

3. Янчук Н.И.  $\alpha$ -Эффект в реакциях гидразидов кислот фосфора с электрофильными реагентами // Журн. общ. химии. - 1981. - Т. 51. - Вып. 10. - С. 2347-2352.
4. Янчук М.І., Іванець Л.М. Кінетика реакцій гідразидів О,О-діарилтіофосфорних кислот з фенілізотіоціанатом в бензолі // Наукові записки Тернопільського державного педагогічного університету. Серія: Хімія. - 2003. - Вып. 7. - С. 42-44.
5. Шандрук М.И., Янчук Н.И., Греков А.П. Строение и реакционная способность производных гидразина. XXXV. Кинетика реакций гидразидов О,О-диарилтиофосфорных кислот с фенилизотианатом в бензоле // Журн. общ. химии. - 1974. - Т. 10. - Вып. 11. - С. 2357-2360.
6. Dixon J.E., Bruice T.C. Kinetic and thermodynamic nature of the  $\alpha$ -effect for amine nucleophiles // J. Amer. Chem. Soc. - 1972. - V. 94. - N 6. P. 2052-2056.
7. Fina N.J., Edwards J.O. The alpha-effect. A review // Int. J. Chem. Kinet. - 1973. - V 5. - N 1. - P. 1-26.
8. Gregory M.J., Bruice T.C. The  $\alpha$ -effect. II. Displacements on  $sp^3$  carbon // J. Amer. Chem. Soc. - 1967. - V. 89. - N 17. - P. 4400-4402.
9. Хадсон Р. Структура и механизм реакций фосфорорганических соединений. М.: Мир, 1967. - 362 с.
10. Янчук Н.И., Грод И.Н., Іванець Л.Н. Количественная оценка влияния физико-химических свойств растворителей на кинетику реакций образования фосфорсодержащих семикарбазидов // Журн. общ. химии. - 2002. - Т. 72. - Вып. 11. - С. 1889-1894.
11. Шандрук М.И., Янчук Н.И., Греков А.П. Гидразиды фосфиновых и фосфорных кислот // Журн. общ. химии. - 1973. - Т. 43. - Вып. 10. - С. 2194-2198.
12. Klement R., Knollmüller K.O. // Chem. Ber. - 1960. - Bd 93. - S. 1088-1092.
13. Янчук Н.И., Балух В.М. Общий основной катализ пиридином в реакции образования фосфорсодержащих тиосемикарбазидов // Журн. общ. химии. - 1984. - Т. 45. - Вып. 12. - С. 2663-2669.
14. Шандрук М.И., Янчук Н.И., Греков А.П. Строение и реакционная способность производных гидразина. XXXIII. Кинетика реакций гидразидов диарилфосфиновых и О,О-диарилфосфорных кислот с фенилизотианатом в бензоле // Журн. общ. химии. - 1974. - Т. 44. - Вып. 11. - С. 2424-2432.
15. Доерфель К. Статистика в аналитической химии. М.: Мир, 1969. - 248 с.

*Поступило до Редакції 14.04.2005 р.*

**Д. В. Бражник, Ю. П. Зайцев, В. А. Зажигалов, А. Коваль\***  
**Інститут сорбції та проблем ендоекології НАН України**  
**\*Інститут каталізу та хімії поверхні**  
**Польської Академії Наук, м. Краків, Польща**

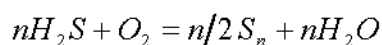
**УДК 544.47, 661.873**

## **ОКИСНЕНИЯ СІРКОВОДНЮ НА ВАНАДІЙВМІСНИХ ВУГЛЕЦЕВИХ КАТАЛІЗАТОРАХ**

### **Вступ**

Видалення сірководню з природних, а також викидних газів промислових підприємств є важливим аспектом захисту навколишнього середовища. При цьому основною проблемою є знешкодження низькоконцентрованих  $H_2S$ -вмісних газів.

На даний час використовуються три основні групи методів очистки газів від сірководню: а) абсорбційні, б) адсорбційні, в) каталітичні. Основна перевага перших двох груп методів – висока ступінь очистки газу (99,9%) від сірководню при невисоких температурах (30-40 °C). До основних недоліків можна віднести великий розхід сорбційного матеріалу і невелику споживчу цінність кінцевих продуктів. Найбільш перспективні процеси каталітичного окиснення сірководню киснем, які представлені загальним рівнянням реакції:



де  $n$  – число атомів в молекулі сірки, рівне 2...8 [1].

В різних процесах ця реакція може здійснюватись по різному, можуть відбуватися найрізноманітніші реакції, але сумарна реакція окиснення сірководню в елементарну сірку залишається незмінною.

Незважаючи на велику кількість робіт, присвячених прямому каталітичному окисненню  $H_2S$  коло каталітичних систем для цього процесу досить обмежене. Це, перед усім, активоване вугілля та оксиди перехідних металів [2]. Нанесення каталітично-активних перехідних металів на активоване вугілля дозволяє суттєво збільшувати кількість окисненого сірководню [3-5].

В цілому, каталізатори, що містять ванадій, широко використовуються для окиснення органічних та неорганічних речовин, а також пропонуються як найбільш активні реагенти при селективному окисненні  $H_2S$  у сірку. При цьому каталітична активність нанесених оксидів ванадію в значній мірі залежить від методу приготування та природи попередника [6-9].

Метою даної роботи є дослідження впливу методу нанесення на фізико-хімічні властивості та каталітичну активність нанесених на активоване вугілля ванадієвих каталізаторів у реакції окиснення сірководню киснем повітря.

## Експериментальна частина

### *Синтез каталізаторів*

Як носій використовували кісточкове активоване вугілля КАУ (фракція 1-2 мм) з об'ємом мікро- і мезопор 0.16 та 0.36  $cm^3/g$ , відповідно. Питома поверхня за аргоном – 510  $m^2/g$ .

Для вивчення впливу методу приготування на фізико-хімічні та каталітичні властивості каталізаторів були синтезовані дві серії зразків. Серія V (aq)/C була отримана шляхом просочування активного вугілля водним розчином  $NH_4VO_3$  відповідної концентрації. Після цього зразки висушували при 110°C протягом 8 год. і прожарювали у середовищі аргону при температурі 450°C на протязі 3 год. Серія V(acac)/C була синтезована шляхом взаємодії  $VO(acac)_2$  у розчині ацетонітрилу з носієм. Сушку і прожарювання проводили так як і в попередній серії. В обох випадках кількість нанесеного ванадію складала 1 мас. %.

### *Характеристика каталізаторів*

Морфологію поверхні зразків досліджували методом атомно-силової мікроскопії з використанням NanoScope E, Digital Instruments Scanning Probe Microscope Controller.

Термічний аналіз проводили на дериватографі Q-1500 "F. Paulik, J. Paulik, L. Erdely" при швидкості нагріву зразка 5°C·хв<sup>-1</sup>. Для всіх досліджень використовували наважку зразка близько 100 мг.

Енергетичний стан іонів ванадію на поверхні КАУ визначали методом РФЕС на приладі VG Scientific ESCA-3 з використанням  $AlK\alpha_{1,2}$  випромінювання (1486.6 eV). Робочий тиск був менше  $2 \cdot 10^{-8}$  Торр (1 Торр=133.3 Па). Енергії зв'язку співвідносили із стандартним піком C 1s електронів при 284.8 eV вуглецевої поверхні.

Реакцію окиснення сірководню проводили у проточному реакторі (Putech®) із загрузкою каталізатора 1  $cm^3$  (близько 0.5 г) при температурах 20°C та 180°C. Швидкість потоку реакційної суміші складала 50 мл/хв., склад суміші – 1%  $H_2S$  у повітрі. Проскок сірководню визначали за зміною кольору смужки фільтрувального паперу, змоченої 1М розчином ацетату плюмбуму. Даний метод дозволяє виявити сліди сірководню на рівні 20-50 ppm, що переважає чутливість газохроматографічного методу.

## Результати та їх обговорення

Кількість поглинутого сірководню на ванадійвмісних каталізаторах при температурі 20 °C не залежить від методу нанесення і для всіх зразків коливається в межах 3.5-3.8% від маси каталізатора, що близько до показників вихідного вугілля (табл. 1). Це може свідчити про те, що в цих умовах нанесений оксид ванадію ще не проявляє каталітичних властивостей і не приймає участі у реакції.

Підвищення температури реакції до 180°C призводить до збільшення кількості поглинутого сірководню на ванадійвмісному вугіллі. На зразку V(aq)/C кількість перетвореного сірководню у 2.4 рази вища ніж на вихідному вугіллі. Після завершення експерименту помічено, що об'єм каталізатора зменшився на 40% у порівнянні з об'ємом вихідного контакту. Каталізатор V(acac)/C проявляє ще більшу активність. Тестування цього зразку було припинено після 36 годин неперервного експерименту без втрати активності. При цьому було подано 1.62 г  $H_2S$ , що складає 327% від маси зразка. У ході експерименту зміни об'єму каталізатора не спостерігалося.

Дослідження стійкості до окиснення отриманих V/C каталізаторів методом термічного аналізу (рис. 1) показало, що в атмосфері повітря вихідне вугілля стійке до 480-500 °C.

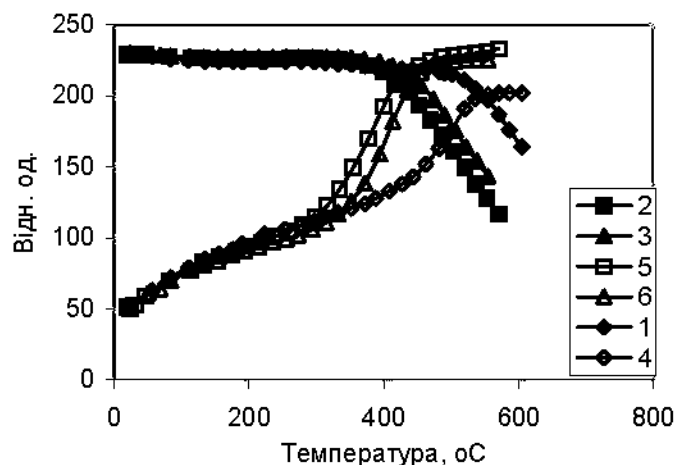


Рис. 1. Результати термічного аналізу V/C каталізаторів.  
Термограми: 1- вугілля КАУ, 2- 1%V(aq)/C, 3 - V(асас)/C.

Результати диференціального термічного аналізу: 4- вугілля КАУ, 5- 1%V(aq)/C, 6 - V(асас)/C.

Нанесення сполук ванадію на поверхню активованого вугілля зменшує його стійкість до поверхневого окислення. Зразок КАУ/V(aq) починає горіти при 375°C, а КАУ/V(асас) при 400°C.

Таблиця 1

Окиснення сірководню на V/C каталізаторах

Зразок	Температура реакції, °C	Маса поглинутого H <sub>2</sub> S, г	Відношення маси H <sub>2</sub> S до маси КАУ, %
КАУ <sub>вих</sub>	20	0.017	3.4
	180	0.331	81
КАУ/V(aq)	20	0.018	3.8
	180	0.954	195
КАУ/V(асас)	20	0.169	3.5
	180	1.617	більше 327

Дослідження хімічного складу поверхні V/C зразків методом РФЕС показало (рис. 2), що у вихідних каталізаторів енергії зв'язку V 2p електронів ванадію однакові: для V(aq) BE=517.4 eV і для V(асас) BE=517.4 eV, що дещо нижче, ніж для йона V<sup>+5</sup> у V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> (BE=517.8 eV) але вище, ніж для йона V<sup>+4</sup> у VO<sub>2</sub> (BE=516.0 eV) [10]. Ця відмінність може бути зумовлена електронодонорним впливом вуглецевої матриці. Після 10 годин проведення експерименту при 180 °C на поверхні контактів в обох випадках іони ванадію залишаються у тих же енергетичних станах.

Результати дослідження енергії зв'язку O 1s електронів показало, що хімічна природа кисню на поверхні вугілля змінюється не суттєво в залежності від методу приготування зразків. Відмінності спостерігаються лише в інтенсивності піків. Варто відмітити, що відношення піків O 1s електронів в активному вугіллі зробити надзвичайно важко і до сих пір багато авторів дискутують з цієї проблеми. Найбільш детально обговорення питання було опубліковано Г. Дармштадтом та ін. [10]. Згідно їх уявлень, перший пік з меншою енергією зв'язку відповідає наявності C=O типу кисню (карбоніл, COOR в естерах). Він має енергію 531.0 – 532.1 eV. Другий пік з проміжною енергією зв'язку (533.5 – 534.0 eV) відносять до C-OH і до -COOR. Третій пік з найбільшою енергією, так званий "shake-up" пік, не відповідає жодному специфічному стану кисню [11]. У переважній більшості його відносять до хемосорбованого кисню або води [12]. На каталізаторі КАУ/V(асас) спостерігається зменшення енергії зв'язку O 1s електронів усіх трьох піків. Це може свідчити про більш високу рухливість зв'язаного кисню та можливості вступу його в реакції окиснення сірководню з меншою затратою енергії у порівнянні із зразком КАУ/V(aq). Збільшення інтенсивності другого піку O 1s на зразку КАУ/V(асас) імовірно спричинене впливом оксигенових груп ацетилацетонату ванаділу, які після термічного розкладу цієї солі можуть зв'язуватись з поверхнею активованого вугілля.

Дані РФЕС зразків до і після 10 год. роботи наведені у табл. 2.

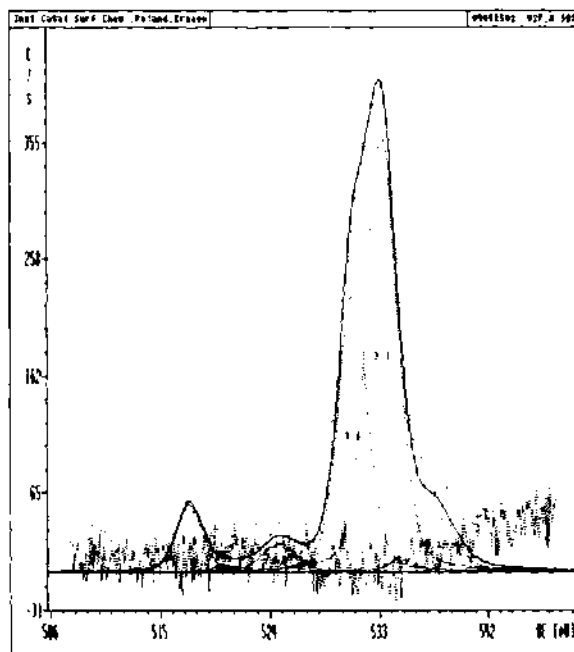
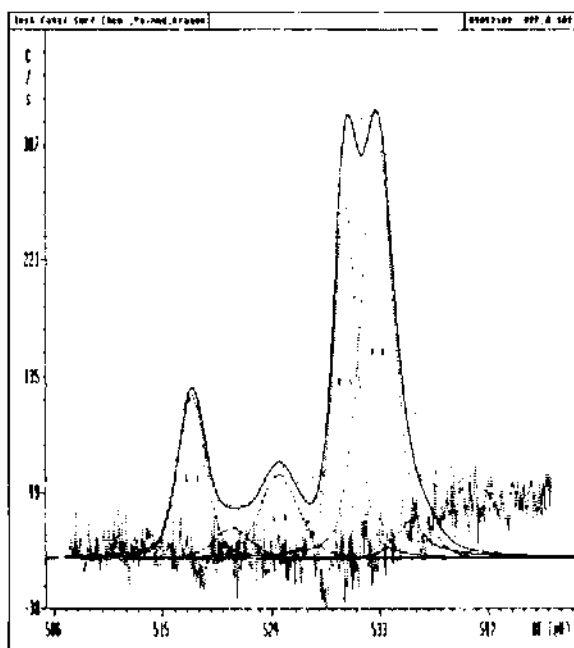


Рис. 2. Спектри РФЕС дослідження зразків: а – КАУ/V(acac), б – КАУ/V(aq).

Таблиця 2

Дані РФЕС зразків до і після 10 годин роботи

Зразок	l	C1s	%	O1s	%	V2p <sub>3/2</sub>	S2p	%
КАУ/V(aq)**	BE	284.8	67.6	530.8	33.6	517.4	-	
		286.5	14.0	533.2	56.3			
		288.3	4.6	537.5	10.1			
		290.5	10.0					
		294.0	3.8					
КАУ/V(aq)***	BE	284.8	65.7	531.2	47.4	517.4	164.6	21.8
		286.5	15.7	533.0	47.8		169	78.2
		288.3	5.6	537.0	4.8			
		290.8	10.5					
		294.2	2.5					
КАУ/V(acac)**	BE	284.8	67.9	530.1	35.5	517.4	-	
		286.4	12.8	532.8	58.1			
		287.9	5.6	536.0	6.4			
		289.8	6.4					
		291.8	4.0					
294.3	3.3							
КАУ/V(acac)***	BE	284.8	70.8	531.7	59.6	517.4	164.3	23
		286.4	17.1	533.3	38.2		169.1	77
		288.0	2.8	537.1	2.2			
		289.7	3.9					
		292.2	5.4					

\* - вихідні зразки;

\*\*\* - після 10 год. роботи.

Після проведення експерименту на поверхні катализаторів виявлено сполуки сірки в двох енергетичних станах. Елементарній сірці відповідає пік з меншою енергією зв'язку: BE=164.3eV та 164,6 eV. Пік з вищою енергією відноситься до сполук сірки у стані S<sup>+6</sup> (SO<sub>3</sub> та H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>). Дані спектрів РФЕС свідчать, що в умовах проведення експерименту основним продуктом реакції є сполуки сірки у вищих ступенях окиснення. Співвідношення продуктів реакції, ідентифікованих на поверхні зразків не залежить від методу приготування катализаторів.

Дослідження структури нанесених на вуглецеву поверхню сполук ванадію методом атомно-силової мікроскопії (рис. 3) показало відмінність морфології поверхневих угруповань оксиду ванадію у зразків, синтезованих по різним методикам. На контакті V(aq)/C спостерігається утворення оксиду ванадію у вигляді плівкових структур розміром від 120 нм і більше, в той час як на зразку КАУ/V(acac) виявлено нанокластери оксиду з переважними розмірами 60-80 нм у вигляді острівкових угруповань. При цьому звертають на себе увагу вертикальні розміри кластерів – у зразка КАУ/V(acac) вони на порядок більші, ніж у каталізатора КАУ/V(aq).



Рис. 3. Морфологія поверхні вихідних V/C каталізаторів за даними атомно-силової мікроскопії: а – V(aq)/C, б – V(acac)/C.

Дослідження морфології поверхні зразків після 10 годин роботи каталізаторів при температурі 180 °С показало наступне (рис. 4). Для КАУ/V(aq) відкладення сірки на поверхні контакту по рельєфу відповідає плівковому покриттю оксидом ванадію вихідного зразку. Це свідчить, що елементарна сірка осаджується зверху на плівку оксиду ванадію, блокуючи її при цьому. Покриття сіркою зразка КАУ/V(acac) відрізняється від попереднього випадку. Рельєф відкладень сірки згладжує рельєф вихідного зразку, однак деякі, найбільш випуклі ділянки кластерів оксиду ванадію не покриваються сіркою повністю. Саме ці ділянки залишаються доступними для проведення каталітичної реакції і відповідають за стабільну тривалу роботу каталізатора.



Рис. 4. Морфологія поверхні V/C каталізаторів за даними АСМ після 10 годин окиснення серководню при температурі 180°C: а – V(aq)/C, б – V(acac)/C.

## Висновки

Досліджено вплив методу нанесення оксидів ванадію на активоване вугілля КАУ у реакції окиснення сірководню киснем повітря. В умовах проведення реакції основним продуктом є сполуки сірки у ступені окиснення +6.

Показано, що при нанесенні ванадію з водного розчину метаванадату амонію на поверхні активного вугілля утворюється плівкове покриття оксидом з неявно вираженим рельєфом. Синтез нанесених зразків з ацетилацетонатних комплексів ванадію у середовищі ацетонітрилу дозволяє забезпечити покриття поверхні КАУ нанорозмірним активним компонентом у вигляді чітко виражених острівкових кластерів.

Встановлено, що метод нанесення активної маси на вуглецеву поверхню дозволяє варіювати дисперсію оксиду ванадію, що суттєво впливає на каталітичну активність у реакції окиснення сірководню.

## РЕЗЮМЕ

Синтезовано та протестовано у реакції окиснення сірководню дві серії ванадійвмісних вуглецевих каталізаторів. Показано, що при використанні у якості попередника  $\text{NH}_4\text{VO}_3$  на поверхні активованого вугілля КАУ утворюється плівкове покриття оксидом ванадію, а у випадку  $\text{VO}(\text{acac})_2$  – нанорозмірні кластери з чітко вираженим острівковим рельєфом. Встановлено, що вибір методу нанесення активного компонента на поверхню вуглецевого носія дозволяє змінювати розміри кластерів оксиду ванадію, що суттєво впливає на його каталітичні властивості в реакції окиснення сірководню киснем повітря.

## РЕЗЮМЕ

Синтезировано и протестировано в реакции окисления сероводорода две серии ванадийсодержащих углеродных катализаторов. Показано, что при использовании в качестве предшественника  $\text{NH}_4\text{VO}_3$ , на поверхности активированного угля КАУ образуется пленочное покрытие оксидом ванадия, тогда как при использовании  $\text{VO}(\text{acac})_2$  наблюдается образование наноразмерных кластеров с четко выраженным островковым рельефом. Установлено, что выбор метода нанесения активного компонента на поверхность углеродного носителя позволяет варьировать размеры кластеров оксида ванадия, что существенно влияет на его каталитические свойства в реакции окисления сероводорода кислородом воздуха.

## SUMMARY

Two series of vanadium containing carbon catalysts are synthesized and tested in an oxidation reaction of hydrogen sulphide. It is shown, that at usage as the precursor  $\text{NH}_4\text{VO}_3$ , on active carbon KAU surface the film coating by vanadium oxide will be derivate, whereas at usage  $\text{VO}(\text{acac})_2$  the formation of nanosized clusters with the legibly expressed insular relief is watched. It is established, that the selection of a deposition method of an active component on a carbon support surface allows varying the sizes of vanadium oxide clusters, which essentially influences its catalytic properties in an oxidation reaction of hydrogen sulphide by oxygen of air.

## ЛІТЕРАТУРА

1. З.П. Бай, А. Ермаков, Н.Н. Кундо. Использование жидкофазного каталитического метода получения серы из сероводорода в процессах очистки коксового газа // Кокс и Химия. - 1993. - №6. - С. 36-42.
2. З.Р. Исмагилов, М.А. Керженцев, С.Р. Хайрулин, В.В. Кузнецов, Химия в интересах устойчивого развития, 7 (1999) - С. 375-396
3. Japan Patent No. 4162692, Toho Belson K.K.
4. Wieckowska J. Catalytic and adsorptive desulphurization of gases // Catalysis Today. - 1995. - Vol. 24. - P. 405-465.
5. Mikhalovskiy S.V. and Zaitsev Yu.P. Catalytic properties of activated carbons. I. Gas-phase oxidation of hydrogen sulphide // Carbon. - 1997. - Vol. 3. - P. 1367.
6. P. Van Der Voort, I.V. Babitch, P.T. Grober, A.A. Verberckmoes. Synthesis and characterization of supported vanadium oxides by adsorption of the acetylacetonate complex // J. Chem. Soc. Faraday Trans. - 1996. - Vol. 92. - No. 19. - P. 3635-3642.
7. A.J. Vab Hengstum, J.G. Van Ommen, H. Bosch, P.J. Gellings. Preparation of supported vanadium and molybdenum oxide catalysts using metal acetylacetonate complexes // Applied Catalysis. - 1983. - Vol. 5. - P. 207-217.
8. P.N. Kalinkin, O.N. Kovalenko, N.N. Kundo. Kinetic peculiarities in the low-temperature oxidation of  $\text{H}_2\text{S}$  on vanadium catalysts // React. Kinet. Catal. Lett. - 2001. - Vol. 74. - No. 1. - P. 177-184.
9. M.N. Song, M. Kang, K.L. Kim. Selective oxidation of hydrogen sulphide over potassium promoted vanadium oxide on alumina catalysts // React. Kinet. Catal. Lett. - 2003. - Vol. 78. - No. 2. - P. 365-371.
10. V. A. Zazhigalov, J. Haber, J. Stoch, A. I. Kharlamov, L. V. Bogutskaya, I. V. Bacherikova, A. Koval, Solid State Ionics 101-103 (1997) 1257-1262.
11. H. Darmstadt, C. Roy and S. Kaliaguine. ESCA characterization of commercial carbon blacks and carbon blacks from vacuum pyrolysis of used tires // Carbon. - 1994. -Vol. 32. - N. 8. - P. 1399-1548.

12. S. Baniac, G. Szimanski, J. Siedlevski and A. Swiatkowski, The characterization of activated carbons with oxygen and nitrogen surface groups // Carbon. - 1997. - Vol. 35. - No. 12. - P. 1799-1810.
13. H.P. Boehm, Some aspects of the surface chemistry of carbon blacks and other carbons // Carbon. - 1994. - Vol. 32. - No. 5. - P. 759-769.

Поступило до Редакції 11.12.2004 р.

І.Д. Лучейко, М.П. Ямко

Тернопільський державний технічний університет імені Івана Пулюя

УДК 66.023

## МАЛІ ЗБУРЕННЯ КОНЦЕНТРАЦІЇ РЕАГЕНТУ В РЕАКТОРІ ІДЕАЛЬНОГО ВИТИСНЕННЯ (РЕАКЦІЯ $\nu_1 A_1 \rightleftharpoons \nu_2 A_2$ )

Стаціонарний режим роботи проточних хімічних реакторів, навіть близьких до ідеальних моделей, є ідеалізацією: параметри реакції та реактора вважаються постійними, не залежними від часу, величинами. Насправді завжди має місце їх відхилення, зокрема неконтрольовані випадкові, від номінальних значень внаслідок коливань температури, швидкості потоку реагентів, концентрацій реагентів на вході, дезактивації каталізатора й інших причин, що порушують стаціонарність режиму. Відмітимо, що поділяти параметри на «реакторні» та «реакційні» не завжди доцільно: для проходження реакції необхідний реакційний об'єм, тобто реактор. У цьому контексті різниця між зовнішніми і внутрішніми збуреннями параметрів також достатньо умовна.

Із математичної точки зору потрібно знайти розв'язки у загальному нелінійної системи диференціальних рівнянь, що описує нестационарний режим реактора в рамках вибраної моделі (витиснення, змішування, коміркової, дифузійної і т. п.). Як показує попередній аналіз, аналітичні розв'язки даної задачі можливі лише в окремих випадках, а числові на ПК ускладнюють розуміння фізичної суті розглядуваних процесів.

Формальну кінетику реакції описуватимемо степеневим рівнянням, якому в промислових умовах при задовільному узгодженні з експериментом віддають перевагу [1].

**Постановка задачі.** Можна показати [2], що для рідкофазної реакції  $\nu_1 A_1 \rightleftharpoons \nu_2 A_2$  в загальному випадку – концентрація реагенту  $A_1$  на вході ізотермічного РІВ є деяка функція часу – система рівнянь балансу за концентраціями має вигляд (всі величини безрозмірні)

$$\begin{cases} \partial c_1 / \partial \theta + \partial c_1 / \partial l = -\bar{k}_1 c_1^n + \bar{k}_2 c_2^m = -\Delta \bar{w} \\ \partial c_2 / \partial \theta + \partial c_2 / \partial l = \alpha \Delta \bar{w} \\ l = 0, c_1 = c_1^{ex}(\theta), c_2 = 0, \end{cases} \quad (1)$$

де  $c_i = C_i / C_{01}^{ex}$  – концентрації реагентів;  $\bar{k}_1 = k_{12} \tau_L (C_{01}^{ex})^{n-1}$ ,  $\bar{k}_2 = k_{21} \tau_L (C_{01}^{ex})^{m-1}$ ,  $n, m$  – константи швидкостей і спостережувані порядки реакцій  $A_1 \rightarrow \alpha A_2$ ,  $\alpha A_2 \rightarrow A_1$  ( $C_{01}^{ex}$  – початкова концентрація  $A_1$  при стаціонарному режимі, моль/м<sup>3</sup>;  $\tau_L = L / u_0$  – час проходження компонентів із постійною лінійною швидкістю  $u_0$  через реактор довжиною  $L$ , с);  $\theta = \tau / \tau_L$ ,  $l = z / L$  – час і координата в напрямі потоку;  $\Delta \bar{w} = \bar{w}_1 - \bar{w}_2$  – різниця швидкостей реакцій;  $\alpha = \nu_2 / \nu_1$  – співвідношення стехіометричних коефіцієнтів. Тут і в подальшому індекс «0» відповідає стаціонарному режимові ( $c_{01}^{ex} \equiv 1$ ).

Як видно з (1), рівняння не є незалежними, і концентрації  $c_i$  зв'язані рівністю

$$c_1 + c_2 / \alpha = c_1^{ex}(\theta - l), \quad (2)$$

що описує матеріальний баланс розглядуваної реакції (без зміни густини) для кожної точки РІВ у будь-який момент часу.