УДК 678.06:62-278:6:66.074

МУЛЬТИМОДЕЛЮВАННЯ ЯК ІНСТРУМЕНТ ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСІВ У СИСТЕМІ «ПОЛІМЕРНА МЕМБРАНА – ВОДА»

Я.М.Заграй, д-р хім. наук,проф.,
О.А. Котовенко, канд.техн.наук,доц.,
О.Ю. Мірошниченко, ст. викл.
(Київський національний університет будівництва і архітектури)

На основі принципів мультимоделювання і квантифікації синтезовані мультимоделі процесів, що проходять на границі фаз у системі «полімерна мембрана - вода», в яких визначальним компонентом є багатошарова полімерна мембрана, пори якої утворюються в результаті флуктуацій структурних ланцюжків полімерів. Результати роботи направлені на вирішення однієї з основних проблем екології - підготовки питної води як основи екобезпеки життєдіяльності та здоров'я людини.

На основе принципа мультимоделирования и квантификации синтезированы мультимодели процессов, которые проходят на границе фаз в системе «полимерная мембрана - вода», в которой определяющим компонентом является многослойная полимерная мембрана с порами, образовавшимися в результате флуктуаций структурных цепочек полимеров. Результаты работы направлены на решение одной из основных проблем экологии - подготовки питьевой воды как основы экобезопасности жизнедеятельности и здоровья человека.

On the basis of multidesigns principle and quantification multimodels of processes, which pass on the border of phases in the system "podimeric membrane – water", in which a determining component is a multi-layered polymeric membrane the pores of which appear as a result of fluctuations of structural chainlets of polymers are synthesized. Job performances are directed on the decision of one of basic problems of ecology – preparations of drinking water as bases of ecosafety of vital functions and health of man.

Вирішення основної проблеми екології – «екобезпека життєдіяльності і здоров'я людини» тісно пов'язано з використанням людиною якісної питної води.

© Я.М. Заграй, О.А. Котовенко, О.Ю. Мірошниченко, 2012

Це обумовлює необхідність дослідження та створеннятеорії процесів, що проходять у системі «полімерна мембрана – вода», та створення мембранних структур із заданими властивостями.

Визначальну роль в механізмах процесів, що протікають в системах «полімерна мембрана – вода», відіграють як структура води, так і структура та властивості самої мембрани. В основу існуючих моделей процесів у системах «мембрана - вода» покладено феноменологічний підхід. Це такі моделі, як модель Соуріраджана, сорбційно-дифузійна модель Лонсдейла, модель капілярного осмосу Дерягіна, модель Кестінга, моделі Кармана, модель Айземана і її модифікація Шульца і Асунмаа та ін. Але всі ці моделі розглядають процеси в системі «мембрана – вода», в яких мембрани мають пори у вигляді капілярів різного діаметру (плоских чи циліндричних) [1,2,3]. Для ізоморфного опису процесів, що проходять у системі «полімерна мембрана - вода», для композитних багатошарових мембран, в яких пори не є капілярами, а утворюються в результаті флуктуацій структурних ланцюжків, ці моделі непридатні.

Для одержання загального уявлення про процеси функціонування системи «полімерна мембрана – вода» можна використовувати так звані узагальнені оперативно-описові моделі, які використовують методи, що дають спрощене уявлення про процес функціонування системи у формі послідовного мовного опису різних процесів, що проходять у елементах системи і складають загальний вербальний опис цієї системи. Метод, що застосовує квантифікований опис будь-яких понять, є модельним описом окремої сторони явища (системи, процесу), яке може функціонувати як атрибутивна властивість складного явища і полягає в тому, що вона описує явище, яке може проявлятися з різною інтенсивністю. Остання кількісно проявляється у вигляді результату вимірювання.

Як об’єкт моделювання розглядались процеси в системі «полімерна мембрана - вода», в якій визначальним компонентом є композитна полімернасинтетична багатошарова мембрана. Загальна товщина такої мембрани 135 – 145 мкм, причому поверхневий шар складається з ароматичного поліаміду і приблизно дорівнює 3 мкм. В якості основи цієї мембрани використовуються ароматичні полісульфони. Розміри динамічно змінюваних внутрішньомембранних пор, які утворюються флуктуацією структурних ланок полімерів, що містять фрагменти іоногенних груп, складали від 0,3 до 1,0 нм. Діелектрична проникність мембрани знаходиться у діапазоні 3,3 – 3,6.

Особливості синтезу математичних моделей визначаються функціональними властивостями процесів у системі «полімерна мембрана –вода» та обумовлені структурними та фізико-хімічними властивостями композитних багатошарових полімерних мембран та властивостями розбавлених водних розчинів (питна вода), що різко змінюються в залежності від їх концентрації та впливу зовнішніх чинників. Особливе місце при вирішенні цієї проблеми займають граничні процеси і їх

характеристики на границі фаз, де домінуючими є процеси гідратації-дегідратації в загальному об'ємі та у примембранному шарі.

Базуючись на залежностях механізмів процесів у міжфазному просторі від діелектричної проникності фаз та процесів гідратації-дегідратації іонів в системі «полімерна мембрана - вода», синтезовані мультимоделі: гідратації - дегідратації на границі фаз «полімерна мембрана - вода», модель діелектричного виключення в примембранному шарі.

При створенні математичної моделі цих процесів як на етапі вербального її подання, так і на етапі формалізації, застосовувався принцип квантифікації. Враховуючи складність та багатофакторність системи, яка досліджується, при формалізації опису процесів застосовано принцип мультимоделювання з його модифікацією для таких складних систем.

Мультимодель гідратації-дегідратації іонів на границі фаз

Модель гідратації-дегідратації іонів на границі фаз у системі «полімерна мембрана - вода» надає можливість описати процес дегідратації іонів у примембранному шарі для композитних багатошарових мембран, в яких пори не є капілярами, а утворюються в результаті флуктуацій структурних ланцюжків, що визначається діелектричною проникністю мембрани (для такої мембрани діелектрична проникність складає $\varepsilon = 3{,}3$ -3,6, а діелектрична проникність об'ємної води, як розчинника, дорівнює $\varepsilon = 81{,}7$).

Енергія гідратації іона дорівнює різниці між його потенціальною енергією у вакуумі U_V та у розчині (середовищі) U_L:

$$U_S = U_V - U_L .$$

Енергія іона у вакуумі

$$U_V = \frac{ze^2}{2r},$$

де ze – заряд іона, r – його радіус.

Енергія іона в середовищі

$$U_L = \frac{z^2 e^2}{2r\varepsilon}.$$

Енергія гідратації в перерахунку через грам-іон

$$U_S = N_a \frac{z^2 e^2}{2r}\left(1 - \frac{1}{\varepsilon}\right),$$

де ε - діелектрична проникність середовища, N_a – число Авогадро.

Проаналізуємо одержане рівняння. При зменшенні діелектричної проникності середовища зменшується потенційна енергія гідратації іона, тобто при $\varepsilon \to 1$ $U_s \to 0$.

Мультимодель механізму процесу діелектричного виключення

Механізм діелектричного виключення - це проявлення двох факторів:

1) радіус дії того чи іншого різновиду поверхневих сил на границі фаз;
2) вплив концентрації на їх екранування.

Іони є носіями електричного заряду високої густини. У свою чергу, носії електричного заряду високої густини виштовхуються із середовища з низькою діелектричною проникністю.

Чиста вода, як розчинник, має високу діелектричну проникність $(\varepsilon \approx 81{,}7)$. Полімерна мембрана має діелектричну проникність від 3,3 - 3,6.

Вода, що локалізується на активних центрах гідрофільного матеріалу мембрани, характеризується теж низьким значенням діелектричної проникності (сталої) ($\varepsilon = 2 \div 13$).

Сила, що діє на іон у міжфазному просторі при переході із середовища з діелектричною проникністю ε_{10} до середовища, де діелектрична проникність складає ε_{20}, може бутиподана у вигляді:

$$f = \frac{(re)^2}{4\varepsilon_{20}h^2} \cdot \frac{\varepsilon_{10} - \varepsilon_{20}}{\varepsilon_{10} + \varepsilon_{20}},$$

ε_{10} – діелектрична проникність мембранної фази (3,3-3,6);

ε_{20} – діелектрична проникність води в загальному об'ємі (~81,7).

Аналіз одержаного рівняння показує, що якщо діелектрична проникність мембрани змінюється від 3,3 до 3,6, то сила, яка діє на іони на границі фаз «полімерна мембрана – вода», при наближенні до мембранної фази доходить до нуля, а потім вона змінює знак на протилежний. У міжфазному просторі формується шар води, яка не має властивості розчиняти речовини, а іони виштовхуються у середовище з більшою діелектричною проникністю – об'ємну воду. Сила, що діє на іони, прямо пропорціональна заряду іона та його радіусу. Як видно із одержаного співвідношення, при збільшенні зарядів іонів (або при зменшенні їх розмірів та діелектричної проникності мембранної фази) вони з меншою імовірністю (у меншій кількості) проникають до мембрани.

Одержані моделі можуть розглядатися як єдина модель, яка описує процеси у примембранному шарі, та визначаються механізмом діелектричної проникності як мембрани, так і води.

Окрім механізму діелектричної проникності, у середовищі з низькою діелектричною проникністю діє механізм асоціації іонів, тобто формуються іонні

пари та більш складні утворення.

Синтезовані моделі призначені длявстановлення та дослідження механізмів, що проходять в системі «полімерна мембрана - вода», в яких визначальним елементом є композитні багатошарові мембрани, де пори не є капілярами, а утворюються в результаті флуктуацій структурних ланцюжків і надають можливість визначити оптимальні параметри для створення мембран з визначеною структурою і властивостями при різних характеристиках водних розчинів (питної води) для визначеного типорозмірного ряду в багатостадійних поетапно-функціональних технологіях підготовки питної води, що неможливо при використанні існуючих моделей.

*** * ***

1. Духин С.С., Сидорова М.П., Ярощук А.Э. Электрохимия мембран и обратный осмос–Л.: Химия, 1991. – 190 с.

2. Дытнерский Ю.И. Мембранные процессы разделения жидких смесей. М.: Химия, 1975. – 230 с.

3. Кестинг Р.Е. Синтетические полимерные мембраны. Структурный аспект. – М.: Химия, 1991. – 336 с.

Отримано: 14.08.2012 р.