

тверждает выводы, сделанные из расчетов ΔG_p для реакций, протекающих в системе U-Fe-H₂O.

Для установления основных параметров протекания реакции (2) экспериментально была определена степень восстановления и осаждения урана в зависимости от стехиометрического соотношения Fe(II) и U(VI). Восстановление урана проводили в модельных сернокислых растворах, содержащих 100 мг/дм³ U(VI), при pH = 4,0-5,5. Согласно результатам, уже при трехкратном избытке Fe(II) степень восстановления урана(IV) составляет 70-90%.

Таким образом, в процессе закисления технологических блоков при скважинном подземном выщелачивании урана на фронте продвижения слабокислых растворов (при pH > 4) возможно восстановление урана ионами двухвалентного железа и его осаждение в виде U(OH)₄. Поэтому для снижения степени отложения урана необходимо создание окислительной обстановки за счет введения в выщелачивающие растворы искусственных окислителей.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-33-00552 мол_а.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЧАСТИЦ ТИПА ЯДРО-КОРОНА НА ОСНОВЕ MoS₂ И NbS₂

Попов И.С., Еняшин А.Н.

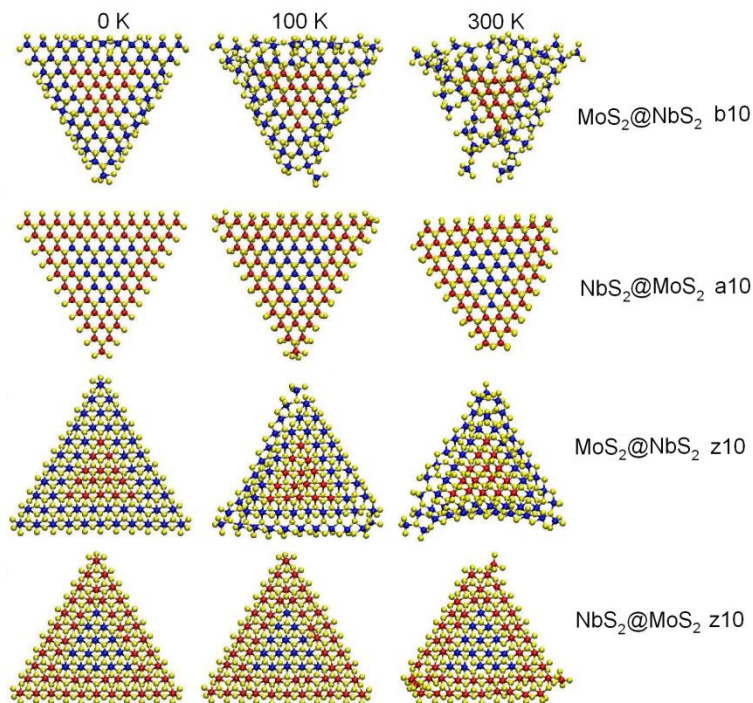
Институт химии твердого тела УрО РАН
620990, г. Екатеринбург, ул. Первомайская, д. 91

Слоистое соединение MoS₂ находит множество применений и является объектом исследования на протяжении многих десятилетий. Среди новых перспективных областей его применения – создание сенсоров, транзисторов, аккумуляторов, солнечных элементов, катализаторов. Расширения и улучшения спектра полезных свойств MoS₂ можно достигнуть путем создания твердых растворов на основе родственных халькогенидов переходных металлов, интеркалятов, частиц типа ядро-оболочка, ядро-корона и др. Нами рассматривалась термическая устойчивость плоских однослойных частиц типа ядро-корона на основе MoS₂ и NbS₂ как в Н, так и в Т-модификации. С этой целью в рамках метода функционала электронной плотности в приближении сильной связи (DFTB) проведено молекулярно-динамическое моделирование таких частиц при температурах 100 и 300 К на временных интервалах порядка 0,5 наносекунды. В моделировании при 100 К использовались частицы с предварительно оптимизированной геометрией, а при 300 – конечная

структура моделирования при 100 К. Результаты моделирования приведены на рисунке.

Частицы, в которых ядро образовано NbS_2 , а оболочка («корона») MoS_2 , демонстрируют большую устойчивость в Н и Т модификациях. При таком расположении при высоких температурах происходит лишь отрыв вершинок частиц. Обратное расположение приводит к разрушению короны NbS_2 при нагревании. В случае Н-модификации корона аморфизуется, в то время как в Т-модификации наблюдается перегиб ее краев.

Таким образом, частицы типа $\text{NbS}_2@\text{MoS}_2$ должны обладать большей устойчивостью и легкостью в получении, чем $\text{MoS}_2@\text{NbS}_2$.



Результаты молекулярно-динамического моделирования.

Красные шары – атомы Мо, синие – Nb, желтые – S.

Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект 15-9-3-34).