

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОАГУЛЯЦИИ ФТОРИДА ЛИТИЯ КАК ПРОДУКТА РЕАКЦИИ ИОННОГО ОБМЕНА

*Н.К. Лысенко^а, студент гр. 2Д41 ИШПР ТПУ,
Научный руководитель: Саклаков В.М., ст. преп.
Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Томская обл., г. Томск, пр. Ленина, 30
E-mail: ^аnicliss@yandex.ru*

Аннотация. Работа посвящена моделированию макроскопический процесс как суммы составляющих его микроскопических взаимодействий, а именно образование фторида лития как продукта реакции ионного обмена в водном растворе, достижение его предельной концентрации и осаждения. Контрольный калориметрический опыт позволит установить, что конкретно для выбранных процессов и условий метод моделирования применим, однако вычисления требуют доработки, так как отклоняются от результатов опыта (согласно опыту, суммарное изменение энтальпии составило $-1,9282$ Кдж, тогда как согласно вычислениям модели $-3,1641$ Кдж).

Ключевые слова: моделирование, реакция ионного обмена, коагуляция, макроскопический процесс, микроскопический процесс.

Abstract. The current research was dedicated to modelling the macroscopic process as the sum of its containing microscopic interactions, specifically the formation of lithium fluoride as a product of ion-exchange reaction, reaching the peak concentration and following sedimentation. Results of control calorimetric experiment confirmed the adequacy of depicted modelling method for the specific process in settled conditions, although model's calculations are to be improved as they deviate from experiment data (according to the experiment enthalpy change was equal $-1,9282$ Kj, however model calculated $-3,1641$ Kj)

Keywords: modeling, ion exchange reaction, coagulation, macroscopic process, microscopic process.

Для решения производственных и исследовательских задач перед их осуществлением выполняют расчеты, позволяющие определить возможность протекания заложенных процессов и правильность подобранных для них параметров. Зачастую необходимо разложить изменения в технологических процессах на временные отрезки, применяя к каждому такому отрезку различные методы моделирования. На передовых промышленных предприятиях, в частности в отраслях нефтегазохимии и бурения, применяют цифровые тени и цифровые двойники технологических процессов. Данные технологии позволяют как осуществлять мониторинг за производством в реальном времени, так и моделировать предусмотренные изменения [1–3].

Тем не менее, как правило пределы моделирования ограничены конкретной производственной задачей и затрагивают только макроскопические процессы, в связи с высокими объёмами, темпами производства. Исследовательские центры могут рассматривать как макроскопические, так и микроскопические процессы, но не совмещают их анализ. С точки зрения фундаментальной науки интерес представляет следующая задача: объединить в рамках одной модели макро- и микроскопическое описание процесса, то есть его элементарных актов, что до определенного предела позволяют сделать накопленные на настоящий момент эмпирические данные и труды фундаментальных естественно-научных наук.

Целью данной работы являлось моделирование коагуляции фторида лития в водном растворе по мере его образования как продукта реакции ионного обмена. Для её выполнения спектрофотометрически были определены кинетические параметры образования и коагуляции фторида лития.

В ходе литературного обзора был проведен сбор справочных величин, необходимых для составления модели самопроизвольного образования и осаждения фторида лития.

Также проведен калориметрический контрольный опыт, путём сопоставления результатов которого с вычислениями модели были сделаны выводы о пределах её применения. Анализ полученных результатов проводился с помощью инструментария языка программирования Python. По результатам составлен план дальнейших работ, которые требует проведения дополнительных исследований.

В качестве объекта исследования выбрана последовательность реакции ионного обмена между фторидом аммония и гидроксидом лития, пересыщения водного раствора образующимся фторидом лития и его последующей коагуляции ввиду следующих обстоятельств:

1. Близость описываемой дисперсной системы на момент начала реакции к состоянию идеального раствора с максвелл-большмановским равномерным распределением компонентов раствора, что позволяет предположить равновероятным столкновений как пар противоионов Li^+ и F^- , так и одноименно заряженных пар катионов лития и анионов фтора.

2. Высокая величина константы равновесия реакции ввиду малых величин констант диссоциации образующихся электролитов фторида лития и гидроксида аммония, позволяющая ограничить её описание как необратимой, тем самым избавляя от необходимости описывать равновесие прямой и обратной реакций;

3. Незначительное отклонение теплоёмкости полученного 0,5 М раствора фторида лития от дистиллированной воды, облегчающее проведение калориметрических измерений и определение реального теплового эффекта моделируемых процессов.

4. Слабо выраженное комплексообразование катиона лития, обусловленное его малым радиусом и, следовательно, малым координационным числом по отношению к потенциальным лигандам.

5. Достаточное постоянство объёма и давления термодинамической системы при их протекании для применения в расчетах функций состояния системы (энтальпии и энергии Гиббса); 6. допустимость упрощения порядка реакции ионного обмена до второго [4].

С целью определения оптимальной длины волны для спектрофотометрических измерений, растворением в дистиллированной воде соответствующих навесок фторида лития были приготовлены суспензии с расчетными концентрациями 0.050, 0.100, 0.150, 0.200, 0.250, 0.400, 0.500 моль/л. Была получена практически линейная зависимость оптической плотности от расчетной концентрации фторида лития (коэффициент аппроксимации линейного тренда 0,9946), причём основной вклад в прирост оптической плотности приходится на увеличение числа коллоидных частиц, а не увеличение их размеров. Таким образом, во всех исследованных суспензиях коллоиды достигли определенного предельного размера, причём относительно небольшого, так как сама суспензия была достаточной устойчивой в течение спектрофотометрических измерений – по-видимому, это связано с высокой относительно большинства малорастворимых электролитов величиной произведения растворимости фторида лития в $1.84 \cdot 10^{-3}$ моль/л, что должно определенным образом ограничивать предельный размер коллоидных частиц.

Размер коллоидных частиц в соответствующих суспензиях был найден по уравнению Рэлея, что в свою очередь позволило определить производную радиуса коллоидов от концентрации и времени, приняв за $2,4619 \cdot 10^{-8}$ см $\cdot$ л $\cdot$ моль $^{-1} \cdot$ с $^{-1}$:

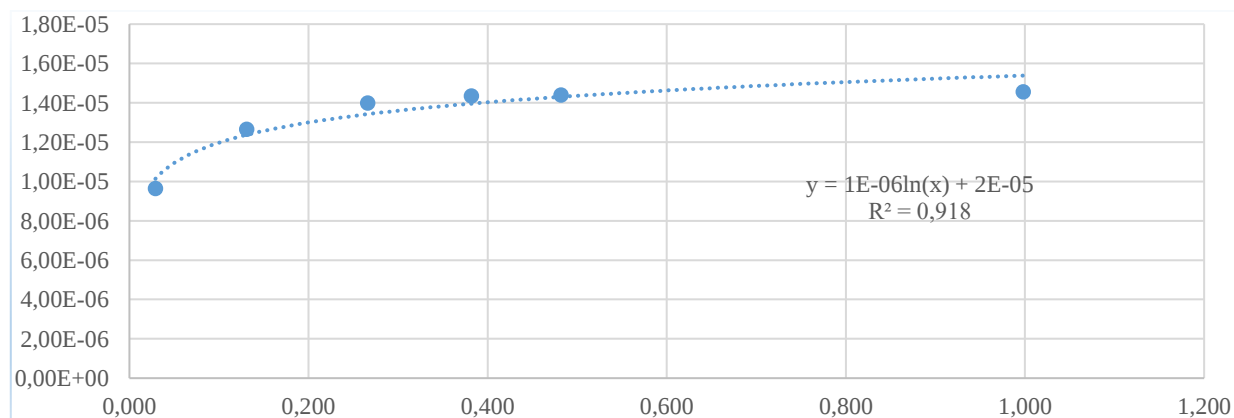


Рис. 1. Косвенно измеренная зависимость радиуса коллоидов фторида лития от оптической плотности водного раствора (длина волны 380 нм)

Техническая задача моделирования элементарных актов химической реакции была упрощена до двух стадий: 1. вычисления изменения функций состояния системы при кулоновском взаимодействии всех возможных пар ионов в объёме ячейки фазового пространства, 2. вычисление суммарного теплового эффекта всех возможных и принятых как равновероятные взаимодействий всех пар ионов, число которых в каждый момент моделируемого отрезка времени находят через скорость реакции в этот момент времени, 3. сложение полученного теплового эффекта с тем, который сопровождает образование и рост коллоидных частиц, а также избытка энергии Гиббса, возникающего при пересыщении реакционной смеси образующимся фторидом лития.

Анализ термограмм калориметрического опыта позволил установить, что суммарный тепловой эффект процесса составил 1,9282 Кдж, что несколько отличается от вычислений модели (3,1641 Кдж), формулируя новые задачи перед текущим исследованием: необходимо воспроизвести спектрофотометрические кинетические опыты, установить влияние различных отдельных параметров системы на течение реакции ионного обмена, процессы образования и роста коллоидных частиц, провести аналогичный опыт с другими реагентами, в том числе с другой реакцией и малорастворимым электролитом в основе, чтобы можно было в полной мере судить о предсказательной силе полученной модели и применимости такого метода моделирования макроскопических процессов как суммы их равновероятных составляющих микроскопических взаимодействий.

На настоящий момент, результаты исследования главным образом демонстрируют универсальность фундаментальных знаний и справочных величин, так как главный вклад в тепловой эффект, рассчитываемый моделью, вычисляется вовсе не из энтепии образования фторида лития (так как все найденные величины предполагали образование кристаллической решетки), а из спектра поглощения его беспримесного образца, где максимум светопоглощения составил 4,96 эВ (из чего следует, что энергия связи $7,95 \cdot 10^{-22}$ Кдж).

Список использованных источников:

1. Применение цифрового двойника в нефтегазовой отрасли / В.Н. Быкова, Е. Ким, М.Р. Гаджиалиев [и др.] // Актуальные проблемы нефти и газа. – 2020. – № 1 (28). – С. 8. – DOI 10.29222/ipng.2078-5712.2020-28.art8.
2. Коровин Г.Б. Возможности применения цифровых двойников в промышленности / Г.Б. Коровин // Вестник Забайкальского государственного университета. – 2021. – Т. 27, № 8. – С. 124–133. – DOI 10.21209/2227-9245-2021-27-8-124-133.
3. Боровков А.И. Цифровой инжиниринг для создания изделий высокой степени технологической сложности на основе цифровых двойников / А.И. Боровков, В.Ю. Кулемин // Актуальные проблемы защиты и безопасности : труды XXVII Всероссийской научно-практической конференции, Санкт-Петербург, 01–04 апреля 2024 года. – Санкт-Петербург: Российская академия ракетных и артиллерийских наук, 2024. – С. 116–123.
4. Курс физической химии: т. 2: издание 2, испр; под ред. чл.-кор. АН СССР проф. Я.И. Герасимова. – М. : «Химия», 1973, – 624 с.

ОБЗОР ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ РЕКОМЕНДАЦИЙ ЛИТЕРАТУРНЫХ ПРОИЗВЕДЕНИЙ

*А.И. Насибуллин^а, студент гр. ИсиТ-21.02,
Научный руководитель: Чернышева Т.Ю., к.т.н., доц.
Тюменский государственный университет
625003, Тюменская обл., г. Тюмень, ул. Володарского, 6
E-mail: ^аstud0000265424@study.utmn.ru*

Аннотация: Проведен анализ существующего программного обеспечения для формирования рекомендаций литературных произведений на примере сервисов: Яндекс Книги, Литрес. В результате было выявлено несколько проблем, ухудшающих работу функционала, связанного с формированием рекомендаций. Поэтому было предложено спроектировать информационную систему, решающую данную проблему.

Ключевые слова: литература, машинное обучение, Яндекс Книги, Литрес, анализ, сервис.

Abstract: The analysis of the existing software for the formation of recommendations of literary works is carried out using the example of services: Yandex Books, Litres. As a result, several problems were identified that impair the functionality associated with the formation of recommendations. Therefore, it was proposed to design an information system that solves this problem.

Keywords: literature, machine learning, Yandex Books, Litres, analysis, service.

На сегодняшний день жители Российской Федерации занимаются чтением литературы регулярно и на постоянной основе.