

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	V
Formelzeichen und Indizes.....	IX
Kurzfassung.....	XIII
1 Einführung in das Thema	1
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
2 Grundlagen zur Modellentwicklung.....	13
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
3 Berechnung der Komplexreaktionen.....	22
3.1 Analyse der Komplexreaktionen am Beispiel Chlorid.....	22
3.2 Unterschiedliche Liganden im Vergleich	28
3.3 Einfluss unterschiedlicher Liganden in Mehrligandsystemen	31
4 Henry-Verhalten von HgX_2-Komplexen.....	38
5 Berechnung des thermodynamischen Gleichgewichts	43
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 Hg(II)-X-H ₂ 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 Wäscherverhältnissen.....	76
5.5.5	Berücksichtigung von elementarem Quecksilber.....	82
6	Analyse experimenteller Daten aus der Industrie	87
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 Hg(II).....	101
6.3.1	Einfluss der Temperatur	101
6.3.2	pH-Wert und 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 Hg(0).....	112
6.4.1	Hg(0)-Freisetzung.....	112
6.4.2	pH-Wert und Hg(0)-Freisetzung	114
6.4.3	Einfluss von SO ₂	115
6.4.4	Einfluss des Redoxpotenzials.....	116
7	Transfer der Forschungsergebnisse in die industrielle Praxis.....	118
7.1	Konzepte für bestehende Abfallverbrennungsanlagen	118
7.2	Konzepte für neue Abfallverbrennungsanlagen	121
7.3	Konzepte für Kohlekraftwerke	122
8	Zusammenfassung und Ausblick	125

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