



Contribution ID : 54

Type : **not specified**

РАСЧЕТ ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ ПРИ СУБЛИМАЦИОННОЙ ОЧИСТКЕ ТЕТРАФТОРИДА ЦИРКОНИЯ В HSC CHEMISTRY

С.Е. ВОРОЖЕЙКИН, О.А. ОЖЕРЕЛЬЕВ Северский технологический институт НИЯУ МИФИ, 636036, г. Северск Томской обл., пр. Коммунистический, 65, e-mail: steff042003@mail.ru

РАСЧЕТ ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ ПРИ СУБЛИМАЦИОННОЙ ОЧИСТКЕ ТЕТРАФТОРИДА ЦИРКОНИЯ
В HSC CHEMISTRY

Фторидная технология переработки циркона является конкурентоспособной альтернативой традиционным методам, обеспечивая получение ядерно-чистого циркония в интересах ГК «Росатом». Практический интерес связан с возможностью переработки цирконового концентрата АО «ТТОК «Ильменит», получаемого при обогащении ильменит-цирконовых песков Туганского месторождения. Целью работы является определение оптимальных условий сублимационной очистки ZrF_4 от примесей переходных металлов в HSC Chemistry. Программный комплекс применяется для термодинамических расчётов и моделирования равновесного состава многокомпонентных систем и распределения компонентов между фазами. Расчёты проведены для системы ZrF_4 – фториды Fe, Ni, Co, Cu, Mn в диапазоне 900–1700 К. Исследовано влияние разбавления газа-носителя Ar и He при давлении 0,013 атм и нормальном давлении. ZrF_4 устойчиво переходит в газовую фазу. Подтверждена термодинамическая нестабильность ZrF_3 в паровой фазе, его концентрация является минимальной. Увеличение доли инертного газа сдвигает процесс сублимации в низкотемпературную область. При изменении соотношения He/Ar:Воздух с 20:1 до 100:1 температура 100% сублимации снижается с 1180–1200 К до 1120–1150 К. Понижение давления до 0,013 атм снижает температуру сублимации на 150–200 К. При максимальном разбавлении и вакууме полная сублимация системы достигается при температурах ниже 900 К. Лимитирующей примесью, определяющей полноту очистки, является FeF_3 , сохраняющийся в твёрдом осадке перед точкой 100% сублимации. Оптимальные условия сублимационной очистки ZrF_4 достигаются при сочетании высокого разбавления инертным газом, пониженного давления и циркониевой насадки. Полученные результаты показывают перспективность применения термодинамического моделирования в HSC Chemistry для определения рациональных параметров сублимационной очистки ZrF_4 .

Primary author(s) : ВОРОЖЕЙКИН, Степан (Евгеньевич)

Co-author(s) : ОЖЕРЕЛЬЕВ, Олег (Александрович)

Presenter(s) : ОЖЕРЕЛЬЕВ, Олег (Александрович)