

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОКИСЛЕНИЯ SO_2

Туктарова А.И.,^а Бараева Л.Р.,^а Сабахова Г.И.,^б Ахметова Р.Т.,^а Юсупова А.А.^а

^а Казанский национальный исследовательский технологический университет,
420015, Казань, ул.К.Маркса, 68,
e-mail: tuktarova_aigul@mail.ru

^б Татарский научно-исследовательский и проектный институт нефти
ОАО «Татнефть», 423230. г. Бугульма, ул. М. Джалиля, 32.

Квантово-химическая программы Priroda 6 является одним из доступных и малотребовательных программных продуктов¹. Данная программа используется исследователями кафедры ТНВиМ КНИТУ на протяжении длительного времени и хорошо себя зарекомендовала для исследования разнообразных неорганических соединений и процессов с их участием².

При исследовании процесса окисления диоксида серы до триоксида в первом приближении расчет проводился без участия катализатора. Полученные результаты представлены в таблице 1.

Стадия	Энергия активации ($E_{\text{акт}}$), кДж/моль	Тепловой эффект (ΔH), кДж/моль
1	13,681	-17,364
2	232	42,61
3	101,53	-0,71
4	67,71	24,89

Таблица 1. Кинетические данные процесса окисления диоксида серы

Первые две стадии являются последовательными, следующие две протекают параллельно друг другу. Самой энергоемкой стадией является вторая ($E_{\text{акт-2}}=252$ кДж/моль). Третья и четвертая стадии приводят к образованию целевого (SO_3) и побочных (SO_4 и SO_2) продуктов соответственно, что пагубно влияет на селективность процесса. Следовательно, для преодоления энергетического барьера и увеличения селективности необходимо проводить процесс окисления диоксида серы при высоких температурах с использованием различных катализаторов.

Литература

1. Туктарова А.И., Бараева Л.Р., Сабахова Г.И., Юсупова А.А., Ахметова Р.Т. Вестник технологического университета, 2018, Т.21, №9, 32-37.
2. Туктарова А.И., Бараева Л.Р., Сабахова Г.И., Юсупова А.А., Ахметова Р.Т. Бутлеровские сообщения, 2018, Т. 53, №1, 79-83.