

# In situ-анализ химических реакций – молекулярное видео

**К**ак выпускать больше продукции с меньшими затратами – постоянный вопрос для работников современных исследовательских химических лабораторий. Исследователи хотят понять, насколько быстро и экономически эффективно они могут создавать высококачественные химические продукты и какие процессы применять для их производства. В свою очередь, это обусловило появление в промышленности тенденции к разработке и внедрению новых методов работы и анализа химических реакций.

Желание получить информацию о реакции не является новым, и уже много лет для этой цели используют офлайн-методы, такие как ВЭЖХ. Данный метод обладает непревзойденной чувствительностью, что позволяет исследователям в любое время получать количественную информацию о компонентах реакции в момент ее проведения. Однако необходимость ожидания результатов анализа образцов приводит к задержкам в получении необходимой информации, что важно, когда скорость разработки имеет существенное значение. Кроме того, неспособность увидеть, что происходит между отборами проб, иногда может привести к неправильному пониманию хода и механизма реакции. Вследствие этого существует потребность в быстром получении информации о реакциях для повышения эффективности оптимизации и масштабирования химического процесса. В последние годы для этой цели широко используют in situ-анализ реакций.



ReactIR™ – это система анализа реакций in situ в режиме реального времени, применяемая для улучшения понимания химических реакций. ReactIR™ позволяет наблюдать за компонентами химической реакции, используя хорошо изученный метод инфракрасной спектроскопии. Химически стойкий зонд НПВО помещается непосредственно в реакционный сосуд, и снимаются спектры, которые затем превращаются в «молекулярное видео» реакции. Наблюдение за изменением концентраций всех основных компонентов реакции и промежуточных продуктов позволяет определять механизм, кинетику и пути реакции.

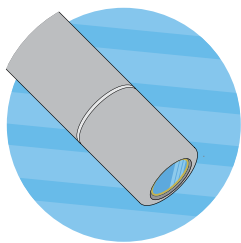
Сочетание средней инфракрасной (MIR) спектроскопии и преимуществ технологии НПВО по сравнению с измерениями пропускания открыло новые возможности для мониторинга классических реакций в режиме реального времени. Их используют исследователи и ученые, чтобы лучше понять химические реакции и, следовательно, увеличить скорость химических разработок.

### Преимущества:

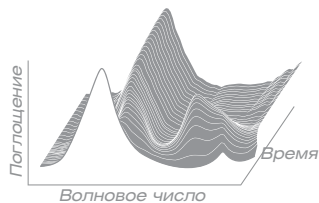
- Идеально подходит для использования в реакциях гидрирования и гетерогенного катализа благодаря нечувствительности к пузырькам или твердым частицам из-за глубины проникновения падающего излучения в образец.
- Пригодность для водной химии (12 мкм в сравнении с несколькими миллиметрами, как при традиционных измерениях пропускания), более короткая длина пути означает меньшую чувствительность к полосам поглощения воды.
- Теперь можно проводить in situ-измерения реакций в реальном времени, поскольку погружение осуществляется непосредственно в реакционный сосуд.

### В дополнение данная технология имеет ряд преимуществ перед офлайн-методами:

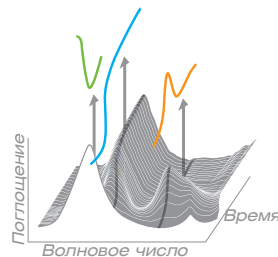
- Возможность получения немедленного доступа к текущей информации о реакции.
- Отсутствие необходимости в отборе проб – измерение в условиях



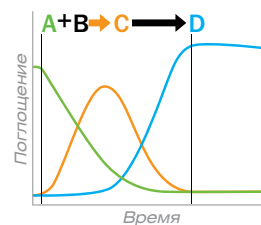
**Зонд ReactIR:** Датчик помещается непосредственно в реакцию для непрерывных измерений в реальном времени.



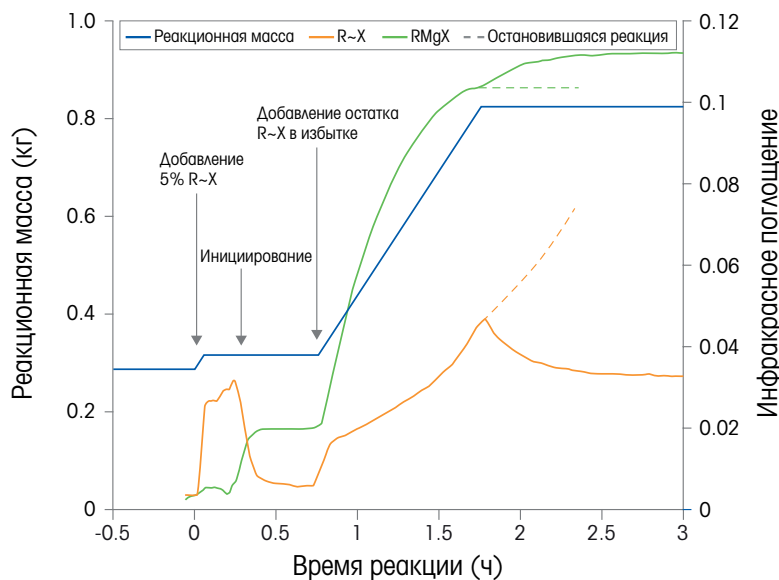
**Измерение:** Спектры непрерывно записываются и представляются на графике - поглощение в зависимости от волнового числа от времени.



**Пики:** Используйте программное обеспечение iC IR для определения изолированных пиков, которые изменяются во времени. Профили этих пиков показывают, как они меняются со временем.



**Тренды:** Так как поглощение пропорционально концентрации, то профили пиков являются профилями реакции, которые показывают ключевые события реакции - начало, окончание, образование интермедиатов и кинетику.



Профили концентрации реакции в зависимости от времени для органического галогенидного реагента (оранжевая кривая) и продукта Гриньяра (зеленая кривая). Пунктирные линии показывают поведение, наблюдаемое, когда реакция останавливается из-за присутствия воды.

реакции гарантирует, что образец не изменился.

- Неразрушающий метод – сохраняет химическую целостность и неизменность концентрации реагентов.
- Безопасность – реакции при высоких температурах и давлении можно измерять без необходимости отбора проб.

В дополнение к этим преимуществам в ИК-спектроскопии действует закон Ламберта – Бера, согласно которому поглощение пропорционально концентрации. Это позволяет исследователям проводить как качественные, так и количественные измерения в ходе реакции.

In situ-измерения в реальном времени не только чрезвычайно полезны и имеют ключевое значение для дальнейшего понимания поведения реакции, но и важны в отношении вопросов безопасно-

сти. Например, in situ ИК-Фурье спектроскопию можно использовать для обнаружения инициации Гриньяра и определения состояния, в котором реакция останавливается из-за наличия воды в растворителе. Это позволяет выявить в реальном времени потенциальную угрозу безопасности в сильно экзотермической реакции. Можно видеть, что реакция начинается через 25 мин и достигает конечной точки в течение 2 ч. Пунктирные линии показывают, как будет выглядеть профиль реакции в случае ее остановки. Возможность видеть этот тип поведения в режиме реального времени позволяет химикам прекратить добавление органического галогенида в случае остановки реакции и предотвратить потенциально опасную ситуацию, когда происходит повторное иницирование.

ReactIR™ имеет высокую производительность, универсальность in situ-измерений и обладает интуитивно понятным, мощным программным обеспечением для проведения анализа реакций, необходимым для простого и быстрого предоставления исчерпывающей информации и понимания химии.

### Как работает ReactIR™?

ReactIR™ работает по принципу ИК-Фурье спектроскопии. Однако химикам и инженерам необходима информация, а не только спектры. Поэтому ReactIR™ и программное обеспечение для анализа реакций iC IR™ были разработаны как мощный комплексный набор технологий, в котором использованы данные ИК-спектроскопии, чтобы позволить даже неопытному пользователю лучше понять химическую реакцию. Спектры реакции собираются с течением времени, а затем выбираются пики, которые соответствуют компонентам реакции. Эти пики анализируют, чтобы построить график, например, высоты пика в зависимости от времени. Этот график представляет профиль концентрации компонентов в течение реакции. ■



### Контактная информация:

**МЕТТЛЕР ТОЛЕДО СНГ**  
101000, г. Москва  
Сретенский бульвар,  
д. 6/1с1, офис 6  
Тел.: +7 (495) 777-70-77

