**Фазовые равновесия и термодинамические свойства в системе H2O – Co(CH3SO3)2 – CH3SO3H**

***Чэнь Жуй***

*Студент, 4 курс бакалавриата*

*1* *Университет МГУ-ППИ в Шэньчжэне,*

*Факультет наук о материалах, Шэньчжэнь , Китай*

*Email: 1410918427 @qq.com*

В наше время широко используются литий-ионные аккумуляторы, которые содержат большое количество кобальта (Co), поэтому важным вопросом стал способ их переработки с дальнейшим извлечением кобальта [1].

В современных промышленных процессах часто используются сильные неорганические кислоты (HCl, H2SO4, HNO3.) для выщелачивания металлов. Но они опасны из-за выделения летучих ядовитых соединений, их соли могут быть плохо растворимы либо ускорять коррозию. Поэтому метансульфокислоту (CH3SO3H) рассматривают как новый реагент для растворения металлов. Она является перспективной заменой для них, так как она тоже является сильной кислотой, но у неё нет описанных выше недостатков. Метансульфаты разлагаются некоторыми бактериями, поэтому они могут рассматриваться как реагенты «зеленой химии» [1].

В результате выщелачивания образуются растворы кислоты, содержащей сразу несколько солей металлов. Для их разделения нужно знать про их растворимости. Тем не менее, фазовые равновесия в системах, содержащих CH3SO3H и её соли с 3d-металлами, слабо изучены экспериментально [1]. При исключительно экспериментальном подходе требуется очень много времени и ресурсов для изучения таких равновесий. Термодинамическое моделирование с опорой на минимально необходимый объём экспериментальных данных позволяет решить эту проблему.

Так как Co является одним из основных компонентов отработанных аккумуляторов, цель данной работы – получить термодинамическую модель жидкой фазы и построить изотермическое сечение фазовой диаграммы в тройной системе H2O – Co(CH3SO3)2 – CH3SO3H при 298.15 К.

Для описания свойств жидкой фазы мы выбрали модель Питцера [2] – она хорошо описывает свойства водных растворов электролитов и широко распространена. Сначала мы получили отсутствующие в литературе бинарные параметры взаимодействия (β0, β1, Сφ, считая β2=0 и α1=1.4) в рамках этой модели для двухкомпонентных систем, H2O– CH3SO3H и H2O – Co(CH3SO3)2 (таблица 1). Затем, получили термодинамические константы растворимости с использованием коэффициентов активности, рассчитанных по полученной модели, и литературных данных по растворимости Co(CH3SO3)2 nH2O (n=4, 6) в водных растворах. Мы оценили растворимость, используя только полученные бинарные параметры взаимодействия и константы растворимости.

Таблица 1. Параметры модели Питцера для H2O– CH3SO3H (1) и H2O– Co(CH3SO3)2(2)

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | β0 | β1 | Сφ |
| 1 | 0.14791 | 0.27941 | -0.0042032 |
| 2 | 0.627296 | -3.395892 | -0.053712 |

Для проверки качества полученной модели методом изотермической растворимости были получены данные о равновесии жидкость-твёрдое в тройной системе H2O – Co(CH3SO3)2 – CH3SO3H при 298.15 К. В результате, мы выявили серьёзное расхождение предсказанных данных с экспериментальными. После введения тройных параметров взаимодействия в модель нам удалось получить адекватное описание равновесий жидкость-твёрдое в тройной системе H2O – Co(CH3SO3)2 – CH3SO3H при 298.15 К.

**Литература**

1. Binnemans K., Jones P.T. // J. Sustain. Metall. 2023. V. 9. P. 26 - 45

2. Pitzer K.S., Kim J.J. // J. Am. Chem. Soc. 1974. V. 96, № 18. P. 5701–5707.