

были представлены частицами вытянутой формы в виде нитей, соломинок и т.д. с максимальным размером до 5 мм.

Были проведены эксперименты на ЗАО «Городские очистные сооружения» по очистке сточных вод на угольном фильтре на основе посеребренного угля БАУ, угле БАУ и фильтре с набивкой полипропиленовым волокном при постоянном расходе воды – 0,4 л/мин и 0,9 л/мин и объеме фильтрующей насадки 5 литров. Фильтры на углях характеризуются малой емкостью по загрязнениям, но более тонкой очисткой от  $\text{NO}_2^-$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{NH}_3$ .

Из представленных результатов можно сделать вывод, что на первой стадии очистки сточных вод следует производить на волокнистых насадках, а доочистку на угольных.

На основе проведенных экспериментов была разработана типовая серия малогабаритных установок с производительностью от 100 до 400 л/час для хозяйствственно-питьевого водоснабжения. В этом проекте использован безреагентный метод очистки воды на фильтрах с волокнами из полипропилена с упрощенной аэрацией и финишной микробиологической доочисткой воды фильтрацией через цеолит, в решетку которого были внедрены ионы серебра (Заключение Центра государственного санитарно-эпидемиологического надзора в Томской области №806 от 31.05.2001 г.). Полипропиленовое волокна, полученное по технологии [2] и использованное в лабораторных исследованиях, было сертифицировано госсанэпиднадзором Томской области (Санитарно-эпидемиологическое заключение №70.ТС.03.515.П.000316.03.05 от 16.03.2005 г.). Питание установки предусмотрено от сети переменного тока  $\approx 220$  В, установка может подключаться к централизованному водопроводу или индивидуальной скважине, кроме того, напорный бак установки может наполняться вручную из любого источника воды.

Станции сертифицированы Федеральной

службой по надзору в сфере защиты прав потребителей и благополучия человека по Томской области санитарно-эпидемиологическим заключением № 70.ТС.369.Т.001403.01.06 от 11.01.2006 г.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

- Новиков Ю.В., Сайфутдинов М.М. Вода и жизнь на земле. Издательство «Наука», 1981.
- Патент (РФ) № 2179600 "Установка для получения волокнистых материалов из утиля и отходов термопластов" / В.В. Бордунов, С.В. Бордунов, И.А. Соболев // Заявл. 24.10.2000. Опубл. 20.02.2002. Бюл.

#### ПРОГРАММА РАСЧЕТА РАВНОВЕСИЯ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В ШИРОКОМ ИНТЕРВАЛЕ ТЕМПЕРАТУР

Косинцев В.И., Сечин А.И., Бордунов С.В., Куликова М.В., Прокудин И.А., Косинцев М.В.  
Томский политехнический университет  
Томск, Россия

В химической термодинамике изучается применение законов термодинамики к химическим и физико-химическим явлениям. В ней рассматривается главным образом: тепловые балансы процессов, включая тепловые эффекты физических и химических процессов; фазовые равновесия для индивидуальных веществ и смесей; химическое равновесие.

Важнейший параметр, характеризующий обратимую химическую реакцию – константа равновесия  $K$ . Расчеты константы равновесия очень важны для практики.

Расчет константы равновесия химических реакций осуществляется как функция температуры и давления. Облегчения, внесенные за последнее время в методику точных расчетов, не сделали их легкими и достаточно быстрыми. Так третье приближение Улиха [1].

$$\Delta G_0 = \Delta H^0_{298} - T \cdot \Delta S_{298} + \Delta Cp[T - 298,16 - T \cdot \lg T/298,16] \quad (1)$$

дающее результаты, немного отличающиеся от результатов точных расчетов, громоздко, так как связано со сложными вспомогательными расчетами, отнимающими много времени и труда. Значительное упрощение в методику точных методов расчета равновесия внесли Тёмкин и Шварцман [2] за счет предварительного табулирования всех температурных функций, входящих в формулу для определения логарифма константы равновесия химической реакции. Дальнейшее развитие методов Улиха, Темкина, Шварцмана было продолжено в работах Владимира [3, 4]. Отличительной чертой метода Владимира [3, 4] является предварительное табулирование не только температурных функций уравнения логарифма константы равновесия, но и функций эн-

талпии системы  $\Delta H^0$ , изменение энтропии ее  $\Delta S^0$  и изменения коэффициентов для теплоемкостей всех участков реакций  $\Delta Cp$ . Недостатком метода, является опять все тоже предварительное табулирование, а вместе с ним, для широких интервалов температур, и утомительных действий, отнимающих много времени.

С целью ускорения вышеизложенных работ была составлена программа вычисления на современной ЭВМ в редакторе XL в виде простоты программирования, удобного ввода и вывода данных.

Остановимся подробнее на методе [5] расчета равновесия, учитывающем зависимость  $\Delta H = f(T)$ , с помощью которого были введены уравнения  $\lg K_p = f(T)$ , и сосчитаны  $\Delta H$ ,  $\lg K_p$  в ин-

тервале температур  $100 \div 1000^{\circ}\text{C}$  обычным методом, а затем составлена и отработана программа в редакторе XL.

Влияние температуры на константу равновесия описывается уравнением Вант-Гоффа [6].

$$\frac{d \ln K_p}{dT} = \frac{\Delta H^\theta}{RT^2} \quad (2)$$

где,

$\Delta H^\theta$  – стандартный тепловой эффект реакции;

$R$  – универсальная газовая постоянная;

$T$  – температура в  $^{\circ}\text{K}$ ;

$K_p$  – константа равновесия.

В случае точного расчета и при больших температурных интервалах уравнение (45) учитывает зависимость теплового эффекта реакции от температуры. Для этого подставим уравнение:

$$\Delta Cp = \Delta a + \Delta b \cdot T + \Delta c \cdot T^2 + \Delta c' \cdot T^3 \quad (3)$$

В уравнение закона Кирхгофа [6]

$$\left( \frac{d(\Delta H)}{dT} \right) p = \Delta Cp \quad (4)$$

Интегрируя, получим:  $\Delta H = f(T)$  в конечной формуле:

$$\Delta H = \Delta H_0 + \Delta a \cdot T + \frac{1}{2} \Delta b \cdot T^2 + \frac{1}{3} \Delta c \cdot T^3 - \Delta c' \cdot T \quad (5)$$

Сочетая уравнение (2) с уравнением (5) и интегрируя, получим:

$$\ell g K_p = - \frac{\Delta H_0}{4,575 \cdot T} + \frac{\Delta a}{1,987} \cdot \ell g T + \frac{\Delta b}{9,15} \cdot T + \frac{\Delta c}{27,45} \cdot T^2 + \frac{\Delta c'}{9,15} \cdot T^3 + J''$$

В соответствии с уравнением изобары химической реакции

$$\begin{aligned} \Delta G_0 &= -R \cdot T \cdot \ell n K_p = -4,575 \cdot T \cdot \ell g K_p \\ \Delta G_0 &= \Delta H^\theta - \Delta a \cdot T \cdot \ell n T - \frac{1}{2} \Delta b \cdot T^2 - \frac{1}{6} \Delta c \cdot T^3 - \frac{1}{2} \Delta c' \cdot T^3 + J \cdot T \end{aligned} \quad (6) \quad (7)$$

где  $J = 4,575 \cdot J''$

В уравнениях 5-7 неизвестными величинами являются  $\Delta a$ ,  $\Delta b$ ,  $\Delta c$ ,  $\Delta c'$ ,  $\Delta H_{298}$ ,  $\Delta G_{298}$ ,  $\Delta H^\theta$ ,  $J$ , которые находятся в соответствии уравнений:

$$\Delta H_{298} = \sum \Delta H_{298(\text{прод.)}} - \sum \Delta H_{298(\text{уч.)}} \quad (8)$$

$$\Delta G_{298} = \sum \Delta G_{298(\text{прод.)}} - \sum \Delta G_{298(\text{уч.)}} \quad (9)$$

$$\Delta a = \sum \Delta a_{(\text{прод.)}} - \sum \Delta a_{(\text{уч.)}} \quad (10)$$

$$\Delta b = \sum \Delta b_{(\text{прод.)}} - \sum \Delta b_{(\text{уч.)}} \quad (11)$$

$$\Delta c = \sum \Delta c_{(\text{прод.)}} - \sum \Delta c_{(\text{уч.)}} \quad (12)$$

$$\Delta c' = \sum \Delta c'_{(\text{прод.)}} - \sum \Delta c'_{(\text{уч.)}} \quad (13)$$

Коэффициенты  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $c'$  и  $\Delta H_{298}$ ,  $\Delta G_{298}$  берутся с учетом стехиометрических коэффициентов уравнения рассчитываемых реакций. Для нахождения  $\Delta H_0$ , которые являются экстраполяци-

онной константой подставим в уравнение (5) значения  $\Delta a$ ,  $\Delta b$ ,  $\Delta c$ ,  $\Delta c'$  при  $T = 298^{\circ}\text{K}$  и  $\Delta H_{298}$  получим в случае высоких температур:

$$\Delta H_0 = \Delta H_{298} - (\Delta a \cdot 298 + \frac{\Delta b}{2} \cdot 298^2 + \frac{\Delta c}{3} \cdot 298^3 - \frac{\Delta c'}{298}) \quad (14)$$

Для нахождения  $J$  подставим значения  $\Delta H_0$  (14),  $\Delta G_{298}$  и  $T = 298^{\circ}\text{K}$  в уравнение (7), получим

$$J = (\Delta G_{298} - \Delta H_0)/T + \Delta a \cdot \ell n T + 1/2 \cdot \Delta b \cdot T + 1/6 \cdot \Delta c \cdot T^2 + 1/2 \cdot \Delta c' \cdot T^3 =$$

$$=(\Delta G_{298}-\Delta H_0)/298)+\Delta a \cdot 5,69+\Delta b \cdot 149+\Delta c \cdot 14801+\Delta c' \cdot 5,63 \cdot 10^6 \quad (15)$$

Подставим значения 8-15 в 5 получим:

$$\ell g K_p = \frac{-\Delta H^\circ/T + \Delta a \cdot 2,3 \cdot \ell g T + \frac{1}{2} \Delta b \cdot T + \frac{1}{2} \cdot \Delta c' \cdot T^2 + J''}{4,575} \quad (16)$$

Параллельно энталпийному методу был выстроен алгоритм и проведены вычисления энтропийного метода определения термодинамических параметров.

Связь энтропии с термодинамическими параметрами описана следующими уравнениями [5]:

$$\frac{d G}{d T} = -S \quad (17)$$

$$T dS = C dT \quad (18)$$

Интегрируя уравнение (2) совместно с (58) получаем:

$$\Delta S = S_0 + \Delta a \ln T + \Delta b \cdot T + 1/2 \Delta c \cdot T^2 - 1/2 \Delta c' \cdot T^2 \quad (19)$$

Интегрируем (17) совместно с (19):

$$\Delta G = - (S_0 \cdot T + \Delta a \cdot T \cdot \ln T - \Delta a \cdot T + 1/2 \Delta b \cdot T^2 + 1/6 \Delta c \cdot T^3 + 1/2 \Delta c' \cdot T^2) + J \quad (20)$$

Для нахождения  $\Delta S_0$  в уравнение (19) подставляем значения  $\Delta a$ ,  $\Delta b$ ,  $\Delta c$ ,  $\Delta c'$  при  $T = 298$   $^{\circ}$ К и  $\Delta S_{298}$ . Значение  $J$  определяется по уравнению (20) при  $T = 298$   $^{\circ}$ К и  $G_{298}$ .

Значение энталпии  $\Delta H_t$  определяется из уравнения

$$\Delta G = \Delta H_m - T \Delta S_m \quad (21)$$

В соответствии с уравнением изобары химической реакции

$$\Delta G_0 = - R \cdot T \cdot \ell n K_p = - 4,575 \cdot T \cdot \ell g K_p$$

Определяем

$$\ell g K_p = - \Delta G_0 / R \cdot T \cdot 2,303 \quad (22)$$

Результаты расчета, полученные энталпийным и энтропийным методами в редакторе XL показали хорошую сходимость с результатами термодинамических расчетов проведенных программами «Астра-4» и «ТЕРРА» [7]. Расчеты в редакторе XL удобны и быстры. Достаточным условием для проведения расчетов является внесение следующих исходных данных:  $H_{298}$ ,  $G_{298}$ ,  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $c'$  компонентов смеси, необходимых для расчета  $\Delta C_p$ ,  $\Delta H_t$ ,  $\ell g K_p$ .

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Уилих Г. Успехи химии. № 2-3, 1940.
2. Темкин М.И., Шварцман Л.А. Вспомогательная таблица для расчетов по химической термодинамики. «Успехи химии», вып. 2, 1948.
3. Владимиров Л.П. Ускоренные методы термодинамических расчетов химических реакций. Издательство ЛГУ, 1956 г.
4. Владимиров Л.П. Практический точный метод расчета констант равновесия газовых реакций. Научные записки ЛПИ Выпуск XXIII. 1955.
5. Карапетянц М.Х. Химическая термодинамика. Госхимиздат, 1953.
6. Зельдович Я.Б., Полярный А.И. Расчеты тепловых процессов при высоких температурах. Изд-во Б.Н.И. 1947.

7. Пушкирев А.И. Газообразные плазмохимические процессы, инициируемые импульсным электронным пучком. Автореферат диссертации на соискание ученой степени д.ф.м.н, г. Томск, 2007 г. (Автоматизированная система термодинамических расчетов «TERRA» в интервале температур 300-10000  $^{\circ}$ К и давлении исходной смеси 0,01-0,1 МПа).

**ПРАКТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПОЛУЧЕНИЯ  
МУЧНЫХ КОНДИТЕРСКИХ ИЗДЕЛИЙ  
ПРОФИЛАКТИЧЕСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ**  
Красина И.Б., Джакимова О.И., Аракчеева О.А.  
ГОУ ВПО «Кубанский государственный  
технологический университет»  
Краснодар, Россия

Согласно принятым нормативам, продукт питания считается функциональным, если он имеет благоприятное влияние на определенные функции организма человека, или если при его употреблении снижается риск возникновения какого-либо заболевания. Под это определение, например, подходят продукты, несущие в своем составе биологические субстанции - пробиотики,