

ИЗУЧЕНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ КРЕМНИЕВЫХ КОМПЛЕКСОВ В РАСПЛАВЕ $\text{KF-KCl-K}_2\text{SiF}_6$

Воробьёв А.С.* , Исаков А.В., Галашев А.Е.

Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*E-mail: alex2006-91@mail.ru

STUDY OF STABILITY OF SILICON COMPLEXES IN $\text{KF-KCl-K}_2\text{SiF}_6$ MELT

Vorob'ev A.S.* , Isakov A.V., Galashev A.Y.

Institute of High-Temperature Electrochemistry, Ural Branch, Russian
Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

In this work, the stability of silicon complexes formed in the $\text{KF-KCl-K}_2\text{SiF}_6$ melt was studied by the method of quantum mechanics. The following complexes were considered: fluoride, oxyfluoride and oxide.

В данной работе методом квантовой механики, реализованном в программном пакете Siesta, изучалась устойчивость кремниевых комплексов, образующихся в расплаве $\text{KF-KCl-K}_2\text{SiF}_6$. Нами были рассмотрены следующие комплексы: фторидные (SiF_x , где $x=4..7$), оксифторидные (SiO_3F , SiO_2F_2 , SiOF_3) и оксидные SiO_x и Si_2O_y , где $x=2..4$, а $y=4..7$. Данные комплексы были рассмотрены при разном соотношении калия к кремнию, начиная от систем без атомов калия, заканчивая системами имеющим три атома калия. Исследование проводили в рамках теории функционала электронной плотности с использованием базиса плоских волн. Для всех рассмотренных систем была произведена геометрическая оптимизация с использованием обобщённого градиентного приближения в форме РВЕ. Изменение полной энергии системы при динамической релаксации атомов ограничивалось величиной 0.001 эВ, а энергия обрезания базиса плоских волн равна 300 Ry.

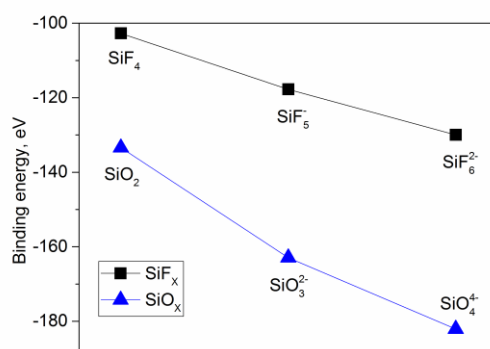


Рис. 1. Энергии связи комплексов SiF_x , SiO_xF_y , SiO_x при числе атомов калия равном 3

Все энергии связи были рассчитаны по формуле:

$$E_{\text{binding}} = E_{\text{SiOF}} - N_{\text{Si}}E_{\text{MSi}} - N_{\text{F}}E_{\text{F}} - N_{\text{O}}E_{\text{O}},$$

где E_{SiOF} , E_{Si} , E_{F} и E_{O} – полная энергия комплекса, энергии единичного атома кремния (Si^{4+}), фтора (F^{-1}) и кислорода (O^{-2}) соответственно, а N_{Si} , N_{F} , N_{O} обозначают количество атомов кремния, фтора и кислорода в системе.

Полученные в расчётах минимальные энергии связи полностью соответствуют энергетической последовательности комплексов, зарегистрированной *in situ* методом КР-спектроскопии в расплаве $\text{KF-KCl-K}_2\text{SiF}_6$ [1].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 18-73-00227.

1. Zaykov Y.P., Isakov A.V., et al. J. Phys. Chem. B, 118, 1584 (2014).

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ СОРБЦИИ КОБАЛЬТА

Вовк С.К.*, Денисов Е.И.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: sergey-vovk7@mail.ru

THE STUDY OF SORPTION KINETICS OF COBALT

Vovk S.K., Denisov E.I.

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Co sorption by T-35 sorbent was studied under dynamic conditions from 1M NaCl solution. The dependences «S – T» and «-lg(1-F) – T» were obtained for the determination of regularities of Co interphase distribution. A comparison of it depending on the pH, speeds of hashing and temperature of the solution was done. Obtained results have shown that T-35 sorbent is promising for extraction Co from solutions.

Целью данной работы является исследование кинетики сорбции кобальта, нахождение лимитирующей стадии и определение оптимальных условий по извлечению из растворов.

Исследования проводили в динамических условиях: колонка, заполнена сорбентом марки «Термоксид» Т-35 (ферроцианид никеля-калия на носителе гидроксиде циркония), через которую непрерывно по кругу прокачивается раствор (0,1M NaCl) с радиоактивным метчиком ^{60}Co при одновременном автоматическим измерением активности накопленной сорбентом. Соотношение массы сорбента к объему раствора составляет 1:100.