ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ

ӘЛ-ФАРАБИ АТЫНДАҒЫ ҚАЗАҚ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ

ЖАҢА ХИМИЯЛЫҚ ТЕХНОЛОГИЯЛАР МЕН МАТЕРИАЛДАР ҒЫЛЫМИ-ЗЕРТТЕУ ИНСТИТУТЫ

КОНФЕРЕНЦИЯ МАТЕРИАЛДАРЫ

х.ғ.д., профессор Ж.Қ. Қайырбеков 70-жылдығына арналған Халықаралық ғылыми-практикалық конференция

Международная научно-практическая конференция

International scientific-practical conference

КӨМІРСУТЕКТІ ШИКІ ЗАТТАРДЫ КОМПЛЕКСТІ ӨҢДЕУДІҢ ТЕХНОЛОГИЯСЫ

ТЕХНОЛОГИЯ КОМПЛЕКСНОЙ ПЕРЕРАБОТКИ УГЛЕВОДОРОДНОГО СЫРЬЯ

TECHNOLOGY OF HYDROCARBON RAW MATERIAL COMPLEX PROCESSING

Алматы, 15-16 октября 2014 года

Көмірден алынған дизель отынының сапасын жақсарту.
10. **Каирбеков Ж.К., Мылтыкбаева Ж.К., Ташмухамбетова Ж.Х., Мухай Д., Мукталы Д.** О возможности использования озона для улучшения качества дизельного топлива.
11. **Тилеуберди Е., Султанов Ф.Р., Онгарбаев Е.К., Тулеутаев Б.К., Мансуров З.А.** Исследование структуры асфальтенов природных битумов.
12. **Гюльмалиев А.М., Каирбеков Ж.К., Мылтыкбаева Ж.К.** Расчет температурной зависимости термодинамических функций каталитических систем методами статистической механики и квантовой химии.
13. **Каирбеков Ж.К., Аубакиров Е.А., Ташмухамбетова Ж.Х., Файзуллаева М.Ф., Шоманова Ж.К., Бурханбеков К., Валишевский К.А.** Оптимизация процесса каталитической гидрогенизационной переработки отходов резин.
14. **Каирбеков Ж.К., Аубакиров Е.А., Ташмухамбетова Ж.Х., Бурханбеков К., Файзуллаева М.Ф., Шоманова Ж.К., Валишевский К.А.** Идентификация жидких продуктов термической и термокаталитической переработки изношенных автопокрышек.
15. **Каирбеков Ж.К., Ермолдина Э.Т., Малибекова Г.А.** Активность палладиевого катализатора, модифицированного гуматом калия.
16. **Досумов К.Д.** Роль оксидов церия в каталитических процессах переработки углеводородного сырья.
17. **Молдабаев Ә.К., Қаирбеков Ж.Қ., Ешова Ж.Т., Байкенов М.И.** Көмірді гидрогендеу процесінің кинетикалық заңдылықтары.
18. **Молдабаев Ә.К., Қаирбеков Ж.Қ, Ешова Ж.Т., Байкенов М.И.** Құрамында темір бар өндірістік қалдықтар негізіндегі сульфидті металдардың катализдік белсенділігі.
19. **Жармагамбетова А.К.** Полимеры в синтезе наноразмерных нанесенных катализаторов гидрирования.
20. **Джумекеева А.И., Берсугуров К.С., Тумабаев Н.Ж., Жармагамбетова А.К.** Разложение водонефтяной эмульсии месторождения Узень на деэмульгаторах фирмы BASF.

УДК: 662.74:552

А.М. Гюльмалиев*, Ж.К.Каирбеков**, Ж.К.Мылтыкбаева**
*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва
E-mail: Gyulmaliev@ips.ac.ru
**Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы
E-mail: niinhtm@ mail.ru

РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ КАТАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ МЕТОДАМИ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ И КВАНТОВОЙ ХИМИИ

Температурная зависимость термодинамических функцийкаталитических систем необходимы для моделирования их механизма действий в конкретных химических реакциях. В литературе часто эти величины отсутствуют, поэтому разработка надежных методов их расчета представляется весьма ценным. В данной работе предложена методика расчета термодинамических функций произвольных

каталитических систем с применением методов статистической механики и квантовой химии.Суть методики расчета заключается в следующем. Согласно методам статистической механики для невысоких температур общая сумма по состояниям квантово-химической системы равна [1]:

$$Q = Q_{tr} \cdot Q_{rot} \cdot Q_{vib} \cdot Q_{el} \quad (1)$$

Здесь суммы по состояниям: Q_{tr} - трансляционного движения; Q_{rot} - вращательного движения, Q_{vib} - колебательного движения и Q_{el} - электронного возбуждения.

Термодинамические функции каталитической системы через общую сумму по состояниям выражаются следующим образом:

- свободная энергия Гиббса

$$G = -RT \ln Q \quad (2)$$

– внутренняя энергия

$$E = RT^2 \ln\left(\frac{\partial \ln Q}{\partial T}\right)_V \quad (3)$$

- энтропия

$$S = RT\left(\frac{\partial \ln Q}{\partial T}\right)_V + R \ln Q \quad (4)$$

- теплоемкость при постоянном объеме