ВОЗМОЖНОСТИ И ЭФФЕКТИВНОСТЬ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ПОДХОДА К ИССЛЕДОВАНИЮ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ И ПРОЦЕССОВ

Сочагин Александр Андреевич - аспирант кафедры физической химии

Условия равновесия

$$G = \sum_{i=1}^{n} \mu_i y_i \equiv \sum_{i=1}^{n} \left(\mu_i^0 + RT \ln \gamma_i x_i \right) y_i \to \min_{\{y_i\}}$$

$$\sum_{i=1}^{n} a_{ij} y_i = y_j^0, \qquad j \in 1:m$$

$$y_i \geq 0, \qquad i \in 1:n$$

Объекты исследования

1. Катализатор на основе диатомита
2. Каталитическая реакция окисления сернистого газа

Этапы работы

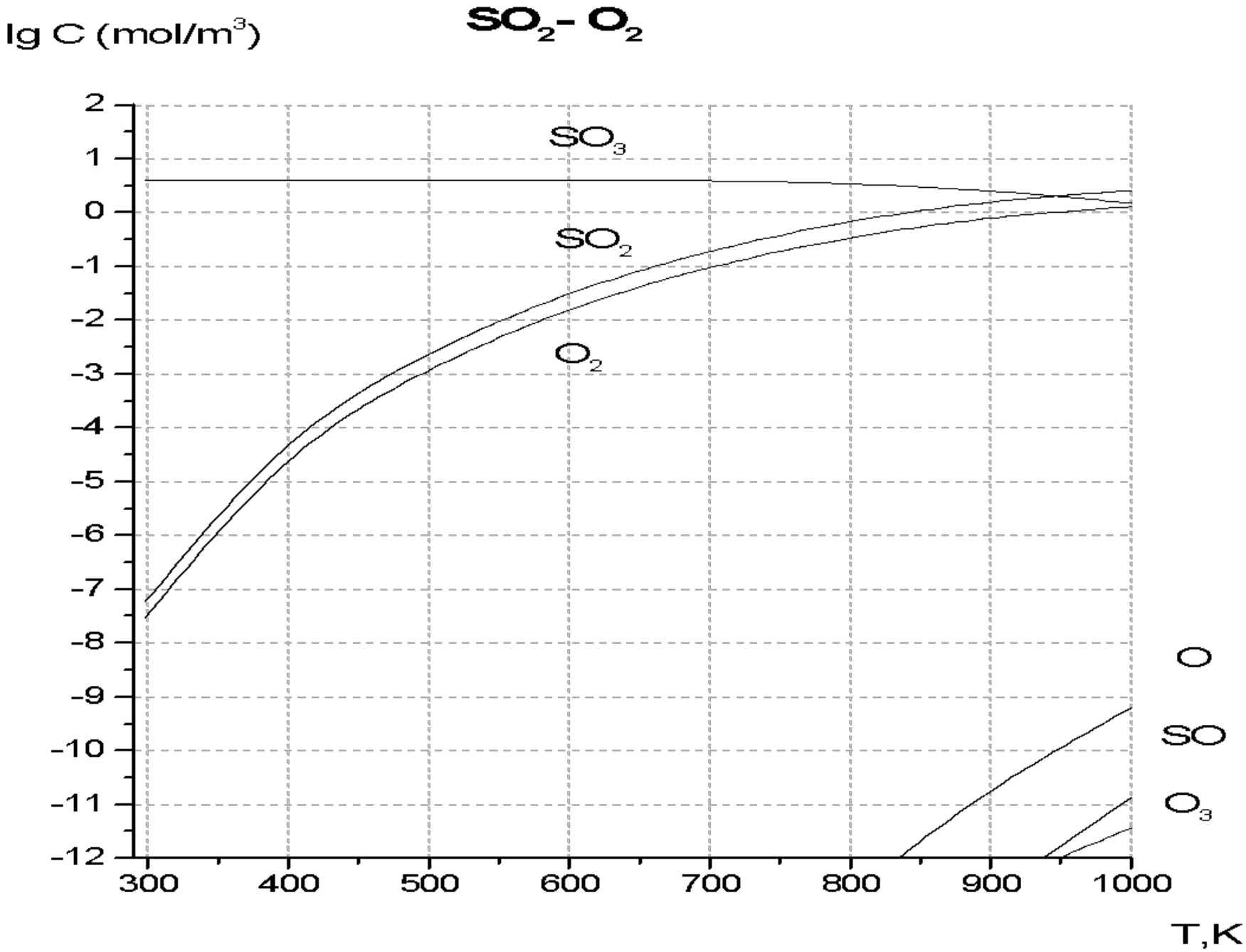
1. Термодинамический расчёт на стадиях получения катализатора
2. Термодинамический расчёт реакции окисления сернистого газа без катализатора
3. Термодинамический расчёт каталитической реакции окисления сернистого газа на катализаторе СВД

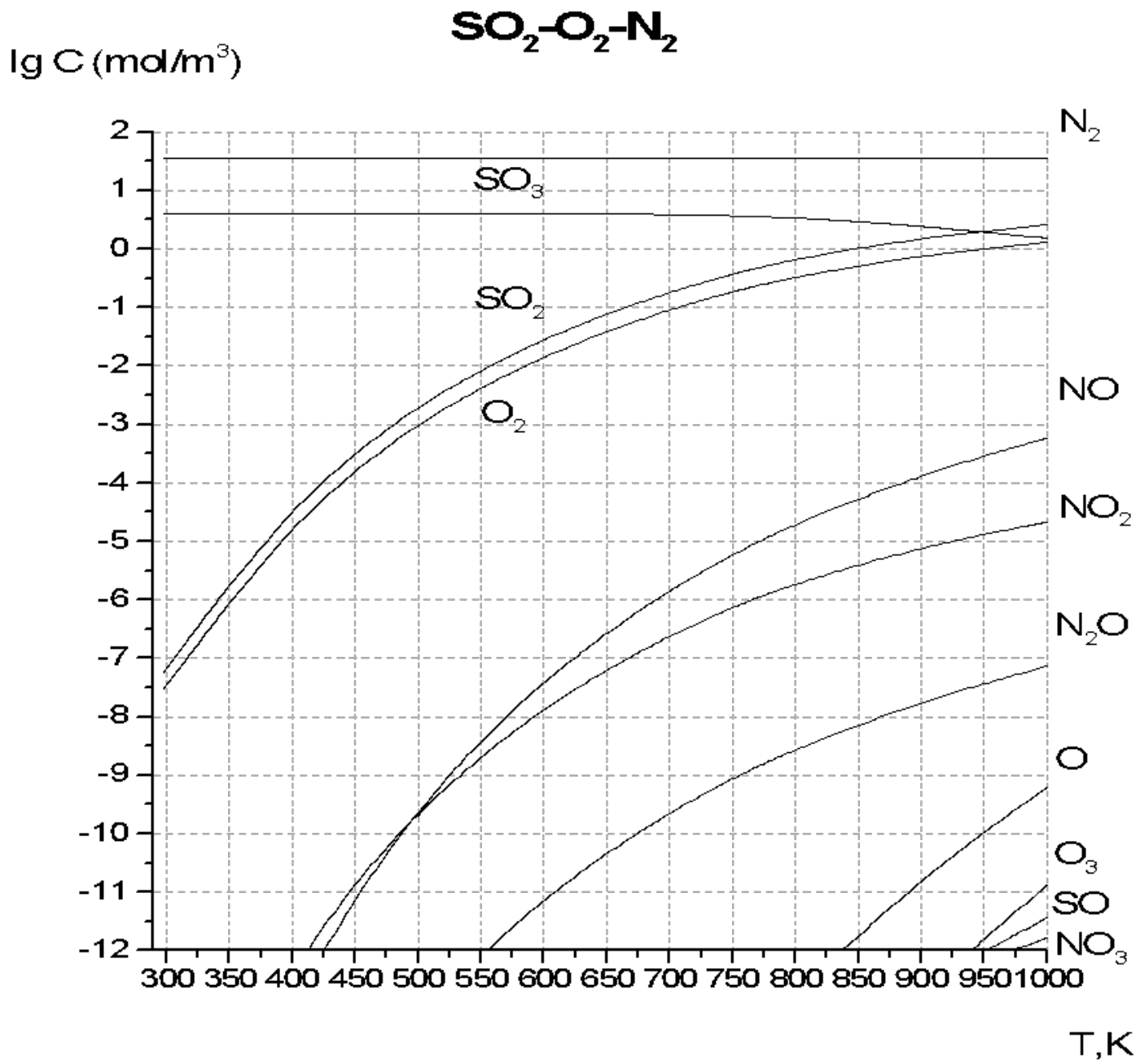
Состав диатомита

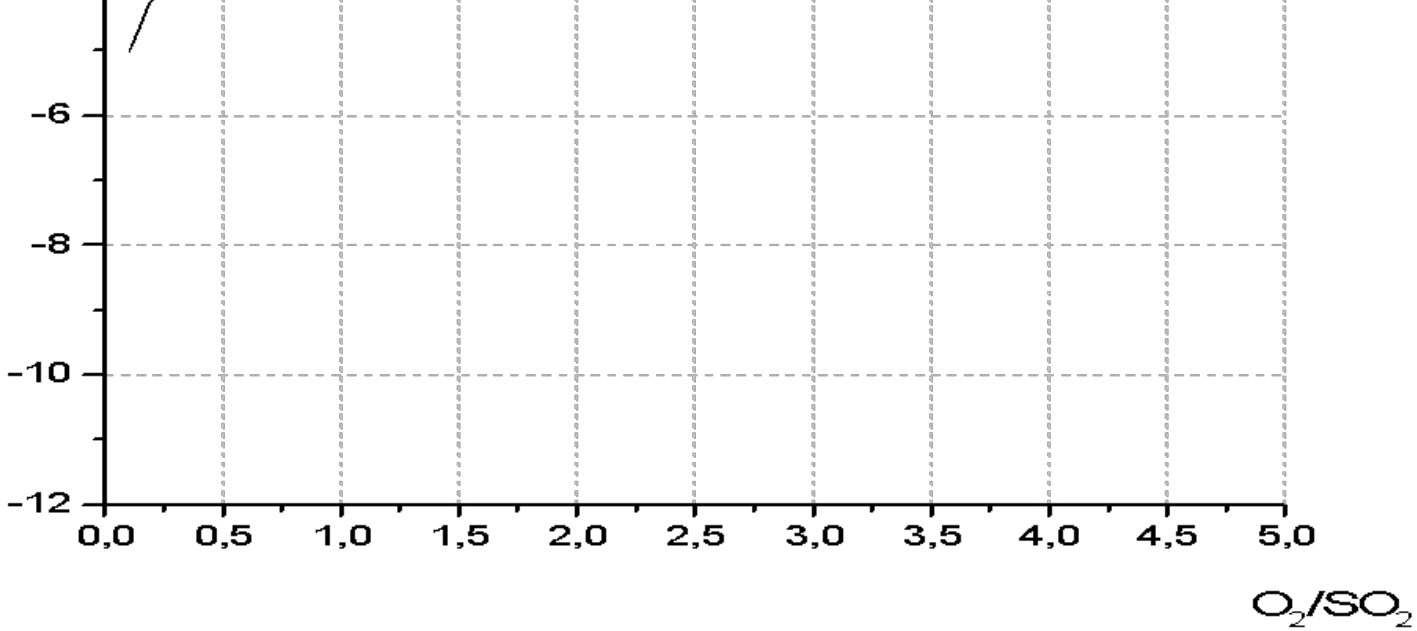
Состав, масс.%							
SiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	CaO	MgO	Na_2O	K_2O	прочие
94,69	1,20	0,32	0,31	0,53	0,10	0,10	2,75

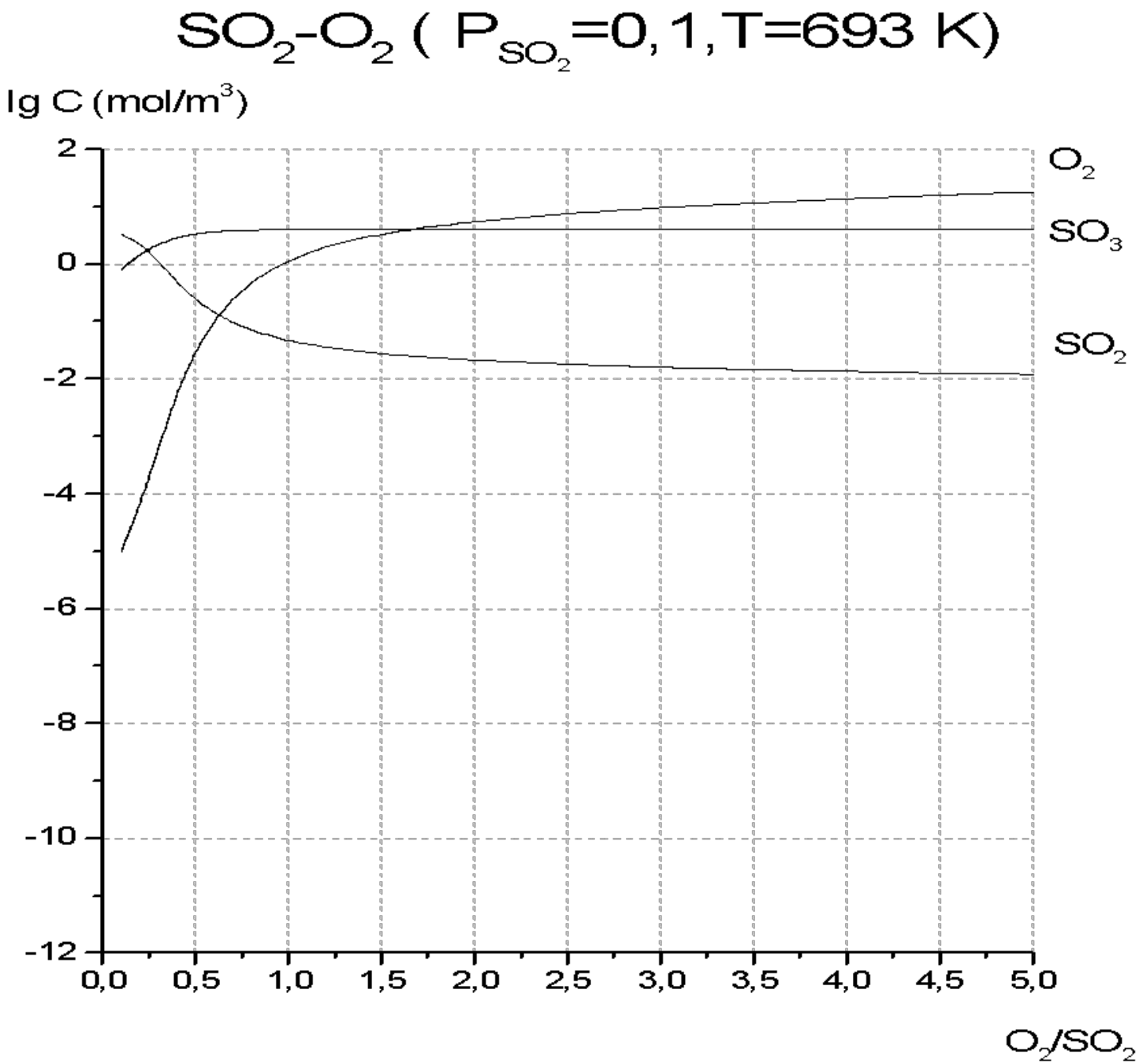
Общий состав катализатора

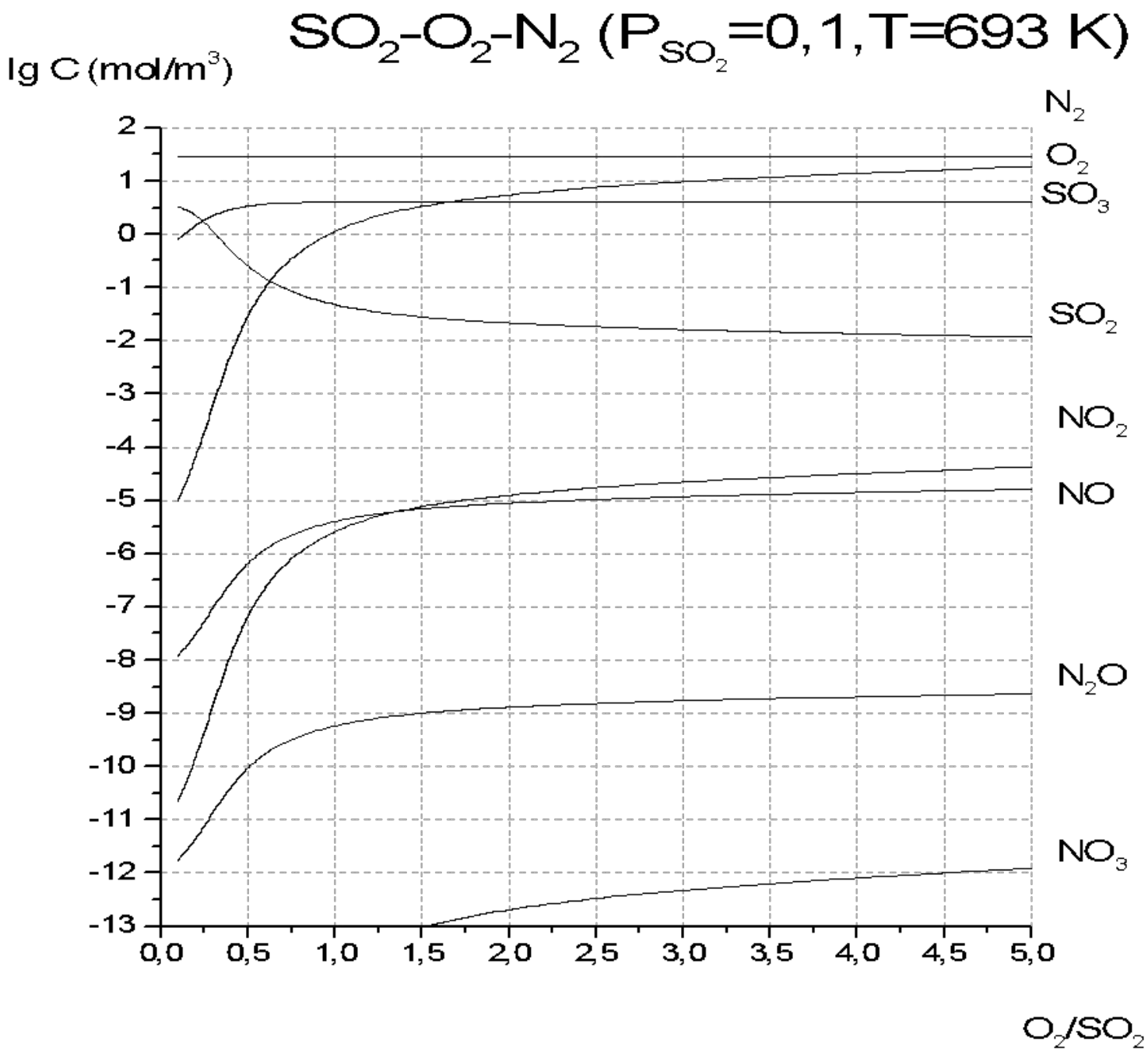
$$V_2O_5 \cdot nK_2O \cdot mSO_2$$


SO2- O2
lg C (mol/m3)
SO3
SO2
O2
O
SO
O3
2
1
0
-1
-2
-3
-4
-5
-6
-7
-8
-9
-10
-11
-12
300
400
500
600
700
800
900
1000
T,K


SO2-O2-N2
lg C (mol/m3)
2
1
0
-1
-2
-3
-4
-5
-6
-7
-8
-9
-10
-11
-12
300 350 400 450 500 550 600 650 700 750 800 850 900 950 1000
T,K
N2
SO3
SO2
O2
NO
NO2
N2O
O
O3
SO
NO3


-6
-8
-10
-12
0,0
0,5
1,0
1,5
2,0
2,5
3,0
3,5
4,0
4,5
5,0
O2/SO2


SO2-O2 (PSO2=0,1,T=693 K)
lg C (mol/m3)
2
0
-2
-4
-6
-8
-10
-12
0,0
0,5
1,0
1,5
2,0
2,5
3,0
3,5
4,0
4,5
5,0
O2
SO3
SO2
O2/SO2


SO2-O2-N2 (PSO2=0,1,T=693 K)
lg C (mol/m3)
N2
O2
SO3
SO2
NO2
NO
N2O
NO3
2
1
0
-1
-2
-3
-4
-5
-6
-7
-8
-9
-10
-11
-12
-13
0,0
0,5
1,0
1,5
2,0
2,5
3,0
3,5
4,0
4,5
5,0
O2/SO2