Северский Государственный
Технологический Институт

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОМПЬЮТЕРНЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ ГЕТЕРОГЕННЫХ ПРОЦЕССОВ ГАЗ-ТВЕРДОЕ

Мясников М.С.

ГЕТЕРОГЕННЫЕ ПРОЦЕССЫ ГАЗ-ТВЕРДОЕ В АТОМНОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ:

- Фторирование урана, плутония и т. д.
- Очистка сбросных газов
- Селективная сорбция и десорбция
- Процессы окисления и восстановления

ЦЕЛИ ИССЛЕДОВАНИЯ КИНЕТИКИ ГЕТЕРОГЕННЫХ ПРОЦЕССОВ:

1. Установление факторов, влияющих на процесс
2. Определение кинетических параметров реакции и вывод уравнения вида

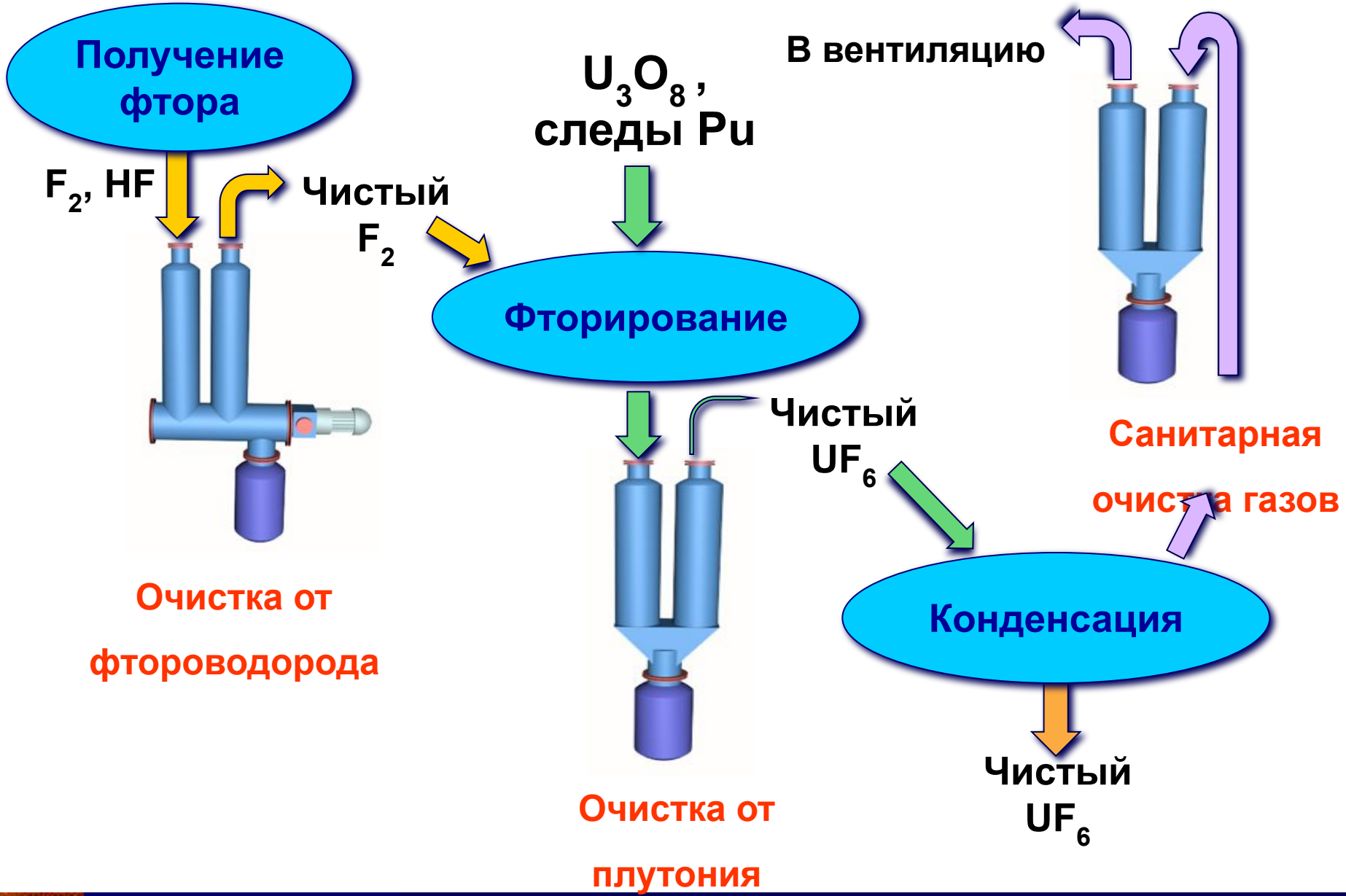
$$\alpha = f(T, P, \tau),$$

где α – степень превращения твердого образца

ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ СОРБЕНТОВ НА ОСНОВЕ ЩЕЛОЧНЫХ И ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ:

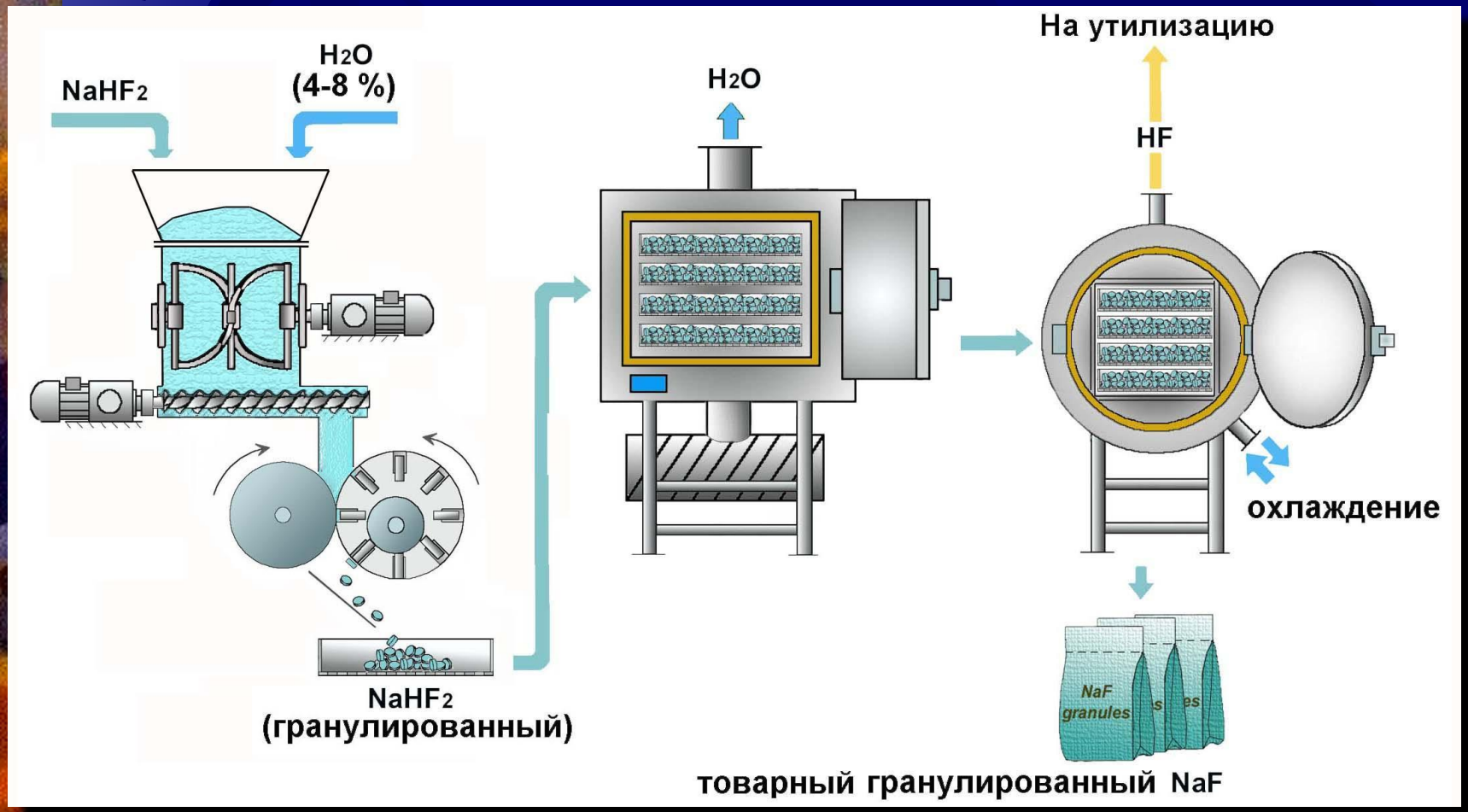
- Очистка электролизного фтора от фтороводорода
- Утилизация и селективная сорбция газообразных фторидов (SiF_4, BF_3 и др.)
- Получение летучих фторидов (WF_6,ClF_3,MoF_6,NF_3 и др.)
- Технология ВОУ-НОУ

ПРИМЕНЕНИЕ СОРБЕНТОВ ДЛЯ ПРОЦЕССА ВОУ-НОУ



ПОРОШКОВАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ ТАБЛЕТИРОВАННЫХ СОРБЕНТОВ NaF

Формование таблеток → Сушка таблеток T = 90 - 100 °C → Прокалка таблеток при температуре десорбции летучего компонента → упаковка товарного таблетированного сорбента



СОРБЕНТЫ НА ОСНОВЕ NaF, LiF, CaF_2 ДЛЯ СЕЛЕКТИВНОЙ ОЧИСТКИ ЛЕТУЧИХ ФТОРИДОВ MoF_6, WF_6, HF, UF_6, SiF_4

Удельная поверхность, $м^2/г$…4.94

Статическая прочность, $кгс/см^2$…....68.4

Истинная плотность, $г/см^3$…...2.43

Насыпная плотность, $г/см^3$……1.16

Пористость, %……..…52.0

Количество адсорбированного HF

при 80 °C и 50 мм рт. ст., г/г……0.43

то же UF_6……1.8

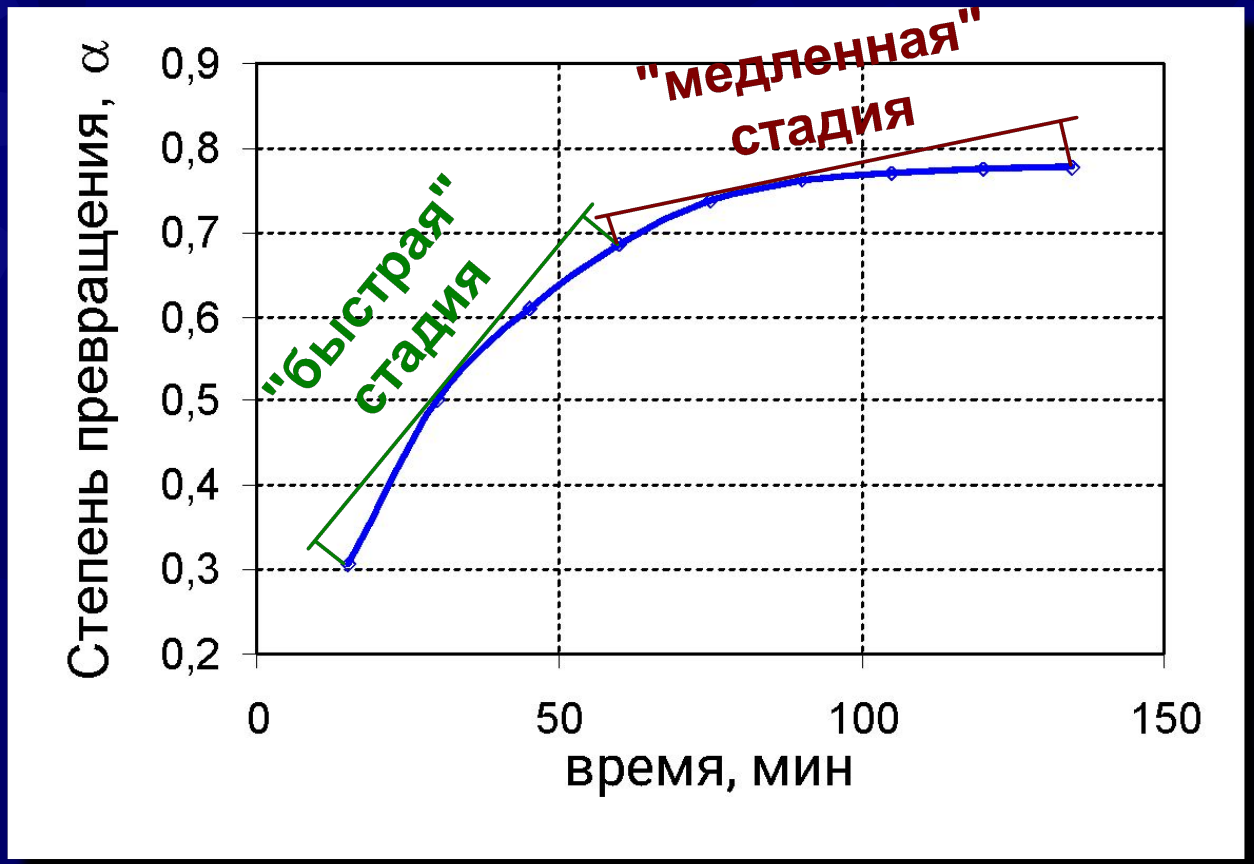
Разработана методика и компьютерная программа «Кинетика» для расчета кинетических параметров сорбции и десорбции летучих фторидов с таблетированных сорбентов:

- E_a - кажущейся энергии активации процесса;
- n - порядка реакции по твердому реагенту;
- m - порядка реакции по газообразному реагенту;
- k_0 - предэкспоненциального множителя в уравнении Аррениуса (константы сорбционной колонны),

а также установления лимитирующей стадии процесса

Работа программы продемонстрирована на примере процесса десорбции гексафторида молибдена с гранулированного NaF по реакции («быстрая» стадия процесса):

$$MoF_6 \cdot 2NaF \rightleftharpoons MoF_6 + 2NaF$$



Матрица исходных данных (в окне текстового редактора Norton Commander)

давление опыта в мм рт. ст.

view ALFA.P1 - Far

Авто

ALFA.P1 DOS 225

10	190	200	210
	15	15	15
	75	90	75
15	0.188	0.246	0.3045
30	0.314	0.407	0.5
45	0.409	0.507	0.61
60	0.480	0.601	0.686
75	0.533	0.641	0.737
90	0.576	0.681	0.762
105	0.611	0.711	0.771
120	0.637	0.727	0.775
135	0.661	0.744	0.778

температуры опытов в градусах Цельсия

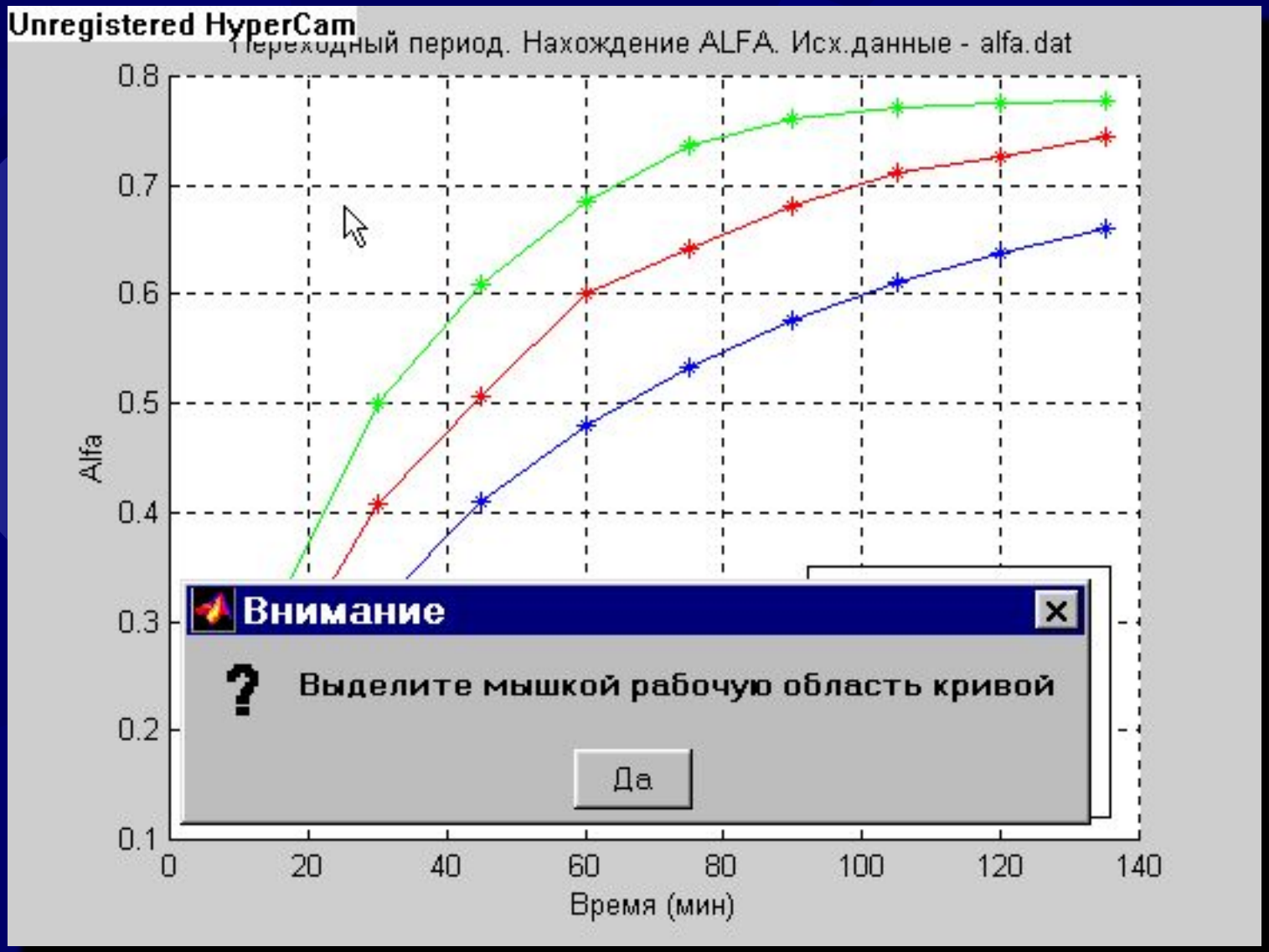
границы рабочей области (в минутах) на графиках α = f(τ)

время в минутах

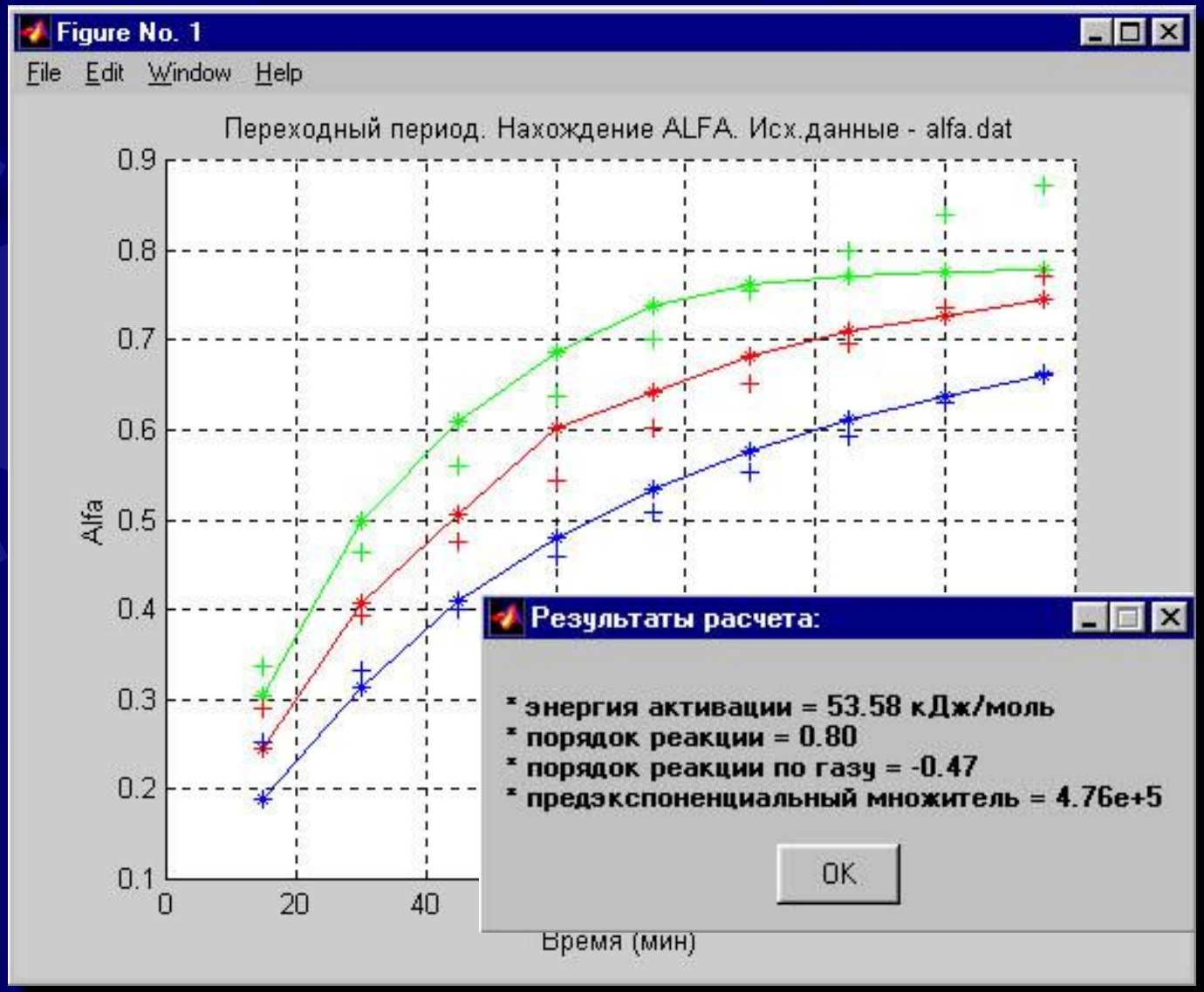
значения α

1Help 2Unwrap 3Quit 4Hex 5 6Edit 7Search 8Win

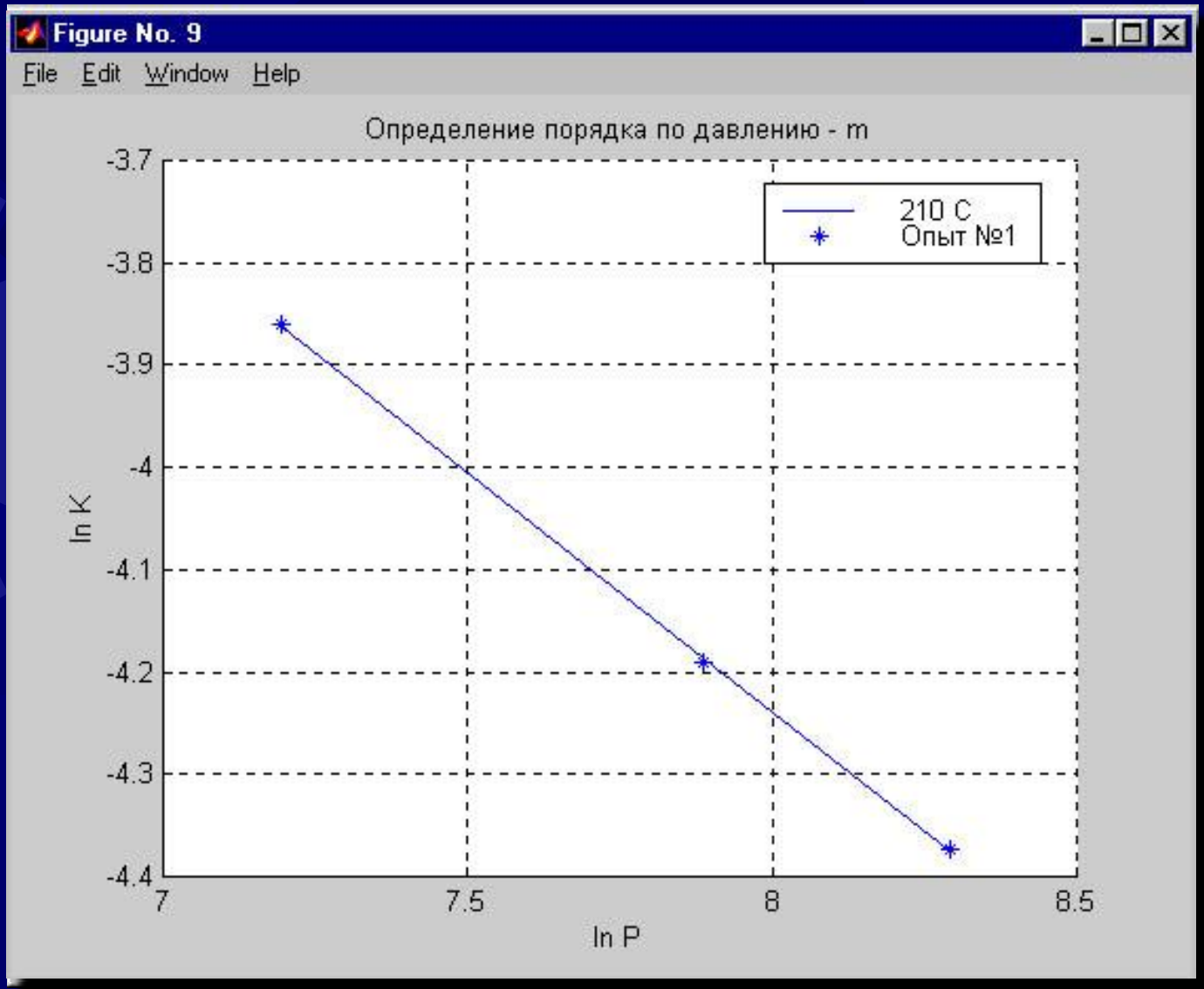
Выбор рабочей области (контролирующей стадии) на графиках зависимости α = f(τ)



Построение зависимости α = f(τ) по рассчитанным параметрам



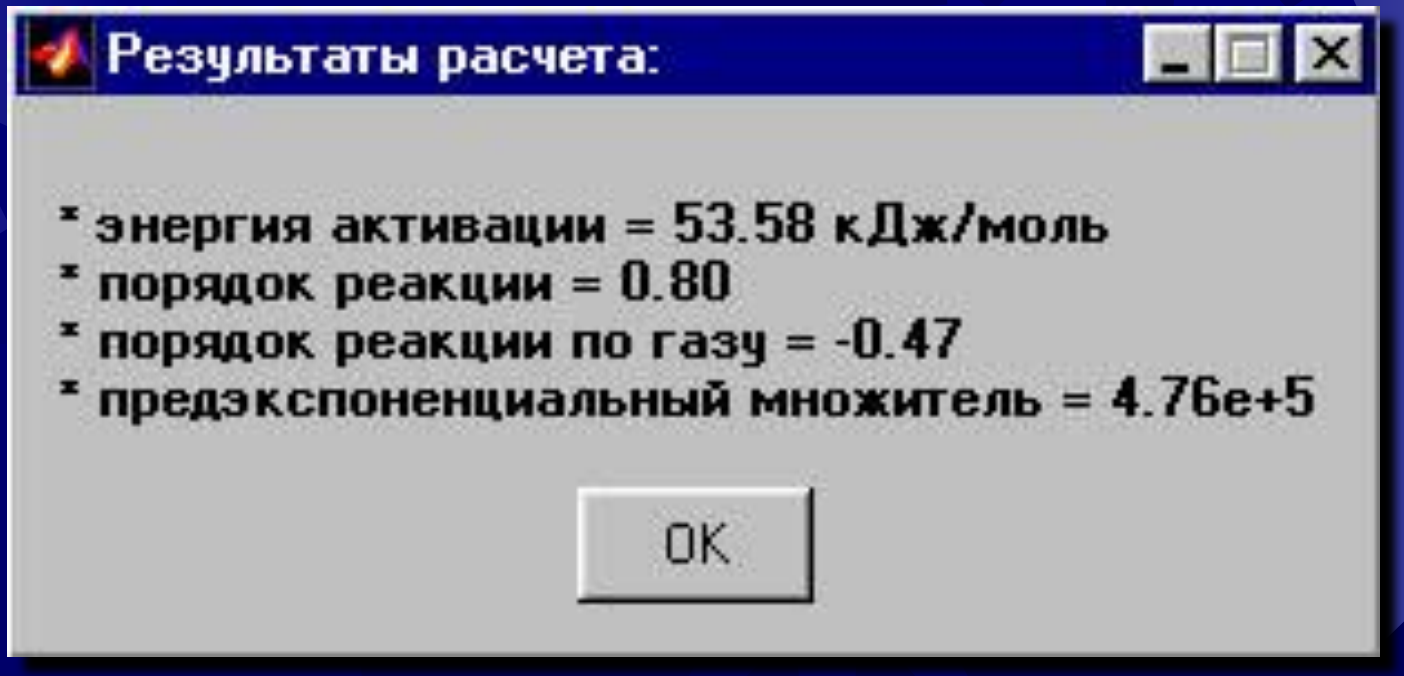
Определение порядка по давлению m



Алгоритм работы программы:

Получено кинетическое уравнение процесса:

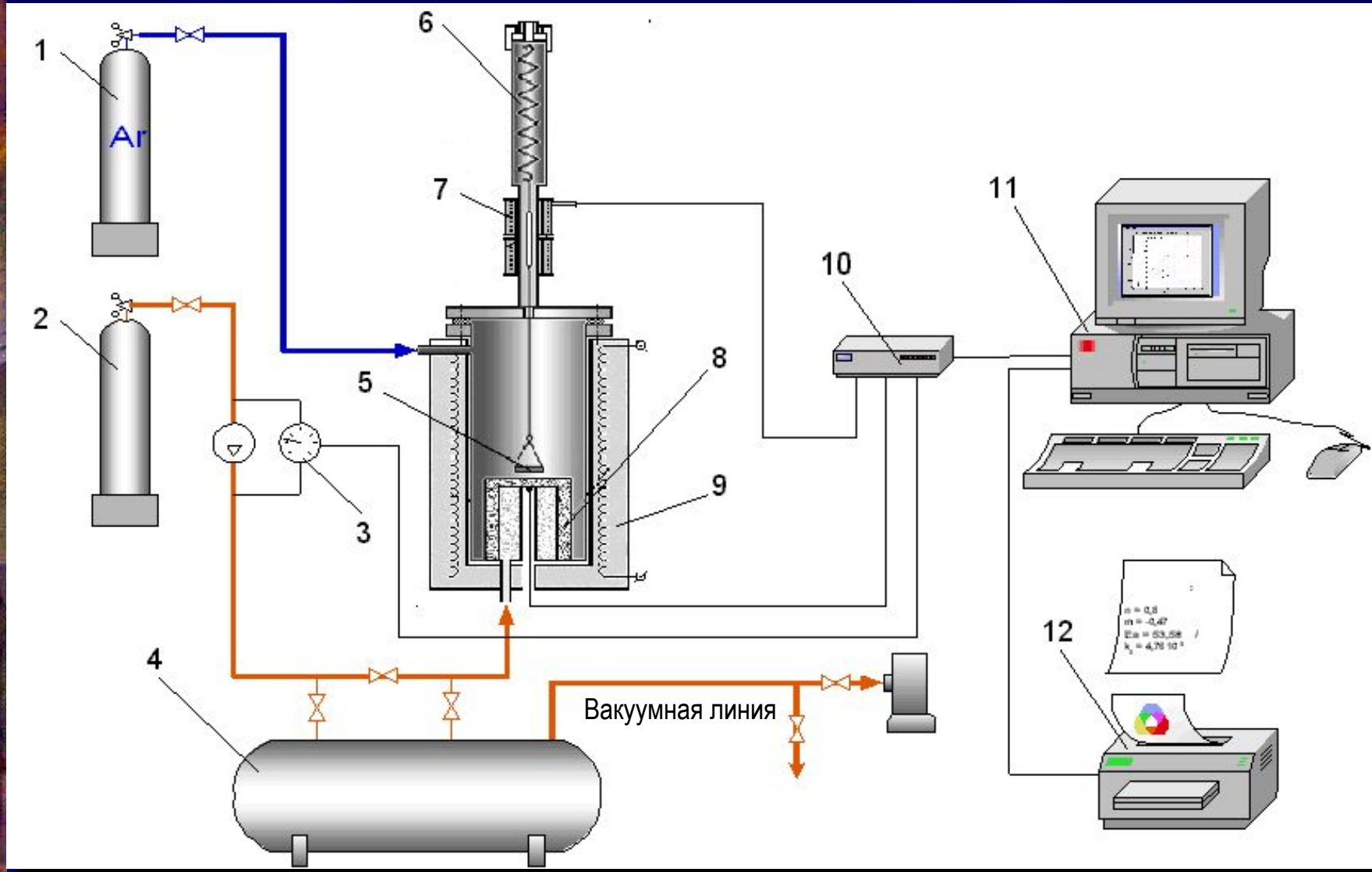
$$\alpha = 1 - e^{-(4,76\cdot 10^{5})\cdot p^{-0,47}\cdot e^{-\frac{53580}{R\cdot T}}\cdot \tau^{0,8}}$$



В ПЕРСПЕКТИВЕ ПЛАНИРУЕТСЯ:

- дополнить программу модулями статистики и автоматического поиска контролирующей стадии процесса на графиках $\alpha = f(\tau)$;
- транслировать текст программы с языка Matlab в исполняемые модули и лицензировать полученный программный продукт.
- организовать ввод исходных данных непосредственно с датчиков экспериментальной установки через контроллер

Установка для исследования кинетики процессов сорбции-десорбции, совмещенная с персональным компьютером



1, 2 - баллоныс газом-адсорбтивом и газом-разбавителем; 3 - прибор контроля давления рабочего газа; 4 - ресивер; 5 - таблетка; 6 - взвешивающая система; 7 - датчик измерения массы; 8 - пористый рассеиватель; 9 - нагреватель; 10 - контроллер; 11 - персональная ЭВМ; 12 – принтер

Спасибо за внимание!