**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**

федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ**

**ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Инженерная школа ядерных технологий

Направление – Ядерные физика и технологии

Отделение ядерно-топливного цикла

Отчет по лабораторной работе №4

по дисциплине

«Методы разделения стабильных изотопов»

**Компьютерное моделирование нестационарных процессов в колоннах**

Вариант 6

Исполнитель:

Студент, гр. 0А8Д \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Кузьменко А.С.

подпись дата

Проверил:

Профессор ОЯТЦ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Орлов А.А.

подпись дата

Томск – 2021

**СОДЕРЖАНИЕ**

[ЦЕЛЬ РАБОТЫ 3](#_Toc88463171)

[1. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ 3](#_Toc88463172)

[1.1. Ионнобменные смолы 3](#_Toc88463173)

[1.2 Методика выполнения расчета 7](#_Toc88463174)

[2. ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ 10](#_Toc88463175)

[3. ПРАКТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ 10](#_Toc88463176)

[ВЫВОДЫ 21](#_Toc88463177)

**ЦЕЛЬ РАБОТЫ**

Установить зависимость скорости движения фронта разделения между ионами от плотности тока в аппарате, емкости смолы и отношения подвижности ионов.

**1. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ**

**1.1. Ионнобменные смолы**

Ионнообменные смолы имеют два типа применения в электрохимии: электромиграция в среде, образуемой влажной смолой, и электродиализ между двумя отделениями с электролитом, разделенными стенками, образованными ионообменными мембранами.

Электромиграцией называется движение ионов под действием электрического поля. Ионообменная смола, набухшая в воде, аналогична концентрированному солевому раствору, диссоциированному на ионы. Таким образом, при достаточной ионизации в смоле осуществляется прохождение электрического тока путем миграции ионов.

Влажные смолы, у которых обычно функциональные группы полностью ионизированы, ведут себя как сильные электролиты и являются наиболее электропроводными. Смолы с комплексными функциональными группами ведут себя как слабые электролиты и очень плохо проводят электрический ток.

Подвижность обмениваемого иона в смоле ниже, чем в водном растворе, в силу наличия макромолекулярной решетки, которая тормозит его движение; ион противоположного знака не свободен, как в водном растворе, а закреплен в макромолекулярной решетке.

Число переноса какого-либо иона есть та доля электрического тока, которая переносится путем миграции этого иона. По определению, сумма чисел переноса всех ионов, участвующих в миграции, равна 1. В обычном солевом растворе диссоциация растворенных соединений поставляет минимум два иона; каждый из них обладает числом переноса <1. В случае ионообменной смолы, диссоциация функциональных групп дает еще два иона, но один из них полностью привязан к макромолекулярной решетке и не может мигрировать. Под влиянием электрического поля мигрирует только обменивающийся ион, и его число переноса в таком случае равняется 1.

Перенос ионов в электрическом поле сопровождается переносом окружающих их молекул растворителя. Этот эффект существенен в смолах, где все мигрирующие ионы направляются в одну сторону, увлекая с собой заметное количество растворителя.

Рассмотрим колонну, заполненную ионообменной смолой. Два электрода, помещенные с обоих концов, при достаточной разности потенциалов позволяют создать электрическое поле. Пусть A – тот катион, который с самого начала содержится во всей массе однородной смолы.

Под влиянием приложенной разности потенциалов наблюдаются следующие явления:

1) катионы A мигрируют в смоле от анода к катоду. Они проявляют тенденцию уходить из анодной зоны и накапливаться в катодной;

2) электрохимическая реакция на аноде (реакция окисления) будет производить новые катионы B, которые займут в смоле места уходящих катионов A, в то время как катодная электрохимическая реакция (реакция восстановления) потребляет прибывающие катионы A или доставляет им анионы, необходимые для их выхода из смолы и эвакуации из колонны. Так осуществляется постепенный переход получаемого электрохимически иона B на место первоначального иона смолы A.

На рисунке 1 представлены диаграммы эволюции фронта разделения между двумя обменивающимися ионами. При этом миграция ионов происходит только сквозь зерна смолы.

В колонне происходит электрический ток, сила которого пропорциональна подвижности u катионов в смоле, градиенту потенциала E и концентрации c катионов. Сила тока характеризует поток катионов вдоль колонны, т.е. скорость, с которой происходит обмен.

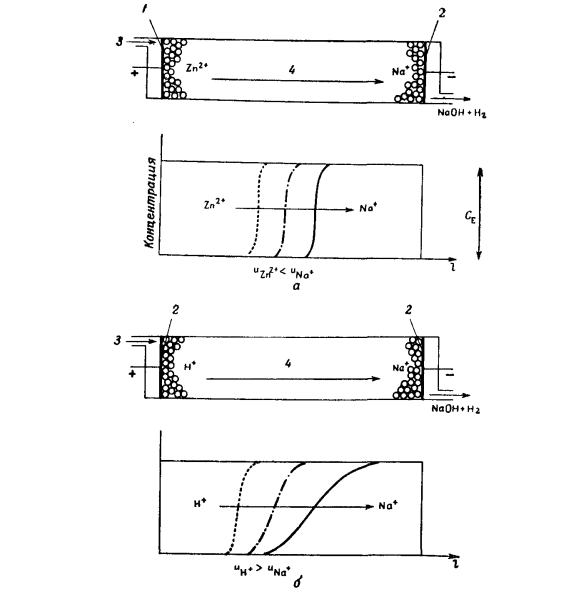


Рисунок 1 – Обмен при помощи электролиза и электромиграции ионов Na+ сульфосмолы, а также ионов (а) Zn2+, получающихся окислением цинкового электрода, и ионов (б) H+, образующихся при окислении воды на платиновом электроде

Диаграмма эволюции фронта разделения между двумя обменивающимися ионами: 1 – перфорированный цинковый электрод; 2 – перфорированный платиновый электрод; 3 – вода; 4 – направление миграции катионов

Напряжение, которое нужно приложить для получения тока силой *i*, разлагается на две части:

а) напряжение электролиза, определяемое по кривым сила тока – напряжение, характерным для электрохимических реакций окисления и восстановления на каждой из поверхностей раздела электрод – ионообменная смола (аналогично кривым, наблюдаемым с водными растворами, но с уменьшенной скоростью диффузии);

б) омическое напряжение *Ri*, вызываемое прохождением тока *i* в колонне с сопротивлением *R*.

Если желательно поддерживать в колонне постоянную силу тока (тем самым и движение катионов в колонне), необходимо в ходе процесса изменять прилагаемое напряжение. Поскольку участвующие в обмене ионы обладают различной проводимостью, сопротивление колонны изменяется. Так, например, в ходе обмена катиона, такого, как Na+, на H+ напряжение нужно снижать, поскольку второй из этих ионов имеет более высокую электропроводность.

При постоянном напряжении изменяется скорость обмена ионов.

Поток ионов, получаемый в колонне при действии электрического поля, аналогичен тому, который вызывается протеканием раствора. Но здесь особенности обмена между смолой и раствором не играют роли.

Промежуточная жидкость не участвует в механизме процесса, кроме как для удаления некоторых продуктов электролиза и иногда некоторых обменных ионов.

В первом случае, представленном на рис. 1 зона обмена перемещается в колонне от анода к катоду равномерно; она обычно мало растянута. Этот случай соответствует обмену вытеснением. Он наблюдается, когда подвижность иона, появляющегося при электролизе, меньше подвижности заменяемого иона смолы.

Во втором случае, наоборот, зона обмена постепенно расширяется в ходе ее перемещения в колонне. Это явление имеет место в том случае, когда подвижность иона, являющегося продуктом электролиза, выше подвижности заменяемого иона смолы.

**1.2 Методика выполнения расчета**

Теория исходит из предположения о том, что колонна представляет собой однородную среду, в которой можно пренебречь влиянием диффузии ионов.

Пусть в некоторой точке колонны с абсциссой *l* и в некоторый момент времени *t* концентрация первоначального иона *A* и производимого электролизом иона *B* будут соответственно *CA* и *CB*; *uA* и *uB* – подвижности этих ионов, предполагаемые неизменяющимися с концентрациями; *E* – градиент приложенной разности потенциалов. Тогда в тот же момент времени в точке с абсциссой *l+dl* концентрации будут

, ,

а градиент потенциала

.

Если выделить внутри колонны элементарный объем сечением 1 см*2* и длиной *dl*, то разность между количествами вошедшего и вышедшего вещества за промежуток времени *dt*, начиная с момента *t*, вызовет изменение концентраций  и . Балансы сохранения количеств *A* и *B* можно будет записать в виде



или

 (1)

и по аналогии

 (2)

Принимая во внимание формулу полной обменной емкости смолы *CA+CB=CE* (на единицу объема смолы) и вычитая уравнение (2) из уравнения (1), получим

 (3)

В сущности, так как градиент потенциала *E* связан с концентрациями *CA* и *CB* выражением для электрического тока

,

уравнение (3) может выразиться единственно лишь как функция концентрации *CA* (или *CB*). Таким образом, получаем дифференциальное уравнение вида

 (4)

В предположении, что

,

*x* является функцией только одной переменной *CA*. Общее решение уравнения (4) дает эволюцию во времени фронта разделения между ионами *A* и *B*. Это решение типа

.

Отсюда следует, что точка фронта, для которой *CA*, а, следовательно, и *x* имеют определенные значения (*CA*)0 и *x*0, мигрирует, следуя формуле



или

 (5)

где *l*0 – абсцисса этой точки в момент *t=0*. Из формулы следует, что точка мигрирует с постоянной скоростью:

 (6)

Предположим, что ион *A* мигрирует впереди иона *B*, который занимает его место в смоле. Из выражения для скорости  как функции *CA* вытекают следующие выводы:

а) если *uA<uB* (случай ионов Na+, обменивающихся на ионы Zn2+, *uNa+/uZn2+=2*). Любая точка позади фронта (*CA*→0) продвигается вперед любой точки, находящейся впереди (*CA*→*CE*). Следовательно, фронт вполне естественно проявляет тенденцию к сжатию и принимает устойчивую форму, превращаясь в плоскость.

б) если же *uA>uB* (случай ионов Na+, обменивающихся на ионы Н+, *uNa+/uН+=0,12*), наблюдается обратная картина, и фронт проявляет тенденцию расширяться в колонне. Теоретически распределение *CA=f*(*l*) в зоне перехода в любой момент получается комбинированием уравнений (5) и (6) при *t=t0*.

Для того чтобы осуществить разделение электромиграцией в колонне, образец смеси, например, двух ионов *A* и *B*, вносят в смолу одного из электродов. Затем прилагают такую разность потенциалов, чтобы ионы *A* и *B* начали мигрировать к противоположному электроду, и по величине достаточную, чтобы получить подходящую силу тока. Ток воды в этом направлении увлекает и выносит из колонны продукты электролиза.

Главное и общее условие успешной реализации этого процесса разделения состоит в том, чтобы заставить продвигаться под влиянием электрического поля полосу смеси между находящимся впереди ионом, подвижность которого выше подвижностей всех ионов смеси, и находящимся позади полосы ионом с низкой подвижностью.

**2. ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ**

Таблица 1 – Исходные данные

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Вариант | *I,* мА/см2 | *CE*, мг·экв/см2 | *uA/uB* |
| 6 | 14–88 | 2–8,7 | 0,435–9,8 |

**3. ПРАКТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ**

1) Установлена зависимость изменения скорости движения фронта разделения между ионами при изменении плотности тока в аппарате:

6

5

4

3

2

1

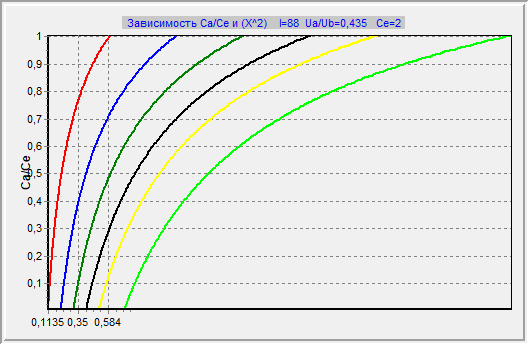


Рисунок 2 – Зависимость изменения скорости движения фронта разделения между ионами от плотности тока в аппарате;

*C*E=2 мг-экв/см2; *uA/uB*=0,435

1 – *I*=14 мА/см2; 2 – *I*=26,33333333 мА/см2; 3 – *I*=38,66666667 мА/см2;  
4 – *I*=51 мА/см2; 5 – *I*=63,33333333 мА/см2; 6 – *I*=88 мА/см2.

1

6

5

4

3

2

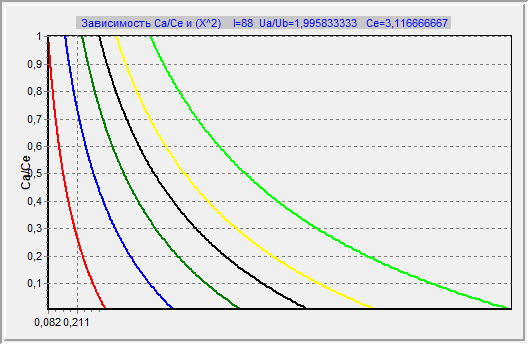


Рисунок 3 – Зависимость изменения скорости движения фронта разделения между ионами от плотности тока в аппарате;

*C*E=3,116666667 мг-экв/см2; *uA/uB*=1,995833333

1 – *I*=14 мА/см2; 2 – *I*=26,33333333 мА/см2; 3 – *I*=38,66666667 мА/см2;  
4 – *I*=51 мА/см2; 5 – *I*=63,33333333 мА/см2; 6 – *I*=88 мА/см2.

1

2

3

4

5

6

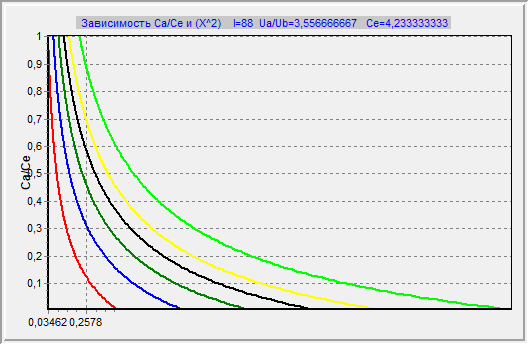


Рисунок 4 – Зависимость изменения скорости движения фронта разделения между ионами от плотности тока в аппарате;

*C*E=4,233333333 мг-экв/см2; *uA/uB*=3,556666667

1 – *I*=14 мА/см2; 2 – *I*=26,33333333 мА/см2; 3 – *I*=38,66666667 мА/см2;  
4 – *I*=51 мА/см2; 5 – *I*=63,33333333 мА/см2; 6 – *I*=88 мА/см2.

6

5

4

3

2

1

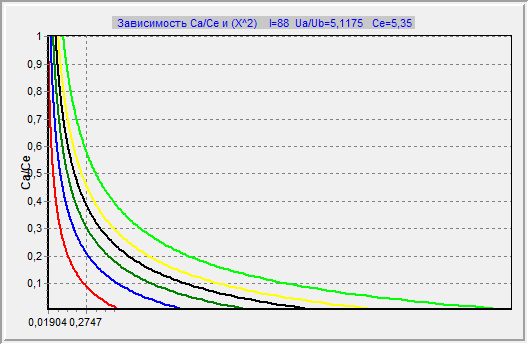


Рисунок 5 – Зависимость изменения скорости движения фронта разделения между ионами от плотности тока в аппарате;

*C*E=5,35 мг-экв/см2; *uA/uB*=5,1175

1 – *I*=14 мА/см2; 2 – *I*=26,33333333 мА/см2; 3 – *I*=38,66666667 мА/см2;  
4 – *I*=51 мА/см2; 5 – *I*=63,33333333 мА/см2; 6 – *I*=88 мА/см2.

6

5

4

3

2

1

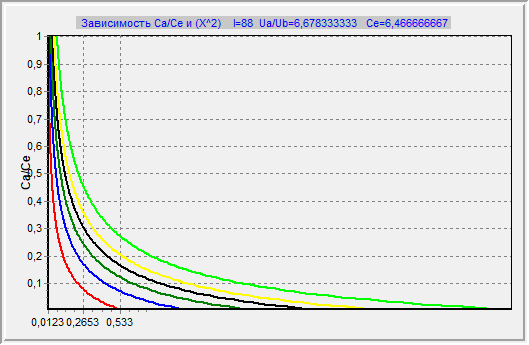


Рисунок 6 – Зависимость изменения скорости движения фронта разделения между ионами от плотности тока в аппарате;

*C*E=6,466666667 мг-экв/см2; *uA/uB*=6,678333333

1 – *I*=14 мА/см2; 2 – *I*=26,33333333 мА/см2; 3 – *I*=38,66666667 мА/см2;  
4 – *I*=51 мА/см2; 5 – *I*=63,33333333 мА/см2; 6 – *I*=88 мА/см2.

4

6

5

3

2

1

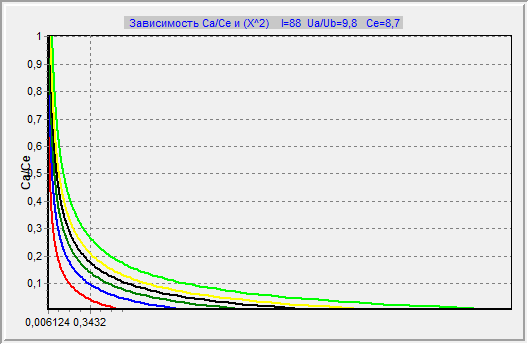


Рисунок 7 – Зависимость изменения скорости движения фронта разделения между ионами от плотности тока в аппарате;

*C*E=8,7 мг-экв/см2; *uA/uB*=9,8

1 – *I*=14 мА/см2; 2 – *I*=26,33333333 мА/см2; 3 – *I*=38,66666667 мА/см2;  
4 – *I*=51 мА/см2; 5 – *I*=63,33333333 мА/см2; 6 – *I*=88 мА/см2.

На рисунке 2 кривые возрастают, следовательно, ионы движутся в обратном направлении (от катода к аноду). На рисунках 3-7 кривые убывают, значит, происходит сжатие фронта (подвижность ионов ). Подвижность ионов, образующихся при электролизе выше, чем у первоначальных ионов, следовательно, количество электричества переносится больше образованными ионами.

2) Установлена зависимость изменения скорости движения фронта разделения между ионами при изменении емкости смолы:

1

6

5

4

3

2

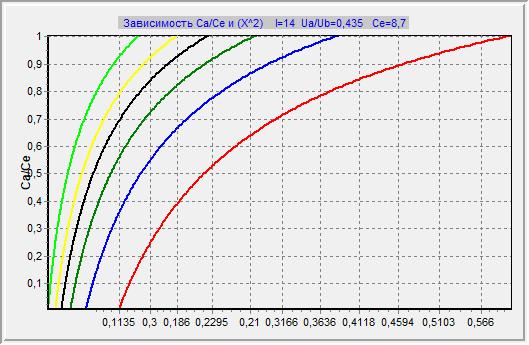


Рисунок 8 – Зависимость изменения скорости движения фронта разделения между ионами от емкости смолы; *I*=14 мА/см2; *uA/uB*=0,435

1 – *C*E=14 мг-экв/см2; 2 – *C*E=3,116666667 мг-экв/см2;  
3 – *C*E=4,233333333 мг-экв/см2; 4 – *C*E=5,35 мг-экв/см2;  
5 – *C*E=6,466666667 мг-экв/см2; 6 – *C*E=8,7 мг-экв/см2.

6

5

4

3

2

1

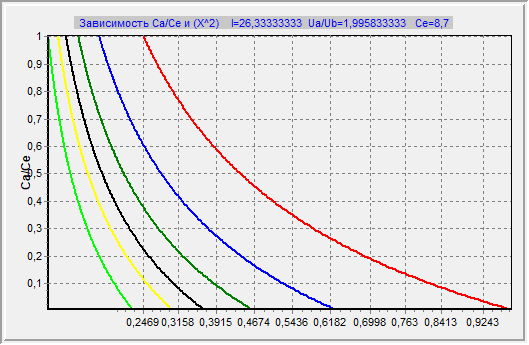


Рисунок 9 – Зависимость изменения скорости движения фронта разделения между ионами от емкости смолы; *I*=26,33333333 мА/см2; *uA/uB*=1,995833333

1 – *C*E=14 мг-экв/см2; 2 – *C*E=3,116666667 мг-экв/см2;  
3 – *C*E=4,233333333 мг-экв/см2; 4 – *C*E=5,35 мг-экв/см2;  
5 – *C*E=6,466666667 мг-экв/см2; 6 – *C*E=8,7 мг-экв/см2.

6

5

4

3

2

1

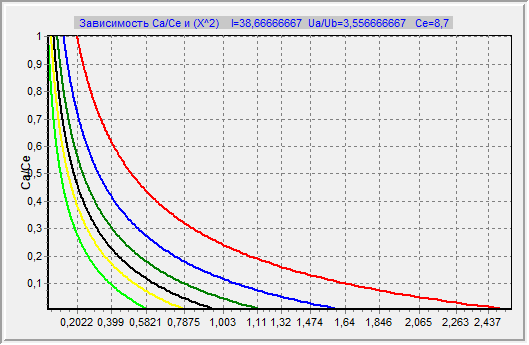


Рисунок 10 – Зависимость изменения скорости движения фронта разделения между ионами от емкости смолы; *I*=38,66666667 мА/см2; *uA/uB*=3,556666667

1 – *C*E=14 мг-экв/см2; 2 – *C*E=3,116666667 мг-экв/см2;  
3 – *C*E=4,233333333 мг-экв/см2; 4 – *C*E=5,35 мг-экв/см2;  
5 – *C*E=6,466666667 мг-экв/см2; 6 – *C*E=8,7 мг-экв/см2.

6

5

4

3

2

1

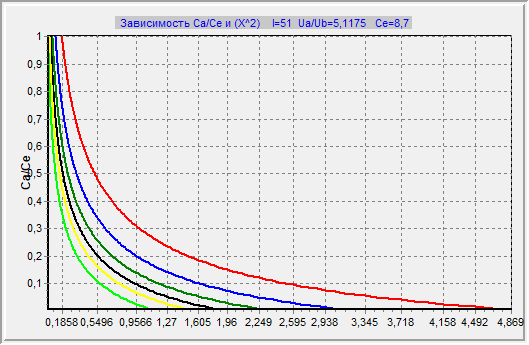


Рисунок 11 – Зависимость изменения скорости движения фронта разделения между ионами от емкости смолы; *I*=51 мА/см2; *uA/uB*=5,1175

1 – *C*E=14 мг-экв/см2; 2 – *C*E=3,116666667 мг-экв/см2;  
3 – *C*E=4,233333333 мг-экв/см2; 4 – *C*E=5,35 мг-экв/см2;  
5 – *C*E=6,466666667 мг-экв/см2; 6 – *C*E=8,7 мг-экв/см2.

6

5

4

3

2

1

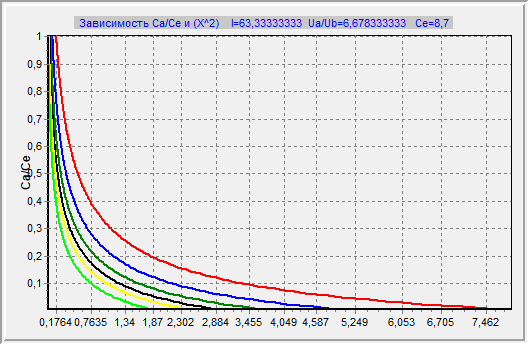


Рисунок 12 – Зависимость изменения скорости движения фронта разделения между ионами от емкости смолы; *I*=63,33333333 мА/см2; *uA/uB*=6,678333333

1 – *C*E=14 мг-экв/см2; 2 – *C*E=3,116666667 мг-экв/см2;  
3 – *C*E=4,233333333 мг-экв/см2; 4 – *C*E=5,35 мг-экв/см2;  
5 – *C*E=6,466666667 мг-экв/см2; 6 – *C*E=8,7 мг-экв/см2.

6

5

4

3

2

1

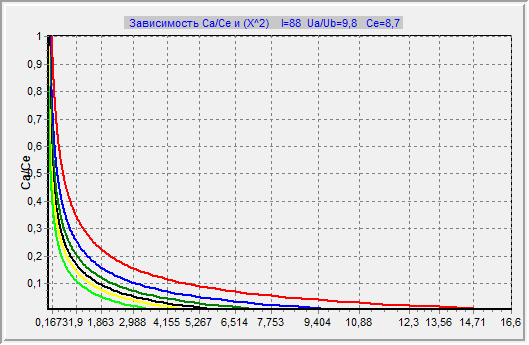


Рисунок 13 – Зависимость изменения скорости движения фронта разделения между ионами от емкости смолы; *I*=88 мА/см2; *uA/uB*=9,8

1 – *C*E=14 мг-экв/см2; 2 – *C*E=3,116666667 мг-экв/см2;  
3 – *C*E=4,233333333 мг-экв/см2; 4 – *C*E=5,35 мг-экв/см2;  
5 – *C*E=6,466666667 мг-экв/см2; 6 – *C*E=8,7 мг-экв/см2.

На рисунке 8 кривые возрастают, следовательно, ионы движутся в обратном направлении (от катода к аноду). На рисунках 9-13 кривые убывают, значит, происходит сжатие фронта (). Подвижность является определяющим фактором, так как значительно влияет на характер перемещения ионов.

3) Установлена зависимость изменения скорости движения фронта разделения между ионами при изменении отношения подвижности ионов:

6

5

4

3

2

1

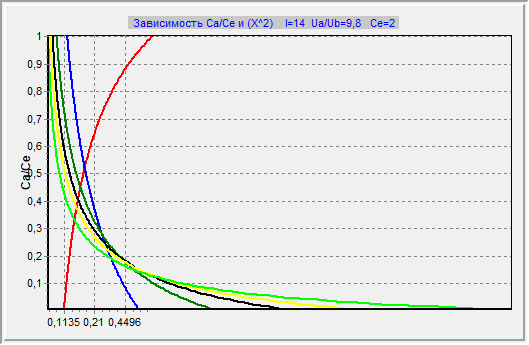


Рисунок 14 – Зависимость изменения скорости движения фронта разделения между ионами от отношения подвижности ионов;

*I*=14 мА/см2; *C*E=2 мг-экв/см2

1 – *uA/uB*=0,435; 2 – *uA/uB*=1,995833333; 3 – *uA/uB*=3,556666667;   
4 – *uA/uB*=5,1175; 5 – *uA/uB*=6,678333333; 6 – *uA/uB*=9,8.

6

5

4

3

2

1

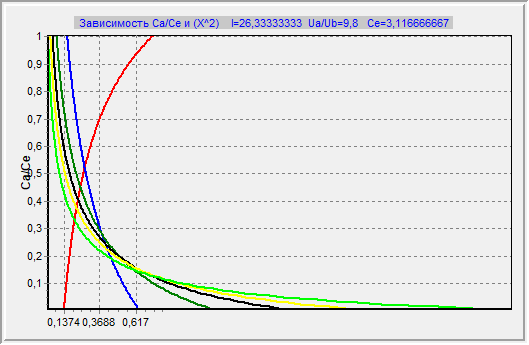


Рисунок 15 – Зависимость изменения скорости движения фронта разделения между ионами от отношения подвижности ионов;

*I*=26,33333333 мА/см2; *C*E=3,116666667 мг-экв/см2

1 – *uA/uB*=0,435; 2 – *uA/uB*=1,995833333; 3 – *uA/uB*=3,556666667;   
4 – *uA/uB*=5,1175; 5 – *uA/uB*=6,678333333; 6 – *uA/uB*=9,8.

3

6

1

5

4

2

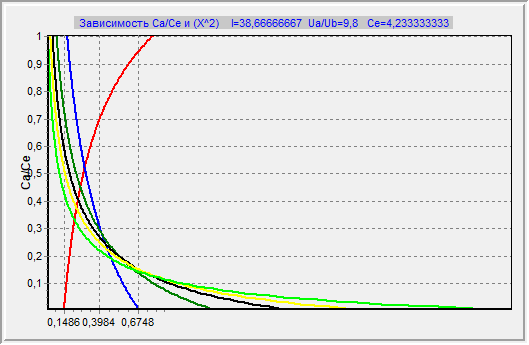


Рисунок 16 – Зависимость изменения скорости движения фронта разделения между ионами от отношения подвижности ионов;

*I*=38,66666667 мА/см2; *C*E=4,233333333 мг-экв/см2

1 – *uA/uB*=0,435; 2 – *uA/uB*=1,995833333; 3 – *uA/uB*=3,556666667;   
4 – *uA/uB*=5,1175; 5 – *uA/uB*=6,678333333; 6 – *uA/uB*=9,8.

6

5

4

3

2

1

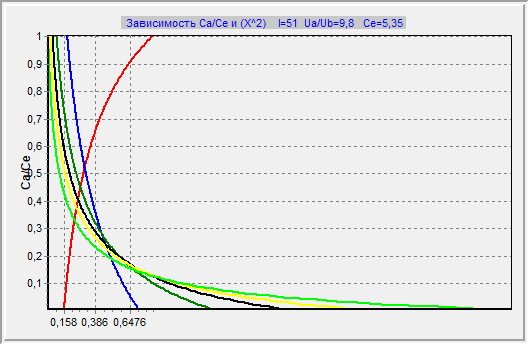


Рисунок 17 – Зависимость изменения скорости движения фронта разделения между ионами от отношения подвижности ионов;

*I*=51 мА/см2; *C*E=5,35 мг-экв/см2

1 – *uA/uB*=0,435; 2 – *uA/uB*=1,995833333; 3 – *uA/uB*=3,556666667;   
4 – *uA/uB*=5,1175; 5 – *uA/uB*=6,678333333; 6 – *uA/uB*=9,8.

6

1

5

4

3

2

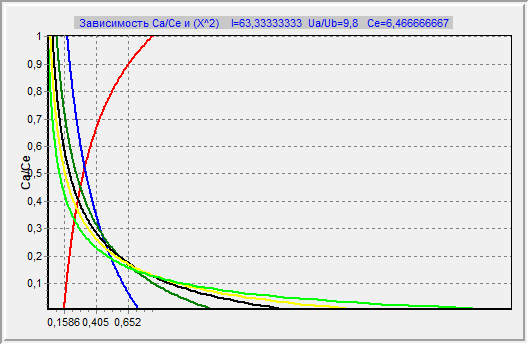


Рисунок 18 – Зависимость изменения скорости движения фронта разделения между ионами от отношения подвижности ионов;

*I*=63,33333333 мА/см2; *C*E=6,466666667 мг-экв/см2

1 – *uA/uB*=0,435; 2 – *uA/uB*=1,995833333; 3 – *uA/uB*=3,556666667;   
4 – *uA/uB*=5,1175; 5 – *uA/uB*=6,678333333; 6 – *uA/uB*=9,8.

6

5

4

3

2

1

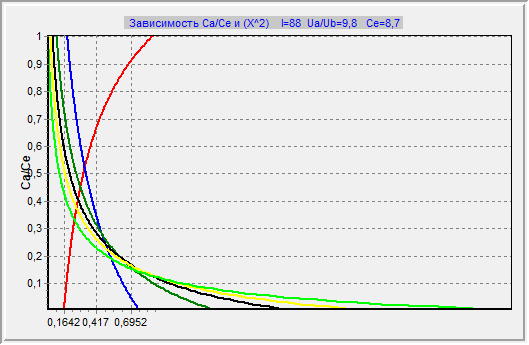


Рисунок 19 – Зависимость изменения скорости движения фронта разделения между ионами от отношения подвижности ионов;

*I*=88 мА/см2; *C*E=8,7 мг-экв/см2

1 – *uA/uB*=0,435; 2 – *uA/uB*=1,995833333; 3 – *uA/uB*=3,556666667;   
4 – *uA/uB*=5,1175; 5 – *uA/uB*=6,678333333; 6 – *uA/uB*=9,8.

 (7)

Наблюдается расширение фронта, следовательно, . Перенос тока первоначальными ионами происходит быстрее нежели ионами, производимыми электролизом. На всех рисунках кривая 1 возрастает, это связано с тем, что ионы движутся в другую сторону (то есть от катода к аноду).

4) Найдены условия, при которых скорость движения фронта разделения между ионами не изменяется:

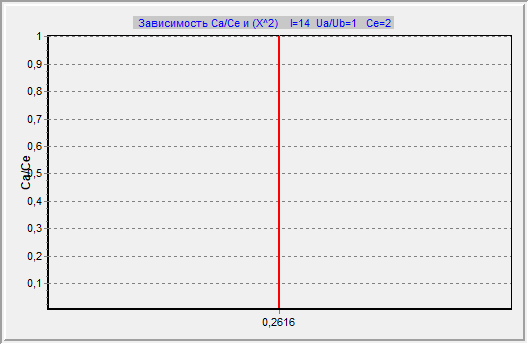


Рисунок 20 – Скорость движения фронта разделения между ионами;

Из выражения для скорости  как функции *CA*:

 (7)

При 

 (8)

Следовательно, скорость *x*2 при *u*A/*u*B=1 постоянна.

**ВЫВОДЫ**

Установлена зависимость скорости движения фронта разделения между ионами от плотности тока в аппарате, емкости смолы и отношения подвижности ионов.

При зависимости от плотности тока и емкости смолы наблюдается тенденция сжатия, то есть происходит продвижение ионов. При зависимости от отношения подвижности ионов наблюдается обратная картина, фронт проявляет тенденцию расширяться в колонне.

Подвижность является определяющим фактором, так как значительно влияет на характер перемещения ионов.