

*Химические науки***ГАЗОВЫЕ ГИДРАТЫ И ИХ СВОЙСТВА**

<sup>1</sup>Макитова Д.Д., <sup>2</sup>Нагаев В.Б., <sup>1</sup>Шомахов И.В.

<sup>1</sup>*Кабардино-Балкарский государственный аграрный университет, г. Нальчик, Россия;*

<sup>2</sup>*Российский государственный университет нефти и газа, г. Москва, Россия*

При определенных температурах и давлении из воды и природного газа образуются газовые гидраты, представляющие собой кристаллические вещества, описываемые формулой  $N \cdot n \cdot H_2O$ , где  $N$  – молекула газа,  $n$  – число молекул воды в кристалле гидрата. К физически связанной воде обычно относят гигроскопическую воду, которая в виде молекул сконцентрирована на поверхности частиц породы и удерживается молекулярными силами. Как правило, чем меньше размер частиц породы, тем больше связанной воды находится в ней. С возрастанием глубины залегания появляется все больше веществ, в составе которых присутствует химически связанная вода. Динамика и состав таких кристаллогидратов, как правило, обусловлены геологическими и тектоническими особенностями горизонтов, компонентами которых они являются.

Наличие кристаллогидратной воды в составе различных газов может быть весьма значительным, поскольку с повышением давления возрастает и растворимость газов. Для таких глубоких газоносных горизонтов характерно содержание воды в сероводороде, метане и углекислом газе. Нередко, на значительных глубинах, отмечается содержание воды и в составе водорода, причем в значительных объемах.

Гидраты природных газов относят к клатратным соединениям, т.е. соединениям включения, поскольку внутрь полиэдрического каркаса могут проникать молекулы газа — «молекулы гости», которые связываются со структурой «хозяина» межмолекулярными взаимодействиями, в частности, образованием межмолекулярных водородных связей [1].

В таких кристаллогидратах, вследствие амбидентного характера молекул воды, проявляющегося в их способности выступать как электрон-донора, так и донора протона, в образовании связей вовлекаются как атомы кислорода — координация к катионам, так и атомы водорода — образование межмолекулярных водородных связей.

Для указанного типа взаимодействий характерно формирование межмолекулярных контактов типа  $O - H \dots R$  ( $R$  = азот, фтор, кислород) и

участие в формировании координационных полиэдров других атомов. Молекулы воды в таких структурах стремятся давать локальные фрагменты с атомами или ионами основного соединения, в состав которого они включаются.

Прецизионными рентгеноструктурными исследованиями, позволяющими локализовать положение атомов водорода с высокой степенью точности, установлено, что при небольших отрицательных и невысоких положительных температурах, молекулы воды, содержащиеся в органических клатратных соединениях, могут образовывать полиэдрические структуры, характеризующиеся наличием межмолекулярных  $H$ -связей.

Следует отметить, что энергия межмолекулярной водородной связи (20-40 кДж/моль), по крайней мере, на порядок меньше энергии ковалентных взаимодействий. Соответственно, невелики и те изменения в распределении электронной плотности, которые возникают вследствие образования водородной связи. Тем не менее, прецизионные рентгеноструктурные исследования позволяют такие изменения фиксировать и получать ценную информацию о природе и проявлениях  $H$ -связей [2].

Взаимодействие атомов, участвующих в  $H$ -связи и составляющих так называемый  $H$ -комплекс, в принципе включает в себя следующие эффекты: электростатическое взаимодействие, поляризацию, перенос заряда, обменное и дисперсионное взаимодействия.

Электростатическое взаимодействие представляет собой кулоновское взаимодействие зарядов, без какого бы то ни было их перераспределения. Поляризация и перенос заряда — эффекты, обусловленные перераспределением электронной плотности внутри взаимодействующих молекул и между ними, соответственно. Обменное взаимодействие представляет собой, в данном случае, отталкивание и отражает ограничения, налагаемые на электронное строение молекул принципом Паули. Дисперсионный вклад возникает как следствие корреляции электронов во взаимодействующих молекулах.

На рис. 1 показано распределение электронной плотности формальдегид – вода. В данном случае, именно поляризация стабилизирует  $H$  – связь данного типа. Таким образом, эффект образования  $H$ -связи, по существу, сводится к увеличению полярности функциональных групп, присутствующих в изолированных молекулах.

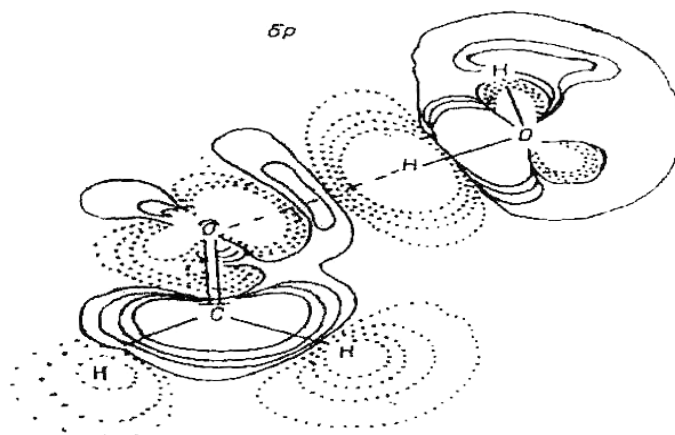


Рис.1 Суммарное распределение деформационной электронной плотности для системы формальдегид – вода

Рентгеноструктурными исследованиями установлено, что при небольших отрицательных и при невысоких положительных температурах молекулы воды могут образовывать полиэдрические структуры. В таких структурах имеются полости, размеры которых значительно больше расстояний между молекулами воды в обычной гексоганальной структуре льда. Внутри полиэдрического каркаса могут проникать молекулы

газов, которые связаны с каркасом «хозяина» Ван-дер-Ваальсовскими силами.

На рис.2 приведены энергетически наиболее выгодные, т.е. устойчивые кристаллические структуры гидратов. В вершинах этих многогранников находятся атомы кислорода, а ребрам соответствуют водородные связи. Полости таких структур могут занимать как небольшие по размерам молекулы —  $\text{CH}_4$ ,  $\text{Ar}$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ , так и крупные —  $\text{C}_2\text{H}_6$ ,  $\text{C}_4\text{H}_{10}$ .

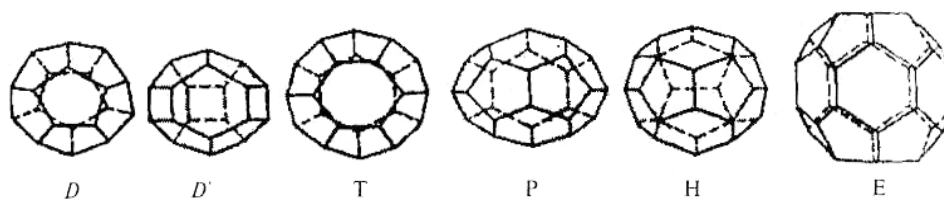


Рис. 2. Полиэдрические каркасы молекул воды:  $D, D'$  – двадцатигранники;  $T, P, H, E$  – 14-, 15-, 16- и 20-гранники, соответственно.

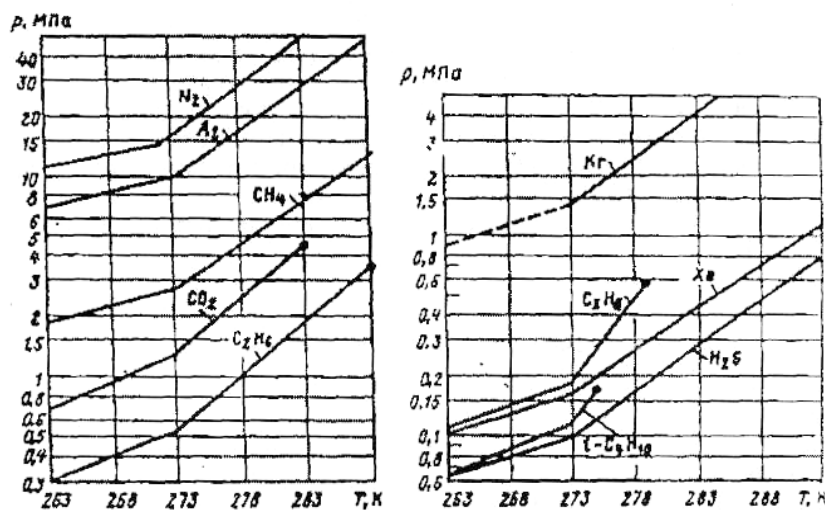


Рис. 3 Условия образования гидратов некоторых газов

На рис.3 приведены графики устойчивого образования гидратов некоторых газов.

Исследование структуры гидратированных соединений может внести большую ясность о поведении ионов или молекул изучаемых веществ, поскольку их физические свойства могут быть правильно интерпретированы только в зависимости от их строения, в особенности, от расположения молекул воды и способа их связи с молекулами изучаемых соединений. Особенности структуры веществ проявляются на их

механических, электрических и термических свойствах, что является прямым следствием расположения молекул воды и способа их связи с фрагментами структуры.

#### Список литературы

1. Антипов В.И., Нагаев В.Б., Седых А.Д. Физические процессы нефтегазового производства -М.: Недра, 1998.-373 с.
2. Цирельсон В.Г., Зоркий П.М. Итоги науки и техники, серия Кристаллохимия - М.: 1986 - Т.20 -261 с.

#### Экономические науки

УДК 005.5

#### ОПТИМАЛЬНОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ ВЫПУСКА ПРОДУКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ РЕСУРСОВ ДЛЯ ВЫПОЛНЕНИЯ КОМПЛЕКСА ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНО ВЗАИМОСВЯЗАННЫХ РАБОТ (МНОГОМЕРНЫЙ СЛУЧАЙ)

<sup>1</sup>Ташев А.А., <sup>2</sup>Балабекова М.Ж.

<sup>1</sup>КазАТУК, Алматы, Казахстан,  
e-mail: azattash@mail.ru;

<sup>2</sup>КазАТУСО, Алматы, Казахстан,  
e-mail: Maskura2012@mail.ru

Одной из наиболее важных задач, возникающих в различных областях человеческой деятельности (технической, экономической, организационной и др.) является проблема распределения и перераспределения ресурсов, причем оптимальным образом [1,2].

Данная работа посвящена распределению ресурсов, когда выполняемые работы являются взаимосвязанными.

Рассмотрим комплекс взаимосвязанных работ, состоящий из  $m$  узлов показанный на рисунке 1.

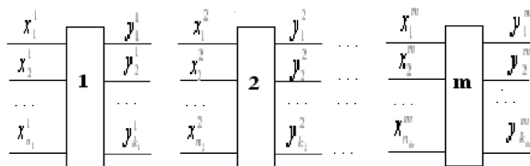


Рисунок 1. Комплекс взаимосвязанных работ

Выходы каждого узла распределяются между входами последующего узла. Входы первого узла  $\bar{x}^1 = (x_1^1, x_2^1, \dots, x_{n_1}^1)$ , второго узла  $\bar{x}^2 = (x_1^2, x_2^2, \dots, x_{n_2}^2)$  и т.д.  $m$ -го узла  $\bar{x}^m = (x_1^m, x_2^m, \dots, x_{n_m}^m)$ . Выходы узлов определяются переменными  $\bar{y}^1 = (y_1^1, y_2^1, \dots, y_{k_1}^1)$ ,  $\bar{y}^2 = (y_1^2, y_2^2, \dots, y_{k_2}^2)$ , ...,  $\bar{y}^m = (y_1^m, y_2^m, \dots, y_{k_m}^m)$ , соответственно.

Предположим, что выход каждого  $i$ -го узла зависит от входа  $i$ -го узла линейно, а именно

$$\bar{y}^i = A^i \bar{x}^i, \quad i = 1, \dots, m, \quad (1)$$

где

$$A^i = \begin{bmatrix} a_{11}^i & a_{12}^i & \dots & a_{1n_i}^i \\ a_{21}^i & a_{22}^i & \dots & a_{2n_i}^i \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{k_i 1}^i & a_{k_i 2}^i & \dots & a_{k_i n_i}^i \end{bmatrix}, \quad i = 1, \dots, m.$$

Допустим также, что выходы каждого  $i$ -го узла линейно распределяются между входами  $i+1$ -го узла, то есть

$$\bar{x}^i = B^i \bar{y}^{i-1}, \quad i = 2, \dots, m, \quad (2)$$

где

$$B^i = \begin{bmatrix} b_{11}^i & b_{12}^i & \dots & b_{1k_{i-1}}^i \\ b_{21}^i & b_{22}^i & \dots & b_{2k_{i-1}}^i \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_{n_i 1}^i & b_{n_i 2}^i & \dots & b_{n_i k_{i-1}}^i \end{bmatrix}, \quad i = 2, \dots, m.$$

Тогда воспользуясь (1) и (2) для  $\bar{y}^m$  имеем

$$\begin{aligned} \bar{y}^m &= A^m \bar{x}^m = A^m B^m \bar{y}^{m-1} = A^m B^m A^{m-1} \\ & B^{m-1} \bar{y}^{m-2} = \\ &= A^m B^m A^{m-1} B^{m-1} \dots A^2 B^2 A^1 \bar{x}^1. \end{aligned} \quad (3)$$

Если обозначим через  $A = A^m B^m A^{m-1} B^{m-1} \bar{y}^{m-2} = A^m B^m A^{m-1} B^{m-1} \dots A^2 B^2 A^1$ , то (3) имеет вид

$$\bar{y}^m = A \bar{x}^1. \quad (4)$$

Определим теперь затраты на приобретения входного продукта  $\bar{x}^1$ :

$$Z_1 = \bar{z}^1 \bar{x}^1, \quad (5)$$

где  $\bar{z}^1 = (z_1^1, z_2^1, \dots, z_{n_1}^1)$ ,  $z_i^1$  -затраты на приобретение единицы  $x_i^1$ -ой продукции.

Затраты на производства продукции  $\bar{y}^i$  в линейном случае определяется как

$$Z_2 = \sum_{i=1}^m \bar{q}^i \bar{y}^i, \quad (6)$$