 млн т [3]. Перші три місця займають Китай – 10065 млн т, США – 5416 млн т, Індія – 2654 млн т. Загалом за 2018 р. в результаті діяльності людини в атмосферу було викинуто понад 36 573 млн т CO₂ [3, 4].

Головним напрямом у боротьбі зі зміною клімату вважається спільне зниження кількості викидів парникових газів в атмосферу Землі, декарбонізація – уловлювання й зберігання вуглецю та конверсія CO₂ в продукти палива та нафтохімії. Ці проблеми можна було б вирішити, якщо б знайшовся ефективний спосіб використання діоксиду вуглецю як джерела вуглецю при виробництві палива й хімічної сировини. Перетворення CO₂ на хімікати та енергоносії з доданою вартістю вважається одним із чотирьох пріоритетних напрямів розвитку економіки різних країн.

На рисунку 1 у вигляді схеми зображено сполуки, які можуть бути отримані з CO₂.

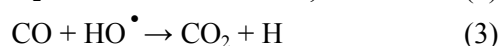
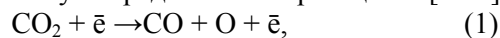
На рисунку 2 схематично зображено електроннокаталітичну переробку CO₂ в органічні сполуки (без урахування допоміжних підготовчих стадій). Згідно з цією схемою електроннокаталітична переробка CO₂ в органічні сполуки складається з двох основних стадій:

- у первинному розряднику відбуваються процеси активації в зоні низькотемпературної плазми вуглекислого газу та руйнування парів води з утворенням водню, кисневмісних радикалів HO[•] та HO₂[•], які відіграють суттєву роль у перетворенні вуглекислого газу;

- у вторинному розряднику відбувається безпосередній синтез на поверхні гетерогенного каталізатора в зоні низькотемпературної плазми органічних сполук із речовин, що утворилися в первинному розряднику.

Як джерело низькотемпературної плазми використовується бар'єрний розряд.

Хімізм процесу в первинному розряднику може бути представлений реакціями [6-12]:



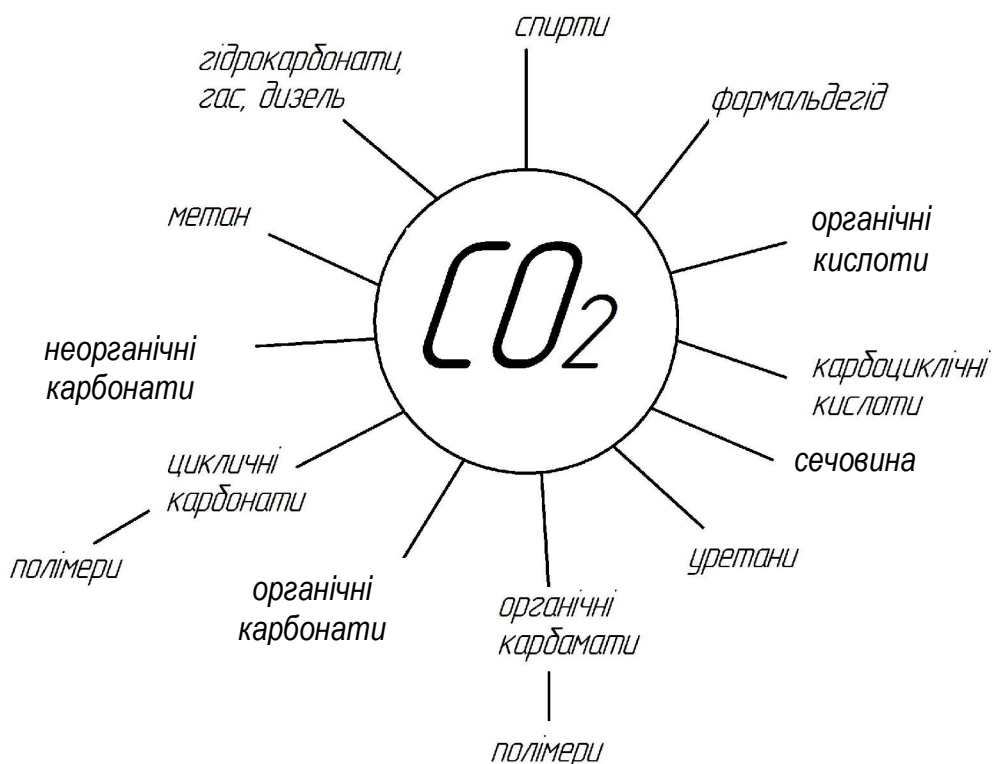
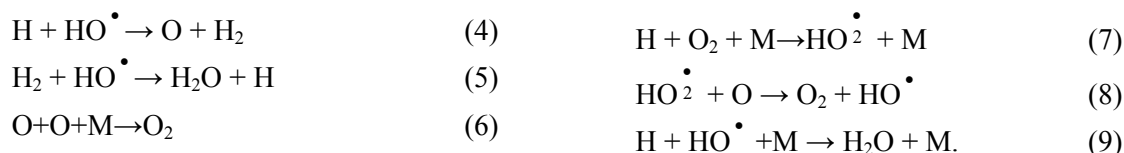


Рисунок 1 – Сполуки, які можна отримати із CO₂ [5] (неорганічні / органічні карбонати, сечовина)

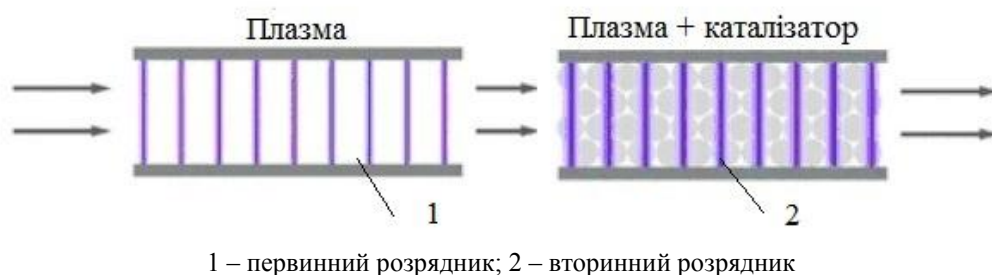
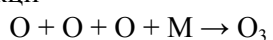


Рисунок 2 – Схема переробки CO₂ в органічні сполуки

В результаті до початкової суміші вуглекислого газу та парів води додаються ще атомарний кисень, водень, оксид вуглецю та кисневмісні радикали HO[•] та HO^{2•}.

В [6-12] згадується, що при пропусканні через бар'єрний розряд CO₂ утворюється озон завдяки реакції



При детальному описі будь-якого досліджуваного хімічного процесу виникає необхідність у великій кількості параметрів, визна-

чення яких через різноманітні причини є ускладненим. Так, при дослідженні таких короткоживучих сполук, як радикали та іони, дуже складно без спеціалізованого обладнання визначити кінетику перебігу процесу, а за допомогою математичного моделювання це можливо.

Будь-які хімічні процеси за участі каталізатора супроводжуються дифузійною реакцією із потоку в зерно каталізатора і продуктів реакції від зерен – в потік. Таким чином, будь-який хімічний процес, що проходить

на поверхні каталізатора, пов'язаний із дифузією, що забезпечує транспорт реагентів та продуктів реакції з однієї зони в іншу. Більшість реакцій проходять у порах каталізатора. Враховуючи це, можна розрізнити наступні стадії процесу:

1. Транспортування реагентів з потоку до поверхні зерен за допомогою дифузії.
2. Дифузія реагентів з потоку в пори зерен каталізатора.
3. Адсорбція реагентів у порах каталізатора.
4. Хімічні перетворення в порах каталізатора.
5. Десорбція продуктів реакції.
6. Дифузія продуктів реакції з пор до поверхні зерен каталізатора.
7. Транспортування продуктів реакції з поверхні каталізатора в потік речовини.

Усе це вказує на нерозривний зв'язок дифузійних процесів та хімічної реакції. А оскільки сполуки в них беруть участь, існуючи протягом частки секунди, то найкращим методом їх дослідження є математична модель.

Метою роботи є розробка і рішення математичної моделі дифузійних процесів на поверхні каталізатора в зоні низькотемпературної плазми бар'єрного розряду з накладанням напруженості електромагнітного поля при електроннокаталітичній переробці вуглекислого газу в органічні сполуки для сполук, час життя яких становить тисячні частки секунди.

Математичний опис. Основний закон масопередачі визначає швидкість процесу перенесення речовини до поверхні каталізатора

$$\frac{dM}{d\tau} = K\Delta Cdf,$$

де K – коефіцієнт масопередачі; ΔC – рушійна сила дифузійного процесу; df – поверхня, крізь яку відбувається дифузія.

Виходячи з того, що опір середовища при дифузії речовини із однієї фази в іншу відсутній, коефіцієнт масопередачі з урахуванням газової β_c і твердої β_a фаз дорівнює

$$K_C = \frac{1}{\frac{1}{\beta_c} + \frac{m}{\beta_a}},$$

де m – тангенс кута нахилу рівноважної лінії або коефіцієнт розподілення.

При низьких концентраціях речовини в газі справедливий запис

$$\frac{m}{\beta_a} \ll \frac{1}{\beta_c} \text{ і } K_c \approx \beta_c.$$

Тому необхідно, в першу чергу, визначити вплив електричного поля на дифузійні процеси в газовій фазі. З теорії масообміну відомо, що будь-яка речовина з ядра потоку в приграничний шар переноситься конвективною і молекулярною дифузією. Прийmemo, що в ядрі потоку концентрація речовини залишається постійною певний час.

При накладанні напруженості електричного поля речовина, крім конвективної і молекулярної дифузії, транспортується ще завдяки дрейфу заряджених молекул до приграничної поверхні. Швидкість цього дрейфу напряму залежить від напруженості електричного поля E

$$w_D = K_D E,$$

де K_D – скалярна рухомість іонів. Вона характеризує іони і газ та чисельно дорівнює швидкості руху під дією поля напруженістю в 1 В/м у газі під тиском в одну атмосферу. Тоді кількість речовини, перенесеної з ядра фази до міжфазної поверхні, визначається виразом

$$v_E = w_D c.$$

В результаті цього концентрація розподіленої речовини змінюється до C_{zpE} . Ця зміна при накладанні напруженості поля приводить до зростання концентрації компоненту, що розподіляється, зі сторони твердої фази до значення a_{zpE} . В цьому випадку, за законом Щукарьова, швидкість масовіддачі в твердій фазі має вигляд

$$v_a = \beta_a (a_{zpE} - a).$$

Рушійна сила на межі розділу фаз залежить від механізму молекулярної дифузії, і тоді швидкість масовіддачі в газовій фазі буде дорівнювати

$$v_y = v_c + v_E \text{ або } v_y = \beta_c (c - c_{zp}) + v_E.$$

Праву частину цього рівняння також можна представити у вигляді

$$v_a = \beta_{cE} (C - C_{zp}),$$

де β_{cE} – коефіцієнт масовіддачі в газовій фазі в електричному полі:

$$\beta_{cE} = \beta_c + \frac{v_E}{C - C_{zp}}.$$

Тоді маємо

$$K_{cE} = \beta_c + \frac{v_E}{C - C_{cp}}$$

При збільшенні електричного поля E концентрація на межі розділу фаз зі сторони газового потоку C_{cpE} буде збільшуватися до встановлення рівноваги на межі і в ядрі потоку.

При іонізації газового потоку під дією електричного поля на заряджену частинку (іон) діє сила, яка дорівнює добутку заряду частинки на напруженість електричного поля (В/м) E

$$P = |e|nE,$$

де $e=1,60219 \cdot 10^{-19}$ Кл – заряд електронів;
 n – валентність іона.

Сила опору середовища руху іона

$$F = 3\pi\mu w_d d,$$

де μ – в'язкість середовища, Па·с;
 w_d – швидкість руху (дрейфу) іонів, м/с;
 d – діаметр іона, м.

При русі іона, за умови $P=F$,

$$w_d = |e| \frac{nE}{3\pi\mu d}.$$

Швидкість масопередачі при дії електричного поля визначається за формулою

$$v_E = w_d C,$$

де C – концентрація компонента, що розподіляється в ядрі газової фази, кг/м³.

Таким чином, при накладанні на газовий потік напруженості поля до швидкості масовіддачі в газовій фазі v_c додається швидкість масопідводу іонів v_E в електричному полі.

Швидкість масопереносу в електричному полі визначається за формулою

$$v_y = v_c + v_E.$$

В стаціонарних умовах $v_y = v_a$ або

$$\beta_c (C - C_{GP}) + v_E = \beta_a (a_{GP} - a),$$

звідки

$$a_{GP} = a + \frac{\beta_c (C - C_{GP}) + v_E}{\beta_a},$$

де a, a_{GP} – концентрація компонента в ядрі і на межі твердої фази, відповідно, кг/м³;

C_{GP} – концентрація компонента на межі твердої фази, кг/м³.

Тобто накладання напруженості електричного поля приводить до збільшення концентрації з обох сторін межі розділу фаз.

Коефіцієнт об'ємного масопереносу при накладанні напруженості поля визначається у вигляді

$$\beta_e = \frac{w_e}{d_3},$$

де d_3 – діаметр зерен каталізатора, м.

Зовнішній об'ємний коефіцієнт масопередачі при звичайному русі речовин визначається за формулою

$$\beta_y = \frac{1,6Dw^{0,54}}{v^{0,54}d^{1,46}},$$

де D – коефіцієнт дифузії речовини в газі, м²/с;
 w – фіктивна швидкість газу в шарі каталізатора, м/с;
 v – кінематична в'язкість газу, м²/с.

Загальний об'ємний коефіцієнт масовіддачі від ядра газового потоку до поверхні зерен каталізатора має вигляд

$$\beta_{ye} = \beta_y + \beta_e,$$

а загальна швидкість масовіддачі

$$v_{ye} = \beta_{ye} (C - C_{cp}).$$

Швидкість дифузії реагенту A до поверхні каталізатора в газовій фазі розраховують за рівнянням

$$W_D = \frac{Re^{0,7} Pr^{0,33}}{2,32d_q} DC_A.$$

Критерії Рейнольдса і Прандтля:

$$Re = \frac{w_\phi d_q \rho}{(1 - \varepsilon)\mu},$$

$$Pr = \frac{\mu}{\rho D},$$

де C_A – концентрація реагенту A в газі B , кмоль/м³;

ρ – густина реагенту A , кг/м³; Па·с;

ε – поруватість шару каталізатора.

Розрахунок напруженості поля в зоні електричного розряду можна розрахувати за виразом

$$E = \frac{U_r}{r_p},$$

де U_r – напруга в розрядному проміжку, В;
 r_p – зазор між електродами, м.

Напругу між електродами можна знайти за формулою

$$U_r = U \frac{C_\phi}{C_2 + C_\phi},$$

де U – напруга, що подається на електроди, В;
 C_ϕ – ємність бар'єру;
 C_2 – ємність газового проміжку.

Для електродів циліндричної форми ємності дорівнюють:
для бар'єру

$$C_0 = 2\pi\epsilon_0\epsilon \frac{L}{\ln \frac{D}{D_{\text{вн}}}},$$

для газового проміжку

$$C_2 = 2\pi\epsilon_0\epsilon_2 \frac{L}{\ln \frac{D_n}{D}},$$

де ϵ і ϵ_2 – діелектричні проникності бар'єру і газу газового проміжку;

ϵ_0 – електрична стала;

L – довжина електродів, м;

$D_{\text{вн}}$, D , D_n – діаметри електродів, м.

Результати розрахунку та їх обговорення. Виходячи з наведених залежностей, були розраховані напруженості поля для напруг від 7 до 11 кВ для матеріалу бар'єру – скла і газу в газовому проміжку – вуглекислий газ з парами води, які наведено в таблиці 1.

Температура газового потоку – 350°C, газове середовище – CO₂, розмір пор каталізатора – 8·10⁻⁸ мм, тобто мікропори.

Таблиця 1 – Значення напруженості поля для різних напруг

Напруга, кВ	7	8	9	10	11
Напруженість поля, кВ/м ²	3,607	4,122	4,638	5,152	5,668

При рішенні моделі значний інтерес становлять дифузійні процеси для CO, O₂, O, H₂O, HO[•], HO₂[•], H, які, за реакціями (1)-(9), суттєво впливають на процес утворення органічних сполук із CO₂. Результати рішення моделі подано в таблиці 2.

Як видно з результатів рішення моделі, на усі параметри дифузійного процесу суттєво впливає накладання низькотемпературної плазми. Однак величина цього впливу для кожної сполуки суттєво різниться.

Таблиця 2 – Розрахункові значення параметрів дифузійного процесу для різних напруг

Сполука	Напруга, кВ					
	0	7	8	9	10	11
Коефіцієнт дифузії, м ² /с						
CO	0,00857	0,03	0,0304	0,03041	0,03044	0,03046
O ₂	0,00731	0,0272	0,0274	0,0277	0,0279	0,0282
O	0,0147	0,02286	0,0249	0,0276	0,02992	0,0324
H ₂ O	0,0088	0,0324	0,0326	0,0329	0,0331	0,0334
HO [•]	0,010086	0,0383	0,0384	0,0385	0,0386	0,0387
HO ₂ [•]	0,00826	0,0235	0,0237	0,0241	0,0242	0,0245
H	0,0079	0,0373	0,0385	0,04	0,042	0,043
Швидкість дрейфу під дією магнітного поля, м/с						
CO	0	0,0014	0,0016	0,0018	0,002	0,0022
O ₂	0	0,0015	0,0017	0,0019	0,0021	0,0023
O	0	1,5	1,705	1,92	2,13	2,35
H ₂ O	0	0,0015	0,00171	0,00192	0,00213	0,00235
HO [•]	0	0,0047	0,00533	0,006	0,0067	0,0074
HO ₂ [•]	0	0,015	0,0171	0,0192	0,0213	0,0235
H	0	0,844	0,905	1,09	1,207	1,33
Загальний об'ємний коефіцієнт масовіддачі, кмоль/м ² ·с						
CO	25,89	26,03	26,05	26,07	26,09	26,109
O ₂	2,183	2,331	2,36	2,38	2,4	2,417
O	4,33	19,25	21,38	23,51	25,64	27,78
H ₂ O	2,63	2,78	2,8	2,82	2,84	2,86
HO [•]	3,23	3,29	3,295	3,3	3,31	3,31
HO ₂ [•]	1,87	2,019	2,04	2,06	2,08	2,103
H	23,56	32,009	33,22	34,42	35,63	36,84

Закінчення таблиці 2

Швидкість масовіддачі, кмоль/м ² ·с						
CO	$562,4 \cdot 10^{-9}$	$164,7 \cdot 10^{-7}$	$164,9 \cdot 10^{-7}$	$165,0 \cdot 10^{-7}$	$165,1 \cdot 10^{-7}$	$165,2 \cdot 10^{-7}$
O ₂	$553,4 \cdot 10^{-9}$	$591,2 \cdot 10^{-9}$	$596,6 \cdot 10^{-9}$	$602,0 \cdot 10^{-9}$	$607,4 \cdot 10^{-9}$	$612,8 \cdot 10^{-9}$
O	$153,5 \cdot 10^{-3}$	$683,7 \cdot 10^{-3}$	$759,4 \cdot 10^{-3}$	$835,1 \cdot 10^{-3}$	$910,9 \cdot 10^{-3}$	$986,6 \cdot 10^{-3}$
H ₂ O	$378,5 \cdot 10^{-4}$	$399,9 \cdot 10^{-4}$	$403,1 \cdot 10^{-4}$	$406,1 \cdot 10^{-4}$	$406,2 \cdot 10^{-4}$	$412,3 \cdot 10^{-4}$
HO•	$718,2 \cdot 10^{-5}$	$728,2 \cdot 10^{-5}$	$730,0 \cdot 10^{-5}$	$731,5 \cdot 10^{-5}$	$733,0 \cdot 10^{-5}$	$734,5 \cdot 10^{-5}$
HO ₂ •	$562,4 \cdot 10^{-9}$	$607,3 \cdot 10^{-9}$	$613,7 \cdot 10^{-9}$	$620,1 \cdot 10^{-9}$	$626,6 \cdot 10^{-9}$	$632,9 \cdot 10^{-9}$
H	$247,6 \cdot 10^{-9}$	$336,4 \cdot 10^{-9}$	$349,1 \cdot 10^{-9}$	$361,7 \cdot 10^{-9}$	$374,5 \cdot 10^{-9}$	$387,2 \cdot 10^{-9}$
Швидкість дифузії до поверхні, м ² /с						
CO	0,000016	0,000171	0,000171	0,000171	0,0001716	0,0001716
O ₂	0,000000121	0,00000136	0,00000137	0,00000138	0,00000139	0,0000014
O	0,026	0,785	0,842	0,898	0,952	1,0004
H ₂ O	0,000000777	0,0000087	0,00000875	0,0000088	0,00000884	0,00000884
HO•	0,000000138	0,0000015	0,0000015	0,0000015	0,00000151	0,00000151
HO ₂ •	0,000000129	0,00000147	0,00000148	0,00000149	0,0000015	0,00000151
H	2,47E-08	0,000000326	0,000000335	0,000000343	0,000000351	0,000000359

Так, коефіцієнти дифузії при накладанні напруженості поля збільшуються, але для кожної речовини різним чином. При накладанні напруженості коефіцієнт дифузії збільшується в кілька разів, однак при подальшому збільшенні цієї напруженості подальше збільшення різне. Із речовин, що становлять інтерес у цьому дослідженні, найбільш стрімко зростає коефіцієнт дифузії атомарного кисню та водню, тоді як зміна коефіцієнтів для інших сполук значно менша: вони змінюються в межах $1 \cdot 10^{-3} - 10^{-4}$ м/с.

Під дією напруженості поля усі досліджувані сполуки починають свій направлений рух за векторами електромагнітного поля. Однак також, як і у випадку з коефіцієнтом дифузії, ця швидкість дрейфу різна. Дуже швидко рухаються ті ж атоми кисню і водню. На перший погляд, це можна було б пояснити тим, що ці сполуки дуже легкі, і тому вони рухаються швидко. Проте якщо порівняти молярні маси радикалів HO₂• та HO•, то радикал HO• повинен мати більшу швидкість дрейфу, ніж HO₂•, бо він легший. Як видно з результатів моделювання, радикал HO₂• при майже вдвічі більшій масі має швидкість дрейфу, в три рази більшу. Тобто на швидкість дрейфу не впливає маса сполуки, а впливають такі характеристики, як стан молекули (збуджений або незбуджений), розподіл електронних густин тощо.

Значення загального об'ємного коефіцієнта масовіддач без накладання напруженості і з накладанням суттєво не відрізняються, і ця різниця становить кілька відсотків. Це не стосується пари молекул, що рухаються, про які згадувалося вище. Додається ще і CO.

Для швидкості масовіддачі вплив накладання напруженості поля ще більший. Якщо брати за аналогією з попередніми розрахованими параметрами, то найбільш рухливими мають бути атомарний кисень і водень. Однак тут ця пара розпалася. В атомарного водню не відбувається суттєвого збільшення швидкості масовіддачі, тоді як атомарний кисень відповідає очікуванням і збільшує свою швидкість масовіддачі. Радикали HO₂• та HO• змінюють свою швидкість масовіддачі дуже незначною мірою, і ця зміна, як і для молекулярного кисню, може бути пояснена зміною температурного режиму системи при накладанні напруженості поля.

Схожа картина спостерігається і для швидкості дифузії сполук до поверхні катализатора.

Висновки. Сучасне суспільство викидає в навколишнє атмосферне повітря велику кількість різноманітних хімічних сполук, серед яких і діоксид вуглецю. Щороку його викиди становлять мільйони тонн, і темпи викидів не зменшуються. Проблеми із впливом CO₂ на довкілля можна було б вирішити, якщо б знайшовся ефективний спосіб використання

діоксиду вуглецю як джерела вуглецю при виробництві палива й хімічної сировини.

Одним із таких напрямів переробки CO₂ шляхом перетворення на хімічні реагенти і паливо є електроннокаталітична переробка CO₂ в органічні сполуки. Особливістю цього методу є використання низькотемпературної плазми з бар'єрного розряду в присутності гетерогенного каталізатора. Досліджено дифузійні процеси на поверхні каталізатора за допомогою математичного моделювання. Зокрема було складено і вирішено математичну модель дифузійних процесів на поверхні каталізатора при електроннокаталітичній переробці CO₂. Виходячи з результатів моделювання, видно, що на усі параметри дифузійного процесу суттєво впливає накладання низькотемпературної плазми. Однак величина цього впливу для кожної сполуки суттєво різниться.

Аналізуючи кожний окремий дифузійний параметр, нами встановлено, що:

- при накладанні напруженості поля коефіцієнт дифузії збільшується в кілька разів. Однак при подальшому збільшенні напруженості змінюється коефіцієнт дифузії для речовин є різною. Найбільша вона в атомарного кисню та водню, тоді як його змінює для інших сполук значно менша;

- дія напруженості поля змушує усі досліджувані сполуки направлено рухатися за векторами електромагнітного поля. Найбільшою є швидкість руху в атомарного кисню та водню;

- на значення загального об'ємного коефіцієнта масовіддачі накладання напруженості суттєво не впливає, і наявна різниця становить декілька відсотків. Це не стосується пари рухомих молекул, про які згадувалося вище. Додається ще і CO;

- для швидкості масовіддачі вплив накладання напруженості поля є ще більшим. В атомарного водню не відбувається суттєвого збільшення швидкості масовіддачі, тоді як атомарний кисень, навпаки, збільшує свою швидкість масовіддачі. Радикали HO[•] та HO[•] змінюють свою швидкість масовіддачі дуже незначною мірою.

Список використаних джерел

[1] Огляд світового досвіду зниження обсягів антропогенних викидів парникових газів на об'єктах енергетики, М-во енергетики

та вугільної промисловості України, НЕК «Укренерго», Наук.-техн. центр електроенергетики, 2013.

- [2] CO₂. Earth is live!! Daily CO₂. [Електронний ресурс]. Режим доступу: <https://www.co2.earth/daily-co2>. Дата звернення: Жовт. 28, 2020.
- [3] Global Carbon Atlas. CO₂ Emissions. [Online]. Available: <http://www.globalcarbonatlas.org/ru/CO2-emissions>. Дата звернення: Лип. 28, 2020.
- [4] Press release: Special Report on Global Warming of 1.5°C. Incheon, Republic of Korea: Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC). Accessed on: Oct. 7, 2018.
- [5] Payal B. Joshi, "Carbon dioxide utilization: a comprehensive review", *Int. J. Chem. Sci.*, no. 12 (4), pp. 1208-1220, 2014.
- [6] Xintong Ma, Sirui Li, and Maria Ronda-Lloret, "Plasma assisted catalytic conversion of CO₂ and H₂O over Ni/Al₂O₃ in DBD reactor", *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, no. 39 (1), pp. 109-124, 2019. DOI: 10.1007/s11090-018-9931-1.
- [7] Amin Zhou, Dong Chen, Cunhua Ma, Feng Yu, and Bin Dai, "DBD plasma-ZrO₂ catalytic decomposition of CO₂ at low temperatures", *Catalysts*, no. 8, pp. 256-267, 2018. DOI: 10.3390/catal8070256.
- [8] R. Snoeckx A. Ozkan, F. Reniers, and A. Bogaerts, "The quest for value-added products from CO₂ and H₂O in a dielectric barrier discharge: a chemical kinetics study", *ChemSusChem*, vol. 10 (2), pp. 409-424, 2016. DOI: 10.1002/cssc.201601234.
- [9] X. Zhang, B. J. Lee, H. G. Im, and M. S. Cha, "Ozone production with dielectric barrier discharge: effects of power source and humidity", *IEEE Trans. Plasma Sci.*, no. 44 (10), pp. 2288-2296, 2016. DOI: 10.1109/TPS.2016.2601246.
- [10] Hasliza Bahruji, Michael Bowker, Graham Hutchings, Nikolaos Dimitratos, Peter Wells, Emma Gibson, Wilm Jones, Catherine Brookes, David Morgan, and Georgi Lalev, "Pd/ZnO catalysts for direct CO₂ hydrogenation to methanol", *Journal of Catalysis*, vol. 343, pp. 133-146, 2016. DOI: 10.1016/j.jcat.2016.03.017.
- [11] Mun-Sing Fan, Ahmad Zuhairi, and Abdullah Subhash, "Catalytic technology for carbon dioxide reforming of methane to synthe-

- sis gas", *ChemCatChem*, vol. 1, pp. 192-208, 2009.
DOI: 10.1002/cctc.200900025.
- [12] Mehrnoush Khavarian, Siang-Piao Chai, and Abdul Rahman Mohamed, "Carbon dioxide over carbon-based nanocatalyst", *Journal of nanoscience and nanotechnology*, vol. 13, pp. 4825-4837, 2013.
DOI: 10.1166/jnn.2013.7569.
- [13] А. Б. Голованчиков, М. Ю. Ефремов, и Н. А. Дулькина, *Интенсификация массо-обменных процессов в электрическом поле: монография*. Волгоград: ИУНЛ ВолгГТУ, 2011.
- [14] Y. Itikawa, "Cross sections for electron collisions with carbon dioxide", *J. Phys. Chem. Ref. Data*, vol. 31, no. 3, pp. 749-767, 2002.
DOI: 10.1063/1.4913926.
- [7] Amin Zhou, Dong Chen, Cunhua Ma, Feng Yu, and Bin Dai, "DBD plasma-ZrO₂ catalytic decomposition of CO₂ at low temperatures", *Catalysts*, no. 8, pp. 256-267, 2018.
DOI: 10.3390/catal8070256.
- [8] R. Snoeckx A. Ozkan, F. Reniers, and A. Bogaerts, "The quest for value-added products from CO₂ and H₂O in a dielectric barrier discharge: a chemical kinetics study", *ChemSusChem*, vol. 10 (2), pp. 409-424, 2016.
DOI: 10.1002/cssc.201601234.
- [9] X. Zhang, B. J. Lee, H. G. Im, and M. S. Cha, "Ozone production with dielectric barrier discharge: effects of power source and humidity", *IEEE Trans. Plasma Sci.*, no. 44 (10), pp. 2288-2296, 2016.
DOI: 10.1109/TPS.2016.2601246.
- [10] Hasliza Bahruji, Michael Bowker, Graham Hutchings, Nikolaos Dimitratos, Peter Wells, Emma Gibson, Wilm Jones, Catherine Brookes, David Morgan, and Georgi Lalev, "Pd/ZnO catalysts for direct CO₂ hydrogenation to methanol", *Journal of Catalysis*, vol. 343, pp. 133-146, 2016.
DOI: 10.1016/j.jcat.2016.03.017.
- [11] Mun-Sing Fan, Ahmad Zuhairi, and Abdullah Subhash, "Catalytic technology for carbon dioxide reforming of methane to synthesis gas", *ChemCatChem*, vol. 1, pp. 192-208, 2009.
DOI: 10.1002/cctc.200900025.
- [12] Mehrnoush Khavarian, Siang-Piao Chai, and Abdul Rahman Mohamed, "Carbon dioxide over carbon-based nanocatalyst", *Journal of nanoscience and nanotechnology*, vol. 13, pp. 4825-4837, 2013.
DOI: 10.1166/jnn.2013.7569.
- [13] А. Б. Голованчиков, М. Ю. Ефремов, и Н. А. Дулькина. *Интенсификация массовых процессов в электрическом поле: монография*. Волгоград, Россия: ИУНЛ ВолгГТУ, 2011.
- [14] Y. Itikawa, "Cross sections for electron collisions with carbon dioxide", *J. Phys. Chem. Ref. Data*, vol. 31, no. 3, pp. 749-767, 2002.
DOI: 10.1063/1.4913926.

References

- [1] Review of world experience in reducing anthropogenic greenhouse gas emissions at energy facilities, Ministry of Energy and Coal Industry of Ukraine, NEK "Ukrenergo", Sci. and Tech. Center of Electric Power, 2013.
- [2] CO₂. Earth is live!! Daily CO₂. [Online]. Available: <https://www.co2.earth/daily-co2>. Accessed on: Oct. 28, 2020.
- [3] Global Carbon Atlas. CO₂ Emissions. [Online]. Available: <http://www.globalcarbonatlas.org/ru/CO2-emissions>. Accessed on: Oct. 28, 2020.
- [4] Press release: Special Report on Global Warming of 1.5°C. Incheon, Republic of Korea: Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC). Accessed on: Oct. 7, 2018.
- [5] Payal B. Joshi, "Carbon dioxide utilization: a comprehensive review", *Int. J. Chem. Sci.*, no. 12 (4), pp. 1208-1220, 2014.
- [6] Xintong Ma, Sirui Li, and Maria Ronda-Lloret, "Plasma assisted catalytic conversion of CO₂ and H₂O over Ni/Al₂O₃ in DBD reactor", *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, no. 39 (1), pp. 109-124, 2019.
DOI: 10.1007/s11090-018-9931-1.

V. V. Pochynok, *postgraduate student*,
V. M. Viazovik, *Dr.Tech.Sc., associate professor*
e-mail: v.viazovyk@chdtu.edu.ua
Cherkasy State Technological University
Shevchenko blvd, 460, Cherkasy, 18006, Ukraine

MATHEMATICAL MODEL OF DIFFUSION PROCESSES IN ELECTROCATALYTIC PROCESSING OF CO₂ IN ORGANIC COMPOUNDS

Modern society emits a large number of various chemical substances into the ambient air. One of these compounds is carbon dioxide. Millions of tons are thrown away every year, and this pace is not decreasing.

All these problems could be solved if an efficient way to use carbon dioxide as a source of carbon in the production of fuel and chemical raw materials is found. The conversion of CO₂ into value-added chemicals and energy sources is considered to be one of the four priority areas of economic development in different countries. Electrocatalytic processing of CO₂ into organic compounds can be used as one of such directions of processing. A peculiarity of this method consists in the use of low-temperature plasma barrier discharge in the presence of a heterogeneous catalyst. An important component of this method is diffusion processes on the catalyst surface, which after a short period of existence of some compounds are best investigated using a mathematical model. Therefore, a mathematical model of diffusion processes on the catalyst surface during electron-catalytic CO₂ processing has been compiled and solved.

Analyzing each individual diffusion parameter, we have found that:

- when the field strength is applied, the diffusion coefficient increases several times;*
- the action of the field strength causes all the studied compounds to move in a direction along the vectors of the electromagnetic field. The greatest is the velocity of atomic oxygen and hydrogen;*
- the value of the total volumetric coefficient of mass transfer is not significantly affected by the superposition of tension, and the available difference is a few percent. This does not apply to hydrogen, oxygen and CO atoms;*
- the rate of mass transfer to atomic oxygen is higher, other compounds do not significantly increase the rate of mass transfer.*

Keywords: *carbon dioxide, electrocatalytic processing, organic compounds, mathematical model, diffusion processes.*

Стаття надійшла 21.11.2020

Прийнято 19.12.2020