

# ОБОБЩЕННАЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЭКСТРАКЦИИ ЛАНТАНОИДОВ И ИТТРИЯ В СИСТЕМАХ $\text{NH}_4\text{NO}_3\text{-HNO}_3\text{-H}_2\text{O-ТБФ}$ , $\text{HCl-NaCl-H}_2\text{O-Суанех 272-P507-}$ $\text{ТБФ}$ С УЧЕТОМ АССОЦИИ ЭКСТРАГЕНТОВ И ДИССОЦИИ КИСЛОТ

Афонин М.А.,<sup>а</sup> Нечаев А.В.<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup>Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет),  
190013, г. Санкт-Петербург, проспект Московский, дом 24-26/49, литер А,  
afonin18111956@yandex.ru

<sup>б</sup>Группа Компаний «Русредмет», 198320, Санкт-Петербург, г. Красное Село,  
ул. Восстановления, д. 15, корпус 3, литер А

Создана обобщенная термодинамическая модель совместной экстракции редкоземельных элементов цериевой подгруппы, Eu, Gd (РЗЭ) и Y в системе  $\text{Ln}(\text{NO}_3)_3\text{-NH}_4\text{NO}_3\text{-HNO}_3\text{-H}_2\text{O-ТБФ}(100\%)$  и  $\text{HCl-NaCl-H}_2\text{O-Суанех 272-P507-ТБФ}$ . Отличительные особенности модели – учет ассоциации экстрагентов и учет полученной нами зависимости константы диссоциации азотной и хлороводородной кислот от ионной силы водного раствора без использования коэффициентов активности.

Для расчета концентрационных констант экстракции веществ, диссоциации азотной кислоты и комплексообразования РЗЭ и иттрия с нитрат ионами предложено использовать единые уравнения их зависимости от ионной силы водного раствора. Если ионная сила водной фазы меньше 0,5, то расчет концентрационной константы проводится по уравнению Дебая-Хюккеля (1):

$$\text{Lg}K = \text{Lg}K_0 + A * \mu + \frac{0.505 * \Delta Z^2 * \sqrt{\mu}}{1 + 1.6 * \sqrt{\mu}} + B * C_{\text{extractant}}^y \quad (1)$$

Если ионная сила водной фазы больше 0,5, то расчет концентрационной константы проводится по модифицированному нами уравнению Васильева (2) (уравнению Дебая -Хюккеля) [1]

$$\text{Lg}K = \text{Lg}K_0 + A * \mu + 0.1954 * \Delta Z^2 * \sqrt[3]{\mu} + B * C_{\text{extractant}}^y \quad (2)$$

Определение констант экстракции и параметров неидеальности при помощи программы MULCON проводилось поиском глобального минимума целевой функции, зависящей от рассогласования всех данных экспериментальных и расчетных коэффициентов распределения экстрагируемых веществ. При определении минимума целевой функции применяли ограничения второго рода (соблюдение законов сохранения массы, заряда и соблюдении закона действия масс). Разработанная модель и расчетный метод позволили удовлетворительно, в пределах погрешности измерений, описать изотермы совместной экстракции нитратов и хлоридов La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu и Gd фосфорорганическими экстрагентами (ТБФ, P507 и Суанех 272), и экстракцию хлорида иттрия экстрагентом на основе P507.

## Литература

1. Копырин, А.А. / А.А. Копырин, Е.В. Комаров, М.А. Афонин // Стандартизация условий изучения комплексообразования в растворах. - Красноярск, 23-24 июня, 1982, Тез. докл. симпозиума, Красноярск: Сиб. ТИ, 1982, с.55-56