

**ЗНАЧЕНИЕ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ РЕДКОЗЕМЕЛЬНОГО ЭЛЕМЕНТА В ЧАСТНОСТИ ОКСАЛАТ НЕОДИМА В ПРОГРАММЕ DELPHI**

*С развитием техники и науки с каждым днем глубоко изучается каждый редкоземельный элемент, среди них особенно неодим. Далее приведены значения и актуальность математической модели процессов термического разложения оксалатнеодима. Для проведения расчета необходимы теплофизические свойства исходных материалов, эти данные и методика расчета приведены в работе.*

В 1878 году французский химик М. Деляфонтен обнаружил неоднородность дидима, а в 1879 году Л. Буабодран выделил из него фракцию, соответствующий элемент назвали самарием, а дидим продолжал числиться как элемент. Но в 1885 году австрийский химик Карл Ауэр фон Вельсбах разделил дидим на два элемента. Для этого он использовал метод фракционной кристаллизации двойных аммонийных солей: в одну фракцию входили соли зеленого цвета (им соответствовал бледно-зеленый оксид), в другую – соли цвета от фиолетового до красного (им соответствовал серовато-синий оксид). Элемент, дающий соли зеленого цвета, он назвал празеодимом, а второй элемент – неодимом (т. е. новый дидим). В виде металла неодим был получен группой немецких ученых во главе с В. Мутманном в 1902 году. Неодим (от греч. neos – новый и didymos – близнец, двойник) – химический элемент III группы 6-го периода периодической системы химических элементов Д. И. Менделеева, он относится к редкоземельным элементам – лантаноидам.

Основные константы и свойства неодима:[1]

Атомный номер	60
Атомная масса	144,24
Число известных изотопов	24
Число природных изотопов	7
Молекула	Nd
Плотность, г/см <sup>3</sup>	7,008
Температура плавления, оС	1024
Температура кипения, оС	3027
Степени окисления	0, +3
Потенциал ионизации, эВ	5,46
Сродство к электрону, эВ	-0,52
Относительная электроотрицательность	1,07
Электродный потенциал, В	-2,43
Конфигурация внешних электронных оболочек атома	4f46s2
Атомный радиус, пм	182
Ковалентный радиус, пм	164
Ионный радиус (Nd <sup>3+</sup> ), пм	104
Кларк, %	2,5*10 <sup>-3</sup>

Редкоземельные металлы обладают уникальными свойствами, благодаря чему используются в различных сферах современной промышленности, особенно в науке.

Уровень их применения является показателем научно-технического развития той или иной отрасли, способствует экономии минерального сырья, улучшению экологической обстановки, обеспечению национальной безопасности. В то же время редкоземельное минеральное сырье относится к числу не восполняемых в природных условиях ресурсов, его запасы ограничены. Мировой спрос на продукцию в последние 20 лет развивается по возрастающему тренду. Экспорт на редкоземельную в составе высокотехнологичных продуктов и изделий наиболее выгоден и именно он обеспечивает развитым государствам максимальную прибыль. Устойчивый рост потребности рынков редкоземельном сырье наблюдался на протяжении всей второй половины XX века, с большой долей вероятности он продолжится и в XXI веке. Ассортимент редкоземельной продукции будет расширяться, об этом говорит динамика мирового потребления редкоземельной продукции. Такие тенденции связаны, прежде всего, с усовершенствованием технологий практически во всех отраслях промышленности и использованием редкоземельной продукции в создании новых высокотехнологичных материалов, товаров и изделий с уникальными характеристиками. Все без исключения РЗЭ проявляют высокое химическое сродство к неметаллам (O, S, N, P, H), обычно присутствующим в черных металлах. В связи с этим возникает возможность применения РЗЭ в качестве эффективных раскислителей и десульфуризаторов различных сталей и сплавов. В этой области, главным образом, используют ферроцерий или сплав лантаноидов (мишметалл). Мишметалл представляет собой сплав церия и металлов цериевой подгруппы с небольшим (до 5 %) содержанием железа и повышающий прочность стали, ее коррозионную устойчивость, а также жидкотекучесть и обрабатываемость. Добавление 2 кг РЗЭ на тонну стали существенно увеличивает ее прочность и ковкость. Чрезвычайно важную роль играют РЗЭ в производстве высокопрочного чугуна; 0,15% Се существенно повышает его физико - механические свойства: повышение сопротивления окислению, улучшение литейных качеств, горячей ковкости. В качестве модификатора чугуна может быть также использован иттрий. Сплавы железа с высоким содержанием металлов цериевой подгруппы (70-75 % РЗМ и 25-30 % Fe) - пирофорны и находят широкое применение для изготовления кремней для зажигалок, а также для пиротехнических составов. Для этих же целей применяют мишметалл или его сплав с оловом и магнием. В цветной металлургии сплавы РЗЭ могут с успехом применяться в качестве восстановителей в металлотермических реакциях, так как РЗЭ более сильные восстановители, чем алюминий [1].

В настоящее время, обладающая крупнейшими в мире запасами и ресурсами редких элементов и необходимыми технологическими заделами для их освоения и использования, вынуждена удовлетворять потребности промышленности в РЗЭ за счет импорта их концентратов. Поэтому можно утверждать о полной экономической зависимости сырьевого рынка РЗЭ и с течением времени эта проблема будет только обостряться. Очень важно иметь собственные независимые источники сырья, что может быть в значительной мере реализовано переработкой промышленных отходов.

Одним из наиболее востребованных редкоземельных элементов является неодим, особенно в производстве жестких дисков и сверх магнитов. При производстве магнитов из-за несовершенства технологии до 40% магнитного материала теряется с отходами, наибольшую часть из которых составляют шлифовальные отходы, которые в настоящее время практически не перерабатываются. С учетом возрастания роли сильных магнитов в различных областях их потребления количество шлиф отходов также будет увеличиваться. Поэтому разработка технологий переработки отходов магнитного производства позволит в дальнейшем решить проблему утилизации, сократить затраты на приобретение сырья и вернуть в производство значительное количество дорогостоящего импортного сырья, тем самым осуществить производство магнитов с большой эффективностью. Например: Стекольная промышленность - один из крупных потребителей РЗЭ для производства

стекла, керамических и абразивных материалов. В стекольной промышленности РЗЭ применяются как для окрашивания стекла (в желтый цвет -  $\text{CeO}_2$ , красный -  $\text{Nd}_2\text{O}_3$ , зеленый -  $\text{Pd}_2\text{O}_3$  и др.), так и для обесцвечивания его (соли Nd, Er, Ce), для изготовления специальных стекол, поглощающих УФ -лучи (Nd - для защиты от солнечных лучей, Nd + Pr + Ce - в стекле очков для сварочных и других работ). Чистый оксид лантана применяется в оптических стеклах к объективам фото-аппаратов. Стекла с добавлением оксидов неодима и иттрия употребляются в качестве фильтров в рентгеноструктурных и астрофизических исследованиях. РЗЭ встречаются в виде следов в золе каменных углей, растений, костей, в кораллах, листьях, морской воде, глинистых сланцах, фосфорных рудах, известковых отложениях, метеоритах и на Солнце [2].

Сложность взаимодействия элементов системы плазменный поток дисперсный материал – стенки реактора, зависимость эффективности обработки дисперсного материала в плазменном реакторе от множества взаимосвязанных параметров, трудоемкость и сложность экспериментальных исследований привели к необходимости разработки и создания математических моделей и численных методов расчета процессов обработки дисперсных материалов в плазменных реакторах [3].

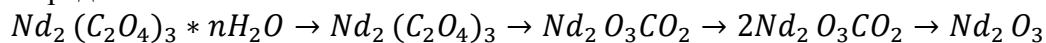
Широкое возможности создание в ПК для численных расчетов, способствовали разработке одно – двух и трехмерной математических моделей для расчета ряда процессов обработки дисперсных материалов. Отсутствие достоверных зависимостей учитывающих изменение параметров газа и материала в условиях плазменных температур, привело к использованию в математических моделях известных зависимостей, установленных для условий умеренных температур. Поэтому большинство выполненных численных расчетов дает информацию о качественном или относительном изменении параметров и не сравнивается с результатами экспериментальных исследований, что не позволяет оценить правомерность принятых допущений и используемых в математической модели зависимостей. Однако такие результаты численного расчета могут быть использованы как для оценки диапазона параметров в схемы плазменного устройства, необходимых для проведения эксперимента, так и для определения путей совершенствования плазменных реакторов. Наибольший интерес представляют математические модели и выполненные с их помощью численные исследования, которые подтверждены результатами экспериментов; вопросы выбора и построения математической модели; результатами и анализ численных исследований. Численные методы позволяют оптимизировать плазменные технологические процессы, геометрические размеры реактора, режимы плазменного потока и обработку в нем дисперсного материала в их взаимосвязи, т.е. в конечном счете весь плазменный технологический процесс в целом [4].

Известно довольно большое количество математических моделей для расчета движения и теплообмена частиц дисперсных материалов в высокотемпературном потоке газа, наиболее полные и достоверные из них предложены в работах [4, 5]. Данные о теплофизических свойствах как дисперсных, так и других форм оксалатов РЗЭ в области высоких температур в литературе отсутствуют. Математическая модель для расчета процессов обработки дисперсных материалов в плазменном реакторе с моногоструйной камерой смешения представлена в и для свой реализации, как и другие методы требуют знания как основных характеристик источника низкотемпературной плазмы-плазматронов, камеры смешения, канала реактора, так и теплофизических свойств обкатываемого продукта. Характеристики низкотемпературной плазмы и реакторов с трехструйными камерами смешения изложены в работах [6].

Данные о теплофизических свойствах как дисперсных, так и других форм оксалатов РЗЭ в области высоких температур в литературе отсутствуют. В связи с этим в работе были представлены результаты определения плотности оксалата неодима проводилось пикнометрическим методом среднее значение плотности сухого оксалата неодима  $2,5\text{г/см}^3$

соответственно. Теплоемкость оксидов неодама рассчитан по методике исходные данные для расчета температура диссоциации оксидов неодама  $T_{пл}=1800$  К стандартная энтропия  $S_{298}=187.855$  кал/моль температура полиморфного превращения оксидов неодама  $T_{п}=1033$ К [7].

Для сложных кислородных соединений, каковым, является оксид неодама содержащий твердые оксиды, в соответствии с рекомендуемой последовательностью расчета определим.

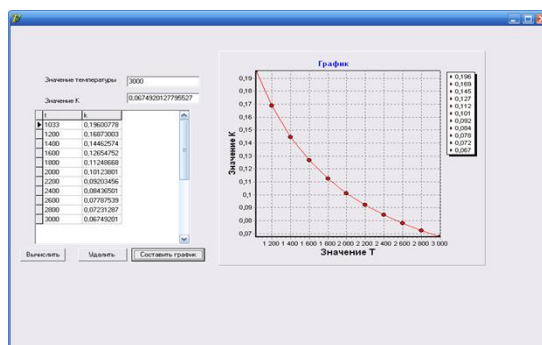


1) атомную энтропию оксидов неодама  $S^{ат} = S_{298}/n$  (n – число атомов в соединении);

2) величину  $T = 5070 / S^{ат}$ ;

3) коэффициенты b, и K входящие в последующие расчетные формулы,

$$a = 507 + \frac{1010}{S^{ат}}, \quad b = 0.8 * a, \quad K = 2535 / S^{ат} T n l n n.$$



K - зависимость полиморфного превращения оксидов неодама, в результате расчета зависит от полиморфного превращения оксидов неодама в высокой температурной области  $T = 3000$  К. Чем выше температура, тем больше возрастает полиморфное превращение оксидов неодама. Вывод - математическое моделирование процесса термического разложения оксидов РЗЭ при высоких температурах ( $T = 1033$  К-3000 К)

#### Литература:

1. <http://www.allbest.ru/>
2. [ru.wikipedia.org/](http://ru.wikipedia.org/)
3. [magnit-stop.ru/art.40/html](http://magnit-stop.ru/art.40/html).
4. Татыбеков А. Плазмохимическая технология получения оксидов иттрия, церия и неодама. – Фрунзе, 1987. – С. 7-13, 90-93
5. Будде К., Гебекер Д., Шмидт Х. Математическая модель высокотемпературного несущего потока с гетерогенной эндотермической химической реакцией. // Высокотемпературный тепло-массообмен в стационарных и нестационарных условиях. - Минск: ИТМО АН БССР, 1977.-С.169-183
6. Моссе А.Л. Плазменные реакторные устройства на основе многоструйной камеры смешения для обработки дисперсных материалов. // Изв. АН БССР. Серия физ.-энерг. наук, 1979.
7. Глушкова В.Б. Полиморфизм оксидов редкоземельных элементов. - Л.: Наука, 1967. - С.132.