МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ДИФФЕРЕНЦИРУЮЩЕГО РАСТВОРЕНИЯ СМЕСЕЙ ТВЕРДЫХ ФАЗ

А. А. Почтарь, В. В. Малахов

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН
630090, Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, 5
e-mail: po4tar@catalysis.ru

Смеси твердых фаз неорганической природы всегда неоднородны по своему составу. Неоднородность отражает пространственное представление о химическом составе различных веществ и материалов. При валовом элементном анализе неоднородность стараются нивелировать, используя усредненные представительные пробы. Однако при исследовании свойств различных конструкционных и функциональных материалов, в том числе катализаторов, определение пространственной неоднородности состава приобретает первостепенное значение. С этой целью эффективным является применение стехиографического метода дифференцирующего растворения (ДР). Динамический режим ДР, заключающийся в изменении во времени состава и концентрации растворителей, а также температуры, позволяет получить важную информацию о проявлениях неоднородности химического состава твердых веществ и материалов. Но получить такую информацию можно только эмпирически, подобрав условия селективного и эффективного разделения и определения компонентов смеси этим методом.

Вместе с тем, при исследовании свойств многоэлементных многофазовых систем эффективным может быть математическое моделирование проходящих в них процессов. Моделирование позволяет относительно быстро установить характер влияния изменения отдельных параметров кинетических уравнений, а также вида функций изменения во времени концентрации и температуры растворителей на кинетику процессов ДР и, соответственно, - на селективность и эффективность разделения фаз. Получаемые при моделировании результаты помогают проводить эмпирический поиск требуемых условий ДР.

При моделировании процессов ДР на основе классической модели сокращающейся сферы использовали модели (1) смесей твердых фаз с различными характеристиками их дисперсности и (2) процессов их растворения в динамическом режиме. В результате моделирования получали кинетические зависимости растворения элементов из состава фаз, трансформировали их в стехиограммы и, далее, находили кинетические зависимости растворения фаз. Для оценки полноты разделения фаз использовали два критерия: коэффициент разделения и степень сорастворения.

В результате моделирования были получены зависимости значений критериев разделения фаз от констант скоростей и порядков реакций по растворителю, а также от энергии активации. Было однозначно показано, что изменение временного профиля стехиограмм сложных многоэлементных смесей фаз характеризует степень однородности и неоднородности состава растворяющихся фаз, а изменение вида кинетических кривых растворения фаз характеризуют степень их однородности макро- и микроструктуры.