

**А.Н.Жигунов (5 курс, каф. ПФОТТ), Г.О.Карапетян, д.х.н., проф.**

## **КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ РАСТВОРЕНИЯ «АГРОВИТА»**

**ABSTRACT:** The program under a platform PC with operating system WINDOWS was designed for computer simulation of a dissolution kinetics of mineral fertilizer "AgrovitAkvo". The program estimates an invoice velocity of dissolution in several points on available data and predicts behaviour of a sample under other initial conditions. The formulas for calculation of a kinetics of dissolution are presented. The experimental dependencies are produced, the comparison of program operation with available experimental data is carried out.

Сельскохозяйственная деятельность непрерывно обедняет почву элементами, необходимыми для роста растений (калий, фосфор, азот, кальций, магний, бор). Значительная часть их расходуется на развитие растений, теряется с урожаем, и в почву не возвращается. Технологические операции обработки земельных угодий способствуют вымыванию из почвы дождевыми водами ценных компонентов или переходу их в формы, не пригодные для усвоения растениями. Природные минералы, как правило, не могут быть использованы в качестве удобрений, так как либо не усваиваются растениями (например, апатиты, фосфориты), либо с ними вносятся вредные для растений элементы (хлор, тяжелые металлы).

С учётом недостатков существующих технологий производства удобрений можно сформулировать ряд общих требований к предлагаемой новой технологии производства минеральных удобрений:

- конечный продукт должен иметь заданный состав и структуру, обеспечивающую полное усвоение продукта растениями;
- в идеале нужно стремиться к безотходной технологии производства удобрений;
- необходимо максимальное снижение энергозатрат на единицу продукции.

Вопросы состава и структуры минеральных удобрений и технологии их производства были решены на основе использования свойств фосфатных стёкол. Применение стеклообразных удобрений не связано с использованием токсичных, огне- и взрывоопасных растворителей и значительно снижает загрязнение промышленных сточных вод, что имеет большое значение в агропромышленном комплексе.

АгровитАкво вносится в почву один раз в 3-4 года и в течении всего этого срока не требуется подкормка растений, так как вымывание и выветривание стеклообразных удобрений исключается.

Одной из важнейших характеристик АгровитАкво является его растворимость. При  $T=10...20$  °С полное растворение гранул происходит за 3 года. При увеличении температуры скорость растворения резко возрастает.

Основной проблемой при рассмотрении процесса растворения является согласование математических данных с экспериментальными и прогнозирование поведения вещества при других условиях.

Мы рассматривали однородный однокомпонентный твёрдофазный материал в виде гранулы. Поверхность материала однородна и изначально не имеет микрорельефа. В конечном варианте рассматривается гранула в виде сферического зерна идеальной формы начального радиуса  $r_0$ [м]. Также известна плотность материала и то, что она одинакова по всему объёму. Т.о. начальная масса:

$$m_0 = \frac{4}{3} \pi \rho r_0^3$$

Для упрощения будем считать контакт жидкости с поверхностью идеальным. Процесс растворения протекает в интервале температур  $T_1...T_2$ , °С; Температурные градиенты отсутствуют. В рассматриваемом интервале температур объёмные свойства твёрдого материала и жидкости считаем постоянными, фазовых переходов нет. Растворение эквимолярное, явления селективного выщелачивания и гидролиза отсутствуют. Растворение твёрдой фазы равномерное, форма твёрдого материала сохраняется. Явления сольватации (взаимодействие между частицами (ионами, молекулами; сольватация в водных растворах называется гидратацией) растворяемого вещества и частицами растворителя) и образования двойного заряженного слоя не учитываются. Известна предельная равновесная растворимость материала в жидкости при заданной температуре  $C_{нас}$  [кг/м<sup>3</sup>]. Закон зависимости растворимости от температуры неизвестен. Скорость растворения много меньше скорости диффузии. Мы, в сущности, имеем два процесса диффузии. При помещении гранулы в воду, происходит разрыв связей =Р-О-Р=. Таким образом, имеем гранулу, окружённую положительными зарядами. Это, конечно, притягивает дипольные молекулы воды, которые в свою очередь проникают в гранулу и способствуют растворению.

Т.о. имеем процессы диффузии воды в гранулу (описывается одним законом) и растворенного вещества – в жидкость (описывается другим законом).

Нами разработана программа, которая по введённым данным вычисляет время растворения. Изменяя радиус с небольшим шагом, программа подставляет вычисленную константу скорости растворения и данные из полей в формулу:

$$t = \frac{\rho}{b \cdot C_{нас}} \left[ h^2 \left( \frac{1}{h+r} - \frac{1}{h+R_0} \right) + \left( 1 + \frac{b}{k} + \frac{b \cdot h}{D} \right) (R_0 - r) + h \cdot \left( 2 + \frac{b \cdot h}{D} \right) \ln \left( \frac{h+r}{h+R_0} \right) \right]$$

Плотность  $\rho$  вычисляется по известным данным по формуле:

$$\rho = \frac{m}{\frac{4}{3} \pi R_0^3}$$

где:  $t$ - время растворения;  $k$ - константа скорости растворения;  $C_{нас}$ - предельная равновесная растворимость материала в жидкости;  $D$ - коэффициент диффузии вещества через слой жидкости;  $m$ - начальная масса гранулы;  $r$ - текущий радиус;  $R_0$ - начальный радиус новой гранулы;  $h$ - слой жидкости постоянной толщины на поверхности гранулы;  $b$ - неотрицательная функция, характеризующая локальную скорость поглощения. Эта константа появляется, когда мы рассматриваем внешнюю поверхность жидкого слоя, на которой происходит поглощение растворённого вещества. Здесь рассматривается поглощение растворенного вещества контактным слоем почвы. Закон поглощения, вообще говоря, неизвестен. Из практических соображений необходимо задавать граничное условие потока концентрации через этот слой. Скорость поглощения растворенных веществ зависит от их концентрации в растворе.

Полученные данные совпадают с экспериментальными результатами в области наличия последних и прогнозируют дальнейшее поведение образца. Это означает, что выбранный подход к решению задачи, в целом, оправдал себя и расчёт по приведённым формулам дал верный результат. Программа может быть использована для любого гранулированного удобрения при наличии соответствующих данных.

#### ЛИТЕРАТУРА:

1. Карапетян Г.О. Карапетян К.Г., Минеральные удобрения XXI века в свете проблем экологии //Научно-технические ведомости СПбГТУ, Изд-во СПбГТУ, 2000. - №1(19) – с. 76-83
2. Коттон Ф., Уилкинсон Дж. Современная неорганическая химия, ч.3. Химия переходных элементов. – М.: Мир, 1969. - 595 с.
3. Tagantsev D.K., Karapetyan G.O. Decrystallization of crystallized glasses by ion exchange// Journal of Non-Crystalline Solids, ELSEVIER, 1999 -№ 255 – с. 185-192.