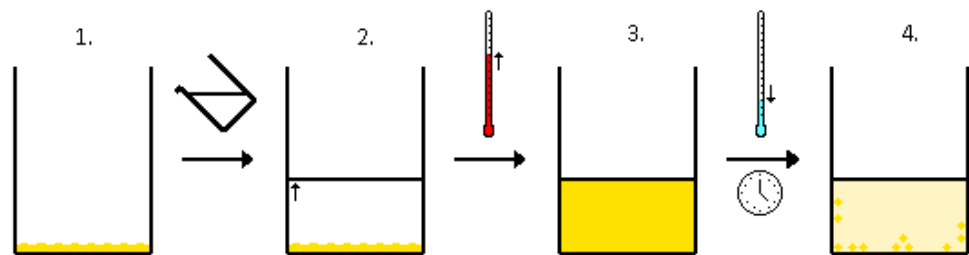


Создание программы для расчета перекристаллизации



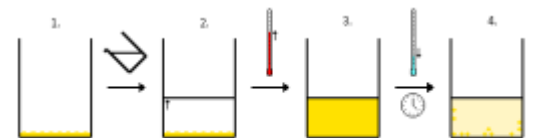
[https://en.wikipedia.org/wiki/Recrystallization_\(chemistry\)#/media/File:1_solvent_recrystallisation.png](https://en.wikipedia.org/wiki/Recrystallization_(chemistry)#/media/File:1_solvent_recrystallisation.png)

Выполнил: ученик 10 “Л”
Нечаев Е.Т.
Научный руководитель:
доцент СУНЦ МГУ
к.х.н Н.И. Морозова

Москва
2017

Задачи работы

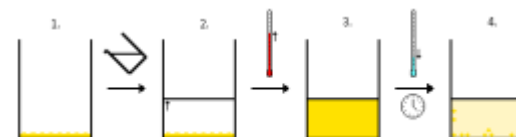
1. Разработать общие методы расчета параметров перекристаллизации
2. Разработать алгоритм, реализующий их
3. Написать программу



Ввод данных

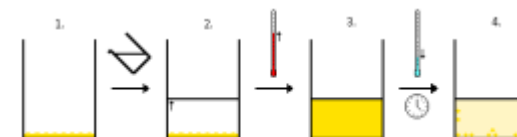
Функции:

1. `calc.for.subst (substance, w, A)` – расчет по данным из базы растворимостей
2. `calc (Solubility, A, w)` – выбор максимума и минимума растворимости из вектора (упорядоченного списка значений) растворимостей при разных температурах
3. `calculate.recrystallization (A, w, s1, s2)` – по растворимостям при двух различных температурах

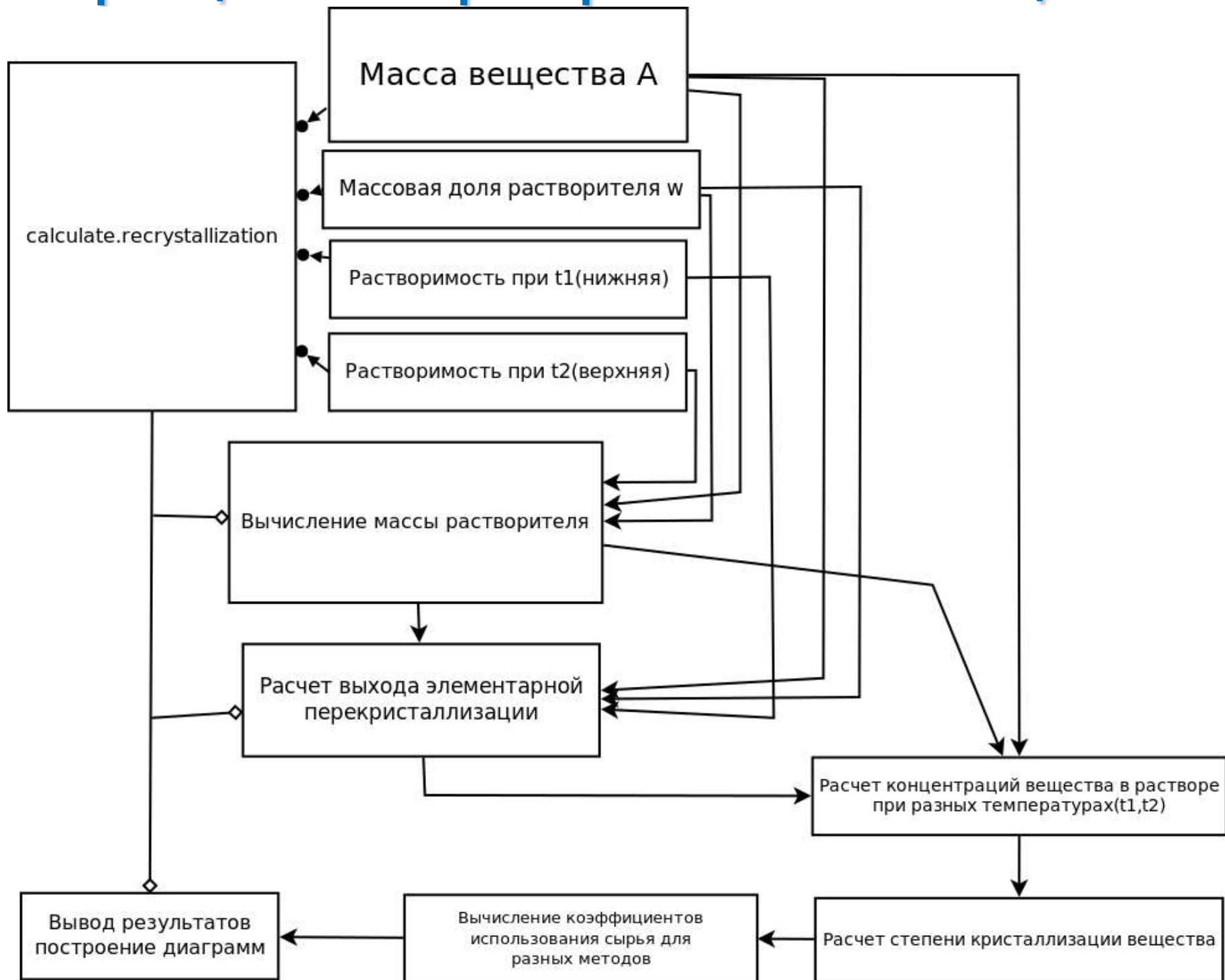


База растворимостей

Compound	X0.C	X10.C	X20.C	X25.C	X30.C	X40.C	X50.C	X60.C	X70.C
CoI2	1.360952e+02	161.64511679	1.666003e+02	2.029365e+02	2.175611e+02	2.466609e+02	2.766612e+02	304.69445569	3.327131e+02
Co(NO2)2	7.605780e-02	NA	NA	4.924128e-01	NA	NA	NA	NA	NA
Co(NO3)2	8.348624e+01	88.67924528	9.762846e+01	1.032520e+02	1.100840e+02	1.272727e+02	1.506266e+02	167.37967914	1.849003e+02
CoSO4	2.484395e+01	29.87012987	3.531800e+01	3.831259e+01	4.124294e+01	4.771049e+01	5.243902e+01	56.00624025	5.503876e+01
Co(SCN)2	NA	NA	NA	1.028398e+02	NA	NA	NA	NA	NA
CrO3	1.645503e+02	165.25198939	1.673797e+02	1.688172e+02	1.702703e+02	1.739726e+02	1.785515e+02	183.28611898	1.898551e+02
CsBr	NA	NA	NA	1.232143e+02	NA	NA	NA	NA	NA
CsBrO3	1.173614e+00	1.96798205	3.103413e+00	3.831378e+00	4.668202e+00	6.746371e+00	9.409190e+00	12.76499774	1.689071e+01
CsCl	1.619859e+02	173.82256298	1.853881e+02	1.910361e+02	1.966479e+02	2.076923e+02	2.184713e+02	229.05561040	2.394433e+02
CsClO3	2.459016e+00	4.02579840	6.315118e+00	7.781850e+00	9.517030e+00	1.383039e+01	1.951715e+01	26.80699975	3.596193e+01
CsClO4	7.962907e-01	1.02030508	1.533151e+00	1.999184e+00	2.637791e+00	4.471375e+00	7.009096e+00	10.24142873	1.416828e+01
CsI	4.471780e+01	59.23566879	7.605634e+01	8.484288e+01	9.455253e+01	1.141328e+02	1.341920e+02	154.45292621	1.747253e+02
CsIO3	1.091791e+00	1.60536476	2.259945e+00	2.658865e+00	3.114044e+00	4.123282e+00	5.329682e+00	6.71219720	8.342362e+00
CsNO3	9.241861e+00	14.94252874	2.285012e+01	2.787724e+01	3.351135e+01	4.705882e+01	6.393443e+01	84.16206262	1.079002e+02
CsOH	NA	NA	NA	NA	3.000000e+02	NA	NA	NA	NA
Cs2SO4	1.673797e+02	173.22404372	1.785515e+02	1.816901e+02	1.840909e+02	1.898551e+02	1.949853e+02	200.30030030	2.058104e+02
CuBr2	NA	NA	NA	1.262443e+02	NA	NA	NA	NA	NA
CuCl2	6.891892e+01	71.52658662	7.421603e+01	7.574692e+01	7.761989e+01	8.115942e+01	8.518519e+01	89.39393939	9.417476e+01
Cu(ClO4)2	1.188184e+02	NA	NA	NA	1.457002e+02	NA	NA	NA	NA
CuF2	NA	NA	NA	7.505629e-02	NA	NA	NA	NA	NA



Процесс перекристаллизации



Вывод данных

```
> calc.for.subst("KCl",1,40)
```

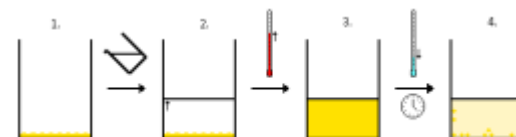
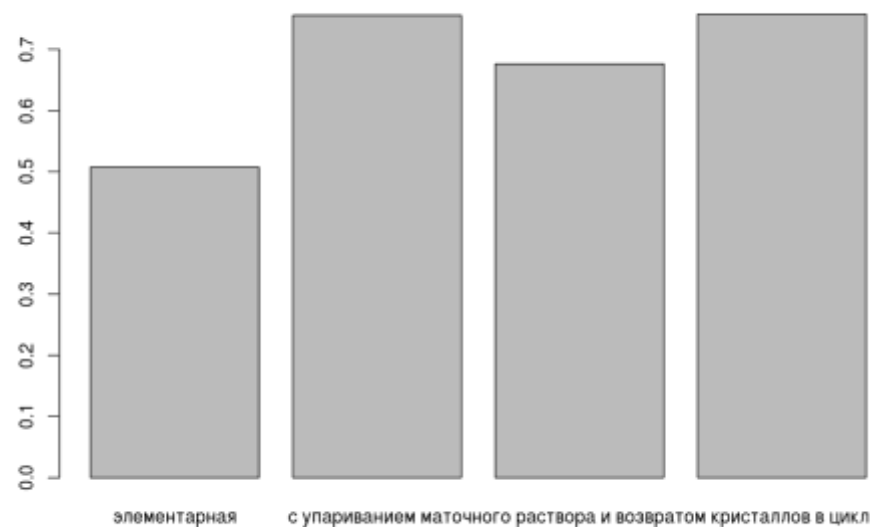
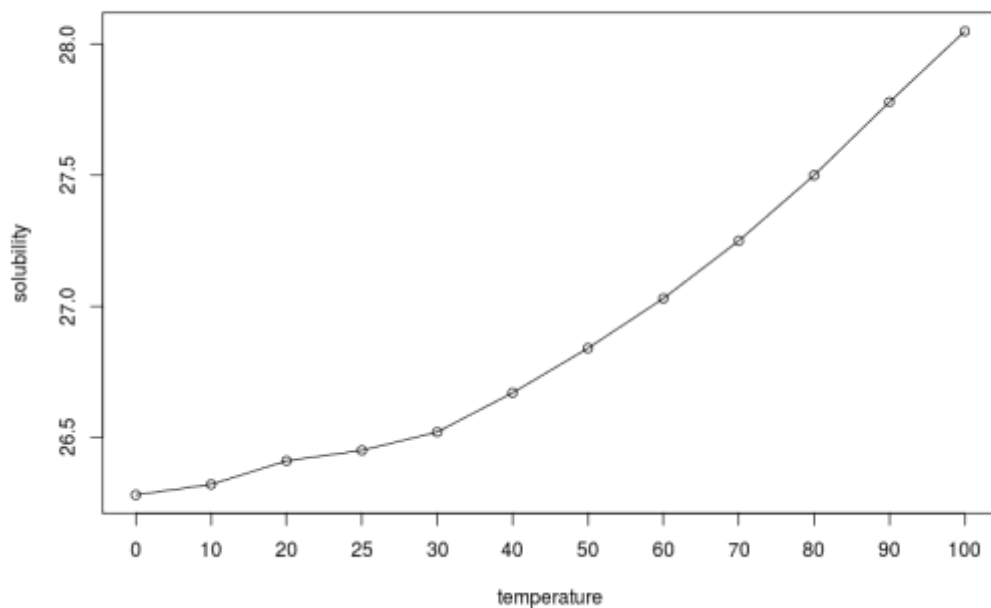
```
[1] с упариванием маточного раствора без возврата кристаллов в цикл
```

```
4 Levels: с полным возвратом маточного раствора ... элементарная
```

```
[1] "Необходимая масса воды для растворения: 70.957 г"
```

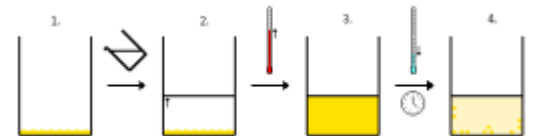
```
[1] "Выход: 20.29 г, 50.72%"
```

```
[1] "Границы температур: нижняя - 0°C, верхняя - 100°C"
```



Благодарности

Автор благодарит своего научного руководителя, Наталью Игоревну Морозову, и Александра Сергеевича Сигеева за помощь в написании и редакции работы, своих одноклассников Енни Хульт и Максима Красильникова за моральную поддержку.



Список литературы

Коренев Ю.М. Общая и неорганическая химия. Часть IV. Физико-химические свойства растворов. М.: Издательство Московского Государственного Университета, 2004. – С. 7-9.

Степин Б.Д., Горштейн И.Г. Методы получения особо чистых неорганических веществ. М.: Химия, 1969. – 479 с.

Ширяев А.К., Климочкин Ю.Н. Общие методы работы в лаборатории органической химии. Самара, 2004. – 30 с.

Матусевич Л.Н. Кристаллизация из раствора в химической промышленности. М.: Химия, 1968. – 304 с.

Горштейн Г.И. Математический анализ циклов кристаллизации солей. Труды всесоюзного научно-исследовательского института химических реактивов, вып. 20. М.: Госхимиздат, 1951. – С. 64-95.

Коренев Ю.М., Морозова Н.И., Жиров А.И. Практикум по неорганической химии. М.: Издательство Московского Государственного Университета, 1999. – С. 16-17.

R Data Import/Export. https://cran.r-project.org/doc/manuals/r-release/R-data.html#Spreadsheet_002dlike-data

An Introduction to R. Vector arithmetic. <https://cran.r-project.org/doc/manuals/r-release/R-intro.html#Vector-arithmetic>

An Introduction to R. Graphics. <https://cran.r-project.org/doc/manuals/r-release/R-intro.html#Graphics>

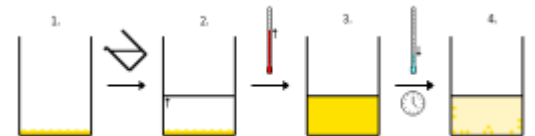
An Introduction to R. Low-level plotting commands. https://cran.r-project.org/doc/manuals/r-release/R-intro.html#Low_002dlevel-plotting-commands

Aqueous solubility of inorganic compounds at various temperatures.
http://sites.chem.colostate.edu/diverdi/all_courses/CRC%20reference%20data/solubility%20of%20inorganic%20compounds.pdf

Bar plots. <https://stat.ethz.ch/R-manual/R-devel/library/graphics/html/barplot.html>

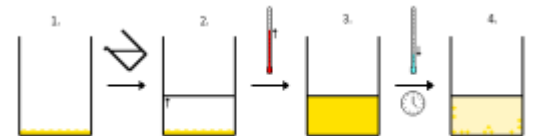
Масса растворителя

$$m = \frac{100\omega A - s_2 A (1 - \omega)}{s_2}$$



Выход перекристаллизации

$$B = \frac{100\omega A - s_1(1-\omega)A - s_1 m}{100\omega - s_1(1-\omega)}$$



Степень кристаллизации вещества и коэффициент использования

$$\alpha = \frac{100}{100 - c_2} \frac{c_1 - c_2}{c_1}$$

Способ перекристаллизации	Формула для расчета K
1. Элементарная перекристаллизация	$K = \alpha$
2. Перекристаллизация с полным возвратом маточного раствора	$K = \frac{(n+1)\alpha}{1+n\alpha}$
4. Однократная перекристаллизация с упариванием маточного раствора с возвратом кристаллов в цикл	$K = \frac{\alpha}{1 - \alpha(1 - \alpha)}$
5. Однократная перекристаллизация с упариванием маточного раствора без возврата кристаллов в цикл	$K = 2\alpha - \alpha^2$