

АНАЛИЗ КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ОДНОСТУПЕНЧАТОГО ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ ДИОКСИДА ТИТАНА*

Т.В. Ганджа¹, К.А. Исаков¹, А.В. Шаповалов^{1,2}

¹Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, г. Томск, Россия

²Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия

Рассматривается кинетическая модель одноступенчатого процесса, являющегося элементом многоступенчатого процесса получения диоксида титана. Изучаются влияние внешних воздействий и задача оптимизации параметров в качестве необходимого этапа для разработки кинетической модели сложной многоступенчатой реакции полного технологического процесса. Исследовано влияние температуры на кинетику процесса. Рассмотрены численные решения кинетических уравнений с учетом диффузии.

Ключевые слова: диоксид титана, кинетическая модель, оптимизация параметров, численные решения.

Введение

Моделирование кинетических процессов в системах различной природы с учетом внешних воздействий позволяет эффективно исследовать управляющие воздействия на динамические режимы в системе, играющие существенную роль не только в нахождении оптимальных условий экспериментальной реализации процессов, но и в разработке технологий, использующих кинетические процессы для получения целевого продукта. К таким продуктам относится, в частности, диоксид титана (TiO_2), уникальные физико-химические свойства которого позволяют широко применять его не только в экспериментальных исследованиях, но и в современной промышленности.

Химические способы получения диоксида титана в лабораторных условиях хорошо изучены и подробно описаны в литературе, например, [1, 2] (см. также обзоры [3, 4]).

Существующие промышленные методы производства диоксида титана из ильменитового (FeTiO_3) концентрата и тетрахлорида (TiCl_4) титана используют преимущественно хлоридную и сульфатную технологии [3–5].

Расширяющиеся потребности и ряд объективных факторов, таких как близость сырья, и уже существующие технологические процессы, которые могут быть использованы для производства целевого продукта, стимулируют разработку технологии получения диоксида титана на основе фторидной технологии [6, 7]. Отметим, что фторидная технология позволяет получить диоксид титана высокого качества и снижает экологическую нагрузку на окружающую среду по сравнению с сульфатной и хлоридной технологиями.

Поскольку реализация разрабатываемой технологии является относительно новой в промышленных масштабах, она требует новых аппаратно-программных решений, для разработки которых необходимо математическое моделирование процессов, происходящих в этих аппаратах.

В технологическом процессе реакции получения диоксида титана имеют сложный механизм и проходят через несколько элементарных стадий. В этом процессе при определенных условиях часть диоксида титана (TiO_2) фторируется не полностью, а с образованием некоторых элементов, которые при термическом разложении образуют оксидфторид титана (TiOF_2) [6]. Оксидфторид титана является прекурсором для получения TiO_2 . Для разложения TiOF_2 на TiF_4 и TiO_2 необходимы более высокие температуры (550850 °С) в ходе реакции



В данной работе рассматриваются модель кинетики описанного выше одноступенчатого процесса (1) в зависимости от внешних условий и задача оптимизации параметров в качестве необходимого этапа для разработки кинетической модели сложной многоступенчатой реакции полного технологического процесса. Влияния температуры и диффузии в рассматриваемой модели исследовалось численными методами.

* Работа частично поддержана грантом РФФИ и Томской области, проект № 19-41-700004.

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>