

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. White, W.B., Chess, D., Chess, C.A., Biggers, J.W.  $\text{CaLa}_2\text{S}_4$ : ceramics window material for the 8 to 14  $\mu\text{m}$  region // Proc. Soc. Photo-Opt. Instrum. Eng. 1982. V. 297. P. 38-43.
2. Beswick, J.A., Pedder, D.I., Lewis, J.C., Ainger, F.W. New infra-red window materials // New Opt. Mater. 1983. V. 400. P. 12-20.
3. Savage, J.A., Levis, K.L. Fabrication of infrared optical ceramics in the  $\text{CaLa}_2\text{S}_4$ - $\text{La}_2\text{S}_3$  solid solution system // Proc. Soc. Photo-Opt. Instrum. Eng. 1986. V. 683. P. 79-84.
4. Covino, J., Harris, D.C., Hills, M.E., Loda, R.T., Schwartz, R.W. Development of calcium lanthanum sulfide as an 8-12  $\mu\text{m}$  transmitting ceramic // Proceedings of the SPIE — The International Society for Optical Engineering. 1984. V. 505. P. 42-46.
5. Ming Shyong Tsai, Min Hsiung Hon. Hot-press sintering and the properties of lanthanum-rich calcium lanthanum sulfide ceramic // Journal of Materials Research. 1994. V. 9. № 11. P. 2939-2943.
6. Скорняков Г.П., Суров М.Е., Астафьева Л.В., Дронова Г.Н., Маслаков А.А. Оптические свойства керамик  $\text{La}_2\text{S}_3$ ,  $\text{Y}_2\text{S}_3$  и  $\text{EuS}$  // Журнал прикладной химии. 1981. Т. 31. Вып. 2. С. 343-346.

**Евгений Викторович КИМ** —  
начальник Центра нанотехнологий  
Технопарка ТюмГУ  
[uisge.b@gmail.com](mailto:uisge.b@gmail.com)

**Олег Валерьевич АНДРЕЕВ** —  
зав. кафедрой неорганической и физической химии,  
профессор, доктор химических наук  
[andreev@utmn.ru](mailto:andreev@utmn.ru)

**Виктор Юрьевич РЯДИНСКИЙ** —  
директор Технопарка, кандидат технических наук  
[ecolog59@mail.ru](mailto:ecolog59@mail.ru)

Тюменский государственный университет

УДК 502.65

## МОДЕЛЬ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ВОДНЫХ ОБЪЕКТОВ ОТ ШЛАМОВЫХ АМБАРОВ

### MODEL OF WATER BODIES CONTAMINATION FROM CUTTING PITS

**АННОТАЦИЯ.** Приведены выводы расчетных уравнений метода электрохимической аналогии и их применения для моделирования процессов загрязнения в системе «шламовый амбар — водный объект», результаты прогноза и их верификация.

**SUMMARY.** The article contains the findings of design equations of electrochemical analogy method and their application for contamination processes modeling in system «cutting pit — water body», as well as the results of prognosis and their verification.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА.** Шламовый амбар, загрязнение, электрохимическая аналогия.

**KEY WORDS.** Cutting pit, contamination, electrochemical analogy.

Шламонакопители (шламовые амбары) являются одними из основных источников загрязнения нефтегазодобывающих провинций. Только на территории Ханты-Мансийского автономного округа — Югры (основного нефтедобывающего региона России) находится около 3000 шламовых амбаров, а количество накопленных в

них отходов составляет 5-6 млн тонн. Многие из таких шламонакопителей расположены в водоохранной зоне [1]. Например, на территории Самотлорского месторождения — одного из самых крупных — шламовые амбары, расположены на технологических площадках, находящихся внутри озера Самотлор.

Аналитические исследования загрязнения объектов северных территорий является трудоемкими, а порой сложновыполнимыми. Существующие модели по оценке полей загрязнения строятся на принципах аппроксимации и экстраполяции экспериментальных данных во времени и не содержат в своей основе фундаментальных уравнений явлений природы. Не обнаружены сведения об использовании метода аналогии процессов массопереноса и электропроводности при расчете полей распространения загрязнений.

Цель статьи состоит в выводе расчетных уравнений метода электрохимической аналогии и их применения для моделирования процессов загрязнения в системе «шламовый амбар-водный объект».

Сущность метода электрохимической аналогии (ЭХА) или метода эквивалентных химических схем основана на аналогии математической записи двух разных физических явлений: химической диффузии, фильтрационных процессов и электропроводности.

Согласно теории дискретизации непрерывных процессов пространственное распространение загрязнителей в почве можно представить в виде совокупности связывающих их точек и линий. Соответствующий граф имеет вид электрической цепи. С граничными условиями: источник один, а «выходов» — конечных точек поля загрязнения — много. Наличие контуров в цепи является следствием перетоков загрязнителей в различных направлениях.

Рассмотрим случай загрязнения озера, как водного объекта из шламового амбара (рис. 1.). Загрязнители распространяются различными путями, образуя цепи. Между цепями могут образовываться перетоки, так как распространение загрязнителей происходит по принципу наименьшего сопротивления.

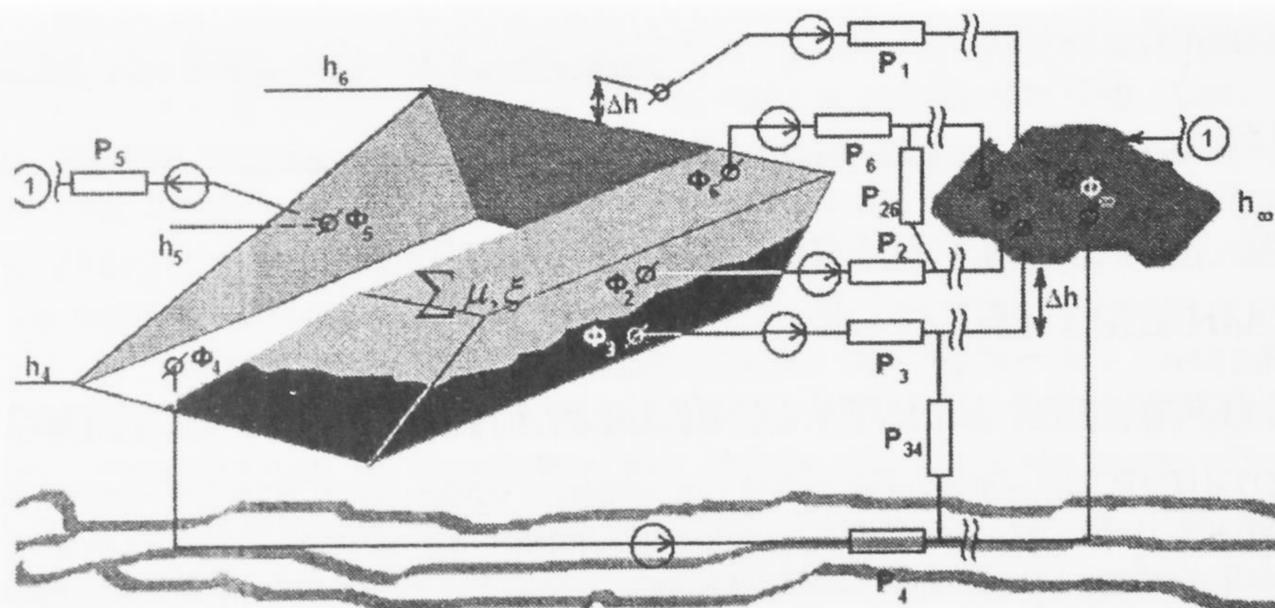


Рис. 1. Модель распространения загрязнителей в системе «шламовый амбар-озеро»

Для интерпретации физико-химических процессов в электроцепной терминологии делаем следующие замены (табл. 1):

1.  $\Delta\phi$  — разность потенциалов, разность количества электричества  $\rightarrow \Delta c$  — разность концентраций вещества;
2.  $Q$  — заряд — количество электронов  $\rightarrow N$  — количество вещества;
3.  $I$  — сила тока  $\rightarrow Y$  — интенсивность потока загрязнителей;
4.  $R$  — электрическое сопротивление  $\rightarrow P$  — сопротивление среды потоку загрязнителей;
5.  $J$  — плотность тока  $\rightarrow \zeta$  — плотность потока загрязнителей.

Таблица 1

Величины и их размерности в электрохимической аналогии

Электричество			Загрязнение		
Величина	Обозначение	Размерность	Величина	Обозначение	Размерность
Заряд	Q	Кл	Количество вещества	N	моль
Сила тока	$I = \frac{Q}{t}$	А (кл/с)	Интенсивность потока	$Y = \frac{N}{t}$	моль/с
Разность потенциалов	$U = \Delta\phi$	В	Разность химических потенциалов	$\Delta c$	моль/м <sup>3</sup>
Сопротивление	$R = \frac{U}{I}$	Ом	Сопротивление среды потоку	$P = \frac{\Delta c}{Y}$	сек/м <sup>3</sup>
Проводимость	$\Omega = R^{-1}$	См	Проводимость цепи	$\Theta = P^{-1}$	м <sup>3</sup> /сек
Плотность тока	$J = \frac{I}{S}$	А/м <sup>2</sup>	Плотность потока	$\zeta = \frac{Y}{S}$	$\frac{\text{моль}}{\text{м}^2 \cdot \text{сек}}$

Движущими силами процесса, обуславливающие движение загрязнителя, являются разность уровней  $\Delta h$  точек наблюдения и разность концентраций  $\Delta c$  загрязнителя в них. Составляющую обуславливающую движение загрязнителей под действием силы гравитации (разница уровней) можно описать законом Дарси. Закон Фика описывает движение загрязнителей, обусловленное разницей концентраций (табл. 2.).

Таблица 2

Движущие силы поля загрязнителей

Закон Дарси	Закон Фика
$V_{\phi} = \frac{k\rho\Delta h}{\mu l} = K \frac{\Delta h}{l}$	$I_{\text{д}} = -D \frac{\partial c}{\partial x}$
Фильтрационное сопротивление среды	Диффузионное сопротивление среды
$P_{\phi} = \frac{1}{V_{\phi}SK} = \frac{l}{\Delta h S}$	$P_{\text{д}} = \frac{\Delta c}{\zeta S}$
	т.к. $\zeta = D \frac{\Delta c}{l}$ (согласно закону Фика), то
	$P_{\text{д}} = \frac{\Delta c}{\zeta S} = \frac{\Delta c}{S} \frac{l}{D\Delta c} = \frac{l}{DS}$

Таким образом, суммарное сопротивление среды потоку:

$$\overline{P}_{\Sigma} = \overline{P}_{\text{д}} + \overline{P}_{\phi}$$

Получившаяся величина используются для расчетов в модели распространения загрязнителей. Для расчета поля загрязнителей методом узловых потенциалов [2] записывается уравнение в матричной форме:

$$A\theta A^t \cdot C = -A (\theta N) + AP$$

где A — матрица соединений (таблица коэффициентов уравнений, составленных по первому закону Кирхгофа. Строки этой матрицы соответствуют узлам, а столбцы — ветвям графа цепей загрязнения), A<sup>t</sup> — транспонированная матрица соединений,  $\theta$  — матрица проводимости, C — матрица узловых потенциалов (концентраций).

Решение системы узловых уравнений будет иметь вид:

$$C = - (A\theta A^t)^{-1} \cdot A (\theta N + P)$$

Для определения нестационарного поля потенциалов (концентраций) загрязнителей записывается уравнение диффузии для  $i$ -элемента в конечных разностях:

$$\frac{c_1 + c_7 - 2c_2}{\Delta x^2} + \frac{c_4 + c_6 - 2c_2}{\Delta y^2} + \frac{c_3 + c_5 - 2c_2}{\Delta z^2} = \frac{c_2 - c_2'}{D\Delta\tau}$$

$c_2'$  — химический потенциал внутри  $i$ -элемента в момент времени  $\tau + \Delta\tau$ .

Вышеописанные уравнения использованы для написания расчетного модуля программы на персональном компьютере. На основе данных химического анализа спрогнозировано состояние поля загрязнителей вокруг шламового амбара и произведена верификация прогноза (табл. 3, рис. 2а, 2б).

Таблица 3

**Распространение ионов  $Cl^-$  от шламового амбара:  
определение, прогноз, верификация**

	Точки отбора проб									
Данные (мг/л)	101	102	103	104	105	201	202	203	204	205
КХА	2509	1962	1746	2302	1851	1038	657	623	932	897
Прогноз	4050	3610	3170	3950	3380	2900	2140	1950	2380	2200
КХА верификация	3778	3243	2881	3367	3047	2425	1733	1495	1870	1851
	Точки отбора проб									
Данные (мг/л)	301	302	303	304	305	401	402	403	404	405
КХА	612	340	221	389	405	184	54	32	66	74
Прогноз	1740	1490	1060	1570	1620	860	510	280	600	650
КХА верификация	1346	1118	862	1244	1280	504	327	157	256	381

КХА — количественный химический анализ.

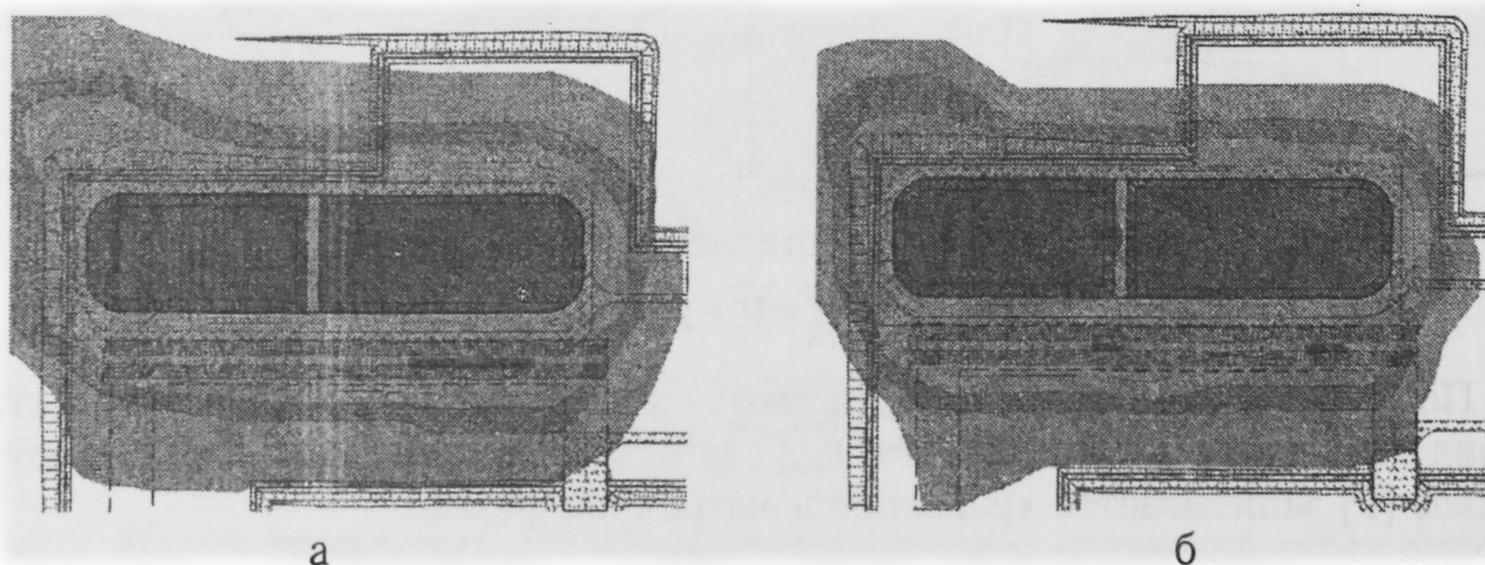


Рис. 2. Состояние поля загрязнителей вокруг амбара:

а — прогноз на 6 месяцев, б — верификация прогноза по данным КХА

Хлорид-ион является одним из основных загрязнителей. На основе данных по его распространению (данные КХА в табл. 3) методом электрохимической аналогии спрогнозировано распространение на 6 месяцев (прогноз в табл. 3). Верификация результатов показала (КХА верификация в табл. 3), что совпадение составляет в среднем 70-80%. Качественное и удовлетворительное количе-

ственное соответствие прогноза и определений свидетельствует о правомерности метода ЭХА. Вместе с тем сама расчетная модель требует уточнений. В частности, не учитывался факт зимнего периода, при котором процессы переноса веществ заметно меньше.

Таким образом, выведены расчетные уравнения метода электрохимической аналогии распространения загрязнения от шламового амбара. В разработанном программном модуле рассчитана модель распространения хлорид-ионов от шламового амбара и верифицирована через 6 месяцев.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.

1. Обзор «О состоянии окружающей природной среды Ханты-Мансийского автономного округа — Югры в 2005 году». Ханты-Мансийск: ОАО «НПЦ МОНИТОРИНГ», 2006.

2. Нейман Л.Р., Демирчан К.С. Теоретические основы электротехники. Т. 1. Л.: Энергоиздат, 1981. 536 с.

**Надежда Александровна ЕРМАКОВА** —  
доцент кафедры органической  
и экологической химии,  
кандидат химических наук  
permasova@utmn.ru

**Людмила Анатольевна ВОЛКОВА** —  
старший научный сотрудник  
кафедры органической и экологической химии  
lvolkova2000@mail.ru

Тюменский государственный университет

УДК 541.49

### **ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ В СИСТЕМАХ, СОДЕРЖАЩИХ ИОНЫ МЕТАЛЛОВ И ОРГАНИЧЕСКИЕ ЛИГАНДЫ, АДДИТИВНЫМИ МЕТОДАМИ**

### **RESEARCH OF COMPLEX FORMATION IN THE SYSTEMS CONTAINING IONS OF METALS AND ORGANIC LIGANDS BY USING ADDITIVE METHODS**

**АННОТАЦИЯ.** Работа посвящена обобщению результатов исследования комплексообразования в системах  $M-M'-L$ , где  $M-Bi(III)$  или  $Cu(II)$ ,  $M'-Co(II)$ ,  $Ni(II)$ ;  $L$  — лимонная кислота (Cit) или этилендиаминтетрауксусная кислота (ЭДТА). Использован комплекс физико-химических методов: спектрофотометрии, калориметрии, кондуктометрии, ЭПР-спектроскопии.

**SUMMARY.** The article is devoted to the generalization of research results of a complex formation in systems  $M-M'-L$ , where  $M-Bi(III)$  or  $Cu(II)$ ,  $M'-Co(II)$ ,  $Ni(II)$ ;  $L$ -a citric acid (Cit) or ethylenediaminetetraacetic acid (EDTA). The complex of physicochemical methods was used: spectrophotometry, calorimetry, conductometry, and EPR-spectroscopy.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА.** Комплексообразование, лимонная кислота, этилендиаминтетрауксусная кислота, состав и устойчивость комплексов.