

**РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ РАЗДЕЛЕНИЯ ЛАНТАНА
И ПРАЗЕОДИМА НА ГАЛЛИЕВЫХ, ИНДИЕВЫХ И ЭВТЕКТИЧЕСКИХ
ГАЛЛИЙ-ИНДИЕВЫХ СПЛАВАХ В РАСПЛАВЕ 3LiCl-2KCl**

© С. Ю. Мельчаков, Л. Ф. Ямицков, В. А. Иванов, А. В. Щетинский,
В. А. Волкович, М. А. Русаков, А. Г. Осипенко, М. В. Кормилицын, 2013
ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет им. первого Президента
России Б. Н. Ельцина», Екатеринбург, Россия, jaaf@dpt.ustu.ru

Перспективными металлическими системами для переработки ОЯТ считаются индивидуальные металлы третьей группы и композиции на их основе. Это обусловлено низкими температурами плавления этих металлов ($T_{пл Ga} = 29,77\text{ }^\circ\text{C}$; $T_{пл In} = 156,78\text{ }^\circ\text{C}$; $T_{пл Ga-In(эвт)} = 15,3\text{ }^\circ\text{C}$) и их радиационной стойкостью, что позволяет работать с высокооблученным, маловыдержанным ядерным топливом.

Расчет коэффициентов разделения (Θ) проводили по данным табл. 1–4 о коэффициентах активности и растворимости лантана и празеодима в галлии, индии и их эвтектическом сплаве (уравнения 1 и 2). Для расчетов также приведены сведения об условных стандартных потенциалах лантана и празеодима (табл. 5) по данным [1–3].

Таблица 1

Коэффициенты активности β -лантана в жидких галлии, индии и сплавах
Ga-In эвтектического состава

Me	$\lg \gamma = a + b/T$		$\Delta T, \text{K}$	Источник
	a	$-b$		
Ga	4,825	13132	633–800	[4, 5]
	4,728	13378	675–975	[6]
In	2,764	9548	725–975	[7]
Ga-In	3,786	12216	573–1073	[8]

Таблица 2

Растворимость лантана (мол. доли) в жидких галлии, индии и сплавах
Ga-In эвтектического состава

Me	$\lg X = a + b/T$		$\Delta T, \text{K}$	Источник
	a	$-b$		
Ga	0,860	2310	400-800	[4]
	0,646	2258	675–975	[6]
In	0,880	2291,8	675–975	[7]
In	-1,31	1100	500–800	[10]
Ga-In	1,874	3136	573–1073	[8]

$$\lg \Theta_{\frac{Me1}{Me2}} = \frac{nF}{2.303RT} (E_{2liq}^* - E_{1liq}^*) + \lg \gamma_{Me1liq} - \lg \gamma_{Me2liq} \quad (1)$$

$$\lg \Theta_{\frac{Me1}{Me2}} = \frac{nF}{2.303RT} (E_{2sol}^* - E_{1sol}^*) + \lg X_{Me1} - \lg X_{Me2} \quad (2)$$

Таблица 3

Коэффициенты активности α -празеодима в жидких галлии, индии и сплавах Ga-In эвтектического состава

Me	$\lg \gamma = a + b/T$		$\Delta T, K$	Источник
	a	$-b$		
Ga	3,982	13178	633–800	[4, 5]
	5,334	13572	675–975	[11]
In	3,346	10012	675–975	[12]
Ga-In	2,351	9996	573–1073	[9]

Таблица 4

Растворимость празеодима (мол. доли) в жидких галлии, индии и сплавах Ga-In эвтектического состава

Me	$\lg X = a + b/T$		$\Delta T, K$	Источник
	a	$-b$		
Ga	0,740	2130	400–800	[4]
	0,744	2291	675–975	[11]
In	1,427	2730	675–975	[12]
Ga-In	3,515	4770	573–1073	[4]

Таблица 5

Условные стандартные потенциалы лантана и празеодима

Me	$-E^*_{sol}(723 K), B$	$-E^*_{sol}(823 K), B$	$-E^*_{liq}(723 K), B$	$-E^*_{liq}(823 K), B$
La	3,121	3,058	3,134	3,067
Pr	3,098	3,031	3,111	3,041

Коэффициенты разделения лантана и празеодима, рассчитанные по коэффициентам активности и растворимости приведены в табл. 5 и 6.

Таблица 6

Расчет коэффициентов разделения с использованием данных о коэффициентах активности Pr и La

Me	$-\lg \gamma (723K)$	$-\lg \gamma (823K)$	$-\lg \gamma_{liq} (723K)$	$\lg \gamma_{liq} (823K)$	Источник	
La	Ga	13,56	11,33	3,82	11,51	[4, 5, 6]
	In	10,44	8,84	10,70	9,02	[7]
	Ga-In	13,11	11,06	13,37	11,24	[8]
Pr	Ga	13,84	11,59	14,12	11,78	[4, 5, 11]
	In	10,50	8,82	10,78	9,00	[12]
	Ga-In	11,47	9,79	11,75	9,98	[9]
$\lg \Theta(Pr/La)$		Ga	-0,78	-0,76	н.р.	
		In	-0,56	-0,48	н.р.	
		Ga-In	1,14	0,77	н.р.	
$\Theta(Pr/La)$		Ga	0,16	0,18	н.р.	
		In	0,28	0,34	н.р.	
		Ga-In	13,7	5,9	н.р.	

Таблица 7

Расчет коэффициентов разделения с использованием данных о растворимости
Pr и La

Me		-lgX (723K)	-lgX (823K)	Источник
La	Ga	2,41	2,02	[4, 6]
	In	2,56	2,28	[7, 10]
	Ga-In	2,46	1,94	[8]
Pr	Ga	2,32	1,94	[4, 11]
	In	2,35	1,89	[12]
	Ga-In	3,08	2,28	[9]
lg Θ (Pr/La)	Ga	0,40	0,42	н.р.
	In	0,28	0,11	н.р.
	Ga-In	1,05	-0,84	н.р.
Θ (Pr/La)	Ga	0,40	0,38	н.р.
	In	0,53	0,78	н.р.
	Ga-In	11,14	0,14	н.р.

Список литературы

1. Roy J. J., Grantham L. F., McCoy L. R. et al. Molten salt chemistry and technology: Mater. Sci. Forum / Universite Pierre & Marie Curie, Laboratoire d'Electrochimie. Trans. Tech. Publications: Switzerland-Germany-UK-USA. 1991. V. 73–75. P. 547.
2. Внучкова Л. А., Баянов А. П., Дегтярь В. А., Серебренников В. В. Взаимодействие металлического празеодима с его трихлоридом в расплаве эквимольной смеси хлоридов калия и лития // Изв. вузов. Цветная металлургия. 1972. № 3. С. 115.
3. Lantelme F., Cartailier T., Berghoute Y. et al. Physicochemical Properties of Lanthanide and Yttrium Solutions in Fused Salts and Alloy Formation with Nickel // JES. 2001. V. 148. P. 604.
4. Яценко С. П., Аникин А. Ю., Диева Э. Н. Растворимость редкоземельных металлов в жидком галлии // Изв. АН СССР. Металлы. 1972. № 2. С. 212–214.
5. Лебедев В. А., Кобер В. И., Ямщиков Л. Ф. Термохимия сплавов редкоземельных и актиноидных элементов: справ. изд. Челябинск: Металлургия, Челябинское отделение, 1989. 336 с.
6. Внучкова Л. А., Баянов А. П., Серебренников В. В. Изучение термодинамических свойств сплавов системы лантан – галлий // Ж. физич. химии. 1971. Т. 45. Вып.1. С.177.
7. Дегтярь В. А., Баянов А. П., Внучкова Л. А., Серебренников В. В. Термодинамика систем La-In и La-Tl // Изв. АН СССР. Металлы. 1971. № 4. С. 149–153.

8. Dedyukhin A. S., Ivanov V. A., Melchakov S. Yu. et al. Activity coefficients and solubility of lanthanum and praseodymium in gallium-indium eutectic alloy // ECS Transactions. 2012. № 50 (11). P. 507–515.

9. Melchakov S. Yu., Ivanov V. A., Yamshchikov L. F. et al. Thermodynamics of reaction of praseodymium with gallium-indium eutectic alloy // J. of Nuclear Materials. 2013. № 437. P. 66–69.

10. Диева Э. Н. Растворимость редкоземельных металлов в жидком индии // Физико-химические исследования жидких металлов и сплавов : сб. трудов. Свердловск: УНЦ АН СССР. 1974. С. 98–104.

11. Внучкова Л. А., Баянов А. П., Серебренников В.В. Исследование термодинамических свойств празеодим-галлиевых сплавов // Ж. физич. химии. 1972. Т. 46. Вып. 4. С.1051–1052.

12. Дегтярь В. А., Баянов А. П., Внучкова Л. А., Серебренников В. В. Термодинамика жидких празеодим-индиевых сплавов // Ж. физич. химии. 1971. Т. 45. Вып. 7. С. 1816–1817.