

НОВЫЕ ПОДХОДЫ ПРИ СОЗДАНИИ СИМУЛЯЦИОННЫХ МОДЕЛЕЙ ФАЗООБРАЗОВАНИЯ В ГИДРОМЕТАЛЛУРГИИ

Юсупов Р.А., Халилова А.И., Бахтеев С.А.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет
420015, Российская Федерация, Республика Татарстан, Казань, ул.К.Маркса, 68,
e-mail: yusupovraf@yandex.ru*

В расчетах областей образования твердых фаз из водных растворов солей металлов используется известное правило произведения растворимости, менее известное правило молекулярной растворимости [1] и еще менее применяемое условие выбора приоритетной фазы [2]. В работах [3 - 6] нами дано широкое определение правила молекулярной растворимости и показаны области его применения. В этих работах показана необходимость совместного использования вышеуказанных правил и условия выбора приоритетной фазы, а также применения предложенного нами нового условия – правила растворимости по интермедиату [3, 4] для расчета областей образования твердых фаз в виде тонких пленок или осадков с одинаковой стехиометрией, но без перекрывания их областей образования.

Нами предложены симуляционная модель, программные продукты и базы данных, которые на основе данных эксперимента позволяют в ручном или автоматическом режиме проводить расчеты: числа частиц в системе; значений констант равновесия; установление функций, описывающих случайные процессы, необходимые для оценки неопределенности значений параметров.

Литература

1. Основы аналитической химии. 1 - 2 т.: Учеб. для студ. учреждений высш. проф. образования / [Н.В.Алов и др.] ; под ред. Ю.А.Золотова. — 5-е изд., стер. — М. : Издательский центр «Академия», 2012. — 416 с. ISBN 978-5-7695-9125-9.
2. Гильманшина, С.И. Основы аналитической химии: курс лекций / С.И. Гильманшина. – 2-е изд. – СПб.: Питер, 2006. – 224 с.
3. Юсупов Р.А., Бахтеев С.А.// Журнал физ. химии. 2009. Т. 83. № 12. С. 2395
4. Yusupov R.A., Bakhteev S.A.// Russ. J. of Phys. Chem. A. 2009. vol.83. №12. P. 2188.
5. Юсупов Р.А., Бахтеев С.А. Смердова С.Г.// Журнал физ. химии. 2009.Т. 84. № 7. С. 1391
6. Yusupov R.A., Bakhteev S.A., Smerdova S.G.// Russ. J. of Phys. Chem. A. 2010. Vol. 84. №7. P.1263.

Работа выполнена в рамках утвержденного задания № 4.1584.2014/К конкурсной части государственного задания на 2014-2016 гг.