

экстрагента к повышенным дозам излучения. Многочисленные работы, направленные на оценку влияния радиационных нагрузок показали, что при длительном воздействии ионизирующего излучения (ИИ) на экстракционные системы происходит не только уменьшение коэффициента очистки целевых компонент от осколков деления и снижение полноты их выделения в конечные продукты, но и так называемое «разрушение» экстрагента на стадиях экстракции, промывки и реэкстракции. Более того, при переработке ОЯТ с реакторов на быстрых нейтронах (РБН), радиационная нагрузка на имеющиеся экстракционные системы возрастает в сотни раз за один многоступенчатый цикл.

Относительно простым в реализации путём снижения негативного влияния ИИ на экстрагент при переработке высокоактивных растворов, является использование экстракционной аппаратуры с малым временем контакта фаз, в качестве которой может являться центробежный экстрактор. При этом возникает необходимость в проведении экспериментальных исследований по отработке экстракционных технологий, так как ввод нового или дополнительного оборудования в имеющуюся экстракционную схему вносит существенные изменения в технологии. Проведение подобного рода исследований весьма затруднительно, так как производство по переработке ОЯТ с любых реакторных установок относится к объектам высокой опасности. В связи с этим наиболее целесообразно проводить экспериментальные изыскания с применением компьютерных моделей.

В настоящей работе представлена динамическая компьютерная модель, позволяющая создавать экстракционные схемы на основе центробежных экстракторов практически любой сложности. Данная модель позволяет выполнить полноценную диагностику построенного каскада, за счет реализации не только стационарных, но и пусковых режимов работы каскада. Наряду с этим имеется возможность внесения изменений в протекающие процессы, например, изменение температуры или концентрационного состава исходных реагентов, а так же введение дополнительных потоков в органическую или водную фазы. Помимо этого, реализована возможность графического представления распределения концентрационного состава целевых компонент, как в экстракторе, так и по каскаду в целом.

Данная работа направлена на определение в процессе диагностики собранной экстракционной схемы или узла, оптимального режима работы имеющихся в технологических схемах экстракционных каскадов, с целью обеспечения максимальной очистки целевых компонент от продуктов деления, минимизации вероятности захвата целевых компонент какой-либо из фаз, а так же определения минимального количества циклов для обеспечения полного извлечения целевых компонент.

РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО МОДУЛЯ РАСЧЕТА ГЕОМЕТРИИ АТОМНЫХ СТРУКТУР

А.А. Золотарев, А.В. Обходский

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: art707@tpu.ru

Для синтеза новых материалов с заданными свойствами необходимо знать их структурные особенности, основные свойства и характеристики. Применение компьютерного моделирования и численных методов расчета позволяет получить большое количество данных об атомной структуре и свойствах материалов перед проведением экспериментальных исследований.

Для компьютерного моделирования и расчета свойств молекул методом Хартри-Фока-Рутаана необходимо знать координаты каждого атома в декартовом пространстве. Вследствие этого ведется разработка

программного обеспечения формирующего координаты атомов в молекуле на основе структурной формулы молекулы методами молекулярной механики и оптимизации ее геометрии.

Метод молекулярной механики позволяет находить геометрические характеристики и энергии многоатомных систем. В рамках метода молекулярной механики полная энергия исследуемой структуры представляет собой сумму энергетических термов: энергия химического взаимодействия, энергия валентных углов, энергия торсионного взаимодействия, энергия ван-дер-ваальсового взаимодействия, энергия электростатического взаимодействия. В основе метода молекулярной механики лежит следующая математическая модель: атомы представляются в виде шаров, связанных между собой пружинами или стержнями. Энергии длин связей и валентных углов описываются законом Гука [1].

Оптимизация молекулярной геометрии позволяет изучить структуру молекулы и ее энергию в свободном состоянии. Суть оптимизации геометрии заключается в повторном (многократном) вычислении энергии молекулы и вариации структурных параметров так, чтобы достичь структуру, соответствующей минимуму полной энергии молекулы. Вариация обычно включает в себя первоначальный расчет энергии при начальной структуре, оценку градиента энергии, выбор новых структурных параметров на основе информации о градиенте, и проверку выполнения условий прекращения процесса оптимизации [2].

В результате было разработано программное обеспечение, которое формирует структурную формулу молекулы, проверяет ее на корректность, устанавливает начальные координаты атомов в молекуле и проводит оптимизацию начальной геометрии. Полученные координаты атомов являются исходными данными для расчетов методом Хартри-Фока-Рутаана.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации. Соглашение о предоставлении субсидии RFMEFI57814X0095 от 28.11.2014 г.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Игнатов С.К. Квантово-химическое моделирование молекулярной структуры, физико-химических свойств и реакционной способности. – Нижний Новгород.: ННГУ, 2007 – 84 с.
2. Блатов В.А. Полуэмпирические методы квантовой химии. – Самара.: Универс-групп, 2005 – 32 с.

РАЗРАБОТКА АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИМ ПРОЦЕССОМ ПОЛУЧЕНИЯ КАЛЬЦИТОАНГИДРИТА

Е.С. Китаева, А.А. Денисевич

Томский политехнический университет, 63405, Россия, г. Томск,

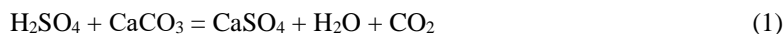
пр. Ленина, 30, e-mail:esk15@tpu.ru

Цель работы состоит в возможности использования отходов производства и потребления.

В настоящее время производство на предприятиях металлургической и энергетической промышленности сопровождается выбросами в атмосферу серосодержащих газов. Разработаны технологии по обезвреживанию и получению различных строительных материалов из этих газов, а при переработке серосодержащих газов образуется концентрированная серная кислота.

Для добычи руды приходится закупать строительный гипс для заполнения пустот в пластах почвы, после извлечения руды.

В результате химического взаимодействия по уравнению (1) образуется безводный твердый сульфат кальция, названный кальцитоангидритом (КА), газообразные углекислый газ и вода.



КА может выступать заменой строительному гипсу [1].