

$$G_Y = -0,179 + 32,1C_Y + 2,45C_{Ba} + 4,1C_{Cu} - 172,5C_Y C_{Ba} + 130C_Y C_{Cu} - 340C_Y^2 - 44,38C_{Cu}^2;$$

$$G_{Ba} = -4,139 + 198,4C_Y + 54,8C_{Ba} + 17,98C_{Cu} - 22,5C_Y C_{Ba} - 195,0C_Y C_{Cu} - 125,63C_{Ba} C_{Cu} - 3090,0C_Y^2 - 186,88C_{Ba}^2 - 68,75C_{Cu}^2;$$

$$G_{Cu} = -2,005 + 128,59C_Y + 6,705C_{Ba} + 8,888C_{Cu} - 92,5C_Y C_{Ba} - 90,25C_Y C_{Cu} + 4,625C_{Ba} C_{Cu} - 1940C_Y^2 - 43,75C_{Cu}^2.$$

Анализируя полученные результаты, можно сделать следующие выводы: увеличение концентраций иттрия, бария и меди в растворе приводит к увеличению сорбции каждого из них. Причем наибольший вклад в сорбцию оказывает иттрий.

Из анализа эффектов двух факторов видно, что совместное присутствие иттрия и бария на катионите КФП-12 увеличивает сорбцию иттрия, сорбция меди подавляется, а совместное присутствие иттрия и бария не оказывает никакого влияния на сорбцию бария; на катионите КУ-2х8 сильнее всего подавляется сорбция иттрия, а менее бария. При совместном присутствии иттрия и меди на катионитах КФП-12 и КУ-2х8 сорбция иттрия увеличивается, а сорбция бария подавляется сильнее сорбции меди. Совместное присутствие бария и меди на катионите КФП-12 не оказывает влияния на сорбцию иттрия и бария, а увеличивает сорбцию меди; на катионите КУ-2х8 не оказывает никакого влияния на сорбцию иттрия, подавляет сорбцию бария и увеличивает сорбцию меди. Со-

вместное присутствие иттрия, бария и меди повышает сорбцию меди на катионите КФП-12 и не оказывает никакого влияния на сорбцию иттрия и бария, а также не оказывает влияние на сорбцию иттрия, бария и меди на катионите КУ-2х8.

Для получения гранулята на основе *Y-Ba-Cu-O* необходимо, чтобы в результате сорбции ионов иттрия, бария и меди на катионите выполнялось мольное соотношение $Y:Ba:Cu = 1:2:3$. В результате исследований были определены оптимальные условия процесса сорбции. Установлено, что наилучшее соотношение $Y:Ba:Cu$ при сорбции на катионите КФП-12 - 1:1,96:3,01 и на катионите КУ-2х8 - 1:2,00:2,99.

Работа представлена на VII научную конференцию с международным участием «Успехи современного естествознания», Дагомыс (Сочи), 4-7 сентября 2006. Поступила в редакцию 13.09.2006г.

Технические науки

Модифицированные катализаторы для процесса углекислотного риформинга метана

Аркатова Л.А., Курина Л.Н., Галактионова Л.В.
Томский Государственный Университет

Переработка природного газа в моторные топлива в XXI веке становится одной из важнейших проблем нефте- и газохимии. Кроме того, неблагоприятная экологическая обстановка привела к необходимости перехода на альтернативные виды моторных топлив. Одним из перспективных процессов в этом направлении является получение диметилового эфира (ДМЭ). Главное его преимущество как дизельного топлива – экологически чистый выхлоп, цетановое число ДМЭ составляет 55-60 против 40-45, а температура воспламенения 235 °С против 250 °С в сравнении с обычным дизельным топливом. Для производства ДМЭ необходима эквимолярная смесь CO + H₂, которую можно получить методом углекислотной конверсии метана (УКМ). Активными катализаторами данного процесса являются металлы подгруппы железа. В данной работе изучены нестандартные каталитические системы - никелевые катализаторы на основе интерметаллида Ni₃Al, модифицированного Mo и Co, полученные методом

самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС). Метод получения катализаторов прост, экспрессивен, имеет малые энергозатраты. Установлено, что система Ni₃Al, модифицированная Co, имеет низкие каталитические показатели, в частности, конверсия метана не превышает 70%. Более того, данные образцы катализаторов претерпевают частичное зауглероживание, что является причиной их дезактивации.

Введение молибдена в систему Ni₃Al резко увеличивает ее каталитическую активность, (конверсии углекислого газа достигают 97 %, метана – 91 %) в процессе окисления метана до синтез-газа (смесь CO + H₂). Данный факт может быть обусловлен образованием карбидов молибдена, являющихся катализаторами процесса УКМ.

Таким образом, в работе предложен новый подход к получению активных катализаторов процесса углекислотной конверсии метана, а также синтезированы высокоактивные каталитические системы для данного процесса.

Работа представлена на VII научную конференцию с международным участием «Успехи современного естествознания», Дагомыс (Сочи), 4-7 сентября 2006г. Поступила в редакцию 06.09.2006г.

Особенности исследования поведения многослойных оболочечных конструкций, находящихся в условиях воздействия стационарных температурных и силовых полей с учетом деградации физико – механических свойств материалов

Белов А.В., Поливанов А.А., Попов А.Г.
*Камышинский технологический институт
 (филиал) Волгоградского государственного
 технического университета*

В настоящее время в химической промышленности и энергетике широко применяются элементы стальных конструкций, выполненные в виде тонких однослойных и многослойных оболочек вращения. Такие конструкции в процессе эксплуатации могут подвергаться воздействию силовых и тепловых нагрузок, а также различных агрессивных сред, вызывающих коррозию материала. При этом достаточно распространенным видом коррозии является высокотемпературная водородная коррозия сталей. Воздействие водорода на стальные конструкции может приводить к обезуглероживанию материалов, из которых они изготовлены, что проявляется в существенном снижении их жесткости, мгновенной и длительной прочности и пластичности. Этот процесс идет тем интенсивнее, чем выше температура, давление водорода и уровень действующих напряжений. Так, например при температуре 500°C и парциальном давлении водорода 5 – 10 МПа для стали 20 по истечении определенного времени модуль упругости может уменьшиться на 20%, а такие механические характеристики, как пределы мгновенной, длительной прочности и текучести снижаются в еще большей степени. Подобная деградация механических свойств материалов вследствие водородной коррозии существенно ослабляет конструкцию и может привести к возникновению в зонах концентрации напряжений пластических деформаций и развитию деформаций ползучести и в конечном итоге к нарушению несущей способности конструкции в целом.

Поэтому, для достоверной оценки работоспособности конструкций, находящихся в условиях термосилового нагружения и воздействия водородосодержащей среды необходимо иметь возможность численного моделирования изменения их напряженно – деформированного состояния с одновременным учетом всех действующих факторов.

Наиболее продуктивным подходом к решению таких задач с точки зрения эффективности и достоверности получаемых результатов является подход, заключающийся в поэтапном их решении. При этом на первом этапе задача решается в достаточно простой постановке (с учетом отдельных факторов воздействия) и после анализа полученных результатов осуществляется переход к ее решению в более сложной постановке. И таким образом, переходя от простой постановки к более сложной, в итоге выполняется расчет с учетом всех действующих факторов и особенностей поведения материала. В ходе поэтапного решения задачи на основе анализа получаемых результатов могут выбираться модели и гипотезы, наиболее адекватно описывающие закономерности

поведения материала применительно к рассматриваемым условиям нагружения.

Для определения несущей способности и долговечности стальных конструкций в виде тонких однослойных и многослойных оболочек вращения будем использовать методику расчета, разработанную авторами, которая позволяет исследовать историю изменения осесимметричного упругопластического напряженно – деформированного состояния однослойных и многослойных оболочек вращения с учетом повреждаемости материалов при ползучести и оценивать их несущую способность и долговечность. А для учета влияния высокотемпературной водородной коррозии обобщим данную методику расчета путем использования модели воздействия на конструкцию водородосодержащей среды, предложенную И.Г. Овчинниковым.

Разработанная методика решения комплексной задачи по оценке прочности, жесткости и долговечности многослойных оболочек вращения в зависимости от задаваемых значений соответствующих параметров позволяет выполнять расчет в различных постановках. Возможные варианты таких постановок задач, решаемых в рамках разработанной системы расчета оболочек вращения приведены ниже.

1. Термоупругая постановка задачи. Здесь предполагается линейная зависимость напряжений от деформаций, зависимость свойств материала от температуры учитывается путем задания значений модуля упругости материала для различных фиксированных температур. Разрушение конструкции не предполагается.

2. Термоупругопластическая постановка задачи. В этом случае закон поведения материала предполагается линейным только в пределах упругих деформаций, а для моделирования развития необратимых деформаций могут быть использованы:

- теория простых процессов деформирования (теория малых упругопластических деформаций) – в случае стационарного термосилового нагружения;
- теория неизотермических процессов упругопластического деформирования элементов твердого тела по траекториям малой кривизны (теория течения с изотропным упрочнением) – в случае нестационарного термосилового нагружения с возможностью исследования истории нагружения.

Учет пластических деформаций производится путем непосредственного использования мгновенной термомеханической поверхности

$$s = f(\epsilon^*, T) \quad (1)$$

Здесь ϵ^* – мгновенная деформация, состоящая из упругой $\epsilon\epsilon$ и мгновенной пластической деформации ϵp .

В зависимости от условий нагружения и механических свойств материалов оболочки для оценки ее несущей способности возможно применение одного из двух критериев разрушения: Треска – Сен – Венана или Губера – Мизеса.

3. Термовязкоупругопластическая постановка задачи без учета повреждаемости материалов при ползучести. Здесь в дополнение к предыдущей постановке задачи предполагается возможность развития