

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Институт цветных металлов и материаловедения

Кафедра органической и аналитической химии

УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой
_____ Б.Н. Кузнецов
« ____ » _____ 2018г.

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

04.03.01 - Химия

ИЗУЧЕНИЕ ИОННОГО СОСТАВА КРИОЛИТА В ПРОЦЕССЕ ПРОИЗВОДСТВА АЛЮМИНИЯ

Руководитель _____ доцент, канд.хим.наук Ф.Н. Томилин

Выпускник _____ С.А. Хегай

Красноярск 2018

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа по теме «Изучение ионного состава криолита в процессе производства алюминия» содержит 39 страниц текстового документа, ссылки на 30 использованных источников, 12 рисунков, 6 таблиц.

АЛЮМИНИЙ, КРИОЛИТ, ФТОРИДЫ АЛЮМИНИЯ, ТЕОРИЯ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ (DFT), VЗЛУР.

Алюминиевая промышленность является крупной отраслью цветной металлургии, объединяющей комплекс предприятий по выработке металлического алюминия. Благодаря своим уникальным физико-химическим свойствам данный металл нашёл широкое применение в электротехнике, строительстве, авто- и авиастроении, упаковке пищевых продуктов, производстве бытовой техники и пр. Целью работы является изучение ионного состава криолита в процессе производства алюминия с помощью квантовохимических расчётов. В ходе исследования обнаружено, что ионы AlF_4^- , AlF_5^{2-} , AlF_6^{3-} являются термодинамически устойчивыми. С катионами Na^+ структуры AlF_4^- , AlF_5^{2-} , AlF_6^{3-} образуют стабильные соединения, для кластеров NaAlF_4 и Na_3AlF_6 существуют по две различные конформации, когда для Na_2AlF_5 существует только одна конфигурация. Расчёты показывают, что частица AlF_6^{3-} может играть ключевую роль при взаимодействии с глинозёмом в процессе получения алюминия. Моделирование расплава глинозёма и криолита позволит повысить экономичность и эффективность технологии электролиза.

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Институт цветных металлов и материаловедения
Кафедра органической и аналитической химии

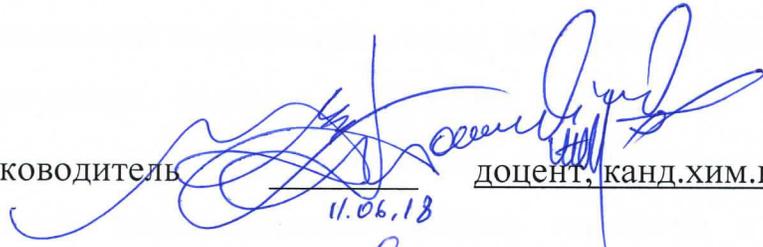
УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой
 Б.Н. Кузнецов
« 11 » 06 2018г.

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

04.03.01 - Химия

ИЗУЧЕНИЕ ИОННОГО СОСТАВА КРИОЛИТА В ПРОЦЕССЕ ПРОИЗВОДСТВА АЛЮМИНИЯ

Руководитель



11.06.18

доцент, канд.хим.наук

Ф.Н. Томилин

Выпускник



11.06.18.

С.А. Хегай

Красноярск 2018