

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Исследование фазовых равновесий.
Идентификатор ссылки на объект – ROI-jbc-01/20-61-3-86 Подраздел: Технология неорганических веществ.
Цифровой идентификатор объекта – <https://doi.org/10.37952/ROI-jbc-01/20-61-2-3-86>
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 541+541.123.1+541.48. Поступила в редакцию 14 марта 2020 г.

Прогнозирование фазовых равновесий в водно-солевых системах

© Миронович⁺ Евгений Сергеевич, Колядо Александр Владимирович,
Гаркушин* Иван Кириллович и Клеймёнов Евгений Александрович

Кафедра общей и неорганической химии. Самарский государственный технический университет.
ул. Молодогвардейская, 244. г. Самара, 443100. Самарская область. Россия.
Тел.: (846) 278-43-11. E-mail: e.mironovich@bk.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: прогнозирование фазовых равновесий, многокомпонентные системы, водно-солевые системы, гидрофосфат калия, карбамид, жидкие комплексные удобрения.

Аннотация

Произведен обзор научно-технической и справочной литературы по индивидуальным веществам и двухкомпонентным системам, входящим в состав водно-солевой системы $K_2HPO_4 - (NH_2)_2CO - H_2O$. Для прогнозирования фазовых равновесий в реальной системе предположена математическая модель, позволяющая определять зависимость коэффициента активности вещества или иона от концентрации и температуры раствора. Решение системы уравнений было осуществлено в среде табличного процессора Microsoft Excel, в результате чего, в пересчёте на гидрофосфат калия были получены следующие характеристики сплава эвтектического состава с расчётным содержанием компонентов в эвтектике: 36.5 % масс. K_2HPO_4 , 11.5 % масс. $(NH_2)_2CO$, 52.0 % масс. H_2O , температура плавления 250.6 К (-22.6 °С). С целью поиска состава с минимальной температурой кристаллизации в трехкомпонентной системе карбамид – гидрофосфат калия – вода был исследован симплекс $K_2HPO_4 \cdot 6H_2O - (NH_2)_2CO - H_2O$ визуально-политермическим методом. Эвтектика в исследуемой системе кристаллизуется при температуре минус 28 °С и содержит 8 % масс. карбамида, 35 % масс. гидрофосфата калия, 57 % масс. воды. Анализ полученных данных экспериментальным и расчётным путями показал их удовлетворительную сходимость. Среднее отклонение расчетных данных от экспериментальных по составу составило 18.9%, а по температуре плавления эвтектике 2.3%. Предлагаемый алгоритм расчёта может быть использован для прогнозирования характеристик эвтектик в тройных водно-солевых системах при планировании эксперимента.