

100-летию со дня рождения

В. И. Ленина посвящается



Идет семинар. Теоретики и экспериментаторы обсуждают совместно работу. На снимке: В. ТАПИЛИН и В. ПОПОВСКИЙ. Фото А. Зубцова.

Д Е Н Ъ Н А У К И — П Я Т Ы Й

День науки — пятый. Отчитывается ордена Трудового Красного Знамени Институт катализа Сибирского отделения АН СССР.

Высокая награда научному коллективу подчеркнула важность и действенность исследований ученых-химиков. Год от года растут связи института с производством. Это определило стиль работы коллектива — сочетание теории и практики.

ИНСТИТУТ КАТАЛИЗА

Когда-то Д. И. Менделеев говорил: «Наука и промышленность — вот тут мои мечты». Наука сегодня — реальный двигатель технического прогресса.

ОРГАН
ПРЕЗИДИУМА
И МЕСТНОГО КОМИТЕТА
ПРОФСОЮЗА СО АН
СССР

Год издания 8-й.

№ 14 (392).

2 апреля 1969 г.

СРЕДА.

Цена 4 коп.

Пролетарии всех стран, соединяйтесь!



ЗА НАУКУ В СИБИРИ

В СОВРЕМЕННОЙ промышленности большинство химических превращений веществ осуществляется с помощью катализаторов. Каждая отрасль химической (в широком смысле этого слова) промышленности, например, производство азотных удобрений, моторного топлива и масел, серной кислоты, синтетического каучука, пластмасс и т. д. базируется на своей определенной группе катализаторов. Экономическая эффективность данной отрасли в целом определяется, в первую очередь, качеством используемых катализаторов. Усовершенствование хотя бы одного из группы катализаторов иногда приводит к существенным изменениям в технологии и экономике всей отрасли. Так, в результате разработки низкотемпературного катализатора конверсии окиси углерода значительно изменилась технологическая схема синтеза аммиака и снизилась его стоимость. Создание на основе цеолитов более эффективного катализатора крекинга нефтепродуктов позволило повысить выход и намного увеличить выработку моторного топлива и масел на действующих установках без дополнительных капитальных вложений. Дальнейшее повышение выхода ценных нефтепродуктов дают новые катализаторы гидрокрекинга. Они позволили существенно снизить давление гидрогенизационной переработки тяжелых видов нефтяного сырья. В результате этого процесс, считавшийся ранее нерентабельным, становится одним из наиболее перспективных, так как позволяет экономнее использовать природные запасы нефти.

На основе катализаторов стереорегулярной полимеризации в последние годы освоено производство новых синтетических каучуков, причем каучук на основе изопрена полностью соответствует природному. Пробег автопокрышек, изготовленных на основе такого синтетического каучука, в несколько раз превышает пробег автопокрышек, выпускавшихся ранее.

что равносильно соответствующему увеличению объема их производства.

Можно привести очень много примеров решающего влияния качества катализаторов на экономику производства.

С другой стороны, катализатор — один из элементов сложного технологического комплекса. Условия работы промышленных катализаторов существенно отличаются от условий работы катализаторов в

процессах в химической промышленности. Естественно, что в силу невысокого уровня знаний, характерного для этого периода, качество (или эффективность) большинства известных промышленных катализаторов не всегда было оптимальным. Поэтому на данном этапе развития химической промышленности существенный вклад может быть внесен путем оптимизации и усовершенствования катализаторов на основе по-

тализаторов пока еще невозможно предвидеть результаты масштабных переходов. Выход из создавшегося противоречия — в разработке методов математического моделирования технологических процессов производства катализаторов. Для решения этой задачи необходимо изучение физико-химической природы и количественных зависимостей технологических процессов на всех стадиях производства катализаторов и раз-

значительно обесценивается еще и потому, что поступает через несколько лет после выпуска продукта.

Отсюда видно, насколько важной оказывается разработка научных основ метрологии и стандартизации промышленных катализаторов. В прямой связи с усовершенствованием метрологии находится прогнозирование качества промышленных катализаторов. Такой прогноз может быть сделан на основе знаний физико-химической природы активного вещества и законов формирования тела катализатора. Сюда относятся вопросы регулирования пористых структур, общей поверхности и поверхности активного компонента, формирования прочности и т. д., по которым в ближайшее время можно ожидать появления серьезных обобщений. Качество катализатора характеризуется многими параметрами, и ответ на вопрос, какой из двух данных катализаторов лучше, далеко не прост. Единственный научный метод решения этого вопроса — проведение технико-экономических исследований. Необходимо выяснить, как влияет изменение тех или иных параметров катализатора на экономику всего технологического комплекса в целом. В существующих условиях оптимальным будет тот катализатор, который дает максимальный экономический эффект. Для новых разработок решающий критерий — их прогрессивность, которая качественно может быть выражена, например, как степень повышения производительности труда и снижения удельных капитальных вложений по сравнению с существующими решениями.

Таковы некоторые научные проблемы, которые решаются Институтом катализа и его научно-исследовательскими подразделениями — отделом промышленных катализаторов.

Н. ЗАЙДМАН,
кандидат химических наук,
А. САМАХОВ,
кандидат технических наук.

КАТАЛИЗАТОРЫ В ПРОМЫШЛЕННОСТИ

лаборатории. В соответствии с этим, к промышленным катализаторам, наряду с активностью и селективностью, предъявляются требования каталитической и механической стабильности, технологичности их производства и т. д.

Требования, предъявляемые к промышленному катализатору, по своей природе противоречивы. Разработка оптимального промышленного катализатора состоит в поиске наиболее выгодных компромиссных решений среди множества взаимозависимых и исключających друг друга факторов. Задача осложняется тем, что сам критерий, по которому производится оптимизация катализатора, часто не может быть сформулирован в начале разработки.

Используемые в настоящее время в промышленности катализаторы в подавляющем большинстве найдены путем длительного подбора и дорогостоящих экспериментов. Каждый катализатор рождался порой после многих тысяч опытов. То был период количественного роста, ознаменовавший начало использования каталитических

следних достижений науки. В соответствии с этим специальным постановлением правительства на Институт катализа возложено научно-техническое руководство в стране работами по усовершенствованию существующих и созданию новых промышленных катализаторов. Основой такого руководства должно стать как использование научных достижений, так и обобщение практического опыта.

Изучение состояния производства катализаторов показывает, что наиболее важными проблемами являются создание научных основ технологии и научно-обоснованной метрологии промышленных катализаторов, а также научный прогноз улучшения качества катализаторов. Развитие методов математического моделирования, пионерами которого являются ученые нашего института, дало возможность в несколько раз сократить срок освоения новых процессов. Вместе с тем, разработка промышленного катализатора по-прежнему требует длительного времени, так как в технологии производства ка-

работка количественных методов оценки свойств (метрологии) промышленных катализаторов. Последнее требует некоторого пояснения. Задачи по метрологии катализаторов возникают потому, что применяемые в промышленности лабораторные методы определения качества катализаторов недостаточно точны и чувствительны, а для некоторых важных параметров лабораторные методы вообще не разработаны. Этим обусловлено то, что на основании лабораторных испытаний не представляется возможным однозначно оценить качество промышленных катализаторов.

Существует мнение, что преимуществу того или иного катализатора можно выявить только после длительных испытаний в промышленном реакторе. Однако результаты этих испытаний являются суммарной характеристикой катализатора, конструкции аппарата и условий эксплуатации, т. е. и здесь качество катализатора определяется не однозначно. Кроме того, для создателей катализаторов такая информация

Слово катализ в переводе с греческого означает разрушение. Этот термин был введен около 130 лет тому назад знаменитым химиком Берцелиусом для обозначения явлений изменения скорости химических превращений под воздействием веществ, не изменяющих своего состава в результате реакции. Эти вещества, называемые катализаторами, вызывают химические реакции или изменяют их скорость благодаря промежуточному химическому взаимодействию с участниками реакции, открывая новый, более легкий путь протекания реакции. При этом катализатор восстанавливает свой состав при завершении цикла промежуточных превращений. При отсутствии побочных причин, вызывающих потери или порчу катализатора, количество продуктов реакции, получаемых с единицы веса катализатора, неограниченно велико. Увеличение скорости химических реакций с помощью катализаторов достигается без существенных затрат катализатора и расхода энергии.

Катализаторы «разрушают» препятствия на пути химических превращений, преодолевают реакционную инертность химических соединений. Они позволяют осуществлять с большой скоростью реакции неизмеримо медленные в отсутствие катализаторов. Не менее важна селективность действия катализаторов, позволяющая направлять реакцию в сторону образования определенного, наиболее ценного продукта из большого числа возможных. Наконец, применение стереоспецифических катализаторов позволяет регулировать строение продукта, например, пространственное расположение присоединяемых групп в растущей молекуле полимера.

Явления катализа широко распространены в природе, и человеку пришлось уже очень давно с ними столкнуться. Широкое использование катализа в промышленности началось, однако, только около 50 лет тому назад. Это связано с началом быстрой химизации промышленности. Современная техника все шире использует искусственные, синтетические вещества, изготавливаемые в результате сложных химических превращений природного сырья. Синтетическим путем производится основная масса сырья для резиновой промышленности, красители, пластические массы, волокна, удобрения, моторное топливо, фармацевтические препараты и многое другое. Потенциальные возможности создания и массового производства новых веществ с ценными свойствами очень велики. Реализация этих возможностей ограничивается трудностью осуществления необходимых химических превращений с достаточной скоростью и в нужном направлении. Наиболее простой способ увеличения скорости химических превращений — повышение температуры — не всегда может быть использован из-за ограниченной устойчивости синтезируемых веществ. Электрохимические и радиационные методы требуют очень большой затраты энергии. Основным средством воздействия на скорость химических превращений является применение катализаторов.

Одним из первых ярких успехов промышленного использования катализа было решение проблемы фиксации азота воздуха. Несмотря на неограниченные ресурсы элементарного азота в атмосфере, промышленность и сельское хозяйство в начале текущего столетия испытывали острый недостаток соединений азота. Только с помощью катализаторов удалось прео-



КАТАЛИЗ — ОСНОВНОЙ ПУТЬ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

Академик Г. К. БОРЕСКОВ, Герой Социалистического Труда

долеть химическую инертность азота и создать промышленность синтетического аммиака и азотной кислоты. В настоящее время аммиак и другие соединения азота производят, исходя из азота воздуха и природного газа (метана) с использованием ряда каталитических процессов (конверсия метана и окиси углерода с водяным паром для получения водорода, очистка от соединений серы, синтеза аммиака, окисление аммиака до окиси азота), требующих применения разнообразных катализаторов. Мировое производство связанного азота достигает ежегодно десятков миллионов тонн. Без решения проблемы фиксации азота воздуха невозможно было бы ведение сколько-нибудь интенсивного сельского хозяйства и развитие важных направлений органического синтеза (взрывчатые вещества, красители, синтетические волокна и др.).

Подлинную техническую революцию произвел катализ в технологии нефтепереработки. В середине пятидесятых годов в руководствах по переработке нефти слово катализ даже не упоминалось, а через несколько лет каталитические методы вторичной переработки нефтепродуктов — каталитический крекинг, реформинг, гидроочистка, гидрокрекинг — получили широкое использование. Каталитическими методами ежегодно производится моторное топливо и химические продукты в количестве сотен миллионов тонн. Для этого изготавливаются сотни тысяч тонн раз-

личных катализаторов. И в результате удалось значительно повысить выход и качество ценных продуктов, получаемых из нефти, что эквивалентно удвоению ресурсов нефтяного сырья.

Особенно широкое применение получил катализ в области синтеза органических соединений. Ярким примером успеха в этой области явилась реализация в нашей стране, впервые в мире, производства синтетического каучука, основанного на разрабатанном академиком С. В. Лебедевым превращении этилового спирта в дивинил на сложном окисном катализаторе. Из большого числа возможных путей превращения спирта этот катализатор направляет реакцию преимущественно в сторону образования дивинила, полимеризация которого в смеси с другими веществами и приводит к синтетическому каучуку. В дальнейшем были реализованы и более выгодные экономические методы получения мономеров СК дивинила и изопрена из продуктов нефтепереработки — бутилена, бутана, изоктана и др. — путем каталитической дегидрогенизации или окислительного дегидрирования. Каждая ступень прогресса в этой области была связана с разработкой новых катализаторов, позволяющих осуществлять желаемую реакцию с достаточной скоростью и избирательностью.

Катализ нашел широкое применение для осуществления процессов полимеризации. В последнее время при-

менение специальных катализаторов позволило решить проблему стереоспецифической полимеризации, открывшей широкие возможности улучшения и сознательной вариации свойств высокомолекулярных веществ. Этим положено начало развития новой области применения катализа, когда подбор специфического действующего катализатора позволяет не только ускорять реакцию и направлять ее в сторону получения продукта требуемого состава, но и регулировать детальное строение этого продукта. Катализатор в данном случае как бы выполняет роль программирующего устройства, матрицы, определяющей сложное строение получаемого вещества. Это открывает широкие перспективы синтеза материалов с требуемыми свойствами, а в дальнейшем, вероятно, и изделий.

Катализ занимает сейчас ведущее положение в осуществлении химических превращений в промышленности. С его помощью изготавливаются все мономеры для производства синтетических волокон и пластических масс, важнейшие полупродукты анилино-красочной и фармацевтической промышленности, серная кислота, жиры, моющие средства и большое число других продуктов. Быстро возрастает роль катализа при осуществлении глубокой очистки технологических газов и обезвреживания выхлопных газов промышленности и автотранспорта и сточных вод.

Три четверти производств

химической и нефтеперерабатывающей промышленности используют катализаторы, а среди новых процессов доля каталитических еще выше. С помощью катализа производится около 20 процентов всей промышленной продукции. В дальнейшем, по мере освоения все более сложных химических превращений, роль катализа будет расти. Об этом свидетельствует положение в живой природе, где все химические превращения осуществляются и регулируются с помощью ферментов — сложных катализаторов белковой природы. Успехи в развитии катализа в значительной мере определяют общий прогресс химической технологии. Отыскание соответствующего катализатора — основное условие реализации производства новых продуктов, освоения дешевых источников сырья и более совершенных технологических схем.

Изыскание катализатора для осуществления определенной реакции представляет собой весьма сложную задачу. Это связано со специфичностью действия катализаторов, требующей почти для каждой реакции подбора особого катализатора, и с вытекающей отсюда сложностью и разнообразием их состава. Эмпирический метод подбора требует поэтому очень большой затраты труда и времени и не обеспечивает достижения оптимального результата. Значительную помощь в решении задачи могла бы принести теория катализа, позволяющая предвидеть

катализаторское действие. Развитие такой теории и является основной проблемой, стоящей перед учеными Института катализа.

В области катализа длительное время господствовало представление о возможности открытия простого и общего подхода, объясняющего и предсказывающего катализаторское действие. Это привело к появлению большого числа теорий, пытавшихся с одной, обычно довольно узкой, позиции трактовать сущность явлений катализа. Сейчас стала ясной химическая природа катализа, ведущая роль промежуточного химического взаимодействия катализатора с реагирующими веществами. Это означает, что проблема предвидения катализаторского действия принципиально не отличается от предсказания скорости химических реакций, но является более сложной из-за участия дополнительно компонента — катализатора. Отсюда следует, что полноценная теория предвидения катализаторского действия может быть построена лишь на основе глубокого изучения механизма действия катализаторов и должна опираться на всю совокупность закономерностей химического взаимодействия, химической кинетики, химии и физики твердого тела. Вторым важным следствием является невозможность в настоящее время общего и строгого решения задачи предвидения катализаторской активности. Действительно, химическая кинетика пока не в состоянии предсказать скорость даже простейшей некатализаторской реакции. Научные основы предвидения катализаторского действия должны поэтому строиться на приближенных и частных закономерностях, справедливых лишь для ограниченных групп катализаторов и реакций.

В Институте катализа развивается несколько подходов выявления таких частных закономерностей. Один из них основывается на корреляции катализаторской активности с энергией промежуточного взаимодействия реагирующих веществ с катализатором. Всякое химическое взаимодействие проходит через «переходное состояние» системы реагирующих частиц с деформированными связями и повышенной свободной энергией. Чем выше свободная энергия образования переходного состояния, тем менее вероятно его образование и, следовательно, меньше скорость реакции. Строгий расчет энергии переходного состояния пока невозможен. Для приближенной оценки мы исходим из предположения, что в пределах ограниченных групп катализаторов и реакций изменение энергии переходного состояния можно приближенно оценивать из величин изменения энергии отдельных связей, разрывающихся или возникающих при превращении переходного состояния. Если рассматривать протекание определенной реакции на различных катализаторах, то на величину энергии переходного состояния основное влияние будет оказывать изменение энергии связей реагирующих веществ с катализатором. В этом случае можно предвидеть линейную зависимость энергии активации реакции на различных катализаторах от изменения энергии связи реагент-катализатор. Если энергии этих связей в группе катализаторов известны, то можно оценить относительную активность катализаторов. В нашем институте подробно исследовалась катализаторская активность катализаторов реакций окисления в зависимости от величины энергии связи кислорода с катализатором. Был разработан ряд методов определения энергии

этой связи и установлена корреляция с катализаторской активностью. В результате установлены закономерности, указывающие пути вариаций состава катализаторов реакций окисления для регулирования катализаторских свойств, изменяя энергию связи кислорода. Метод корреляции катализаторской активности и энергии определенных связей с катализатором, образующихся или разрушающихся в процессе катализаторской реакции, имеет общее значение и может быть использован и для других катализаторских реакций.

Можно рассчитывать, что быстрый прогресс физических методов исследования и растущие возможности квантово-химических расчетов позволят в ближайшем будущем уточнить и расширить наши знания о взаимодействии реагирующих веществ с катализатором, строении переходного состояния, а также энергии и характере связей, образующихся и разрушающихся при его превращении. На этой основе будут существенно расширены и обобщены развиваемые в настоящее время корреляции катализаторских свойств с химическими и электронными характеристиками катализаторов. Из упомянутых методов исследования перспективны оптические методы, особенно исследования инфракрасных спектров адсорбированных молекул, адсорбционная калориметрия, электронный парамагнитный резонанс, ядерный магнитный резонанс и другие магнитные методы, дифракция медленных электронов, позволяющая исследовать строение поверхностного слоя атомов твердых катализаторов, новые масс-спектрометрические методы, ионный проектор, дающий возможность следить за отдельными молекулами на поверхности, и многие другие.

Вторым основным направлением работы Института катализа является развитие научных основ приготовления катализаторов, определение наиболее выгодной пористой структуры и методов ее регулирования в процессе производства промышленных катализаторов. Работа по созданию промышленных катализаторов не исчерпывается нахождением требуемого химического состава. Определенный химический состав, образование катализаторской активности, соединения обязательные, но недостаточные условия высокой катализаторской активности. Необходимо, кроме того, создать большую внутреннюю поверхность твердого катализатора и определенную пористую структуру, облегчающую доступ реагирующих веществ к этой поверхности. Следует отметить, что для большинства промышленных катализаторов внутренняя поверхность в десятки тысяч раз превосходит наружную поверхность зерен и достигает часто сотен квадратных метров в одном кубическом сантиметре катализатора. Пористая структура в основном определяет и механическую прочность катализаторов, являющуюся важной промышленной характеристикой, особенно при использовании катализатора в псевдооживленном слое, когда необходимо сопротивление к истиранию. Пониженное качество многих промышленных катализаторов, изготовляемых и используемых на наших заводах, в значительной степени связано с недостаточным вниманием, уделяемым вопросам развития поверхности и создания нужной пористой структуры.

Современная теория протекания катализаторских реакций на пористых катализаторах позволяет на основе кинетических данных рассчитывать с помощью электронных

(Окончание на 7 стр.)

Ряд промышленных процессов протекает на катализаторах, которые меняют свою активность. По этой причине такие процессы, как катализаторский крекинг, получение мономеров для синтетического каучука, некоторые процессы хлорирования и некоторые другие являются нестационарными, т. е. состав контактного газа меняется не только в пространстве, но и во времени.

Как правило, активность катализатора меняется в сложных процессах, в которых наряду с нужным образуются и побочные продукты. (Вообще говоря, активность меняется во всех катализаторских процессах, но во многих случаях этим изменением из-за его малой скорости можно пренебречь). Зачастую именно взаимодействие катализатора с каким-либо побочным продуктом является одной из причин изменения активности катализатора. Активность либо падает сразу, как только начинается процесс на катализаторе, либо сначала возрастает (так называемая «разработка» катализатора), а затем падает, но в неподвижном слое катализатора возникает необходимость в какой-то момент процесс прервать и регенерировать катализатор (вернуть ему утраченные свойства). Отсюда первая особенность таких процессов — их периодичность. Можно сделать процесс непрерывным — выводить катализатор из зоны реакции и регенерировать в другом аппарате.

Основные трудности в моделировании таких процессов возникают при изучении кинетики нестационарных процессов. Изменение активности катализатора (в некоторых случаях весьма быстрое) делает непригодными методы кинетических исследований для стационарных процессов. Необходимо перерабатывать большой объем экспериментальной информации, связанный не только с проведением при одних и тех же условиях большого числа измерений для сложного процесса, но и с необхо-

ПРОБЛЕМЫ

МОДЕЛИРОВАНИЯ

димостью контролировать при этом состояние катализатора.

В Институте катализа используются качественно новые методы проведения этих исследований. Это оригинальная установка для проведения кинетических экспериментов, соединенная с вычислительной машиной. Такая система дает возможность во много раз ускорить обработку результатов измерений, повысить точность, а также планировать постановку экспериментов и оперативно управлять их проведением. На основе полученных данных проводится моделирование процесса.

Трудности моделирования связаны в основном с системой реактор — регенератор, в которой находится подвижный (псевдооживленный) катализатор. Хотя реактор с неподвижным слоем представляет объект с распределенными параметрами, и процесс в нем описывается системой нелинейных уравнений в частных производных, однако эти системы успешно решаются с помощью цифровых и аналогоцифровых вычислительных машин.

В случае же, когда катализатор с изменяющимися свойствами циркулирует между реактором и регенератором, при расчете процессов возникает специфическая задача. Решение этой задачи требует но-

вых подходов. Такие подходы развиваются в совместной работе Института катализа и Вычислительного центра СО АН СССР.

При определении оптимальных условий нестационарных процессов необходимо решать задачи с обратной связью: выбранные условия влияют на активность, активность на состав газа, последний вновь на активность и т. д. Оптимальное управление поэтому меняется во времени, обеспечивая максимальный выход целевого продукта при минимальной скорости падения активности.

Следует подчеркнуть, что все теоретические вопросы и кинетики, и моделирования нестационарных процессов решаются на конкретных промышленных процессах.

В Институте катализа проведено моделирование процессов получения мономеров синтетического каучука и найдены условия оптимального их проведения. Рассчитанные оптимальные условия реализованы на одном из промышленных реакторов, который проходит производственные испытания при активном участии как работников завода, так и сотрудников лаборатории моделирования Института катализа.

Ю. КУЗНЕЦОВ,
научный сотрудник лаборатории моделирования.

В. ГАЛУЗИНА, старший лаборант лаборатории приготовления катализаторов, отбирает пробу для анализа полноты осаждения катализатора.

Опытнo-химический цех, отделение приготовления катализаторов. Здесь идет доработка лабораторных методик приготовления катализаторов и разработка технологических регламентов, открывающих катализаторам путь в промышленность.

На снимке: аппаратчик Ира Садыкова и начальник отделения приготовления катализаторов А. Н. Тихова наблюдают за процессом прокаливания катализатора.

Фото А. Зубцова.



В объективе—
наши будни

ДЕНЬ НАУКИ— ПЯТЫЙ

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ

Моделирование — изучение объектов и процессов на моделях — широко применяется во многих отраслях науки и техники. В кораблестроении на моделях изучается устойчивость кораблей, в самолетостроении — аэродинамика самолета и его отдельных узлов, в космической технике — отработка мягкой посадки на планеты, в гидроэнергетике — потоки воды на плотинах и т. д. За прошедшее десятилетие развилась область математического моделирования в химической промышленности.

Развитие химической промышленности высокими темпами в послевоенные годы, особенно в последнее десятилетие, естественно, сопровождается быстрым ростом производительности отдельных аппаратов. Для новых процессов необходим ускоренный научный метод строительства новой аппаратуры. Если сохранить «старую» систему внедрения путем испытания новых процессов в установках постепенно возрастающего размера (на что обычно требуется 10—15 лет), может возникнуть ситуация, при которой внедренный в промышленность процесс будет не нужен, предполагаемый для выпуска продукт устаревает, появляются более совершенные продукты и материалы. Поэтому «рожденный» и развиваемый в институте метод моделирования химических аппаратов, позволяющий на основе лабораторных исследований предсказывать сразу работу промышленных аппаратов, минуя промежуточные испытания, имеет большое значение для обеспечения высоких темпов развития химической промышленности.

Успехи математического моделирования определились, с одной стороны, благодаря развитию экспериментальных методов исследования скорости химических реакций и скоростей переноса тепла и вещества, а с другой — бурному развитию вычислительной математики и электронной вычислительной техники.

Метод математического моделирования основан на действенно научном познании процесса: сложный химико-технологический процесс расчленяется на части, не зависящие от масштаба. Эти части выделяются и исследуются раздельно. Последующий их синтез и взаимодействие осуществляются в моделях математическими методами с помощью ЭВМ.

Если на первой конференции по моделированию химических реакторов в 1963 году в Новосибирске была дискуссия о самом термине и возможности существования математического моделирования химических аппаратов, то сейчас это — широко используемый метод сооружения реакторов как у нас, так и за рубежом. Математическое моделирование стало теоретической основой химической технологии. Отсеялись формалистические работы, появившиеся из-за легкой доступности использования ЭВМ. Математическое моделирование, опирающееся на физико-химические закономерности, прошло проверку временем — вторая (1965 г., г. Новосибирск) и третья (1968 г., г. Киев) конференции по химическим реакторам подтвердили это.

Необходимость анализа сложного процесса, расчленение его на части и их изучение изменяет идеологию исследования. В маленьком масштабе не надо воспроизводить промышленные условия. Это дорого и бесполезно, ведь с масштабом изменяются результаты протекания процесса. При исследовании требуется познание закономерностей процесса вместо воспроизводства промышленных условий, а предсказывать промышленные условия надо на моделях с помощью электронно-аналоговых машин.

Разработка химической аппаратуры методом математического моделирования требует совместной творческой работы специалистов в области химической технологии, физической химии, математики, электроники, аэродинамики, теплопередачи и усилия коллективов научно-исследовательских и проектно-конструкторских организаций, опытных заводов, химических и машиностроительных предприятий. Для решения конкретных задач и объединения всех специалистов в институте имеется хороший опыт по работе комплексных бригад, в некоторые входят различные специалисты из разных организаций. Эффективность такой организации труда — в результатах их работы. Сейчас комплексными бригадами по разным проблемам разработаны совершенные реакторы для получения хлорвинила, формальдегида, нафталина, окиси этилена, мономеров синтетического каучука, серной кислоты и т. д. и т. п.

Значение и ценность метода математического моделирования не исчерпывается решением отдельных практических задач. Математическое моделирование становится методом исследования, методом познания химико-технологических процессов, и поэтому требует создания более общей теории, принципиальных подходов к решению отдельных проблем. Так, математическое моделирование потребовало развития анализа числа режимов и устойчивости химических процессов, их оптимизации, численных методов решения задач в химии. Поэтому создание теории методов, позволяющих решать широкий класс задач химической технологии, и внедрение этих методов в практику работы инженеров принесут очень много пользы народному хозяйству с решением конкретных задач.

М. СЛИНЬКО,
член-корреспондент АН СССР, лауреат Ленинской премии.

ИДЕОЛОГИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ

Сейчас никто уже не сомневается, что химизация народного хозяйства — дело большой важности, что химия и химические продукты находят все более широкое применение в промышленности, сельском хозяйстве и в быту. А так как в пользу химии нет сомнений, то надо ее делать, надо создавать новые совершенные материалы, новые экономичные процессы, новые мощные производства. Есть два пути создания высокопроизводительных агрегатов — строить много, но небольшого размера, или сразу — аппараты очень большой мощности. Экономисты подсчитали: крупные производства выгоднее. Например, созданы реакторы в производстве серной кислоты мощностью до 500 т H_2SO_4 в сутки. Сейчас стоит задача создать реакторы вдвое большей мощности. Казалось бы, надо поставить два таких аппарата. Но оказывается, что поставить один реактор мощностью 1000 т H_2SO_4 в сутки значительно выгоднее. Именно поэтому сейчас в химической промышленности наблюдается тенденция создания реакторов большой производительности, способных давать в год 360—500 тысяч тонн серной кислоты, 500 тысяч тонн аммиака, 60—90 тысяч тонн фталевого ангидрида, хлорвинила и т. д.

Но, как всегда, масштабы создают новые проблемы. Основное здесь следующее. Любые временные остановки, крупного аппарата, любое ухудшение его работы — это большие потери продукта. Поэтому аппарат должен быть простым, надежным в эксплуатации, легко управляемым. Кроме того, увеличение размеров аппарата требует нового решения его отдельных узлов. И даже вся конструкция аппарата может принципиально измениться. Например, трубчатые реакторы для получения фталевого ангидрида мощностью 5000 тонн в год содержат более 5000 труб диаметром 20 мм. Дальнейшее увеличение мощности (до 30—60 тыс. тонн в год) возможно только при использовании псевдооживленного слоя. Реакторы для окисления двуокиси серы мощностью до 60 т в сутки делались также трубчатыми. Дальнейшее увеличение производительности (а сейчас создается проект аппарата мощностью более 1000 т в сутки) потребовало перехода к аппаратам с адиабатическими слоями катализатора. Поэтому надо заранее с высокой точностью предсказать, каким должен быть высокопроизводительный реактор, каким должен быть его режим, как надо им управлять при любых нарушениях условий его эксплуатации. Ответить на все эти вопросы позволяет математическое моделирование химических реакторов.

В Институте катализа ведутся работы по созданию реакторов большой мощности для производства важнейших продуктов химической промышленности.

Но, даже получив принципиальное решение и располагая квалифицированными кадрами, один институт не в силах решить всю проблему создания крупнотоннажного производства для какого-либо процесса: в создании реакторов должны принимать участие химики, инженеры-технологи, конструкторы, специалисты по автоматизации, экономисты. Кроме того, один реактор, сам по себе, не работает — нужны аппараты подготовки реагентов, аппараты выделения и очистки готового продукта, аппараты, обеспечивающие работу реактора — основного аппарата, в котором происходит химическое превращение и из исходных реагентов получается нужный продукт.

Для этого организованы комплексные бригады, в которые входят сотрудники института,

специалисты научно-исследовательских и проектных организаций, министерств, а также представители заводов. Кроме привлечения для совместной работы самых различных специалистов, комплексная бригада может эффективно использовать опыт специалистов определенной узкой отрасли промышленности. Очень большое значение имеет моральный фактор: участвуя в работе бригады, различные специалисты знают в большей или меньшей степени все этапы работы, становятся соавторами разрабатываемого процесса. А это позволяет значительно ускорить реализацию результатов исследований. Именно совместная работа и общая заинтересованность в ее результатах, а не система «ателье — заказчик», определяет плодотворность комплексных бригад.

Но вернемся к крупнотоннажным реакторам. Проблемы были названы, научный метод решения этих проблем — мате-

ческом производстве серной кислоты. Так, рекомендации бригады по усовершенствованию нового 540-тонного контактного аппарата были полностью приняты проектными организациями, причем необходимые изменения были внесены в уже изготовляющиеся за границей серии аппаратов для Советского Союза. Сейчас разрабатывается проект аппарата мощностью более 1000 тонн в сутки, работающего по новой схеме.

Можно привести еще много результатов по разработке новых реакторов — увеличена на 40 процентов производительность реактора получения окиси этилена и на 10—30 процентов — реактора дегидрирования бутилена, разработаны новые реакторы синтеза высших спиртов и получения нафталина и т. д., и т. п. Во всех этих работах основные, принципиальные решения были получены в Институте катализа. Это стало возможным благодаря тому, что, во-первых, в работе мы опира-

МАСШТАБЫ И ПРОБЛЕМЫ

матическое моделирование, одна из плодотворных организационных форм — комплексные бригады. Теперь — о результатах. Создание первого отечественного производства безметаллового формальдегида, начатое совместно с Новосибирским химзаводом в 1961 году, привело к пуску через 4 года крупного опытно-промышленного реактора, который работает и сейчас. Причем был сразу построен реактор, подобного по конструкции которому до этого не было.

Полгода назад был пущен опытный секционный аппарат синтеза хлорвинила — мономера для получения искусственных пленок, из которых делают покрытия для полов, скатерти, плащи и многие технические изделия. Интенсивность работы секционного реактора вдвое (!) выше, чем у лучших аппаратов как у нас, так и за рубежом. Кроме того, было доказано, что более правильным управлением температурным режимом работы действующего реактора можно увеличить «пробег» катализатора с 3-х до 4-х месяцев.

Оптимизация процесса получения азотоводородной смеси в производстве аммиака показала, что только перераспределением подачи воды можно получить значительную экономию пара, уменьшить расход кислорода и себестоимость полученного водорода. Когда эти результаты обсуждались, первым вопросом было: «А разве этого нигде не делали? Ведь процесс довольно хорошо изучен». Действительно, решение оказалось настолько неожиданно простым, что у нас сначала возникло подозрение: может быть, мы что-то не учли. Нет, специальные работы позволили получить экономию пара на 16 процентов, кислорода — почти на 4 процента.

Самая крупная бригада по усовершенствованию производства серной кислоты состоит из специалистов 6-ти организаций из 4-х городов нашей страны. Бригада, возглавляемая академиком Г. К. Боресковым, в значительной степени определяет техническую политику в катали-

емся на фундаментальные знания о процессе — кинетике химического превращения, процессах переноса вещества и тепла в аппаратах, которые позволяют на основе лабораторных исследований предсказывать поведение аппарата любого масштаба. Во-вторых, на вооружении имеется «рожденный» и развитый в институте метод математического моделирования химических процессов. В-третьих, — надежная связь с отраслевыми институтами, с заводами, с министерствами. Наконец, кадры, люди лаборатории моделирования определяют успех дела. Лаборатория, которая начала существовать с 1959 года в лице единственного кандидата наук М. Г. Слинко, теперь является крупным подразделением, руководимым членом-корреспондентом АН СССР М. Г. Слинко. В лаборатории выросли кандидаты наук В. Б. Скоморохов, Ю. Ш. Матрос, А. В. Федотов, А. Ермаков. В ближайшее время должны защищаться В. С. Шепелев, Ю. И. Кузнецов, Г. С. Яблонский, О. А. Малиновская, Л. А. Баянский.

В лаборатории много способных молодых сотрудников — химики-технологи В. Радионов, Ю. Вяткин, Ю. Ермаков, математики А. Иванов, С. И. Спизак и другие. Лаборатория располагает хорошим комплексом аналоговых и цифровых вычислительных машин и имеет крепкую научную связь с лабораторией химических задач ВЦ СО АН СССР.

Метод моделирования реакторов большой мощности в настоящее время в принципе разработан. Тем не менее каждый новый процесс обладает своей специфичностью, и для его разработки требуется творчество, ибо каждая реакция, каждый реактор, даже, казалось бы, хорошо изученный (например, случай с получением водорода), по своему неповторим. В этом и заключается привлекательность химии — миллион различных веществ и много путей получения каждого из них.

В. БЕСКОВ,
кандидат химических наук.

Широкое применение полимеров — это резкий скачок производительности труда в сельском хозяйстве, строительстве, машиностроении. Получение синтетических высокомолекулярных соединений в настоящее время развивается такими быстрыми темпами, которые до сих пор не знала ни одна область человеческой деятельности. Мировое производство полимеров в 1967 году достигло 20 миллионов тонн. За последние годы объем их производства удваивался каждые 5 лет. Этот быстрый рост будет продолжаться и в ближайшие десятилетия. Катализ играет важную роль в обеспечении успехов полимерной индустрии как на стадии получения исходных продуктов, так и на стадии полимеризации.

Образование высокомолекулярных соединений из низкомолекулярных происходит при последовательном протекании большого числа элементарных реакций — сотен и тысяч. Эти элементарные реакции протекают на активных частицах — центрах роста полимерной молекулы. Первоначально промышленное получение высокомолекулярных материалов основывалось на процессах, в которых активными частицами являются радикалы или ионы (радикальная и ионная полимеризация). В последние десятилетия были развиты каталитические методы получения высокомолекулярных соединений. При каталитической полимеризации рост полимерной молекулы происходит путем взаимодействия низкомолекулярных молекул (молекул мономера) с активной связью между катализатором и молекулой полимера. Рост полимерной молекулы происходит «от катализатора»; если это гетерогенный катализатор, то большая молекула вырастает с его поверхности, как волос из корня. То, что катализатор принимает участие в каждом из элементарных актов на протяжении всего роста полимерной молекулы, имеет важное значение и объясняет преимущества каталитического синтеза высоко-

молекулярных соединений. При каталитической полимеризации возможно получение больших линейных молекул, обладающих однородным строением по всей длине. Геометрическая и электронная структура центра роста определяет способ присоединения очередной молекулы мономера. Можно сказать, что центр роста при каталитической полимеризации является некоторой матрицей, впечатывающей строго определенным об-

массовый материал, который не может быть получен некаталитическими методами. Важный материал — 1,4-цис-полиизопрен — полимер, синтезируемый в биологических процессах в каучуконосах, не мог быть получен в промышленном масштабе, пока не были открыты комплексные металлоорганические катализаторы.

Каталитическими методами получается также один из самых

В промышленности для получения полиэтилена используется как металлоорганические, так и окисные катализаторы. Окисные катализаторы обладают целым рядом преимуществ, в частности, они очень дешевы, готовятся простыми методами на основе дешевого сырья (силикагеля, окислов хрома).

В области каталитической полимеризации важной задачей является изучение механизма элементарных стадий процесса. Процессы

ные катализаторы полимеризации, которые используются для промышленного получения полиэтилена высокой плотности. Интересная информация о механизме полимеризации на этом катализаторе, как оказалось, может быть получена с применением радиоактивных изотопов. При разрыве активной связи между катализатором и растущим полимером взаимодействием с меченым соединением удается подсчитать число таких связей («активных центров») и определить их реакционную способность. Этот метод позволяет получать сведения о составе поверхностных комплексов, которые являются каталитически активными в реакции полимеризации.

Сведения о механизме действия катализатора находят практическое приложение при разработке методов повышения активности катализатора. Существующие методы получения полиэтилена высокой плотности основаны на проведении процесса в жидкой фазе и требуют тонкой очистки и использования больших количеств растворителя. Создание активного окисного катализатора полимеризации позволяет добиться принципиального упрощения технологической схемы получения полиэтилена при среднем давлении — проводить процесс в газовой фазе в реакторе с подвижным слоем. При использовании активного катализатора конечное его содержание в полученном полимере настолько мало (менее 0,1%), что такой продукт не требует дополнительной очистки. Помимо создания активного катализатора, для такого процесса в институте разработаны методы регулирования молекулярного веса полученного полимера. Полученные результаты позволяют приступить к отработке аппаратно-формирования процесса газовой полимеризации на укрупненной установке.

Ю. ЕРМАКОВ,

кандидат химических наук.

КАТАЛИТИЧЕСКАЯ ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ

разом каждую молекулу мономера в растущую полимерную молекулу.

Развитие методов каталитического синтеза полимеров началось с открытия К. Циглера (ФРГ) и Дж. Натта (Италия) в 1953 году. А через 10 лет за комплексные металлоорганические катализаторы полимеризации ученым была присуждена Нобелевская премия. В сравнительно короткий срок на базе этого открытия была создана промышленность получения новых, так называемых стереорегулярных полимеров. Эти полимеры обладают регулярным стерическим строением мономерных звеньев по всей длине полимерной цепи. К таким материалам относится стереорегулярный полипропилен — важный

крупнотоннажных пластиков — полиэтилен. В промышленности получение полиэтилена с применением катализаторов развивается наряду с радикальной полимеризацией при высоком давлении, так как каталитическими методами получается материал, обладающий многими ценными свойствами (повышенной прочностью, более высокой температурой плавления, твердостью), который не может быть заменен полиэтиленом высокого давления. При каталитическом синтезе полиэтилена используются более мягкие условия (температура 70—150°, давление до 40 атм), тогда как для радикальной полимеризации требуется приложить давление не менее 1500 атмосфер.

каталитической полимеризации являются многостадийными, они включают реакции образования активных центров, роста полимерных молекул и реакции отрыва полимерных молекул от центра роста. Понимание механизма этих стадий необходимо для разработки новых катализаторов полимеризации и усовершенствования существующих, для создания методов регулирования свойств полимеров, в первую очередь молекулярного веса. Последнее особенно важно, так как синтез высокомолекулярного соединения направлен не на получение индивидуального вещества, а на получение материала с комплексом ценных свойств.

В Институте катализа одним из объектов изучения являются окис-

ЛАБОРАТОРИЯ ПРИГОТОВЛЕНИЯ КАТАЛИЗАТОРОВ

Активность твердых катализаторов определяется тремя основными параметрами: химическим составом, который определяет активность единицы поверхности, так называемую удельную активность; величиной поверхности единицы веса (или объема) катализатора; степенью доступности этой поверхности для молекул реагирующих веществ (пористой структурой).

Исходя из этого, задачу создания нового катализатора можно представить состоящей из двух частей. Первая состоит в поисках оптимального химического состава и является задачей теории подбора катализаторов.

Однако одного только знания, какие элементы должны входить в состав катализатора,

еще совершенно недостаточно. Для того, чтобы катализатор можно было использовать в промышленности, он должен обладать еще рядом свойств. А именно: развитой поверхностью, оптимальной пористой структурой и достаточной прочностью. Выяснением закономерностей формирования поверхности как общей, так и активного компонента и пористой структуры занимается лаборатория приготовления катализаторов, которая скоро отметит седьмую годовщину со дня организации.

Катализатор — это пористое тело, состоящее из очень большого числа частиц, сросшихся между собой в местах контакта. Величина поверхности катализатора равна суммарной поверхности частиц, из которых он состо-

ит, и потому зависит от их величины. Пористая структура тел образована промежутками между этими частицами и потому зависит от их размера и плотности упаковки. И управление пористой структурой катализаторов можно свести к управлению величиной частиц, из которых он состоит, и плотностью их упаковки.

Проведенные лабораторией исследования показали, что величина частиц, из которых состоит гидроокись и, соответственно, величина ее поверхности зависит от степени гидролиза исходного вещества. Чем выше степень гидролиза и больше его скорость, тем более развитой поверхностью будет обладать получаемая гидроокись.

В качестве примера можно

привести силикагель, для которого установлено, что, варьируя условия получения, можно изменять величину поверхности от 800 до 10 кв. м/г. Оказалось, что наибольшее влияние на нее оказывает pH при осаждении и промывке: при низких pH получаются образцы с высокоразвитой поверхностью, по мере роста pH величина поверхности уменьшается. Это обусловлено изменением содержания катионов в геле: при повышении pH среды содержание катионов в геле возрастает, поэтому происходит частичное обезвоживание. В результате при сушке глобулы сближаются, коалесцируют, а поверхность сокращается. При уменьшении содержания катионов происходит оводнение глобул, их стабильность возрастает.

Сходная картина наблюдается также и для гидроокиси алюминия, только в этом случае в состав гидрогеля включаются основные соли.

Если исходные вещества для получения катализаторов кристаллически и в процессе термической обработки происходят фазовые превращения, то кристаллическая структура гидроокиси может оказывать влияние на величину поверхности катализатора. Например, при прокаливании бемита поверхность не изменяется, а при прокаливании байерита — сильно возрастает. Это обусловлено уменьшением удельного объема.

В тех случаях, когда катализаторы имеют сложный состав, задача усложняется: необходимо, чтобы катализатор обладал развитой поверхностью, с достаточной концентрацией активных мест. Для ряда окисных катализаторов сложного состава было показано, что их активность обусловлена тем, что между компонентами происходит взаимодействие с образованием химических соединений. Глубина взаимодействия и, следовательно, концентрация активного компонента на поверхности зависит от условий приготовления: тем-

пературы осаждения, продолжительности старения, температуры и продолжительности прокаливания и др. Варьируя эти условия, можно получать высокоактивные катализаторы сложного состава.

Другим видом сложных катализаторов являются металлы на носителях. В этом случае также очень важна высокоразвитая поверхность металла. Для получения металла в тонкодисперсном состоянии обычно применяют носители. В зависимости от назначения катализатора могут быть использованы способы приготовления, но во всех случаях, чтобы получить большую величину металлической поверхности, а следовательно — высокую эффективность катализатора, важно, чтобы сам носитель имел высокоразвитую и доступную для реагирующих веществ поверхность. Для более тонкого распределения металла на носителе необходимо наличие взаимодействия соединения металла с носителем, в то же время металл в этом соединении должен быть восстановлен при не слишком высоких температурах, чтобы избежать его спекания. Небольшая доля металла почти всегда остается невосстановленной — связанной с носителем, т. е. неиспользованной. Степень использования металла, его дисперсность, термическая устойчивость и доступность для реагирующих веществ зависят от способа приготовления катализатора, и выявление оптимальных методов приготовления — одна из задач лаборатории.

Изучение закономерностей формирования катализаторов и создание научной базы их приготовления возможны только при широком использовании физических, химических и физико-химических методов исследования ряда лабораторий, что и осуществлено в институте.

В. ДЗИСЬКО,

доктор химических наук.



Лаборатория приготовления катализаторов. Доктор химических наук В. А. ДЗИСЬКО (в центре) обсуждает планы работ с сотрудниками (слева направо) М. С. БОРИСОВОЙ, Д. В. ТАРАСОВОЙ и Н. С. КОЦАРЕНКО. Фото А. Зубцова.

ДЕНЬ НАУКИ— ПЯТЫЙ

НА ГЛАВНОЙ

ЭФФЕКТ БАВ

В производстве серной кислоты контактным методом в 30-х годах начал использоваться ванадиевый катализатор БАВ, разработанный Г. К. Боресковым с сотрудниками. При расчете контактных аппаратов применялось кинетическое уравнение процесса окисления сернистого ангидрида, выведенное Боресковым и Соколовой в 1937 году.

В связи с созданием реакторов высокой мощности — 1000—2000 тонн серной кислоты в сутки, а также для усовершенствования работающих производств потребовалось уточнение кинетических закономерностей процесса.

В лаборатории каталитического окисления, руководимой академиком Г. К. Боресковым, были проведены исследования по кинетике окисления двуокиси серы с использованием наиболее совершенного проточно-циркуляционного метода. На основании полученных результатов выведено кинетическое уравнение протекания процесса, применимое практически при всех условиях, соответствующих промышленным. Совместно с лабораторией моделирования проведены исследования по влиянию внутридиффузионного торможения на процесс и получены важные результаты, существенно меняющие более ранние представления по этому вопросу. Работа доложена на IV Международном конгрессе по катализу.

Были определены кинетические характеристики новых более активных катализаторов, разработанных лабораторией приготовления.

Результаты кинетических исследований используются при расчетах промышленных контактных аппаратов.

Кинетические исследования ванадиевых катализаторов в сочетании с магнитными методами и ИК-спектроскопией позволили получить ряд важных представлений о протекании реакции и строении активного компонента серноокислительных катализаторов.

В настоящее время ведутся исследования в направлении выяснения более детального механизма протекания процесса окисления двуокиси серы.

А. ИВАНОВ,
кандидат химических наук.



Еще 25 лет назад академик Боресков обратил внимание на то, что для катализаторов данной химической природы активность приблизительно пропорциональна величине их поверхности. Это и понятно — ведь гетерогенные каталитические процессы происхо-

дят именно на поверхности, и чем она больше, тем многочисленней каталитические акты, т. е. тем больше скорость реакции. Примерно в то же время рассмотрены вопросы влияния пористой структуры катализаторов на скорость и избирательность каталитических процессов.

Таким образом, знание геометрических характеристик катализаторов совершенно необходимо для понимания закономерностей их действия в самых различных процессах. Определение этих характеристик — одна из главных задач лаборатории адсорбции. В 1961 году, когда была создана лаборатория, уже имелись надежные методы измерения и удельной поверхности, и пористой структуры

твердых тел. Однако эти измерения проводились на сложных вакуумных стеклянных установках, заполненных ртутью. Производительность этих установок чрезвычайно низка, они требовали непрерывного наблюдения, все операции выполнялись вручную. С самого начала мы поняли, что такие установки не смогут нас удовлетворить.

Под руководством кандидата химических наук Н. Е. Буяновой в лаборатории была разработана удобная высокопроизводительная и высокочувствительная установка для определения величины общей поверхности катализаторов. Для этого было использовано измерение адсорбции аргона из его смеси с гелием, проходящей непрерывно через образец катализатора. Изменение состава этой смеси за счет поглощения аргона при адсорбции или его выделения при десорбции, автоматически регистрируемое катарометром, дает возможность просто и удобно измерить величину адсорбции,

из нее вычислить дисперсность активного компонента. И здесь мы широко применяем газохроматографические методы измерений. Только за последнее время разработаны методики определения поверхности никеля, платины и железа, нанесенных на силикагель и окись алюминия по хемосорбции кислорода из потока гелия.

Пористая структура катализаторов изучается под руководством кандидата химических наук К. Г. Ионе методами ртутной порометрии и капиллярной конденсации. Так как ртуть для большинства твердых тел является несмачивающей жидкостью, для ее введения в капилляры пористого тела необходимо приложить давление тем большее, чем меньше размер капилляров. Измеряя объем ртути, вдавленной в катализатор при давлениях от долей атмосферы до 3.000 атмосфер, удается получить характеристику его пористости практически во всем диапазоне размеров пор. В методе капиллярной конденсации применяется,



Лаборатория адсорбции. Слева: лаборант В. Б. ТОПОРКОВА, справа: руководитель группы, кандидат химических наук К. Г. ИОНЕ. Результат интересный, но неожиданный.

ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КАТАЛИЗАТОРОВ

а из нее — вычислить удельную поверхность катализатора. Производительность такой установки во много раз больше, чем вакуумной: затрата времени на одно определение составляет всего полчаса вместо нескольких дней в прежних методах. Благодаря этому, очень большая потребность института в такого рода измерениях — около 3.500 в год — полностью была удовлетворена. Кроме того, по нашим рекомендациям построены и успешно работают около 25 таких установок в различных научно-исследовательских институтах и заводских лабораториях страны.

В случае, если катализатор имеет сложный состав, например, широко распространенные металлические катализаторы на инертных носителях, необходимо определять величину поверхности их активной части. Для этого в лаборатории используются хемосорбционные методы. Избирательная хемосорбция различных газов дает возможность найти поверхность и

наоборот, жидкость, смачивающая стенки поры, например, бензол, жидкий азот. Изучая конденсацию ее пара на вогнутых поверхностях жидкого мениска в порах твердого тела, также можно найти кривую распределения их размеров. Оба эти метода, взаимно дополняя и контролируя друг друга, используются в лаборатории для характеристики пористой структуры многих катализаторов. К сожалению, расчетная сторона этих методов связана с моделями пористых тел, часто весьма далеких от реальной структуры катализаторов. Поэтому в последнее время мы особое внимание уделяем изучению действительного строения пористых твердых тел и надеемся, что эти работы, проводимые совместно с лабораторией физических методов исследования, дадут нам возможность более точно и всесторонне характеризовать применяемые в институте катализаторы.

А. КАРНАУХОВ,
кандидат химических наук.

ТРАДИЦИОННОСТЬ ИСКЛЮЧАЕТСЯ

В своем развитии катализ не только стремится в полной мере использовать достижения других направлений химии и других наук, но и ставит перед ними новые проблемы. Я коротко хочу рассказать о взаимосвязи катализа и аналитической химии — раздела химической науки, занимающегося разработкой теории и методов определения состава веществ. Требования катализа зачастую весьма специфичны, что ставит перед необходимостью по-новому оценивать возможности тех или иных методов. Можно указать и на следующее весьма характерное обстоятельство: в аналитической химии традиционно разделены органический и неорганический анализы; между тем, подавляющее большинство каталитических процессов заключается в превращении органических соединений в присутствии катализаторов — веществ неорганического происхождения. В общем, исследование подобных систем требует применения практически всех известных методов аналитической химии.

Среди методов, служащих для определения химического состава исходных веществ и продуктов каталитических реакций, прежде всего следует отметить газовую хроматографию. Без преувеличения можно сказать, что весь прогресс катализа неразрывно связан с успехами этого замечательного метода. Успехи эти велики, однако относительная молодость метода — ему около 20 лет — требует приложения больших усилий при методических разработках, опыте и искусстве аналитиков. Исследования в этой области в лаборатории проводятся под руководством кандидата химических наук Л. Я. Гаврилиной. Они направлены на создание новых адсорбентов — наполнителей газохроматографических колонок, позволяющих проводить исследо-

вание сложных смесей органических веществ, образующихся при каталитических реакциях. Главное внимание уделяется анализу реакционноспособных систем, смесей веществ с очень близкими и специфическими свойствами.

Для общего анализа катализаторов и веществ, служащих для их приготовления, аналитическая химия, пожалуй, может предложить наибольшее число готовых решений. Но такие проблемы, как проблема нахождения активного компонента катализатора или приготовления катализаторов с воспроизводимыми характеристиками, приводят к необходимости количественного определения различных форм одного или нескольких химических элементов, образующих катализатор. Эти вопросы разработаны в аналитической химии еще очень слабо. Для их решения следует развивать различные методы и, в частности, метод избирательного растворения, с помощью которого мы рассчитываем определять фазовый состав и состав поверхностных слоев катализаторов.

В последнее время интенсивно разрабатывается область катализа, связанная с применением комплексов соединений как катализаторов гомогенных реакций. Под руководством кандидата химических наук Г. Л. Елизаровой в нашей лаборатории проводятся исследования по определению состава и свойств катализаторов этого типа. Применение физико-химических методов — полярографии, потенциометрии, спектрофотометрии — позволяет раскрывать тайны этих чрезвычайно сложных и подвижных систем.

В. МАЛАХОВ,
кандидат химических наук.

МАГИСТРАЛИ ПРОГРЕССА

Какой продукт химии вам кажется наиболее необходимым? По-видимому, большинство сойдется на ответе: «Каучук, резина». Действительно, без них невероятно представить себе жизнь современного человека. Между тем, совсем недавно единственным источником каучука были каучуковые плантации колоний, главным образом каучуконосных районов Юго-Восточной Азии.

Естественно, что молодое Советское государство не могло опираться на такие источники снабжения натуральным каучуком (НК). В 1926—1928 гг. ВСНХ объявил международный конкурс на создание метода получения синтетического каучука (СК). И вот в 1932 году впервые в мире в СССР советским ученым С. В. Ле-

бедевым был создан каталитический метод получения СК из спирта. Это замечательное изобретение советского ученого положило начало развитию одной из самых мощных отраслей мировой промышленности. Как и

дешевый источник сырья для получения мономеров СК — насыщенные углеводороды, получаемые из нефти. Сами же мономеры — ненасыщенные углеводороды — получают каталитическим дегидрированием соответствующего

дивинила в США в 1970 году будет произведено около 1,5 миллиона тонн! Из этого количества дивинила 85 процентов будет получено путем дегидрирования бугана и бутилена на катализаторах. Качество и эффектив-

ность катализаторов определяют их качество. Среди них наиболее важны — активность, избирательность действия, механическая прочность, срок работы, склонность к закоксуванию, продолжительность фазы дегидрирования, т. е. работы без регенерации, состав побочных продуктов, стоимость катализатора и т. д. Все эти вопросы решаются всесторонним изучением катализаторов и каталитических процессов в лаборатории дегидрирования и частично в некоторых других лабораториях института. Качество, ассортимент и количество катализаторов дегидрирования в ближайшие годы должны быть значительно повышены. От этого зависит успех развития одной из важнейших и многотоннажных отраслей химической промышленности страны. Уже сегодня в СССР выпускается около 40 тысяч тонн катализаторов дегидрирования. За период предстоящей пятилетки это количество должно удвоиться. В решении всех этих задач институт активно сотрудничает с рядом отраслевых учреждений и заводов, в том числе с Омским заводом синтетического каучука, проводит большую научно-организационную работу по координации работ в стране, всемерно проводит в жизнь принцип: «Глубокий научный подход для решения практически важных проблем народного хозяйства».

Благодаря этому за короткий срок в институте получены весьма ценные научные результаты, они рекомендованы в промышленности и внедряются на производстве с большим экономическим эффектом.

Р. БУЯНОВ,
кандидат химических наук, лауреат Ленинской премии.

ВСЕСТОРОННЕЕ ИЗУЧЕНИЕ

все в жизни, технология производства СК с годами изменяется, совершенствуется. Ныне основная масса СК получается каталитической полимеризацией основных мономеров — дивинила, изопрена, стирола. И главная задача промышленности состоит в том, чтобы получить эти мономеры с минимальными затратами труда. Наиболее

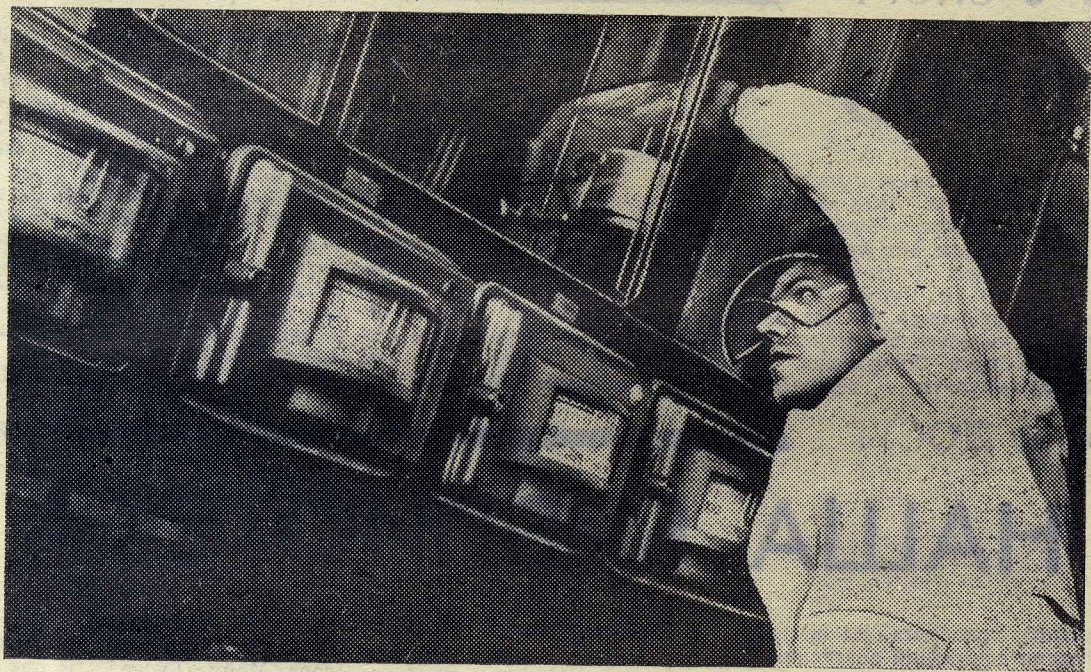
щих насыщенных углеводородов.

Сколько же сегодня получают в мире синтетического и натурального каучука? Цифра внушительная. К 1970 году мировое потребление всех видов каучука (без СССР) составит 5,5 миллиона тонн! Из этого количества на долю СК придется около 3,7 миллиона тонн! Од-

ность катализаторов определяют в данном производстве все экономические показатели. Только за период с 1959 по 1965 годы мощности по производству СК в СССР возросли в 2,2 раза. В предстоящей пятилетке темпы роста этого производства еще более возрастут. Вот почему в Институте катализа СО АН СССР большое внимание уделяется вопросу изучения, усовершенствования и создания новых катализаторов дегидрирования.

Цель этих работ — не только повышение эффективности действующих производств. Наряду с работами по катализаторам для обычного дегидрирования в институте ведутся исследования по созданию принципиально новых катализаторов для реализации в промышленности окислительного дегидрирования. Создание промышленного метода окислительного дегидрирования позволило бы резко повысить эффективность производства, снизить себестоимость СК.

Сейчас в мировой практике осуществлен целый ряд различных способов производства мономеров. И они полностью зависят от свойств катализаторов. Каждый катализатор специфичен, обладает своими отрицательными и положительными свойствами. Многие свой-



Аспирант Николай Терентьевич КУЛИШКИН.

КАТАЛИЗ—ОСНОВНОЙ ПУТЬ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

(Окончание. Нач. на 2 стр.). вычислительных машин оптимальную пористую структуру катализаторов для реакции любой сложности.

Во многих случаях оптимальная пористая структура оказывается сложной и включает сочетание крупных и тонких пор. Только улучшая пористую структуру, сохраняя постоянный состав катализатора, можно существенно повысить его активность и выход полезного продукта.

На основе этих научных разработок Институт катализа, совместно с Научным советом по катализу при Государственном комитете по науке и технике Совета Министров СССР, ведет систематическую организационную работу по усовершенствованию катализаторов, используемых в химической и нефтеперерабатывающей промышленности.

Работниками института за последние пять лет разработаны новые, более совершенные катализаторы для производства серной кислоты, конверсии окиси углерода в производстве водорода, метанирования окиси углерода для очистки водорода, гидрогенизации ряда органических соединений, синтеза сераорганических соединений, по-

лимеризации, очистки хлопковых газов промышленно-сти и ряда других процессов.

Быстрое осуществление химических процессов в промышленных масштабах требует решения проблемы перехода от данных лабораторного исследования к выбору наилучшей конструкции заводского реактора и оптимальных условий его работы. Это одна из важнейших проблем современной химической технологии. В процессе ее решения возникло третье основное направление работ Института катализа — математическое моделирование.

Первоначальной целью развития этого метода был отказ от существующей практики, когда, после окончания лабораторных исследований, начинается длительная эмпирическая разработка процесса на модельных, укрупненных, опытных и опытно-промышленных установках постепенно возрастающего размера. Основная причина этой многостадийности — в неумении предсказать работу реактора при изменении его размеров и конструкции. Эти трудности устраняются при использовании математического моделирования, сущность его, в применении к химическим реакторам, заклю-

чается в исследовании химического процесса на модели, имеющей другое физическое содержание, но математическое описание которой тождественно математическому описанию реактора. Наиболее универсальными моделями являются аналоговые и цифровые вычислительные машины или их комплексы. В основу математического описания должны быть положены результаты экспериментальных лабораторных исследований. При этом надо отказаться от распространенного стремления исследователей — воспроизводить в лабораторных установках сложные условия промышленного осуществления процесса. Наоборот, для математического описания необходимо использовать закономерности собственно химического превращения, не искаженные влиянием процессов переноса. Взаимное влияние химических и физических составляющих процесса учитывается математическим путем. Важно подчеркнуть: чтобы математическое описание позволяло предсказывать протекание процесса в реакторах разного размера и конструкции, оно должно включать кинетические закономерности в

форме, инвариантной относительно изменения масштаба.

На основе математического описания могут быть найдены оптимальные условия проведения процесса, т. е. наиболее выгодные значения температуры, давления, соотношения компонентов реакционной смеси, длительности отдельных циклов в случае периодических процессов, и т. п.

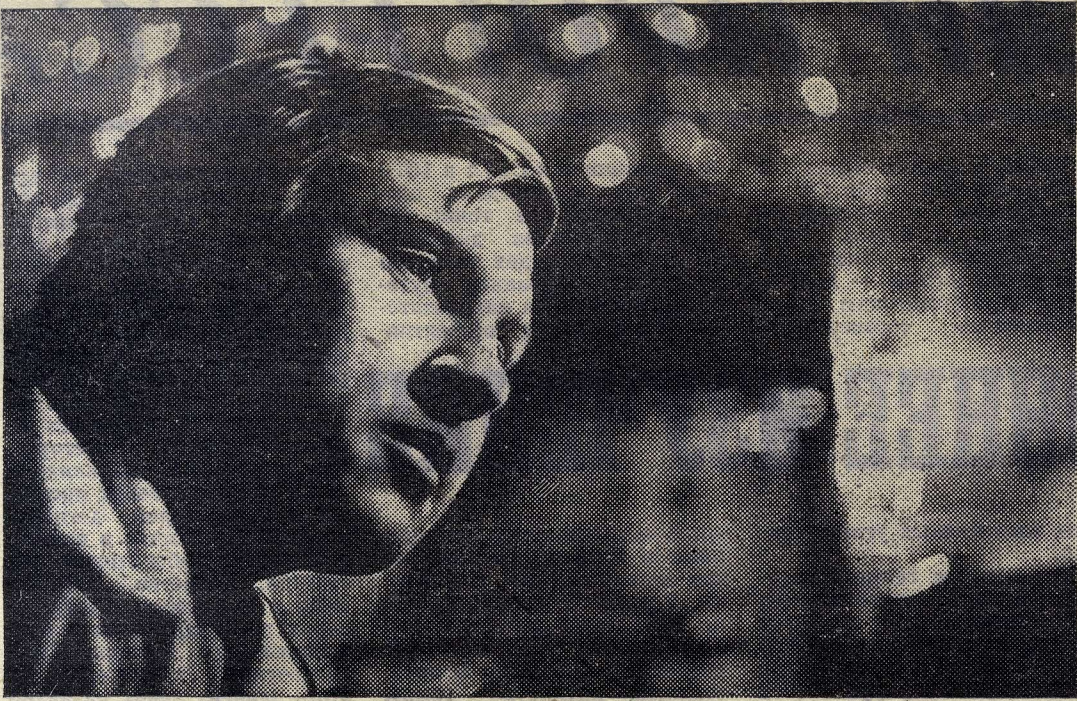
Наряду с определением оптимального режима, решающее значение при выборе конструкции каталитического реактора имеет устойчивость процесса. Эта задача может быть решена путем качественного анализа решений математического описания реактора. При этом, не получая самих решений, можно найти число и области существования стационарных состояний реактора и критерии перехода устойчивых состояний в неустойчивые.

В результате этих анализов и расчетов на основе математического описания может быть выбрана конструкция каталитического реактора и определены его размеры, количество и распределение катализатора, оптимальные условия работы и другие параметры.

Метод математического моделирования получил широкое распространение, и с его помощью решены задачи создания реакторов для многих новых каталитических процессов, а также — важная проблема увеличения мощности отдельных аппаратов для высокотоннажных производств химической и нефтеперерабатывающей промышленности.

В Институте катализа на основе метода математического моделирования за сравнительно короткий срок созданы новые конструкции каталитических реакторов для производства хлористого винила, серной кислоты, дегидрирования бутилена, производства формальдегида из метанола, получения нитрила акриловой кислоты и многие другие.

В заключение я хочу подчеркнуть важность всестороннего изучения проблемы катализа, включая как глубокие теоретические вопросы механизма действия катализаторов и предвидения каталитических свойств, так и методы приготовления катализаторов и создание конструкций реакторов для осуществления каталитических процессов. При этом громадная информация, предоставляемая результатами использования катализа в практических условиях, позволяет уточнять направление наиболее перспективных фундаментальных исследований, а достижения последних лет дают возможность глубже и в более общей форме решать практические задачи.



Юрий ПАНКРАТЬЕВ, научный сотрудник, руководитель группы микрокалориметрии.

Менделеевские вечера

В нашем институте стало традицией ежегодное проведение собраний членов Всесоюзного химического общества имени Д. И. Менделеева, или, как мы их называем, Менделеевских вечеров.

Первый такой вечер состоялся весной 1964 года и был посвящен 130-летию со дня рождения Д. И. Менделеева.

Н. Е. Буянова увлекательно рассказала о жизни и деятельности великого русского ученого. Затем — чаепитие. На столах шумят самовары, непринужденная домашняя обстановка, остроумная «химическая» викторина... Вечер понравился: форму встреч решили сделать традиционной. Теперь очередной Менделеевский вечер ожидается с нетерпением. Сотрудники с энтузиазмом участвуют в подготовке таких вечеров. На них обсуждаются вопросы, связанные с участием во Всесоюзных конкурсах, проводимых ВХО им. Д. И. Менделеева, председатели отчитываются о деятельности совета, проводятся выборы, сотрудники института делятся своими впечатлениями о зарубежных путешествиях, демонстрируют свои фильмы.

Четыре года подряд председателем совета избиралась доктор химических наук, профессор Н. П. Кейер. За это время была организована научно-техническая конференция, на Всесоюзных конкурсах шесть наших научно-исследовательских работ были отмечены премиями и дипломами. Группа сотрудников по линии Менделеевского общества совершила туристскую поездку в Чехословакию.

Менделеевская организация Института катализа за хорошую работу неоднократно награждалась Почетными грамотами и подарками Областного совета ВХО им. Д. И. Менделеева.

СОВЕТ ОБЩЕСТВА.

СПОРТ

РОДИНА ЧЕМПИОНОВ

Институт катализа — родина многих спортсменов — чемпионов СО АН СССР по различным видам спорта. Их рекорды все еще не побиты. Всегда гордишься, когда смотришь на стенд в спорт-павильоне «Юность», где вместе с именитыми спортсменами выставлены фотографии наших сотрудников.

Главное внимание мы уделяем массовости спортивного и физкультурного движения. Достаточно сказать, что наши люди не боятся морозов, поистине позавидуешь спортсменам-рыбкам, возглавляемым кандидатом химических наук В. Гаврилинским. В их тесной компании всегда — дружба и сотрудничест-

во. Серьезных успехов достигли наши теннисисты. Они заявили о себе как опытные бойцы малых ракеток. Их мастерство с каждым днем растет. Среди них Г. Семин, В. Бугаев, В. Малеев, Г. Грушенцев, Ю. Вяткин и другие — всего в секции занимается около 20 человек. А наши шахматисты — чемпионы

СО АН 1964 года — успешно выступают и сейчас. Мы ждем от наших ведущих шахматистов — Л. Баянского, А. Курышева, Ю. Кузнецова — все не расскажем. Многие наши сотрудники разумно сочетают большую научную работу с занятиями в таких секциях, как туристская, парусная, стрелковая и др. Сейчас у нас проводится спортивная анкета, чтобы выявить наши внутренние резервы. Мы считаем, что спорт — гарантия здоровья и плодотворной деятельности.

В. КУЛИКОВ.

ДОСУГ

НАША БИБЛИОТЕКА

В Институте катализа уже 8 лет работает библиотека художественной литературы, которая пользуется большим успехом у сотрудников института (более 400 читателей!).

Идея создания собственной библиотеки возникла в 1961 году, когда доктор химических наук Вера Александровна Дзисьюк принесла в институт годовые комплекты журналов и несколько книг. Эта идея пришлась по душе всем сотрудникам: ведь единственная сейчас библиотека художественной литературы в Академгородке в то время находилась в городе.

Книжный фонд библиотеки начал довольно быстро пополняться за счет личных фондов сотрудников, а через год и за счет средств, выделяемых местным комитетом института (иногда, правда, не без известных усилий наших первых и бесценных общественных библиотекарей — энтузиастов — кандидатов химических наук Ирины Львовны Михайловой и Инессы Семеновны Сазоновой). Эти деньги тратились очень бережно. Ежегодно проводилась подписка на литературно-художественные журналы (более 20 наименований), приобретались полные собрания сочинений советских и зарубежных писателей и другие ценные книги.

Хорошим дополнением к собственному книжному фонду явился передвижной, регулярно обмениваемый фонд книг, который предоставляет нам художественная библиотека объединенного комитета профсоюзов СО АН СССР.

В 1967 году наша библиотека-передвижка была отмечена грамотой Сибирского отделения за отличную работу.

Сейчас книжный фонд нашей библиотеки (не считая журнального) приближается к 2000 экземпляров. Библиотека имеет хорошее помещение. Но главное — слаженный, очень хороший коллектив библиотеки.

Это — И. С. Сазонова и И. Л. Михайлова, Майя Гусева, Валя Галузина, Люба Милова, Надя Жаркова. Все они большие любители книги.

Четкая, регулярная работа, внимательное отношение к читателям и хороший состав книг — все это привлекает новых читателей в нашу библиотеку.

ДРУЖЕСКИЕ СВЯЗИ

ГОРЯЧО БЛАГОДАРЮ!

В рамках советско-венгерского научно-технического сотрудничества каждый год много венгерских специалистов знакомятся с работой научно-исследовательских институтов Советского Союза. В то же время советские специалисты часто посещают Венгрию. Этот обмен учеными очень полезен для обеих стран, так как дает возможность освоить самые современные достижения науки и узнать жизнь другой страны. Соглашения, заключенные в рамках СЭВ, свидетельствуют о том, что в будущем уровень научно-технического сотрудничества наших стран будет возрастать.

Я работаю в Венгерском научно-исследовательском Институте нефти и природного газа, в группе катализа, в маленьком венгерском городе Веспрем. Полгода назад приехал в научную командировку в Академгородок. Думаю, нет необходимости подробно рассказывать о

моих ожиданиях перед этой командировкой. Уже раньше много слышал и читал об этом крупном научном центре Советского Союза, поэтому не удивительно, что собирался в путь с большим волнением. Приехал в Институт катализа в сентябре прошлого года. Главная цель моей командировки — ознакомление с математическим моделированием каталитических процессов. Кроме этого, я имел возможность ознакомиться с другими лабораториями Института катализа. Везде поразила меня высокий уровень обеспечения научно-исследовательской работы: современное лабораторное оборудование, измерительные приборы и т. д. Об уровне работы самих научных сотрудников лучше всего свидетельствует тот факт, что недавно Институт катализа был награжден орденом Трудового Красного Знамени. По этому поводу от всего сердца поздравляю руководство института и всех его научных сотрудников.

Хочу особенно отметить ту

дружескую атмосферу, которую я ощущаю в институте. Во время командировки она помогала мне преодолеть много трудностей, связанных с плохим знанием языка.

Приятные впечатления об институте еще более усиливает ваш красивый Академгородок. По моему, для деятелей науки нельзя представить более идеального места для работы.

Время моей командировки приближается к концу — осталось всего несколько дней до моего отъезда в Венгрию. Эта поездка полностью оправдала мои надежды. Я хотел бы горячо поблагодарить всех, кто способствовал успеху моей командировки и помогал приспособиться к жизни далекой страны, преодолеть трудности холодной сибирской зимы. Я уезжаю с приятными впечатлениями и надеюсь, что представится еще возможность встречи со своими новыми советскими друзьями.

Д. ФЕКЕТЕ (ВЕНГРИЯ)

ОТДЫХ

«КАТАЛИЗ» НА РЫБАЛКЕ

...Надо сказать, что окунам в этом сезоне крупно повезло. В первых, во-вторых, «генерал» Гаврилин болен. Были, правда, с осени рейды в Масляху, но мало. Так что приходится согреть себя воспоминаниями о бывшем. Вот, представьте: сидит человек (на ящике, стульчике, санках или просто так) и дышит, глубоко, спокойно, через нос. Так можно и час, и два, и больше в зависимости от погоды и характера. Только удочка в руке подрагивает. И вдруг нахально торопливое... дерг... дерг... Ожившийся было рыбак наливается злостью. «Ах ты, сейчас мы тебя за губу!» Впрочем, поймать ерша не очень просто. Да и радости мало. Другое дело — четкий клев окуня. Рукавицы летят в сторону, сердце — вниз, удочка — вперед или за тебя и быстро, но аккуратно подводится к лунке окуня. Ревнивый взгляд соседа: «Лапоть?» — «Да так, грамм на сто пятьдесят!». И опять — «напряженная тишина».

Но, как говорится, мы ценим рыбалку не только за это. Рыбалка — символ мужества, даже если

в машине присутствуют несколько женщин, что, в общем, нежелательно. Перед тем, как засесть с удочкой у лунки, рыбак должен преодолеть массу препятствий: 1) достать транспорт, чтобы было что толкать (помню, как несли мы в Сосновку и обратно 16 км машину с Васей — шофером) 2) купить мотыля или мормыша; 3) не проспать (обидней всего, когда в 100 метрах по дороге видишь уезжающую машину с приятелями); 4) и пр., и пр.

А с другой стороны, что может быть демократичней рыбалки? Разве что баня, но нет, баня не объединяет людей, а тут (на рыбалке) сердце радуется, когда видишь шефа, со всей своей интеллектуальной мощью навалившегося на то же колесо, что и ты. Однако вы, дорогие читатели, и сами уже почувствовали или знаете, что такое зимняя рыбалка. Так давайте проведем конец сезона на высоком уровне.

И. о. редактора
Т. А. ДРЕМОВА.