

Потенциальная энергия зависит только от расстояния между двумя слоями, а не от относительной хиральности внутренней и внешней трубок. Это открывает нам возможности исследования структурных и электронных свойств с помощью расчетов *ab initio* и DFT.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сайто Р., Дрессельхаус Г., Дрессельхаус М.С. Физические свойства углеродных нанотрубок. Imperial College Press; Глава 3 (1998).
2. Журне К., Мазер В.К., Бернье П., Лузо А., де ла Шапель М.Л., Лефрант С., Дениар П., Ли Р., Фишер Дж.Е. Крупномасштабное производство одностенных углеродных нанотрубок электродуговым методом. Природа; 388:756-758 (1997).
3. Дай Х., Ринзлер А.Г., Николаев П., Тесс А., Колберт Д.Т., Смолли Р.Э. Одностенные нанотрубки, полученные катализируемым металлом диспропорционированием монооксида углерода. хим. физ. Lett.; 260:471-475 (1996).
4. Б.В. Смит, М. Монтиу и Д.Е. Луцци, Инкапсулированный C60 в углеродных нанотрубках, Nature, 396, 323–324 (1998).
5. Д. К. Рапапорт, Искусство молекулярно-динамического моделирования, Издательство Кембриджского университета, Нью-Йорк, США, 2-е изд., (2004).

Киеу Бак Тхуан (Вьетнам)

Томский политехнический университет, г. Томск

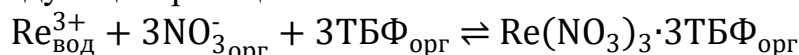
Научный руководитель: Карелин Владимир Александрович,
д-р техн. наук, профессор

ЭКСТРАКЦИЯ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ТРИБУТИЛФОСФАТОМ

Термин «редкоземельные элементы» (РЗЭ) обозначает группу из 17 химических элементов, в которую входят скандий, иттрий и лантаноиды. Лантаноиды представляют собой серию элементов с атомными номерами от 57 до 71 и все, кроме прометия, встречаются в природе [1]. Поскольку соседние редкоземельные элементы (РЗЭ) имеют чрезвычайно схожие физические и химические свойства возникает проблема от-

деления их друг от друга для научных исследований или промышленности. Следовательно, решение этой проблемы является самой сложной задачей в области технологии РЗЭ.

Экстракционные методы, особенно фосфорорганическими соединениями или карбоновыми кислотами, были доказаны в разных работах как эффективные методы разделения РЗЭ из раствора. Некоторыми распространенными экстрагентами являются ди-(2-этилгексил)-ортофосфорная кислота (Д2ЭГФК) [2] и трибутилфосфат (ТБФ) [3]. В промышленных масштабах чистый ТБФ широко применяют с разбавителями при экстракции РЗЭ из азотнокислых растворов. Механизм процесса можно записать следующей реакцией:



При концентрации $\text{HNO}_3 \leq 12 \text{ M}$, РЗЭ экстрагируются в виде сольватов с ТБФ, а в более кислых средах комплексные кислоты $\text{H}_n\text{Re}(\text{NO}_3)_{n+3} \cdot 3\text{ТБФ}$ выделяются из раствора.

Информация о экстрагенте. ТБФ является химически очень стабильным соединением, о чем свидетельствуют его термическая стабильность и стойкость к окислению. Физические свойства ТБФ, особенно коэффициенты извлечения металлов, близки к оптимальным для крупномасштабных операций. Эти факторы в сочетании с его доступностью обеспечат его дальнейшее использование в будущем. На рисунке 1 представлена структура ТБФ.

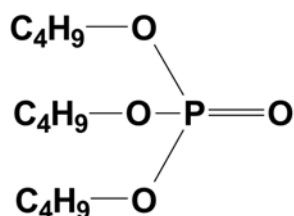


Рис.1. Структура ТБФ

Результаты. Зависимость коэффициентов распределения (α) РЗЭ от атомного номера представлена в рисунке 2. Все кривые не содержат точки для церия (Ce), так как невозможно предотвратить процесс окисления Ce (III) до Ce (IV). Полученная кривая при концентрации HNO_3 18,5 М почти прямая. Однако лучше всего она представлена двумя прямыми, сходящимися в окрестности $Z \sim 64$. При концентрации HNO_3 15,5 М отклонение от одной прямой линии весьма заметно. Следует отметить, что с уменьшением концентрации HNO_3 наклон правой части кривой уменьшается быстрее, чем наклон левой. Эта инверсия усиливается при еще более низких концентрациях HNO_3 , как показано на кривой при концентрации HNO_3 1,0 М.

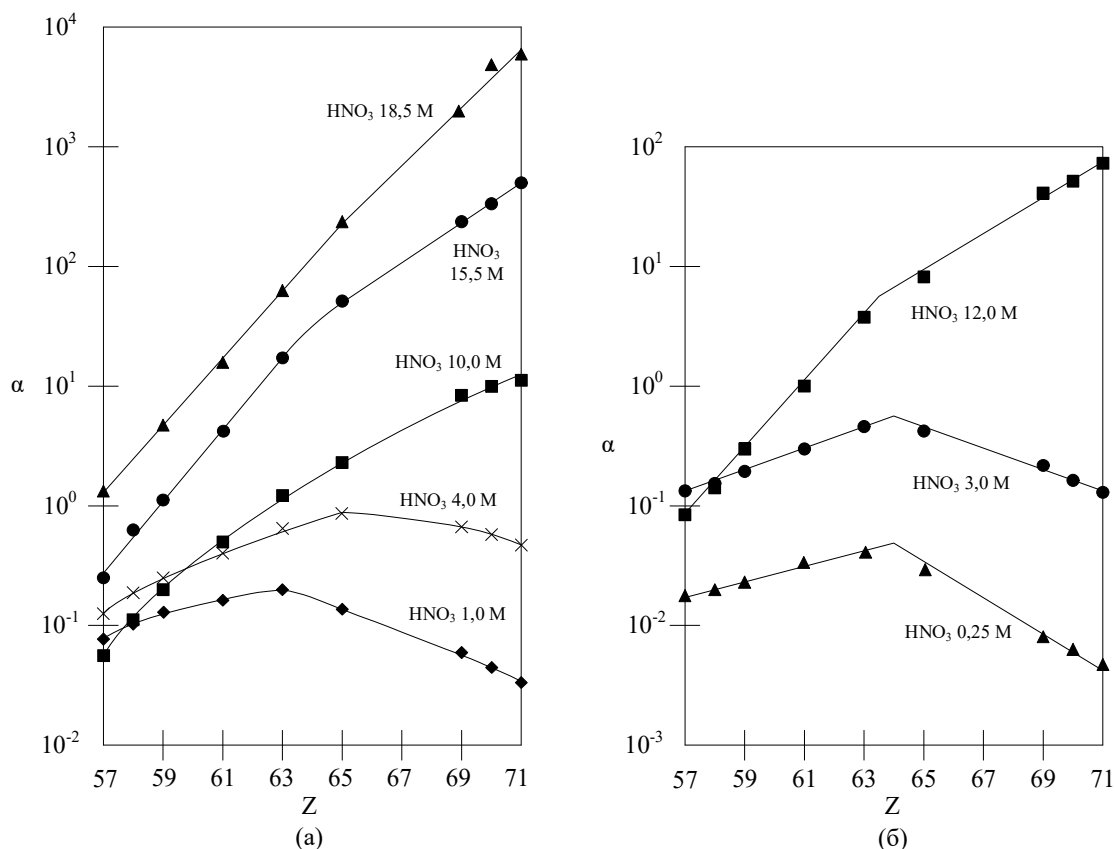


Рис. 2. Зависимость коэффициентов распределения РЗЭ от атомного номера при разных концентрациях HNO_3

Из-за этого эффекта, можно разделить РЗЭ на 2 подгруппы ($Z = 57-64$ и $Z = 64-71$) с произвольной прямой линией для каждой из них. Однако трудно определить, что эти линии соединены в одной точке, соответствующей $Z = 64$. В диапазоне $Z = 57-64$, все линии направлены вверх, даже при концентрации HNO_3 0,25 М.

Поскольку существует зависимость α от концентрации HNO_3 , эксперименты были проведены, чтобы определить зависимость α от концентрации ТБФ. ТБФ был разбавлен в бензине «галоша» (бензин прямой перегонки малосернистых нефтей [4]). Результаты представлены на рисунке 3. Видно, что 2 подгруппы показывают обратный порядок экстракции при значительно более высокой концентрации кислоты в системе с разбавленным ТБФ, чем в системе с неразбавленным ТБФ.

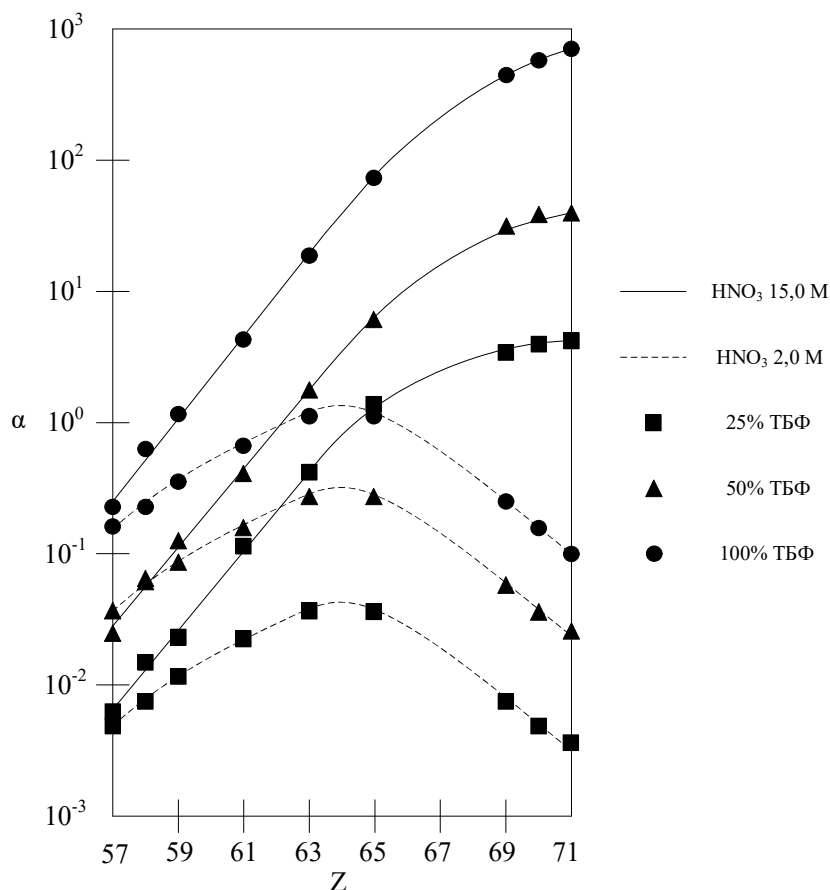


Рис. 3. Зависимость коэффициентов распределения РЗЭ от атомного номера при различных способах разбавления ТБФ

Заключение. Различные графики зависимости коэффициента распределения (α) от атомного номера (Z) можно рассматривать как соединение двух прямолинейных участков, пересекающихся при $Z \sim 64$. С уменьшением концентрации HNO_3 наклон участка с высоким Z уменьшается быстрее, чем у участка с низким Z . Кроме того, при уменьшении концентрации HNO_3 наклон участка с высоким Z становится отрицательным, а с низким Z остается положительным во всей исследуемой области.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gupta, С.К. Extractive metallurgy of rare earths / С.К. Gupta, N. Krishnamurthy // International Materials Reviews. – 1992. – Vol. 37. – Issue 1. – P. 197-248. – DOI: 10.1179/imr.1992.37.1.197.
2. Михайличенко, А.И. Экстракция редкоземельных элементов ди-(2-этилгексил)-ортофосфорной кислотой из азотнокислых растворов / А.И. Михайличенко, Р.М. Пименова // Радиохимия. – 1969. – № 11. – Вып. 1. – С. 8-13.

3. Вальков А.В. Экстракция редкоземельных элементов смесями изомеров трибутилфосфата с нитратом триалкилметиламмония / А.В. Вальков, Н.Д. Хмелевская // Изв. вузов. Химия и хим. технология. – 2018. – № 61. – Вып. 7. – С. 54-60. – DOI: 10.6060/ivkkt.20186107.5676.
4. Черножуков Н.И. Очистка и разделение нефтяного сырья, производство товарных нефтепродуктов. В 3 частях. Часть 3 / Н.И. Черножуков. – 6-е изд. – Москва : Химия, 1978. – 424 с., ил.

Ли Вэньди (Китай)

Томский политехнический университет, г. Томск

Научный руководитель: Илела Алфа Эдисон,
канд. техн. наук, доцент

СИНТЕЗ НАНОПОРОШКА $MgAl_2O_4-Ag$ С ПОМОЩЬЮ НАНОРАСПЫЛИТЕЛЬНОЙ СУШКИ

Введение. Серебро обладает целым комплексом уникальных свойств в том числе антибактериальных и противовирусных. В качестве антибактериального агента нано-серебро имеет большую удельную поверхность, малый размер частиц, легко контактирует с патогенными микроорганизмами и может проявлять максимальную биологическую активность [1]. Ограничением широкого использования серебра является его токсичность, одним из способов подавления которой является включение данного металла в состав инертного композиционного материала, например, полимера или керамики. В данной работе для этих целей предложено использовать алюмомагниевою шпинель.

В настоящее время композиционный материал на основе алюминия и магния широко используют благодаря исключительным физическим и химическим свойствам также низкой токсичности [2–4]. Одним из традиционных методов, который часто используется для получения $MgAl_2O_4$, является химический. В нашей работе мы предлагаем для получения нанопорошков $MgAl_2O_4-Ag$ использовать установку Nano Spray Dryer B-90. Она позволяет быстро получить чистый порошок [5].

Экспериментальная часть. Для подготовки прекурсоров готовили 1 М растворы нитратов алюминия и магния, выдерживали их в течение суток. Затем готовили суспензию гидроксидов методом обратного используя как осадитель аммиак. Использовали два соотношения между