

Ружина Мария Владимировна

студентка

ГАОУ ВО «АГТУ «Высшая школа нефти»

г. Альметьевск, Республика Татарстан

АВТОМАТИЗИРОВАННЫЕ СПЕКТРАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ КОНТРОЛЯ В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

***Аннотация:** в статье рассматривается проблема задержки данных при традиционном лабораторном контроле. Предлагается решение в виде интеграции в поток БИК- и КР-спектрометров с хемометрической обработкой. На примере полимеризации стирола показана возможность непрерывного расчёта конверсии мономеров и молекулярно-массовых характеристик для перехода к управлению процессом в реальном времени.*

***Ключевые слова:** БИК-спектроскопия, спектроскопия комбинационного рассеяния, хемометрика, полимеризация стирола, конверсия мономера, степень полимеризации, процессные аналитические технологии, уравнение Аррениуса.*

Традиционный подход к контролю химико-технологических процессов, основанный на периодическом отборе проб и их последующем анализе в заводской лаборатории, вносит временную задержку, достигающую десятков минут. Для управления динамичными процессами, как радикальная полимеризация или каталитический крекинг, где состав реакционной массы меняется непрерывно, этот метод не дает возможности эффективного оперативного вмешательства. Современная концепция цифрового производства требует перехода на непрерывный мониторинг, реализуемый с помощью автоматизированных спектральных анализаторов, интегрированных непосредственно в технологический поток.

Методологической основой исследования служат два взаимодополняющих оптических метода. Спектроскопия ближнего инфракрасного диапазона (БИК) регистрирует обертоны и составные частоты валентных колебаний связей О-Н, С-Н, N-H, позволяя отслеживать концентрации воды, мономеров и растворите-

лей. Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР), в свою очередь, дает информацию о фундаментальных колебательных модах и позволяет однозначно идентифицировать индивидуальные соединения по их уникальным спектральным «отпечаткам пальцев». Поскольку в многокомпонентных смесях полосы поглощения перекрываются, для извлечения количественной информации применяются хемометрические алгоритмы, среди которых наиболее распространен метод проекции на латентные структуры.

Ключевой результат практического применения данной методологии был продемонстрирован для процесса радикальной полимеризации стирола, инициируемой пероксидом бензоила. Схема реакции в общем виде выглядит следующим образом: $n \text{C}_6\text{H}_5\text{-CH=CH}_2 \rightarrow [-\text{CH}(\text{C}_6\text{H}_5)\text{-CH}_2\text{-}]_n$. БИК-анализатор, установленный в реакторе, непрерывно регистрирует текущую концентрацию мономера $[\text{M}]_t$, что позволяет в реальном времени рассчитывать его конверсию по формуле $X = ([\text{M}]_0 - [\text{M}]_t) / [\text{M}]_0$. Для идеальной полимеризации без реакций обрыва цепи среднечисловая степень полимеризации линейно связана с конверсией: $\text{DP}_n = X / (1 - X)$. На практике также отслеживаются средневесовая молекулярная масса и индекс полидисперсности.

Количественный анализ базируется на законе Бугера-Ламберта-Бера, который для смеси принимает вид $D(\lambda) = 1 \cdot \sum \epsilon_i(\lambda) \cdot c_i$. Скорость расходования мономера подчиняется кинетическому уравнению $r = -d[\text{A}]/dt = k[\text{A}]^n$, а влияние температуры на константу скорости описывается уравнением Аррениуса. На основе этих данных автоматизированная система управления процессом получает аналитический сигнал в течение 1–5 секунд, что несопоставимо быстрее традиционных методов. Это позволяет при любом отклонении конверсии или молекулярной массы от заданного профиля мгновенно корректировать температуру в реакторе или дозировку инициатора.

Внедрение описанных процессных аналитических технологий полностью меняет парадигму контроля качества, переводя его из категории финального в категорию предиктивного. Использование оптоволоконных зондов, которые выносят электронный блок за пределы опасной зоны, делает этот метод применимым

во взрыво- и пожароопасных средах. Более того, спектроскопия позволяет вести раннее обнаружение утечек токсичных веществ, таких как хлор или аммиак, по их характерным спектральным сигнатурам, минимизируя риски для персонала и окружающей среды. Сочетание оперативности, точности и безопасности делает автоматизированные БИК- и КР-спектрометры ключевым инструментом для создания эффективного и устойчивого химического производства.

Список литературы

1. Хромато-масс-спектрометрическое и спектрофотометрическое определение некоторых синтетических красителей в пищевых продуктах / С.Г. Дмитриенко, В.В. Апяри, Е.А. Шатаева, Ю.А. Золотов // Российский химический журнал. – 2012. – Т. 56. №1–2. – С. 71–81.

2. Савицкий А.П. Использование спектроскопии комбинационного рассеяния и флуоресценции для контроля качества лекарственных средств / А.П. Савицкий, И.Ю. Горячева // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2015. – Т. 81. №5. – С. 5–12.

3. Солодун Е.В. Применение БИК-спектрометрии для экспресс-анализа субстанций нестероидных противовоспалительных средств / Е.В. Солодун, Т.А. Марышева // Химико-фармацевтический журнал. – 2018. – Т. 52. №3. – С. 49–54.

4. Процессно-аналитические системы в фармацевтическом производстве / Ю.А. Труханов, М.Ю. Шавелкина, М.В. Комарова, Д.И. Демин // Химическая промышленность сегодня. – 2020. – №4. – С. 22–28.