

Равновесные составы и концентрации компонентов (моль/кг), образующихся в системе:  $C_2H_4O_3-Sb_2O_3-H_2O$  (3:1:1) при  $P=0,1$  МПа,  $T=298-1000$  К (табл.2-3) показали распределение конденсированных частиц сурьмы: 1,37-1,19 моль/кг в пределах 448-998 К. Максимальное значение концентраций конденсированной сурьмы соответствует 1,37 моль/кг при 448 К. Содержание конденсированного оксида сурьмы  $Sb_2O_3(c)$  равно 0,68 моль/кг в пределах изменения температуры 298-398 К. Отсюда следует, что конденсированная частица сурьмы в пирометаллургических процессах образуется в пределах изменения температуры от 448 К до 998 К;  $Sb_2O_3(c)$  образуется при 298-398 К.

**Условные обозначения:**  $C_p'$  - удельная теплоемкость (равновесная), кДж/(кг·К);  $C_p^g$  - теплоемкость газовой фазы (равновесная), кДж/(кг·К);  $I$  - полная энтальпия, кДж/кг;  $L_t$  - коэффициент теплопроводности, Вт/(м·К);  $L_t'$  - полная теплопроводность, Вт/(м·К);  $MM^g$  - молярная масса газовой фазы, г/моль;  $\mu$  - коэффициент динамической вязкости, Па·с;  $\mu$  - число молей, моль/кг;  $Pr'$  - число Прандтля (равновесное);  $R_g$  - газовая постоянная, Дж/(кг·К);  $S$  - энтропия, кДж/(кг·К);  $U$  - полная внутренняя энергия, кДж/кг;  $V$  - удельный объем, м<sup>3</sup>/кг;  $z$  - массовая доля конденсированных фаз.

**Выводы:** Результаты исследований могут быть использованы при разработке технологии выщелачивания сурьмосодержащих компонентов из некондиционных руд и вторичного сырья, а также при подборе эффективного выщелачивающего агента при высоких температурах.

#### Список литературы

1. Усубакунов М.У. Исследование соединений сурьмы (III) с оксикарбоновыми кислотами и разработка способов получения особо чистых сурьмы и ее соединений // Фрунзе, 1981. - С.28-31.
2. Соложенкин П.М. Развитие обогащения и переработки золото-сурьмяных руд и концентратов Республики Саха (Якутия) в зоне вечной мерзлоты/ П.М. Соложенкин // Вестник XXI. Москва, 2005. - С. 344-352.
3. Применение ЭВМ для термодинамических расчетов металлургических процессов / Г.Б Синярев и др.-М.: Наука, 1982. – 264 с
4. Физико-химическое моделирование системы  $H_2C_4H_4O_6-Sb_2S_3-H_2O$  и определение спектра концентрационного распределения сурьмосодержащих компонентов в газовой фазе/ Э.А. Шабданова и др. // Наука и новые технологии, Бишкек. - 2012. - №4. - С.121-125.
5. Шабданова Э.А. Использование органических оксикислот в процессах выщелачивания и комплексообразования металлов/ Э.А. Шабданова // Известие вузов. Бишкек, 2015. - №2. - С.95-102.

УДК 544.32:546.86

#### ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ: СУЛЬФИД СУРЬМЫ-ЯБЛОЧНАЯ КИСЛОТА-ВОДА ПРИ МИНИМУМЕ ЭНЕРГИИ ГИББСА

*Маймеков Зарлык Капарович, д.т.н., профессор, Кыргызско-Турецкий Университет Манас, Кыргызстан, 720044, г. Бишкек, Джал, e-mail: z.maumekov@mail.ru*

*Самбаева Дамира Асанакуневна, 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. ИГДигТ 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: сульфид сурьмы – яблочная кислота – вода. Расчет включил использование нескольких баз исходных

данных, вычисление термодинамических характеристик, обработку, корректировку и визуализацию 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.

**Ключевые слова:** моделирование, распределение, процесс, система, сурьма, яблочная кислота, сульфид, состав, вода

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

*Maymekov Zarlyk K., Dr., Prof., Kyrgyz-Turkish University Manas, Djal, 720044, Bishkek, Kyrgyz Republic, e-mail: z.maymekov@mail.ru*

*Sambaeva Damira A., Dr., Prof., Institute of Mining and Mining Technologies named after academician U. Asanaliev of KSTU named after I.Razzakov, 215 Chuy avenue, 720001, Bishkek, Kyrgyz Republic, e-mail: damira\_sam@mail.ru*

*Tunguchbekova Zhyldyz T., Institute of Mining and Mining Technologies named after academician U. Asanaliev of KSTU named after I.Razzakov, 215 Chui avenue, 720001, Bishkek, Kyrgyz Republic, e-mail: jika\_azim@mail.ru*

Article purpose – physical and chemical modeling of heterogeneous system: antimony sulfide – lactic acid – water. Calculation included use some bases of basic data, calculation of thermodynamic characteristics, processing, adjustments and visualization of thermodynamic parameters of components of water solution of electrolyte, gases, liquid and condensed phases. For the purpose of implementation of thermodynamic calculations the possible molecular and ionic equations of chemical reactions were worked out, the molar ratio of components (C:H:O:Sb) is found in solution and the matrix of the studied system is defined; selection of values of temperatures and pressure is carried out.

**Keywords:** modeling, distribution, process, system, antimony, lactic acid, sulfide, compound, water

Формирование физико-химической модели гетерогенной системы: сульфид сурьмы – яблочная кислота – вода осуществлено путем поиска потенциально возможных в равновесии фаз, зависимых компонентов и состав системы по независимым компонентам при минимизации изобарно-изотермического потенциала [1]. При этом расчет включил использование нескольких баз исходных данных, вычисление термодинамических характеристик, проверку и сопоставление результатов из различных источников [2-6], а также обработку, корректировку и визуализацию 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 298 К и давлении  $P=10^5$  Па. Полученные результаты представлены в табл. 1-4.

Таблица 1

Физико-химические и термодинамические параметры системы: яблочная кислота ( $C_4H_6O_5$ ) - сульфид сурьмы ( $Sb_2S_3$ ) – вода ( $H_2O$ ) (3:1:1)

Температура, К	298	G, МДж	-3.34	Eh, В	0.09
Давление, Па	$1 \times 10^5$	H, МДж	-3.94	pe	1.45
Объем, м <sup>3</sup>	$3.92 \times 10^{-4}$	S, кДж/К	1.31	pH	2.09
Масса, кг	0.760	U, МДж	-3.93	Ионная сила	0.01
Плотность, кг/м <sup>3</sup>	1937.16	Ср, кДж	2.80	TDS, мг/кг раств.	470.99

Таблица 2

## Параметры фазы

Название фазы	Объем, 10 <sup>-3</sup> м <sup>3</sup>	Количество молей	Масса, 10 <sup>-3</sup> кг	Плотность, 10 <sup>3</sup> кг/м <sup>3</sup>	Вес. %
Водный раствор	0.39	1.13e+01	420.28	1.07e+00	55.30
Sb <sub>2</sub> S <sub>3</sub>	0.00	1.00e+00	339.70	0.00e+00	44.70

Таблица 3

## Независимые компоненты

Химический состав	Дисперсия баланса массы	Моляльность	мг/кг раствора	Химический потенциал	log моляльности
S-3.00	2.22e-10	8.61e-08	2.76e-03	-6425	-7.07
Sb-2.00	8.50e-09	4.61e-15	5.61e-10	-11108	-14.34
C-12.00	8.16e-13	8.25e+01	9.91e+05	11486	1.92
H-20.00	6.35e-10	1.02e+02	1.03e+05	-4374	2.01
O-16.00	1.56e-08	9.24e+01	1.48e+06	-50374	1.97

Таблица 4

## Зависимые компоненты

Распределение компонентов и заряженных частиц	gT , cal/mole	Моляльность	Количество молей	мг/кг раствора или вес. %	Коэффициент активности
CO <sub>3</sub> <sup>-2</sup>	-143584	3.79e-14	5.51e-15	2.27e-12	0.69
HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	-145984	1.06e-05	1.54e-06	6.48e-04	0.91
HS <sup>-</sup>	-12774	5.56e-13	8.09e-14	1.84e-11	0.91
HSbO <sub>2</sub> <sup>*</sup>	-116230	2.30e-15	3.35e-16	3.57e-13	1.00
CH <sub>3</sub> COO <sup>-</sup>	-92872	6.79e-05	9.88e-06	4.01e-03	0.91
CH <sub>3</sub> COOH <sup>*</sup>	-95271	6.19e-02	9.01e-03	3.72e+00	1.00
CO <sub>2</sub> <sup>*</sup>	-89261	2.27e+01	3.31e+00	1.00e+03	1.00
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> <sup>*</sup>	-3272	4.14e-01	6.03e-02	1.25e+01	1.00
HCOO <sup>-</sup>	-95610	3.93e-10	5.71e-11	1.77e-08	0.91
HCOOH <sup>*</sup>	-98009	3.55e-08	5.16e-09	1.63e-06	1.00
H <sub>2</sub> <sup>*</sup>	-8748	4.46e-11	6.48e-12	8.98e-11	1.00
H <sub>2</sub> S <sup>*</sup>	-15173	8.61e-08	1.25e-08	2.94e-06	1.00
CH <sub>4</sub> <sup>*</sup>	-6010	6.27e+00	9.12e-01	1.01e+02	1.00
CH <sub>3</sub> OH <sup>*</sup>	-56384	4.56e-12	6.64e-13	1.46e-10	1.00
C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> <sup>*</sup>	2205	5.72e+00	8.33e-01	3.33e+02	1.00
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> <sup>*</sup>	-533	1.64e+00	2.39e-01	7.24e+01	1.00
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> COO <sup>-</sup>	-90133	5.50e-04	8.00e-05	4.02e-02	0.91
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> COOH <sup>*</sup>	-92533	6.68e-01	9.72e-02	4.95e+01	1.00
C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> O <sub>3</sub> <sup>-</sup>	-137769	3.84e-14	5.59e-15	3.96e-12	0.91
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O <sup>2-</sup>	-92872	6.79e-05	9.88e-06	4.01e-03	0.91
C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> O <sup>2-</sup>	-87395	1.56e-03	2.27e-04	1.36e-01	0.91

$C_2H_3O_3^-$	-143245	1.06e-17	1.54e-18	7.93e-16	0.91
$C_3H_3O_4^-$	-182133	2.72e-09	3.96e-10	2.80e-07	0.91
$C_2HO_4^-$	-184871	1.09e-14	1.59e-15	9.72e-13	0.91
$C_3H_5O_3^-$	-140507	1.07e-14	1.55e-15	9.51e-13	0.91
$C_3H_2O_4^{-2}$	-179733	4.17e-13	6.07e-14	4.26e-11	0.69
$C_3H_5O^{2-}$	-90133	5.59e-04	8.13e-05	4.09e-02	0.91
$OH^-$	-56722	1.53e-15	2.22e-16	2.59e-14	0.92
$H^+$	-2399	2.83e-03	4.11e-04	2.85e-03	0.90
$H_2O$	-59122	1.76e+01	2.57e+00	4.62e+01	1.00

Полученные результаты показали, что при физико-химическом моделировании системы: сульфид сурьмы-яблочная кислота-вода при минимуме энергии Гиббса и температуре 298 К, давлении 1 МПа водородный показатель раствора составляет 2,09, т.е. образуется кислая среда, способствующая растворению твердой фазы. В водном растворе распределение частиц имеет следующий характер:  $CO_3^{2-}$ ,  $HCO_3^-$ ,  $HS^-$ ,  $HSbO_2^*$ ,  $CH_3COO^-$ ,  $CH_3COOH^*$ ,  $CO_2^*$ ,  $C_2H_6^*$ ,  $HCOO^-$ ,  $HCOOH^*$ ,  $H_2^*$ ,  $H_2S^*$ ,  $CH_4^*$ ,  $CH_3OH^*$ ,  $C_4H_{10}^*$ ,  $C_3H_8^*$ ,  $C_2H_5COO^-$ ,  $C_2H_5COOH^*$ ,  $C_4H_7O_3^-$ ,  $C_2H_3O^{2-}$ ,  $C_4H_7O^{2-}$ ,  $C_2H_3O_3^-$ ,  $C_3H_3O_4^-$ ,  $C_2HO_4^-$ ,  $C_3H_5O_3^-$ ,  $C_3H_2O_4^{-2}$ ,  $C_3H_5O^{2-}$ ,  $OH^-$ ,  $H^+$ ,  $H_2O$ . Из распределения компонентов и частиц видно, что сурьма переходит в раствор в виде:  $HSbO_2^*$ , т.е. при pH=2,09 происходит растворение твердой фазы.

**Заключение.** Результаты исследований могут быть использованы при разработке технологии выщелачивания сурьмусодержащих компонентов из некондиционных руд и вторичного сырья, а также при подборе эффективного выщелачивающего агента при высоких температурах.

#### Список литературы

1. Karpov I.K., Chudnneko K.V., Kulik D.A., Bychinskii V.A. The convex programming minimization of five thermodynamic potential other than Gibbs energy in geo-chemical modeling // Amer.J.Sci.- 2002.- V.302.- P.281-311.
2. Усубакунов М.У. Исследование соединений сурьмы (III) с оксикарбоновыми кислотами и разработка способов получения особо чистых сурьмы и ее соединений // Фрунзе, 1981. - С.28 - 31.
3. Соложенкин П.М. Развитие обогащения и переработки золото-сурьмяных руд и концентратов Республики Саха (Якутия) в зоне вечной мерзлоты/ П.М Соложенкин // Вестник XXI. Москва, 2005. - С. 344 - 352.
4. Концентрационное распределение сурьмусодержащих частиц в системе:  $Sb_2S_3$ - $MnO_2$ - $H_2SO_4$ - $NaCl$  при различных температурах/ Маймеков З.К. // Межд. научно-прак. конф. - Тараз, 2013. - Т.1. - С.16-19.
5. Физико-химическое моделирование системы  $Sb_2S_3$ - $K_2MnO_4$ - $H_2SO_4$ - $ZnCl_2$  и прогнозирование химического состава продуктов реакции/ Д.А.Самбаева // Сб. статей. - Пенза, 2013. - С.127 - 130.
6. Шабданова Э.А. Концентрационное распределение сурьмусодержащих компонентов в системе  $MoO_3$ - $WO_3$ - $Sb_2O_3$ - $H_2C_4O_6$ - $H_2O$  при P=0,1 МПа и T=285-1005K/ Э.А. Шабданова // Химический журнал Казахстана. - Алматы, 2014. - №2. - С.223-227.

УДК 577.217.39:612.015.32 (574)

#### PROSPECTS FOR PROCESSING OF PROTEIN-CARBOHYDRATE RAW MATERIALS IN KAZAKHSTAN

*Erzhanov Bekzat, master student of M. Auezov South-Kazakhstan State University, Republic of Kazakhstan, Shymkent, Tauke-khan av., 5, e-mail: zhanarbeka@mail.ru*