

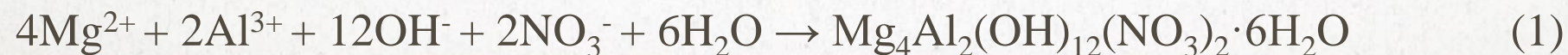
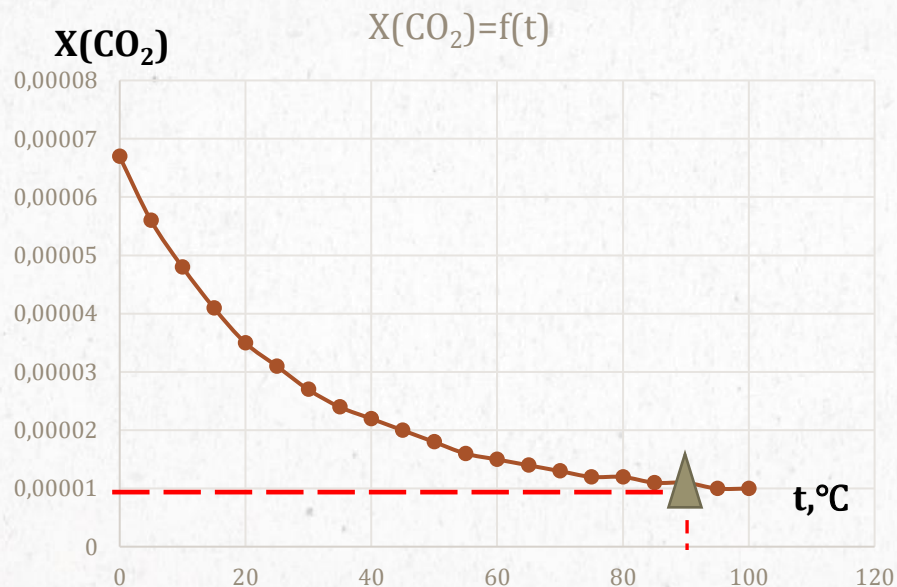
**ОПТИМИЗАЦИЯ УСЛОВИЙ ПОЛУЧЕНИЯ  
НИТРАТНОЙ ФОРМЫ КВИНТИНИТА:**



## ЗАДАЧИ

- Анализ описанных в литературе методов получения нитратной формы квинтинита;
  - Нахождение стандартных значений одного термодинамического потенциала и энтропии реакции образования нитратной формы квинтинита из простых веществ;
  - Определение точки в пространстве параметров состояния, в окрестности которой будем искать их оптимальные значения;
-

# ВЫБОР СХЕМЫ ПОЛУЧЕНИЯ



# ФОРМУЛЫ ЭЙЛЕРА-ФУРЬЕ

$$a_0 = \frac{1}{l} \int_0^{2l} f(x) dx$$

$$a_n = \frac{1}{l} \int_0^{2l} f(x) \cos \frac{\pi n x}{l} dx$$

$$b_n = \frac{1}{l} \int_0^{2l} f(x) \sin \frac{\pi n x}{l} dx$$

(2)

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left( a_n \cos \frac{\pi n x}{l} + b_n \sin \frac{\pi n x}{l} \right)$$

# ДИСКРЕТНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ

$$\int_0^{2l} f(x) dx = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n f(c_i) \Delta x_i \quad (3)$$

$$c_1 = v_2$$

$$\Delta x_1 = v_3 - v_1$$

$$c_2 = v_4$$

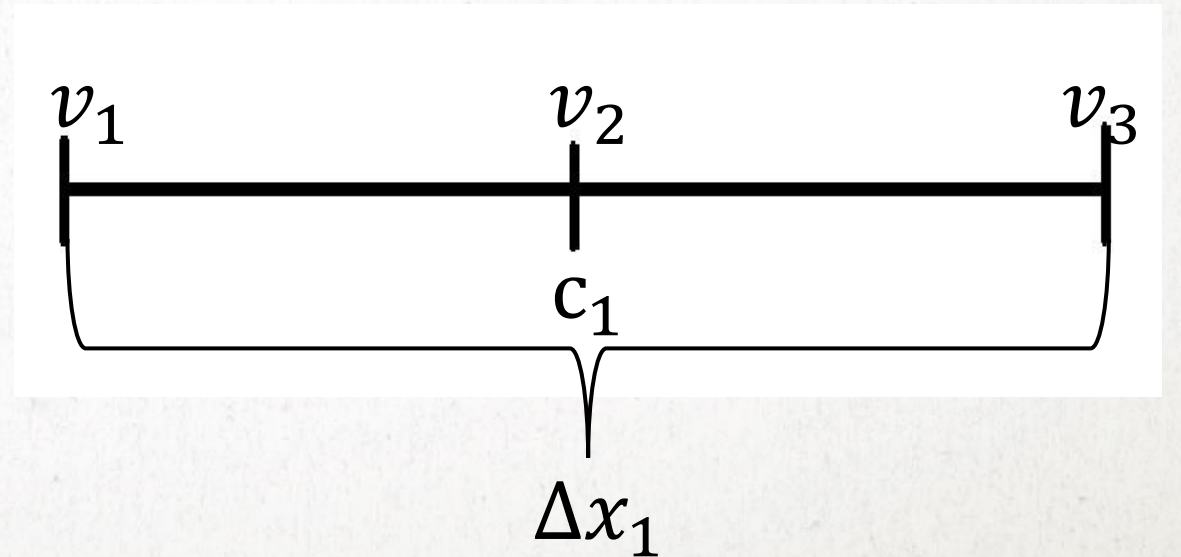
$$\Delta x_2 = v_5 - v_3$$

...

...

$$c_i = v_{2i}$$

$$\Delta x_i = v_{2i+1} - v_{2i-1}$$



$$l = v_{N=2i} - v_2$$

$$a_0 = \frac{1}{2l} \sum_{k=2}^{N=2i} I_k (v_{k+1} - v_{k-1})$$

$$a_X = \frac{1}{2l} \sum_{k=2}^{N=2i} I_k (v_{k+1} - v_{k-1}) \cos \frac{\pi X v_k}{l}$$

(4)

$$b_X = \frac{1}{2l} \sum_{k=2}^{N=2i} I_k (v_{k+1} - v_{k-1}) \sin \frac{\pi X v_k}{l}$$

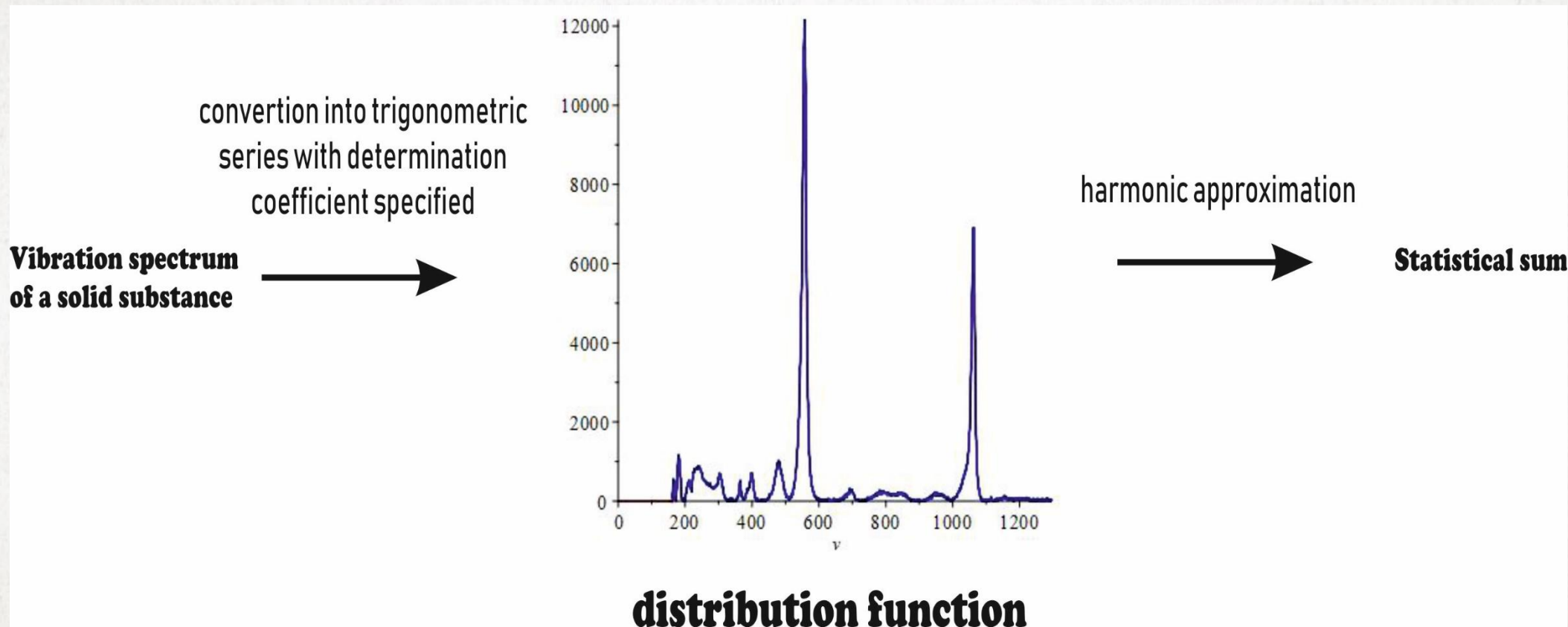
$$I(v) = \frac{a_0}{2} + \sum_{i=1}^X \left( a_X \cos \frac{\pi X v}{l} + b_X \sin \frac{\pi X v}{l} \right)$$

# КРИТЕРИЙ АДЕКВАТНОСТИ МОДЕЛИ

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{k=1}^N (I_k - I(v_k))^2}{\sum_{k=1}^N (I_k - \bar{I})^2} \quad (5)$$

```
> for X from s by 1 to (N2 + 1) - (N1 - 1) do
  G := evalf( fourierseries(P, v, N1, N2, X) );
  S1 := sum( ( ('P'[i, 2] - eval(G, v='P'[i, 1])) )^2 / (N2 - N1 + 1), i = N1 - 1 .. N2 + 1 );
  S2 := Variance(P)[2];
  R2 := 1 - S1 / S2;
  if R2 > 0.9 then break;
  end if;
end do: X, R2, G
```

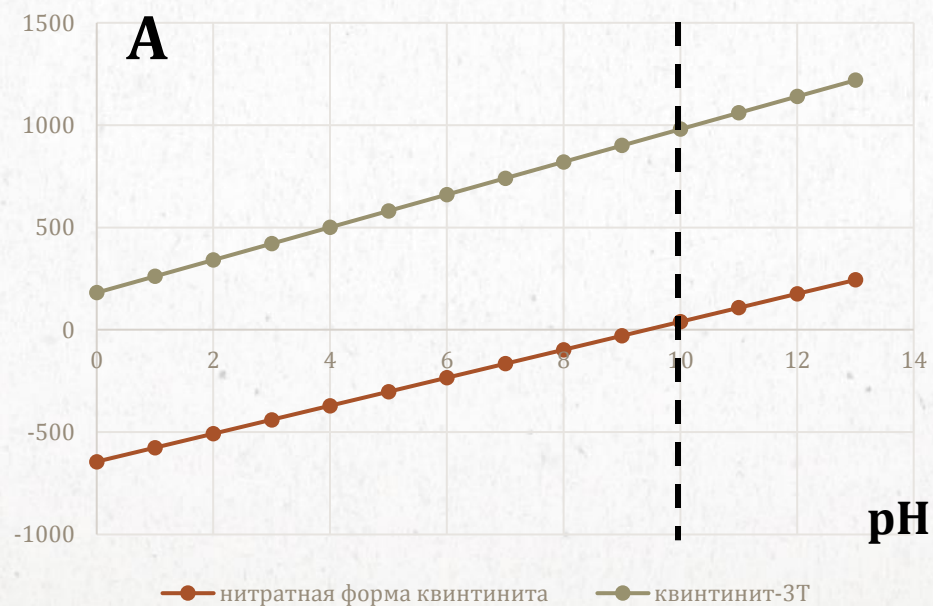
# СТАТИСТИЧЕСКИЙ РАСЧЁТ ФУНКЦИЙ СОСТОЯНИЯ ТВЁРДОГО ТЕЛА





вещество	$\Delta_f H^0_{298}$ , кДж/моль	$\Delta_f G^0_{298}$ , кДж/моль	$S^0_{298}$ , Дж/(моль·К)
$Mg_4Al_2(OH)_{12}(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$	-7836	-6752	72
$Mg_4Al_2(OH)_{12}CO_3 \cdot 3H_2O$	-8224	-7291	85
$AlO(OH)$	-891	-822	66

$$A = - \sum_i \left\{ \nu_i \left( \frac{T}{T_0} \mu_{i,T=T_0}^0 + \bar{H}_i \left( 1 - \frac{T}{T_0} \right) + RT \ln \frac{n_{0i} + \nu_i \xi}{\sum_i (n_{0i} + \nu_i \xi)} \right) \right\} \quad (6)$$



## РЕЗУЛЬТАТЫ

- Найдены приближённые значения функций состояния нитратной формы квинтинита и примесей, образующихся при его осаждении из раствора;
- Путём оптимизации химического сродства целевого процесса найден рН осаждения нитратной формы, показана невозможность её получения при наличии растворённого  $\text{CO}_2$ ;
- Найдены условия, позволяющие получать монофазный продукт в большом количестве: температура  $90^\circ\text{C}$  (создаётся до смешения компонентов и поддерживается до завершения процессов оляции-оксоляции), синтез выполняется в буферном растворе глицин- $\text{NaOH}$  с  $\text{pH}=10$