

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КИНЕТИКИ ГИДРОЛИЗА САХАРОЗЫ

MATHEMATICAL MODEL OF KINETICS OF SUCROSE HYDROLYSIS

Кулиш А.С., студент, Лебедев С.Ю., доцент, СумГУ, Сумы

Kulish A., student, Lebedev S., associate professor, SumSU, Sumy

Наши многочисленные эксперименты по изучению кинетики гидролиза сахарозы в присутствии разных неорганических кислот привели к эмпирическим зависимостям, описывающим процесс для каждого отдельного случая [k (мин^{-1})]:

$$\begin{aligned}k &= 9,97 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-11940/T) \cdot \exp(1,196 \cdot C) \quad (\text{HBr}); \\k &= 2,82 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-11510/T) \cdot \exp(1,028 \cdot C) \quad (\text{HCl}); \\k &= 7,18 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-11830/T) \cdot \exp(1,054 \cdot C) \quad (\text{HNO}_3); \\k &= 5,29 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-11750/T) \cdot \exp(1,166 \cdot C) \quad (\text{H}_2\text{SO}_4).\end{aligned} \quad (1)$$

Целью данной работы является обобщение полученных экспериментальных данных (1) и создание единой математической зависимости, описывающей процесс гидролиза сахарозы.

Нами рассмотрены несколько разных подходов к достижению поставленной цели.

1. Анализ уравнений (1) показывает некоторую близость данных для серной и бромистоводородной кислот с одной стороны и соляной и азотной кислот – с другой. Обобщение экспериментальных данных для этих пар кислот привело к зависимостям:

$$\begin{aligned}k &= 1,805 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-11400/T) \cdot \exp(1,047 \cdot C) \quad (\text{HCl}, \text{HNO}_3); \\k &= 5,400 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-11750/T) \cdot \exp(1,177 \cdot C) \quad (\text{HBr}, \text{H}_2\text{SO}_4);\end{aligned} \quad (2)$$

2. Объединение экспериментальных данных по всем кислотам на начальной стадии привело к уравнению:

$$k = 1,660 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-11400/T) \cdot \exp(1,142 \cdot C). \quad (3)$$

3. Теория активированного комплекса описывает константу скорости реакции k теоретическим уравнением:

$$k = kT/h \exp(-\Delta H/RT) \exp(\Delta S/R), \quad (4)$$

где k и h – постоянные Больцмана и Планка; ΔH и ΔS – энтальпия и энтропия активации реакции; $\Delta H = E_a - RT$, E_a – энергия активации реакции, R – универсальная газовая постоянная. Обработанные с учётом уравнения (4) экспериментальные уравнения (1) позволили получить соотношение:

$$k = 1,250 \cdot 10^{12} \cdot T \cdot \exp(-11615/T) \cdot \exp(1,1 \cdot C). \quad (5)$$

Все полученные зависимости проанализированы на предмет соответствия экспериментальным данным, рассчитаны погрешности для каждого случая. Установлены

области, в которых каждое из соотношений в лучшей мере описывает экспериментальные данные.

Результаты работы позволили определить направление дальнейших исследований в обобщении полученных результатов экспериментов.