

Литература

1. Виноградов А. П. Средние содержания химических элементов в главных типах изверженных горных пород земной коры // Геохимия, 1962. - № 7. - С. 555—571.
2. Мизандронцев И.Б. Химические процессы в донных отложениях водоемов. –Новосибирск: Изд-во Наука, 1990. – С.175.
3. Перельман А.И. Геохимия природных вод 2003. – М.: Изд-во Наука, 1982. – С.154.

Разработка информационной технологии и компьютерный менеджмент качества неорганических кислот особой чистоты

д.т.н. проф. Бессарабов А.М., Трынкина Л.В., Казаков А.А., Трохин В.Е.
Научный центр «Малотоннажная химия»
bessarabov@nc-mtc.ru

Аннотация. При создании технологии получения ассортимента неорганических кислот особой чистоты нами была разработана информационная база данных гибкого производства, включающего 7 типовых аппаратурных модулей: химической очистки, ректификации, десорбции, адсорбции, абсорбции, коррекции состава и фильтрации. Для аналитического мониторинга особо чистых неорганических кислот на основе информационных PALS-технологий разработана система компьютерного менеджмента качества.

Ключевые слова: особо чистые вещества, неорганические кислоты, база данных, компьютерный менеджмент качества, PALS-технология

Среди веществ особой чистоты немаловажную роль играют высокочистые неорганические кислоты, применяющиеся в таких областях народного хозяйства, как атомная энергетика, микроэлектроника, полупроводниковая техника, волоконная оптика и др. В последнее время промышленное производство неорганических кислот реактивной квалификации и особой чистоты характеризуется существенным ростом требований потребителей продукции к такому понятию, как качество. Прежде всего качество особо чистой кислоты определяется содержанием в ней лимитируемых микропримесей. При выборе способов очистки предпочтение отдается методам, в которых ограничена возможность внесения дополнительных загрязнений [1, 2].

Для глубокой очистки в основном применяются такие процессы, как адсорбция, абсорбция, ректификация и т.д. В этих процессах обеспечивается очистка особо чистых кислот до содержания отдельных примесей на уровне 10^{-6} - 10^{-8} % масс. Целью данной работы является информационная поддержка при синтезе производства ассортимента неорганических кислот особой чистоты (соляной, плавиковой, хлорной и азотной) на основе общих принципов формирования гибких технологических схем из типовых модулей [3].

Разработка модульной технологии осуществлялась путем такого сочетания отдельных технологических процессов, которое дает возможность использования максимального разнообразия исходного сырья. В качестве примера такого синтеза приводится разработка технологий высокочистых азотной и хлорной кислот [2] на одной технологической линии, и галогеноводородных кислот (плавиковой и соляной) – на другой [1]. При этом во втором случае имеет место возможность использования практически всех возможных видов исходного сырья (газ, концентрированные и разбавленные кислоты), представленного на рынке химических продуктов.

Созданная нами новая технология получения ассортимента неорганических кислот особой чистоты базируется на 7 типовых аппаратурных модулях: химической очистки, ректификации, десорбции, адсорбции, абсорбции, коррекции состава и фильтрации. При созда-

нии информационной технологии для проектирования данного производства нами была разработана структура информационной базы данных (см. рисунок 1). На верхнем уровне представлены 2 класса веществ: «Органические химические вещества 71.080» и «Неорганические химические вещества 71.060» (согласно Международному классификатору стандартов).

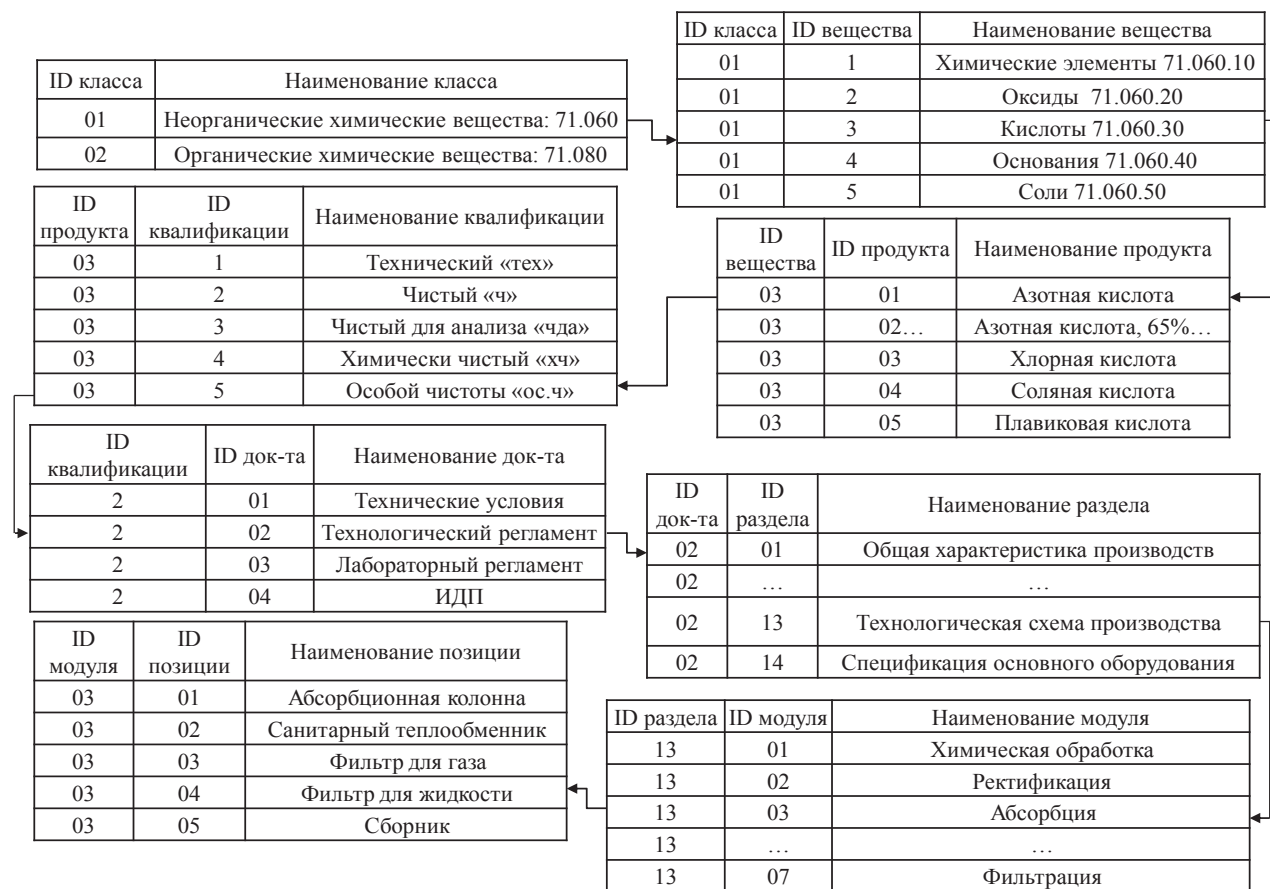


Рисунок 1. Структура информационной базы данных для разработки технологического регламента модульного производства ассортимента неорганических кислот особой чистоты

Рассматриваемые вещества – хлорная, азотная, соляная и фтористоводородная кислоты – относятся к классу неорганических веществ (код – 71.060) и относятся к «Неорганическим кислотам» – код 71.060.30. Эта информация представлена табличными полями «Наименование класса» и «Наименование вещества». Названия используемых продуктов представлены в поле «Наименование продукта», в данном случае содержащим наименования получаемых по нашей технологии кислот: азотная кислота, азотная кислота 65%, хлорная кислота, соляная кислота, плавиковая кислота. Как видно из примера, здесь также может содержаться информация о концентрации основного вещества. Следующая подкатегория «Наименования квалификации» содержит папки с информацией о квалификации выбранного продукта по чистоте: технический «тех», чистый «ч», чистый для анализа «чда», особой чистоты «ос.ч». Выбор определенной квалификации направляет нас в подкатегорию «Наименования документа», который отражает названия основных технических документов при производстве данного продукта: технические условия, технологический регламент, лабораторный регламент и исходные документы для проектирования. Подкатегория «Наименования раздела» содержит информацию о разделах выбранного документа, в данном случае технологического регламента. На данном рисунке показано обращение к папке «Технологическая схема производства», продолжением которой является подкатегория «Наименования модуля». Эта

подкатегория содержит папки с названиями модулей, составляющих данную установку: химическая обработка, ректификация, абсорбция, фильтрация, а также десорбция, адсорбция и коррекция состава (последние на рисунке не показаны). Обращение к папке соответствующего модуля приводит к заключительной подкатегории, которую иллюстрирует табличное поле «Наименование позиции». В нем представлены наименования позиций – название каждого элемента, составляющего выбранный модуль.

Для аналитического мониторинга ассортимента неорганических кислот нами разработана система компьютерного менеджмента качества (КМК-система) [4]. Система разработана на основе информационной CALS-технологии (Continuous Acquisition and Life cycle Support — непрерывная информационная поддержка жизненного цикла продукта) и включает 4 иерархических информационных уровня: анализируемое вещество, показатели качества, методы анализа, аналитические приборы.

На верхнем уровне рассматриваются выпускаемые нами неорганические кислоты. На втором уровне иерархии проводится структурирование по каждому рассматриваемому веществу с целью группировки по областям применения и кластерам «показатели качества». В каждом конкретном случае «показатели» определяются особенностями применения кислоты. Например, для серной кислоты рассматриваются области применения: микроэлектроника – серная кислота «ос.ч 11-5» (ГОСТ 14262), «ос.ч 25-5» (ТУ 2612-00229402564-01), «ос.ч 5-5» (ГОСТ 14262), основными критериями качества для микроэлектроники являются катионы металлов на уровне 10^{-5} – 10^{-7} % массовых и в качестве перспективного показателя качества серной кислоты для микроэлектроники заказчики предлагают в будущем учитывать взвешенные частицы.

В КМК-систему занесены показатели качества неорганических кислот реактивной квалификации. В серной кислоте «хч» (ГОСТ 4204) для органического, неорганического синтеза и лабораторной практики нормируются следующие показатели: остаток после прокаливания; вещества, восстанавливающие перманганат калия. В серной кислоте для пищевой промышленности «хч» (ГОСТ 4204) нормируются тяжелые металлы, мышьяк, нитраты, железо, селен, а при производстве этилового спирта в серной кислоте «хч» (ГОСТ 4204) гостится такой показатель, как проба Савала. В реакциях алкилирования для производства двуокиси титана, анилиновых красителей, при производстве пергаментной бумаги – серная кислота «чда» (ГОСТ 4204), в которой нормируются все те же показатели, что и в квалификации «хч», но только допускаются более низкие нормы качества. В процессах очистки нефти, карбонизации шерстяных тканей, извлечения урана из уранита, в процессе травления железа и стали, при производстве взрывчатых веществ, электролитов, для производства удобрений и искусственного волокна – серная кислота «ч» (ГОСТ 4204) или техническая (ГОСТ 2184).

На 3-м уровне КМК-системы рассматриваются методы анализа. Последний 4-й уровень иерархии связан с аналитическим контролем соответствующих примесей. Для аналитического контроля качества кислот особой чистоты применяется современное аналитическое оборудование. Для его выбора используется база данных аналитических приборов, используемых в технологии получения химических реактивов и особо чистых веществ. Использование приборов и единых методик при проведении анализа содержания примесей элементов, кислот в форме анионов и взвешенных частиц позволяет унифицировать подготовку, проведение исследований и интерпретацию их результатов для всех кислот.

На основе проведенных анализов неорганических кислот реактивных квалификаций и особой чистоты был составлен перечень основных показателей качества, занесенный в КМК-систему. Для всех кислот можно выделить несколько общих примесей и методов их анализа: основное вещество определяется титриметрией, но процент погрешности данного метода составляет 10%; и поэтому в качестве альтернативы данному методу можно предложить ВЭЖХ; физико-химические показатели (массовая доля нелетучих веществ, остаток после прокаливания и остаток после прокаливании в виде сульфатов) определяются гравиметриче-

ским методом и альтернативных методов для данного показателя не существует; массовая доля анионов (сульфаты, фосфаты, хлориды, сульфиты, силикаты) определяется фотометрическим методом; массовая доля примеси элементов (алюминия, бора, висмута, галлия, железа, золота, индия, кадмия, калия, кальция, кобальта, кремния, магния, марганца, меди, мышьяка, натрия, никеля, олова, ртути, свинца, селена, серебра, сурьмы, титана, хрома, цинка) определяется методом масс-спектропии с индуктивно связанной плазмой (ИСП-МС). Альтернативой является атомно-эмиссионная спектроскопия и атомно-абсорбционная спектроскопия, но альтернативные методы не позволяют определить весь спектр элементов на уровне требований к кислотам особой чистоты; примесь мышьяка можно определять фотометрически, метод достаточно чувствителен как для кислот реактивной квалификации, так и для кислот особой чистоты, но данная методика трудна в исполнении и воспроизведении, а также требует построения калибровочных графиков с применением эталонов.

Нами был проведен ряд анализов соляной кислоты на содержание кремния по гостированной методике ГОСТ 10671.1. Метод основан на определении кремнекислоты в неокрашенных растворах реактивов по окраске молибденовой сини с применением в качестве восстановителя двойной сернокислой соли закиси железа и аммония (соль Мора) и последующим его фотометрическим определением. Ввиду того, что данная методика трудна в исполнении и воспроизведении, а также требует построения калибровочных графиков с применением эталонов, нами был предложен альтернативный метод, метод ИСП-МС.

В поданной нами на аттестацию методике проводится унифицирование пробоподготовки при проведении анализа минеральных кислот на примеси элементов. Метод заключается в пропорциональном разбавлении образцов высокочистой водой в зависимости от искомым концентраций. При концентрациях элементов на уровне 10^{-5} – 10^{-6} требуется 10-ти кратное разбавление по массе, на уровне 10^{-7} – 10^{-8} пробу выпаривают в кварцевых или стеклоуглеродных тиглях, с последующим смывом осадка 5% азотной кислотой. При определении низких содержаний ртути, мышьяка, селена и некоторых других элементов на атомно-абсорбционных спектрофотометрах используется приставка-генератор гидридов и холодного пара ртути.

Пробоподготовка на анионы в минеральных кислотах зависит от природы кислот, так, соляная, азотная, плавиковая кислоты анализируют напрямую. Для анализа серной кислоты готовят соответствующим разбавлением 20% раствор с деионизированной водой. Для анализа взвешенных частиц все пробы подаются в прибор напрямую, кавитация подавляется азотом под давлением 5 атм. Неорганические кислоты используются не только в химической промышленности, но и зачастую в пищевой как эмульгаторы или регуляторы кислотности. Требования, предъявляемые к качеству пищевых добавок весьма жесткие, в частности, это касается катионов тяжелых металлов.

Однако химические методы определения примесей элементов могут быть более информативными в связи с тем, что основаны на физико-химических свойствах конкретных форм тех или иных примесей (массовая доля тяжелых металлов в пересчете на Pb, массовая доля железа) и их результаты могут быть использованы непосредственно в технологии и применении реактива. Таким образом, исключение химических методов из базы данных нецелесообразно.

По результатам наших исследований осуществляется на ЗАО «Экос-1» производство широкого ассортимента неорганических кислот особой чистоты. С помощью созданных КМК-систем разработаны методики и технические условия на неорганические кислоты для нужд ЗАО «Экос-1» и НЦ «МТХ». Программные модули PALS-систем вошли в отчетную документацию по Государственным контрактам Минобрнауки России и Минпромторга России.

Литература

1. Трохин В.Е., Трынкина Л.В., Казаков А.А., Бессарабов А.М. Разработка информационного CALS-проекта гибкой технологии соляной и плавиковой кислот особой чистоты // Вестник Саратовского государственного технического университета. 2011. № 4 (62), вып.4. С. 253-257.
2. Бессарабов А.М., Вендило А.Г., Трохин В.Е., Попов А.К., Казаков А.А., Рябенко Е.А., Кочетыгов А.Л. PALS-система для проектирования промышленного производства хлорной и азотной кислоты особой чистоты // Приборы и системы. Управление, контроль, диагностика. 2011. № 2. С. 1-7.
3. Trokhin V.E., Vendilo A.G., Bessarabov A.M., Kazakov A.A., Stepanova T.I. Use of the CALS concept for development of equipment modules producing reagent-quality aliphatic hydrocarbons // Chemical and Petroleum Engineering. 2012. Vol. 48, № 5-6. P. 271-277.
4. Глушко А.Н., Бессарабов А.М. Разработка CALS-системы компьютерного менеджмента качества пропиточных составов для дорожных покрытий // Известия МГТУ «МАМИ». 2013. Т. 2, № 3 (17). С. 91-94.

Алгоритм определения освещенности солнечных батарей Российского сегмента Международной космической станции

к.ф.-м.н. доц. Сазонов В.В.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
8(495)930-52-87

Аннотация. Рассматривается задача определения освещенности солнечных батарей Российского сегмента Международной космической станции, которая является одной из основных задач, возникающих при математическом моделировании системы электропитания Российского сегмента Международной космической станции. В работе представлено законченное решение: подход к заданию внешней поверхности МКС при помощи геометрического моделирования ее положения в пространстве относительно Земли и Солнца, способ задания конструкции солнечных батарей и устойчивый алгоритм определения освещенных участков солнечных батарей, основанный на методе трассировки лучей.

Ключевые слова: геометрическое моделирование, трассировка лучей, Международная космическая станция, математическое моделирование

Введение. Система электропитания (СЭП) Российского сегмента (РС) Международной космической станции (МКС) представляет собой сложный технический объект с непростою логикой работы. Выработка электроэнергии осуществляется солнечными батареями (СБ), установленными на служебном модуле (СМ) РС МКС, когда станция пролетает по участку своей орбиты, освещаемому Солнцем. Этот участок орбиты составляет не менее половины витка, МКС совершает виток за ~90 минут. Бортовое питание РС МКС осуществляется от бортовых аккумуляторов, которые подзаряжаются при помощи СБ.

Проведение экспериментов на борту МКС и выполнение ряда других операций, связанных с полетом станции, зачастую требует больших затрат электроэнергии, и планирование работ экипажа существенным образом зависит от работы СЭП, поэтому задача математического моделирования работы СЭП является актуальной.

СБ состоят из набора фотоэлектрических преобразователей (ФЭП), каждый из которых является элементарным источником постоянного тока, с номинальной ЭДС в несколько вольт. ЭДС, вырабатываемая ФЭП, зависит от многих факторов [1]. Упрощенно можно представить функцию ЭДС в следующем виде: