САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

\

МОРГУНОВА Ольга Евгеньевна

ОПТИМИЗАЦИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ГЕТЕРОГЕННЫХ ФИЗИКО - ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ

02.0. 04 - физическая химия

Диссертация на соискание ученой степени кандидата химических наук

Научный руководитель: засл. деятель науки РФ, профессор, д.х.н. Трунин А.С.,

Самара - 2005

ОГЛАВЛЕНИЕ

Условные обозначения и сокращения

ВВЕДЕНИЕ.

ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ.

Сущность комплексной методологии исследования много¬компонентных систем

Взаимосвязь и взаимовлияние развития инструментальных

методов и методологии исследования фазовых диаграмм

Визуально-политермический анализ и метод сечений

Дифференциально-термический анализ и проекционно¬термографический метод проф. A.G. Космынина

Дифференциальная сканирующая калориметрия и; калори¬метрический метод проф. A.G. Космынина

Методы планирования и оптимизации эксперимента при ис¬следовании фазовых диграмм. Моделирование фазовых

комплексов

Метод моделирования характеристик тройных эвтектик по данным об элементах огранения систем низшей мерности

Мартыновой-Сусарева.

Выводы и постановка задачи исследования

ЭЛЕКТРОННЫЙ ГЕНЕРАТОР ФАЗОВЫХ ДИА¬ГРАММ

Концепция электронного генератора фазовых диаграмм на

основе метода Мартыновой - Сусарева

Создание баз данных и структура генерации систем

Программа пересчёта концентраций

Описание алгоритма моделирования по Мартыновой - Суса-

і з

2.5. Формирование электронного отчёта. 55

2.6. Запуск программы 56

2.7. Руководство пользователя 57

2.7.1. Интерфейс программы. 57

2.7.2 Рекомендации по установке 63

фг 2.8. Апробация программы на эталонных трёхкомпонентных эв¬тектических системах 63

: 2.8.1. Система К // Cl, S04, W04 64

" 2.8.2. Система Li, Na, Sr//F. 65

2.8.3. Результаты апробации; 67

2.9. Оценка валидности метода компьютерного моделирования.. 69

2.10. Выводы по главе 2 73

3.0. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ 75

3.1. Инструментальные методы исследования и классификация

J используемых веществ 75

3.1.1. Визуально — политермический анализ. 76

3.1.2. Аппаратура и методика дифференциального термического

анализа и комплексного ДТА. 79

3.1.3. Рентгенофазовый анализ 82

3.2. Исследование погрешности определения состава и темпера¬туры эвтектики солевых систем. 82

і т

3.3. Моделирование характеристик эвтектик трёхкомпонентных

солевых систем и их экспериментальное подтверждение 84

3.3.1. Система Na//Br,N03)CNS. 85

3.3.2. Система Na // Br, NO3, М0О4 86

3.3.3. Система Na // Br, CNS, СН3СОО 87

3.3.4. Система Cd, Na, Pb // Br 88

3.3.5. Система Na//BO2, Cl, F 90

3.3.6. Система Na // BO2, Cl, SO4 91

Ф1

3.4. Моделирование характеристик эвтектик трёхкомпонентных водно-солевых и органических систем как основы для раз¬работки альтернативных топлив, и их экспериментальное подтверждение.

92

94

95

96

98

99

100

101

102

106

110

110

112

113

115

3.4.1. Система NH4NO3 - KN03 - CO(NH2)2.

З.4.2; Система NH4NO3 - KN03 - NaN03

3.4.3. Система CO(NH2)2~ KNG3 - NaNG3

3:4.4. Система К, NH4//N03-H20.

31.4.5; Система Na, NH4// N03-H20.

3:4.6. Система К, Na // N03-H20.

3.5. Моделирование характеристик эвтектик: стабильных секу¬

щих треугольников четырёхкомпонентных взаимных систем; и их экспериментальное подтверждение.

3.5.1. Моделирование и идентификация древа; фаз четрёхкомпо- нентной взаимной системы Са, Ва // F, Cl, М0О4

3.5.2. Исследование четырёхкомпонентной;взаимной• системы Na, Са, Ва // F, С1.

3.5.3. Моделирование и расчёт эвтектических характеристик ста-бильных секущих треугольников древ фаз ряда четырёхком-понентных взаимных систем.

3.5.3.1. Стабильный секущий треугольник KG1 - CaF2 - BaF2 четы-рёхкомпонентной взаимной системы К, Са, Ва// F, СП

3.5.3.2. Стабильный секущий треугольник NaF - CaF2 - K2W04 че-тырёхкомпонентной взаимной системы Na; К, Са // F, WO4...

3.5.3.3. Стабильный секущий треугольник NaF - КС1 - K2W04 че-тырёхкомпонентной взаимной системы Na, К // F, Cl; WO4....

3.6. Выводы по главе 3

4.0. ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ ЭГ В ПРАКТИКЕ

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ.

Ф 4.1. Хронометрирование временных и трудовых затрат при ис¬

следовании диаграмм плавкости методом сечений по дан- нымвизуально - политермическим анализа. 117

4.2. Хронометрирование временных и трудовых затрат при ис¬

следовании диаграмм плавкости методом? проекционное - термографическим методом проф. Космынина A.G. по дан¬ным ДТА. 124

4.3. Хронометрирование временных и трудовых затрат при мо¬

делировании характеристик трёхкомпонентных эвтектик ме¬тодом Мартыновой - Сусарева без применения компьютер¬ных технологий 128

4.4. Хронометрирование временных: и трудовых затрат при ис¬

следовании физико - химических; систем с помощью элек¬тронного генератора фазовых диаграмм 130і

4.5. Сравнительный? анализ эффективности применения; различ¬

ных методов ФХА в практике исследования трёхкомпонент¬ных эвтектических физико - химических систем. 132

4.6. Электронный генератор фазовых диаграмм как прототип

справочников и научной литературы по фазовым диаграм¬мам нового поколения. 134

4.7. Области применения электронного генератора фазовых диа¬грамм. 135

4.8. Пути развития идеологии электронного генератора фазовых

диаграмм 136

4.9. Выводы по главе 4. 137

ОБЩИЕ ВЫВОДЫ 139

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ. 141

Приложения

ОБЩИЕВЫВОДЫ

 Впервыепредложенаиреализованаконцепцияэлектронногогенераторафазовыхдиаграммупозволяющегоавтоматизироватьпроцессмоделированияэвтектическиххарактеристиктрёхкомпонентныхсистем

 Апробацияэлектронногогенераторафазовыхдиаграммнаэталонныхтрёхкомпонентныхсистемахпоказалачтопридостаточнойточностивводимыхданныхобэлементахограненияпогрешностьмоделированияэвтектикнепревышаетэкспериментальнойвсреднемпосоставамнеболеепотемпературе—менее

 СиспользованиемэлектронногогенераторавпервыеизученрядтрехкомпонентныхсолевыхэвтектическихсистемШГЪХГполученыхарактеристикиэвтектикстабильныхсекущихтреугольниковдревфазчетырёхкомпонентныхвзаимныхсолевыхсистемСаВаСМоСаВаКСаВаККиосуществленаихэкспериментальнаяидентификация

 ПолученыэвтектическиехарактеристикисистемсингредиентамиразрабатываемогоальтернативногонеуглеродоводородноготопливасовместносВостНИИгКемерово

 Применениеэлектронногогенераторафазовыхдиаграммвпрактикеисследованиятрёхкомпонентныхфизикохимическихсистемвозможноспроведениемединичногоподтверждающегоэкспериментаилибезтаковоготкпогрешностьмоделированиятемпературыисоставаэвтектикпосравнениюсданнымиэкспериментависследованныхсистемахсоставляетменее

 РазработаннаяметодикакомпьютерногомоделированияпозволилаоптимизироватьизучениефазовыхдиаграммтрёхкомпонентныхэвтектическихсистемВремяисследованиясокращаетсяснесколькихмесяцевприиспользованиитрадиционныхметодовдочасовсподтверждающимэкспериментомилибезпроведенияэкспериментадонесколькихминут

ВажнымдостоинствомэлектронногогенераторафазовыхдиаграммявляетсяширокаяобластьегоприменениянасолевыхводносолевыхорганическихиметаллическихсистемахЭтопозволяетиспользоватьегоприразработкеконкурентоспособныхнамировомрынкетехнологийпосозданиюновыхматериаловПрименениеэлектронногогенераторафазовыхдиаграммдаётвозможностьперейтикпринципиальноновомувидуэлектронныхсправочниковссамостоятельнойгенерациейданныхсиспользованиемеговисследовательскойпрактикеиучебномпроцессе