

Козуб П.А., Козуб С.М., Бердо Р.В.
 Харківський національний медичний університет

ВИКОРИСТАННЯ СТЕХІОМЕТРИЧНОЇ СУМІШІ ДЛЯ МАТЕМАТИЧНОГО ОПИСУ СКЛАДНИХ ХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ

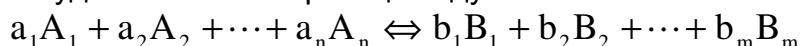
Практично всі методики, які використовуються для дослідження і опису хімічних процесів, оперують відносними одиницями виміру кількостей реагентів у вихідній суміші - концентраціями або відношенням кількостей реагентів. Однак при дослідженні складних взаємодій виникають проблеми взаємозалежності між концентраціями та/або суб'єктивності вибору "кращого" відношення.

Для вирішення цієї проблеми запропоновано використання в якості одиниці вимірювання стехіометричної суміші, яка має чіткий фізичний зміст та пов'язана з хімізмом реакції конкретного процесу.

При строго стехіометричному відношенні між реагентами у вихідній суміші (стехіометрична суміш) і протіканні реакції до кінця, кінцева реакційна суміш буде містити тільки продукти в кількості, що відповідає стехіометрії продукто-утворюючої реакції. При цьому додавання у вихідну суміш будь-яких додаткових компонентів не призведе до збільшення абсолютних кількостей речовин, що утворяться. Отже, вихідна реакційна суміш може бути логічно розділена на стехіометричну суміш і надстехіометричну суміш, що не бере участь в цільовій реакції, а відношення кількості будь-якого компонента надстехіометричної суміші до кількості стехіометричної суміші (стехіометричний надлишок) є безрозмірною величиною, що вказує на ступінь відхилення складу реальної суміші від теоретично необхідного складу. Відповідно, для стехіометричної суміші надлишки всіх компонентів дорівнюють нулю.

Оскільки будь-яка хімічна реакція є оборотною і може супроводжуватися утворенням побічних продуктів відношення реальної кількості продукту, що утворюється, до теоретично можливої його кількості дає величину стехіометричного виходу (α_s). На противагу виходу по якому-небудь реагенту, що вказує на ступінь його використання, стехіометричний вихід є загальним параметром для всього процесу і відображає ступінь повноти протікання цільової хімічної реакції.

Таким чином, для будь-якої хімічної реакції виду



при відомих початкових кількостях вихідних реагентів (C_j^0), кількість одиниці стехіометричної суміші (C_s), стехіометричні надлишки (E_j) і ступені конверсії по відповідним реагентам (α_j) знаходяться в простих співвідношеннях, що значно спрощує перехід між традиційними та запропонованими величинами

$$C_s = \min\left(\frac{C_1^0}{a_1}, \frac{C_2^0}{a_2}, \dots, \frac{C_n^0}{a_n}\right), E_j = \frac{C_j^0 - a_j \cdot C_s}{C_s}, C_j^0 = C_s \cdot (a_j + E_j), \alpha_j = \frac{\alpha_s}{1 + E_j/a_j}.$$

Значення стехіометричного виходу може бути розраховане теоретично за допомогою термодинамічної константи рівноваги (K_p , K_c), а порівняння величин α_s при різних стехіометричних надлишках реагентів, отриманих через термодинамічну константу рівноваги і по емпіричним даним дозволяє виявити особливості протікання процесу.

Для перевірки запропонованого підходу було обрано добре відомі промислові процеси - синтез метанолу, синтез карбаміду і каталітичне окислення NO, які добре досліджені експериментально на широкому концентраційному інтервалі [1,2].

В результаті було отримано рівняння стехіометричного виходу, які залежать тільки від стехіометричних надлишків

$$\alpha_{CH_3OH} = 0.178 - \frac{1.08}{2.5 + E_{H_2}} + 47.4 \frac{E_{CO} + 0.5}{(E_{CO} + 0.6) \cdot (E_{CO} + 57)},$$

$$\alpha_{CO(NH_2)_2} = 1.27 - \frac{1.48}{2.7 + E_{NH_3}} - \frac{0.229}{1.1 + E_{CO_2}},$$

$$\alpha_{NO} = 1.39 - \frac{2.21}{3.5 + E_{NO}} - \frac{1.51}{3.5 + E_{O_2}}$$

Аналіз рівнянь показав, що вони справедливі для широкого інтервалу варіювання параметрів і дають значну похибку (більше 10%) тільки при значеннях α_S менших 0.05 і великих 0.95. Незважаючи на обмежену кількість використовуваних параметрів (це всього лише ілюстрація підходу) від отриманих рівнянь значно простіше використовуваних в даний час неявно виражених рівнянь і поправочних таблиць, що значно спрощує технологічні розрахунки процесу.

Співставлення рівнянь вказує на їх близьку математичну форму, що робить процес дослідження більш прогнозованим, дозволяє уніфікувати процеси моделювання, аналізу та статистичної обробки експериментальних даних. Явний вигляд залежностей і простота їх отримання дозволяє по новому підійти до питань управління та оптимізації діючих виробництв, а також значно спростити процес прогнозування багатьох технологічних рішень.

Перелік використаних джерел.

- 1.Технология связанного азота.(под ред. В.И.Атрощенко)// - К.:Вища школа, 1985.
- 2.Каталитические и массообменные процессы под давлением в технологии неорганических веществ (под. ред. А.Я.Лобойко)// - Харьков:."Основа" , 1993.

Козуб С.М., Козуб П.А., Рудченко С.О., Левашова О.Л.
 Харківський національний медичний університет

СТВОРЕННЯ БІБЛІОТЕКИ ІНФРАЧЕРВОНИХ СПЕКТРІВ ПРИРОДНИХ ЖИРІВ

Проблеми здорового харчування у останні роки набули надзвичайної актуальності. Більше ніж третина населення планети має підвищену вагу, а в розвинутих країнах виготовлення продуктів харчування супроводжується додаванням різних добавок, які не існують у природних продуктах. Все це спричиняє низку захворювань.

Традиційні хімічні методи перевірки складу продуктів є досить складними і потребують відносно великих розмірів зразків. Крім того, вони є селективними, і тому не дозволяють встановлювати склад багатьох (особливо нових) продуктів.

У той же час існують такі ефективні фізичні методи як ІЧ спектrometerія, які є досить ефективними, але не мають сталих методик їх використання для подібних об'єктів. Тому створення бібліотеки основних жирів, які використовуються у технології харчових виробництв та для виробництва косметичних засобів є дуже важливим з практичної точки зору. Але крім того, така робота дає можливість проведення попередньої класифікації отриманих даних, великого кола узагальнюючих висновків та розширення їх на інші продукти харчування – білки, вуглеводні, вітаміни.

Для створення бази даних було обрано широкий клас жирів які зустрічаються у повсякденних продуктах харчування та косметологічних засобах. Вони були розділені на чотири основні групи – рослинні масла, рибні жири, жири птиці та тваринні жири.

Оскільки основним завданням роботи є створення бази даних ІЧ спектрів жирів з метою якісної оцінки продуктів харчування та виявлення можливої їх фальсифікації, то