

Ф. Т. Бадрtdинова, Л. А. Бигаева, С. И. Спивак (Бирск, БирГСПА, Уфа, БГУ). **Решение обратной задачи процесса поликонденсации аспарагиновой кислоты при термогравиметрическом режиме.**

Одной из обратных задач кинетики является определение кинетических параметров — энергий активаций, констант скорости. В докладе представлено решение обратной задачи для процесса поликонденсации аспарагиновой кислоты.

С математической точки зрения эта задача сводится к минимизации функционала $\Phi(z)$ ($z = (k_1, \dots, x_6)$) соответствия экспериментальных и модельных данных: $\Phi(z) = \sum_{i=1}^n [(P_e(t_i) - P_r(t_i, z))]^2$, где k_1, \dots, x_6 — константы скорости реакций, $P_e(t_i)$ — данные эксперимента по потери веса исходного вещества — аспарагиновой кислоты, полученные из изотерм термогравиметрического анализа (ТГА) [1]. Для нахождения расчетных данных $P_r(t_i, z)$ используется математическая модель, построенная для кинетической схемы изучаемого процесса:

Первая зона	Вторая зона
$\alpha A \rightarrow B + C$ с константой k_1	$(1 - \alpha)A \rightarrow B + C$ с константой k_4
$\alpha A + C \rightarrow B + C$ с константой k_2	$(1 - \alpha)A + C \rightarrow B + C$ с константой k_5
$C \rightarrow D + B$ с константой k_3	$C \rightarrow D + B$ с константой k_6

Здесь A — исходный мономер; B — вода выделяется во всех происходящих реакциях; C — автокатализирующий промежуточный продукт, димер, тример и т. д.; D — конечный продукт, параметр α отражает долю исходного мономера для зон. Химический процесс проходит в двух зонах твердой фазы, причем выдвинута гипотеза о существовании быстрой и медленной зон. Каждая зона проходит в три реакции: первая реакция является прямой, результатом которой является автокатализирующий продукт и вода; вторая реакция автокатализирующая, в третьей реакции образуется конечный продукт.

Результатом решения обратной задачи являются константы скорости. По найденным константам были определены значения энергий активаций $E_1 = 49$, $E_2 = 48$, $E_3 = 39$, $E_4 = 36$, $E_5 = 28$, $E_6 = 44$. Анализируя найденные энергии активации, можно сделать вывод, что одна из зон процесса быстрее, что подтверждает существование медленной и быстрой зон.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гольдберг В. М. и др. Кинетический анализ твердофазной поликонденсации аспарагиновой кислоты. — Доклады Академии наук, 2008, т. 423, № 5, с. 583–587.