УДК 661.97:544.34:620.9

И.А. СЛАБУН, канд. техн. наук, НТУ «ХПИ»

РАВНОВЕСИЕ СРЕДНЕТЕМПЕРАТУРНОЙ КОНВЕРСИИ ОКСИДА УГЛЕРОДА И ОЦЕНКА ВОЗМОЖНОГО ЭНЕРГОСБЕРЕЖЕНИЯ НА ЭТОЙ СТАДИИ ПРОИЗВОДСТВА АММИАКА

Досліджена рівновага системи CO – H_2O – CO_2 – H_2 в інтервалі температур 340 – 500 °С, співвідношень водяної пари до сухого газу на вході $n^{CO^{I}_{вх}} = 0,2 - 0,7$ і тисках P = 0,10 та 3,217 МПа. За всіх температур і тисків зміна $n^{CO^{I}_{вх}}$ при його значеннях $n \geq$ 0,35 мало впливає на рівноважну ступінь перетворення оксиду вуглецю x^{*}_{CO}. За термодинамічними даними запропоновано знизити витрати водяної пари без зменшення x^{*}_{CO}, підтримуючи, наприклад, $n^{CO^{I}_{вх}} = 0,484$ або $0,386$ за одночасним зниженням температури на виході середньотемпературного конвертора CO до 420 або 390 °С відповідно. Це забезпечить заощадження тепла еквівалентного 24,4 або 48,6 тонн умовного палива на 1 т NH_3.

Research of balance of system CO – H_2O – CO_2 – H_2 in an interval of temperatures 340 – 500 °С, parities water pair to dry gas on an entry $n^{CO^{I}_{вх}} = 0,2 - 0,7$ and pressure P = 0,10 and 3,217 MPa. At all temperatures and pressure change $n^{CO^{I}_{вх}}$ at its values $n \geq$ 0,35 an equilibrium degree of transformation oxide of carbon x^{*}_{CO} a little. On thermodynamic data it is offered to lower expenses water pair without reduction x^{*}_{CO}, supporting, for example, $n^{CO^{I}_{вх}} = 0,484$ или $0,386$ at simultaneous decrease in temperature on an exit from mean-temperature converter CO up to 420 or 390 °С accordingly. It will provide economy of heat of equivalent 24,4 or 48,6 tons of conditional fuel on 1 t NH_3.

Суть проблемы. Сырьем для производства аммиака в энерготехнологических агрегатах производительностью 600 – 1500 т/сутки (агрегаты АМ-600, АМ-70, АМ-76, АМ-80), эксплуатируемых в настоящее время в СНГ, является природный газ. При производстве аммиака из природного газа и содержании углеводородов в нем (в пересчете на CH_4) 95 % об. теоретически энергопотребление составляет около 5,3 Гкал/т NH_3 [1].

Лучшие практические показатели энергопотребления в Украине (агрегаты АМ-76, 1420 т NH_3/сутки), при 100 %-ой загрузке проектной мощности, (около 10,0 Гкал/т NH_3) наиболее низкое энергопотребление в агрегатах АМ-80 (1500 т NH_3/сутки, Россия) – по проекту 8,414 Гкал/т NH_3 [2].

Одним из путей уменьшения энергозатрат в производстве аммиака является снижение соотношения объема водяного пара к объему реакционного природного газа (РПГ) $n = V_{H_2O} / V_{РПГ}$. В агрегатах АМ-76 по регламентным данным это соотношение на входе в трубчатую печь составляет $n = 3,6 : 1$, а общее, с учетом пара, подаваемого на вторую ступень конверсии метана, $n = 3,74 : 1$. При этом парогазовая смесь, поступающая на первую (среднетемпературную) ступень конверсии оксида углерода, имеет соотношение пара к сухому газу $n^{CO^{I}_{вх}} = V^{CO^{I}_{вх}}_{H_2O} / V^{CO^{I}_{вх}}_{с.г} = 0,565$, на вторую (низкотемпературную) – $n^{CO^{I}_{вх}} = 0,439$, а газ на входе в среднетемпературный конвертор оксида углерода имеет состав[*], % об.: CO = 12,4; H_2 = 57,1; CO_2 = 7,7; CH_4 = 0,3; Ar = 0,3; N_2 = 22,2.

При таком соотношении пара к сухому газу и регламентном составе сухого газа на входе на среднетемпературную конверсию избыток водяного пара к оксиду углерода по сравнению со стехиометрией реакции (1) составляет 4,56 : 1[**].

$$CO + H_2O = CO_2 + H_2 + 41,13\ кДж \qquad (1)$$

В современных технологиях производства аммиака избыток водяного пара к CH_4 и CO формируется, в основном, в «голове» технологии получения синтез-газа. Чем выше этот избыток, тем больше энергозатрат на производство NH_3.

По мнению разработчиков технологии аммиака, поддержание избытка водяного пара обеспечивает более глубокую и с большей скоростью переработку углеводородов и CO.

В работах [3, 4] показано, что низкотемпературную конверсию оксида углерода в производстве аммиака, как с точки зрения термодинамики, так и кинетики, можно проводить при соотношении $n^{CO^{II}_{вх}}$ более низком, чем регламентное. Т. о., в проблеме создания теоретического обоснования для энергосбережения в производстве аммиака за счет снижения расхода водяного пара необходимы исследования термодинамики и кинетики среднетемпературной конверсии оксида углерода в области пониженных соотношений пара

---

[*] – здесь и далее, если особо не указано, в пересчете на сухой газ.

[**] – на входе на низкотемпературную конверсию CO $[H_2O]^0 : [CO]^0$ = 13,3 : 1.

к сухому газу.

Эта задача актуальна еще и потому, что в будущем, по крайней мере, в Украине, углю, как сырью для производства аммиака, альтернативы нет.

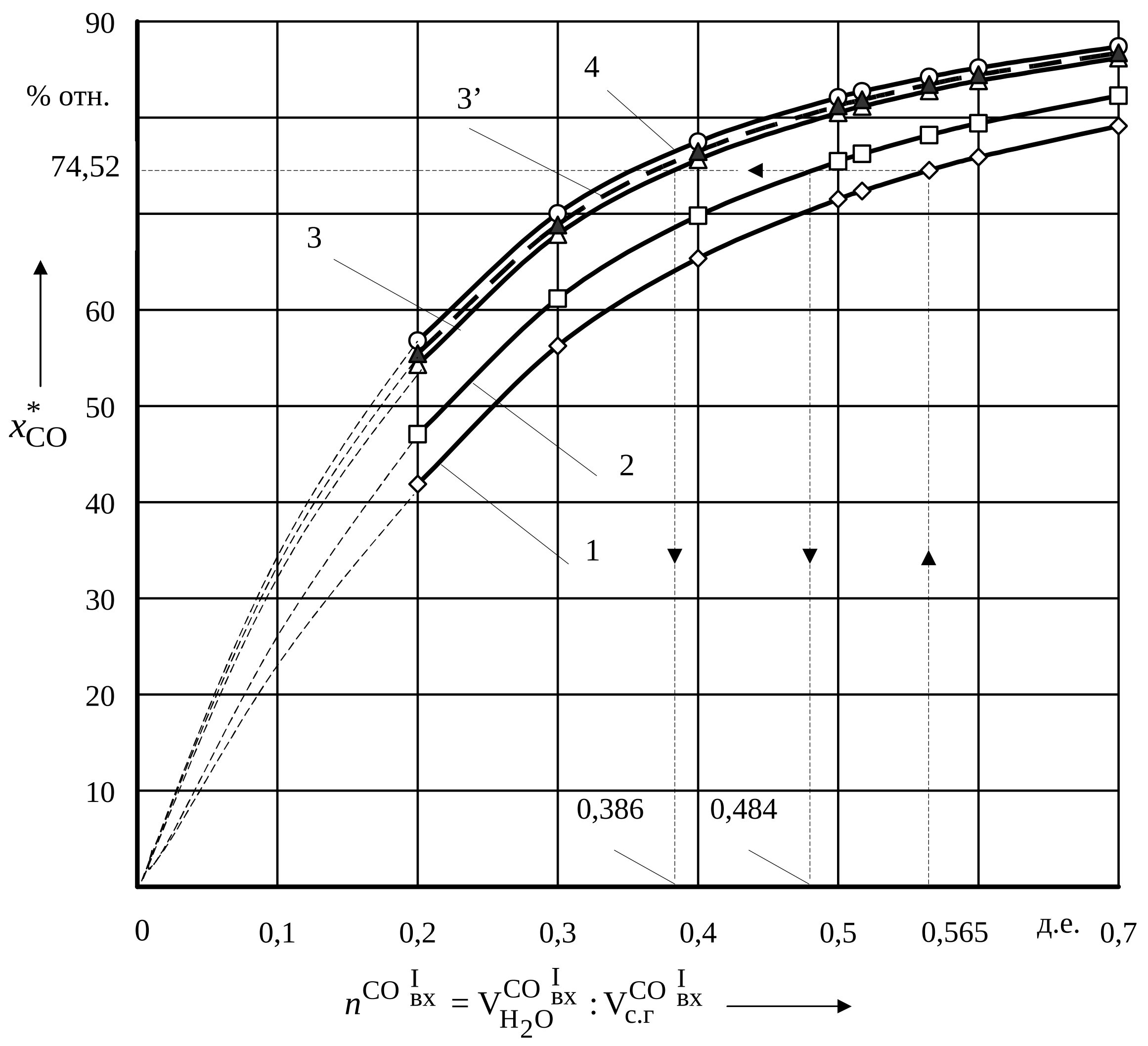
Равновесие реакции (1) исследовали много авторов, наиболее полно, по мнению автора данной статьи, в работах [5, 6]. В работе [5] приведены зависимости равновесной концентрации оксида углерода от температуры при разных соотношениях пара к сухому газу в интервале температур характерных для средне- и низкотемпературной конверсий оксида углерода в производстве аммиака. Однако, не приведен состав исходной смеси, не указано давление, не обработаны данные в виде зависимостей равновесных степеней превращения оксида углерода $x^{*}_{\mathrm{CO}} = f(n^{\mathrm{CO}^{\mathrm{I}}_{\text{вх}}})$ при различных температурах, на наш взгляд, наиболее информативной зависимости для рекомендаций по возможному снижению $n^{\mathrm{CO}^{\mathrm{I}}_{\text{вх}}}$. Из данных работы [5, с. 138 – 140] можно предполагать, что расчеты проведены для регламентных данных агрегата АМ-76.

Общая цель работы – исследование термодинамики и кинетики среднетемпературной конверсии оксида углерода, в т. ч. в области пониженных соотношений водяного пара к сухому газу.

Цель данной работы – изучение влияния избытка водяного пара на равновесие среднетемпературной конверсии оксида углерода и обоснование возможного снижения энергозатрат на этой стадии в производстве аммиака.

Методика исследований. Равновесие реакции (1) изучали в интервале 340 – 500 ºС при давлении равном абсолютному давлению на выходе из среднетемпературного конвертора промышленного агрегата АМ-76 (регламентные данные, $P_{\text{абс}}$ = 3,217 МПа), атмосферном (0,1013 МПа) и близком к атмосферному ($P_{\text{абс}}$ = 0,10 МПа) давлениях. Состав исходного сухого газа принят регламентный для АМ-76 (рис. 1 – 5).

При исследовании влияния соотношения водяного пара к сухому газу в исходной парогазовой смеси на равновесие реакции (1) состав сухого газа на входе не изменяли. Т. о. состав исходного влажного газа изменялся за счет изменения концентрации паров воды. Следует отметить, что с точки зрения исследования «в чистом виде» влияния концентрации паров воды ($[\mathrm{H_2O}]^0$ пропорционально $n^{\mathrm{CO}^{\mathrm{I}}_{\text{вх}}}$) на равновесие системы $\mathrm{CO} - \mathrm{H_2O} - \mathrm{CO_2} - \mathrm{H_2}$, такой подход не совсем корректный. Однако для прикладных целей, в частности, технологий конверсии оксида углерода необходим.



Исходный газ, в пересчете на сухой, % об.: CO = 12,4; H_2 = 57,1; CO_2 = 7,7; CH_4 = 0,3; Ar = 0,3; N_2 = 22,2 (остальное).

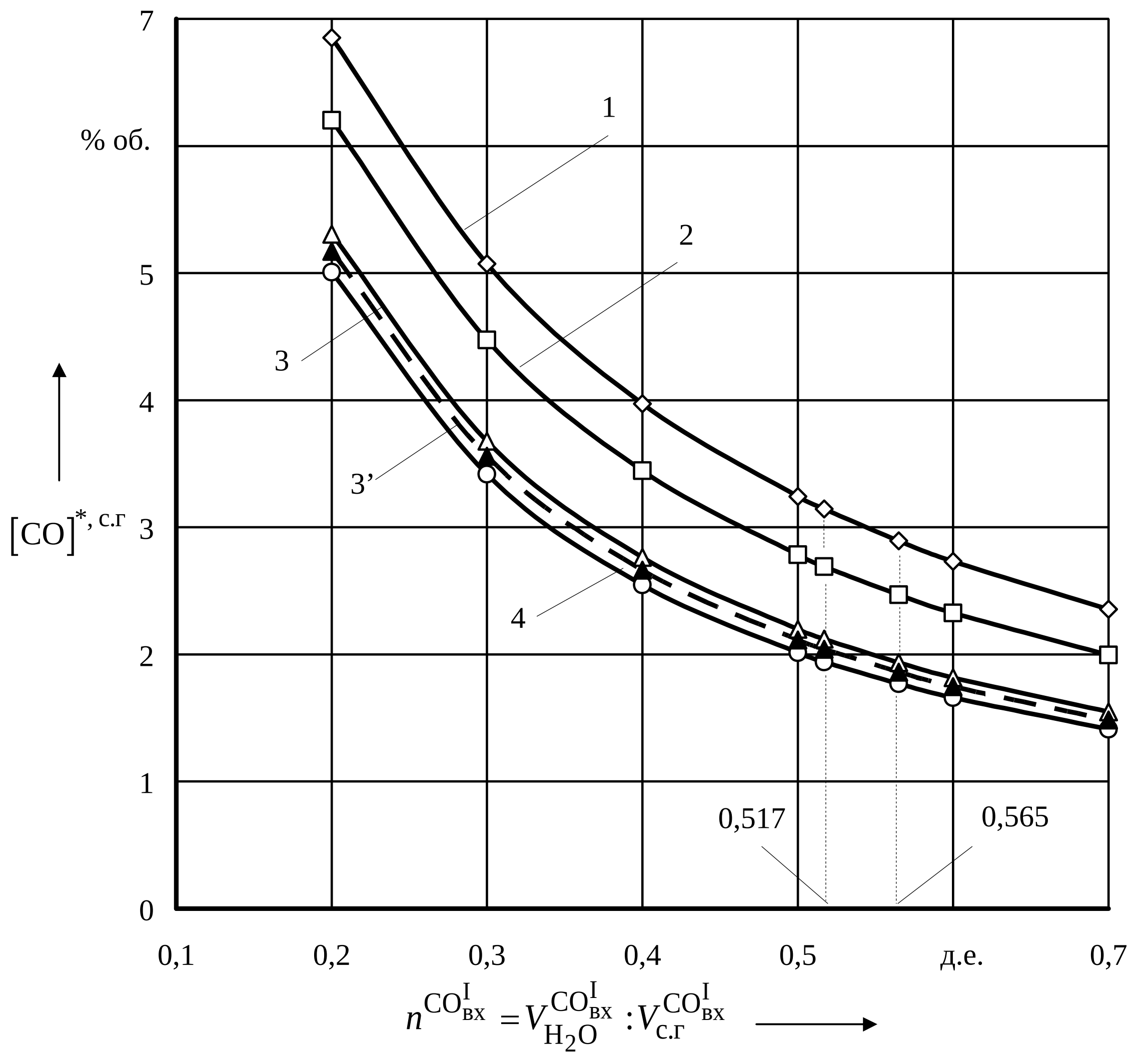
P = 3,217 МПа: 1 – 442; 2 – 420; 3 – 390; 4 – 380 °С

P = 0,1 МПа: 3' – 390 °С

Рис. 1. Зависимость равновесной степени превращения оксида углерода x^{*}_{CO} от соотношения объемов водяного пара к сухому газу в исходной смеси $n^{CO\ I}_{вх}$ и температуры

Константу равновесия реакции (1) для идеальной газовой смеси при данной температуре рассчитывали по уравнению, предложенному в работе [7]:

$$\lg K_{f_1} = \lg K_{P_{1(P\to 1)}} = \frac{2167}{T} - 0{,}5194 \cdot \lg T + 1{,}037 \cdot 10^{-3} \cdot T - 2{,}331 \cdot 10^{-7} \cdot T^2 - 1{,}2777. \quad (2)$$



Исходный газ, в пересчете на сухой, % об.: CO = 12,4; H_2 = 57,1; CO_2 = 7,7; CH_4 = 0,3; Ar = 0,3; N_2 = 22,2 (остальное).

P = 3,217 МПа: 1 – 442; 2 – 420; 3 – 390; 4 – 380 °С

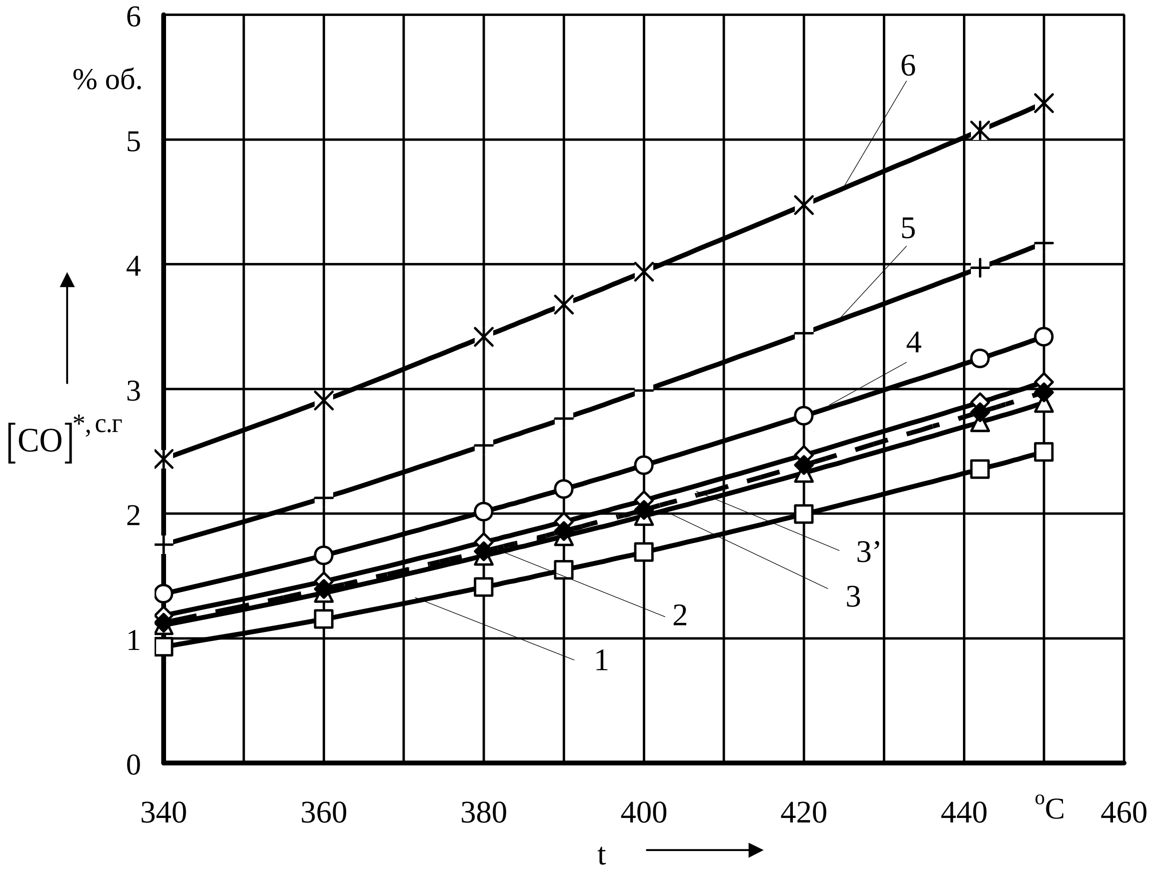
P = 0,1 МПа: 3’ – 390 °С

Рис. 2. Зависимость равновесной концентрации оксида углерода (в пересчете на сухой газ) $[CO]^{*,\,с.г}$ от соотношения объемов водяного пара к сухому газу в исходной смеси $n^{CO^{I}_{вх}}$

По мнению автора этой статьи, уравнение (2) наиболее достоверно из всех известных [3, с. 12 – 13] автору: экспериментально определенная Тёмкиным М.И. с сотрудники $\lg K_{P_1}$ при 250 °С на низкотемпературном катализаторе синтеза метанола марки СНМ-1 отличается от рассчитанной по (2) не более чем на 4,3 % отн. [7].

Учитывая, что H_2O и CO_2 при P > 0,1013 МПа значительно отклоняются от состояния идеального газа, газовая смесь рассматривалась как идеальная смесь реальных газов, а константа равновесия при данных *P* и *T*, выраженная через парциальные давления, рассчитывалась по уравнению

$$K_{P_1}^{P,T} = K_{f_1}^{T} / K_{\gamma_1}^{P,T} . \qquad (3)$$



Исходный газ, в пересчете на сухой, % об.:

CO = 12,4; H_2 = 57,1; CO_2 = 7,7; CH_4 = 0,3; Ar = 0,3; N_2 = 22,2 (остальное).

P = 3,217 МПа: $n^{\mathrm{I}}_{\mathrm{CO\,вх}}$: 1 – 0,7; 2 – 0,6; 3 – 0,565; 4 – 0,5; 5 – 0,4; 6 – 0,3

P = 0,1 МПа: $n^{\mathrm{I}}_{\mathrm{CO\,вх}}$: 3' – 0,565

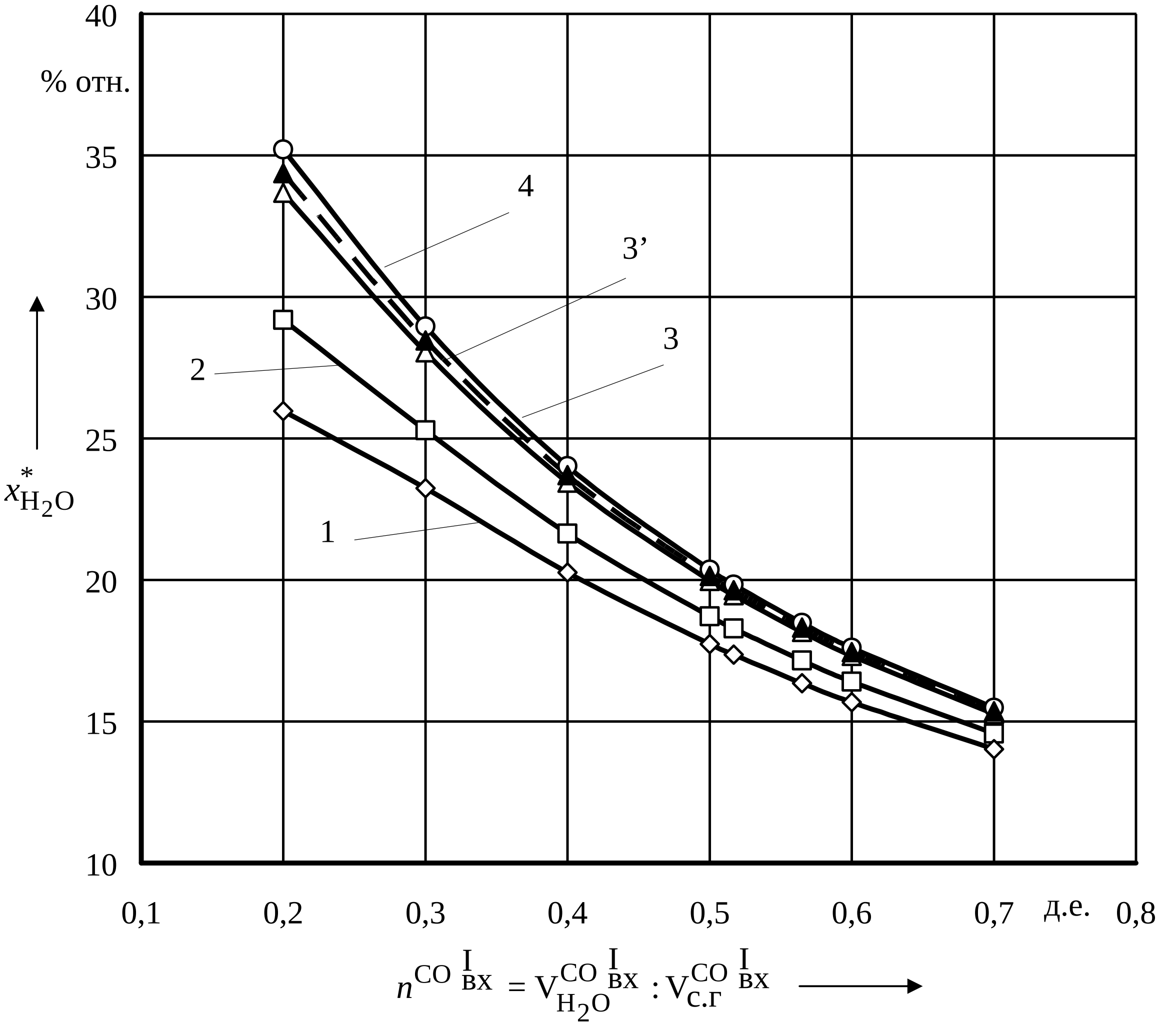
Рис. 3. Зависимость равновесной концентрации оксида углерода (в пересчете на сухой газ) $[CO]^{*,с.г}$ от температуры

Коэффициенты активности компонентов реакции определяли по методу приведенных состояний [8]. Расчеты* проводили на 100 моль исходной сухой газовой смеси с определением состава равновесного влажного и сухого газов,

---

* – автор работы выражает благодарность инженерам Сиверчук С.Э. и Коваленко Т.Ф. за участие в расчетах равновесия реакции (1) на ПЭВМ.

равновесного соотношения пара к сухому газу $n^{*,\mathrm{CO}^{\mathrm{I}}}$, а также равновесных степеней превращения оксида углерода x^{*}_{CO} и воды $x^{*}_{\mathrm{H_2O}}$.



Исходный газ, в пересчете на сухой, % об.:

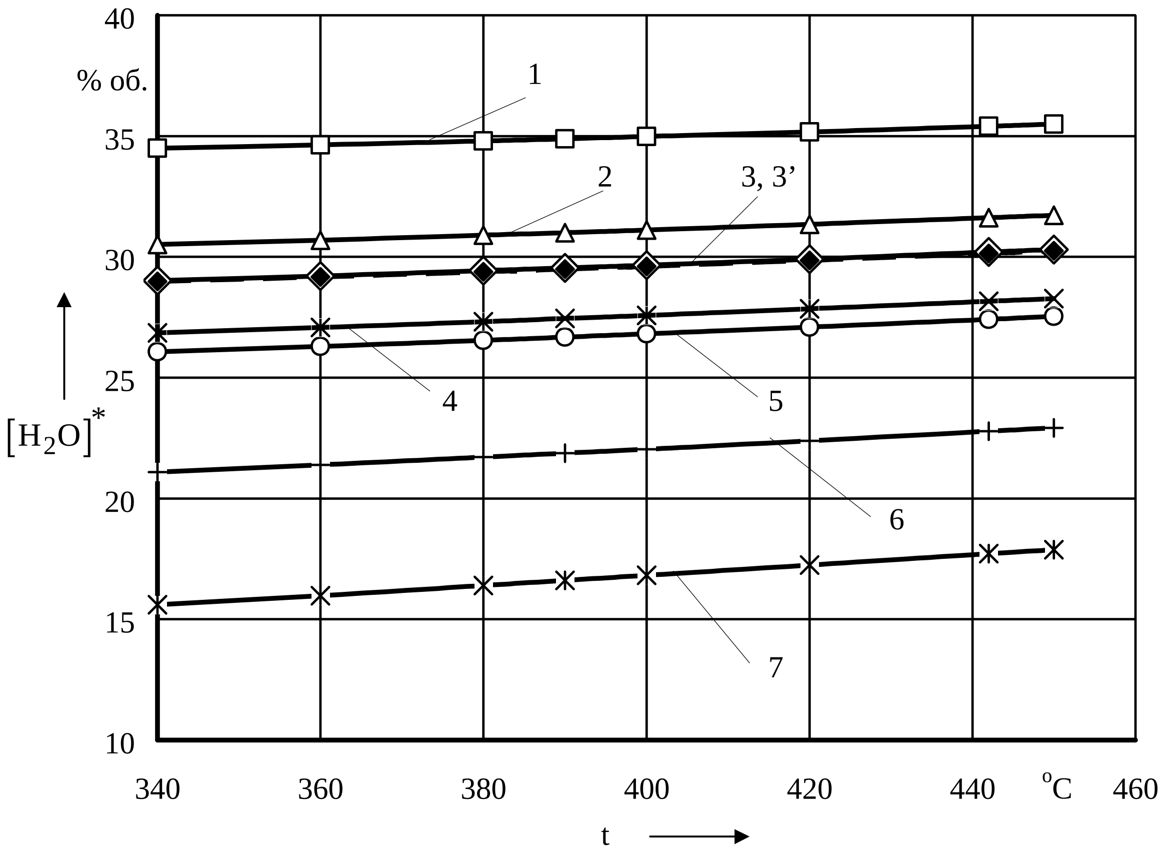
CO = 12,4; H_2 = 57,1; CO_2 = 7,7; CH_4 = 0,3; Ar = 0,3; N_2 = 22,2 (остальное).

P = 3,217 МПа: 1 – 442; 2 – 420; 3 – 390; ; 4 – 380 °С

P = 0,1 МПа: 3’ – 390 °С

Рис. 4. Зависимость равновесной степени превращения паров воды $x^{*}_{\mathrm{H_2O}}$ от соотношения объемов водяного пара к сухому газу в исходной смеси $n^{\mathrm{CO}\ \mathrm{I}}_{\text{вх}}$ и температуры

Результаты и их обсуждение. Значения констант равновесия реакции (1), выраженные через фугитивности и парциальные давления, рассчитанные при различных *P* и *T* по уравнениям (1), (2), сведены в табл. 1. Результаты исследований влияния соотношения пара к сухому газу в исходной парогазовой смеси $n_{\text{CO}_{\text{вх}}^{\text{I}}}$, температуры и давления на равновесие системы $CO – H_2O – CO_2 – H_2$ представлены на рис. 1 – 5.



Исходный газ, в пересчете на сухой, % об.:
$CO = 12{,}4$; $H_2 = 57{,}1$; $CO_2 = 7{,}7$; $CH_4 = 0{,}3$; $Ar = 0{,}3$; $N_2 = 22{,}2$ (остальное).
P = 3,217 МПа: $n_{\text{CO}_{\text{вх}}^{\text{I}}}$: 1 – 0,7; 2 – 0,6; 3 – 0,565; 4 – 0,517; 5 – 0,5; 6 – 0,4; 7 – 0,3.
P = 0,1 МПа: $n_{\text{CO}_{\text{вх}}^{\text{I}}}$: 3’ – 0,565

Рис. 5. Зависимость равновесной концентрации паров воды $[H_2O]^*$ от температуры и соотношения объемов водяного пара к сухому газу в исходной смеси $n_{\text{CO}_{\text{вх}}^{\text{I}}}$

Из данных рис. 1 – 3 следует, что равновесная степень превращения оксида углерода x_{CO}^* повышается, а равновесная концентрация оксида углерода $[\text{CO}]^{*,\text{с.г}}$ понижается с увеличением соотношения пара к сухому газу в исходной смеси $n_{\text{CO}_{\text{вх}}^{\text{I}}}$ и с уменьшением температуры. Наиболее значительно изменение $n^{\text{CO}^{\text{I}}_{\text{вх}}}$ влияет на x^*_{CO} и $[\text{CO}]^{*,\,\text{с.г}}$ в интервале 0 – 0,35, при дальнейшем увеличении $n^{\text{CO}^{\text{I}}_{\text{вх}}}$ это влияние значительно меньше (рис. 1 и рис. 2).

Таблица 1

Значение константы равновесия реакции конверсии оксида углерода

	P, МПа	t, ºC								
		340	360	380	390	400	420	442	450	500
$K^T_{f_1}$	$P_i \to$ 0,1013	22,7430	17,9019	14,3161	12,8727	11,6146	9,5474	7,8029	7,2751	4,8683
$K^{P,T}_{P_1}$	0,10	22,7003	17,8684	14,2946	12,8539	11,5984	9,5354	7,7928	7,2673	4,8643
$K^{P,T}_{P_1}$	3,217	21,4775	17,0249	13,6146	12,2682	11,0941	9,1639	7,5257	7,0241	4,7390

Снижение равновесной степени превращения паров воды $x^*_{\text{H}_2\text{O}}$ с повышением $n^{\text{CO}^{\text{I}}_{\text{вх}}}$ (см. рис. 4) связано с увеличением концентрации воды в исходной парогазовой смеси $[\text{H}_2\text{O}]^0$. Этим же обусловлен и ход зависимостей, представленных на рис. 5.

Реакция (1) протекает без изменения объема, поэтому, как и следовало ожидать, давление практически не влияет на равновесие. Незначительные уменьшение равновесных x^*_{CO}, $x^*_{\text{H}_2\text{O}}$ и увеличение $[\text{CO}]^{*,\,\text{с.г}}$, $[\text{H}_2\text{O}]^*$ с повышением давления процесса (см. рис. 1 – 5) связано с отклонением компонентов реакции (1) от идеального состояния с повышением давления.

Термодинамический анализ реакции (1), в. т. ч. для параметров (P, T, состав сухого газа на входе) среднетемпературной конверсии оксида углерода производства аммиака, показывает возможность снижения соотношения пара к сухому газу в парогазовой смеси, подаваемой в среднетемпературный конвертор. Однако это снижение желательно осуществить без снижения равновесной степени превращения на этой стадии, т. е. сохранить x^*_{CO} неизменным, например, снижением температуры на выходе из конвертора.

Регламентные (агрегат АМ-76) температура на выходе из среднетемпературного конвертора 442 ºC, соотношение пара к сухому газу на входе – $n^{\text{CO}^{\text{I}}_{\text{вх}}} = 0,565$; равновесная степень превращения для регламентных данных (см. рис. 1) $x^*_{\text{CO}} = 74,52\ \%$ отн.

Из данных рис. 1 следует, что есть возможность снизить $n^{\mathrm{CO}^{\mathrm{I}}_{\text{вх}}}$ до 0,484 или 0,386, сохранив $x^{*}_{\mathrm{CO}} = 74,52\ \%$ за счет снижения температуры на выходе $t^{\mathrm{CO}^{\mathrm{I}}_{\text{вых}}}$ до 420 или 390 ºC соответственно. Следует отметить, что в настоящее время имеется опыт промышленного проведения среднетемпературной конверсии в интервале температур 322 – 381 ºC на железохромовом, промотированном медью, среднетемпературном катализаторе [9] (Изготовитель ООО НПК «Алвиго-КС»), правда, на регламентном соотношении пара к сухому газу [10]. На основании термодинамических данных, представленных в данной статье, нами проведена оценка возможной экономии тепла на первой (среднетемпературной) конверсии CO за счет снижения $n^{\mathrm{CO}^{\mathrm{I}}_{\text{вх}}}$ до указанных выше значений и для параметров пара равным параметрам парогазовой смеси на входе в среднетемпературный конвертер. При этом принято, что снижение соотношения $n^{\mathrm{CO}^{\mathrm{I}}_{\text{вх}}}$ осуществляется за счет уменьшения расхода пара в «голове» технологии (без промежуточной конденсации пара перед среднетемпературной конверсией), т.е. за счет снижения соотношения пара к РПГ перед трубчатой печью (за счет $n^{\mathrm{CH}^{\mathrm{I}}_{4\text{вх}}}$).

Температуру пара $t_{\text{п}}$ определяли как:

$$t_{\text{п}} = t^{\mathrm{CO}^{\mathrm{I}}_{\text{вх}}} = t^{*\mathrm{CO}^{\mathrm{I}}_{\text{вых}}} - \Delta\bar{t}^{\,\mathrm{CO}^{\mathrm{I}}}_{\text{уд}} \cdot \frac{\left([\mathrm{CO}]^{0} - [\mathrm{CO}]^{*}\right)}{100}, \qquad (3)$$

где $t^{*\mathrm{CO}^{\mathrm{I}}_{\text{вых}}}$ – равновесная (на выходе из конвертора) температура, ºC; $[\mathrm{CO}]^{0}, [\mathrm{CO}]^{*}$ – концентрация CO в исходной и равновесной (при $t^{*\mathrm{CO}^{\mathrm{I}}_{\text{вых}}}$) парогазовых смесях; $\Delta\bar{t}^{\,\mathrm{CO}^{\mathrm{I}}}_{\text{уд}}$ – удельное повышение температуры в конверторе, град/% CO, $\Delta\bar{t}^{\,\mathrm{CO}^{\mathrm{I}}}_{\text{уд}} = 6,86\ \text{град.}/\%\ \mathrm{CO}$; принято как среднее между данными адиабатического повышения температуры при расчете равновесия реакции (1) [10] и фактическим (агрегат АМ-76) удельным повышением температуры при эксплуатации катализатора СТК-СМФ [10].

В расчетах сделано допущение, что объем сухого газа на входе на среднетемпературную конверсию $V_{\text{с.г}}^{\text{CO}^{\text{I}}_{\text{вх}}}$ не изменяется при уменьшении избытка пара в «голове» технологии. Этот объем принят равным 3254 нм^3/т NH_3 (регламент АМ-76) (расчеты показали, что, например, при уменьшении $n_1^{\text{CH}^{\text{I}}_{4\text{вх}}}$ с 3,7 : 1 до 3,0 : 1 объем сухого газа на входе на CO$^{\text{II}}$ уменьшился на 0,47 % отн.).

Экономию тепла на стадии CO$^{\text{I}}$ за счет снижения соотношения пара к сухому газу на этой стадии $n^{\text{CO}^{\text{I}}_{\text{вх}}}$ определяли по уравнению

$$\Delta Q_{\text{п}} = \Delta G_{\text{п}}^{\text{CO}^{\text{I}}} \cdot i\,, \qquad (4)$$

где $\Delta G_{\text{п}}^{\text{CO}^{\text{I}}}$ – снижение (экономия) пара за счет уменьшения соотношения пара к сухому газу на стадии CO$^{\text{I}}$, кг пара/т NH_3; i – энтальпия пара при параметрах входа в среднетемпературный конвертор, кДж/т NH_3.

Результаты расчета сведены в табл. 2.

Таблица 2

Оценка возможной экономии энергоресурсов на первой ступени конверсии оксида углерода CO$^{\text{I}}$, в производстве аммиака ($G_{NH_3} = 1420$ т NH_3 / сутки) по данным равновесия системы $CO – H_2O – CO_2 – H_2$

Регламентные и предлагаемые параметры CO$^{\text{I}}$			Энтальпия пара ($P_{\text{п}}^{\text{вх}} = 3,236$ МПа) парогазовой смеси на входе CO$^{\text{I}}$, кДж/кг	Возможная экономия на CO$^{\text{I}}$		
Соотношение $n^{\text{CO}^{\text{I}}_{\text{вх}}}$, д.е.	Температура парогазовой смеси			пара (3,236 МПа), $\Delta G_{\text{п}}$, кг/т NH_3	тепла	
	вход	выход			Гкал/т NH_3	т.у.т.*/т NH_3
0,565 (реглам. АМ-76)	380	442	–	–	–	–
0,484	355	420	3117,9	211,8	0,157	22,4
0,386	325	390	3044,4	468,1	0,340	48,6

* – т.у.т. – тонна условного топлива, $\Delta Q_{\text{н}} = 7000$ ккал / кг .

Выводы. Изучено влияние соотношения пара к сухому газу, температуры, давления на равновесие системы $CO - H_2O - CO_2 - H_2$ для параметров среднетемпературной конверсии оксида углерода в производстве аммиака. Из полученных данных следует, что при $n^{CO^{I}_{вх}}$ $(V^{CO^{I}_{вх}}_{H_2O} / V^{CO^{I}_{вх}}_{с.г})$ выше 0,35 изменение соотношения незначительно сказывается на равновесных параметрах реакции (1). Регламентные значения $n^{CO^{I}_{вх}}$ можно уменьшить снижением температуры входа парогазовой смеси в среднетемпературный конвертор, сохранив при этом равновесную степень превращения оксида углерода.

На базе данных равновесия реакции (1) показано, что снижение соотношения пара к сухому газу в парогазовой смеси, подаваемой на среднетемпературную конверсию, от регламентных значений (0,565 : 1) до 0,484 : 1 и 0,386 : 1 позволяет сэкономить тепло эквивалентное соответственно 22,4 и 48,6 т.у.т. на 1 т NH_3.

На практике избыток водяного пара к сухому газу на этой стадии получения технологического газа для синтеза аммиака и экономическая эффективность от этого снижения будут определяться кинетикой конверсии метана и среднетемпературной конверсии оксида углерода при пониженных соотношениях пара к сухому газу, в т. ч. и с учетом, возможно, дополнительных объемов загрузки катализаторов на этих стадиях; при использовании газов переработки твердого топлива – кинетикой конверсии CO и, возможно, дополнительной загрузкой катализатора на этой стадии.

Список литературы: **1.** *Алексеев А.М.* Отраслевая наука в азотной промышленности // Российский химический журнал (Журнал Рос. хим. общ-ва им. Д.И. Менделеева). – 2003. – Т. XLVII, № 5. – С. 53 – 58. **2.** Производство аммиака мощностью 475 тыс. т/год (АМ-80). Технология производства: Проект: Пояснительная записка и чертежи / Государственный институт азотной промышленности. – М., 1986. – Т. 2. – Кн. 1. – 230 с. **3.** *Слабун И.А.* Каталітична конверсія вуглеводнів з метою одержання водню і водневовмісних газів // Методи розрахунків у технології неорганічних виробництв: Підручник / За ред. О.Я. Лобойка, Л.Л. Товажнянського – Харків: НТУ "ХПІ", 2001. – Гл. 1. – С. 5 – 82. **4.** *Слабун И.А.* Кинетика низкотемпературной конверсии оксида углерода парами воды. Обоснование макромеханизма и структуры кинетического уравнения // Вестник Харьковского государственного политехнического университета. – 1998. – Вып. 18. – С. 148 – 154. **5.** Справочник азотчика: Физико-химические свойства газов и жидкостей… – 2-е изд., перераб. – М.: Химия, 1986. – 512 с. **6.** Производство технологического газа для синтеза аммиака и метанола из углеводородных газов / Под ред. А.Г. Лейбуш. – М.: Химия, 1971. – 288 с. **7.** Равновесие синтеза метанола / В.Д. Кузнецов, Ф.С. Шуб, Т.В. Белышева, М.И. Тёмкин // ТОХТ. – 1977. – Т. XI, № 6. – С. 866 – 871. **8.** *Еремин Е.Н.* Основы химической термодинамики. Учебное пособие для вузов. – М.: Высшая школа, 1974. – 341 с. **9.** ТУ У 24.6-31337612-052-2001. Катализатор среднетемпературной конверсии оксида углерода (II). – Введ. 01.03.2002. Без огран. срока действия. – Северодонецк: Госкомпромполитики Украины. – 2001. – 39 с. **10.** Из опыта эксплуатации железохромовых катализаторов в первой ступени конверсии СО производства аммиака. // Катализ в пром-ти. – 2006. – № 6. – С. 9 – 18.

Поступила в редколлегию 12.11.07

УДК 504.06

А.Б. ЦЕЛИЩЕВ, канд. техн. наук,
М.Г. ЛОРИЯ, канд. техн. наук, Технологический институт,
Восточноукраинский национальный университет им. Владимира Даля
(г. Северодонецк)

КИНЕТИКА РАЗЛОЖЕНИЯ ПЕСТИЦИДНОГО ПРЕПАРАТА ДДТ ТЕРМОФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

В статті визначаються основні параметри хімічних реакцій, на підставі експериментальних даних, необхідних для моделювання процесу термофотокаталітичного перетворення. А також аналізується процес деструкції пестицидного препарату ДДТ термофотокаталітичним методом.

The main parameters of chemical reactions are defined in article on as-new experimental data, required for modeling of process a thermophotocatalytic transformation. As well as is analysed about-cession an decomposition of pesticides of preparation DDT thermophotocatalytic method.

Целью работы является определение основных параметров химической реакции разложения пестицидного препарата ДДТ. Это необходимо для моделирования процесса термофотокаталитического обеззараживания хлорсодержащих органических отходов [1].

Одной из основных задач химической кинетики являются расчет скорости химической реакции. Скорость сложной реакции может быть рассчитана, если известны составляющие её элементарные стадии, кинетические уравнения, описывающие эти стадии и численные значения констант скорости стадий. Поэтому определение кинетических уравнений и констант скорости элементарных реакций являются важнейшей задачей теории элементарных химических процессов.

В настоящее время основные данные о константах скорости реакций получают из эксперимента. Вместе со значением энергии активации той же ре-