

7. Патент РФ на изобретение № 2455052. Непомнящих Д. В., Крейкер А. А., Князев Ан. С. и др.

8. Патент РФ на изобретение № 2494115. Новиков В. Т., Фитерер Е. П., Яркова А. В., Похарукова Ю. Е. и др.

9. Лившиц М.Л. Технический анализ и контроль производства лаков и красок. – М.: Высшая школа, 1987. – 264 с.

ИЗУЧЕНИЕ СУБЛЕМАЦИОННЫХ СВОЙСТВ ГЕКСАФТОРОТИТАНАТА АММОНИЯ $(\text{NH}_4)_2\text{TiF}_6$

Е. И. Курченко, студент гр. 0491

Научный руководитель: *доцент, к. х. н., Р. И. Крайденко*

Томский политехнический университет, 634050, г.Томск, пр.Ленина,30,

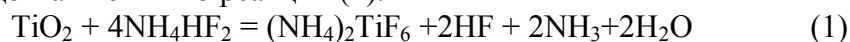
E-mail: evgenii@tpu.ru

Данная тема посвящена изучению сублимационных свойств $(\text{NH}_4)_2\text{TiF}_6$ для его извлечения из профторированного титано – магнетитового концентрата.

Важнейшими видами титановой продукции являются пигментный диоксид титана, мировое производство которого оставляет около 3 млн. т TiO_2 в год. На данный момент в России добывается меньше 5 % мирового производства, когда как по запасам в России около 59 % титановых руд, однако в основном это неосвоенные месторождения. [1] Поэтому изучение свойств соединения титана, которые в дальнейшем можно использовать в разработки технологии переработки титановых руд, является актуальным.

При переработки титановых руд широко используются сернокислотный и хлорный способ, но в последнее время все больший интерес имеет гидрофторидный способ. Реакция кислородсодержащих соединений титана с $(\text{NH}_4)_2\text{TiF}_6$ представляет особый интерес в силу технологической привлекательности способа извлечения титана из природного сырья посредством образования и последующего разложения фторотитанатов аммония с переходом титана в газовую фазу. [2]

По данной фторидной технологии титановый концентрат фторировался гидрофторидом аммония по реакции (1):



Также в соединение с фтором переходили Fe, Al, Ca, Mg, Si, V (таблица 1).

Таблица 1. Усредненный состав элементов во фторированном сырье

№	Элемент	Массовая доля, %
1	Ti	24,47
2	Si	0,17
3	Al	0,14
4	Ca	0,064
5	Fe	0,0061
6	Mg	0,0019
7	V	0,043

Затем проводились эксперименты по сублимации $(\text{NH}_4)_2\text{TiF}_6$, выявлялась зависимость между температурой процесса и толщиной насыпного слоя профторированного концентрата. В результате экспериментов были получены зависимости степени сублимации от времени при различных температурах и толщинах насыпного слоя (рис.1).

Как видно из полученных графиков наибольшая степень сублимации достигается при 650°C , тогда как при повышении температуры до 700°C выход продукта не изменялся, а даже наоборот процесс сублимации осуществлялся медленнее. Это явление объясняется гидролизом влагой воздуха титанового комплекса при его нагревании до 700°C , что приводило к образованию труднолетучего оксифторида титана по реакции (2), что приводит к снижению степени сублимации титана. [3]

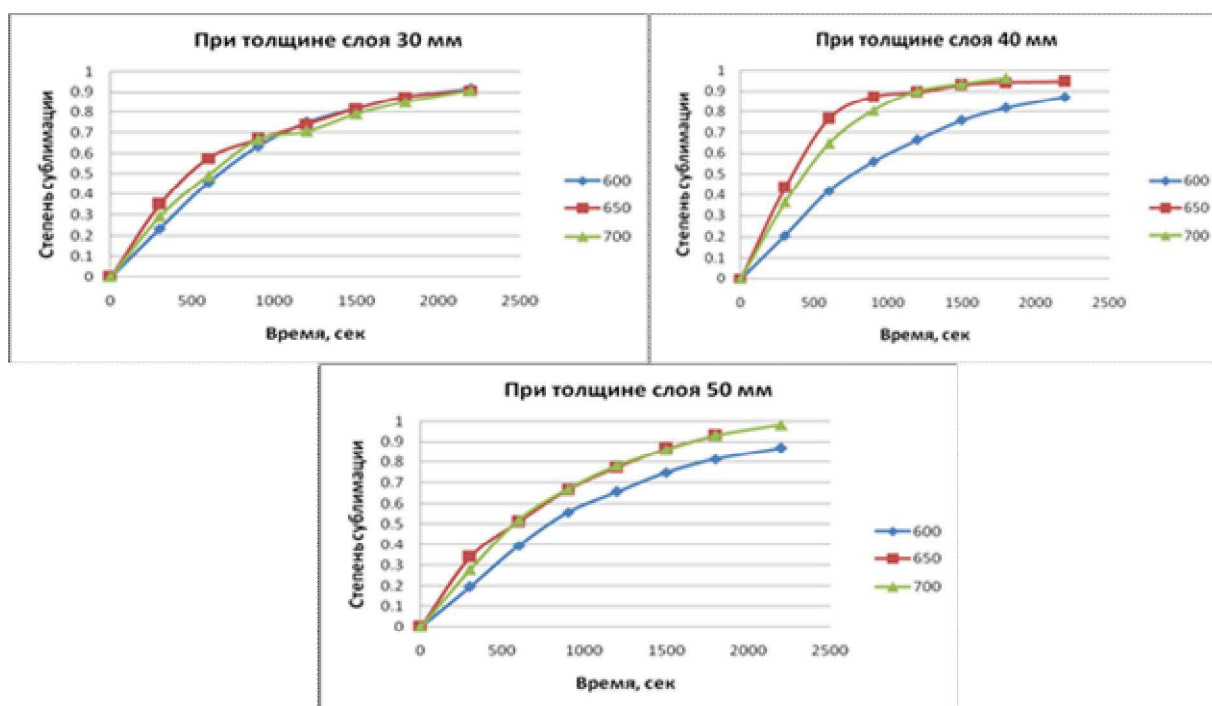


Рисунок 1. Зависимости степени сублимации от времени при различных температурах и толщинах насыпного слоя

По полученным графикам сложно определить при какой толщине сублимация идет быстрее, поэтому были подсчитаны скорости сублимации по экспериментальным данным (Таблица 2).

Таблица 2. Скорость сублимации титанового комплекса

$t^\circ\text{C}$	600	650	700
$h, \text{ мм}$	Скорость сублимации, $\text{кг/ч}\cdot\text{м}^2$		
30	23,5	27,1	26,3
40	33	35,4	31
50	45,4	48	45,9

Из результатов расчетов видно, что наибольшая скорость сублимации достигается при увеличении толщины насыпного слоя.

Также по данным графиков были сделаны кинетические расчеты, в результате которых было выяснено, что процесс протекает по уравнению сокращающейся сферы:

$$\alpha = 1 - (1 - 11,1 \cdot 10^{-3} \cdot e^{-\frac{25096,2}{RT}} \cdot t)^3$$

Таким образом, экспериментально было установлено что процесс сублимации гексафторотитаната аммония наиболее эффективно протекает при температуре 650°C, скорость. Скорость сублимации возрастает при увеличении толщины насыпного слоя. Выведенное уравнение сокращающейся сферы позволяет вычислить степень сублимации при заданных условиях [4].

Список литературы:

1. <http://www.mining-media.ru/ru/article/ekonomic>.
2. Мельниченко Е.И. Фторидная переработка редкометального сырья Дальнего Востока. Владивосток: Дальнаука, 2002.
3. Мельниченко Е. И. Оксифториды переходных металлов. Владивосток: Дальнаука 2001. - 35 с.
4. Розовский А. Я. Гетерогенные химические реакции. Кинетика и макрокинетика. М.: «Наука», 1980.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ИЗОМЕРОВ 3-НИТРО-1,5-БИС-(4-МЕТОКСИФЕНИЛ) ФОРМАЗАНА

*П.В. Петунин, магистрант гр. 4ГМ31, Р.Р. Валиев, к.ф.-м.н., ассистент каф. ОНХ,
П.С. Постников, к.х.н., ст. преп. каф. БИОХ
Томский политехнический университет, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30
E-mail: petuninpavel@yandex.ru*

Прогнозирование цветных характеристик веществ является важным аспектом органической химии, в частности, в химии красителей. В настоящее время активно развиваются квантово-механические методы расчета молекул, причем эти методы позволяют не только вычислять энергию молекулы, но и рассчитывать возбужденные состояния, что позволяет предсказывать УФ-спектры [1].

В настоящее время для изучения спектроскопических свойств активно используется как теория функционала плотности (DFT), так и *ab initio* методы. Результаты расчетов последних лет показывают, что точность вычислений энергий и вероятностей электронных переходов с помощью временно зависимой теории функционала плотности (TDDFT) не уступает, а часто и превосходит точность результатов вычислений с использованием *ab initio* методов.

Достаточно часто в качестве красителей используют формазаны [2]. Поэтому является актуальным использование TDDFT метода для теоретического изучения электронных спектров поглощения формазанов. 3-нитроформазаны очень