

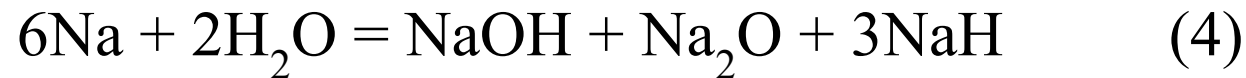
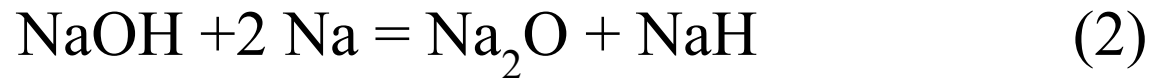
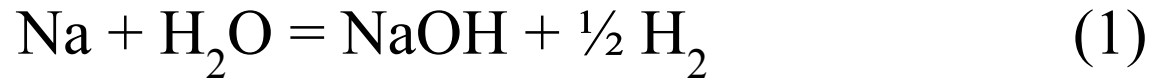
Расчет равновесного состояния системы натрий- кислород-водород

**Алексеев В.В., Борисов В.В.,
Перевозников С.В.**

Совещание рабочей группы РГ-3 «Технология» в рамках сотрудничества между госкорпорацией «Росатом» и КАЭ Франции по быстрым реакторам 18-22 июня 2018 г., Обнинск, АО «ГНЦ РФ-ФЭИ».

АО «ГНЦ РФ – ФЭИ», г. Обнинск, Россия

Взаимодействие воды с натрием



Исходные уравнения

Вследствие протекания реакции (2) концентрации компонентов в образующейся неравновесной системе перераспределяются в соответствии с законом действующих масс

$$K = C_2 C_3 / C_1 \quad (5)$$

где C_1 , C_2 , C_3 – соответственно равновесные концентрации щелочи, оксида натрия и гидроксида натрия, выраженные в мольных долях.

При использовании весовых значений концентраций компонентов, например млн^{-1} , выражение (5) записывается в виде

$$K = k 10^{-6} C_2 C_3 / C_1 \quad (6)$$

где $k = \mu_4 \mu_1 / \mu_2 \mu_3$

μ_1 , μ_2 , μ_3 , μ_4 – молекулярные массы щелочи, оксида натрия, гидроксида натрия и натрия.

Получено значение $k = 0,618$.

Равновесные концентрации компонентов записываются следующим образом:

$$C_1 = C_{\text{щ}} + x \quad (7)$$

$$C_2 = C_o - x \quad (8)$$

$$C_3 = C_{\text{г}} - x \quad (9)$$

где x – изменение концентрации щелочи в ходе реакции (2).

Температурная зависимость для константы равновесия K от температуры T (К) при малых концентрациях примесей в интервале 371-840 К [2]:

$$\text{Lg } K = 5,478 - 1073/T - 2,709 \text{ Lg } T \quad (10)$$

Решение системы уравнений

В итоге совместного решения системы уравнений (6) – (10) получена зависимость для определения величины x :

$$x = p - (p^2 - q)^{0,5} \quad (11)$$

где $p = (K \cdot 10^6/k + 1,55 C_o + 0,6 C_r)/1,86$; $q = (C_o C_r - C_{щ} K \cdot 10^6/k)/0,93$.

После определения величины x равновесные концентрации компонентов определяются с использованием (7), (8) и (9). Поскольку $C_{щ}$, C_o и C_r пропорционально связаны с C_v мы имеем также зависимости равновесных концентраций C_1 , C_2 , C_3 от C_v .

При увеличении исходной концентрации воды в натрии концентрация гидроксида натрия достигает насыщения C_r^s . Тогда условие равновесия имеет вид:

$$K = k \cdot 10^{-6} C_2 C_r^s / C_1 \quad (12)$$

Из решения системы (7), (8), (12) получено

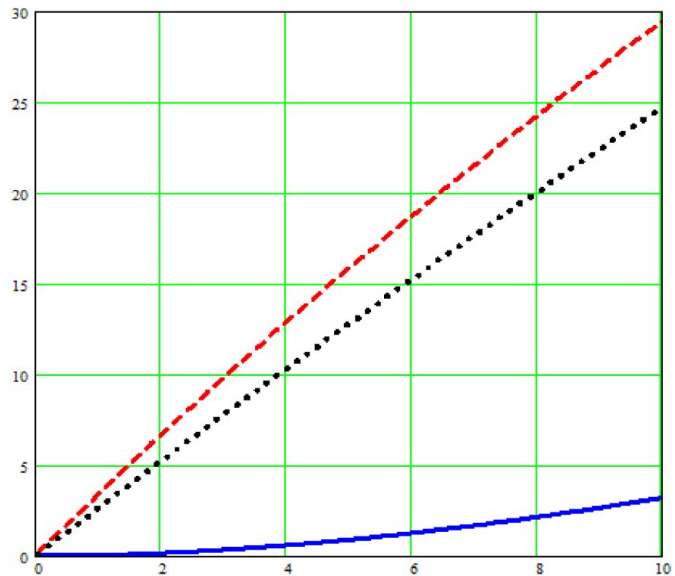
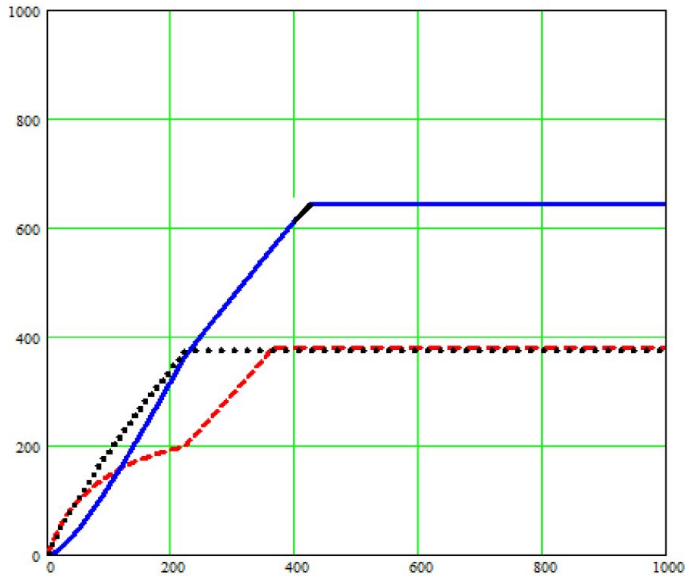
$$x = (C_o C_r^s - C_{щ} K \cdot 10^6/k) / (K \cdot 10^6/k + 1,55 C_r^s) \quad (13)$$

В этом случае равновесные концентрации щелочи и оксида натрия определяются с использованием (7) и (8), а гидроксида натрия $C_3 = C_r^s$. Следует отметить, что в данной части решение является приближенным, поскольку точно неизвестно насколько величина C_r^s может отклоняться от известной зависимости в рассматриваемой системе, а также ввиду возможного выпадения осадка гидроксида натрия. Зависимость величины C_r^s (млн⁻¹) от температуры:

$$\lg C_r^s = 1,38 + (6,467 - 3023/T) \quad (14)$$

Результаты расчетов

$C_1, C_2, C_3, \text{ млн}^{-1}$

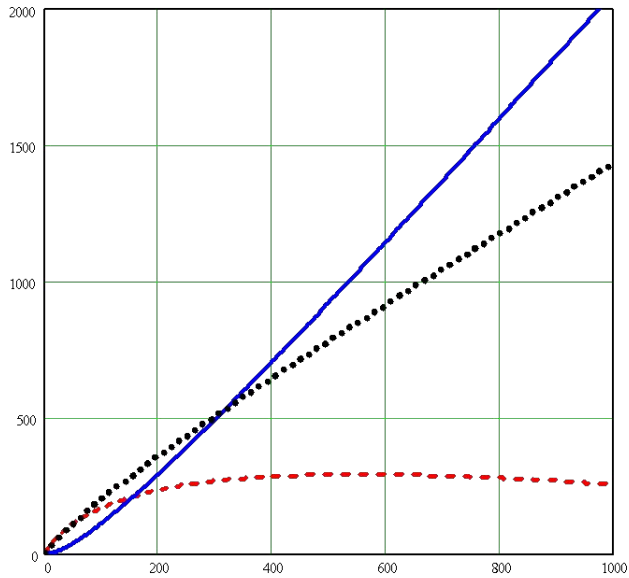


Зависимости равновесных концентраций компонентов системы натрий- кислород-водород от концентрации воды в натрии при температуре $300\text{ }^{\circ}\text{C}$:
сплошная – щелочь; штрих – оксид натрия; пунктир – гидрид натрия

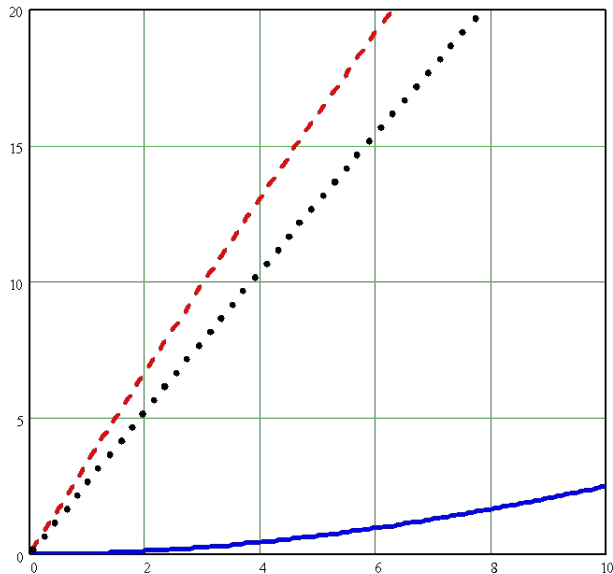
$C_v, \text{ млн}^{-1}$

Результаты расчетов

$C_1, C_2, C_3, \text{ млн}^{-1}$



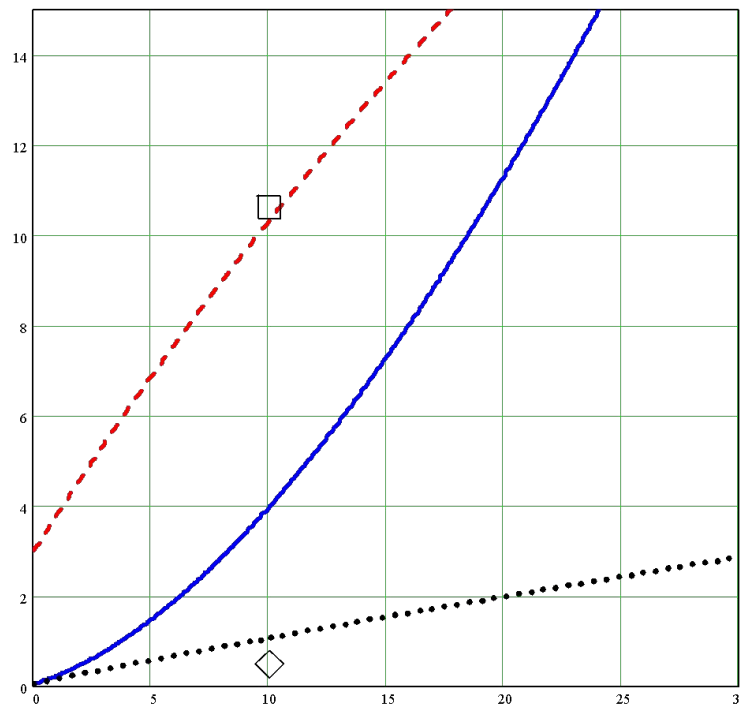
Зависимости равновесных
концентраций компонентов системы
натрий- кислород-водород от
концентрации воды в натрии при
температуре 500°C :
сплошная – щелочь; штрих – оксид
натрия; пунктир – гидрид натрия



$C_в, \text{ млн}^{-1}$

Результаты расчетов

$C_1, C_2, C_3, \text{ млн}^{-1}$

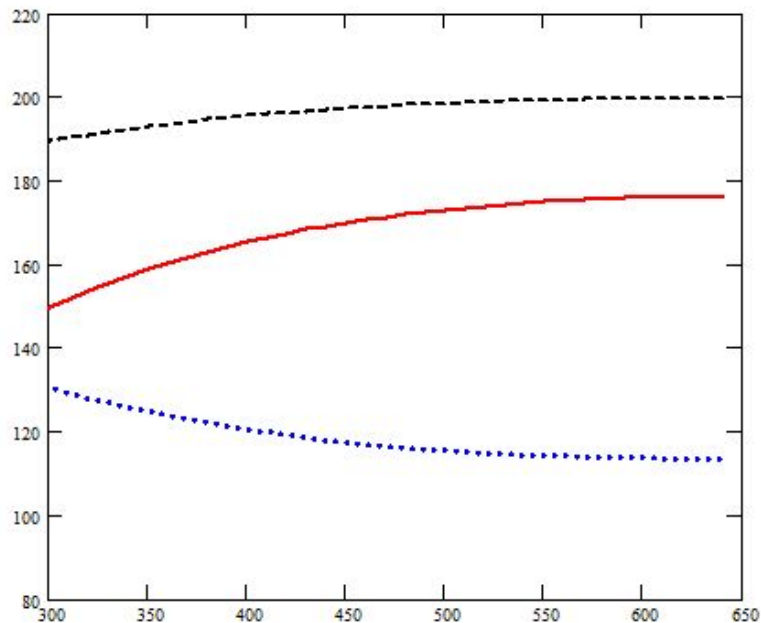


$C_в, \text{ млн}^{-1}$

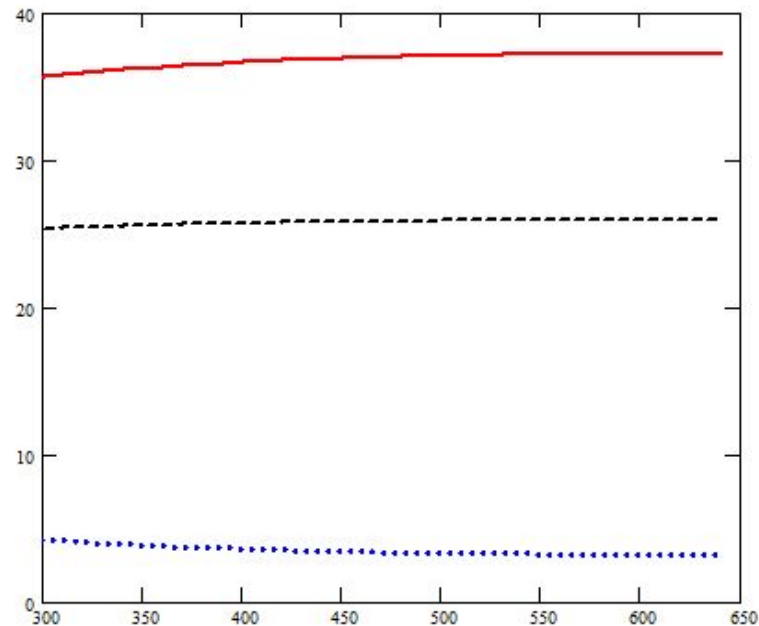
Сравнение результатов расчета равновесных концентраций компонентов системы натрий- кислород-водород при температуре 400 °С с экспериментальными данными по измерению концентрации кислорода (квадратная точка) и водорода (ромбическая точка) в натрии. Концентрация кислорода и водорода в исходном натрии принималась 3 млн⁻¹ и 0,05 млн⁻¹ соответственно:
сплошная – щелочь; штрих – кислород; пунктир – водород

Результаты расчетов

$C_1, C_2, C_3, \text{млн}^{-1}$



а)
t, C



б)
t, C

Зависимости равновесных концентраций компонентов системы натрий- кислород- водород от температуры при концентрации воды в натрии а) 100млн^{-1} и б) 10млн^{-1} :
сплошная – щелочь; штрих – оксид натрия; пунктир – гидрид натрия

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ !