

*Малышев Даниил Романович*

бакалавр, студент

ГБОУ ВО «Альметьевский государственный нефтяной институт»

г. Альметьевск, Республика Татарстан

## **МОЛЕКУЛЯРНЫЙ АНАЛИЗ В ПОТОКЕ КАК ИНСТРУМЕНТ КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА В ХИМИЧЕСКОМ ПРОИЗВОДСТВЕ**

*Аннотация:* в работе рассматривается применение инлайн-метода ближней инфракрасной (БИК) спектроскопии для контроля качества продукции непосредственно в технологическом потоке химического производства. Описаны термодинамические причины образования бракованного продукта при аварийных режимах, квантово-механическая природа БИК-поглощения, математический аппарат хемометрики для расшифровки спектров в реальном масштабе времени, а также экологические преимущества автоматического возврата непрореагировавшего сырья в цикл.

*Ключевые слова:* инлайн-анализ, БИК-спектроскопия, хемометрика, контроль качества, ангармонизм, зелёная химия.

Традиционный офлайн-контроль качества в химическом производстве занимает от 30 до 60 минут – промежутков, за который состав реакционной массы способен кардинально измениться. Согласно принципу Ле Шателье, любое отклонение от регламента (падение температуры из-за выхода из строя мешалки, снижение мощности нагрева) смещает равновесие в сторону экзотермического направления: концентрация целевого продукта снижается, доля непрореагировавшего сырья возрастает. Сформировавшийся химический брак (off-spec) за время ожидания лабораторного заключения способен загрязнить всю складскую партию, превратив её в опасные отходы.

Решением служит перенос аналитической функции непосредственно в трубопровод – инлайн-анализ на основе ближней инфракрасной спектроскопии (БИК, NIR, диапазон 780–2500 нм). Метод является неразрушающим: БИК-фотоны не обладают энергией, достаточной для ионизации молекул или разрыва

ковалентных связей. Поглощение излучения обусловлено квантово-механическими колебаниями химических связей. Вследствие ангармонизма вибрационного потенциала в БИК-области возникают обертоны и комбинационные полосы – запрещённые переходы между несмежными колебательными уровнями. Их низкая интенсивность обеспечивает глубокое проникновение излучения в объём жидкости; наибольший аналитический вклад вносят обертоны связей O-H, C-H и N-H [2].

Расшифровка перекрывающихся полос выполняется методами хемометрики. Предобработка спектров (нормализация, дифференцирование) устраняет физический и оптический шум. Метод главных компонент (PCA) выявляет аномалии: неизвестная примесь в реакторе проявляется как статистический выброс. Метод проекции на скрытые структуры (PLS) связывает форму спектральных полос с концентрациями компонентов и определяет содержание целевого вещества за доли секунды [3].

При обнаружении отклонения ПЛК подаёт сигнал на пневматический клапан, отсекающий бракованный поток. Непрореагировавшее сырьё по обводной трубе возвращается в реактор на повторный цикл превращений. Это исключает трудоёмкую утилизацию опасных отходов – окислительно-восстановительную обработку, химическое осаждение и нейтрализацию – и соответствует принципам «зелёной» безотходной химии [1].

### *Список литературы*

1. Алфёрова Н.А. Зелёная химия и тенденция её развития / Н.А. Алфёрова, А.М. Минакова, Ю.М. Аверина, В.В. Меньшиков // Успехи в химии и химической технологии. – 2017. – Т. 31, № 15 (196). – С. 84–85. EDN ZWUMIH
2. Иванова Л.В. ИК-спектromетрия в анализе нефти и нефтепродуктов / Л.В. Иванова, Р.З. Сафиева, В.Н. Кошелев // Вестник Башкирского университета. – 2008. – Т. 13, № 4. – С. 869–874. EDN KLTSHT
3. Николаев С.И. Применение БИК-спектроскопии для определения количества неорганических и органических соединений в кормах / С.И. Николаев,

И.О. Кулаго, С.Н. Родионов // Известия Нижневолжского агроуниверситетского комплекса: наука и высшее профессиональное образование. – 2013. – № 2 (30). – С. 110–116. EDN QCWVGR