

## THE PRODUCT OF POLYETHYLENE TEREPHTHALATE CHEMICAL DESTRUCTION AS THE COMPLEX REAGENT FOR COAL ORGANIC MASS EXTRACTION

**Bodyan L.A., Varlamova I.A., Girevaya N.Y., Kalugina N.L., Medyanik N.L.**

Nosov Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk, Russia (455000, Magnitogorsk, Lenina, 38),  
e-mail: chem@magtu.ru

The product of polyethylene terephthalate chemical destruction was obtained. Quantum-chemical parameters of compounds-components of the destruction product (ethyleneglycolterephthalate, diethyleneglycolterephthalate, terephthalic acid, ethyleneglycol) were calculated, and these results were a foundation to evidence presence of active electron donor (nucleophilic) centers on oxygen atoms of carboxyl, ester and hydroxyl groups. Quantum-chemical parameters of functional groups which modeled a structure of the coal organic mass (COM) were calculated, and they were a basis to establish presence of electron acceptor (electrophilic) adsorption centers with maximum positive charge on coal surface carbon fragments. COM - reagent interaction runs using the charge-controlled mechanism was established: COM's active adsorption centers give lower unoccupied molecular orbitals (LUMO), components of the polyethylene terephthalate destruction product give highest occupied molecular orbitals (HOMO). The ability to use the polyethylene terephthalate destruction product as a complex reagent which combines collector and foamer properties to extract coal organic mass was proved. Use of the complex reagent leads to better parameters of flotation in comparison with traditional flotation reagents as thermogasoil and waste still bottoms of butyl alcohols was obtained. When reagent consumption was reduced 3.5 times concentrate output increased by 4.5% with nearly the same ash.

## ИЗОТОПНЫЙ ОБМЕН В МОЛЕКУЛАХ СО НА ЦЕМЕНТНОМ MNALCA-КАТАЛИЗАТОРЕ

**Бреева Н.В.<sup>1,2</sup>**

1 ФГБОУ ВПО «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»  
(125047, г. Москва, Миусская пл., 9), e-mail: n\_breeva@mail.ru  
2 ООО «Химвэй Палладиум» (302027, г. Орел, Октябрьская, 27)

Методом изотопного обмена исследовано взаимодействие СО с промышленным катализатором MnAlCa в интервале температур  $-196 \pm 500$  °С. При температурах выше 300 °С наблюдался гетерообмен  $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$  с поверхностным кислородом катализатора.  $^{12}\text{C}^{18}\text{O} + [^{16}\text{O}]_{\text{пов}} \leftrightarrow ^{12}\text{C}^{16}\text{O} + [^{18}\text{O}]_{\text{пов}}$ . Скорость гетерообмена в 1060 раз больше скорости гомомолекулярного обмена  $\text{CO} (^{12}\text{C}^{18}\text{O} + ^{13}\text{C}^{16}\text{O} \leftrightarrow ^{12}\text{C}^{16}\text{O} + ^{13}\text{C}^{18}\text{O})$  при этой же температуре. Наряду с гетерообменом наблюдалось образование  $\text{CO}_2$  в газовой фазе. На основании данных кинетики изотопного обмена и адсорбционных измерений высказано предположение, что в интервале температур  $-196 \pm 25$  °С обмен протекает через промежуточные комплексы адсорбированных молекул СО, слабо связанных с поверхностью. При высоких температурах равновесие между различными формами адсорбированного СО сдвинуто в сторону адсорбции с большей энергией связи и обмен между молекулами СО идет через соединения, включающие поверхностный кислород катализатора.

## CO ISOTOPIC EXCHANGE REACTION OVER MNALCA CATALYST

**Breeva N.V.<sup>1,2</sup>**

1 D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia (125047, Moscow, Миусская а square, 9),  
e-mail: n\_breeva@mail.ru  
2 Chemway Palladium Co.ltd (302027, Orel, Oktybrskaya street, 27)

In this paper we report our results regarding the isotopic exchange reaction:  $^{12}\text{C}^{18}\text{O} + ^{13}\text{C}^{16}\text{O} \leftrightarrow ^{12}\text{C}^{16}\text{O} + ^{13}\text{C}^{18}\text{O}$  over MnAlCa catalyst between  $-196$  and  $+5000$ °C. In the  $-196 \pm 250$ °C temperature range, no CO disproportionation/dissociation reactions are observed. For the MnAlCa catalyst, an activation energy of 14,6 kJ mol<sup>-1</sup> was estimated for the isotopic mixing reaction within the range  $-196 \pm 250$ °C. It is proposed that the CO isotopic exchange proceeds via no dissociative mechanism in the same range. At higher temperature, reactions of CO disproportionation are observed. An exchange of the  $^{16}\text{O}$  from the MnAlCa support with the gas-phase  $^{18}\text{O}$ -containing isotopes of CO takes place. Three types of CO adsorbed species on MnAlCa were proposed. Mass spectrometric, chemisorptions measurements have been employed.

## ВЛИЯНИЕ ДОБАВКИ АЛЮМИНИЯ НА СОСТАВ И МОРФОЛОГИЮ ПЛЕНОК ГИДРОКСИДА ЦИНКА, ОСАЖДЕННЫХ ИЗ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ

**Ваганова Ю.В., Миролюбов В.Р., Катышев С.Ф., Ищенко А.В., Ключкина Е.О.**

ФГАОУ ВПО «Уральский Федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»,  
Екатеринбург, Россия (620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19), e-mail: mery118@mail.ru

Пленки гидроксида цинка с добавкой алюминия были получены методом химического осаждения из водных растворов. Определены условия совместного осаждения гидроксидов цинка и алюминия с использованием методики расчета условий ионного равновесия в растворе. Методами рентгенофазового анализа и сканирующей электронной микроскопии исследованы фазовый состав и морфология полученных продуктов. В сильно щелочной области