

Кинетическая схема окислительных превращений яблочного пектина под действием озон-кислородной смеси

© Кутлугильдина¹ Галия Гаязовна, Зимин^{1*+} Юрий Степанович, Сахибгареева² Маргарита Владимировна, Спивак³ Семен Израилевич и Мустафин¹ Ахат Газизьянович

¹ Кафедра физической химии и химической экологии. Башкирский государственный университет. ул. Заки Валиди, 32. г. Уфа, 450076. Республика Башкортостан. Россия.

Тел.: (347) 229-96-94. E-mail: ZiminYuS@mail.ru

² Отдел разработки информационных систем в наземной инфраструктуре.

ООО "РН-БашНИПИнефть". ул. Ленина, 86. г. Уфа, 450006. Республика Башкортостан. Россия

³ Кафедра математического моделирования. Башкирский государственный университет.

ул. Заки Валиди, 32. г. Уфа, 450076. Республика Башкортостан. Россия.

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: яблочный пектин, окисление, озон-кислородная смесь, пероксид водорода, кинетическая схема окисления, математическое моделирование.

Аннотация

Проведено математическое моделирование окислительных превращений яблочного пектина (ЯП) под действием озон-кислородной смеси в водных растворах (реакционная система «ЯП + O₃ + O₂ + H₂O»). Кинетическая схема окислительного процесса составлена на основании известных представлений о механизмах жидкофазного окисления органических соединений (с учетом известных к настоящему времени экспериментальных результатов по окислению ЯП). С помощью программного комплекса «ХимКинОптим» для предложенной схемы были решены обратная и прямая задача химической кинетики. При этом были использованы известные литературные данные о константах скорости элементарных стадий. Решение обратной задачи химической кинетики с использованием индексного метода глобальной оптимизации наблюдаемых и расчетных кинетических данных позволило определить константы скорости ключевых стадий окислительного процесса. Оказалось, что полученные расчетным путем константы скорости отдельных стадий достаточно хорошо согласуются со значениями констант скорости, взятых из литературных источников. Решение прямой задачи химической кинетики, с использованием найденных констант скорости, позволило получить кинетические кривые всех участников озонированного окисления яблочного пектина. Установлено, что кинетическая кривая накопления карбоксильных групп, полученная экспериментально, полностью совпала с теоретической зависимостью. Показано также, что предложенная схема окислительных превращений яблочного пектина в рассматриваемой реакционной системе «ЯП + O₃ + O₂ + H₂O» позволяет объяснить все имеющиеся к настоящему времени экспериментальные результаты. Для дополнительного подтверждения кинетической схемы были проведены исследования по озонированному окислению яблочного пектина с добавками еще одного инициатора (H₂O₂ + FeSO₄). Для этого в обсуждаемую выше схему были введены 3 новые стадии, характеризующие каталитическое разложение пероксида водорода под действием металла переменной валентности (Fe²⁺). Решением прямой задачи химической кинетики были получены кинетические кривые накопления конечных продуктов реакции. Было установлено, что кинетика накопления карбоксильных групп в реакционной системе «ЯП + O₃ + O₂ + H₂O₂ + FeSO₄ + H₂O», полученная в результате дополнительно проведенного эксперимента, совпала с теоретически предсказанной кинетической кривой. Данный факт является дополнительным подтверждением правильности предложенной схемы окислительных превращений яблочного пектина.