

КРИСТАЛОКВАЗІХІМІЧНИЙ МЕХАНІЗМ КАТАЛІЗУ НА ЛІТІЙ-ЦИНКОВИХ ФЕРИТАХ

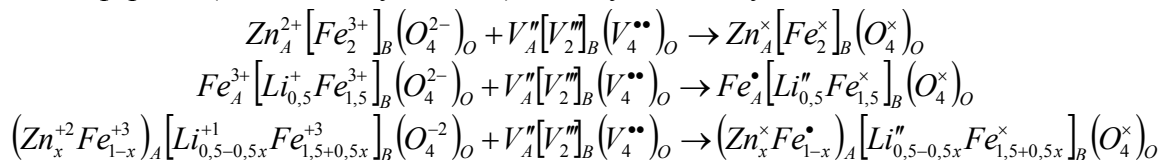
Татарчук Т.Р.

Прикарпатський університет імені Василя Стефаника
tatar_ch@inbox.ru

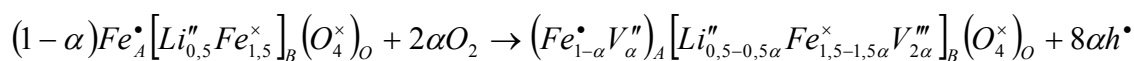
Літій-цинкові ферити, як матеріали електронної техніки, вивчалися раніше, проте, що стосується досліджень їх хімічних та каталітичних властивостей, то робіт в цьому напрямку майже немає, хоча каталітичні властивості інших феритів, особливо шпінельної структури, в деякій мірі вивчалися. В даній роботі розглядається принципово нова теорія каталізу, яка ґрунтується на утворенні та анігіляції антиструктури та електронно-діркових пар.

Зразки феритів отримували із вихідних речовин Li_2CO_3 (х.ч.), Fe_2O_3 (ч.д.а.), ZnO (ч.д.а.) по звичайній керамічній технології при температурі $900^\circ C$ на протязі 4 годин. В якості модельної реакції при дослідженні каталітичних властивостей літій-цинкових феритів використано реакцію окиснення чадного газу. Кінетичні закономірності вивчали на установці проточного типу при ізотермічних витримках ($400, 500, 600^\circ C$). Питома поверхня каталізаторів виміряна по низькотемпературній адсорбції аргону і розрахована по рівнянню BET.

Зрозуміло, що процес каталізу буде проходити через такі стадії: адсорбція CO, O_2 на поверхні феритового каталізатора; хімічна взаємодія CO та O_2 з каталізатором; утворення CO_2 по реакції $2CO + O_2 \rightarrow 2CO_2$; десорбція CO_2 . Відомо, що механізм каталізу включає залучення т.зв. активних центрів, проте на сьогодні їх природа, значним чином, залишається нез'ясованою. Тому нами вперше застосовано кристалоквазіхімічну модель в хімії твердого тіла до встановлення природи активних центрів каталізу. Кристалоквазіхімія передбачає накладання антиструктури на кристалохімічну структуру сполуки, в даному випадку структуру шпінелі. Тобто кристалоквазіхімічні формули літійового, цинкового та літій-цинкового феритів (в загальному вигляді) запишуться наступним чином:



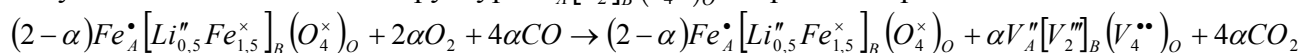
Кристалоквазіхімічний механізм каталізу можна розглянути на прикладі літійового фериту. При адсорбції O_2 на поверхні $Li_{0,5}Fe_{2,5}O_4$ утворюються катіонні вакансії та діркова провідність:



При адсорбції CO утворюються аніонні вакансії та електронна провідність:



Далі відбувається анігіляція антиструктури $V_A'' [V_2]_B (V_4^{**})_O$ і дірка-електрон:



При адсорбції газоподібних O_2 та CO можливе також виникнення таких дефектів – вкорінений кисень та вкорінений метал. Отже, з рівнянь процесу видно, що каталіз на $Li_{0,5}Fe_{2,5}O_4$ здійснюється через утворення дефектних структур, які за рахунок анігіляції антиструктур та дірок-електронів переходять у початковий стан, що повністю узгоджується із теорією каталізаторів.

Автор висловлює вдячність своєму науковому керівнику професору Лісняку С.С. за допомогу у виконанні даної роботи.