

УДК 669.213.6

КВАНТОВО-ХІМІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ РЕАКЦІЙНОЇ ЗДАТНОСТІ РЕЧОВИН ДЛЯ СТАБІЛІЗАЦІЇ ПЛАЗМОХІМІЧНО АКТИВОВАНОЇ ВОДИ

О. А. Півоваров

Доктор технічних наук, професор*

E-mail: apivo@fm.ua

М. І. Воробйова

Аспірант*

E-mail: Rita-vorobyova@yandex.ru

*Кафедра технології неорганічних речовин та екології

Український державний хіміко-технологічний Університет

пр. Гагаріна, 8, м. Дніпропетровськ, Україна, 49005

В роботі за допомогою програми HyperChem 7.00 виконано квантово-хімічні розрахунки ряду неорганічних речовин, відібраних для стабілізації пероксидних сполук, водних розчинів, оброблених під дією контактної нерівноважної низькотемпературної плазми. На основі розрахованих параметрів досліджуваних сполук проаналізовано їх реакційну здатність та досліджено силу їх донорно-акцепторної взаємодії з металами-катализаторами розкладення пероксидних та надпероксидних сполук

Ключові слова: квантово-хімічні розрахунки, стабілізуючі речовини, пероксидні сполуки, плазмохімічно активована водна

В работе с помощью Hyper Chem 7.00 выполнены квантово-химические расчеты ряда неорганических веществ, отобранных для стабилизации пероксидных соединений, водных растворов, обработанных под действием контактной неравновесной низкотемпературной плазмы. На основе рассчитанных параметров исследуемых соединений проанализирована их реакционная способность и сила донорно-акцепторного взаимодействия с металлами-катализаторами разложения пероксидных и надпероксидных соединений

Ключевые слова: квантово-химические расчеты, стабилизирующие вещества, пероксидные соединения, плазмохимически активированная вода

1. Вступ

Відколи Україна здобула незалежність, гостро стало питання про створення власних золотовалютних резервів держави [1]. Донедавна головним джерелом поповнення золотого запасу НБУ було виробництво дорогоцінних металів з вторинної сировини, однак через її вичерпаність наразі основними ресурсами вважаються золотовмісні руди та їх концентрати. В Україні відомо понад 16 золоторудних родовищ та 690 пунктів мінералізації золота, проте основною проблемою, що стримує їх широке залучення до експлуатації, є їх «упорність» до ціанідного методу вилуговування, який, на сьогодні, вважається одним з головних способів вилучення дорогоцінних металів з руд та концентратів [2–4]. У світовій гідрометалургійній промисловості розроблені способи інтенсифікації ціанідного вилуговування, проте, у своїй більшості, їх вдале застосування пов'язане із необхідністю використання багатостадійних технологій, що потребують введення в загальну схему вилуговування складного обладнання, що, як наслідок, збільшує собівартість отриманої продукції.

Одним з можливих способів інтенсифікації вилучення золота з рудних концентратів може бути використання ціанідних розчинів, виготовлених на основі води, обробленої за допомогою контактної нерівноважної низькотемпературної плазми (КНП)

[5]. Процес активації води полягає у контактній дії плазми тліючого розряду на воду в системі, яка складається із анода в газовій фазі і катода, який занурений у рідину. В результаті перебігу складних хімічних процесів утворюються реакційно спроможні гідратовані електрони, радикали і частки, які призводять до утворення пероксидних та надпероксидних сполук водню. На основі результатів попередніх досліджень [6–8] авторами встановлено, що останні завдяки своїм високим окислювальним властивостям є активними окислювальними компонентами процесу ціанування і сприяють збільшенню інтенсивності вилуговування золота в порівнянні з традиційним способом вилуговування в 1,5–2,5 рази. Разом з тим, ефективне використання плазмохімічних активованих ціанідних розчинів обмежено можливою втратою їх реакційної здатності, внаслідок розкладу перекисних сполук під дією металів, присутніх у більшості золотовмісної мінеральної сировини.

У зв'язку з цим, виникає питання стабілізації плазмохімічного активованого розчину в процесі вилуговування благородних металів.

Існує безліч органічних і неорганічних стабілізаторів пероксиду водню, спрямованих на запобігання його розкладання і збереження активності в продовж тривалого часу в різних середовищах [9]. За характером дії стабілізатори діляться на групи: 1) речовини з

адсорбційною здатністю [10]; 2) речовини, що здатні до утворення комплексів [11]; інші речовини, в тому числі органічні [12]. Аналіз літератури свідчить, що одними з найбільш ефективних є речовини другої групи, а саме солі фосфорної та пірофосфорної кислот, серед яких виділяють пірофосфати, гіпофосфати та метафосфати натрію, а також різні гідрофосфати і поліфосфати [11]. Стабілізуюча дія даного ряду речовин заснована на здатності зв'язувати іони полівалентних металів в пасивні для пероксиду водню комплексні іони.

Враховуючи велику кількість відомих на сьогоднішній день стабілізуючих речовин попередня кількісна оцінка їх реакційної здатності та ступеня дієвості в конкретних умовах є важливим етапом на шляху пошуку найбільш ефективних речовин для стабілізації пероксидних сполук води, обробленої КНП, при вилуговуванні дорогоцінних металів з рудного концентрату. Звукити коло потенційно ефективних добавок, і як наслідок, скоротити об'єм експериментальних досліджень по встановленню речовин, стабілізуюча дія яких, у визначених умовах, є оптимальною, дозволяє використання напівемпіричного метода квантово-хімічних розрахунків. Крім того, квантово-хімічні розрахунки допомагають встановити параметри, які визначають реакційну здатність сполук (електронна густина, структуру молекули з урахуванням взаємодії між атомами та ін.), що сприяє більш ґрунтовній інтерпретації експериментальних даних, отриманих в подальшому.

Таким чином, метою роботи стало відбір речовин для стабілізації пероксидних сполук, водних розчинів, оброблених під дією контактної нерівноважної плазми, методом квантово-хімічних розрахунків.

2. Методика експерименту

Для квантово-хімічних розрахунків (КХР) використовували метод молекулярної механіки ММ+ і напівемпіричний метод МР3 при повній оптимізації геометрії молекул (NuserChem 7) [13]. По розрахованих електронних зарядах на атомах молекул визначали їх здатність до хімічної взаємодії, а по хвильовій функції вищої зайнятої молекулярної орбіталі (ВЗМО) та нижчої вільної молекулярної орбіталі встановлювали найбільш вірогідні адсорбційні центри та енергію щільності ΔE . Згідно теорії *Кортана*'s значення енергії ВЗМО та НВМО пов'язані з потенціалом іонізації (I) та ядерною подібністю до електронів (A) наступним співвідношенням: $A = -E_{\text{НВМО}}$, $I = -E_{\text{ВЗМО}}$. Абсолютну жорсткість та абсолютну електронегативність розраховували за наступними формулами [14]:

$$\chi = \frac{1}{2}(I + A), \quad (1)$$

$$\eta = \frac{1}{2}(I - A). \quad (2)$$

За формулою (2), запропонованою в [14], розрахована сила взаємодії молекул з поверхнею α -Fe, як основного компонента широко розповсюджених в промисловості вуглецевих сталей:

$$\Delta N = \frac{\chi_A - \chi_B}{\eta_A - \eta_B}, \quad (3)$$

де χ – абсолютна електронегативність, eВ; η – абсолютна жорсткість, eВ; A – характеристики молекули досліджуваної речовини; B – характеристики елементарної решітки поверхні заліза.

Абсолютну електронегативність розраховували за формулою (2).

Також розрахована абсолютна м'якість молекул (δ) за формулою (4):

$$\sigma = \frac{1}{\eta}. \quad (4)$$

Згідно з роботою авторів за абсолютну електронегативність поверхні заліза теоретично можна прийняти $\chi_{\text{Fe}} \approx 7$ eВ [15], а абсолютну жорсткість – $G_{\text{Fe}} = 0$ eВ [16].

3. Результати та їх обговорення

З ціллю підбору речовини для стабілізації пероксидних сполук плазмохімічно активованої води при вилуговуванні для попереднього теоретичного аналізу хімічної активності було відібрано наступні речовини:

- ортофосфат натрію (Na_3PO_4);
- гідроортофосфат натрію (Na_2HPO_4);
- гідроортофосфат калію (K_2HPO_4);
- дифосфаттетра калію ($\text{K}_4\text{P}_2\text{O}_7$);
- дигідропірофосфат калію ($\text{K}_2\text{H}_2\text{P}_2\text{O}_7$);
- станат натрію ($\text{Na}_2\text{O}_3\text{Sn}$);
- трифосфат пентанатрію ($\text{Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}$).

В роботі методом квантово-хімічних розрахунків теоретично досліджено реакційну здатність досліджуваних речовин для цього методом молекулярної механіки ММ+ проведено їх просторову геометричну оптимізацію та розраховано електронні заряди на атомах молекул. Результати представлено на рис. 1.

Згідно з літературними даними [17, 18] адсорбція неорганічних речовин відбувається на частково заповнену орбіталь металів реакційними центрами молекул. При подібному механізмі адсорбції електронна взаємодія, як правило, має донорно-акцепторний характер, в результаті чого, за принципом теорії жорстких і м'яких кислот і основ (ЖМКО), згідно з яким, кислотно-лужна взаємодія відбувається таким чином що «жорсткі» кислоти переважно зв'язуються з «жорсткими» основами, а «м'які» кислоти з «м'якими» основами, утворюються хімічні комплекси неорганічних речовин з металом [19].

Відомо, що на основі значень електронних зарядів можна прогнозувати по яких атомах буде відбуватися взаємодія з металом [18]. Вважається, що саме атоми, на яких розташовані найбільш електронегативні заряди і, як наслідок, сконцентрована найбільша електронна густина, володіють надлишковим зарядом (тобто мають неподілену електронну пару) можуть виступати в якості донора. До того ж згідно з [19], чим більш негативний заряд на атомі, тим краще відбувається передача електронів від донора. Отже, відповідно до розрахованих значень електронних зарядів досліджуваних речовин, найбільш вірогідно взаємодія з металами відбувається: для ортофосфата натрію (Na_3PO_4) через O_2 , O_4 , O_6 , O_8 ; для гідроортофосфата натрію (Na_2HPO_4) через O_2 , O_4 , O_6 , O_8 ; для гідроортофосфата

калію (K_2HPO_4) через O_2, O_4, O_6, O_8 ; для дифосфаттетра калію ($K_4P_2O_7$) через $O_1, O_2, O_3, O_6, O_8, O_{10}, O_{12}$; для дигідропірофосфата калію ($K_2H_2P_2O_7$) через $O_2, O_3, O_5, O_6, O_8, O_{10}, O_{11}$; для станат натрію (Na_2O_3Sn) через O_1, O_4, O_3 ; для трифосфат пентанатрію ($Na_5P_3O_{10}$) $O_1, O_2, O_4, O_7, O_9, O_{10}, O_{12}, O_{14}, O_{15}, O_{16}$.

Під час реакції між донором електронів та акцептором електронів відбуваються парні взаємодії між всіма їх орбіталами, що підходять один до одного по симетрії, при цьому головний вклад в загальну енергію вносить взаємодія між граничними орбіталами ВЗМО донора (основи) та НВМО акцептора (кислоти). Тому при описі кислотно-основної взаємодії необхідно розглядати також величини ВЗМО донора та НВМО акцептора. Крім того, розташування ВЗМО відповідно до [20] показує ймовірність перебування електрона в певній точці простору на цій орбіталі, і тому для встановлення найбільш вірогідних реакційних центрів серед виділених у досліджуваних сполуках розраховано хвильову функцію їх вищої зайнятої молекулярної орбіталі рис. 2.

Розрахунки показали, що хвильова функція ВЗМО для молекул ортофосфата натрію (Na_3PO_4), гідроортофосфата натрію (Na_2HPO_4) та трифосфат пентанатрію ($Na_5P_3O_{10}$) розташована не на всіх атомах кисню, що обмежує кількість їх реакційних центрів до двох атомів кисню $O_6 (-0,737), O_8 (-0,752)$ у Na_3PO_4 , і трьох атомів кисню $O_2 (-0,756), O_6 (-0,708), O_8 (-0,734)$ та $O_1 (-0,717), O_2 (-0,678), O_4 (-0,716)$ у Na_2HPO_4 та $Na_5P_3O_{10}$ відповідно. У молекули дифосфаттетра калію ($K_4P_2O_7$) розташування хвильової функції також обмежує кількість реакційних центрів до трьох атомів кисню $O_2 (-0,738), O_3 (-0,781), O_{10} (-0,758)$ і адсорбція, ймовірно, буде йти саме через ці центри. Хвильова функція ВЗМО у дигідропірофосфат калію ($K_2H_2P_2O_7$) симетрично на атомах кисню $O_2 (-0,586), O_3 (-0,610), O_6 (-0,610), O_8 (-0,586)$. На відміну від вище зазначених речовин хвильова функція ВЗМО у молекули гідроортофосфат калію (K_2HPO_4) та станат натрію (Na_2O_3Sn) рівномірно розташована на атомах кисню і тому при взаємодії, найвірогідніше, будуть задіяні всі зазначені реакційні центри.

Значення енергії ВЗМО ($E(VZMO)$), окрім перебування електрона в певній точці простору на орбіталі, також зазвичай пов'язують зі здібністю молекули віддавати електрони (тобто виступами в якості донора електронів), в той час як енергія НВМО вказує на здібність молекули приймати електрон. Оскільки взаємодія відбувається за донорно-акцепторним механізмом, то, відповідно [21], більш високе значення енергії ВЗМО речовини свідчить про його підвищені адсорбційні властивості (за рахунок впливу на процес переносу заряду через адсорбційний шар). Крім того, відповідно до [16] про реакційну здатність молекули можна судити по значенню енергії щільності досліджуваних молекул (ΔE). Відтак високі значення цієї енергії молекули ($\Delta E = E(HCMO) - E(VZMO)$) свідчать про збільшення електронної стабільності та зменшення реакційної здатності, в той час, як більш низькі параметри цього значення навпаки вказують на високу реакційну здатність, оскільки енергія для видалення електрону з останньої зайнятої молекулярної орбіталі буде низькою [17].

Тому для досліджуваних сполук також розраховано енергетичні рівні нижньої вакантної і верхньої зайнятої молекулярних орбіталей (НВМО і ВЗМО) та енергія щільності, тобто їх різниця ($\Delta = E(НВМО) - E(VZMO)$) (табл. 1). Так, значення енергії щільності для досліджуваних молекул збільшується в ряду: трифосфат пентанатрію ($Na_5P_3O_{10}$) < дигідропірофосфат калію ($K_2H_2P_2O_7$) < станат натрію (Na_2O_3Sn) < ортофосфат натрію (Na_3PO_4) < дифосфаттетра калію ($K_4P_2O_7$) < гідроортофосфат калію (K_2HPO_4) < гідроортофосфат натрію (Na_2HPO_4).

Таблиця 1

Квантово-хімічні характеристики молекул речовин

Молекула	E_{VZMO} (eV)	E_{NBMO} (eV)	$\Delta E_{Н-В}$ (eV)	Потенціал іонізації
Ортофосфат натрію (Na_3PO_4)	-7,610085	-0,540882	7,069203	7,610085
Гідроортофосфат натрію (Na_2HPO_4)	-8,614887	0,6652333	9,28012	8,614887
Гідроортофосфат калію (K_2HPO_4)	-7,819713	-0,117711	7,702002	7,819713
Дифосфаттетра калію ($K_4P_2O_7$)	-6,407998	1,275636	7,683634	6,407998
Дигідропірофосфат калію ($K_2H_2P_2O_7$)	-7,394059	-1,618813	5,775246	7,394059
Станат натрію (Na_2O_3Sn)	-7,61980	-1,075879	6,543921	7,6198
Трифосфат пентанатрію ($Na_5P_3O_{10}$)	-6,95300	-1,97077	4,98011	6,9530

Представлений ряд вказує лише на реакційну здатність сполук, а оцінити силу їх донорно-акцепторної взаємодії з металами можна за ступенем переносу заряду (DN) – частиною електрона, що передано від молекули досліджуваної сполуки до атома метала. Оскільки результати попередніх досліджень хімічного складу рудного концентрату [8], свідчить що основну частину серед каталітично активних металів, присутніх в рудній фракції, становить залізо, тому при виборі стабілізуючої добавки визначаючим фактором є ефективність їх взаємодії саме із залізом.

Розраховані значення абсолютної жорсткості χ , абсолютної електронегативності η , абсолютної м'якості та сили взаємодії молекул з $\alpha - Fe$ для досліджуваних речовин (ΔN). Результати представлені в табл. 2.

З аналізу отриманих даних (табл. 2) видно, що ступінь переносу заряду ΔN_{me} , тобто сила взаємодії молекул кислоти - акцептора (метал) і основи - донора (досліджувані речовини) зменшується в ряду: дифосфаттетра калію ($K_4P_2O_7$) < трифосфат пентанатрію ($Na_5P_3O_{10}$) < дигідропірофосфат калію ($K_2H_2P_2O_7$) < ортофосфат натрію (Na_3PO_4) < станат натрію (Na_2O_3Sn) < гідроортофосфат калію (K_2HPO_4) < гідроортофосфат натрію (Na_2HPO_4).

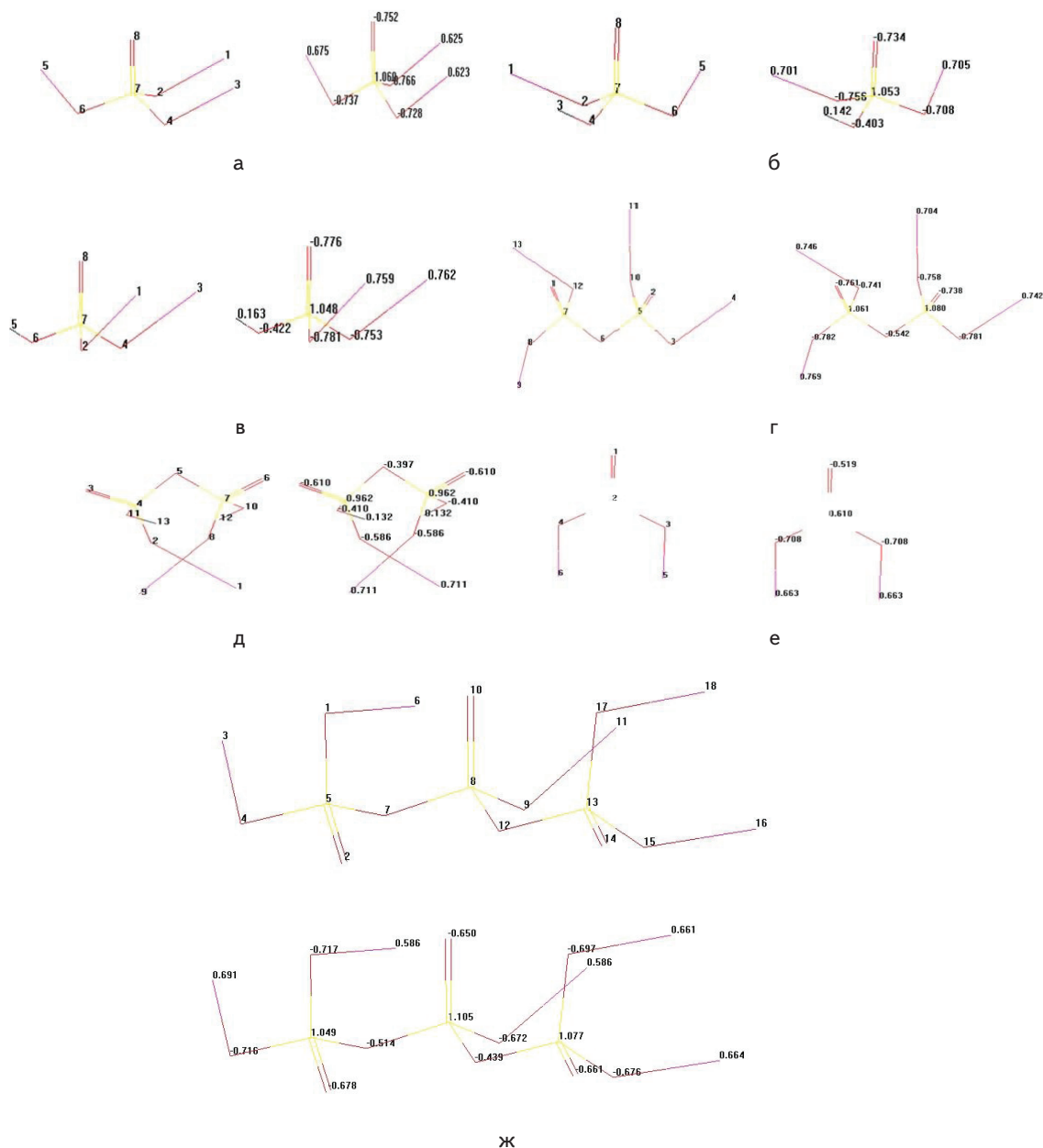


Рис. 1. Структура речовини після оптимізації геометрії молекул, послідовна нумерація атомів та електронний заряд на атомах досліджуваних сполук (Hyper Chem 7.0, RHF розрахунок за методом MNDO-PM3: а) ортофосфат натрію (Na_3PO_4); б) гідроортофосфат натрію (Na_2HPO_4); в) гідроортофосфат калію (K_2HPO_4); г) дифосфаттетра калію ($\text{K}_4\text{P}_2\text{O}_7$); д) дигідрофосфат калію ($\text{K}_2\text{H}_2\text{P}_2\text{O}_7$); е) станат натрію ($\text{Na}_2\text{O}_3\text{Sn}$); ж) трифосфат пентанатрію ($\text{Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}$).

Таблиця 2

Абсолютна електронегативність, абсолютна жорсткість та ступінь перенесення заряду молекул речовин

Молекула	X (eV)	η (eV)	σ (eV)	ΔN
Ортофосфат натрію (Na_3PO_4)	4,075483	3,534602	0,282917	0,413698
Гідроортофосфат натрію (Na_2HPO_4)	3,981277	4,633361	0,215814	0,32528
Гідроортофосфат калію (K_2HPO_4)	3,968712	3,851001	0,259673	0,393571
Дифосфаттетра калію ($\text{K}_4\text{P}_2\text{O}_7$)	2,566181	3,841817	0,260294	0,577047
Дигідрофосфат калію ($\text{K}_2\text{H}_2\text{P}_2\text{O}_7$)	4,506436	2,887623	0,346306	0,431768
Станат натрію ($\text{Na}_2\text{O}_3\text{Sn}$)	4,34784	3,271961	0,305627	0,405286
Трифосфат пентанатрію ($\text{Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}$)	4,4615	2,4915	0,401365	0,509432

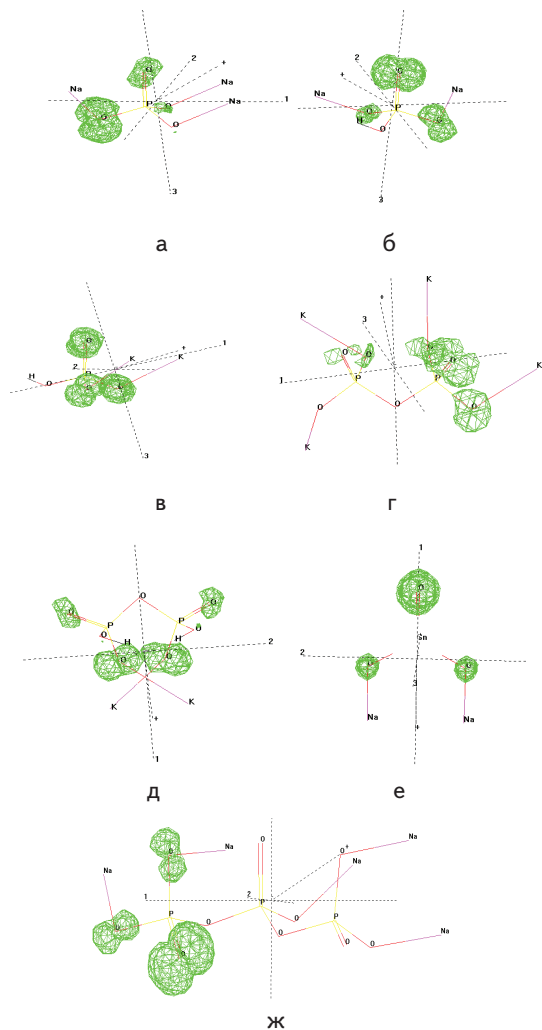


Рис. 2. Щільність вищої зайнятої молекулярної орбіталі оптимізованих структур молекул: а) ортофосфат натрію (Na_3PO_4); б) гідроортофосфат натрію (Na_2HPO_4); в) гідроортофосфат калію (K_2HPO_4); г) дифосфаттетра калію ($\text{K}_4\text{P}_2\text{O}_7$); д) дигідропірофосфат калію ($\text{K}_2\text{H}_2\text{P}_2\text{O}_7$); е) станат натрію ($\text{Na}_2\text{O}_3\text{Sn}$); ж) трифосфат пентанатрію ($\text{Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}$)

4. Висновки

В роботі з використанням програми HyperChem 7.00 виконано квантово-хімічні розрахунки ряду неорганічних речовин, відібраних для стабілізації пероксидних сполук H_2O_2 , що утворюються у воді, в результаті її обробки контактною нерівноважною плазмою. На основі розрахованих параметри досліджуваних сполук і показано, що їх реакційна здатність зменшується збільшується в ряду: трифосфат пентанатрію ($\text{Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}$) < < дигідропірофосфат калію ($\text{K}_2\text{H}_2\text{P}_2\text{O}_7$) < станат натрію ($\text{Na}_2\text{O}_3\text{Sn}$) < ортофосфат натрію (Na_3PO_4) < дифосфаттетра калію ($\text{K}_4\text{P}_2\text{O}_7$) < гідроортофосфат калію (K_2HPO_4) < гідроортофосфат натрію (Na_2HPO_4). Розраховано силу їх донорно-акцепторної взаємодії із залізом (ΔN_{Me}), що є металом-каталізатором розкладення пероксидних та надпероксидних сполук плазмохімічно активованої води, при вилуговуванні дорогоцін-

них металів з рудних концентратів. Показано, що ΔN_{Me} зменшується в ряду: дифосфаттетра калію ($\text{K}_4\text{P}_2\text{O}_7$) < < трифосфат пентанатрію ($\text{Na}_5\text{P}_3\text{O}_{10}$) < дигідропірофосфат калію ($\text{K}_2\text{H}_2\text{P}_2\text{O}_7$) < ортофосфат натрію (Na_3PO_4) < станат натрію ($\text{Na}_2\text{O}_3\text{Sn}$) < гідроортофосфат калію (K_2HPO_4) < гідроортофосфат натрію (Na_2HPO_4).

Література

1. Гучетль, И. С. Переработка упорных золотосодержащих руд и концентратов [Текст] / И. С. Гучетль, Е. Н. Друкель, Л. В. Барышников. – М.: Институт «Цветметинформация», 1972. – 60 с.
2. Горошников, Б. И. О генезисе полиметаллической минерализации Нагольного кряжа в Донбассе [Текст] / Б. И. Горошников, М. В. Курило // *Метаморфогенное рудообразование низкотемпературных фракций и ультраморфизма*. – М.: Наука, 1981. – С. 121–139.
3. Курило, М. В. Мінеральні асоціації і зона окиснення Бобрівського золоторудного родовища в Донбасі [Текст] / М. В. Курило, М. Ю. Дицук, Є. В. Балан // *Геолог України*, 2008 – № 3. – С. 67–73.
4. Лодейщиков, В.В. Методические рекомендации по типизации руд, технологическому опробованию и картированию коренных месторождений золота [Текст] / В. В. Лодейщиков, А. В. Васильева. – Иркутск: Иргиредмет, 1997. – 164 с.
5. Пивоваров, А. А. Неравновесная плазма: процессы активации воды и водных растворов [Текст] / А. А. Пивоваров, А. П. Тищенко. – Днепропетровск.: Грек, 2006. – 225 с.
6. Пивоваров, О.А. Кінетика розчинення дорогоцінних металів у плазмохімічно активованих розчинах [Текст] / О. А. Пивоваров, М. І. Воробійова // *Наукові вісті НТУУ «КПІ»*. – 2012. – № 3. – С. 115–119.
7. Пивоваров, О.А. Вилуговування дорогоцінних металів з упорних рудних концентратів розчинами, виготовленими на основі плазмохімічно активованої води [Текст] / О. А. Пивоваров, М. І. Воробійова // *Вопросы химии и химической технологии*. – 2012. – № 5. – С. 150–155.
8. Пивоваров, А. А. Стабилизация пероксида водорода в плазмохимически активированных растворах при выщелачивании благородных металлов из рудных концентратов [Текст] / А. А. Пивоваров, М. И. Воробьева // *Вопросы химии и химической технологии*. – 2012. – № 3. – С. 124–127.
9. Позин, М. Е. Перекись водорода и перекисные соединения [Текст] / М. Е. Позин. – М.: Л., 1951. – 457 с.
10. Берекблит, В. М. Химия и технология перекиси водорода [Текст] / В. М. Берекблит, В. В. Бурдин, В. М. Вишняков. – Ленинград: Химия, 1984. – 201 с.
11. Чтевская, Г. Н. Стабилизация растворов перекиси водорода в щелочной среде [Текст] / Г. Н. Чтевская, В. Г. Фомичев, Н. Е. Ковченко, Н. К. Хорева. // *Технология получения органических продуктов и перекиси водорода*. – 1986. – № 1. – С. 59–61.
12. Пат. 3781409 США, СІ. 423–273 / Stabilization of hydrogen peroxide, Theodore F. Miraday, Kendall Park, and Kenneth J. Radimer, Little Falls, – №.: 230067. Заявл. 28.02.1972; Опубл. 25.12.1973.

13. Stewart, J.J. Optimization of parameters for Semi empirical Methods. I. Method./ J.J. Stewart [Text] // J.Comput. Chem. – 1989. – V. 10. – P. 221.
14. Stewart J.J. МОРАС: A semi empirical Molecular Orbital Program / J.J. Stewart [Text] // J. Computer – Aided Molecular Desing. – 1990. V 4. P. 1-105.
15. Becke, A. D. Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior [Text] / A. D. Becke // Phys. Rev. – 1988. – № 38. – P. 3098–3100.
16. Perdew, J. P. Density-functional approximation for the correlation energy of the inhomogeneous electron gas [Text] / J. P. Perdew // Phys. Rev. 1986. – № 33. – P. 8822–8824.
17. Бугай, Д. Е. Использование квантово-химических индексов защитной способности ингибиторов коррозии при интерпретации механизма защитного действия [Текст] / Д. Е. Бугай, Л. И. Габитов, И.Г. Бреслер – М.: Химия, 1990. – 390 с.
18. Щембелов, Г. А. Квантово-химические методы расчета молекул [Текст] / Г. А. Щембелов, Д. А. Устынюк, В. Н. Мамаев. – М.: Химия, 1980. – 178 с.
19. Маррел, Дж. Химическая связь. [Текст] / Дж. Маррел, С. Кеттл, Дж. Теддер – М.: Мир, 1980. – 382 с.
20. Дорошенко, Т. Ф. О применении принципа ЖМКО для описания ингибирующей эффективности гетероциклических азотистых оснований [Текст] / Т. Ф. Дорошенко, С. Н. Лящук, Ю. Г. Скрипник. // Защита металлов. – 2000. – №3. – С. 27–29.
21. Квантово-механическая интерпретация роли полиаминов в ингибировании кислотной коррозии [Текст] / Г. Х. Авад, А. Н. Асад, А. М. Абдель, С. С. Масуд. // Защита металлов. – 1997. – №6. – С. 56 – 57.

В роботі розглянуті особливості реологічної поведінки водних суспензій воластоніту в залежності від геометричної конфігурації частинок в присутності поверхнево-активних речовин аніонного та неіоногенного типів. Показано, що аніонні модифікатори призводять до зменшення стабільності коагуляційної структури та переведення суспензій з псевдопластичного до дилатантного типу

Ключові слова: воластоніт, ПАР, модифікація, суспензія, реологічна поведінка, гранулометричний розподіл часток

В работе рассмотрены особенности реологического поведения водных суспензий воластонита в зависимости от геометрической конфигурации частиц в присутствии поверхностно-активных веществ анионного и неіоногенного типов. Показано, что модификаторы приводят к уменьшению стабильности коагуляционной структуры и переводу суспензии из псевдопластического в дилатантное состояние

Ключевые слова: воластонит, ПАВ, модификация, суспензия, реологическое поведение, гранулометрическое распределение частиц

УДК 667:64, 667:6

ВЛИЯНИЕ ПОВЕРХНО- АКТИВНЫХ ДОБАВОК НА РЕЛОГИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ВОДНЫХ СУСПЕНЗИЙ ВОЛАСТОНИТА

В. А. Свидерский

Доктор технических наук, профессор*

E-mail: xtkm-users@kpi.ua

А. А. Сикорский

Аспирант*

E-mail: alexey.sikorskiy@ukr.net

А. В. Миронюк

Кандидат технических наук, ассистент

E-mail: airshape@ukr.net

*Кафедра химической технологии
композиционных материаловНациональный технический университет Украины
«Киевский политехнический институт»
пр. Победы, 37, г. Киев, Украина, 03056

1. Введение

Воднодисперсные лакокрасочные материалы в настоящее время являются наиболее перспективным типом материалов, который удовлетворяет требованиям экологичности и экономической эффективности. Увеличение экономической целесообразности использования этих материалов принципиально достигается

повышением концентрации наполнителей в системе. При этом, перед разработчиком композиции стоит задача сохранения или улучшения эксплуатационных свойств. Максимальная допустимая концентрация наполнителя в системе может быть повышена за счёт использования фактора упаковки частиц или же за счёт снижения адсорбционной активности их поверхности по отношению к связующему [1]. Последнее достига-