

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ ОКСИД СУРЬМЫ-МОЛОЧНАЯ КИСЛОТА-ВОДА ПРИ МИНИМУМЕ ЭНЕРГИИ ГИББСА**

*Маймеков Зарлык Капарович, д.т.н., профессор, КТУ «Манас», Кыргызстан, 720038, Бишкек, мкр. Джал, кампус им. Ч Айтматова, e-mail: z.mautekov@mail.ru*

*Самбаева Дамира Асанакуновна, д.т.н., профессор, ИГДиГТ им. академика У Асаналиева КГТУ им. И.Раззакова, Кыргызстан, 720001, г. Бишкек, пр.Чуй 215, e-mail: damira\_sam@mail.ru*

*Тунгучбекова Жылдыз Тунгучбековна, преп. ИГД и ГТ им. академика У.Асаналиева, КГТУ им. И.Раззакова, Кыргызстан, 720001, г.Бишкек, пр. Чуй 215, e-mail: jika\_azim@mail.ru*

Цель статьи - физико-химическое моделирование гетерогенной системы: оксид сурьмы-молочная кислота-вода при минимуме энергии Гиббса и расчет ее термодинамических параметров (G, H, S, U). Равновесные составы компонентов в отдельных

фазах позволили определить значений pH, Eh, ионную силу (I) раствора при температурах 283-298 К и давлении  $P=10^5$  Па. Показано, что в системе: оксид сурьмы- молочная кислота- вода при температуре 398 К, давлении 1 МПа водородный показатель раствора составила 4,17. Полученная кислая среда, способствовала растворению твердой фазы:  $Sb_2O$  и  $Sb_4O_6$ . Распределение частиц имеет следующий характер:  $CO_3^{-2}$ ,  $HCO_3^-$ ,  $HSbO_2^*$ ,  $SbO_2^-$ ,  $CH_3COO^-$ ,  $CO_2^*$ ,  $HCOO^-$ ,  $HCOOH^*$ ,  $CH_3OH^*$ ,  $C_2H_3O^{2-}$ ,  $HCO_2^-$ ,  $C_3H_5O^{2-}$ ,  $OH^-$ ,  $H^+$ ,  $H_2O$ . Из распределения компонентов и частиц видно, что сурьма переходит в раствор в виде:  $HSbO_2^*$ ,  $SbO_2^-$ .

**Ключевые слова:** оксид, сурьма, молочная кислота, вода, оксикарбоновая кислота, распределение.

## PHYSICAL-CHEMICAL MODELING OF THE ANTIMONY OXIDE-LACTIC ACID-WATER SYSTEM AT A MINIMUM GIBBS ENERGY

*Maymekov Zarlik Kaparovich, Dr., Prof., KTMU, Kyrgyzstan, 720038, Bishkek, Djal, Chyngyz Aytmатов Campus, e-mail: z.maymekov@mail.ru*

*Sambaeva Damira Asanakunovna, Dr., Prof., Institute of Mining and Mining and Technologies named after academician U. Asanaliyev of KSTU named after I.Razzakov, 215 Chui avenue, 720001, Bishkek, Kyrgyzstan. e-mail: damira\_sam@mail.ru*

*Tunguchbekova Zhyldyz Tunguchbekovna, Institute of Mining and Mining Technologies named after academician U.Asanaliyev of KSTU named after I.Razzakov, 215 Chui avenue, 720001, Bishkek, Kyrgyzstan. e-mail: ijika\_azim@mail.ru.*

The purpose of this article is the physic-chemical modeling of heterogeneous systems: antimony oxide- lactic acid- water at a minimum of Gibbs energy and the calculation of thermodynamic parameters (G, H, S, U). Equilibrium composition of components in separate phases allowed to define values pH, Eh, the ionic force (I) of the solution at temperatures from 283 to 298 K and pressure of  $P=10^5$  Pa. It is shown that in system: antimony oxide lactic acid-water at a temperature of 398 K, pressure of 1 MPa pH of solution 4,17. The obtained acid medium, promoted dissolution of a solid phase:  $Sb_2O$ ,  $Sb_4O_6$ . Distribution of particles has the following character:  $CO_3^{-2}$ ,  $HCO_3^-$ ,  $HSbO_2^*$ ,  $SbO_2^-$ ,  $CH_3COO^-$ ,  $CO_2^*$ ,  $HCOO^-$ ,  $HCOOH^*$ ,  $CH_3OH$ ,  $C_2H_3O^{2-}$ ,  $HCO_2^-$ ,  $C_3H_5O^{2-}$ ,  $OH^-$ ,  $H^+$ ,  $H_2O$ . From distribution of components and particles it is visible that antimony passes into a solution in the form:  $HSbO_2^*$ ,  $SbO_2^-$ .

**Keywords** – oxide, antimony, lactic acid, water, hydroxyl acid, distribution.

Формирование физико-химической модели гетерогенной системы: оксид сурьмы – молочная кислота - вода осуществлено путем поиска потенциально возможных в равновесии фаз, зависимых компонентов и состав системы по независимым компонентам при минимизации изобарно-изотермического потенциала [1-4]. При этом расчет включил использование несколько баз исходных данных, вычисление термодинамических характеристик, проверке и сопоставления результатов из различных источников, а также обработки, корректировке и визуализации термодинамических параметров компонентов водного раствора электролита, газов, жидких и конденсированных фаз. С целью осуществления термодинамических расчетов были составлены возможные молекулярные и ионные уравнения химических реакций, найдено мольное соотношение компонентов (C : H : O : Sb) в растворе и определена матрица изучаемой системы; осуществлен подбор значений температур и давления. Результаты исследований позволили рассчитать термодинамические параметры системы (G, H, S, U), определить равновесный состав, pH, Eh, ионную силу (I) раствора и установить спектр концентрационного распределения отдельных компонентов в фазах (ж, г, тв) при температуре 283-298 К и давлении  $P=10^5$  Па. Полученные результаты представлены в табл.1-5.

Таблица 1

Физико-химические и термодинамические параметры системы: молочная кислота  
( $C_3H_6O_3$ ) -оксид сурьмы ( $Sb_2O_3$ ) –вода ( $H_2O$ ) (3:1:1)

Температура, К	398	G, МДж	-4.17	Eh, В	-0.14
Давление, Па	$1 \times 10^5$	H, МДж	-4.21	pe	-1.79
Объем, м <sup>3</sup>	0.298	S, кДж/К	2.43	pH	4.17
Масса, кг	0.903	U, МДж	-4.23	Ионная сила	0.00
Плотность, кг/м <sup>3</sup>	3.03	Ср, кДж	0.75	TDS, мг/кг раств.	11.67

Таблица 2

## Параметры фазы

Название фазы	Объем, $10^{-3}$ м <sup>3</sup>	Количество молей	Масса, $10^{-3}$ кг	Плотность, $10^3$ кг/м <sup>3</sup>	Вес. %
Водный раствор	0.038	2.00e+00	36.05	9.39e-01	3.99
Газ	297.92	9.00e+00	284.20	9.54e-04	31.46
Sb <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (сенармонтит)	0.00	1.00e+00	583.00	0.00e+00	64.54

Таблица 3

## Независимые компоненты

химический состав	дисперсия баланса массы	моляльность	мг/кг раствора	двойной раствор	химический потенциал	log моляльности
C-9.00	1.49e-11	1.05e-02	1.26e+02	-0.05	-40	-1.98
Sb- 4.00	1.32e-09	4.81e-05	5.86e+00	-2.97	-2353	-4.32
H-20.00	1.91e-11	1.87e-04	1.88e-01	-5.47	-4327	-3.73
O-18.00	2.92e-09	2.12e-02	3.39e+02	-63.15	-49967	-1.67

Таблица 4

## Параметры газов

	фугитив- ность	Logфугити в-ности	парциальное давление	log парциального давления	log коэффициент фугитивности	коэффициент фугитивности
CH <sub>4</sub>	4.44e-01	-3.52e-01	4.44e-01	-3.52e-01	0.00e+00	1.00
CO	1.57e-07	-6.80e+00	1.57e-07	-6.80e+00	0.00e+00	1.00
CO <sub>2</sub>	5.56e-01	-2.55e-01	5.56e-01	-2.55e-01	0.00e+00	1.00
H <sub>2</sub> CO	1.47e-15	-1.48e+01	1.47e-15	-1.48e+01	0.00e+00	1.00
HCO	3.02e-31	-3.05e+01	3.02e-31	-3.05e+01	0.00e+00	1.00
H	3.18e-28	-2.75e+01	3.18e-28	-2.75e+01	0.00e+00	1.00

Таблица 5

## Зависимые компоненты

Распределение компонентов и заряженных частиц	gT , cal/mole	моляльность	Количество молей	мг/кг раствора или вес. %	logмоляльности	коэффициент активности	log коэффициент активности	ln активности
<b>Водный раствор</b>								
CO <sub>3</sub> <sup>-2</sup>	-143404	2.59e-11	9.33e-13	1.55e-06	-10.59	0.95	-0.02	-28.44
HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	-150990	2.31e-05	8.32e-07	1.41e+00	-4.64	0.99	-0.01	-14.71
HSbO <sub>2</sub> <sup>*</sup>	-106611	2.41e-05	8.67e-07	3.72e+00	-4.62	1.00	0.00	-14.65
SbO <sub>2</sub> <sup>-</sup>	-99018	4.35e-11	1.57e-12	6.68e-06	-10.36	0.99	-0.01	-27.89
CH <sub>3</sub> COO <sup>-</sup>	-109726	2.62e-11	9.44e-13	1.55e-06	-10.58	0.99	-0.01	-28.39
CO <sub>2</sub> <sup>*</sup>	-99975	5.23e-03	1.88e-04	2.30e+02	-2.28	1.00	0.00	-9.27
HCOO <sup>-</sup>	-101032	4.75e-09	1.71e-10	2.14e-04	-8.32	0.99	-0.01	-23.19
HCOOH <sup>*</sup>	-108627	3.47e-09	1.25e-10	1.59e-04	-8.46	1.00	0.00	-23.50
CH <sub>3</sub> OH <sup>*</sup>	-67315	1.69e-12	6.08e-14	5.41e-08	-11.77	1.00	0.00	-31.12
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O <sup>2-</sup>	-109726	2.62e-11	9.44e-13	1.55e-06	-10.58	0.99	-0.01	-28.39
HCO <sub>2</sub> <sup>-</sup>	-101032	4.75e-09	1.71e-10	2.14e-04	-8.32	0.99	-0.01	-23.19
C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> O <sup>2-</sup>	-118421	2.36e-16	8.51e-18	1.73e-11	-15.63	0.99	-0.01	-40.01
OH <sup>-</sup>	-51008	1.90e-08	6.86e-10	3.24e-04	-7.72	0.99	-0.01	-21.81
H <sup>+</sup>	-7587	6.93e-05	2.50e-06	6.98e-02	-4.16	0.99	-0.01	-13.61
H <sub>2</sub> O	-58621	5.55e+01	2.00e+00	1.00e+00	1.74	1.00	0.00	0.00
<b>газ</b>								
CH <sub>4</sub>	-17349	-	4.00e+00	22.58	0.60	1.00	0.00	-0.81
CO	-49999	-	1.43e-06	0.00	-5.85	1.00	0.00	-15.66
CO <sub>2</sub>	-99973	-	5.00e+00	77.42	0.70	1.00	0.00	-0.59
H <sub>2</sub> CO	-58661	-	1.33e-14	0.00	-13.88	1.00	0.00	-34.15
<b>Твердая фаза Sb<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (сенармонтит)</b>								
Sb <sub>4</sub> O <sub>6</sub>	-309211	-	1.00e+00	100.00	0.00	1.00	0.00	0.00