

Дополнительные материалы конференций

Химические науки

**КОНЦЕНТРАЦИОННЫЕ КОЛЕБАНИЯ В
ХИМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЕ «ПАРАКСИЛОЛ
– КИСЛОРОД – МЕТИЛТОЛУАТ»**

Федоров А.Я., Мелентьева Т.А.

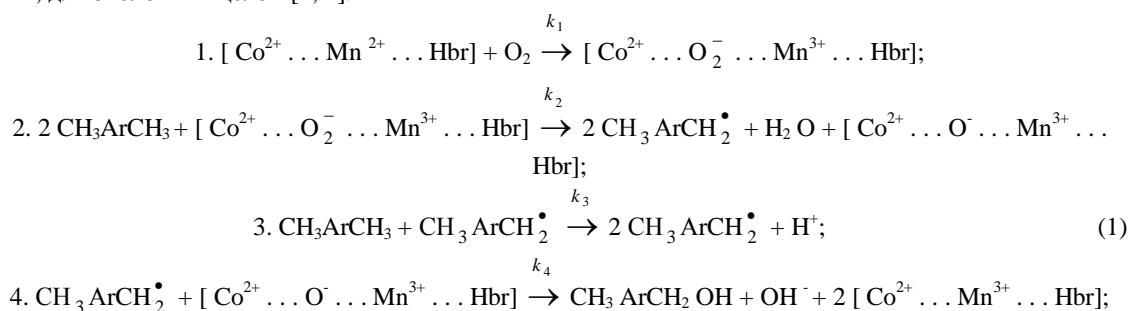
*Институт повышения квалификации
Тульский государственный университет
Тула, Россия*

Введение

Концентрационные колебания характерны для открытых систем, находящихся вдали от равновесия. На всех уровнях организации, от макромолярного до микромолекулярного, в химических системах возможны незатухающие колебания характерных физических параметров – концентраций реагентов, каталитических комплексов, параметров, определяющих физическое поведение и т.д. Теоретическое и экспериментальное исследование химических явлений имеет весьма важное значение для биофизики, биохимии, для биологии в целом [1, 2].

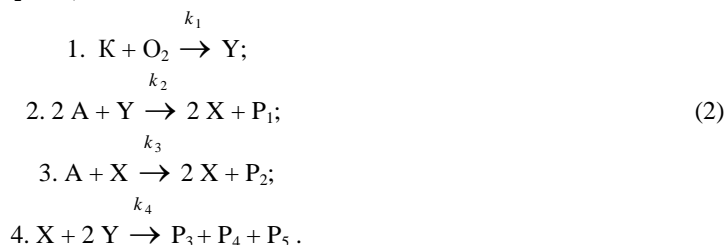
Основная часть

Система «параксиллол – кислород – метилтолуат» является многофазной системой. Механизм окисления параксиллола содержит несколько десятков элементарных стадий. Поэтому количественный анализ такого механизма весьма затруднителен. Предполагается, что концентрация параксиллола значительно превосходит концентрацию метилтолуата. Однако можно упростить задачу описания концентрационных колебаний и рассмотреть несколько элементарных стадий, исходя из трех ключевых веществ: $A = \text{CH}_3\text{ArCH}_3$ – концентрация параксиллола в реакционной смеси, $X = \text{CH}_3\text{ArCH}_2^\bullet$ – вещество, играющее роль промежуточного переключателя; $Y = [\text{Co}^{2+} \dots \text{O}_2^- \dots \text{Mn}^{3+} \dots \text{Hbr}]$ – вещество, контролирующее образование промежуточных соединений. Доминируют следующие реакции [3]:



где $[\text{Co}^{2+} \dots \text{Mn}^{2+} \dots \text{Hbr}]$ – кобальт марганец-бромидный катализатор; $[\text{Co}^{2+} \dots \text{O}_2^- \dots \text{Mn}^{3+} \dots \text{Hbr}]$, $[\text{Co}^{2+} \dots \text{O}^- \dots \text{Mn}^{3+} \dots \text{Hbr}]$, $[\text{Co}^{2+} \dots \text{Mn}^{3+} \dots \text{Hbr}]$ – каталитические комплексы; $\text{CH}_3\text{ArCH}_2^\bullet$ – свободный радикал; O_2 – молекулярный кислород; H_2O , H^+ , $\text{CH}_3\text{ArCH}_2\text{OH}$, OH^-

– продукты реакций. Экспериментальному анализу подвергаются только устойчивые соединения, которых в механизме (1) насчитывается два. Математическая модель процесса следующая. Обозначим P_i – продукты реакций ($i = 1 \dots 5$), $K = [\text{Co}^{2+} \dots \text{Mn}^{2+} \dots \text{Hbr}]$:



Константы скорости элементарных стадий предполагаются следующими: $k_1 = 1, 6 \cdot 10^3$ ((л/моль) с⁻¹); $k_2 = 1, 3$ ((л/моль)² с⁻¹); $k_3 = 2 \cdot 10^2$ ((л/моль) с⁻¹); $k_4 = 4 \cdot 10^3$ ((л/моль)² с⁻¹). Нелинейные уравнения реакций (2) имеют вид:

$$\begin{aligned}
 \dot{X} &= 2 k_2 A^2 Y - k_4 X Y^2 + k_3 A X; \\
 \dot{Y} &= k_1 K B - k_2 A^2 Y - k_4 X Y^2;
 \end{aligned} \tag{3}$$

где B - концентрация молекулярного кислорода в реакционной смеси, K_1 - концентрация каталитического комплекса. Введем безразмерные переменные:

$$X = (k_2 / k_4) A x; Y = (k_3 / k_4) y; t = (\tau / (A^2 k_2)).$$

Из системы (3) получаем следующую систему обыкновенных безразмерных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{d\tau} &= a_0 y - a_1 xy^2 + a_2 x; \\ \frac{dy}{d\tau} &= b_0 - y - b_1 xy^2; \end{aligned} \quad (4)$$

где $a_0 = (2 k_3 / k_2 A)$, $a_1 = (k_3^2 / k_4 k_2 A^2)$, $a_2 = (k_3 / k_2 A)$, $b_0 = (k_1 k_4 K_1 B / k_2 k_3 A^2)$ и $b_1 = (k_3 / k_4 A)$ - безразмерные коэффициенты. Найдем стационарные решения уравнений (4) при принятых кинетических константах. При этом, для нахождения концентрации молекулярного кислорода в реакционной смеси необходимо использовать закон Генри при следующих значениях технологических параметров - $T = 205^\circ \text{C}$, $P = 26 \text{ атм.}$. В этом случае стационарное решение указанных уравнений, удовлетворяющее положительности и действительности имеет вид:

$$y_1 = 1,6 \cdot 10^2; x_1 = 1,0 \cdot 10^3. \quad (5)$$

Автоколебательный режим возникает в рассматриваемой химической системе, если точка y_1, x_1 неустойчива по Ляпунову. Это соответствует определенному набору констант элементарных химических стадий и технологических условий.

Мы рассмотрели точечную, сосредоточенную систему. Если система распределенная, т.е. наряду с химическими реакциями в ней имеется диффузия, то в ней могут возникать волно-

вые процессы с пространственной неоднородностью (автоволновые процессы). Такие процессы играют большую роль во многих биологических процессах - морфогенезе, в поведении возбудимых тканей. Автоволновые процессы в химической технологии возможны при отсутствии конвекции, но существенной диффузии в ядре потока жидкости. Это имеет место в тонких трубах или тонких слоях. Поэтому указанные процессы существенны в производствах ДМТ и ТФК.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Волкенштейн М.В. Биофизика. / М.: из - во «Наука». 1981. 575 с.
2. Рубин А.Б. Биофизика. / М.: изд-во «Книжный дом «Университет»». 2000. Т.2. 467 с.
3. Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики. / М.: из - во «Высшая школа». 1984. 463 с.

Работа представлена на научную международную конференцию «Современные наукоемкие технологии», 16-23 ноября 2007 г., о. Тенерифе (Испания). Поступила в редакцию 18.10.2007.

Биологические науки

ВОЗМОЖНОСТИ СОЧЕТАНИЯ ФЕРРОГЛЮКИНА И ФОСПРЕНИЛА В КОРРЕКЦИИ АНТИАГРЕГАЦИОННОЙ АКТИВНОСТИ У НОВОРОЖДЕННЫХ ПОРΟΣЯТ С АНЕМИЕЙ

Медведев И.Н., Краснова Е.Г.

Курский институт социального образования
(филиал) РГСУ
Курск, Россия

Введение: У новорожденных поросят с анемией нередко возникают тромботические осложнения и нарушение микроциркуляции из-за микротромбозов, вызванные ослаблением функций сосудистой стенки на фоне гипоксии и снижения уровня метаболизма в стенке сосуда.

Цель работы: выявить возможности ферроглоукина и фоспренила по коррекции антиагрегационной активности стенки сосуда у новорожденных поросят с анемией.

Материалы и методы: Обследовано 33 новорожденных поросенка с анемией. Коррекция проводилась ферроглоукином 150мг 2 раза через 10 дней и фоспренилом 0,05мл/кг внутримышеч-

но через 5 дней через пять дней после первой инъекции препарата железа.

АТ исследовалась по Шитиковой А.С. (1997) с использованием АДФ, коллагена, тромбина, ристомидина, адреналина и перекиси водорода (H_2O_2) в общепринятых концентрациях. Антиагрегационная активность стенки сосуда оценивалась по Балуда В.П. и соавт. (1983) с вычислением индекса антиагрегационной активности стенки сосуда (ИААСС).

Результаты исследования: Наиболее активно тромбоциты больных животных при венозной окклюзии на фоне лечения реагировали на коллаген — $26,2 \pm 0,14 \text{ с.}$ На втором месте — АДФ ($31,8 \pm 0,04 \text{ с.}$) и ристомидин ($31,6 \pm 0,21 \text{ с.}$). Ранняя АТ с H_2O_2 у больных поросят свидетельствует об ослаблении антиокислительной системы тромбоцитов, прежде всего каталазы и супероксиддисмутазы. Тромбиновая и адреналиновая АТ на фоне венозной окклюзии также развивалась быстрее, чем в контроле - $46,2 \pm 0,05 \text{ с.}$ и $87,5 \pm 0,01 \text{ с.}$, соответственно.

Применение ферроглоукина и фоспренила позволило добиться улучшения показателей