

Министерство образования и науки Российской Федерации
 федеральное государственное автономное образовательное учреждение
 высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
 ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий
 Направление подготовки 14.04.02 «Ядерная физика и технологии»
 Отделение школы Отделение ядерно-топливного цикла

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Анализ параметров работы установки для разделения изотопов водорода

УДК 621.039.3:546.11

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0АМ6А	Верхорубов Д.Л.		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Видяев Д.Г.	д.т.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Верховская М.В.	к.э.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Гоголева Т.С.	к.ф.-м.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Дорофеева Л.И.	к.ф.-м.н.		

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий
Направление подготовки 14.04.02 «Ядерная физика и технологии»
Уровень образования Магистратура
Отделение школы Отделение ядерно-топливного цикла
Период выполнения Весенний семестр 2017/2018 учебного года

Форма представления работы:

Магистерская диссертация

(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель ООП
Л.И. Дорофеева
(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

Студенту:

Группа	ФИО
0АМ6А	Верхорубов Дмитрий Леонидович

Тема работы:

Анализ параметров работы установки для разделения изотопов водорода	
Утверждена директором ИЯТШ	1939/с от 20.03.2018

Срок сдачи студентом выполненной работы:	4.06.2018
--	-----------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	Значение основных параметров работы и условий для установок по ректификации и химическом изотопном обмене.
---------------------------------	--

Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	При разработке магистерской диссертации должны быть рассмотрены следующие вопросы: 1. Провести обзор и анализ литературных данных по основным способам промышленного разделения изотопов водорода. 2. Отработка методики расчета основных параметров установки изотопного обмена. 3. Проведение расчетов для двух типов разделительной установки. 4. Анализ и оценка полученных результатов. 5. Экономическое обоснование проведения НИР. Выводы по работе. Заключение
---	--

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Доцент Верховская М.В.
Социальная ответственность	Ассистент Т.С. Гоголева

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	12.03.2018
---	------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Видяев Д.Г	д.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0АМ6А	Верхорубов Д.Л.		

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий
Направление подготовки 14.04.02 «Ядерная физика и технологии»
Уровень образования Магистратура
Отделение школы Отделение ядерно-топливного цикла
Период выполнения Весенний семестр 2017/2018 учебного года

Форма представления работы:

Магистерская диссертация

(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)

**КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН
выполнения выпускной квалификационной работы**

Срок сдачи студентом выполненной работы:	4.06.2018
--	-----------

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
26.03.2018	Разработка ТЗ на ВКР	20
27.03.2018	Составление и утверждение технического задания	10
28.03. – 01.04.2018	Выбор направления исследования и способов решения задач	10
01.04. – 08.04.2018	Сбор и изучение научно-технической литературы	10
28.04. – 10.05.2018	Поиск экспериментальных данных	8
10.05. – 11.05.2018	Расчет на основе экспериментальных данных	7
11.05. – 15.05.2018	Анализ и обработка полученных результатов	5
15.05 – 01.06.2018	Обобщение и оценка эффективности полученных результатов	5
01.06. – 08.06.2018	Оформление пояснительной записки	5

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Видяев Д.Г.	д.т.н.		

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Дорофеева Л.И.	к.ф.-м.н.		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»**

Студенту:

Группа	ФИО
0АМ6А	Верхорубов Дмитрий Леонидович

Школа	ИЯТШ	Отделение	ОЯТЦ
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	14.04.02 Ядерные физика и технологии/ Изотопные технологии и материалы

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	1. Норматив заработной платы
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	1. Коэффициенты для расчета заработной платы

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Планирование и формирование бюджета научных исследований	1. Структура работ в рамках научного исследования 2. Определение трудоемкости выполнения работ и разработка графика проведения научного исследования 3. Бюджет научно-технического исследования
2. Разработка календарного план-графика выполнения ВКР	1. Определение показателя технической готовности темы, длительности этапов, коэффициента календарности и продолжительности работ 2. Построение календарного план графика проведения ВКР
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	1. Определение коэффициента социально-научного эффекта НИР 2. Определение коэффициента научно-технического эффекта дипломной работы 3. Оценка ресурсной эффективности НИР

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	12.03.2018
---	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Верховская М.В.	к.э.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0АМ6А	Верхорубов Дмитрий Леонидович		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Студенту:

Группа	ФИО
0АМ6А	Верхорубов Дмитрий Леонидович

Школа	ИЯТШ	Отделение	ОЯТЦ
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	14.04.02 Ядерные физика и технологии/ Изотопные технологии и материалы

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Описание рабочего места (рабочей зоны) на предмет возникновения:	<ul style="list-style-type: none"> – вредных проявлений факторов производственной среды (микроклимат, освещение, шумы, вибрации, электромагнитные поля); – опасных проявлений факторов производственной среды (механической, электрической и пожарной природы).
2. Знакомство и отбор законодательных и нормативных документов по теме	<ul style="list-style-type: none"> – требования охраны труда при работе на ПЭВМ – электробезопасность; – пожаробезопасность;
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:	<ul style="list-style-type: none"> – действие фактора на организм человека; – приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ); – предлагаемые средства защиты (коллективные и индивидуальные).
2. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой произведённой среды в следующей последовательности:	<ul style="list-style-type: none"> – электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, средства защиты); – пожаробезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения).

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	12.03.2018
---	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ОЯТЦ ИЯТШ	Гоголева Т.С.	к.ф.-м.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0АМ6А	Верхорубов Дмитрий Леонидович		

Содержание

Реферат	9
Введение.....	10
1. Литературный обзор	12
1.1 Строение и физические свойства водорода.....	12
1.2 Взаимодействие водорода с простыми веществами.....	12
1.3 Взаимодействие водорода со сложными веществами.....	13
1.4 Получение водорода	14
1.5 Строение и физические свойства воды.....	16
1.6 Тяжелая вода и методы ее получения	16
1.7 Ректификация воды.....	22
1.8 Химический изотопный обмен в системе вода-водород	26
2. Практическая часть	30
2.1 Описание подходов к расчету обменной колонны.....	30
2.1.1 Ректификация воды.....	30
2.1.2 Химический изотопный обмен в системе вода-водород	33
3 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	40
3.1 Потенциальные потребители результатов исследования	40
3.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	40
3.1.3 SWOT-матрица	43
3. 2 Планирование научно-исследовательских работ.....	46
3.2.1 Структура работ в рамках научного исследования	46
3.2.2 Определение трудоемкости выполнения работ	47

3.2.3	Разработка графика проведения научного исследования	48
3.2.4	Бюджет научно-технического исследования (НТИ)	49
3.2.5	Материальные затраты НТИ	50
3.2.6	Основная заработная плата исполнителей темы	50
3.2.7	Отчисления во внебюджетные фонды	52
3.2.8	Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта	52
3.3	Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	53
4	Социальная ответственность	58
4.1	Анализ опасных и вредных производственных факторов	59
4.2	Обоснование и разработка мероприятий по снижению уровней опасного и вредного воздействия и устранению их влияния при работе на ПЭВМ	61
4.2.1	Организационные мероприятия.....	61
4.2.2	Технические мероприятия.....	61
4.2.3	Условия безопасности работы	63
4.3	Электробезопасность	66
4.4	Пожарная и взрывная безопасность.....	67
	Выводы	70
	Заключение	71
	Список использованных источников:	72
	Приложение А	78

Реферат

Выпускная квалификационная работа: страниц 99, рисунков 12, таблиц 31, 40 источников, 1 приложение.

Ключевые слова: водород, разделение, ректификация, тяжелая вода, химический изотопный обмен.

Объектом исследования являются параметры работы установки для разделения изотопов водорода.

Цель работы – определение и анализ основных параметров работы установки для разделения изотопов водорода методом ректификации воды и ХИО в системе вода-водород

В результате исследования определены зависимости высоты эквивалентного теоретической ступени от удельного потока, диаметра и размера насадки в колонне, а также определены степень разделения, число равновесных ступеней и высота колонны, необходимая для получения заданной концентрации.

Область применения: результаты проведенных исследований могут быть использованы при создании установки для разделения изотопов водорода.

Введение

Тяжелая вода – бесцветная жидкость без вкуса и запаха. Термин применим по отношению к воде у которой легкий атом заменен более тяжелым. Так, различают тяжелую воду, в которой дейтерий замещает протий; и сверхтяжелую воду, которая содержит тритий. Так же выделяют тяжело-кислородную воду, в которой атомы кислорода O^{16} заменены более тяжелыми изотопами O^{17} и O^{18} . Таким образом, всего существует 18 видов тяжелой воды, 9 из которых – радиоактивны.

Впервые молекулы дейтерия в природной воде были обнаружены Г. Юри в 1932 году, и уже в 1933 получена первая тяжеловодородная вода методом электролиза. Тогда, для получения 1 тонны тяжелой воды было необходимо переработать около 40 тысяч тонн воды природного содержания, и потратить более 60 миллионов кВт-ч электроэнергии, что сопоставимо с получением 3000 тонн алюминия [1].

Тяжелая вода нашла широкое применение в атомной отрасли в качестве теплоносителя и замедлителя нейтронов в тяжеловодных реакторах. Так же перспективно использование тяжелой воды в качестве источника получения дейтерия для термоядерного синтеза. Чистый дейтерий применяется как изотопный индикатор в научных исследованиях в химии, биологии, физиологии, агрохимии и др.

В настоящее время не смотря на то, что существует несколько методов получения тяжелой воды в промышленных масштабах, это все еще остается актуальной проблемой. На данный момент, стоимость одного килограмма D_2O с концентрацией 99,9% составляет до 81 000 рублей [2]. Высокая стоимость обусловлена высокими энергозатратами и дефицитом на рынке.

Для достижения поставленной задачи решались следующие цели:

1. Провести обзор и анализ литературных данных по основным способам промышленного разделения изотопов водорода.

2. Отработка методики расчета основных параметров установки изотопного обмена.
3. Проведение расчетов для двух типов разделительной установки.

1. Литературный обзор

1.1 Строение и физические свойства водорода

Водород – является двухатомным газом, который не имеет ни цвета, ни запаха, и является самым легким газом. Благодаря этому свойству водород активно использовался в аэростатах, дирижаблях, однако широкому применению водорода препятствует его взрывоопасность в смеси с воздухом.

Имеет очень низкие температуры плавления (-259°C) и кипения (-253°C).

Существует 3 изотопа водорода: протий 1H , дейтерий 2H или D , и радиоактивный тритий 3H или T [3].

1.2 Взаимодействие водорода с простыми веществами

Водород – неметалл средней электроотрицательности, поэтому он обладает и окислительные, и восстановительные свойства [4].

Окислительные свойства водорода проявляются в реакциях с металлами - элементами главных подгрупп I-II группы таблицы Менделеева. Самые активные металлы (щелочные и щелочноземельные) при нагревании с водородом дают гидриды – твердые солеобразные вещества, содержащие в кристаллической решетке гидрид-ион H^- :



Восстановительные свойства водорода проявляются в реакциях с более типичными неметаллами:

1) Взаимодействие с галогенами



Аналогично протекает взаимодействие с аналогами фтора - хлором, бромом, йодом. По мере уменьшения активности галогена интенсивность протекания реакции уменьшается. Реакция с фтором происходит при обычных условиях со взрывом, для реакции с хлором требуется освещение или нагревание, а реакция с йодом протекает лишь при сильном нагревании и обратимо [3,5].

2) Взаимодействие с кислородом



Реакция протекает с большим выделением тепла, иногда со взрывом.

3) Взаимодействие с серой



Сера - гораздо менее активный неметалл, чем кислород, и взаимодействие с водородом протекает спокойно.

4) Взаимодействие с азотом



Реакция обратима, протекает в заметной степени только в присутствии катализатора, при нагревании и под давлением. Продукт называется аммиак.

5) Взаимодействие с углеродом



Реакция протекает в электрической дуге или при очень высоких температурах [4]. В качестве побочных продуктов образуются и другие углеводороды.

1.3 Взаимодействие водорода со сложными веществами

Водород проявляет восстановительные свойства и в реакциях со сложными веществами [3,4]:

1) Восстановление оксидов металлов, стоящих в электрохимическом ряду напряжений правее алюминия, а также оксиды неметаллов:



Водород применяют как восстановитель для извлечения металлов из оксидных руд. Реакции идут при нагревании. [4]

2) Присоединение к органическим непредельным веществам



Реакции протекают в присутствии катализатора и под давлением.

1.4 Получение водорода

В промышленности водород получают переработкой углеводородного сырья - природного и попутного газа, кокса и т.п. [3,4,5].

Лабораторные методы получения водорода:

1) Взаимодействие металлов, стоящих в электрохимическом ряду напряжений металлов левее водорода.



Примечание:

1. Образующаяся соль должна быть растворима. В ином случае нерастворимая соль обволакивает частицы металла, затрудняя доступ кислоты к металлу, и реакция прекращается [5].

2. В реакциях с азотной и с концентрированной серной кислотами способны участвовать и металлы, стоящие правее водорода в электрохимическом ряду напряжений металлов. Однако водород в этих реакциях не выделяется [5].

2) Взаимодействие металлов, стоящих в электрохимическом ряду напряжений металлов левее магния, с холодной водой. При этом также образуется щелочь [3,4].



Металл, находящийся в электрохимическом ряду напряжений металлов левее марганца, способен вытеснить водород из воды при определенных условиях (магний - из горячей воды, алюминий - при условии снятия оксидной пленки с поверхности).

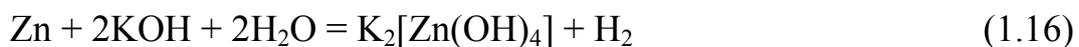


Металл, находящийся в электрохимическом ряду напряжений металлов левее кобальта, способен вытеснить водород из водяного пара. При этом также образуется оксид.



3) Взаимодействие металлов, гидроксиды которых амфотерны, с растворами щелочей [4].

Металлы, гидроксиды которых амфотерны, вытесняют водород из растворов щелочей. Вам необходимо знать 2 таких металла - алюминий и цинк:



При этом образуются комплексные соли - гидроксоалюминаты и гидроксоцинкаты [5].

Все методы, перечисленные до сих пор, основаны на одном и том же процессе - окислении металла атомом водорода в степени окисления +1:



4) Взаимодействие гидридов активных металлов с водой:



Этот процесс основан на взаимодействии водорода в степени окисления -1 с водородом в степени окисления +1:



5) Электролиз водных растворов щелочей, кислот, некоторых солей:



1.5 Структура и физические свойства воды

Вода — самое распространенное соединение водорода и единственное вещество, все три агрегатных состояния которого мы можем наблюдать в естественных условиях.

Температурная шкала Цельсия использует точки кипения и замерзания воды как точки отсчета и делит интервал между ними на 100 градусов. Масса одного литра жидкой воды при 0°C составляет 1 килограмм.

Молекула воды имеет угловое строение, поскольку вокруг атома кислорода находятся не только 2 атома водорода, связанные с ним ковалентными связями, но и 2 неподеленные пары атома кислорода (Рис.1.1) [6].

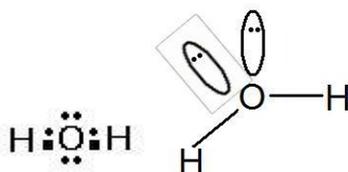


Рис. 1.1 – Структура молекулы воды.

По этой причине молекула воды представляет собой диполь - центры положительных и отрицательных зарядов в ней разнесены.

Огромная полярность связи О-Н приводит к тому, что между молекулами воды образуются водородные связи. Благодаря водородным связям вода обладает аномально высокой теплоемкостью (4,18 Дж/(г*К)), высокими температурами кипения и плавления [6].

Вопреки бытовым представлениям, чистая вода почти не проводит электрический ток. Электропроводность природной воды связана с растворенными в ней веществами.

1.6 Тяжелая вода и методы ее получения

Тяжелая вода имеет такую же химическую формулу, как и обычная природная вода, однако вместо атома протия она содержит более тяжелый изотоп водорода — атом дейтерия. Формула тяжёло-водородной воды обычно

записывается как D_2O . Внешне тяжелая вода неотличима от природной, она не содержит ни вкуса, ни запаха.

Однако по свойствам тяжелая вода значительно отличается от обычной. Химические реакции с тяжелой водой протекают медленнее, чем с природной, константы диссоциации молекулы тяжелой воды меньше таковых для обычной воды.

В природных водах на один атом дейтерия приходится 5500 атом протия. Данное предположение исходит из того, что весь дейтерий находится в виде молекулы D_2O , однако частично дейтерий находится в виде полутяжелой воды HDO .

Оксид дейтерия токсичен лишь в слабой степени, химические реакции протекающие в его среде медленнее, чем с природной водой, водородные связи с участием дейтерия сильнее. Эксперименты над млекопитающими показали, что замещение 25% протия в тканях дейтерием приводят к стерильности, а более высокие концентрации приводят к смерти живого организма. [11] Однако некоторые микроорганизмы способны жить в 70%-ной тяжелой воде) (простейшие) и даже в чистой тяжелой воде (бактерии). Человек может без серьезных последствий для здоровья выпить стакан тяжелой воды и весь дейтерий будет выведен из организма через несколько дней. В этом отношении тяжелая вода менее токсична, чем, например, поваренная соль.

Тяжелая вода накапливается в остатке электролита при многократном электролизе воды. При контакте с воздухом тяжелая вода поглощает пары природной воды, поэтому считается что она гигроскопична. Производство тяжелой воды энергозатратно, поэтому её стоимость очень высока. Основные физические свойства тяжелой воды приведены в таблице 1.1.

Таблица 1.1 – Сравнение физических свойств H_2O и D_2O [7]

Физические свойства	H_2O	D_2O
Молекулярная масса, а.е.м.	18,016	20,029
Плотность при 298,16 К, г/см ³	0,99707	1,10449
Температура кристаллизации, К	273,16	276,96
Температура кипения, К	373,16	374,59
Коэффициент замедления нейтронов	61	5700
Эффективное сечение захвата тепловых нейтронов, 10 ⁻²⁸ м ²	0,33	0,0046
Удельная теплоемкость при 293 К, кДж/кг·К	4,184	4,201

Важнейшим свойством тяжёлой воды является то, что она практически не поглощает нейтроны, поэтому используется в ядерных реакторах для торможения нейтронов. Также, высокая теплоемкость тяжелой воды обуславливает ее применение в качестве теплоносителя. Тяжелая вода используется также в качестве изотопного индикатора в химии и биологии. В физике элементарных частиц тяжёлая вода используется для детектирования нейтрино; так, крупнейший детектор солнечных нейтрино в Канаде содержит 1 килотонну тяжёлой воды.

Таким образом, основным потребителем тяжелой воды является атомная отрасль, в частности, тяжеловодные энергетические реакторы. Этот тип реакторов получил широкое распространение в тех регионах, где отсутствует технология по обогащению урана. В связи с этим, в тяжеловодных реакторах используется не высокообогащенный U^{235} , а природный. К таким странам относятся Канада, Аргентина, Индия, Корея и др. Наиболее распространенным тяжеловодным реактором на сегодняшний момент является CANDU (Canadian Deuterium Uranium), принципиальной особенностью которого является использование тяжелой воды как теплоносителя в активной зоне реактора, так и в качестве замедлителя нейтронов.

Кроме энергетических тяжеловодных реакторов существуют также исследовательские реакторы в таких странах, как Россия, Германия, Аргентина, Китай и др. Данные реакторы предназначены для материаловедческих исследований, а также для наработки изотопной продукции.

В настоящий момент существует большой спрос на тяжелую воду. Это обуславливается тем, что для единовременной загрузки в исследовательский реактор необходимо 20-30 т тяжелой воды, а для энергетических реакторов – порядка 400-500 кг на 1 МВт электрической мощности.

Данные по производственным мощностям установок для получения тяжелой воды в разных странах по состоянию на конец XX века приведены в таблице 1.2 [20].

Таблица 1.2 – Мощности по производству тяжелой воды, т/год

Страна производитель	Действующие	Проектируемые	Остановленные
Аргентина	250	-	-
Индия	588	-	-
Канада	463	800	800
Китай	50	-	-
Россия	10*	-	-
Румыния	180	-	-
США	-	-	400

*За счет переработки некондиционной тяжелой воды

Как видно из таблицы 1.2, основными производителями тяжелой воды являются те страны, в которых развита тяжеловодная энергетика. В то же время, в СССР максимальное производство тяжелой воды не превышало 50 тонн в год. В современной России производство тяжелой воды из природного сырья отсутствуют, а текущие потребности удовлетворяются за счет переработки ранее накопленных тритий-содержащих тяжеловодных отходов. Основными потребителями тяжелой воды в России на настоящий момент является единственный промышленный тяжеловодный реактор ЛФ-2 на ФГУП «ПО Маяк» и высокопоточный исследовательский реактор ПИК Петербургского

института ядерной физики (ПИЯФ) НИЦ «Курчатовский институт» с легководным замедлителем и тяжеловодным отражателем [13,14].

В настоящий момент учеными из ПИЯФ была разработана на опытных установках оригинальная технология получения тяжелой воды путем очистки тяжеловодных отходов от трития. В 1995 была введена в эксплуатацию первая в России и одна из первых в мире опытно-промышленная установка на основе метода изотопного обмена в системе вода-водород и электролиза воды (ЭВИО). [12]

Высокая эффективность установки ЭВИО дает возможность получать тяжелую воду с содержанием дейтерия $> 99,995$ % ат. Отработанная технология обеспечивает высокое качество тяжелой воды, включая глубокую очистку тяжелой воды от трития до остаточной активности, позволяющей без ограничений использовать тяжелую воду в медицинских и научных целях. Возможности установки позволяют полностью обеспечить потребности российских предприятий и организаций в тяжелой воде и дейтерии, а также экспортировать часть продукции. За время работы для нужд Росатома и других предприятий России были произведены более 20 тонн тяжёлой воды и десятки килограммов газообразного дейтерия.

Существует также и полутяжёлая (или дейтериевая) вода, у которой только один атом водорода замещен дейтерием. Формулу такой воды записывают как HDO.

В настоящий момент существует несколько методик получения тяжелой воды в промышленных масштабах (табл. 1.3). Однако наиболее вызывающие интерес и более перспективными является ректификация воды и изотопный обмен в системе вода-водород.

Таблица 1.3 – Сравнение методов получения тяжелой воды [13].

Метод разделения	α_{HD}	Рабочая температура, К	Энергозатраты, МВт·ч/кг D_2O	Преимущества и недостатки метода
Электролиз воды	1,5-10	313-333	120-150	<p>Преимущества:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Высокий коэффициент разделения <p>Недостатки:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Высокие энергозатраты 2. Пожаровзрывоопасность
Ректификация воды	1,047	333	40	<p>Преимущества:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Простота метода 2. Безопасность 3. Низкая энергозатратность <p>Недостатки:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Низкий коэффициент разделения 2. Крупногабаритные установки
Химический изотопный обмен				
Система $H_2S - H_2O$	2,34/1,82	303/403	2,8	<p>Преимущества:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Отсутствие катализатора в процессе 2. Высокие коэффициенты разделения 3. Отсутствие узла обращения потоков <p>Недостатки:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Экологическая опасность 2. Взрывоопасность 3. Токсичность 4. Высокая коррозионная активность
Система $H_2O - H_2$	3,22	328	65-70	<p>Преимущества:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Высокий коэффициент разделения <p>Недостатки:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Необходимость катализатора 2. Взрывоопасность

1.7 Ректификация воды

В связи с тем, что концентрация дейтерия в природной воде невелика, то для получения тяжелой воды необходима многократное разделение. В настоящее время разработано несколько методов получения тяжелой воды в промышленных масштабах. Один из них – ректификация.

Ректификация воды – сложный массообменный процесс, который осуществляется в противоточных колонных аппаратах с контактными элементами – насадками или элементами (Рис.4) [14]. В ходе работы колонны происходит непрерывный процесс обмена между паровой и жидкой фазами, которые двигаются относительно друг друга в противоположные направления. При этом жидкая фаза обогащается более высококипящим элементом (D_2O), а паровая фаза – более низкокипящим (H_2O).

Процесс массообмена происходит по всей высоте колонны между стекающей вниз флегмой и поднимающимся вверх паром. Чтобы увеличить интенсивность протекания процесса, используют контактные элементы – насадки и тарелки, тем самым увеличивая площадь массообмена. В случае применения насадки жидкость стекает тонкой пленкой по ее поверхности, в случае применении тарелок пар проходит через слой жидкости на поверхности тарелок.

Принцип работы колонного аппарата заключается в следующем: из испарительного куба испаряемая смесь поднимается вверх по колонне, проходя через специальные тарелки, которые наполнены флегмой (смесь) состоящая из конденсата предыдущей колонны и частичного конденсата холодильника).

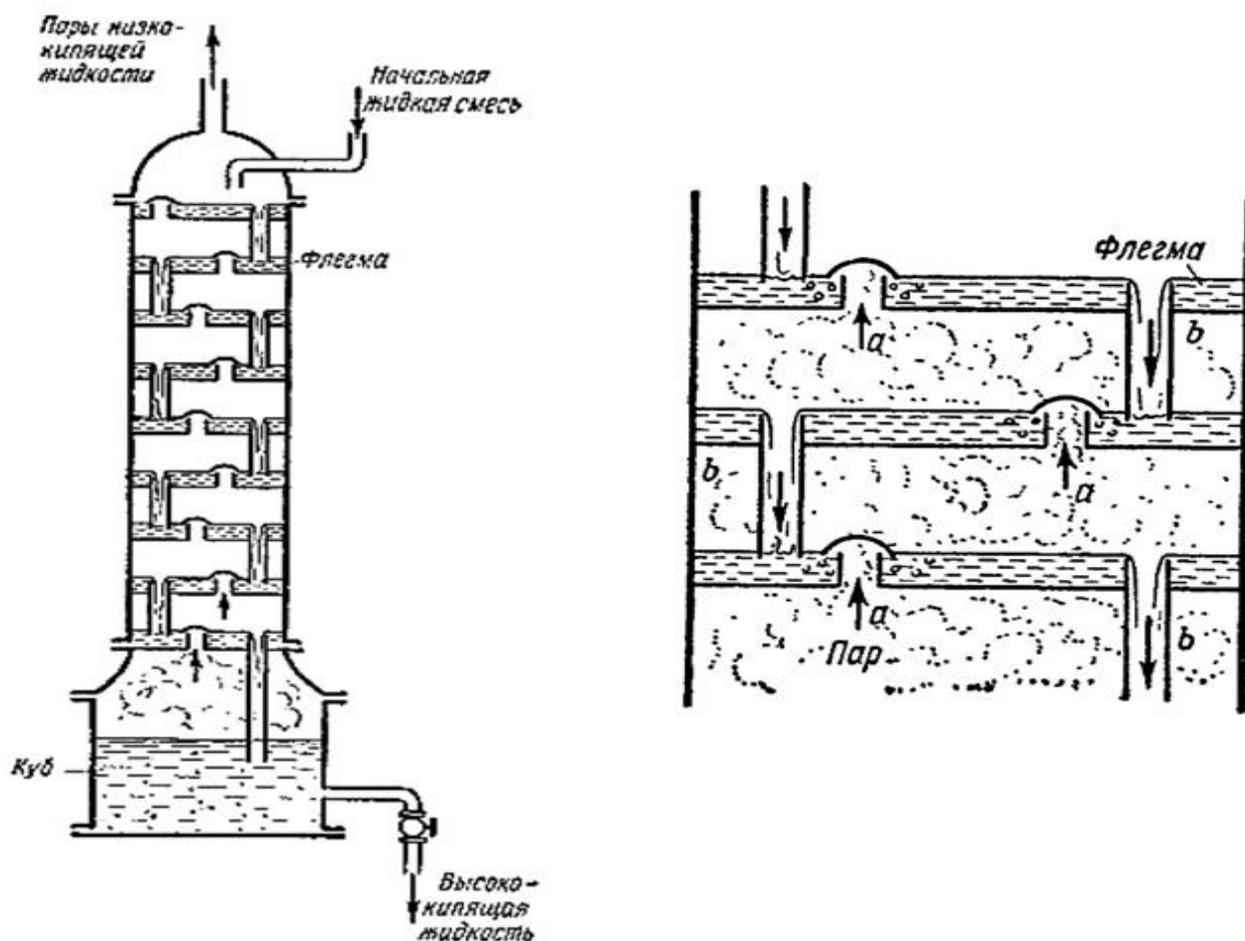


Рис. 1.2 – Ректификационная колонна.

Трубки «а» (Рис. 1.2) покрыты колпачками, края которых погружены в тарелки. Таким образом, поступающие пары проходят через флегму, при этом они частично охлаждаются и конденсируются, а флегма нагревается и испаряется. Конденсируется в первую очередь та часть паровой смеси, которая имеет более высокую температуру кипения. Испаряется же из флегмы низкокипящая жидкость.

При достаточной производительности нагревателя в кубе и хорошей теплоизоляции колонны специального обогрева тарелок не требуется, так как пар, поступающий с тарелки $i-1$, имеет более высокую температуру, чем температура кипения флегмы на i тарелке. Таким образом, пары обедняются молекулами высококипящей жидкости, а флегма обогащается ими. Чем выше в колонне поднимается пар, тем меньше в нем молекул высококипящей жидкости.

И наоборот, на нижних тарелках флегма почти не содержит жидкости с низкой температурой кипения.

На химических заводах часто отдельные колонны собираются в батареи. В подобных батареях удастся произвести разделение жидкостей с весьма близкими температурами кипения. Однако выделить из природной воды чистую тяжелую воду путем перегонки затруднительно. У них, как и у других изотопных веществ, очень близки температуры кипения. Во фракционных колоннах удастся лишь несколько повысить концентрацию тяжелой воды в стекающей вниз флегме.

Как говорилось ранее, для установления эффективного массообмена между жидкой фазой и паром необходимо использовать различные контактные устройства с развитой поверхностью. Такими устройствами могут являться тарелки с флегмой и различные насадки (кольца Рашига, кольца Наттера, СПН и др.). Однако в работе с тарельчатыми устройствами выявлен ряд недостатков. Так, общим недостатком тарелок является высокое гидравлическое сопротивление, а также различие в числе действительных тарелок от числа теоритических тарелок в 2,5 раза [15].

Поверхность контакта в насадочных колоннах создается при стекании жидкости по поверхности твердых насадочных устройств, заполняющих рабочий объем колонны. В то же время, пар движется противотоком в свободном пространстве между элементами насадки.

Насадки делятся на два типа: регулярные и нерегулярные. Регулярные насадки (рис. 1.3а) представляют собой правильные каналы для движения пара. Нерегулярные насадки (насыпные) – отдельные элементы, которые располагаются случайным образом и создают извилистые каналы для прохода пара.



а



б

Рис. 1.3 – Пример насадочных устройств.

а – регулярная насадка, б – нерегулярная насадка.

Наиболее эффективными для процесса ректификации считаются нерегулируемые насадки (рис. 1.3б). Они обладают высокой удельной поверхностью и большой удерживающей способностью по жидкости.

В таблице 1.4 приведены некоторые характеристики мелких эффективных насадок, которые представляют интерес для ректификации воды.

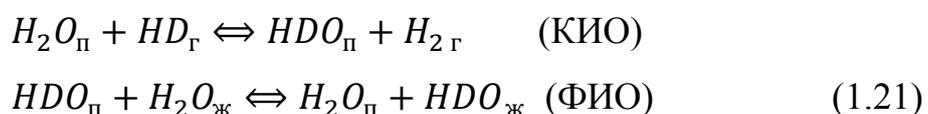
Таблица 1.4 – Характеристики мелких эффективных насадок [16,18]

Наименование	Материал	Размеры элемента, мм	Доля свободного объема, м ³ /м ³	Удельная поверхность, м ² /м ³	Масса единицы объема, кг/м ³
Кольца Рашига	Фарфор	5,2x5,4x1,3	0,64	896	1060
	Керамика	4,4x3,7x1,1	0,60	100	1060
Спиральнопризматическая насадка	Проволока из нержавеющей стали	2x2x0,2	0,82	2580	1114
		3x3x0,2	0,86	2140	855
		4x4x0,2	0,89	2700	220
	Капрон	2x2x0,22	0,81	2440	185
		3x3x0,22	0,85	1610	122
Кольца с перегородкой из сетки	Сетка из нержавеющей стали, 400 отв/см ²	5,1x5,2x0,2	0,904	1180	760
	Сетка из нержавеющей стали, 2500 отв/см ²	5,0x5,0x0,1	0,965	1260	280

Стоит отметить, что, несмотря на большое количество публикаций, посвященных исследованию свойств различных видов насадок, провести сравнение их характеристик не всегда представляется возможным. Это связано в первую очередь, с тем, что насадки испытывались в разных условиях при разделении различных смесей, свойства которых могут сильно отличаться.

1.8 Химический изотопный обмен в системе вода-водород

Процесс химического изотопного обмена в системе вода-водород описывается следующими уравнениями [16]:



Первая реакция описывает процесс обмена дейтерия между парами воды и водородом. Изотопный обмен водорода происходит быстро только тогда, когда в соединении водород связан с атомом, который имеет несколько свободных электронов. Таким образом, обмен молекулярного водорода с всем соединениями проходит чрезвычайно медленно и для ускорения этого процесса необходимо использовать катализатор [16,17]. Таким образом, реакция может протекать с заметной скоростью только в присутствии катализатора, из-за чего называется каталитическим изотопным обменом (КИО).

Вторая реакция представляет собой процесс фазового изотопного обмена паров воды и жидкой воды (ФИО). Данная реакция не требует наличия катализатора и представляет собой перенос изотопов между водяным паром и водой. Таким образом, ХИО в системе вода-водород состоит из двух процессов: первая реакция протекает в парогазовой фазе в прямоточном режиме, а вторая в условиях разделительно установки представляет собой противоточный процесс

между парогазовой фазой и жидкостью, в которой водород выполняет роль газа переносящего пары воды (газа-носителя).

Коэффициенты разделения для общего процесса ХИО неоднократно определялись экспериментальным путем. В таблице 1.5 приведен ряд формул, позволяющий определить коэффициент разделения в процессе ХИО для различных бинарных смесей [17].

Таблица 1.5 – Коэффициенты уравнения $\ln \alpha = \frac{a}{T} + \frac{b}{T^3} + c \cdot \ln T + d$

Коэффициент разделения*	$a, 10^2$	$b, 10^4$	c	d	Область применимости
$\alpha_{HD, \text{ п}}$	4,68	-	-	-0,292	-----
$\alpha_{DH, \text{ п}}$	4,17	-	-	-0,276	-----
$\alpha_{HD, \text{ г-ж}}$	3,689	2,7870	-	-0,2143	273-473 К
$\alpha_{DH, \text{ г-ж}}$	4,138	1,5465	-	-3600	277-368 К

Примечание: * - при обозначении пары изотопов на втором месте стоит изотоп присутствующий в малой концентрации

Процесс изотопного обмена в системе вода-водород может протекать с существенной скоростью только в присутствии катализатора, который активирует молекулярный водород. Такие катализаторы изготавливаются на основе Pt, Pd, Ru, или менее активных Ni и Cr, причем металл осаждается на поверхности пористого носителя, к примеру Al_2O_3 или активированный уголь. Однако еще на этапе предварительных экспериментов в 1942-1944 гг. было замечено, что присутствие жидкой воды на катализаторе существенно снижает его эффективность. Это связано с тем, что вода блокирует поры катализатора, затрудняя доступ к металлам. Водород плохо растворяется в воде и скорость реакции каталитического обмена падает.

Однако, в 1972 году был запатентован и разработан гетерогенный катализатор, способный сохранять свою активность в присутствии воды. [19] Наиболее удачной технологией было признано осаждение платины на

активированный уголь с добавлением тефлона и прессование полученной смеси в гранулы.

В России гидрофобный платиновый катализатор РХТУ-3СМ производится по разработанной в РХТУ технологии под руководством Ю.А. Сахаровского. Данный катализатор представляет собой сферические пористые гранулы сополимера стирола и дивинилбензола с нанесенной платиной. Диаметр гранул составляет 0.8-1.2 мм, а содержание платины порядка 0.8%.

Как следует из вышеизложенного, для осуществления процесса ХИО используется комбинация элементов из катализатора и насадки для проведения КИО и ФИО. На рисунке 6 приведены схемы различных контактных устройств. [16]

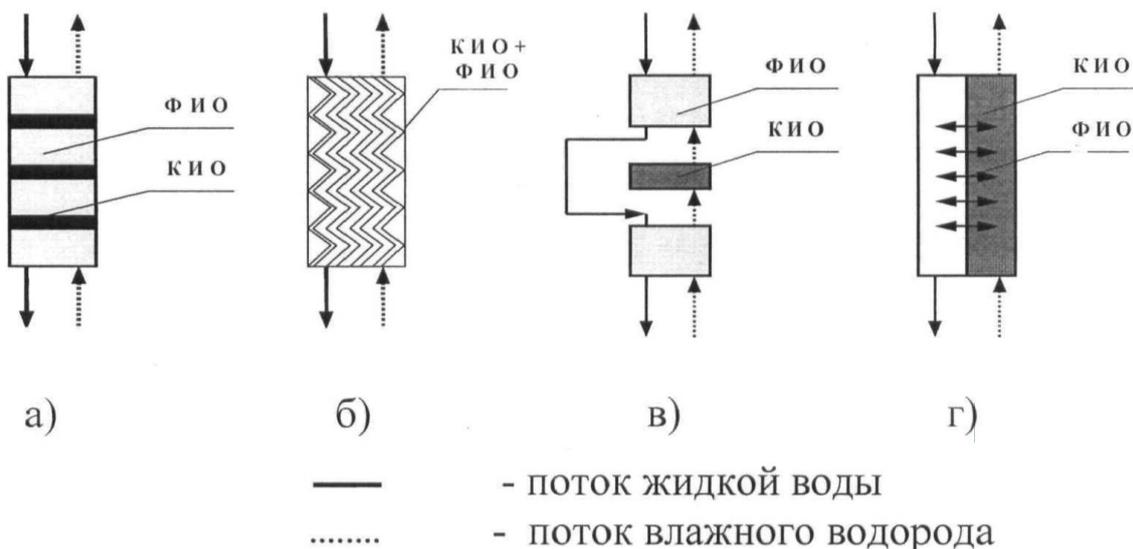


Рис. 1.6 – Принципиальные схемы контактных устройств различного типа.

На рис. 1.6 (а) приведена схема наиболее распространённого типа контактного устройства с нерегулярной насадкой. Оно представляет собой слои чередующихся гидрофобного катализатора и нерегулярной насадки. Принято использовать соотношение катализатор-насадка 1:4. При этом высота слоя катализатора невысока и составляет 1,5 мм [17,18]. Общим недостатком контактных устройств с нерегулярной насадкой является маленькая пропускная способность и проблема с радиальным распределением жидкости. Для

улучшения распределения жидкости требуется установка в колонне перераспределителей орошения через каждые 1,5-2 метра [18].

Более лучшая пропускная способность в колоннах, заполненных регулярной насадкой (рис. 1.6 (б)). Однако удельная поверхность регулярных насадок в несколько раз меньше, чем мелких высокоэффективных насадок. Эффективность массообмена в процессе ХИО на регулируемых насадках ниже, чем на нерегулируемых насадках.

На рисунке 1.6 (в) реализуется схема с разделением пространства процессов КИО и ФИО. Подобные устройства часто упоминаются в японской литературе, посвященной ХИО в системе вода-водород.

В настоящий момент разрабатывается схема еще одного контактного устройства (рис. 1.6 (г)). Авторами работы являются РХТУ им Д.И. Менделеева [16,17,18]. Считается, что пространственное разделение потоков жидкой фазы и газа будет реализовано с помощью мембраны, проницаемой для паров воды. Данная мембрана будет изготовлена из полимера типа полиакриламид. Данный способ позволит использовать негидрофобные катализаторы.

2. Практическая часть

2.1 Описание подходов к расчету обменной колонны

Моделирование – это процесс создания модели, позволяющей максимально отразить свойства и характеристики системы. Однако никакая модель не может полностью отразить все параметры объекта или явления. В связи с этим, одним из важнейших этапов при расчете является создание или подбор модели.

2.1.1 Ректификация воды

Математическое моделирование разделения изотопов водорода при ректификации воды с целью проведения проектных и проверочных расчетов (как одиночных колонн, так и разделительных каскадов, в том числе – в нестационарном состоянии) предпринималось в разные годы разными авторами [21-26]. Большинство предложенных моделей рассматривает общий случай многокомпонентной ректификации, что предполагает запись уравнений равновесия и материального баланса по каждому компоненту смеси. Все они без исключения базируются на более общих моделях, применимых не только в случае ректификации воды, но и любой смеси веществ, например, изотопных форм водорода (эта задача рассматривается в литературе чаще всего). В соответствии с возможностью описывать нестационарное состояние колонны, а также заложенными в модель приближениями и допущениями существующие модели можно разбить на три основные группы.

1. *Динамическое моделирование с использованием понятия теоретической ступени разделения (ТСР)* [26, 27]. В отсутствие стационарного состояния колонн (пусковой период, изменения в составе сырья, варьирование внешних и внутренних потоков, периодическая ректификация) моделирование процесса многокомпонентной ректификации предполагает решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений, выражающих материальный баланс на i -й ТСР: по j -му компоненту:

$$\frac{dh_{ij}}{dt} = F_i x_{F,ij} + L_{i+1} x_{i+1,j} - (L_i - S_i^L) x_{ij} + (V_{i-1} - S_{i-1}^V) y_{i-1,j} - V_i y_{ij}, \quad (2.1)$$

В ЦЕЛОМ

$$\frac{dH_i}{dt} = F_i + L_{i+1} - L_i + V_{i-1} - V_i - S_i^L - S_{i-1}^V, \quad (2.2)$$

и тепловой баланс

$$\frac{dQ_i}{dt} = F_i q_{F,i} + L_{i+1} q_{L,i+1} - (L_i - S_i^L) q_{L,i} + (V_{i-1} - S_{i-1}^V) q_{V,i-1} - V_i q_{V,i} + E_i, \quad (2.3)$$

где h – задержка компонента на ТСР, H – общая задержка на ТСР, Q – суммарная энтальпия всех компонентов на ТСР, F – питающий поток, поступающий на ТСР, S^L и S^V – потоки отбора с ТСР в виде жидкости и пара соответственно, L и V – внутренние потоки жидкости и пара соответственно, x , y и x_F – мольные доли компонента в жидкости, паре и питании соответственно, q_L , q_V и q_F – удельные энтальпии соответствующих потоков, E – тепловая мощность, выделяемая или поглощаемая на ТСР (в том числе вследствие радиоактивного распада трития). Помимо этого в модель закладываются алгебраические уравнения, описывающие парожидкостное равновесие на ТСР, зависимости энтальпии жидкости и пара от температуры, а также гидродинамические и массообменные характеристики контактного устройства колонны. Необходимость решения смешанной системы дифференциальных и нелинейных алгебраических уравнений с размерностью $N \times (4C+8)$ (где N – ЧТСР, C – число разделяемых компонентов) привела автора работы [28] к идее об описании целых групп ТСР в колонне как отдельных ТСР с КПД по Мэрффри более 100% (supertrays, или «супертарелки»). Такой подход действительно позволяет получить хорошее согласие между теорией и экспериментом и при этом в десятки раз сократить объем вычислений. Однако результат в значительной мере зависит от способа разбиения колонны на «супертарелки», который зачастую неочевиден и, кроме того, должен корректироваться в ходе расчетов. В связи с развитием возможностей компьютерной техники авторы компьютерных программ для динамического моделирования предпочитают использовать классическое понятие ТСР [29, 30].

2. Динамическое моделирование без использования гипотезы о ТСР

В рамках другого подхода, более строгого, но и более трудоемкого, ректификационная колонна разбивается по высоте (координата z) на малые участки (не более 1-2 мм), для каждого из которых решаются уравнения массопереноса каждого j -го компонента смеси в жидкой и паровой фазе [21]:

$$\frac{\partial(h_L x_j)}{\partial t} = \frac{\partial(L x_j)}{\partial z} - K_{L,j} \sigma [x_j - x_j^*(y)], \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial(h_V y_j)}{\partial t} = \frac{\partial(V y_j)}{\partial z} - K_{V,j} \sigma [y_j - y_j^*(x)], \quad (2.5)$$

где h_L и h_V – задержки по жидкости и пару на единице высоты, K_L и K_V – коэффициенты массопередачи компонента, выраженные по жидкой и паровой фазе соответственно, σ – сечение колонны, x и y – векторы концентраций компонентов, * символизирует равновесную концентрацию. Модель содержит также уравнения, описывающие термодинамическое равновесие, и формулы для определения коэффициентов массопередачи. При интегрировании системы уравнений в частных производных предполагается, что потоки жидкости и пара постоянны в пределах i -го участка колонны, так что для каждого из них выполняются соотношения материального и теплового баланса:

$$F_i + L_{i+1} - L_i + V_{i-1} - V_i - S_i^L - S_{i-1}^V = 0, \quad (2.6)$$

$$F_i q_{F,i} + L_{i+1} q_{L,i+1} - (L_i - S_i^L) q_{L,i} + (V_{i-1} - S_{i-1}^V) q_{V,i-1} - V_i q_{V,i} + E_i = 0, \quad (2.7)$$

Интегрирование системы производится методом конечных разностей. Аналогичный подход, названный авторами «аналоговой моделью», в приложении к описанию стационарного состояния колонны может использоваться для определения ВЭТС в тех случаях, когда коэффициенты массопередачи для всех компонентов близки и понятие ТСР имеет, таким образом, физический смысл.

2.1.2 Химический изотопный обмен в системе вода-водород

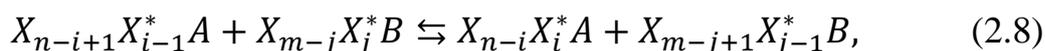
Как было описано ранее в главе 1 химический изотопный обмен водорода с водой (ХИО) включает в себя два процесса: каталитический изотопный обмен (КИО) и фазовый изотопный обмен (ФИО) [16,18].

Процесс ФИО чрезвычайно сложен, поскольку его скорость зависит от гидродинамики потоков в колонне, степени смачиваемости насадки, концентрации водяного пара в паро-газовой смеси и многих других факторов. Поэтому при математическом описании процесса ФИО приходится ограничиться традиционными представлениями о кинетике этого процесса. При этом из опыта определяется объемный коэффициент массопередачи, а в качестве движущей силы процесса рассматривается разность концентраций тяжелого изотопа в паре и равновесной концентрации в жидкости в данном сечении колонны.

Скорость каталитического изотопного обмена на гидрофобном катализаторе, обычно, определяется в опыте в прямоточном реакторе. При обработке данных такого опыта определяется k_{ex} - экспериментальная константа скорости реакции КИО. Поскольку реакция изотопного обмена паров воды и водорода имеет значительный коэффициент разделения, то в широком диапазоне концентраций дейтерия ее кинетика может не подчиняться экспоненциальному закону. Таким образом, встает вопрос о том, как можно учесть такие отклонения и использовать значение экспериментальной константы скорости полученной в области малой концентрации дейтерия при расчете колонны работающей в широком диапазоне концентраций дейтерия.

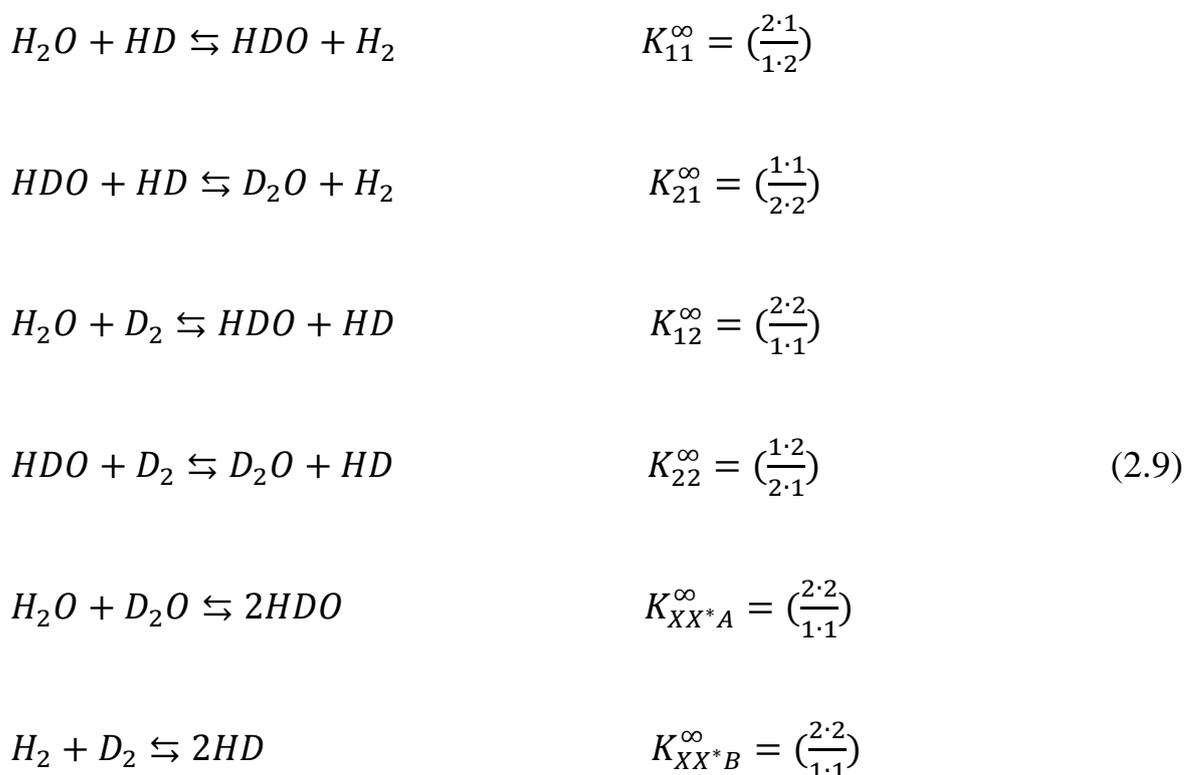
Для трех изотопов водорода - протия, дейтерия и трития возможно существование 12 молекулярных разновидностей воды и водорода. С учетом того, что концентрация трития при разделении изотопов в системе $H_2O - H_2$ не превышает природного содержания, тритием можно пренебречь и считать, что в смеси присутствуют только 6 видов молекул ($H_2O, HDO, D_2O, H_2, HD, D_2$).

Для бинарной изотопной смеси протий-дейтерий можно записать общее уравнение гомогенной реакции изотопного обмена протекающей в паро-газовой фазе [16,19,20]:



где X^* – тяжелый изотоп, A – вещество, имеющее n атомов обменивающегося элемента в эквивалентных положениях, в котором при равновесии концентрируется тяжелый изотоп. Для ХИО системы вода-водород вещество A – водяной пар.

Все возможные реакции обмена протий-дейтерий можно записать следующим образом (в скобках указаны отношения чисел симметрии):



Для каждой из них можно записать свой коэффициент разделения $\alpha_{ij} = K_{ij}/K_{ij}^\infty = \overline{k_{ij}}/k_{ij}$. При температуре стремящейся к бесконечности все константы скорости пропорциональны числам симметрии реагирующих молекул, и коэффициент разделения во всех реакциях (2.9) равен 1. При этом кинетика реакции (2.8) подчиняется экспоненциальному закону во всем диапазоне изотопных концентраций [32, 33]. Однако, если коэффициент разделения существенно больше 1, кинетика реакции (2.8) перестает подчиняться уравнению

первого порядка и это отклонение в общем случае определяется истинным механизмом реакции [33,34]. При рассмотрении простейшего случая, когда уравнения (2.9) соответствуют истинной кинетике процесса т.е. реакции бимолекулярные и исходя из допущения, что $a_u = a_n = a_{21} = a_{22} = a$, было выведено уравнение:

$$\frac{dz}{dt} = \left(\frac{\bar{R}}{n \cdot n_A} \right) \left((1 - z)y - \left(\frac{1}{a} \right) z(1 - y) \right), \quad (2.10)$$

где \bar{R} - скорость прямой реакции (2.8) при $z=0$ и $y=1$ (начальная скорость обмена между H_2O и D_2) (моль/с),

z - атомная доля тяжелого изотопа в веществе в котором при равновесии концентрируется тяжелый изотоп (водяной пар),

y - атомная доля тяжелого изотопа в веществе в котором при равновесии концентрируется легкий изотоп (водород),

n - число обменивающихся атомов занимающих эквивалентные положения в водяном паре,

n_A - число молей вещества А (водяного пара).

Уравнение (2.10) описывает кинетику обратимой реакции второго порядка, которая в общем случае не описывается экспоненциальным законом. Однако для некоторых предельных случаев, в частности, если z и $y \ll 1$, уравнение (2.10) переходит в уравнение (2.11) и экспоненциальная кинетика сохраняется.

$$\frac{dz}{dt} = \left(\frac{\bar{R}}{n \cdot n_A} \right) \left(y - \left(\frac{1}{a} \right) z \right), \quad (2.11)$$

Решение уравнения (2.11) приводит к следующему соотношению:

$$-\ln(1 - F) = \bar{R} \left(\frac{1}{an \cdot n_A} + \frac{1}{m \cdot n_B} \right) t = k_{ex} \cdot t, \quad (2.12)$$

k_{ex} - экспериментальная константа скорости (c^{-1}),

a - коэффициент разделения,

m – число обменивающихся атомов занимающих эквивалентные положения в водороде,

n_B – число молей вещества В (водорода).

Величина F в уравнении (2.12) представляет собой степень обмена:

$$F = \frac{x-x_0}{x_\infty-x_0} = \frac{y_0-y}{y_0-y_\infty}, \quad (2.13)$$

В уравнении (2.12) \bar{R} выражается через экспериментальную константу скорости k_{ex} :

$$\bar{R} = k_{ex} \left(\frac{a \cdot n_m \cdot n_A n_B}{a n \cdot n_A + m \cdot n_B} \right), \quad (2.14)$$

Предположим, что кинетика гетерогенного процесса КИО может быть описана подобно кинетике гомогенной реакции. Для расчета процесса ХИО в колоннах необходимо найти связь экспериментальной константы скорости, определенной в области малой концентрации дейтерия и собственно скорости процесса КИО. Запишем уравнения для реакции обмена водяного пара и водорода, протекающей в проточном реакторе заполненном зернами катализатора. При этом, в уравнении (2.10), количество водяного пара n_A отнесем к единице объема парогазовой смеси находящейся в свободном пространстве между зернами катализатора:

$$\frac{dz}{dt} = \left(\frac{\bar{R}}{2C_W} \right) \left((1-z)y - \left(\frac{1}{a} \right) z(1-y) \right), \quad (2.15)$$

где C_W – концентрация водяного пара (моль/м³),

\bar{R} – скорость реакции обмена в прямом направлении в единице свободного объема (моль/м³ с).

Если z и $y \ll 1$

$$\frac{dz}{dt} = \left(\frac{\bar{R}}{2C_W} \right) \left(y - \left(\frac{1}{a} \right) z \right), \quad (2.16)$$

$$\bar{R} = k_{\text{ex}} \left(\frac{a \cdot 2C_W C_H}{aC_W + C_H} \right), \quad (2.17)$$

где C_W и C_H – концентрация водяного пара и водорода в свободном объеме (моль/м³),

k_{ex} – экспериментальная константа скорости, рассчитанная по истинному времени контакта (t) в реакторе (с⁻¹).

Время контакта при проведении эксперимента в прямоточном реакторе обычно рассчитывают исходя из потока парогазовой смеси на полное, а не на свободное сечение реактора. Поскольку для реакций изотопного обмена характерен малый тепловой эффект и отсутствие изменения объема, можно в уравнениях (2.15-2.17) заменить реальное время контакта, рассчитанное исходя из свободного сечения реактора, на время контакта, рассчитанное исходя из потока парогазовой смеси на полное сечение реактора:

$$dt = \varepsilon d\tau = \varepsilon \frac{S}{Q} dh, \quad (2.18)$$

где dt – истинное время контакта (с),

$d\tau$ – условное время контакта (с),

S – общая площадь сечения реактора (м²),

Q – объемная скорость парогазовой смеси (м³/с),

dh – дифференциально малая высота слоя реактора (м),

ε – доля свободного сечения.

Уравнение, связывающее опытную константу скорости и условное время контакта можно записать как:

$$-\ln(1 - F) = k_{\text{ex}} \cdot \tau = \frac{k_{\text{ex}}}{\varepsilon} \cdot t = k_{\text{ex}}^{\text{ист}} \cdot t, \quad (2.19)$$

$k_{\text{ex}}^{\text{ист}}$ – экспериментальная константа скорости, рассчитанная по условному времени контакта (τ) в реакторе (с⁻¹).

С другой стороны из уравнений (2.17) и (2.19) следует:

$$\bar{R} \left(\frac{a \cdot 2C_W C_H}{aC_W + C_H} \right) \cdot t = k_{\text{ex}}^{\text{ист}} \cdot t = \frac{k_{\text{ex}}}{\varepsilon} \cdot t = k_{\text{ex}} \cdot \tau, \quad (2.20)$$

Скорость реакции, отнесенная к единице общего объема реактора будет меньше:

$$\bar{R}_{\text{ex}} = \varepsilon \bar{R} = k_{\text{ex}} \left(\frac{a \cdot 2C_W C_H}{aC_W + C_H} \right), \quad (2.21)$$

где \bar{R}_{ex} – скорость реакции обмена в прямом направлении в единице общего объема реактора (моль/м³с).

Найдем выражение для описания кинетики процесса, пригодное для расчета колонны ХИО. Используя (2.18) и (2.21), запишем уравнение (2.15):

$$\left(\frac{Q}{S} \right) \frac{dz}{\varepsilon \cdot dh} = \frac{\bar{R}_{\text{ex}}}{\varepsilon \cdot C_W} \left((1 - z)y - \left(\frac{1}{a} \right) z(1 - y) \right), \quad (2.22)$$

Перегруппируем (2.22):

$$C_W \left(\frac{Q}{S} \right) \frac{dz}{dh} = Z \frac{dz}{dh} = \frac{\bar{R}_{\text{ex}}}{2} \left((1 - z)y - \left(\frac{1}{a} \right) z(1 - y) \right), \quad (2.23)$$

Величина $C_W \left(\frac{Q}{S} \right) = Z$ в уравнении (2.23) представляет собой удельный поток водяного пара на полное сечение реактора и имеет размерность (моль/м²с). Тогда уравнение массопередачи для КИО имеет вид:

$$\frac{dz}{dh} = \frac{\bar{R}_{\text{ex}}}{2 \cdot Z} \left((1 - z)y - \left(\frac{1}{a} \right) z(1 - y) \right), \quad (2.24)$$

Следовательно, величину \bar{R}_{ex} в данной модели можно условно рассматривать как объемный коэффициент массопередачи в процессе каталитического изотопного обмена. Фактически же эта величина является скоростью изотопного обмена при движущей силе процесса, выраженной в изотопных концентрациях, равной единице.

В условиях, когда изотопные концентрации изменяются в широком диапазоне по высоте колонны ХИО важным становится вопрос, как практически рассчитывать величину коэффициента разделения в (2.24). Поскольку исходное кинетическое уравнение (2.11) выведено в предположении независимости коэффициента разделения от концентрации, точно определить величину a при различных концентрациях в паре и водороде нельзя. В практическом расчете можно рассчитывать некоторую среднюю концентрацию дейтерия в парогазовой смеси и принимать значение a при ней. Коэффициент разделения в процессе КИО для смеси протий- дейтерий изменяется в относительно узком диапазоне

при изменении содержания дейтерия от ~ 0 до -100 ат.% (например при 333К он изменяется от 3,06 до 2,64) и, следовательно, концентрационная зависимость коэффициента разделения не будет оказывать существенного влияния на вид полученного уравнения (2.24). Следовательно, коэффициент разделения в процессе КИО при расчете по уравнению (2.24) целесообразно брать при средней концентрации дейтерия в парогазовой смеси.

3 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

Данная работа посвящена анализу параметров работы установки для разделения изотопов водорода и ее эффективности процесса разделения в зависимости от свойств величин потоков, температуры и других параметров.

Рассматриваемая технология в меньшей степени затратная и практически безотходна. Такое производство может занять большую долю рынка.

3.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Целью исследования является анализ массообменных процессов при разделения изотопов водорода методом ректификации воды.

Основными конкурентами метода ректификации воды являются метод ХИО в системе вода-водород, а так же ХИО в системе сероводород-вода.

Целевым рынком данного исследования будет являться энергетическая и химическая промышленности.

3.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Анализ конкурентных решений лучше всего проводить при помощи оценочной карты. С этой целью были определены конкуренты на рынке. Анализ помогает вносить коррективы в научное исследование, с целью успешнее противостоять конкурентам. Так же очень важно реалистично оценить сильные и слабые стороны разработки конкурирующих сторон.

С этой целью может быть использована вся имеющаяся информация о конкурентных разработках:

- технические характеристики разработки;
- конкурентоспособность разработки;
- уровень завершенности научного исследования (наличие макета, прототипа и т.п.);

- уровень проникновения на рынок;
- финансовое положение конкурентов, тенденции его изменения и т.д.

Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения позволяет провести оценку сравнительной эффективности научной разработки и определить направления для ее будущего повышения.

Критерии для сравнения и оценки ресурсоэффективности и ресурсосбережения, приведенные в таблице 3.1, подбирались, исходя из выбранных объектов сравнения с учетом их технических и экономических особенностей разработки, создания и эксплуатации. Основными техническими критериями методов будут являться: эффективность работы установки, безопасность эксплуатации, простота эксплуатации и экологичность. Удобство и безопасность эксплуатации установок при разделении изотопов водорода являются важными, так как от этого зависит здоровье человека.

Эффективность разделения изотопов. Данный критерий является одним из важнейших, поскольку он характеризуется коэффициентом разделения, который можно получить на данном типе установки. Коэффициент разделения, в свою очередь характеризует разницу концентраций после однократного разделения изотопов.

Безопасность эксплуатации установки. Характеризуется присутствием опасных соединений в установке, которые при нарушении условий эксплуатации установкой могут привести к взрыву, возгоранию или отравлению обслуживающего персонала.

Простота эксплуатации. Данный критерий характеризует установку тем, как сложно ее запустить и обслуживать в ходе ее работы, необходим ли ей постоянный контроль и смена режимов работы.

Экологичность. Характеризует опасность и вред для окружающей среды в случае утечки рабочих соединений из установки.

Надежность установки. Вероятность поломки установки, а также утечки легколетучих соединений из установки.

Срок эксплуатации. Данный критерий описывает как долго установка может проработать до вывода её из эксплуатации.

Размеры установки характеризуют ее массогабаритные параметры.

Таблица 3.1 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1.Эффективность разделения изотопов	0,15	2	5	5	0,3	0,75	0,75
2.Безопасность эксплуатации установки	0,18	5	3	2	0,9	0,54	0,36
3.Простота эксплуатации установки	0,14	4	4	3	0,56	0,56	0,42
4.Экологичность	0,18	5	4	2	0,9	0,72	0,36
5.Надежность установки	0,12	4	3	3	0,48	0,36	0,36
6.Срок эксплуатации установки	0,13	4	4	3	0,52	0,52	0,39
7. Размеры установки	0,1	3	5	3	0,3	0,5	0,3
Итого	1	27	28	21	3,96	3,95	2,94

Согласно расчету из таблицы 3.1 видно, что рассматриваемая технология разделения изотопов водорода имеет практически равный показатель конкурентоспособности по отношению к ХИО в системе вода-водород (3,96 и 3,95 соответственно). Как видно из таблицы, сильными сторонами технологии

являются безопасность и простота эксплуатации, а так же экологичность. Слабой стороной является эффективность установки.

3.1.3 SWOT-матрица

Целью SWOT-анализа является определение всех сильных и слабых сторон научной разработки, которые рассматриваются как внутренние факторы, а также изучение внешних факторов, каковыми являются рыночные возможности и угрозы, для получения четкого представления основных направлений развития предприятия. На основе такого исследования организация должна максимально использовать свои сильные стороны, попытаться преодолеть слабости, воспользоваться благоприятными возможностями и защититься от потенциальных угроз. Он проводится в несколько этапов.

Первый этап заключается в описании сильных и слабых сторон проекта, в выявлении возможностей и угроз для реализации проекта, которые проявились или могут появиться в его внешней среде. Результаты первого этапа SWOT-анализа представлены таблице 3.2.

Таблица 3.2 – SWOT-анализ.

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта: С1. Экологичность технологии; С2. Квалифицированный персонал; С3. Безопасность технологии;	Слабые стороны научно-исследовательского проекта: Сл1.Отсутствие прототипа научной разработки; Сл2. Низкая эффективность по отношению к другим технологиям
Возможности: В1.Появление дополнительного спроса на новый продукт; В2.Повышение стоимости конкурентных разработок;		
Угрозы: У1.Отсутствие спроса на технологии производства; У2.Развитая конкуренция технологий производства.		

После того как сформулированы четыре области SWOT следует реализация второго этапа.

Второй этап состоит в выявлении соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды. Это соответствие или несоответствие должны помочь выявить степень необходимости проведения стратегических изменений.

В рамках данного этапа необходимо построить интерактивную матрицу проекта. Ее использование помогает разобраться с различными комбинациями взаимосвязей областей матрицы SWOT.

Возможно использование этой матрицы в качестве одной из основ для оценки вариантов стратегического выбора. Каждый фактор помечается либо знаком «+» (означает сильное соответствие сильных сторон возможностям), либо знаком «-» (что означает слабое соответствие); «0» – если есть сомнения в том, что поставить «+» или «-». Интерактивная матрица проекта представлена в таблице 3.3.

Таблица 3.3 – Интерактивная матрица проекта

Сильные стороны проекта				
Возможности проекта		C1	C2	C3
	B1	+	-	+
	B2	+	+	+

Анализ интерактивных таблиц представляется в форме записи сильно коррелирующих сильных сторон и возможностей, или слабых сторон и возможностей и т.д. следующего вида: B1C1C3; B2C1C2C3. Каждая из записей представляет собой направление реализации проекта.

Результаты SWOT-анализа учитываются при разработке структуры работ, выполняемых в рамках научно-исследовательского проекта.

В рамках третьего этапа составлена итоговая матрица SWOT-анализа, представленная в таблице 3.4.

Таблица 3.4 – Итоговая матрица SWOT – анализа

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта: С1. Экологичность технологии; С2. Квалифицированный персонал; С3. Безопасность технологии;	Слабые стороны научно-исследовательского проекта: Сл1.Отсутствие прототипа научной разработки; Сл2. Низкая эффективность по отношению к другим технологиям
Возможности: В1.Появление дополнительного спроса на новый продукт; В2.Повышение стоимости конкурентных разработок;	Из данной комбинации видно, что существует возможность создания надежного и экономически выгодного способа получения изотопов водорода методом ректификации. Спрос на продукт даст возможность для инвестировать в технологию.	Спрос на новый продукт может быть увеличен за счет его технологических возможностей. Если использовать необходимое оборудование для проведения испытания опытного образца, то появится возможность избавиться от недостатка финансовых средств.
Угрозы: У1.Отсутствие спроса на технологии производства; У2.Развитая конкуренция технологий производства.	Исследуемая технология получения изотопов водорода дает возможность получать продукт с необходимыми характеристиками при существенно меньших затратах аналогов.	Привлечение финансовых средств, а также уменьшение производственных затрат приведет к повышению спроса на новые технологии.

Исходя из анализа матрицы, можно сделать вывод, что необходимо задействовать инвестиционные средства для привлечения ресурсов и покупателей к данной разработке, т.к. она привлекательна с точки зрения экологичности и безопасности производства. Кроме того, основные энергозатраты при ректификации воды (до 80 процентов энергозатрат) лежат в области малых концентраций продукта. С увеличением концентрации дейтерия в воде энергоэффективность метода возрастает.

3. 2 Планирование научно-исследовательских работ

3.2.1 Структура работ в рамках научного исследования

Планирование комплекса предполагаемых работ осуществляется в следующем порядке:

- определение структуры работ в рамках научного исследования;
- определение участников каждой работы;
- установление продолжительности работ;
- построение графика проведения научных исследований.

Для выполнения научных исследований формируется рабочая группа, в состав которой могут входить научные сотрудники и преподаватели, инженеры, техники и лаборанты, численность групп может варьироваться. По каждому виду запланированных работ устанавливается соответствующая должность исполнителей.

В данном разделе необходимо составить перечень этапов и работ в рамках проведения научного исследования, провести распределение исполнителей по видам работ. Примерный порядок составления этапов и работ, распределение исполнителей по данным видам работ приведен в таблице 3.5.

Таблица 3.5 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ раб.	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель, Инженер
Выбор направления исследований	2	Подбор и изучение материалов по теме	Инженер
	3	Анализ исходных данных	Инженер
	4	Выбор направления исследований	Инженер, руководитель
	5	Календарное планирование работ по теме	Инженер

Теоретические и экспериментальные исследования	6	Моделирование технологического процесса на ПК	Инженер, Руководитель
Обобщение и оценка результатов	7	Оценка эффективности полученных результатов	Инженер, Руководитель
	8	Анализ и обработка полученных результатов	Инженер
	9	Оформление пояснительной записки к ВКР	Инженер
	10	Подготовка к защите ВКР	Инженер

3.2.2 Определение трудоемкости выполнения работ

Трудовые затраты в большинстве случаев образуют основную часть стоимости разработки, поэтому важным моментом является определение трудоемкости работ каждого из участников научного исследования.

Трудоемкость выполнения научного исследования оценивается экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов. Для определения ожидаемого (среднего) значения трудоемкости $t_{ожi}$ используется следующая формула:

$$t_{ожi} = \frac{3t_{\min i} + 2t_{\max i}}{5}, \quad (3.1)$$

где $t_{ожi}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения i -ой работы чел.-дн.;

$t_{\min i}$ – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (оптимистическая оценка: в предположении наиболее благоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.;

$t_{\max i}$ – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (пессимистическая оценка: в предположении наиболее неблагоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.

Исходя из ожидаемой трудоемкости работ, определяется продолжительность каждой работы в рабочих днях T_p , учитывающая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями. Такое

вычисление необходимо для обоснованного расчета заработной платы, так как удельный вес зарплаты в общей сметной стоимости научных исследований составляет около 65 %.

$$T_{pi} = \frac{t_{ожi}}{Ч_i}, \quad (3.2)$$

где T_{pi} – продолжительность одной работы, раб. дн.;

$t_{ожi}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел.-дн.;

$Ч_i$ – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

3.2.3 Разработка графика проведения научного исследования

Для удобства построения графика, длительность каждого из этапов работ из рабочих дней следует перевести в календарные дни:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{кал}, \quad (3.3)$$

где T_{ki} – продолжительность выполнения i -й работы в календарных днях;

T_{pi} – продолжительность выполнения i -й работы в рабочих днях; $k_{кал}$ – коэффициент календарности.

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле:

$$k_{кал} = \frac{T_{кал}}{T_{кал} - T_{вых}} = \frac{365}{247} = 1,48, \quad (3.4)$$

В таблице 3.6 представлены временные показатели проведения научного исследования.

Таблица 3.6 – Временные показатели проведения научного исследования

Название работы	Трудоемкость работ			Исполнители	Длительность работ в рабочих днях T_{pi}	Длительность работ в календарных днях T_{ki}
	t_{min} , чел-дни	t_{max} , чел-дни	$t_{ожi}$, чел-дни			
Составление и утверждение технического задания	3	5	3,8	И, Р	3,8	5

Подбор и изучение материалов по теме	10	15	12	И	12	14
Анализ исходных данных	5	7	5,8	И	5,8	7
Выбор направления исследований	3	6	4,2	И, Р	2,1	3
Календарное планирование работ по теме	2	2,5	2,2	И	2,2	3
Моделирование технологического процесса на ПК	10	15	12	И	12	14
Оценка эффективности полученных результатов	5	7	5,8	И, Р	5,8	7
Анализ и обработка полученных результатов	2	4	2,8	И, Р	1,4	2
Оформление пояснительной записки к ВКР	6	10	7,6	И	7,6	9
Подготовка к защите ВКР	4	7	5,2	И	5,2	6
Итого:			61,4		57,9 Р/И 13,1/48,3	67 Р/И 10/65

3.2.4 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

При планировании бюджета НТИ должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов расходов, связанных с его выполнением. В процессе формирования бюджета НТИ используется следующая группировка затрат по статьям:

- материальные затраты НТИ;
- затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ;
- основная заработная плата исполнителей темы;
- дополнительная заработная плата исполнителей темы;
- отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления);

3.2.5 Материальные затраты НТИ

Работа над дипломом проводилась в течении 57,9 дней по 3 часа, мощность ПК 500 Вт/час.

Затраты на электроэнергию рассчитываются по формуле:

$$Z_{эл} = C_{эл} \cdot P_{комп} \cdot F_{об}, \quad (3.5)$$
$$Z_{эл} = 5,8 \cdot 0,5 \cdot 57,9 \cdot 3 = 498,51 \text{ руб.},$$

где $C_{эл}$ – тариф на промышленную электроэнергию (5,8 руб за 1 кВт·ч);

P – мощность оборудования, кВт;

$F_{об}$ – время использования оборудования, ч.

3.2.6 Основная заработная плата исполнителей темы

В настоящую статью включается основная заработная плата научных и инженерно-технических работников, рабочих макетных мастерских и опытных производств, непосредственно участвующих в выполнении работ по данной теме. Величина расходов по заработной плате определяется исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы окладов и тарифных ставок. В состав основной заработной платы включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20 – 30 % от тарифа или оклада.

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением НТИ, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработную плату:

$$Z_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп}, \quad (3.6)$$

где $Z_{осн}$ – основная заработная плата;

$Z_{доп}$ – дополнительная заработная плата (12-20 % от $Z_{осн}$).

Основная заработная плата ($Z_{осн}$) руководителя (лаборанта, инженера) от предприятия (при наличии руководителя от предприятия) рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_p, \quad (3.7)$$

где $Z_{\text{осн}}$ – основная заработная плата одного работника;

T_p – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн.;

$Z_{\text{дн}}$ – среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}}, \quad (3.8)$$

где $Z_{\text{м}}$ – месячный должностной оклад работника, руб. (в качестве месячного оклада дипломника выступает оклад инженера, который составляет 9489 руб. и 36800 руб. для доцента, доктора физико-математических наук);

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

- при отпуске в 48 раб.дней $M=10,4$ месяца, 6-дневная неделя;
- при отпуске в 24 раб.дня $M=11,2$ месяца, 5-дневная неделя;

$F_{\text{д}}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб.дн. (табл. 3.8);

k_p – районный коэффициент, равный 1,3 для Томска.

Таблица 3.8 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
-выходные дни	52	104
-праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени		
-отпуск	48	24
-невыходы по болезни	–	–
Действительный годовой фонд рабочего времени	251	223

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_{\text{м}} = Z_{\text{ок}} \cdot k_p, \quad (3.9)$$

$$Z_m = 36800 \cdot 1,3 = 47840 \text{ руб.},$$

где $Z_{тс}$ – заработная плата по окладу, руб. ($Z_{тс}$ составляет 36800 руб.);

k_p – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Расчёт основной заработной платы приведён в таблице 3.9.

Таблица 3.9 – Расчёт основной заработной платы

Исполнители	$Z_{тс}$, руб.	k_p	Z_m , руб.	$Z_{дн}$, руб.	T_p , раб. дн.	$Z_{осн}$, руб.
Руководитель	36800	1,3	47840	1524,78	13,1	19974,63
Магистрант	9489	1,3	12335	619,52	48,3	29922,82
Итого: 49897,45						

3.2.7 Отчисления во внебюджетные фонды

В данной статье расходов отражаются обязательные отчисления по установленным законодательством Российской Федерации нормам органам государственного социального страхования (ФСС), пенсионного фонда (ПФ) и медицинского страхования (ФФОМС) от затрат на оплату труда работников.

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$Z_{внеб} = k_{внеб} \cdot (Z_{осн} + Z_{доп}), \quad (3.10)$$

$$Z_{внеб} = 0,271 \cdot 19974,63 = 5413,12 \text{ руб.},$$

$$Z_{внеб} = 0,271 \cdot 29922,82 = 8109,08 \text{ руб.},$$

где $k_{внеб}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.).

3.2.8 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Рассчитанная величина затрат научно-исследовательской работы (темы) является основой для формирования бюджета затрат проекта, который при

формировании договора с заказчиком защищается научной организацией в качестве нижнего предела затрат на разработку научно-технической продукции.

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект по каждому варианту исполнения приведен в таблице 3.10.

Таблица 3.10 – Расчет бюджета затрат НИИ

Наименование статьи	Сумма, руб.
1. Материальные затраты НИИ	498,51
2. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	0
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	49897,45
4. Отчисления во внебюджетные фонды	13522,2
5. Затраты на научные и производственные командировки	0
6. Контрагентские расходы	0
7. Накладные расходы	0
8. Бюджет затрат НИИ	63917,75

3.3 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат трех (или более) вариантов исполнения научного исследования. Для этого наибольший интегральный показатель реализации технической задачи принимается за базу расчета (как знаменатель), с которым соотносятся финансовые значения по всем вариантам исполнения.

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное увеличение бюджета затрат разработки в размах (значение больше единицы), либо соответствующее численное удешевление стоимости разработки в размах (значение меньше единицы, но больше нуля).

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{ипс.}i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}}, \quad (3.11)$$

Так как разработка имеет одно исполнение, то

$$I_{\text{финр}}^{\text{ипс.}i} = \frac{65834,25}{107548,00} = 0,61$$

Для аналогов соответственно:

$$I_{\text{фина}1}^{a1} = \frac{\Phi_{a1}}{\Phi_{\text{max}}} = \frac{97358,00}{107548,00} = 0,9$$

$$I_{\text{фина}2}^{a2} = \frac{\Phi_{a1}}{\Phi_{\text{max}}} = \frac{107548,00}{107548,00} = 1.$$

где $I_{\text{финр}}^{\text{ипс.}i}$ – интегральный финансовый показатель разработки;

Φ_{pi} – стоимость i -го варианта исполнения;

Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно- исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить следующим образом:

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i, \quad (3.12)$$

где I_{pi} – интегральный показатель ресурсоэффективности для i -го варианта исполнения разработки;

a_i – весовой коэффициент i -го варианта исполнения разработки;

b_i^a, b_i^p – бальная оценка i -го варианта исполнения разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности рекомендуется проводить в форме таблицы (таблице 3.11).

Таблица 3.11 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Объект исследования Критерии	Весовой коэффициент параметра	Проект разработки	Исп.2	Исп.3
1. Производительность	0,3	5	4	4
2. Энергосбережение	0,4	5	3	3
3. Надежность	0,2	4	3	3
4. Материалоемкость	0,1	4	4	2
ИТОГО	1	4,7	3,4	2,4

$$I_{p-исп1} = 5 \cdot 0,3 + 5 \cdot 0,4 + 4 \cdot 0,2 + 4 \cdot 0,1 = 4,7 \quad (3.13)$$

$$I_{аналог 2} = 4 \cdot 0,3 + 3 \cdot 0,4 + 3 \cdot 0,2 + 4 \cdot 0,1 = 3,4$$

$$I_{аналог 3} = 4 \cdot 0,3 + 3 \cdot 0,4 + 3 \cdot 0,2 + 2 \cdot 0,1 = 2,4$$

Исходя из полученных результатов, можно сделать вывод, что научно-техническое исследование будет ресурсоэффективно при первом варианте исполнения проекта, т.е. при высокой производительности и энергоэффективности проекта.

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки ($I_{исп i}$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{финр}^p = \frac{I_m^p}{I_\phi^p}, \quad I_{финаi}^{ai} = \frac{I_m^{ai}}{I_\phi^{ai}}, \quad (3.14)$$

В результате:

$$I_{финр}^p = \frac{I_T^p}{I_{финр}^p} = \frac{4,7}{0,78} = 6,03,$$

$$I_{\text{фина1}}^{a1} = \frac{I_{\text{T}}^{a1}}{I_{\text{фина1}}^{\text{P}}} = \frac{3,4}{0,9} = 3,78,$$

$$I_{\text{фина2}}^{a2} = \frac{I_{\text{T}}^{a2}}{I_{\text{фина2}}^{\text{P}}} = \frac{2,4}{1} = 2,4.$$

Сравнение интегрального показателя эффективности текущего проекта и аналогов позволит определить сравнительную эффективность проекта.

Сравнительная эффективность проекта:

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{финр}}^{\text{P}}}{I_{\text{финаi}}^{ai}}, \quad (3.15)$$

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{финр}}^{\text{P}}}{I_{\text{фина1}}^{a1}} = \frac{6,03}{3,78} = 1,6,$$

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{финр}}^{\text{P}}}{I_{\text{фина2}}^{a2}} = \frac{6,03}{2,4} = 2,5.$$

Результат вычисления сравнительной эффективности проекта и сравнительная эффективность анализа представлены в таблице 3.12.

Таблица 3.12 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Проект разработки	Аналог 2	Аналог 3
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,78	0,9	1
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,7	3,4	2,4
3	Интегральный показатель эффективности	6,03	3,78	2,4

Таким образом, основываясь на определении ресурсосберегающей, финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности

исследования, проведя необходимый сравнительный анализ, можно сделать вывод о превосходстве выполненной разработки над аналогами.

4 Социальная ответственность

Одно из основных направлений профилактической работы по снижению производственного травматизма и профессиональной заболеваемости является повсеместное внедрение комплексной системы управления охраной труда. Одновременно должно осуществляться последовательное повышение качества и эффективности всех средств коллективной и индивидуальной защиты от вредных и опасных производственных факторов, увеличение объема их производства до полного удовлетворения потребностей народного хозяйства и рациональное их использование.

В основе Законодательства Российской Федерации об охране труда лежит Конституция Российской Федерации и Трудовой кодекс Российской Федерации.

Обязанности по обеспечению *безопасных условий и охраны труда* в организации возлагаются на **работодателя**. Согласно Федеральному закону от 17 июля 1999 г. №181-ФЗ "Об основах охраны труда в Российской Федерации" (с изменениями от 20 мая 2002 г., 10 января 2003 г., 9 мая, 26 декабря 2005 г.) поясним некоторые понятия [39].

Охрана труда – система сохранения жизни и здоровья работников в процессе трудовой деятельности, включающая в себя правовые, социально-экономические, организационно – технические, санитарно – гигиенические, лечебно – профилактические, реабилитационные и иные мероприятия.

Условия труда – совокупность факторов производственной среды и трудового процесса, оказывающих влияние на работоспособность и здоровье работника.

Вредный производственный фактор – производственный фактор, воздействие которого на работника может привести к его заболеванию.

Опасный производственный фактор – производственный фактор, воздействие которого на работника может привести к его травме.

Безопасные условия труда – условия труда, при которых воздействие на работающих вредных или опасных производственных факторов исключено либо уровни их воздействия не превышают установленные нормативы.

Рабочее место – место, в котором работник должен находиться или в которое ему необходимо прибыть в связи с его работой и которое прямо или косвенно находится под контролем работодателя.

Сложность поставленных задач требует использования достижений многих научных дисциплин, прямо или косвенно связанных с задачами создания безопасных условий труда. При разработке требований производственной санитарии используются результаты исследований ряда медицинских и биологических дисциплин.

Успех в решении проблем охраны труда в большой степени зависит от качества подготовки специалистов в этой области, от их умения принимать правильные решения в сложных и изменчивых условиях современного производства.

Правила по охране труда и техники безопасности являются обязательными для исполнения рабочими, служащими, инженерно-техническими работниками и руководящим составом.

4.1 Анализ опасных и вредных производственных факторов

Научно – исследовательская работа происходила на кафедре технической физики. Исследования велись на ПЭВМ.

Производственные условия на рабочем месте характеризуются наличием опасных и вредных факторов, которые классифицируются по группам элементов: физические, химические, биологические, психофизиологические.

В таблице 5.1 представлены основные виды работ, которые могут привести к воздействию опасных и вредных факторов.

Таблица 5.1 – Основные элементы производственного процесса, формирующие опасные и вредные факторы

Наименование видов работ и параметров производственного процесса	ФАКТОРЫ ГОСТ 12.0.003-74 ССБТ		Нормативные документы
	Вредные	Опасные	
Расчёт данных на ПЭВМ.	–	Электрический ток	ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность
	Воздействие радиации (ВЧ,УВЧ,СВЧ и т.д.)	–	СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Санитарно-эпидемиологические правила и нормативы. «Гигиенические требования к ПЭВМ и организация работы»
	–	Пожарная опасность	ГОСТ 12.1.004-91 Пожарная безопасность

На работника лаборатории могут воздействовать следующие факторы:

Физические:

- температура и влажность воздуха;
- температура оборудования;
- шум;
- статическое электричество;
- электромагнитное поле низкой чистоты;
- освещённость;

- наличие излучения.

Психофизиологические:

- физические перегрузка (статическая, динамическая);
- нервно-психические перегрузки (умственные перегрузки, перегрузки анализаторов, монотонность труда, эмоциональные перегрузки).

4.2 Обоснование и разработка мероприятий по снижению уровней опасного и вредного воздействия и устранению их влияния при работе на ПЭВМ

4.2.1 Организационные мероприятия

Весь персонал обязан знать и строго соблюдать правила техники безопасности. Обучение персонала технике безопасности и производственной санитарии состоит из вводного инструктажа и инструктажа на рабочем месте ответственным лицом.

Проверка знаний правил техники безопасности проводится квалификационной комиссией после обучения на рабочем месте. Проверяемому, присваивается соответствующая его знаниям и опыту работы квалификационная группа по технике безопасности и выдается специальная удостоверение.

4.2.2 Технические мероприятия

Рациональная планировка рабочего места предусматривает четкий порядок и постоянство размещения предметов, средств труда и документации. То, что требуется для выполнения работ чаще должно располагаться в зоне легкой досягаемости рабочего пространства, как показано на рисунке 5.1.

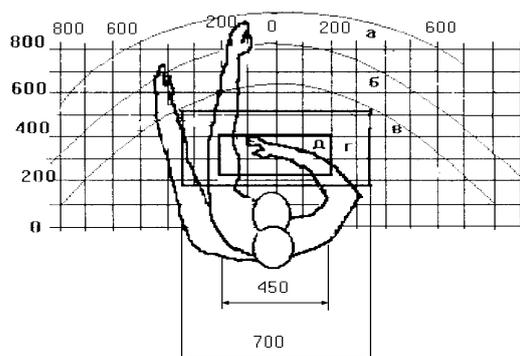


Рисунок 5.1. Зоны досягаемости рук в горизонтальной плоскости

- а – зона максимальной досягаемости рук;
- б – зона досягаемости пальцев при вытянутой руке;
- в – зона легкой досягаемости ладони;
- г – оптимальное пространство для грубой ручной работы;
- д – оптимальное пространство для тонкой ручной работы.

Оптимальное размещение предметов труда и документации в зонах досягаемости рук: дисплей размещается в зоне а (в центре); клавиатура – в зоне г/д; системный блок размещается в зоне б (слева); принтер находится в зоне а (справа); документация – в зоне легкой досягаемости ладони – в (слева) – литература и документация, необходимая при работе; в выдвижных ящиках стола – литература, не используемая постоянно.

При проектировании письменного стола должны быть учтены следующие требования. Высота рабочей поверхности стола рекомендуется в пределах 680-800 мм. Высота рабочей поверхности, на которую устанавливается клавиатура, должна быть 650 мм. Рабочий стол должен быть шириной не менее 700 мм и длиной не менее 1400 мм. Должно иметься пространство для ног высотой не менее 600 мм, шириной – не менее 500 мм, глубиной на уровне колен – не менее 450 мм и на уровне вытянутых ног – не менее 650 мм.

Рабочее кресло должно быть подъёмно-поворотным и регулируемым по высоте и углам наклона сиденья и спинки, а так же расстоянию спинки до переднего края сиденья. Рекомендуется высота сиденья над уровнем пола 420-550 мм. Конструкция рабочего кресла должна обеспечивать: ширину и глубину поверхности сиденья не менее 400 мм; поверхность сиденья с заглублённым передним краем.

Монитор должен быть расположен на уровне глаз оператора на расстоянии 500-600 мм. Согласно нормам угол наблюдения в горизонтальной плоскости должен быть не более 45 градусов к нормали экрана. Лучше если угол обзора будет составлять 30 градусов. Кроме того должна быть возможность выбирать уровень контрастности и яркости изображения на экране.

Должна предусматриваться возможность регулирования экрана:

- по высоте +3 см;
- по наклону от 10 до 20 градусов относительно вертикали;
- в левом и правом направлениях.

Клавиатуру следует располагать на поверхности стола на расстоянии 100-300 мм от края. Нормальным положением клавиатуры является её размещение на уровне локтя оператора с углом наклона к горизонтальной плоскости 15 градусов. Более удобно работать с клавишами, имеющими вогнутую поверхность, четырёхугольную форму с закруглёнными углами. Конструкция клавиши должна обеспечивать оператору ощущение щелчка. Цвет клавиш должен контрастировать с цветом панели.

При однообразной умственной работе, требующей значительного нервного напряжения и большого сосредоточения, рекомендуется выбирать неяркие, малоконтрастные цветочные оттенки, которые не рассеивают внимание (малонасыщенные оттенки холодного зеленого или голубого цветов). При работе, требующей интенсивной умственной или физической напряженности, рекомендуются оттенки тёплых тонов, которые возбуждают активность человека.

4.2.3 Условия безопасности работы

Основные параметры, характеризующие условия труда это: микроклимат, шум, вибрация, электромагнитное поле, излучение, освещённость.

Воздух рабочей зоны (микроклимат) производственных помещений определяют следующие параметры: температура, относительная влажность, скорость движения воздуха. Оптимальные и допустимые значения характеристик микроклимата устанавливаются в соответствии со [40] и приведены в таблице 5.2.

Таблица 5.2 – Оптимальные и допустимые параметры микроклимата.

Период года	Температура, °С	Относительная влажность, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный и переходный	23-25	40-60	0,1
Тёплый	23-25	40	0,1

К мероприятиям по оздоровлению воздушной среды в производственном помещении относятся: правильная организация вентиляции и кондиционирования воздуха, отопление помещений. Вентиляция может осуществляться естественным и механическим путём. В помещение должны подаваться следующие объёмы наружного воздуха: при объёме помещения до 20 м³ на человека – не менее 30 м³ в час на человека; при объёме помещения более 40 м³ на человека и отсутствии выделения вредных веществ допускается естественная вентиляция.

Система отопления должна обеспечивать достаточное, постоянное и равномерное нагревание воздуха. В помещениях с повышенными требованиями к чистоте воздуха должно использоваться водяное отопление. Параметры микроклимата в используемой лаборатории регулируются системой центрального отопления, и имеют следующие значения: влажность – 40 %, скорость движения воздуха – 0,1 м/с, температура летом – 20-25 °С, зимой – 13-15 °С. В лаборатории осуществляется естественная вентиляция. Воздух поступает и удаляется через щели, окна, двери. Основной недостаток такой вентиляции в том, что приточный воздух поступает в помещение без предварительной очистки и нагревания.

Шум и вибрация ухудшают условия труда, оказывают вредное воздействие на организм человека, а именно, на органы слуха и на весь организм через центральную нервную систему. В результате этого ослабляется внимание, ухудшается память, снижается реакция, увеличивается число ошибок при работе. Шум может создаваться работающим оборудованием, установками

кондиционирования воздуха, осветительными приборами дневного света, а также проникать извне.

Экран и системные блоки производят электромагнитное излучение. Основная его часть происходит от системного блока и видео-кабеля. Согласно [16] напряженность электромагнитного поля на расстоянии 50 см вокруг экрана по электрической составляющей должна быть не более:

- в диапазоне частот 5Гц-2кГц – 25В/м;
- в диапазоне частот 2кГц-400кГц – 2,5В/м.

Плотность магнитного потока должна быть не более:

- в диапазоне частот 5Гц-2кГц – 250нТл;
- в диапазоне частот 2кГц-400кГц – 25нТл.

Существуют следующие способы защиты от ЭМП:

- увеличение расстояния от источника (экран должен находиться на расстоянии не менее 50 см от пользователя);
- применение приэкранных фильтров, специальных экранов и других средств индивидуальной защиты.

При работе с компьютером источником ионизирующего излучения является дисплей. Под влиянием ионизирующего излучения в организме может происходить нарушение нормальной свертываемости крови, увеличение хрупкости кровеносных сосудов, снижение иммунитета и др. Доза облучения при расстоянии до дисплея 20 см составляет 50 мкбэр/час. По нормам [40] конструкция ЭВМ должна обеспечивать мощность экспозиционной дозы рентгеновского излучения в любой точке на расстоянии 0,05 м от экрана не более 100 мкР/час.

Утомляемость органов зрения может быть связана как с недостаточной освещенностью, так и с чрезмерной освещенностью, а также с неправильным направлением света.

4.3 Электробезопасность

Электробезопасность – это система организационных и технических мероприятий и средств, обеспечивающих защиту людей от вредного и опасного воздействия электрического тока, электрической дуги, электромагнитного поля и статического электричества.

В зависимости от условий в помещении опасность поражения человека электрическим током увеличивается или уменьшается. Не следует работать с ПЭВМ или другими электрическими приборами и установками в условиях повышенной влажности (относительная влажность воздуха длительно превышает 75 %), высокой температуры (более 35 °С), наличии токопроводящей пыли, токопроводящих полов и возможности одновременного прикосновения к имеющим соединение с землёй металлическим элементам и металлическим корпусом электрооборудования.

Существует опасность электропоражения в следующих случаях:

- при непосредственном прикосновении к токоведущим частям во время ремонта электрических приборов;
- при прикосновении к нетоковедущим частям, оказавшимся под напряжением (в случае нарушения изоляции);
- при прикосновении с полом, стенами, оказавшимися под напряжением;
- при коротком замыкании.

Мероприятия по обеспечению электробезопасности электроустановок:

- отключение напряжения с токоведущих частей, на которых или вблизи которых будет проводиться работа, и принятие мер по обеспечению невозможности подачи напряжения к месту работы;
- вывешивание плакатов, указывающих место работы;
- заземление корпусов всех установок через нулевой провод;
- покрытие металлических поверхностей инструментов надежной изоляцией;

- недоступность токоведущих частей аппаратуры (заключение в корпуса электропоражающих элементов, заключение в корпус токоведущих частей).

Электрозщитные средства – это переносимые и перевозимые изделия, служащие для защиты людей, работающих с электроустановками, от поражения электрическим током, от воздействия электрической дуги. Эти средства должны обеспечивать высокую степень защиты и удобство при эксплуатации. Их выбирают с учетом требований безопасности для данного вида работ. В первую очередь безопасность обеспечивается применением средств коллективной защиты, а затем, если она не может быть обеспечена, применяют средства индивидуальной защиты.

К средствам индивидуальной защиты от поражения электрическим током относятся [41]:

- оградительные устройства, которые могут быть стационарными и переносимыми. Ограждения могут быть заблокированы с устройствами, отключающими рабочее напряжение при снятии;
- изолирующие устройства и покрытия;
- устройства защитного заземления, зануления и защитного отключения;
- устройства дистанционного управления;
- предохранительные устройства и др.

4.4 Пожарная и взрывная безопасность

Согласно [42], в зависимости от характеристики используемых в производстве веществ и их количества, по пожарной и взрывной опасности помещения подразделяются на категории А, Б, В, Г, Д. Так как помещение лаборатории по степени пожаровзрывоопасности относится к категории В, т.е. к помещениям с твердыми сгорающими веществами, необходимо предусмотреть ряд профилактических мероприятий.

Возможные причины загорания:

- работа с открытой электроаппаратурой;
- короткие замыкания в блоке питания;
- несоблюдение правил пожарной безопасности;
- наличие горючих компонентов: документы, двери, столы, изоляция кабелей.

Мероприятия по пожарной профилактике разделяются на: организационные, технические, эксплуатационные и режимные.

Организационные мероприятия предусматривают правильную эксплуатацию оборудования, правильное содержание зданий и территорий, противопожарный инструктаж рабочих и служащих, обучение производственного персонала правилам противопожарной безопасности, издание инструкций, плакатов, наличие плана эвакуации.

К техническим мероприятиям относятся: соблюдение противопожарных правил, норм при проектировании зданий, при устройстве электропроводов и оборудования, отопления, вентиляции, освещения, правильное размещение оборудования.

К режимным мероприятиям относятся, установление правил организации работ, и соблюдение противопожарных мер. Для предупреждения возникновения пожара от коротких замыканий, перегрузок и т. д. необходимо соблюдение следующих правил пожарной безопасности:

- исключение образования горючей среды (герметизация оборудования, контроль воздушной среды, рабочая и аварийная вентиляция);
- правильная эксплуатация оборудования (правильное включение оборудования в сеть электрического питания, контроль нагрева оборудования);
- правильное содержание зданий и территорий (исключение образования источника воспламенения - предупреждение самовозгорания веществ, ограничение огневых работ);
- обучение производственного персонала правилам противопожарной безопасности;

- издание инструкций, плакатов, наличие плана эвакуации;
- соблюдение противопожарных правил, норм при проектировании зданий, при устройстве электропроводов и оборудования, отопления, вентиляции, освещения;
- правильное размещение оборудования;
- своевременный профилактический осмотр, ремонт и испытание оборудования.

При возникновении пожара сообщить руководителю, органам противопожарной безопасности предприятия и приступить к тушению пожара огнетушителем.

При возникновении аварийной ситуации необходимо:

1. Сообщить руководству (дежурному).
2. Позвонить в соответствующую аварийную службу или МЧС – тел. 112.
3. Принять меры по ликвидации аварии в соответствии с инструкцией.

Выводы

1. В результате проведенного литературного обзора установлено, что основными современными методами разделения изотопов водорода являются ректификация воды и химический изотопный обмен в системе вода-водород.
2. Отработана методика расчета основных параметров установки изотопного обмена.
3. На основе полученной методики провести расчет параметров установки для разделения изотопов водорода методом ХИО и ректификации. Установлено, что при разделении изотопов водорода методом ректификации величина пропускной способности или расхода значительно превышает соответствующую величину для колонны ХИО. Показано, что независимо от величины потоков или диаметра колонны, величина ВЭТС при ХИО в системе вода-водород в 25 раз больше ВЭТС для ректификации воды. Также были рассчитаны стоимости одного метра рабочей насадочной части колонн. Они составили 113076,98 рублей для колонны ХИО и 8820 рублей для ректификационной колонны.
4. Произведен расчет затрат НИР и рассмотрены вопросы социальной ответственности.

Заключение

Результаты проведенных исследований могут быть использованы при создании ректификационной и ХИО установках для разделения изотопов водорода с целью получения тяжелой воды с концентрацией 99,8%.

Список использованных источников:

1. И. Леенсон. Дейтерий и тяжелая вода. Электронная энциклопедия «Кругосвет» [электронный ресурс].
URL:http://www.krugosvet.ru/enc/nauka_i_tehnika/himiya/DETERI_I_TYAZHELAYA_VODA.html?page=0,1
2. Интернет-магазин Кемстор. Тяжелая вода [электронный ресурс]. URL:
<http://www.chemstore.spb.ru/catalog/deyterosoedineniya/voda-tyazhelyaya-d2.html>
3. Сайт НИИ КМ. Свойства водорода [электронный ресурс]. URL:
http://www.niikm.ru/articles/element_articles/hydrogen/
4. Информационно-поисковый портал. Водород [электронный ресурс]. URL:
<https://tgko.ru/spravka/gaz/vodorod/>
5. СУНЦ МГУ [электронный ресурс]. URL: <http://internat.msu.ru/wp-content/uploads/%D0%92%D0%BE%D0%B4%D0%BE%D1%80%D0>
6. Образовательный портал Учим.Гуру. Химическая водородная связь [электронный курс]. URL: <https://uchim.guru/himiya/vodorodnaya-svyaz-primery.html>
7. Справочник химика. [электронный курс]. URL:
<http://chem21.info/info/1581/>
8. Справочник. “Водород. Свойства, получение, хранение, транспортирование, применение”. Москва “Химия” - 1989 г
9. Информационно-поисковый портал. Водород [электронный ресурс]. URL:
<https://tgko.ru/spravka/gaz/vodorod/>
10. Сайт НИИ КМ. Свойства водорода [электронный ресурс]. URL:
http://www.niikm.ru/articles/element_articles/hydrogen/
11. Тяжелая вода. Польза и вред [электронный курс]. URL:
<http://vseowode.ru/vidy/tyazhyolaya.html>
12. А. И. Жерновой, Ю. В. Улашкевич, С. В. Дьяченко. Измерение магнитных моментов ферромагнитных наночастиц по положению линий ик-спектра

- магнитной жидкости в магнитном поле. [электронный ресурс]. URL: <http://iairas.ru/mag/2012/full1/Art12.pdf>
13. Белкин Д.Ю. Изотопная очистка теплоносителя промышленного тяжеловодного реактора ЛФ-2. Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук. РХТУ им. Д.Менделеева. Москва, 2016 г.
 14. Малков М.П. Выделение дейтерия из водорода методом глубокого охлаждения. М.: Гос. изд.-во лит. в обл. атомной науки и техн. – 1961 г.
 15. Большая энциклопедия нефти и газа. Выдержка из книги Флореа О.Н. Расчеты по процессам и аппаратам химической технологии [электронный ресурс]. URL: <http://www.ngpedia.ru/pg50158421OnvoZg0002598125>
 16. Изотопы: свойства, получение, применение: [монография : в 2 т.] / [Б. М. Андреев и др.] ; под ред. В. Ю. Баранова. - М. : Физматлит, 2005.
 17. Овчаров А.В. Расчет установок детритизации на основе изучения эффективности химического изотопного обмена водорода с водой. Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук. РХТУ им. Д.Менделеева. Москва, 2005 г.
 18. Пак Ю.С. Разработка процесса детритизации некондиционной тяжелой воды методом изотопного обмена в системе вода-водород. Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук. РХТУ им. Д.Менделеева. Москва, 2005 г.
 19. Stevens W.H. "Process and Catalyst for Enriching a Fluid with Hydrogen Isotopes". - Canadian Patent No. 907, 292, IC12CO1B5/02, August 15, 1972.
 20. Асновский В.Н., Воронин В.Н., Магомедбеков Э.П., Сахаровский Ю.А. Современное состояние и перспективы разделения изотопов водорода. // Сб. докл. XI Междунар. науч. конф. «Физико-химические процессы при селекции атомов и молекул и в лазерных, плазменных и нанотехнологиях». Звенигород. 11–16 декабря 2006 г. М.: ЦНИИАТОМИНФОРМ, ТРИНИТИ, Троицк. 2006. С. 240 – 242.

21. Sazonov A.V., Kagramanov Z.G., Magomedbekov E.P. Kinetic Method for Hydrogen-Deuterium-Tritium Mixture Distillation Simulation // Fusion Science and Technology. 2005. Vol. 48. No. 1. P. 167-170
22. Kinoshita M. Computer-Aided Simulation Procedure for Water Distillation Columns // Journal of Nuclear Science and Technology. 1984. V.21. № 4. P. 299-307.
23. Busigin A., Sood S.K. FLOSHEET – A Computer Program for Simulating Hydrogen Isotope Separation Systems // Fusion Technology. 1988. V. 14. P. 529-535
24. Ahn D.H., Kim K.R., Chung H.S., Kim Y.E., Jeong I.J., Hong S.Y., Ko J.W. Computer Program Development for D2O Upgrader Performance Management // Journal of the Korean Nuclear Society. 1990. V. 22. №. 1. P. 1-11.
25. Kalyanam K. M., Sood S.K., Fusca F., Busigin A. Heavy Water Upgrader Dynamic Simulation // Proceedings of the Annual Conference – Canadian Nuclear Society. – Canadian Nuclear Association. 1997. V. 18. №. 2. P. 15:30.
26. Gani R., Ruiz C.A., Cameron I.T. A Generalized Model for Distillation Columns – I. Model Description and Applications // Computers and Chemical Engineering. 1986. V. 10. № 3. P. 181-198.
27. Cameron I.T., Ruiz C.A., Gani R. A Generalized Model for Distillation Columns – II. Numerical and Computational Aspects // Computers and Chemical Engineering. 1986. V. 10. № 3. P. 199-211
28. Sarigiannis D.A. On order reduction in hydrogen isotope distillation models // Fusion Engineering and Design. 1995. V. 28. P. 406-412.
29. Draghia M.M., Pasca G., Porcariu F. Software Development for the Simulation and Design of the Cryogenic Distillation Cascade Used for Hydrogen Isotope Separation // Fusion Engineering and Design. 2016. [электронный ресурс]. URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.fusengdes.2016.01.044>
30. Bhattacharyya R., Bhanja K., Mohan S. Simulation Studies of the Characteristics of a Cryogenic Distillation Column for Hydrogen Isotope

- Separation // International Journal of Hydrogen Energy. 2016. электронный ресурс]. [URL:http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.01.106](http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.01.106)
- 31.Yamanishi T, Okuno K. Mass Transfer in Cryogenic Distillation Column Separating Hydrogen Isotopes // Journal of Nuclear Science and Technology. 1994. V. 31. № 6. P. 562-571.
- 32.Harris G.M. Kinetics of Isotopic Exchange Reactions. // Trans. Faraday. Soc., 1951,-Vol.47, pp.716-721
- 33.Рогинский С.З. Теоретические основы изотопных методов изучения химических реакций. М.: Изд. АН СССР, 1956.-612 с.
- 34.Меландер Д., Сондерс У. Скорости реакций изотопных молекул. М.: Мир, 1983. -344 с.
- 35.Интернет-магазин Riogen. Продажа катализаторов для химии [электронный ресурс]. URL: <https://shop.riogeninc.com>
- 36.Интернет-магазин Селиваненко.ру. Продажа спирально-призматических насадок [электронный ресурс]. URL: <https://selivanenko.ru/>
- 37.Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение: учебно-методическое пособие / И.Г. Видяев, Г.Н. Серикова, Н.А. Гаврикова, Н.В. Шаповалова, Л.Р. Тухватулина З.В. Криницына; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014. – 36 с.
- 38.Федеральный закон от 24.07.2009 №212-ФЗ «О страховых взносах в Пенсионный фонд Российской Федерации, Фонд социального страхования Российской Федерации, Федеральный фонд обязательного медицинского страхования»
- 39.Федеральный закон «Об основах охраны труда» от 17.07.1999 г. № 181ФЗ. 16.
40. Нормы радиационной безопасности (НРБ-99/2009). СП 2.6.1.2523-09. 17.
- 41.СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Санитарно-эпидемиологические правила и нормативы «Гигиенические требования к ПЭВМ и организации работы». 18. ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность.. 19.

42. Пожаро- и взрывобезопасность промышленных объектов. ГОСТ
Р12.1.004-85 ССБТ Пожарная безопасность

Приложения

Приложение А

Analysis of the operation parameters of the installation for the separation of hydrogen isotopes

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0AM6A	Верхорубов Д.Л.		

Руководитель ВКР Отделения ядерно-топливного цикла ИЯТШ

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Видяев Д.Г.	д.т.н.		

Консультант-лингвист Отделения иностранных языков ШБИП

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Смирнова У.А.			

THE REACTION OF ISOTOPE EXCHANGE IN THE INTRADIFFUSION AREA BY THE MODEL OF INSTANT REACTION IN DEPTH OF CATALYST PORE

The domestic hydrophobic catalyst of the process of chemical isotope exchange in the water-hydrogen system RHTU-ZSM is made by applying platinum on the developed surface of a styrene copolymer with divinylbenzene (SDVB). The catalyst carrier is spherical grains that are 0.8-1.0 mm in diameter. The specific surface area of the catalyst determined by the BET method is 120-150 (m² / g), or about 100 000 000 (m² / m³) in a catalyst solid bed, with an overall specific surface area of the granules in a catalyst solid bed estimated ~ 4.000 (m² / m³), therefore nearly all the platinum deposited on the surface is inside the pores of the catalyst. The bulk of the pores has a diameter of 30-50 nm. If the pore diameter is much smaller than the free-path length of the gas molecule, the diffusion in the pores will be predominantly Knudsen. The following relationship is approximately valid for the free-path length of gas molecules:

$$\lambda = 10^{-7} P, \quad (1)$$

where λ is the free-path length (m), P is the pressure (atm).

With the help of equation (1), it can be estimated that, Knudsen diffusion predominates for the pores less than 100 nm in diameter at atmospheric pressure. Further analysis is made for this case.

The coefficient of Knudsen diffusion depends on the temperature and molecular weight of the molecule and is independent of the pressure and the concentration of other components in the mixture:

$$D_{iK} \sim \sqrt{\frac{T}{M}}, \quad (2)$$

where D_{iK} is the coefficient of Knudsen diffusion (m²/s),

T is the temperature (K),

M is the relative molecular mass.

Studies of the catalytic isotopic exchange process carried out in a number of works have shown that the process proceeds in the intradiffusion area, and the mass transfer from the vapor-gas mixture stream to the catalyst surface does not significantly

affect the observed reaction rate, in other words, the external diffusion resistance is negligible.

The simplest model of the process of catalytic isotope exchange takes into account the diffusion and reaction in the pores of the catalyst and can be developed on the assumption that the reaction proceeds extremely rapidly on the surface of platinum in a compact zone located in the depth of the cylindrical pore. Let us consider the model shown in Fig. 1. If the external diffusion resistance is negligible, then $C_{i,l}$ (concentration at the mouth of the pore) is equal to the concentration in the core of the vapor-gas mixture. In order to simplify the examination as much as possible, let us assume that the isotopic exchange reactions proceed until the equilibrium on the surface at the far end of the pore (indicated by the thick line) and only there is established. Also, let us assume that all pores have a cylindrical shape, the same length, and the surface of the catalyst pellets is flat. Since the reaction is conditionally considered instantaneous, all resistance to the mass transfer is due to the process of diffusion of the reagents into the pore and the reaction products from the pores.

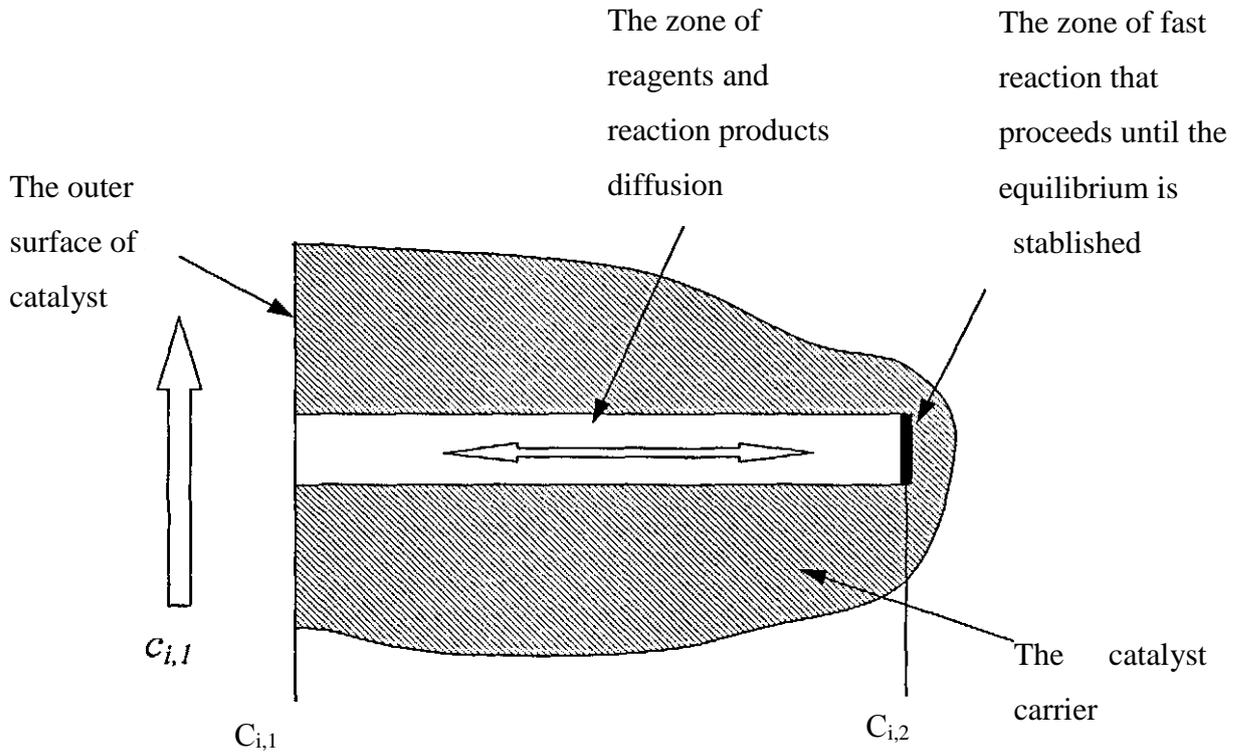


Fig. 1. Schematic model of the sequence of reaction and diffusion in the pores of the catalyst

Since the pore is closed on the one side, it follows from the material balance of the components that $\sum^N N_i = 0$, i.e., the sum of the diffusion fluxes relative to the fixed coordinate system is equal to zero. Consequently, the following diffusion equations can be written:

$$N_i = -C_{tot} D_{iK} \left(\frac{c_{i,2} - c_{i,1}}{l} \right), \quad (3)$$

where

N_i is the diffusion flux of molecules of the i -th isotopic variety (components of the mixture) (mole/m²s)

C_{tot} is the total molar concentration in the core of the vapor-gas flow (in free volume) (mole/m³)

D_{iK} is the Knudsen diffusion coefficient of the i -th component in a multicomponent mixture (m/s)

l is the conditional length of the pore (m)

$C_{i,2} - C_{i,1}$ is the difference of the mole fractions of the i component at the far end of the pore and in the space between the grains.

The change in the concentrations of the components ($H_2O, HDO, D_2O, H_2, HD, D_2, HTO, DTO, HT, DT$) in the reactor volume is described by the following system of 10 differential equations:

$$\frac{dC_i}{dt} = -\theta \cdot N_i = \frac{\theta}{l} C_{tot} D_i (c_{i,2} - c_{i,1}), \quad (4)$$

where

C_i is the molar concentration of the i component in the unit of the total reactor volume ($mole/m^3$)

c_i is the mole fraction of the i component

θ is the total area of the pores input sections in the reactor volume unit (m^2 / m^3)

The quantity C_i in (4) can be expressed as:

$$C_i = \varepsilon \cdot C_{tot} c_i, \quad (5)$$

where ε is the fraction of free volume in the reactor

By substituting (5) into (4), we obtain:

$$\varepsilon \cdot C_{tot} \frac{dc_i}{dt} = \frac{\theta}{l} C_{tot} D_i (c_{i,2} - c_{i,1}), \quad (6)$$

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{\theta D_i}{l \varepsilon} (c_{i,2} - c_{i,1}) = \gamma (c_{i,2} - c_{i,1}), \quad (7)$$

Since tritium is present in the system at the level of microconcentrations, its distribution between different molecular forms of hydrogen and water has no effect on the isotope equilibrium of protium-deuterium. Therefore, it is convenient to divide the consideration of the equilibrium for determining the quantities $c_{i,2}$ into two systems of equations. The equilibrium concentrations of the first six isotopic forms are determined from the first system, and the distribution of tritium, i.e. concentrations of HTO, DTO, HT and DT are determined on the basis of the previously found concentrations of $H_2O, HDO, D_2O, H_2, HD, D_2$. Taking into account the balances for the diffusion fluxes of substances and isotopes, their concentrations are described by the following system of equations:

$$\begin{aligned}
\frac{c_{HDO}c_{H_2}}{c_{H_2O}c_{HD}} &= K_{11} & N_{H_2O} + N_{HDO} + N_{D_2O} &= 0, \\
\frac{c_{D_2O}c_{H_2}}{c_{HDO}c_{HD}} &= K_{21} & N_{H_2} + N_{HD} + N_{D_2} &= 0, \\
\frac{c_{HDO}c_{HD}}{c_{H_2O}c_{D_2}} &= K_{12} & N_{HDO} + 2N_{D_2O} + N_{HD} + 2N_{D_2} &= 0,
\end{aligned} \tag{8}$$

There may be different forms of recording this system, but three equations always describe isotopic equilibrium and three more equations represent the conditions of material balance. Unfortunately, this system can not be solved analytically, but a numerical solution is possible. On the other hand, the equilibrium between various tritium-containing molecules can be described as follows:

$$\begin{aligned}
\frac{c_{HTO}}{c_{HT}} &= K_{11,T} \frac{c_{H_2O}}{c_{H_2}}, \\
\frac{c_{HTO}}{c_{DTO}} &= \sqrt{\frac{K_{HTO}c_{H_2O}}{K_{DTO}c_{D_2O}}}, \\
\frac{c_{HT}}{c_{DT}} &= \sqrt{\frac{K_{HT}c_{H_2}}{K_{DT}c_{D_2}}},
\end{aligned} \tag{9}$$

$$N_{HTO} + N_{DTO} + N_{HT} + N_{DT} = 0,$$

where $K_{11,T}$ is the equilibrium constant of the reaction $H_2O + HT = HTO + H_2$, K_{HTO} , K_{DTO} , K_{HT} , K_{DT} are the equilibrium constants of the corresponding GMIO reactions.

In the system (9), the quantities of concentrations of the molecules not containing tritium are considered to be constants defined from the system (8). As it was mentioned earlier in Chapter 1, the quantities of the equilibrium constants for any isotope exchange reaction of hydrogen and water flowing in the gas phase can be calculated on the basis of spectral data.

The system (9) can be solved analytically:

$$\begin{aligned}
U &= K_{11,T} \frac{c_{H_2O}}{c_{H_2}}, \\
J &= \sqrt{\frac{K_{HTO}c_{H_2O}}{K_{DTO}c_{D_2O}}},
\end{aligned}$$

$$E = \sqrt{\frac{K_{HT}c_{H_2}}{K_{DT}c_{D_2}}},$$

$$c_{HTO} = \frac{UJE \sum_{i=1}^{10} D_i c_i}{JE \cdot D_{HT} + J \cdot D_{DT} + UJE \cdot D_{HTO} + UE \cdot D_{DTO}}, \quad (10)$$

Thus, solving the systems (8) and (9), it is possible to define the equilibrium concentrations at the far end of the pore $c_{i,2}$ and, consequently, numerically integrate the system of differential equations (7). However, it is difficult to apply the equations (7) directly for the calculation of the CIE process in columns, because on the one hand, it is difficult and time-consuming to solve the system numerically (7), and on the other hand, isotopic, and not molecular concentrations are important in the calculation of the columns, while system (7) implies the calculation of the concentration profiles of molecular forms, rather than the atomic fractions of D and T. Let us simplify and transform the system (7).

The atomic fractions in the pair (z) and hydrogen (y) are defined in terms of the mole fractions c_i as follows:

$$z = c_{D_2O} + \frac{1}{2}c_{HDO},$$

$$y = c_{D_2} + \frac{1}{2}c_{HD}, \quad (11)$$

Using (7), we write:

$$\frac{dz}{dt} = \frac{dc_{D_2O}}{dt} + \frac{1}{2} \frac{dc_{HDO}}{dt},$$

$$\frac{dy}{dt} = \frac{dc_{D_2}}{dt} + \frac{1}{2} \frac{dc_{HD}}{dt}, \quad (12)$$

If we assume that $D_{HDO} \sim D_{D_2O} \equiv D_W$ and is similar to $D_{HD} \sim D_{D_2} \equiv D_H$, and also take into account that

$$dy = Hdz = \frac{n_A}{n_B} dz = \frac{Z}{G} dz, \quad (13)$$

where H is the molar ratio of water vapor to hydrogen,

Z and G are the molar fluxes of water and hydrogen vapor, accordingly.

then it follows from (11) and (12):

$$\frac{dz}{dt} = \frac{\theta D_w}{l\varepsilon} (z_2 - z),$$

$$\frac{dy}{dt} = \frac{\theta D_H}{l\varepsilon} (y_2 - y), \quad (14)$$

where z_2 and y_2 are the atomic fractions of deuterium in water vapor and hydrogen at the end of the pore where the reaction takes place,

z and y are the atomic fractions of deuterium in water vapor and hydrogen in the vapor-gas mixture flux.

By dividing one equation in (14) by another, we obtain:

$$\frac{1}{H} \cdot \frac{D_H}{D_w} = \frac{(z_2 - z)}{(y_2 - y)}, \quad (15)$$

where M_W and M_H are the average molecular masses of the water vapor and hydrogen molecules, accordingly.

The inclusion of the conditional quantities $D_{HDO} \sim D_{D_2O} \equiv D_W$, $D_{HD} \sim D_{D_2} \equiv D_H$, and also M_W and M_H into the equations (14) and (15) is connected with the need to move away from the concentrations of the molecular species of water and hydrogen that have heavy atoms in the molecule isotope, to atomic concentrations of a heavy isotope. The differences in the molecular masses for isotopic varieties of water molecules, and, consequently, for the coefficients of Knudsen diffusion are insignificant. These differences are much bigger for hydrogen molecules. The greatest difference exists for the pair HD-D₂ - $D_{HD} / D_{DD} = 1.15$ for the erythium-deuterium system. In the case with the protium-deuterium-tritium system, taking into account the equilibrium between the different molecular forms of hydrogen, the greatest difference will be for the pair HT-DT-D_{HT} / $D_{DT} = 1.12$.

In the framework of the model under consideration, z_2 and y_2 are related by the equilibrium condition:

$$\frac{z_2(1-y_2)}{y_2(1-z_2)} = \alpha_D (z_2), \quad (16)$$

where $\alpha_D (z_2)$ is the partition coefficient in the H-I system, which depends on the z_2 quantity in accordance with the known concentration dependence.

Thus, from the known quantities of z and y , i.e. from the quantities of atomic fractions in the core of the flow, it is possible to find z_2 and y_2 from the system (15) and, consequently, to integrate the system (14).

If the expression for the concentration dependence of α_D is substituted in the right-hand side of (16), then in practice the system can not be solved analytically, since it is reduced to a 4-degree polynomial which analytic solution is extremely cumbersome. On the other hand, if the average partition coefficient is substituted to the right-hand side of (16) with a given concentration of the heavy isotope, the system leads to a 2-degree polynomial which coefficients are given below:

$$(-\Lambda + \alpha_D \Lambda)y_2^2 + (\Lambda + z + \Lambda y + \alpha_D - \alpha_D z - \alpha_D \Lambda y)y_2 - z - \Lambda y = 0,$$

$$\Lambda = \frac{1}{H} \sqrt{\frac{M_w}{M_H}}, \quad (17)$$

More accurate (in comparison with (17)) quantities of z_2 and y_2 can be obtained if α_D is calculated by the rule of additivity:

$$\alpha_D = (\alpha_{DH} - \alpha_{HD})z_2 + \alpha_{HD}, \quad (18)$$

which leads to the need to solve the third-degree polynomial.

In the equations (14), the quantity t represents the actual contact time. Let us now turn to the conditional (calculated for the total cross section of the reactor) contact time. We multiply the first equation of the system (14) by the C_{tot} - the total concentration of the vapor-gas mixture (mole/m³):

$$C_{tot} \frac{dz}{dt} = \frac{\theta}{l\varepsilon} C_{tot} D_w (z_2 - z),$$

and then substitute (4.1.11) in (4.2.19):

$$C_{tot} \frac{Q}{S} \cdot \frac{dz}{dt} = V \frac{dz}{dh} = (Z + G) \frac{dz}{dh} = \frac{\theta}{l} C_{tot} D_w (z_2 - z), \quad (19)$$

where V is the specific mole flow of the vapor-gas mixture (mole/m²s).

The quantity $-\theta l \cdot C_{\text{о6и}} D_w$ is the rate constant of the CIE process and has the dimension (mole/m·s), i.e. the dimension of the volume mass transfer coefficient. Further, this quantity is denoted as K_z^{KIO} and is called the conditionally volumetric mass transfer coefficient in the CIE process. Let us now find the connection between the parameters of the model under consideration and the quantity of the experimental rate constant k_{ex} . If z and $y \ll 1$, the following relations can be written (line 2 is taken from the equation (15)):

$$\begin{aligned}\frac{z_2}{y_2} &= \frac{z_\infty}{y_\infty} = \alpha \\ \frac{(z_2 - z)}{(y - y_2)} &= \frac{1}{H} \sqrt{\frac{M_w}{M_H}}, \\ \frac{(z_\infty - z)}{(y - y_\infty)} &= \frac{1}{H},\end{aligned}\tag{21}$$

Solving these equations, we can express $z_2 = f(z_\infty, z)$ and $y_2 = f(y_\infty, y)$ and substitute these expressions in (14):

$$\begin{aligned}\frac{dz}{dt} &= \frac{\theta D_w}{l\varepsilon} \left(\frac{\sqrt{M_w}(\alpha H + 1)}{\alpha H \sqrt{M_H} + \sqrt{M_w}} \right) (z_\infty - z), \\ \frac{dy}{dt} &= \frac{\theta D_H}{l\varepsilon} \left(\frac{\sqrt{M_H}(\alpha H + 1)}{\alpha H \sqrt{M_H} + \sqrt{M_w}} \right) (y_\infty - y),\end{aligned}\tag{22}$$

In (22) we replace the actual contact time by conditional $dt = \varepsilon d\tau$:

$$\begin{aligned}\frac{dz}{d\tau} &= \frac{\theta D_w}{l} \left(\frac{\sqrt{M_w}(\alpha H + 1)}{\alpha H \sqrt{M_H} + \sqrt{M_w}} \right) (z_\infty - z), \\ \frac{dy}{d\tau} &= \frac{\theta D_H}{l} \left(\frac{\sqrt{M_H}(\alpha H + 1)}{\alpha H \sqrt{M_H} + \sqrt{M_w}} \right) (y_\infty - y),\end{aligned}\tag{23}$$

By integrating these equations, it can be obtained that the rate constant defined in the direct-flow reactor is:

$$k_{ex} = \frac{\theta D_w}{l\varepsilon} \left(\frac{\sqrt{M_w}(\alpha H + 1)}{\alpha H \sqrt{M_H} + \sqrt{M_w}} \right) = \frac{\theta D_H}{l\varepsilon} \left(\frac{\sqrt{M_H}(\alpha H + 1)}{\alpha H \sqrt{M_H} + \sqrt{M_w}} \right),\tag{24}$$

where k_{ex} is the experimental rate constant (c^{-1}).

Then, within the framework of this model, the volume mass transfer coefficient in the CIE process (see equation (20)) calculated from the concentrations in the vapor is related to the experimental rate constant k_{ex} as follows:

$$k_z^{CIE} = k_{ex} \cdot \frac{\alpha H \sqrt{\frac{M_H}{M_w}} + 1}{(\alpha H + 1)},\tag{25}$$

and for the concentrations in hydrogen:

$$k_y^{CIE} = k_{ex} \cdot \frac{\alpha H + \sqrt{\frac{M_H}{M_w}}}{(\alpha H + 1)},\tag{26}$$

The connection between these quantities is given by the expression:

$$\frac{k_z^{CIE}}{k_y^{CIE}} = \sqrt{\frac{M_H}{M_w}}, \quad (27)$$

The above calculations also can be made for tritium. The atomic fractions in the vapor (z_T) and hydrogen (y_T) are defined through the mole fractions c_i as follows:

$$\begin{aligned} z_T &= \frac{1}{2}c_{HTO} + \frac{1}{2}c_{DTO}, \\ y_T &= \frac{1}{2}c_{HT} + \frac{1}{2}c_{DT}, \end{aligned} \quad (28)$$

If we assume that $D_{HTO} \sim D_{DTO} \equiv D_w$, then:

$$\begin{aligned} \frac{dz_T}{dt} &= \frac{\theta D_w}{l\varepsilon} (z_{T,2} - z_T), \\ \frac{dy_T}{dt} &= \frac{\theta D_H}{l\varepsilon} (y_{T,2} - y_T), \end{aligned} \quad (29)$$

The quantities are connected by the equilibrium condition:

$$\frac{dz_T}{dy_T} = \alpha_T (z_2), \quad (30)$$

where $\alpha_T (z_2)$ is the HD-T separation coefficient which depends on the quantity of z_2 (deuterium concentration).

It should be noted that the quantity of the deuterium concentration at the time of calculating the concentration profiles for tritium is already known for each section of the column, because according to the developed calculation method, a complete calculation of the deuterium concentrations along the column height is made first, and then the tritium concentration profile is calculated. By the analogy with the system (21), we express $z_{2,T}$

$$\Lambda = \frac{1}{H} \sqrt{\frac{M_w}{M_H}}, \quad (31)$$

All other equations remain valid when α is replaced by α_T and when the molecular mass ratios are changed.

The above model of the CIE process is based on very serious assumptions. The model that considers the homogeneous reaction of isotope exchange is based on the notion of a reaction not complicated by diffusion, which does not correspond to the actual process on the catalyst.