



XXVII международная научная конференция
студентов, аспирантов и молодых ученых

ЛОМОНОСОВ – 2020

Секция «Химия»

10 – 27 ноября 2020

Материалы конференции

ЭЛЕКТРОННОЕ ИЗДАНИЕ
МОСКВА



УДК 54
ББК 24я43
М34

Отв. ред.: Н.А. Коваленко, А.В. Дзубан

М34 Материалы XXVII Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2020», секция «Химия». – М.: Издательство «Перо», 2020. – 116 МБ. [Электронное издание]. – Систем. требования: процессор x86 с тактовой частотой 500 МГц и выше; 512 Мб ОЗУ; Windows XP/7/8; видеокарта SVGA 1280x1024 High Color (32 bit). – Загл. с экрана.

ISBN 978-5-00171-642-6

ISBN 978-5-00171-642-6

УДК 54
ББК 24я43
© Авторы статей, 2020

Содержание

Аналитическая химия	1
Высокомолекулярные соединения	165
Дисперсные системы и поверхностные явления	368
История химии	437
Катализ	448
Неорганическая химия I (студенты)	544
Неорганическая химия II (аспиранты и молодые учёные)	630
Органическая химия	677
Радиохимия и радиоэкология	984
Физическая химия I: молекулярное моделирование, спектроскопия, лазерная химия	1060
Физическая химия II: химическая термодинамика и химическая кинетика	1152
Физическая химия III: процессы с участием ионов и радикалов в конденсированных средах и на межфазных границах (электрохимия, химия высоких энергий, спиновая химия)	1244
Химическая технология и новые материалы	1298
Химия живых систем, нанобиоматериалы и нанобиотехнологии	1523



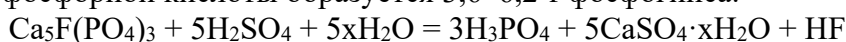
**Термодинамические свойства и фазовые равновесия
в системе $\text{H}_2\text{O}-\text{H}_2\text{SO}_4-\text{K}_2\text{SO}_4-\text{CaSO}_4$
Нестеров А.В.**

Аспирант, 1 год обучения

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
факультет наук о материалах, Москва, Россия*

E-mail: alexnest87@yandex.ru

Фосфогипс является побочным продуктом получения фосфорной кислоты экстракционным способом. При вскрытии апатита концентрированной серной кислотой с 1 т фосфорной кислоты образуется 3,6–6,2 т фосфогипса.



Всего ежегодно в России производится 15 млн тонн фосфогипса. Современные способы переработки фосфогипса являются экономически нерентабельными, поэтому довольно малая его часть отправляется на переработку, а большая его часть накапливается в отвалах. Одним из самых распространенных способов очистки твердых веществ является перекристаллизация. К сожалению, для перекристаллизации сульфата кальция не получится использовать переходы между его различными модификациями в виду длительности этих превращений. В лаборатории химической термодинамики химического факультета МГУ проводятся исследования, направленные на разработку новой технологии переработки фосфогипса, которая основана на проведении при определенных условиях превращения фосфогипса в сингенит ($\text{K}_2\text{SO}_4 \cdot \text{CaSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$), за счет чего примеси оказываются в растворе, а полученные кристаллы можно отделить. Превращение обратно из сингенита в гипс может осуществляться в присутствии серной кислоты. Полученный таким образом гипс уже имеет более высокую чистоту. Проблему выбора оптимальных условий, при которых эти процессы реализуются, возможно решить путем построения термодинамической модели многокомпонентной системы которая помимо воды, серной кислоты, сульфатов калия и кальция включает в себя соединения, содержащиеся в исходном сырье. В качестве объекта исследования в данной работе была выбрана система $\text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{SO}_4 - \text{K}_2\text{SO}_4 - \text{CaSO}_4$. Хотя существует термодинамическая модель многокомпонентной системы, включающая эту подсистему, но в ней наблюдается неудовлетворительное описание термодинамических свойств систем $\text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{SO}_4 - \text{K}_2\text{SO}_4 - \text{CaSO}_4$ и $\text{H}_2\text{O} - \text{K}_2\text{SO}_4 - \text{CaSO}_4$, что является недопустимым при моделировании с заделом на увеличение компонентности.

Целью настоящей работы стало описание равновесий жидкость-пар и жидкость-твёрдое в системе $\text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{SO}_4 - \text{K}_2\text{SO}_4 - \text{CaSO}_4$ в широком концентрационном и температурном диапазонах.

В данной работе для термодинамического моделирования была выбрана модель Питцера–Симмонсона–Клегга. Параметры модели для бинарных подсистем были взяты из литературы. Использование лишь параметров моделей бинарных подсистем, взятых из литературы, приводило к неудовлетворительному описанию фазовых равновесий в тройных системах. Введение параметров тройных взаимодействий позволяет описывать и предсказывать фазовые равновесия в тройных подсистемах в широком концентрационном и температурном диапазонах. Результаты расчетов нашей модели близки к экспериментальным данным в системе $\text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{SO}_4 - \text{K}_2\text{SO}_4 - \text{CaSO}_4$ с низким содержанием серной кислоты. Так как данные в четверной системе не использовались в оптимизации в настоящей работе, то они показывают предсказательную способность модели.

Построенная в настоящей работе модель будет полезна для оценки эффективности и создания технологической схемы для переработки фосфогипса, особенно в области низких и средних концентраций серной кислоты, где достигается удовлетворительное согласование с экспериментальными данными.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ 18-29-24167 мк.

