

УДК 542.87

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ АВТОМАТИЗАЦИИ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ АНАЛИЗА

Сейтаты Игорь Сергеевич, студент, направление подготовки 15.03.04 Автоматизация технологических процессов и производств, Оренбургский государственный университет, Оренбург
e-mail: igorseitaty@yandex.ru

Степанов Артем Дмитриевич, магистрант, направление подготовки 04.04.01 Химия, Оренбургский государственный университет, Оренбург
e-mail: artema437@mail.ru

Научный руководитель: **Проскурин Дмитрий Александрович**, кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой систем автоматизации производства, Оренбургский государственный университет, Оренбург
e-mail: dimitrpro@mail.ru

Аннотация. В рамках химического анализа поверхностных вод актуально использовать волюмометрические методы, частным случаем которых является титрование. В общем случае анализ является достаточно громоздким, требует тщательной пробоподготовки, значительно зависит от класса точности применяемой посуды, особенно бюреток. Благодаря методам автоматизации имеется возможность изготовить устройство автоматической подачи титранта с последующим контролем точки эквивалентности. Основные преимущества полученной экспериментальной установки – высокая точность, отсутствие необходимости промывки системы подачи жидкости, низкая стоимость. Моделирование структуры производилось в программе автоматизированного компьютерного моделирования. Дополнительно в установке используется логический контроллер, позволяющий контролировать процесс титрования с высокой точностью и управлять, как отдельными частями устройства для калибровки его работы, например, проводить тест-титрование, так и позволяет выводить полученный результат в программу-обработчик на ЭВМ.

Ключевые слова: автоматизация, волюмометрический метод, титрование, физико-химический метод, потенциометрическое титрование.

Для цитирования: Сейтаты И. С., Степанов А. Д. Исследование возможности автоматизации физико-химических методов анализа // Шаг в науку. – 2025. – № 4. – С. 37–42.

STUDY OF THE POSSIBILITY OF AUTOMATION OF PHYSICOCHEMICAL METHODS OF ANALYSIS

Seitaty Igor Sergeevich, student, training program 15.03.04 Automation of technological processes and productions, Orenburg State University, Orenburg
e-mail: igorseitaty@yandex.ru

Stepanov Artem Dmitrievich, postgraduate student, training program 04.04.01 Chemistry, Orenburg State University, Orenburg
e-mail: artema437@mail.ru

Research advisor: **Proskurin Dmitry Alexandrovich**, Candidate of Technical Sciences, Associate Professor, Head of the Department of Production Automation Systems, Orenburg State University, Orenburg
e-mail: dimitrpro@mail.ru

Abstract. As part of the chemical analysis of surface waters, it is important to use volumetric methods, a special case of which is titration. In general, the analysis is quite cumbersome, requires careful sample preparation, and significantly depends on the accuracy class of the dishes used, especially burettes. Thanks to automation methods,

it is possible to manufacture an automatic titrant feeding device with subsequent control of the equivalence point. The main advantages of the experimental setup obtained are high accuracy, no need to flush the liquid supply system, and low cost. The structure was modeled using an automated computer simulation program. Additionally, the installation uses a logical controller that allows you to control the titration process with high accuracy and control both individual parts of the device to calibrate its operation, for example, to perform test titration, and allows you to output the result to a processor program on a computer.

Key words: automation, volumetric method, titration, physical and chemical method, potentiometric titration.

Cite as: Seitaty, I. S., Stepanov, A. D. (2025) [Study of the possibility of automation of physicochemical methods of analysis]. *Shag v nauku* [Step into science]. Vol. 4, pp. 37–42.

Химические методы анализа поверхностных вод на данный момент остаются актуальными, благодаря надёжным выработанным методикам определения [2; 3; 4; 7]. Одним из основных является волюмометрический метод анализа, его отличает:

- точность и надёжность метода,
- широкий спектр применения,
- экономичность и доступность,
- разработанность в рамках ГОСТ методик,

– широкая возможность автоматизации.

Титриметрия – частный случай волюмометрического анализа, в рамках которого подачу титранта, в общем ручном случае, осуществляют в бюретке. Для проведения анализа требуется подать достаточно жидкости до достижения точки эквивалентности, после чего имеется возможность определить концентрацию исследуемого вещества. Основная формула для волюмометрических методов следующая:

$$C_1 V_1 = C_2 V_2, \quad (1)$$

где

C_1 V_1 – концентрация и объём израсходованного титранта,
 V_2 – объём аликвоты, взятой на анализ вещества,
 C_2 – искомая концентрация вещества.

Данный метод способен количественно определять широкий спектр соединений в водных растворах, начиная от кислот и щелочей, заканчивая растворённым кислородом и содержанием органических веществ.

Также важной особенностью метода является широкая возможность автоматизации. Основным действующим фактором метода является подача титранта в сосуд для проведения реакции. Перемещение жидкости можно осуществлять с помощью насосных установок, например, перистальтического насоса. Однако имеются существенные факторы, которые не позволяют его использовать в рамках аналитического метода, из-за зависимости точности от:

- скорости вращения роликового диска;
- калибровки шланга подачи;
- высокого влияния конструкции насоса;
- перепадов напряжения.

Применение автоматических титраторов сокращает время проведения анализа и повышает его точность, в следствии снижается стоимость анализа и повышается его качество [1].

Эффективным вариантом может являться использование конструкции для подачи жидкости шаговыми насосами, которые осуществляют дозировку одно-разовыми медицинскими шприцами через винтовую

передачу. Преимущества использования следующие:

- вместо промывки всей системы требуется просто сменить шприц;
- точный контроль дозировки, благодаря настройке шаговых двигателей;
- значительное уменьшение ручного труда, облегчение процесса титрования для оператора;
- автоматическая подача как титранта, так и аликвоты.

Модель, построенная в системе автоматизированного проектирования КОМПАС 3D, представлена на рисунке 1. Схема электрическая принципиальная, построенная в КОМПАС 3D, изображена на рисунке 2.

Титратор обладает двумя идентичными и независимыми гидросистемами для подачи титранта и исследуемого вещества. Каждая состоит из:

- 1) шприца,
- 2) трубки, один конец которой опущен в ёмкость с раствором,
- 3) иглы, направляющей поток раствора в стакан и минимизирующей размер собирающейся капли,
- 4) трёхходового крана, соединяющего предыдущие три элемента и переключающимся по двум режимам: шприц-трубка (для забора раствора), шприц-игла (для подачи раствора).

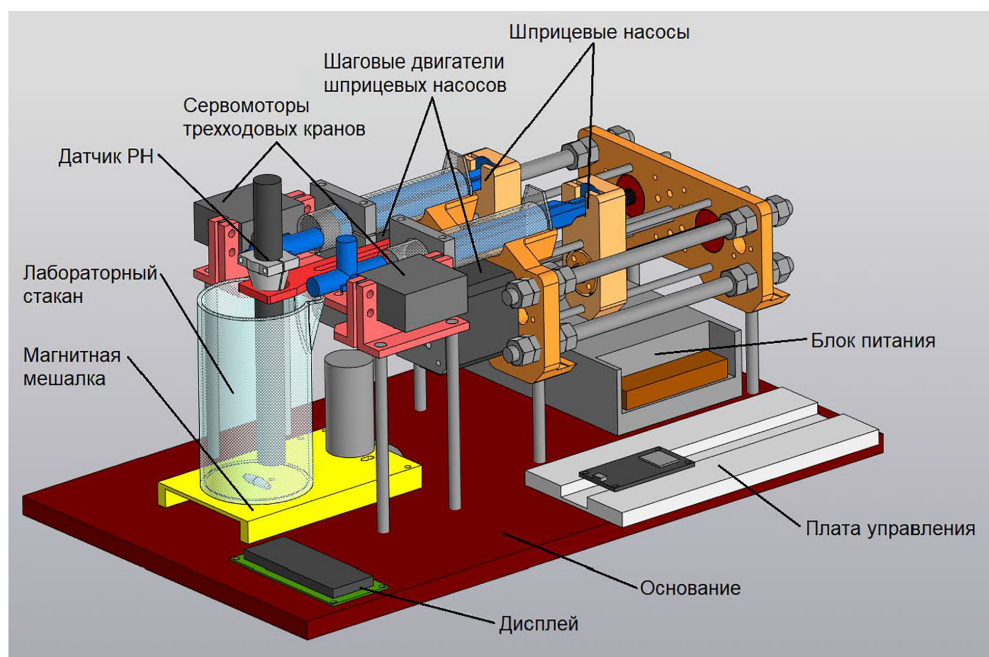


Рисунок 1. Модель конструкции автоматизированного титрования

Источник: разработано авторами

Шток поршня просто и надежно закрепляется в каретке. Каретка через ходовую гайку движется по ходовому винту, который через соединительную муфту крепится к валу шагового мотора. Таким образом, мотор получает команду движения на определенное количество шагов, что приводит к подаче эквивалентного количества раствора. Исходя из устройства шагового мотора, данная система не требует обратной связи.

Логическим устройством для контроля входящих потоков, управлением двигателями и контроля датчика, в виде комбинированного стеклянного pH-электрода является ESP32. Его аналоговые выходы подключены к внешнему АЦП, который по шине I2C передает данные в микроконтроллер. Внешний АЦП необходим для повышенной точности измерения. При этом для наглядности присутствует LCD дисплей с выводом результатов титрования, через драйвер он принимает данные по шине I2C. Также возможно исследование положения точки эквивалентности на основе колориметрических свойств [6].

Сетевое напряжение 220V преобразуется блоком питания в 12V постоянного напряжения, от них питаются шаговые двигатели. С помощью модуля напряжение понижается до 5V, от них работают все остальные элементы.

Процесс анализа параметра воды волюмометрическим методом с помощью установки заключается

в четырёх основных этапах.

1. Оператору требуется опустить трубки в соответствующие ёмкости с титрантом и исследуемым раствором, поставить химический стакан Н-1-150 ТС по центру магнитной мешалки, положить в него магнитный якорь и поместить комбинированный стеклянный pH-электрод для контроля кислотности и точного определения точки эквивалентности на отведенное место, нажатием кнопки запустить программу титрования.

2. Следующий этап программы заключается в калибровке поршней и прокачке гидросистем. Каретки с закрепленными в них поршнями движутся в крайнее положение до нажатия концевого выключателя. В несколько шагов выпускается весь воздух, и шприцы набирают в себя титрант и исследуемый раствор.

3. В стакан подается аликвота, включается магнитная мешалка, начинается подача титранта и измерение водородного показателя среды. При приближении к точке эквивалентности уменьшается скорость подачи.

4. Итоговый расчет точки эквивалентности производится по прохождению пика роста водородного показателя с датчика и количества шагов, пройденных мотором. После окончания результат передается на LCD-дисплей, либо, при подключённой SCADA, фиксируется в базе данных эксперимента.

Поз. обозначение	Наименование	Кол.	Примечание
U1, U2	Установочные компоненты	2	
U3	Драйвер шагового двигателя A4988	1	
U4	Микроконтроллер ESP32 DevKit V1	1	
U5	LCD модуль связи с LCD дисплеем	1	
U6	Аналого-цифровой преобразователь ADS1115	1	
D1	Модуль датчика РН4502С	1	
S1, S2	LCD дисплей 1602	2	
M1, M2	Сервомотор MG996R	2	
M3	Шаговый двигатель NEMA17	2	
P1	Двигатель постоянного тока JGA25-370	1	
P2	Понижающий DC-DC преобразователь LM2596	1	
K1, K2	Импульсный блок питания Esada 128, 60 Вт, P20	1	
K3, K4	Кнопка тактовая	2	
BUZ1	Концевой микровыключатель	2	
	Пассивный зумер	1	
C1, C2	Конденсатор электролитический 30V 1000мкФ	2	
R1, R2	Конденсаторы		
R3, R4	Резисторы		
R5	Резистор 0,25 Вт 10кОм	2	
	Резистор 0,25 Вт 10кОм	2	
	Резистор 0,25 Вт 100 Ом	1	
V11	Полупроводники		
V12	Биполярный pnp транзистор 2N3904	1	
VD1	Биполярный pnp транзистор H8124E	1	
	Диод UF5408	1	

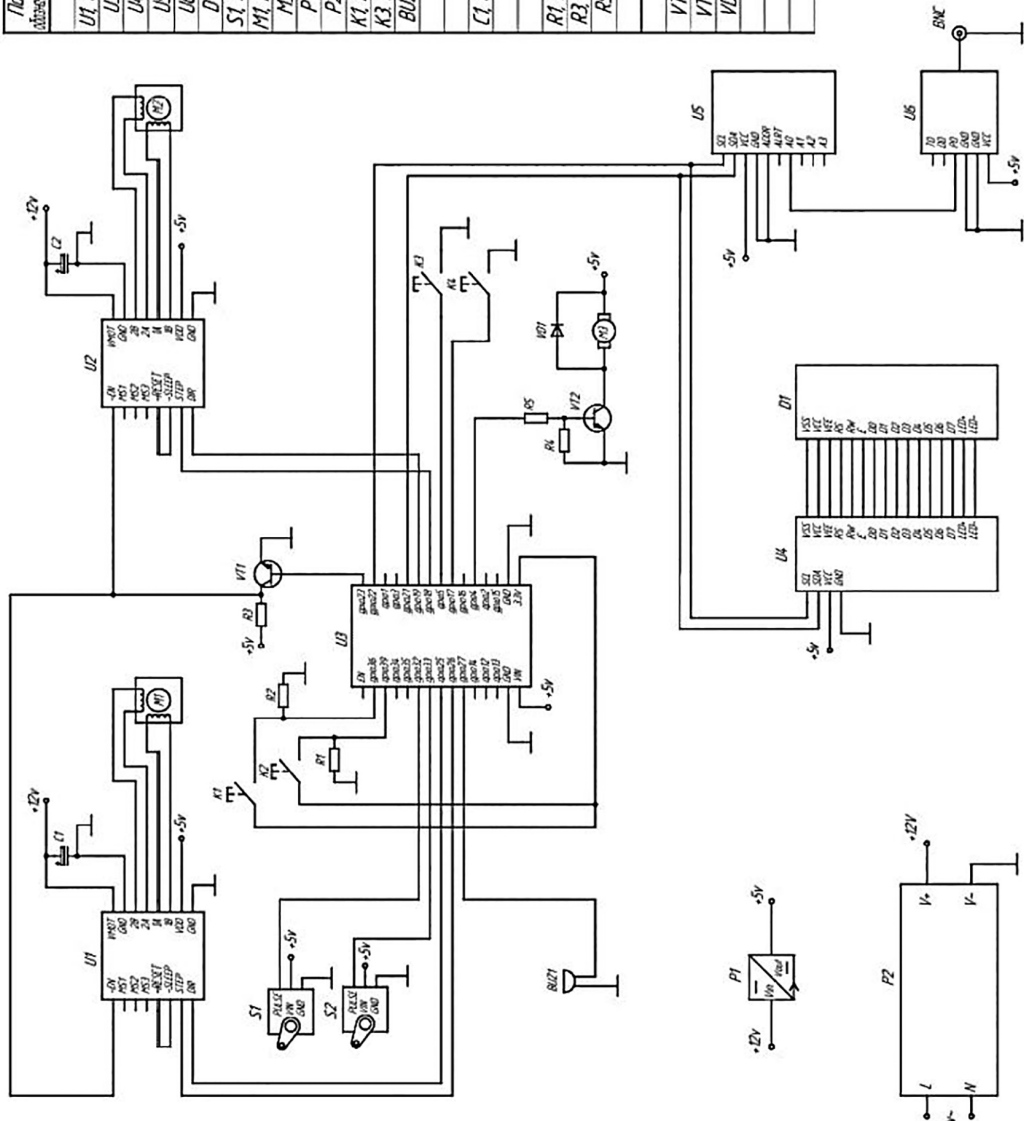


Рисунок 2. Схема электрическая принципиальная
Источник: разработано авторами

Обмен полученными данными напрямую в обработчик информации ЭВМ может также осуществляться по порту RS232 в сторонние программы, включая программные комплексы автоматизиро-

ванного программирования – САП. Схематическое изображение планировки подключения установки в случае использования перистальтических насосов представлено на рисунке 3.

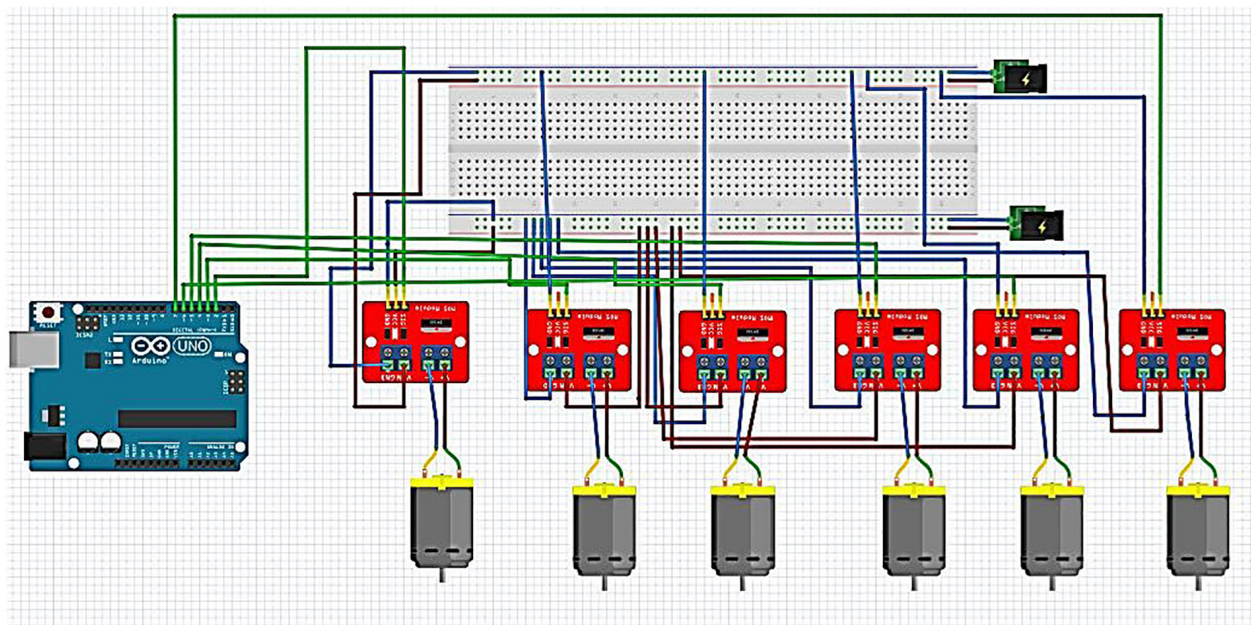


Рисунок 3. Схема установки при использовании перистальтических насосов

Источник: разработано авторами

Высокая громоздкость системы подачи титранта с участием перистальтических насосов создаёт необходимость упрощения и автоматизации с применением шприцевого метода, что особенно важно при применении дифференциальных методов обработки получаемых данных [5].

В рамках работы подтверждена возможность автоматизации волюмометрических методов титрования

с физико-химическим контролем процесса титрования, при этом благодаря использованию методов автоматизации увеличивается эффективность и скорость рутинных и специализированных анализов. В дальнейших исследованиях планируется провести сравнительный анализ точности автоматизированного и ручного методов.

Литература

1. Вибрационный микротитратор : пат. 1712815 A1 СССР № 4778086/26; заявл. 05.01.90; опубл. 15.02.92 – 4 с.
2. Газетдинов Р. Р., Ипасева Э. М. Определение содержания хлоридов в питьевой воде // Заметки ученого. – 2021. – № 7–1. – С. 262–265.
3. Ионметрическое определение хлоридов в питьевых водах различной минерализации / Г. М. Сергеев [и др.] // Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология. – 2011. – Т. 54, № 12. – С. 18–21.
4. Кулагина Е. С., Фокина Л. С. Применение весового автоматического титратора «Титрион» при аттестации стандартных образцов // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2018. – Т. 84, № 1–2. – С. 54–56.
5. Орлова С. В. Автоматизация расчётов по определению концентрации кислот в их смеси. Построение интегральных и дифференциальных кривых титрования // Развитие науки и техники: механизм выбора и реализации приоритетов : сборник статей Международной научно-практической конференции, Тюмень, 17 декабря 2022 года. Том Часть 1. – Уфа: Общество с ограниченной ответственностью «ОМЕГА САЙНС», 2022. – С. 57–61.

6. Создание прикладных программ для автоматизации процесса титрования на основе колориметрических свойств / А. Д. Степанов [и др.] // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : Сборник материалов Всероссийской научно-методической конференции, Оренбург, 26–27 января 2022 года. – Оренбург: Оренбургский государственный университет, 2022. – С. 4324–4329.

7. Тубашева А. Б., Юдин А. А. Сравнение методов определения конечной точки титрования при аргентометрическом определении хлоридов в природных водах // Шаг в науку. – 2022. – № 4. – С. 14–18.

Статья поступила в редакцию: 18.05.2025; принята в печать: 13.10.2025.

Авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.