

З. Т. Динь, С. А. Бахтеев, Р. А. Юсупов

**МОДЕЛИРОВАНИЕ РАВНОВЕСИЙ В СИСТЕМЕ $\text{CuSO}_4 - \text{H}_2\text{O} - (\text{NH}_4)_2\text{SO}_4 - \text{OH}^-$
ПРИ ВЫСОКИХ КОНЦЕНТРАЦИЯХ CuSO_4 НА ОСНОВЕ ЭКСПЕРИМЕНТА
ПО ОСТАТОЧНОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ, ПОТЕНЦИОМЕТРИЧЕСКОГО ТИТРОВАНИЯ
И ИЗМЕРЕНИЯ pH ГИДРОЛИЗА (Сообщение 2)**

Ключевые слова: равновесия, водные растворы, осадки соединений меди(II), рентгенофлуоресцентный анализ, сульфат меди.

Предложен алгоритм расчета констант равновесий в системах содержащих много осадков. Для расчета областей образования осадков применены четыре условия насыщенности раствора: 1. Правило произведения растворимости; 2. Правило молекулярной растворимости; 3. Правило растворимости по интермедиату; 4. Условие выделения приоритетного осадка. Данная методика использована для построения математической модели равновесий в системе $\text{CuSO}_4 - \text{H}_2\text{O} - (\text{NH}_4)_2\text{SO}_4 - \text{OH}^-$ от pH раствора и высокой концентрации Cu(II) (более 0,05 моль/л). Математическая модель системы создана для оптимизации синтеза целевых соединений.

Keywords: equilibrium, aqueous solutions, precipitation of Cu(II) compounds, X-ray fluorescence analysis, copper sulfate.

The algorithm for the calculation of equilibrium constants in systems containing a lot of precipitations was suggested. For the calculation of the formation of precipitation areas used four conditions saturation of the solution: 1. Rule of solubility 2. Rule molecular solubility 3. Rule solubility intermediates, 4. The condition of the sedimentation priority. This methodology is used to construct a mathematical model of the equilibrium in the system $\text{CuSO}_4 - \text{H}_2\text{O} - \text{OH}^-$ as the function of pH and the high concentration Cu(II) (more then 0,05 mol/l). A mathematical model of the system is designed to optimize the synthesis of desired compounds.

Введение

При высоких концентрациях Cu(II) в системе $\text{CuSO}_4 - \text{H}_2\text{O} - (\text{NH}_4)_2\text{SO}_4 - \text{OH}^-$ молярные доли полиядерных и гетеролигандных соединений значительно возрастают [1]. Представленные в сообщении 1 значения констант, позволяющие описать области существования соединений при концентрациях Cu(II) менее 0,1 моль/л, также позволяют описать эти области при концентрации Cu(II) до 1 моль/л [2]. Ниже представлены экспериментальные и расчетные данные по областям существования соединений при концентрациях до 1 моль/л.

Экспериментальная часть и обсуждение результатов

Методика проведения эксперимента изложена в сообщении 1.

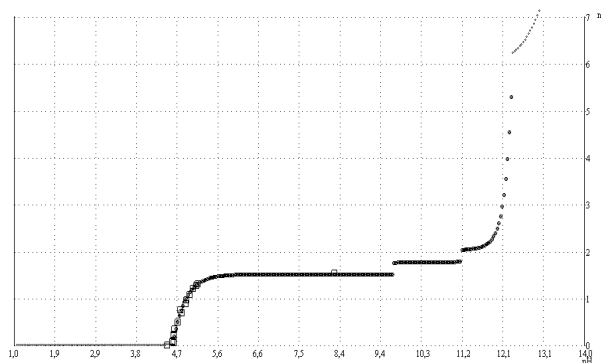


Рис. 1 - Экспериментальные и расчетные кривые потенциометрического титрования системы $\text{CuSO}_4 - \text{H}_2\text{O} - \text{NaOH}$ при концентрации Cu(II) 0,0798 моль/л

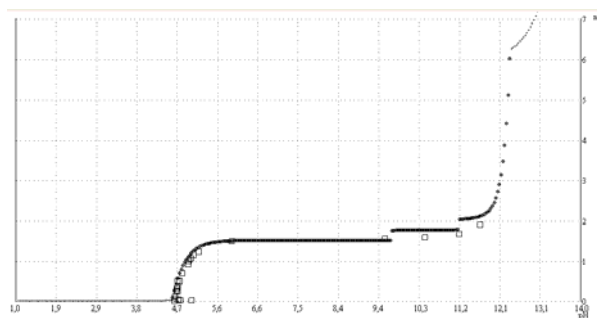


Рис. 2 - Экспериментальные и расчетные кривые потенциометрического титрования системы $\text{CuSO}_4 - \text{H}_2\text{O} - \text{NaOH}$ при концентрации Cu(II) 0,081 моль/л

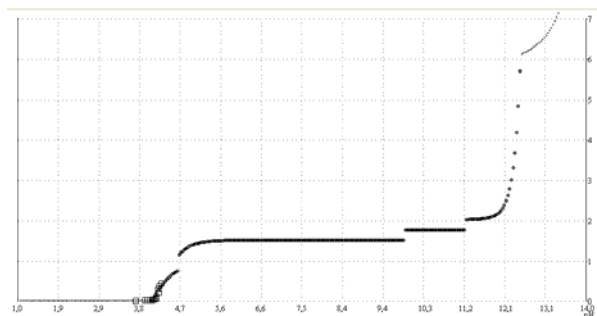


Рис. 3 - Экспериментальные и расчетные кривые потенциометрического титрования системы $\text{CuSO}_4 - \text{H}_2\text{O} - \text{NaOH}$ при концентрации Cu(II) 0,81 моль/л

Заключение

Рассчитаны константы равновесий на основе данных эксперимента по потенциометрическому титрованию. Создана математическая модель равновесий в системе $\text{CuSO}_4 - \text{H}_2\text{O} - \text{OH}^-$ при высоких концентрациях Cu(II) , предназначенная для планирования эксперимента и синтеза соединений Cu(II) .

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-

технологического комплекса России на 2007 – 2013 годы» по госконтракту 16.552.11.7060.

Литература

1. Девятков, Ф.В. Гидролитические свойства нитратов Ni(II) , Cu(II) , Dy(III) / Ф.В. Девятков, А.В. Рубанов // Ученые записки Казанского государственного университета. – 2006. – Т.148. – Кн.1. – С. 92-101.
- Динь З.Т., Бахтеев С.А., Юсупов Р.А. Расчет констант равновесий с учетом образования осадков на основе эксперимента по остаточной концентрации на примере системы $\text{Sn(II)}-\text{H}_2\text{O}-\text{OH}^-$ // Вестник Казанского технологического университета. 2013. №4. №16. С.92-94.

© **З. Т. Динь** – асп. каф. аналитической химии, сертификации и менеджмента качества КНИТУ КНИТУ, gnudktvn@gmail.com;
С. А. Бахтеев – канд. хим. наук, асс. каф. аналитической химии, сертификации и менеджмента качества КНИТУ, said-bah@yandex.ru; **Р. А. Юсупов** – д-р хим. наук, проф. той же кафедры, yusupovraf@yandex.ru.