



Molekuulmodellering van tantaalpentahaliedes tydens hidrolise- en oksidasie-reaksies



Authors:

Marietjie J. Ungerer¹
Cornelia G.C.E. van Sittert¹ 
Derik J. van der Westhuizen¹
Henning M. Krieg¹ 

Affiliations:

¹Chemical Resource Beneficiation (CRB), North-West University, South Africa

Corresponding author:

Marietjie Ungerer,
marietjie.ungerer@nwu.ac.za

How to cite this article:

Ungerer, M.J., Van Sittert, C.G.C.E., Van der Westhuizen, D.J. & Krieg, H.M., 2017, 'Molekuulmodellering van tantaalpentahaliedes tydens hidrolise- en oksidasie-reaksies', *Suid-Afrikaanse Tydskrif vir Natuurwetenskap en Tegnologie* 36(1), a1468. <https://doi.org/10.4102/satnt.v36i1.1468>

Copyright:

© 2017. The Authors. Licensee: AOSIS. This work is licensed under the Creative Commons Attribution License.

Molecular modelling of tantalum penta-halides during hydrolysis and oxidation reactions.

Molecular modelling was used to identify the species that form during the solvent extraction of tantalum and niobium. In this case study the acknowledged reactions of tantalum pentachloride are used to identify the tantalum pentafluoride, -hydroxide and -oxyfluoride species that may form.

Die oorgangsmetale tantaal (Ta) en niobium (Nb), wat gewoonlik saam in die natuur gevind word, het soortgelyke chemiese en fisiese eienskappe, wat hul skeiding uitdagend maak. Daar is verskeie metodes vir die skeiding van hierdie twee metale beskikbaar, insluitende reduksie, fluorinerings, chlorinerings en vloeistof-vloeistofekstraksie. In 'n onlangse studie is die geskiktheid van vloeistof-vloeistofekstraksie vir die skeiding van Ta en Nb bevestig. In die studie is bevestig dat spesiëringdata nodig word om die verkrygte verdelingsdata te verduidelik. Omdat tradisionele tegnieke of instrumente wat die spesies kan identifiseer, egter nie gereedlik vir Ta en Nb toegepas kan word nie, is daar besluit om vir hierdie doel van molekuulmodellering gebruik te maak.

Om die geskiktheid van molekuulmodellering te ondersoek is 'n gevallestudie gedoen, waar daar veronderstel is dat wanneer tantaalpentafluoried (TaF_5) in water opgelos word, dit stapsgewys met water reageer om uiteindelik tantaalpenta-hidroksied [$\text{Ta}(\text{OH})_5$] en ander oksifluoriedspesies, insluitende TaOF_3 , te vorm. Vanweë die beperkte literatuur oor TaF_5 -reaksies met water, is in 'n eerste stap tantaalpenta-chloried (TaCl_5) en sy reaksies met water gebruik om die metode te ontwikkel. As deel van die modelontwikkeling en -verifikasie, is digtheidsfunksioneel-teorie (DFT), waar verskillende funksionele en basisstelle vergelyk is, gebruik om die energie te bereken wat nodig is vir hierdie reaksies. Die geverifieerde model is daarna as 'n gevallestudie op TaF_5 toegepas.

Van die resultate word voorgestel in Figuur 1, waar spesie A TaF_5 met H_2O 'n intermediere spesie B vorm, en waar die H_2O koördineer met die metaalkern van die TaF_5 in beide 'n aksiale en ekwatoriale posisie; C die stabiele $\text{Ta}(\text{H}_2\text{O})\text{F}_5$ -spesie; D die oorgangstoestand waar een van die H-atome van H_2O met een van die F-atome in TaF_5 bind voordat HF as produk afkom; en E TaF_4OH met die OH-groep in 'n aksiale posisie (-4.80 kcal/mol) of ekwatoriale posisie (-2.35 kcal/mol) vorm. By punt E het die geometrie verander vanaf trigonaalbipiramidaal na vierkantigpiramidaal.

Tydens die vergelyking van die resultate van TaCl_5 (metode verifikasie) met TaF_5 (gevallestudie) is soortgelyke data en tendense waargeneem. Hierdie waarnemings dui daarop dat die model geskik is vir die bestudering van die TaF_5 -reaksies met H_2O . Verdere resultate het bevestig dat die vorming van $\text{Ta}(\text{OH})_5$ en Ta_2O_5 vanaf die reaksie van TaX_5 ($X = \text{Cl}$ of F) met water 'n endotermiese reaksie is, terwyl die vorming van $\text{Ta}(\text{H}_2\text{O})\text{F}_5$ en TaF_4OH eksotermies is.

Toekomstige molekuulmodelleringwerk sal die ondersoek behels van die invloed van 'n suur op die metaal- H_2O -interaksie deur spesie-identifikasie in 'n waterige fase, soos in vloeistof-vloeistofekstraksie gevind word.

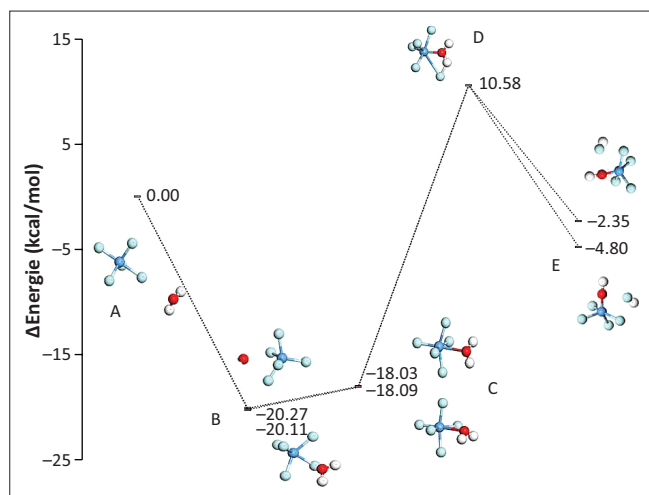
Read online:



Scan this QR code with your smart phone or mobile device to read online.

Note: A selection of conference proceedings: Student Symposium in Science, 27–28 October 2016, North-West University, South Africa. Organising committee: Mr Rudi Pretorius (Department of Geography, University of South Africa); Dr Hertzog Bisset (South African Nuclear Energy Corporation [NECSA]); Dr Andrew Swarts (School of Physical and Chemical Sciences, North-West University).

This abstract is partially based on the authors' publication: Ungerer, M.J., Van Sittert, C.G.C.E., Van der Westhuizen, D.J. & Krieg, H.M., 2016, 'Molecular modelling of tantalum penta-halides during hydrolysis and oxidation reactions', *Computational and Theoretical Chemistry* 1090, 112–119. <http://dx.doi.org/10.1016/j.comptc.2016.06.011>



FIGUUR 1: Hidrolisereaksie van TaF₅ met H₂O.

Literatuurverwysings

Ungerer, M.J., Van Sittert, C.G.C.E., Van der Westhuizen, D.J. & Krieg, H.M., 2016, 'Molecular modelling of tantalum penta-halides during hydrolysis and oxidation reactions', *Computational and Theoretical Chemistry* 1090, 112–119.