

Ю.О. Соколовська, О.Й. Соколовський, З.Ю. Челбаєвський (Дніпропетровськ, Дніпропетровський національний університет)

До кінетики каталізу в методі скороченого опису Боголюбова

Кінетика каталізу вивчається в рамках класичної моделі Міхаеліса-Ментен (див., наприклад, [1]), яка була побудована для опису ферментативного каталізу. В цій моделі система складається з чотирьох компонент: початкової речовини (субстрату), каталізатора (ензиму), зв'язаних станів субстрату та каталізатору (комплексу), продукту, який є структурною модифікацією субстрату. Кінетика цієї моделі описується рівняннями

$$\dot{x} = a(u - z_0)x + bu, \quad \dot{u} = -(ax + b + c)u + axz_0 \quad (1)$$

та законами збереження $z = z_0 - u$, $y = x_0 - x - u$. Тут x, z, u, y – концентрації відповідних компонент, x_0, z_0, u_0, y_0 – їхні початкові значення, a, b, c – константи швидкостей реакцій. Вивчається випадок, в якому $x_0 \sim \lambda^0$, $z_0 \sim \lambda^1$, $u_0 = 0$, $y_0 = 0$, де λ – малий параметр теорії. Ця модель відображає реальну ситуацію каталізу в газовій або рідинній системі, в якій кількість каталізатору мала. У відповідності до уявлень Міхаеліса і Ментен (див. [1]) у системі після деякого перехідного періоду спостерігається стаціонарний стан з незмінною концентрацією комплексу. Це наводить на думку, що при $t \gg \tau_0$ (τ_0 – деякий характерний час) концентрація комплексу $u(t)$ стає функцією концентрації субстрату

$$x(t) \xrightarrow[t \gg \tau_0]{} \tilde{x}(t), \quad u(t) \xrightarrow[t \gg \tau_0]{} \tilde{u}(t), \quad \tilde{u}(t) = u(\tilde{x}(t)), \quad (2)$$

де функція $u(x)$ не залежить від початкових умов задачі x_0, y_0, z_0, u_0 . Таке припущення є фактично функціональною гіпотезою Боголюбова, на якій ґрунтується його метод скороченого опису (див. посилання на піонерські роботи Боголюбова в [2]). Воно веде до замкнутого часового рівняння для функції $\tilde{x}(t)$ виду $\dot{\tilde{x}}(t) = L(\tilde{x}(t))$, розв'язки якого мають фізичний сенс тільки при $t \gg \tau_0$. Окрім зазначених структур в методі скороченого опису визначається ефективна початкова умова \tilde{x}_0 до цього часового рівняння шляхом продовження його розв'язків $\tilde{x}(t)$ на часи $0 \leq t \leq \tau_0$ (тоді $\tilde{x}(0) \equiv \tilde{x}_0$). У підсумку величини $u(x), L(x), \tilde{x}_0$ обчислені нами в теорії збурень по λ . Представлена теорія може бути названа узагальненою теорією стаціонарного каталізу, якщо існуючі розробки [1] називати теорією стаціонарного каталізу.

Робота підтримувалася Державним фондом фундаментальних досліджень України (проект № 25.2/102).

- [1] Cornish-Bowden A. Fundamentals of Enzyme Kinetics. — London: Portland Press, 1995, 344 p.
- [2] Ахиезер А.И., Пелетминский С.В. Методы статистической физики. — М.:Наука, 1977, 368 с.