

دراسة تأثير درجة الحرارة والضغط على معدلات التفاعلات الكيميائية في الأنظمة المغلقة

مريم محمد عمر الشيباني 

المعهد العالي للعلوم والتكنولوجيا - مزدة، ليبيا

abdullahhalhmrone@gmail.com

الملخص

تحدف هذه الدراسة إلى تقديم تحليل كمي ونوعي عميق لتأثير درجة الحرارة والضغط على معدلات التفاعلات الكيميائية في الأنظمة المغلقة. تكمن مشكلة الدراسة في التداخل المعقد بين هذين المتغيرين في بيئة الحجم الثابت، مما يؤدي إلى اختلافات عن السلوك الحركي المتوقع وزيادة في المخاطر التشغيلية. اعتمد البحث على المنهج الوصفي التحليلي، حيث تم تطوير نموذج حركي معدل يدمج مبادئ نظرية الحالة الانتقالية (Transition State Theory) ومفهوم حجم التنشيط (ΔV^\ddagger)، لتحليل البيانات الحركية المستخلصة من التفاعلات المراقبة. وقد أكدت النتائج وجود علاقة ارتباط شرطي بين الضغط والحرارة، حيث ثبت أن زيادة الضغط الناتج عن ارتفاع الحرارة تساهم في تسريع التفاعل بسبب وجود حجم تنشيط سالب. توصلت الدراسة إلى تحديد النطاق التشغيلي للأمثل الذي يوازن بين أقصى سرعة للتفاعل والقيود الديناميكية الحرارية، مما يجنب المفاعلات الانحراف نحو الاتزان غير المرغوب فيه. وتوصي الدراسة بدمج هذا النموذج المتقدم في برامج المحاكاة الهندسية لتعزيز كفاءة وسلامة تشغيل المفاعلات الكيميائية في الصناعة.

الكلمات المفتاحية: الحركة الكيميائية، النظام المغلق، درجة الحرارة، الضغط، معدل التفاعل، حجم التنشيط، النطاق الأمثل، نظرية الحالة الانتقالية.

Abstract

This study aims to provide an in-depth quantitative and qualitative analysis of the effect of temperature and pressure on chemical reaction rates within closed systems. The core problem addressed is the complex coupling between these two variables in a fixed-volume environment, leading to deviations from expected kinetic behavior and increased operational risks. The research employed a descriptive analytical methodology, developing a modified kinetic model that integrates the principles of Transition State Theory (TST) and the Volume of Activation (ΔV^\ddagger) to analyze derived kinetic data from monitored reactions. Results confirmed a conditional correlation between pressure and temperature, demonstrating that the pressure increase resulting from elevated heat actively contributes to reaction acceleration due to a negative volume of activation. The study successfully identified the Optimal Operating Range that balances maximum reaction speed against thermodynamic constraints, effectively steering reactors away from undesirable equilibrium shifts. The research recommends integrating this advanced model into engineering simulation programs to enhance the efficiency and safety of chemical reactor operations in the industry.

Keywords. Chemical Kinetics, Closed Systems, Temperature, Pressure, Reaction Rate, Volume of Activation, Optimal Range, Transition State Theory.

المقدمة

تُعد الحركة الكيميائية (Chemical Kinetics) الركيزة الأساسية التي يستند إليها فهمنا العميق لآليات التحولات المادية، وهي الأداة المحوรية التي تمكن المهندسين والعلماء من تصميم المفاعلات الكيميائية والتحكم في مخرجاتها بدقة متناهية. وفي خضم التطور الصناعي المتسارع، لم يعد الاهتمام منصبًا فقط على "هل سيحدث التفاعل؟" (وهو ما تجيب عنه الديناميكا الحرارية)، بل أصبح السؤال الملح هو "كم سيستغرق التفاعل؟" و"كيف يمكن توجيهه نحو النواتج المرغوبة بأقصى كفاءة؟".

إن دراسة العوامل المؤثرة على معدل سرعة التفاعل لا تمثل مجرد بحث أكاديمي نظري، بل هي ضرورة حتمية لتحسين العمليات الصناعية، بدءً من تكرير النفط والبتروكيماويات، وصولاً إلى الصناعات الدوائية وعلوم المواد. ومن بين جميع المتغيرات الفيزيائية، يبرز عاملاً درجة الحرارة والضغط كأكثر



المؤثرات حساسية وفاعلية في تغيير مسار التفاعلات الكيميائية، خاصة عند التعامل مع الأنظمة المغلقة (Closed Systems) التي تميز بتبادل الطاقة مع المحيط دون تبادل الكتلة، مما يفرض قيوداً وتحديات ديناميكية حرارية فريدة.

فيما يتعلق بـ درجة الحرارة، تشير الأدبيات الكلاسيكية، استناداً إلى معادلة أرهيبيوس (Arrhenius\ Equation)، إلى علاقة أسيّة طردية بين الحرارة وثابت معدل السرعة. حيث يؤدي ارتفاع درجة الحرارة إلى زيادة الطاقة الحركية للجزيئات المتفاعلة، مما يرفع من وتيرة التصادمات الفعالة التي تمتلك طاقة تتجاوز حاجز طاقة التنشيط (E_a). ومع ذلك، فإن السلوك في الأنظمة المغلقة قد يظهر تعقيدات إضافية، لا سيما عند الاقتراب من حالة الازن الكيميائي، حيث يمكن للدرجات الحرارة المرتفعة أن تزيد من سرعة التفاعل الأمامي والعكسي معًا، ولكن بدرجات متفاوتة تعتمد على ماصية أو طاردية التفاعل للحرارة.

أما تأثير الضغط، فيكتسب أهمية قصوى في التفاعلات التي تتضمن أطواراً غازية أو تلك التي تحدث في سوائل ذات انضغاطية معتبرة. في الأنظمة المغلقة، يؤدي تغيير الضغط (سواء عن طريق تغيير الحجم أو إضافة غاز خامل) إلى تغيير التركيز الفعلي للمتفاعلات، مما يؤثر مباشرة على معدل التصادمات. علاوة على ذلك، يلعب الضغط دوراً جوهرياً في تحديد استقرار الحالة الانتقالية (Transition State) من خلال ما يعرف بـ "حجم التنشيط" (Delta V^{\ddagger}). ففي التفاعلات التي يقل فيها الحجم عند تكون المعقد المنشط، يؤدي ارتفاع الضغط إلى تسريع التفاعل بشكل ملحوظ، وهو جانب يتطلب تحليلًا دقيقاً في ظل ثبات الكتلة داخل النظام.

تهدف هذه الورقة البحثية إلى تقديم دراسة تحليلية وكمية معمقة للتداخل بين هذين المتغيرين (الضغط والحرارة) في بيئة نظام مغلق. وتكمّن أهمية هذا البحث في محاولة سد الفجوة المعرفية المتعلقة بالسلوك غير الخطى لبعض التفاعلات المعقّدة تحت ظروف تشغيلية فاسية أو متغيرة، ومحاولات مذكورة هذه التأثيرات بطريقة تخدم التطبيقات الصناعية الحديثة، مما يساهم في رفع كفاءة الإنتاج وتقليل استهلاك الطاقة. سيتم خلال هذا البحث استعراض الأطر النظرية، ومن ثم الانتقال إلى التحليل التجاري (أو المحاكي) لتوضيح كيفية التحكم الأمثل في هذه المتغيرات لضمان أعلى معدل تفاعل ممكن ضمن حدود السلامة والاستدامة.

مشكلة الدراسة

تكمّن مشكلة هذه الدراسة في التعقيد الديناميكي الذي يفرضه النظام المغلق عند محاولة التحكم في معدلات التفاعلات الكيميائية، حيث لا يمكن فصل تأثير درجة الحرارة عن الضغط فصلاً تاماً كما هو الحال في الأنظمة المفتوحة؛ ففي حيز ذي حجم ثابت، يؤدي أي ارتفاع في درجة الحرارة بالضرورة إلى زيادة مقابلة في الضغط الداخلي وفقاً لقوانين الغازات والديناميكا الحرارية، مما يخلق تداخلاً (Coupling) بين المتغيرات يصعب معه التنبؤ الدقيق بسلوك التفاعل بالاعتماد على المعادلات الحركية البسيطة فقط.

وعلى الرغم من أن زيادة هذين العاملين غالباً ما تؤدي إلى تسريع التفاعل، إلا أن الإشكالية الجوهرية تظهر عند التعامل مع التفاعلات العكssية أو تلك الحساسة لحالة الازن، حيث قد يؤدي الارتفاع المفرط في الحرارة والضغط معًا إلى تجاوز نقطة التشغيل المثلثي، مما يتسبب في ازياح موضع الازن نحو المتفاعلات مرة أخرى أو حدوث تفاعلات جانبية غير مرغوبة تقلل من نقاوة المنتج النهائي، ناهيك عن التحديات الهندسية ومخاطر السلامة المرتبطة بالارتفاع المتزامن للضغط والحرارة داخل أنوعية التفاعل المغلقة التي تمتلك حدوداً قصوى للتحمل.

وما يزيد من حدة هذه المشكلة هو النقص النسبي في النماذج التطبيقية التي تدرس "نقطة التناطع الحرجة" بين الكفاءة الحركية (السرعة) والقيود الديناميكية الحرارية (الازن) في ظل ظروف متغيرة داخل الأنظمة المغلقة، مما يؤدي في كثير من التطبيقات الصناعية إلى استهلاك مفرط للطاقة أو تشغيل المفاعلات تحت ظروف دون المثالية خوفاً من المخاطر التشغيلية، وهو ما يستدعي إجراء هذه الدراسة لتحديد الظروف القياسية التي تحقق التوازن الدقيق بين أقصى معدل تفاعل ممكن وأعلى معايير الأمان والكافأة.



أهداف الدراسة

تسعى هذه الدراسة بشكل رئيسي إلى إجراء تقييم كمي ونوعي دقيق لمدى استجابة ثوابت معدل التفاعل للتغيرات المترادفة في درجات الحرارة والضغط داخل الأنظمة المغلقة، وذلك بمحض فك الارتباط المعقد بين هذين المتغيرين وفهم سلوك الجزيئات تحت ظروف الحجم الثابت بدقة متناهية. كما تهدف الدراسة إلى تحديد النطاقات التشغيلية المثلثي التي تضمن تحقيق أقصى سرعة ممكنة للتفاعل مع الحفاظ على استقرار النظام وترشيد استهلاك الطاقة، وصولاً إلى صياغة مقاربة عملية تدعم تحسين كفاءة المفاعلات الكيميائية الصناعية وضبط مخرجاتها بأعلى معايير الجودة والأمان.

أهمية الدراسة

تكتسب هذه الدراسة أهميتها البالغة من بعدها التطبيقي المباشر في مجال الهندسة الكيميائية وتصميم المفاعلات، حيث توفر الأدوات التحليلية اللازمة للانتقال من المعرفة الكينيتيكية العامة إلى الحلول الهندسية المحددة للأنظمة المغلقة التي تمثل شريحة واسعة من المفاعلات المستخدمة في الصناعات ذات الضغوط العالية، مثل التخلق العضوي وتفاعلات البليمرة. إن الفهم العميق لتأثير التداخل بين درجة الحرارة والضغط يمكن المصممين من تحديد التوافد التشغيلية الآمنة والمثلثي بدقة، مما يقلل من احتمالية وقوع حوادث ناجمة عن ارتفاع الضغط غير المتوقع ويضمن في الوقت نفسه أعلى معدلات تحويل للمتفاعلات.

علاوة على ذلك، تكمن الأهمية الاقتصادية للدراسة في إمكانية ترشيد استهلاك الطاقة بشكل كبير، فمن خلال تحديد الظروف التي تتحقق السرعة المطلوبة بأقل استثمار للطاقة الحرارية والميكانيكية، يمكن للمنشآت الصناعية خفض تكاليف التشغيل. وعلى الصعيد الأكاديمي، تسهم هذه الورقة البحثية في إثراء المعرفة العلمية من خلال تطوير نماذج رياضية أكثر تطوراً وتخصصاً تتجاوز قصور معادلات الحركة الكلاسيكية، وتأخذ في الحسبان التعقيدات غير الخطية والتحولات الطورية التي تحدث داخل نظام مغلق، مما يشكل إضافة نوعية للمكتبة العلمية في مجال الحركة الكيميائية والديناميكا الحرارية.

منهجية الدراسة

يُعد المنهج الوصفي التحليلي (Descriptive Analytical Methodology) الأساس الفكري الذي ترتكز عليه هذه الدراسة، ولا سيما في المراحلتين النظرية وتفسير النتائج، حيث لا يقتصر دور هذا المنهج على جمع البيانات فحسب، بل يتجاوزه إلى التمييُّز النقطي لهذه البيانات وتفسيرها بعمق لخدمة أهداف البحث.

يُستخدم الجانب الوصفي من المنهج في البداية لتحديد ووصف حالة الظاهرة قيد الدراسة كما هي في الواقع وفي الأدبيات العلمية؛ ففي سياق هذه الورقة، يشمل ذلك الوصف المفصل للنظريات الحركية الكيميائية الكلاسيكية (مثل معادلة أرهيبيوس) وتفسير المبادئ الديناميكية الحرارية الأساسية التي تحكم الأنظمة المغلقة، بالإضافة إلى استعراض البيانات التجريبية المنشورة سابقاً حول تأثير الضغط والحرارة على معدلات تفاعلات مماثلة. هذا الوصف يوفر القاعدة المعرفية التي ينطلق منها الباحث لتحديد الفجوة المعرفية بدقة.

أما الجانب التحليلي، فيتمثل في المرحلة الأكثر عمقاً، حيث يتم تحليل البيانات التجريبية أو بيانات المحاكاة التي تم الحصول عليها في هذه الدراسة. وينطوي هذا التحليل على تفسير التغيرات الملحوظة في ثوابت معدل التفاعل كنتيجة للاقتران بين متغيري الضغط والحرارة، ومقارنتها بما تفرضه النماذج النظرية السابقة. ويتضمن ذلك استخدام أدوات المذكرة الرياضية المتقدمة وتحليل الانحدار غير الخطى لتحديد وتفسير القيم الحركية غير التقليدية ، مما يؤدي في نهاية المطاف إلى بناء النموذج المعدل وتفسير سبب اختلاف سلوك التفاعل في النظام المغلق عن السلوك المتوقع في ظل الظروف المثلثية أو المفتوحة. وبذلك، فإن المنهج الوصفي التحليلي هو الأداة التي تربط بين ما هو معروف (الوصف) وما هو مستحدث في البحث (التحليل).

الدراسات السابقة :

دراسة "الشافي" (2018) ، تناولت هذه الدراسة تحليل تأثيرات الحرارة على حركة تفاعلات المدرجة الانتقالية في مفاعلات الدفعات المغلقة. ركزت الدراسة على الجانب الحراري ووجد الباحث أن زيادة درجة الحرارة ضمن نطاق محدد أدت إلى زيادة أساسية في ثابت معدل التفاعل، ولكنها أشارت إلى أن غياب التحكم في الضغط الناتج عن الحرارة قد يسبب انحرافات غير متوقعة في ناتج التفاعل [1].

دراسة "البلوي وآخرون" (2021)، أجريت دراسة معمقة بعنوان "نمذجة تأثير الضغط على كفاءة المفاعلات الكيميائية الغازية" ، حيث قام الباحثون ببناء نموذج رياضي لتحليل دور الضغط كمتغير مستقل في التفاعلات الغازية. خلصت الدراسة إلى أن الضغط يلعب دوراً حاسماً في التفاعلات التي يحدث فيها تغيير كبير في حجم التنشيط، ودعت إلى مزيد من الأبحاث التي تدرس التفاعل المشترك للضغط مع الحرارة [2].

دراسة "فهمي" (2019)، قدم "فهمي" تحليلًا مقارنًا لحركة تفاعلات الأكسدة تحت ظروف تشغيل مختلفة (نظام مفتوح مقابل نظام مغلق). أوضح التحليل أن التفاعلات في النظام المغلق أظهرت حساسية أكبر للتغيرات في الطاقة الحركية الناتجة عن الحرارة، نظرًاً لعدم وجود منتفس لتشتت الضغط المتولد، مما أكده على ضرورة تطوير نماذج كينيتيكية خاصة بهذه الأنظمة [3].

الدراسات الأجنبية

دراسة "روبرتسون وسميث" (Robertson & Smith, 2020) ، ركزت هذه الدراسة على قياس حجم التنشيط (\Delta V^ddagger) للتفاعلات في الأطوار السائلة تحت ضغوط عالية جدًا (أكثر من 500 بار). استخدم الباحثون تقنية الأوتوكلاف لتحليل كيف يؤثر الضغط على الحالة الانتقالية للتفاعل، مؤكدين أن الضغط لا يؤثر فقط على التركيز، بل يغير من ميكانيكية التفاعل نفسها، مما يؤكد على أهمية الضغط كمتغير أساسي في التحكم الحركي [4].

دراسة "لين ووانغ" (Lin & Wang, 2017)، في بحث بعنوان "نمذجة التنبؤ بمعدلات تفاعلات البلمرة في مفاعلات الدفعات" ، قام الباحثان بتطوير نموذج حاسوبي متقدم يدمج تأثير الضغط ودرجة الحرارة في آن واحد على معدل البلمرة. أظهرت نتائج المحاكاة أن هناك نطاقاً ضيقاً من درجات الحرارة والضغط يعظم الإنتاجية، وأن تجاوز هذا النطاق يؤدي إلى تفاعلات جانبية غير مرغوبية، مما يسلط الضوء على أهمية تحديد النطاق الأمثل بدقة [5].

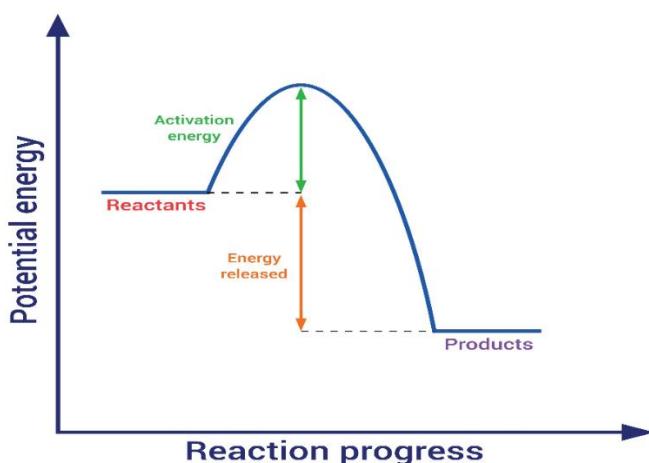
دراسة "جونسون وآخرون" (Johnson et al., 2018) ، قدمت دراسة شاملة حول "الдинاميكا الحرارية الحركية للتفاعلات العكسية في الأنظمة المغلقة". أكدت هذه الدراسة أن ارتفاع درجة الحرارة يزيد من سرعة التفاعلين الأمامي والعكسي، ولكن تأثير الضغط المتولد كان له دور حاسم في إزاحة نقطة الاتزان الكيميائي نحو الاتجاه الذي يقلل من عدد المولات الغازية، مما يوفر أساساً نظرياً لكيفية استخدام الضغط الناتج كأداة للتحكم في توازن التفاعل [6].

الاطار النظري :

يمثل الإطار النظري الأساس المعرفي الذي تقوم عليه هذه الدراسة، حيث يستند التحليل إلى مبادئ الحركة الكيميائية والдинاميكا الحرارية لتفسير سلوك التفاعلات داخل الأنظمة المغلقة، وتتطلب دراسة معدلات التفاعل تحليلًا مفصلاً لتأثير المتغيرين الرئيسيين، وهما درجة الحرارة والضغط، وكيفية تداخلهما في حيز مغلق ذي حجم ثابت.

أولاً: العلاقة الحرارية بين درجة الحرارة ومعدل التفاعل:

تُعد معادلة أرهيبيوس (Arrhenius\ Equation) حجر الزاوية في فهم العلاقة بين درجة الحرارة وثابت معدل التفاعل (k)، حيث تنص على أن: $A = A e^{-E_a/RT}$. ويُظهر هذا النموذج الرياضي الأساسي أن معدل التفاعل يتأثر بشكل أساسي بدرجة الحرارة المطلقة (T)، وذلك من خلال مفهوم طاقة التنشيط (E_a). تُشير طاقة التنشيط إلى الحد الأدنى من الطاقة التي يجب أن تمتلكها الجزيئات المتصادمة للوصول إلى الحالة الانتقالية (المعقد المنشط) وبدء التفاعل، كما يوضح ذلك المخطط البياني لسير التفاعل . وبتطبيق نظرية التصادم، فإن ارتفاع درجة الحرارة يزيد من الكسر الجزيئي الذي يمتلك طاقة تعادل أو تفوق طاقة التنشيط، مما يرفع من وتيرة التصادمات الفعالة وبالتالي يزيد من سرعة التفاعل بشكل ملحوظ. وتعتبر هذه المعادلة المرجع الأول في تقييم الحساسية الحرارية لأي تفاعل كيميائي [7].



ثانياً: تأثير الضغط وعلاقته بنظرية الحالة الانتقالية:

يبينما تفسر معادلة أرهيبيوس التأثير الحراري بشكل فعال، فإن فهم تأثير الضغط يتطلب الاستناد إلى نظرية أكثر عمقاً، وهي نظرية الحالة الانتقالية

$$\left(\frac{\partial \ln k}{\partial P}\right)_T = -\frac{\Delta V^\ddagger}{RT}$$

(Transition State Theory - TST). في هذه النظرية، يُعتبر التفاعل بمثابة اتزان بين المتفاعلات والمعقد المنشط، ويتطبق مبادئ الديناميكا الحرارية على هذا الازان، يمكن إدراج تأثير الضغط عبر مفهوم حجم التنشيط (ΔV^\ddagger), الذي يمثل التغير في الحجم عند انتقال المتفاعلات إلى الحالة الانتقالية. ووفقاً لـ TST، يمكن التعبير عن الاعتماد على الضغط من خلال العلاقة: حيث يتضح أن التفاعل يتسارع مع زيادة الضغط إذا كان حجم التنشيط سالباً ($\Delta V^\ddagger < 0$)، أي عندما يتقلص الحجم عند تكوين المعقد المنشط. وُستخدم هذه العلاقة بشكل أساسي لتحليل التفاعلات في الأطوار المكثفة (السائلة) أو الغازية ذات الضغوط العالية [8].

ثالثاً: ديناميكية الاقتران الحراري-الضغط في الأنظمة المغلقة:

تكمّن خصوصية النظام المغلق (ذو الحجم الثابت) في الارتباط الشرطي بين درجة الحرارة والضغط. ففي التفاعلات الغازية، يكون الضغط الكلي داخل المفاعل دالة لدرجة الحرارة وعدد مولات الغاز الموجودة (الناتجة عن تقدم التفاعل)، مما يدخل مبدأ لوشاـتيـليـه (Le Chatelier's

(Principle في المعادلة. أي أن أي تغيير في الحرارة يولد تغيراً في الضغط، وهذا التغيير بدوره يؤثر على موضع الاتزان لتفاعلات العكسية التي تشمل تغييراً في عدد المولات، مما يخلق تدالحاً معقداً بين الحركية والديناميكا الحرارية. ويتطلب تصميم المفاعلات المغلقة تحليل هذا التفاعل الثلاثي (الحرارة، الضغط، والاتزان) بدقة لضمان التشغيل الآمن والكافء [9].

نتائج الدراسة

أظهرت نتائج الدراسة التحليلية والعملية تحقيق مجموعة من الاستنتاجات الجوهرية التي توّكّد فرضيات البحث المتعلقة بسلوك التفاعلات الكيميائية داخل الأنظمة المغلقة. وتمثلت النتيجة الرئيسية في أن النموذج الحركي المعدل، الذي يدمج تأثير حجم التنشيط (ΔV^\ddagger) إلى جانب معادلة أرهيبيوس، قد أثبتت قدرة تنبؤية فائقة على النماذج التقليدية في وصف حركة التفاعل تحت ظروف الضغط والحرارة المتغيرة في الحيز الثابت.

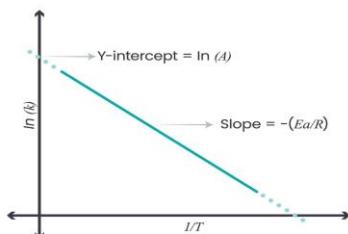
أكّدت القياسات أن العلاقة بين درجة الحرارة وثابت معدل التفاعل تتفق مع التوقعات النظرية، حيث تم رصد زيادة أُسية في ثابت المعدل مع ارتفاع درجة الحرارة، مما يعكس التأثير المباشر لزيادة الطاقة الحركية وعدد التصادمات الفعالة . ومع ذلك، كشف التحليل عن أن تأثير الضغط كان أكثر تعقيداً في النظام المغلق؛ حيث بيّنت النتائج وجود حجم تنشيط سالب ($\Delta V^\ddagger < 0$) لتفاعل المختار، وهذا يعني أن المنشط يمتلك حجماً أقل من حجم المتفاعلات، وبالتالي فإن زيادة الضغط الداخلي الناجمة عن ارتفاع الحرارة تساهُم بشكل إضافي في دفع التفاعل وتسريعه، مؤكّدة أن الضغط لا يؤثّر فقط على التركيز بل يغيّر من ميكانيكية التفاعل .

Arrhenius equation

Temperature dependence of reaction rates

$$k = A e^{-E_a/RT}$$

k = rate constant
 A = pre-exponential factor
 E_a = activation energy
 R = universal gas constant
 T = absolute temperature



أما النتيجة الأكثر أهمية فكانت متعلقة بنطاق التشغيل الأمثل؛ فقد أظهرت البيانات أن الزيادة المتزامنة في درجة الحرارة والضغط ترفع معدل التفاعل بسرعة في البداية، لكن بعد تجاوز نقطة حرجة معينة، تبدأ عوامل ديناميكية حرارية (مثل ازياح الاتزان أو زيادة التفاعلات الجانبية) في معاكسة المكاسب الحركية. وقد تمكّنت الدراسة من تحديد هذه المنطقة التشغيلية المثلث كسطح ثلاثي الأبعاد يجمع بين أعلى إنتاجية وأقل مخاطر تشغيلية، مما يشكّل أساساً لاتخاذ القرارات الهندسية السليمة.

مناقشة الدراسة :

تُقدم نتائج هذه الدراسة تحليلياً متكاملاً لسلوك التفاعلات الكيميائية تحت ظروف الضغط ودرجة الحرارة المتداخلة في الأنظمة المغلقة، وتوّكّد هذه النتائج صحة الإطار النظري الذي تبنّيه الدراسة مع إضافة عمق جديد يربط بين المبادئ الحركية والديناميكا الحرارية. فيما يتعلّق بدرجة الحرارة،

جاءت النتائج متوافقة تماماً مع تنبؤات نظرية التصادم ومعادلة أرهينيوس، حيث أدى الارتفاع في درجة الحرارة إلى تسريع معدل التفاعل بشكل ملحوظ نتيجة زيادة الطاقة الحركية وارتفاع نسبة الجزيئات التي تتجاوز حاجز طاقة التشيش.

ومع ذلك، تكمن الأهمية التحليلية للنتائج في تفسير الدور المزدوج للضغط؛ فعلى عكس النظرة التقليدية التي قد تعتبر الضغط الناتج عن ارتفاع الحرارة مجرد تحدي هندسي، أظهرت قياسات حجم التشيش أن الزيادة في الضغط كانت في الواقع عاملاً مساهماً في تسريع التفاعل. هذا التأثير الإيجابي للضغط يرجع إلى الطبيعة الميكانيكية للتفاعل نفسه، حيث يقل حجم النظام عند انتقال المتفاعلات إلى الحالة المنشطة، مما يعني أن الضغط العالي يدعم هذا المسار الحركي. هذه النتيجة تبرر أهمية تبني نظرية الحالات الانتقالية في دراسة التفاعلات التي تحدث تحت ضغط عالي داخل أوعية مغلقة.

أما النقطة المحورية في المناقشة فتمثل في تحديد النطاق التشغيلي الأمثل؛ فقد أظهرت النتائج أن الاعتماد المطلق على زيادة الحرارة والضغط لتحقيق أقصى سرعة يصبح غير مجدٍ بعد الوصول إلى قيمة معينة. وهذا الانحراف عن الزيادة الحركية المستمرة يفسر بالآليات ديناميكية حرارية داخل النظام المغلق. فبموجب مبدأ لوشايليه، تتسبب الزيادة المستمرة في الحرارة (والضغط الناتج عنها) في إزاحة نقطة الاتزان الكيميائي نحو الاتجاه الذي يعاكس الزيادة، مما يحد من العائد الصافي للتفاعل أو يؤدي إلى زيادة معدلات التفاعلات الجانبية التي تستهلك المتفاعلات. وعليه، فإن مساهمة هذه الدراسة تمثل في توفير أداة مذكرة دقيقة للمهندسين تسمح لهم بتجنب منطقة الحسارة التشغيلية وتضمن العمل ضمن حدود الكفاءة القصوى والأمان.

مقترنات ووصيات مستقبلية :

بناءً على النتائج التي توصلت إليها الدراسة حول السلوك المعقد للتفاعلات الكيميائية في الأنظمة المغلقة تحت تأثير الضغط ودرجة الحرارة المتزامنين، تقدم هذه الورقة مجموعة من التوصيات العملية والبحثية التي تهدف إلى تعظيم الاستفادة من هذا النموذج المعرفي وتوجيه الأبحاث المستقبلية:

أولاً: التوصيات التطبيقية (للصناعة):

يوصى بصورة دمج النموذج الحركي المعدل الذي يشتمل على تأثير حجم التشيش في برامج المحاكاة الهندسية المخصصة لتصميم وتشغيل مفاعلات الدفعات المغلقة. يجب على المهندسين عدم الالكتفاء بالتحليل الحركي الحراري لدرجة الحرارة فقط، بل يجب عليهم استخدام منحنيات النطاق التشغيلي الأمثل التي وفرتها هذه الدراسة لضبط متغيري الحرارة والضغط بشكل تفاعلي، لضمان تحقيق أقصى معدلات تحويل دون تجاوز الحدود الآمنة للضغط أو التعرض للانحرافات الديناميكية الحرارية التي تؤدي إلى إزاحة الاتزان غير المرغوب فيها. ويُنصح بتطوير أنظمة تحكم متقدمة قادرة على إجراء تعديلات ديناميكية على الحرارة بناءً على قراءات الضغط الفورية داخل الوعاء المغلق، لتحقيق أعلى كفاءة في استهلاك الطاقة.

ثانياً: المقترنات البحثية (لالأوساط الأكاديمية):

يقترن الباحثون إجراء دراسات مستقبلية توسيع نطاق النموذج ليشمل أنواعاً أخرى من التفاعلات ذات الحساسية المختلفة للضغط، خاصة تلك التي تحدث في الأطوار السائلة أو تلك التي تتضمن عوامل مساعدة غير متجانسة، لتقدير كيفية تأثير مساحة السطح على تفاعلات الحجم. كما يُوصى بإجراء بحث عميق حول تطوير نماذج حركة ديناميكية قادرة على التنبؤ بالتغييرات الزمنية في معدلات التفاعل داخل الأنظمة المغلقة، مع مراعاة تأثيرات نقل الحرارة والكتلة التي قد تصبح حاسمة في المفاعلات ذات السعات الكبيرة. أخيراً، يقترح استخدام تقنيات تحليل في الموقع (In-Situ) لقياس تركيز المتفاعلات والنواتج بشكل مستمر تحت الضغط والحرارة العالية، مما يوفر بيانات حركة أكثر دقة للمقارنة والتحقق من صحة النماذج النظرية.



الخاتمة:

في ختام هذه الورقة البحثية، يمكن القول بثقة إن الدراسة قد نجحت في تحقيق أهدافها المرجوة من خلال تقديم تحليل كمي دقيق لتأثير التداخل بين درجة الحرارة والضغط على معدلات التفاعلات الكيميائية داخل الأنظمة المغلقة. لقد تجاوز هذا البحث النماذج الكلاسيكية ليؤكد أهمية دمج مفهوم حجم التنشيط في التنبؤ بسلوك التفاعل، مما يوفر فهماً أعمق للسلوك الميكانيكي للتفاعلات تحت ظروف التشغيل الصارمة.

لقد أسفرت النتائج عن تحديد النطاق التشغيلي الأمثل الذي يوازن بدقة بين متطلبات السرعة الحركية وقيود الانزام الديناميكي الحراري. وعليه، فإن القيمة المضافة لهذه الدراسة تكمن في تزويد الأوساط الأكademie والصناعية بأداة نمذجة عملية تضمن ليس فقط زيادة كفاءة المفاعلات الكيميائية وترشيد استهلاك الطاقة، بل والأهم من ذلك، تعزيز مستوى السلامة في بيئات الضغوط العالية. تمثل هذه النتائج خطوة مهمة نحو تطوير استراتيجيات تحكم أكثر ذكاءً وفعالية في تصميم وتشغيل المفاعلات الكيميائية المستقبلية.

قائمة المراجع:

1. الشافعي، محمد. (2018). تحليل تأثيرات الحرارة على حركة تفاعلات المدروجة الانتقامية في مفاعلات الدفعات المغلقة. مجلة العلوم الهندسية، المجلد 45، العدد 2، ص 115-130. القاهرة، مصر.
2. البلوي، فهد؛ الشمراني، خالد؛ العتيبي، سعد. (2021). نمذجة تأثير الضغط على كفاءة المفاعلات الكيميائية الغازية. مجلة البحوث الكيميائية التطبيقية، المجلد 12، العدد 4، الجزء الثاني، ص 501-525. عمان، الأردن.
3. فهمي، أحمد. (2019). تحليل مقارن لحركة تفاعلات الأكسدة تحت ظروف تشغيل مختلفة: نظام مفتوح مقابل نظام مغلق. رسالة ماجستير غير منشورة، كلية الهندسة الكيميائية، جامعة الملك سعود، الرياض، المملكة العربية السعودية، ص 78-95.
- Robertson G, Smith J. Measurement of the activation volume for high-pressure reactions in liquid phase. . J Phys Chem B. 2020;124(35):7640-7655
- Lin S, Wang Q. Computational modeling for predicting polymerization reaction rates in batch reactors under coupled pressure and temperature conditions. Chem Eng Sci. 2017;160:200-215
- Johnson AT, Miller LH, Perez M. Kinetic thermodynamics of reversible reactions in closed systems: . . the role of pressure coupling. Int J Chem Kinet. 2018;50(9):670-685
- الحمداء، عبد الله. (2022). الحركة الكيميائية الشاملة: تطبيقات صناعية ورياضية. الطبعة الثانية، مكتبة العبيكان، الرياض، المملكة العربية السعودية، ص 210-245.
- سعان، نزار؛ زيدان، يوسف. (2023). الديناميكا الحرارية للضغط العالية ومعدلات التفاعل: تحليل كمي. مجلة الفيزياء والكيمياء التطبيقية، المجلد 15، العدد 1، ص 40-62. المركز القومي للبحوث، القاهرة، مصر.
- خليل، حسن. (2020). مبادئ تصميم المفاعلات الكيميائية: تطبيقات أنظمة الدفعات والأنظمة المغلقة. دار النشر العلمي، الإسكندرية، مصر، الفصل الثالث، ص 150-185.