

# Inhaltsverzeichnis

<b>Inhaltsverzeichnis .....</b>	<b>V</b>
<b>Formelzeichen und Indizes.....</b>	<b>IX</b>
<b>Kurzfassung.....</b>	<b>XIII</b>
<b>1 Einführung in das Thema .....</b>	<b>1</b>
1.1 Gesetzliche Rahmenbedingungen .....	1
1.2 Quecksilber: Eigenschaften und Verhalten in Feuerung und Abgasweg .....	3
1.3 Stand der Technik der absorptiven Abgasreinigung .....	5
1.3.1 Abscheidemechanismen bei der Gaswäsche.....	6
1.3.2 Anlagenkonzepte .....	7
1.3.3 Maßnahmen zur Verbesserung der Quecksilberabscheidung.....	8
1.4 Aufgabenstellung .....	11
<b>2 Grundlagen zur Modellentwicklung.....</b>	<b>13</b>
2.1 Begriffsdefinitionen.....	13
2.2 Quecksilber-Komplexe in wässrigen Systemen .....	14
2.3 Redoxpotenzial und pH-Wert .....	16
2.4 Hg-Abscheidegrad.....	19
2.5 Schlussfolgerungen aus theoretischen Betrachtungen .....	20
<b>3 Berechnung der Komplexbildungsreaktionen.....</b>	<b>22</b>
3.1 Analyse der Komplexbildungsreaktionen am Beispiel Chlorid.....	22
3.2 Unterschiedliche Liganden im Vergleich .....	28
3.3 Einfluss unterschiedlicher Liganden in Mehrligandensystemen .....	31
<b>4 Henry-Verhalten von <math>HgX_2</math>-Komplexen.....</b>	<b>38</b>
<b>5 Berechnung des thermodynamischen Gleichgewichts .....</b>	<b>43</b>
5.1 Theoretische Grundlagen.....	43
5.1.1 Fugazitätskoeffizient.....	44
5.1.2 Aktivitätskoeffizient .....	44
5.1.3 Chemische Potenziale .....	45
5.1.4 Dampfdruck .....	47
5.2 Stoffdaten.....	48

5.2.1	Molare Wärmekapazitäten.....	48
5.2.2	Standardbildungsenthalpie und freie Standardbildungsenthalpie.....	49
5.3	Programm zur Berechnung des thermodynamischen Gleichgewichts .....	53
5.3.1	Ablaufplan des Gibbs-Energie-Minimierungs-Programms .....	54
5.3.2	Eingabedaten .....	56
5.3.3	Ergebnisausgabe.....	58
5.3.4	Programmergänzungen .....	58
5.4	Validierung des Simulationsprogramms GEMP .....	59
5.4.1	Validierung der Berechnung von Aktivitätskoeffizienten .....	59
5.4.2	Validierung der Berechnung von Dampfdrücken .....	60
5.4.3	Überprüfung der Berechnungsgenauigkeit .....	61
5.5	Gleichgewichtsberechnungen mit dem Simulationsprogramm GEMP .....	63
5.5.1	Vergleich der Gleichgewichtslage in der flüssigen Phase des Systems $\text{Hg(II)}\text{-X-H}_2\text{O}$ .....	63
5.5.2	Berechnungen des Gas-Flüssig-Gleichgewichts .....	67
5.5.3	Abgas mit einer Ligandenart.....	69
5.5.4	Nachbildung von realen Wäscherhältnissen.....	76
5.5.5	Berücksichtigung von elementarem Quecksilber.....	82
<b>6</b>	<b>Analyse experimenteller Daten aus der Industrie .....</b>	<b>87</b>
6.1	Beschreibung der Messkampagnen.....	88
6.2	Überprüfung der Eignung der Daten zur Bestätigung des Modells .....	90
6.2.1	Fehlerbetrachtung .....	90
6.2.2	Bereich der verfügbaren Daten und Parameter .....	95
6.3	Analyse der Messdaten für $\text{Hg(II)}$ .....	101
6.3.1	Einfluss der Temperatur .....	101
6.3.2	pH-Wert und $\text{Hg(II)}$ -Abscheidegrad .....	102
6.3.3	Verhältnis Chlorid zu Quecksilber.....	105
6.3.4	Liganden Bromid und Jodid.....	109
6.3.5	Aufteilung der Liganden auf die Wäscher.....	110
6.4	Analyse der Messdaten für $\text{Hg(0)}$ .....	112
6.4.1	$\text{Hg(0)}$ -Freisetzung.....	112
6.4.2	pH-Wert und $\text{Hg(0)}$ -Freisetzung .....	114
6.4.3	Einfluss von $\text{SO}_2$ .....	115
6.4.4	Einfluss des Redoxpotenzials.....	116
<b>7</b>	<b>Transfer der Forschungsergebnisse in die Industrielle Praxis.....</b>	<b>118</b>
7.1	Konzepte für bestehende Abfallverbrennungsanlagen .....	118
7.2	Konzepte für neue Abfallverbrennungsanlagen .....	121
7.3	Konzepte für Kohlekraftwerke .....	122
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick .....</b>	<b>125</b>

<b>Anhang A: Wäscherausführungen.....</b>	<b>129</b>
<b>Anhang B: Quecksilbermessungen .....</b>	<b>134</b>
<b>Anhang C: Verwendete Stoffdaten.....</b>	<b>135</b>
<b>Anhang D: Virialgleichung zur Berechnung des Fugazitätskoeffizienten .....</b>	<b>140</b>
<b>Anhang E: Modelle zur Berechnung von Aktivitätskoeffizienten .....</b>	<b>142</b>
<b>Anhang F: Berechnung von Dampfdrücken.....</b>	<b>146</b>
<b>Anhang G: Matrix der Eingabedatei im txt-Format .....</b>	<b>148</b>
<b>Anhang H: Waschwasserbilanz .....</b>	<b>149</b>
<b>Literatur .....</b>	<b>153</b>