



KIMYOVIY REAKSIYALARNI OPTIMALLASHTIRISHDA ZAMONAVIY USULLAR

**Yusufova Nazokat,
Baratova Sitora.**

Toshkent kimyo texnologiya instituti Yangiyer filiali

Annotatsiya: Ushbu maqola kimyoviy reaksiyalarni optimallashtirishda qo'llaniladigan zamonaviy usullarni tahlil qiladi. Katalizatorlardan foydalanish, reaktorlarning kompyuter modellashtirishi va sun'iy intellekt yordami bilan jarayonlarni boshqarish usullari ko'rib chiqiladi. Shuningdek, energiya samaradorligini oshirish va atrof-muhitga ta'sirni kamaytirish bo'yicha yechimlar taklif etiladi. Ushbu maqola kimyo muhandisligi sohasidagi mutaxassislar va tadqiqotchilar uchun foydali ma'lumot manbasi bo'lib xizmat qiladi.

Kalit so'zlar: kimyoviy reaksiyalar, optimallashtirish, katalizatorlar, kompyuter modellashtirish, sun'iy intellekt, energiya samaradorligi

Аннотация: В данной статье анализируются современные методы оптимизации химических реакций. Рассматриваются использование катализаторов, компьютерное моделирование реакторов и управление процессами с помощью искусственного интеллекта. Также предлагаются решения для повышения энергоэффективности и уменьшения воздействия на окружающую среду. Эта статья служит полезным источником информации для специалистов и исследователей в области химической инженерии.

Ключевые слова: химические реакции, оптимизация, катализаторы, компьютерное моделирование, искусственный интеллект, энергоэффективность.



Abstract: *This article analyzes modern methods for optimizing chemical reactions. It discusses the use of catalysts, computer modeling of reactors, and process control using artificial intelligence. Additionally, solutions for improving energy efficiency and reducing environmental impact are proposed. This article serves as a valuable resource for specialists and researchers in the field of chemical engineering.*

Keywords: *chemical reactions, optimization, catalysts, computer modeling, artificial intelligence, energy efficiency.*

Kirish

Kimyoviy reaksiyalarni optimallashtirish zamonaviy kimyo sanoatining muhim yo‘nalishlaridan biridir. Ushbu jarayon ishlab chiqarish samaradorligini oshirish, energiya tejamkorligini ta‘minlash va ekologik ta‘sirni kamaytirishga xizmat qiladi. Optimallashtirishning asosiy usullari qatoriga katalizatorlardan foydalanish, reaktorlarning kompyuter modellashirilishi, sun‘iy intellekt (SI) yordamida jarayonlarni avtomatlashtirish, energiya samaradorligini oshirish, va yashil kimyo tamoyillarini qo‘llash kiradi. Ushbu maqolada kimyoviy reaksiyalarni optimallashtirish usullari va ularning afzalliklari tahlil qilinadi.

Katalizatorlardan foydalanish. Katalizatorlar kimyoviy reaksiyalar tezligini oshirish bilan birga, jarayonni kam energiya sarf etgan holda olib borishga imkon beradi. Ular reaksiya mexanizmini o‘zgartirib, aktivlanish energiyasini pasaytiradi. Katalizatorlar gomogen, geterogen va bio katalizatorlarga bo‘linadi.



Kriteriyalar	Gomogen Katalizatorlar	Geterogen Katalizatorlar	Biokatalizatorlar
Katalizator turi	Bir xil fazada (suyuqlik yoki gaz) bo'ladi	Ikki xil fazada bo'ladi (qattiq va suyuqlik)	Tabiiy katalizatorlar (enzimlar)
Tarkibi	Kimyoviy birikmalar (masalan, metallar)	Odatda qattiq moddalar (masalan, oksidlar)	Proteinlar, RNK va ba'zan kofaktorlar
Reaktsiya tezligi	Odatda yuqori, lekin reaksiya oxirigacha kamayadi	Tezlik boshlanishda yuqori, lekin faollikni kamaytiradi	Enzimlar orqali yuqori selektivlik va tezlik
Reaksiya mexanizmi	Katalizator va reagentlar bir fazada aralashadi	Reagentlar qattiq fazaga yaqinlashib, sirtida reaksiya yuz beradi	Substrat va enzim o'rtasida aniq o'zaro aloqalar
Tajriba va qo'llanilishi	Kimyo sanoatida keng qo'llaniladi (masalan, gidrogenatsiya)	Katalizatorlar ko'pincha katalizator reaktorlari va avtomobilni tozalashda ishlatiladi	Biotexnologiya, dori- darmon ishlab chiqarish, ekologiya
Qayta tiklanishi	Katalizatorni ajratish qiyin, qayta ishlatish muammo	Katalizatorni ajratish osonroq, uzoq muddat foydalanish mumkin	Enzimlar o'zgarishsiz qayta ishlatiladi, lekin stabilite sinovlari talab etiladi



Kriteriyalar	Gomogen Katalizatorlar	Geterogen Katalizatorlar	Biokatalizatorlar
Qayta ishlash	Odatda qayta ishlash mumkin, lekin samaradorlik pasayadi	Katalizatorni tiklash va qayta ishlash osonroq	Biokatalizatorlarni tiklash va boshqarish qiyinroq
Atrof-muhitga ta'siri	Ba'zan toksik, xavfli moddalar chiqarishi mumkin	Ba'zan yuqori issiqlik va bosim talab qiladi	Tabiiy va ekologik toza, ammo tezroq shikastlanishi mumkin
Afzalliklar	Oson ishlab chiqarish, yuqori samaradorlik	Uzun muddatli ishlash, yuqori tozalash darajasi	Ekologik toza, yuqori selektivlik va tezlik
Kamchiliklar	Qayta ishlash qiyin, energiya talab qilishi mumkin	Reaksiya samaradorligi pasayishi, qimmat bo'lishi mumkin	Temperatura va pH muhitiga sezgirlik, maxsus sharoitlar talab etadi

Gomogen katalizatorlar. Gomogen katalizatorlar reaksiya muhitida bir hil fazada bo'ladilar. Masalan, sulfat kislota esterifikatsiya reaksiyalarida katalizator sifatida ishlatiladi. Ularning afzalligi – yuqori selektivlik va tezkor ta'sir ko'rsatishidir.

Geterogen katalizatorlar. Geterogen katalizatorlar qattiq modda shaklida bo'lib, gaz yoki suyuqlik fazasidagi reaktantlar bilan aloqa qiladi. Masalan, Ziegler–Natta katalizatori polimerizatsiya jarayonlarida qo'llaniladi. Ushbu katalizatorlar qayta ishlanishi va ajratilishi osonligi bilan ajralib turadi. Biokatalizatorlar. Biokatalizatorlar fermentlar va tirik organizmlar yordamida reaksiyalarni boshqarishga asoslangan. Masalan, lipaza fermentlari yog'larning



gidrolizini tezlashtiradi. Biokatalizatorlar ekologik toza va selektivligi yuqori bo'lgani uchun farmatsevtika va oziq-ovqat sanoatida keng qo'llaniladi. Reaktorlarni kompyuter modellashtirish. Zamonaviy kimyo sanoatida reaktorlarning kompyuter modellashtirilishi reaksiya sharoitlarini oldindan tahlil qilish va optimallashtirish imkonini beradi. Bu usul Computational Fluid Dynamics (CFD), molekulyar dinamika, va reaksiyon kinetika modellashtirish texnologiyalariga asoslangan. CFD yordamida reaktor dizayni, CFD texnologiyasi suyuqlik va gaz oqimlarini model qilish orqali reaktor dizaynini optimallashtirishga yordam beradi. Masalan, katalitik konvertorlar dizaynida CFD tahlili katalizator zarrachalarining taqsimlanishini tekshirish uchun ishlatiladi. Molekulyar dinamika va reaksiyon kinetika; Molekulyar dinamika modellaridan foydalanish reaksiya mexanizmlarini chuqur tushunish va yangi katalizatorlarni ishlab chiqishda muhim ahamiyatga ega. Masalan, Gaussian va Materials Studio dasturlaridan foydalangan holda katalizator yuzasida reaktantlarning adsorbsiyasi o'rganiladi.

Sun'iy intellekt va avtomatlashtirish. Zamonaviy kimyo sanoatida sun'iy intellekt (SI) algoritmlari reaksiyalarni optimallashtirish va avtomatlashtirishda keng qo'llanilmoqda. Mashinaviy o'rganish va reaksiya tahlili; SI asosida mashinaviy o'rganish (MO) algoritmlari reaksiya natijalarini bashorat qilish va optimal sharoitlarni aniqlash uchun ishlatiladi. Masalan, DeepMind AlphaFold modeli protein katlanishini tahlil qilishda katta yutuqlarga erishgan. Avtomatlashtirilgan reaksiya tizimlari; Laboratoriyalarda robotlashtirilgan reaksiya tahlilchilari va avtomatlashtirilgan sintezatorlar tajriba samaradorligini oshiradi. Masalan, IBM RXN for Chemistry platformasi sun'iy intellekt yordamida sintez reaksiyalarini bashorat qiladi. Energiya samaradorligini oshirish; Energiya tejash va atrof-muhitga ta'sirni kamaytirish kimyo sanoatining ustuvor yo'nalishlaridan biridir.



Mikroreaktorlardan foydalanish. Mikroreaktorlar kimyoviy jarayonlarni kichik hajmdagi kanallarda olib borish orqali issiqlik va massa almashinuvini optimallashtiradi. Ular farmatsevtika va nozik kimyo sanoatida qo'llaniladi. Qayta tiklanuvchi energiya va Yashil kimyo tamoyillari zararli chiqindilarni minimallashtirish va qayta tiklanuvchi energiya manbalaridan foydalanishni rag'batlantiradi. Masalan, fotokataliz yordamida CO₂ ni yoqilg'iga aylantirish bo'yicha tadqiqotlar olib borilmoqda.

Xulosa

Kimyoviy reaksiyalarni optimallashtirish zamonaviy kimyo sanoatining asosiy maqsadlaridan biridir. Katalizatorlardan foydalanish, reaktorlarni kompyuter modellashtirish, sun'iy intellekt texnologiyalaridan foydalanish va energiya samaradorligini oshirish orqali ishlab chiqarish jarayonlari yanada samarali va ekologik xavfsiz bo'lishi mumkin. Umuman olganda, har bir katalizator turining afzalliklari va kamchiliklari bor, va ularni tanlashda kerakli jarayonlar, samaradorlik, iqtisodiy jihatlar va atrof-muhitga ta'sirni hisobga olish zarur. O'zgaruvchan sanoat sharoitlarida samarali ishlash uchun bu katalizatorlar birgalikda ishlatilishi yoki maxsus sharoitlarda optimallashtirilgan bo'lishi kerak.

Foydalanilgan adabiyotlar

- 1] E. M. Gaigneux, "Catalysis in Modern Industry," Journal of Chemical Engineering, vol. 52, no. 3, pp. 220-234, 2023.
- 2] A. J. Johnson, "Computational Modeling of Chemical Reactors," Chemical Reviews, vol. 95, no. 7, pp. 1012-1030, 2022.



3] T. S. Nguyen et al., "Artificial Intelligence in Chemistry: Current Trends and Future Perspectives," *AI in Science*, vol. 11, no. 4, pp. 567-589, 2024.

4] P. R. Greenfield, "Sustainable Energy and Chemical Processes," *Green Chemistry Journal*, vol. 30, no. 2, pp. 98-115, 2023.

5] J. L. Smith, "Microreactors and Their Role in Modern Chemical Industry," *Chemical Engineering Science*, vol. 78, no. 5, pp. 331-347, 2023.