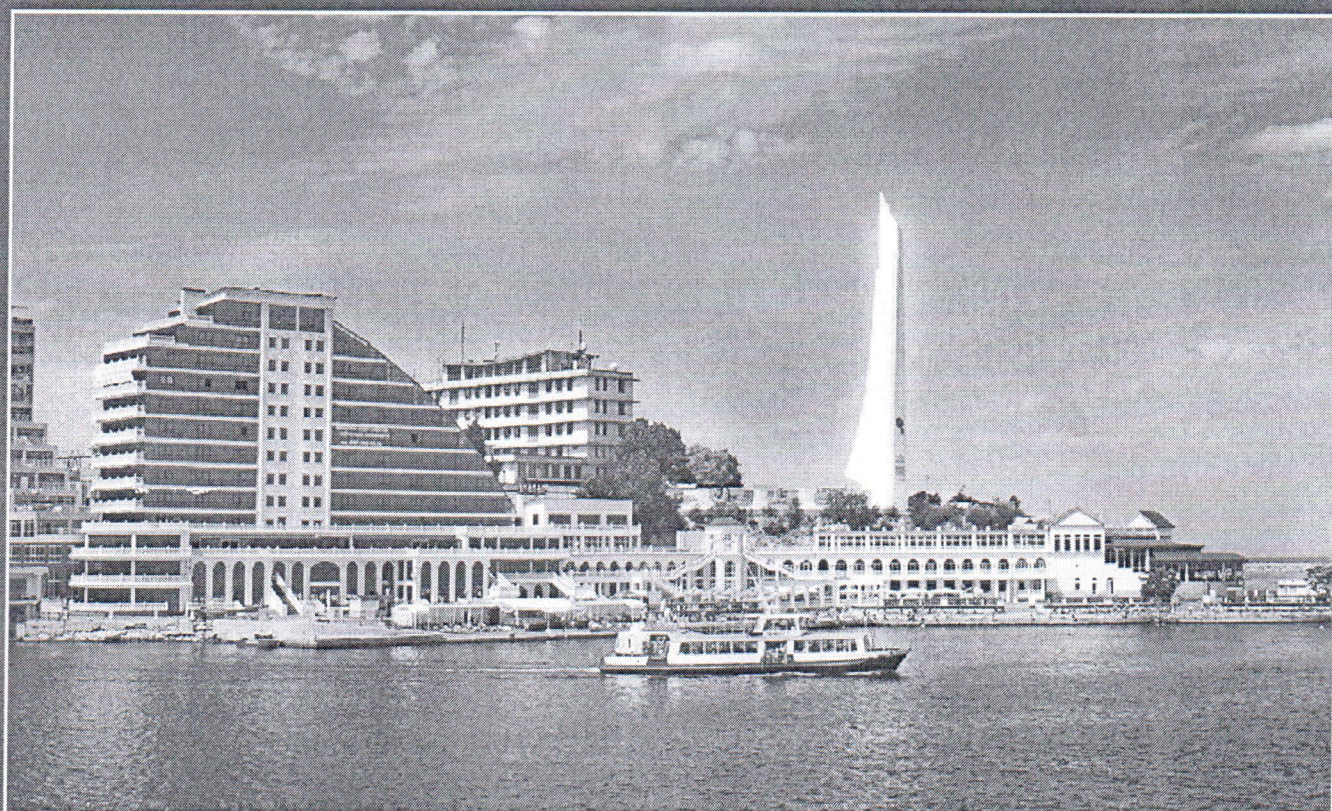




**ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
И ШКОЛА-КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ
«ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ
В МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫХ
ЭКОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ»**

СБОРНИК ТРУДОВ КОНФЕРЕНЦИИ



15 - 22 ОКТЯБРЯ, 2023

Российская академия наук
Научный Совет РАН по физической химии
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина
Российской академии наук
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Федеральный исследовательский центр
«Морской гидрофизический институт РАН»
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Федеральный исследовательский центр
«Институт биологии южных морей» имени А.О. Ковалевского РАН



ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ И
ШКОЛА-КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ
«ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ
В МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫХ
ЭКОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ»

СБОРНИК ТРУДОВ КОНФЕРЕНЦИИ

27 ОКТЯБРЯ – 3 НОЯБРЯ, 2021

г. СЕВАСТОПОЛЬ

УДК 54
ББК 24.5
Ф503

Утверждено к печати Федеральным государственным бюджетным
учреждением науки Институтом физической химии и электрохимии
им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук

Ф503 Физико-химические методы в междисциплинарных экологических исследованиях: Всероссийская конференция и школа-конференция молодых ученых, 15 – 22 октября, 2023, Севастополь, Россия. *Сборник трудов симпозиума*. — М.: ИФХЭ РАН, 2023. – 170 с.

ISBN 978-5-00202-421-6

В сборнике представлены материалы Всероссийской конференции и школы-конференции молодых ученых «Физико-химические методы в междисциплинарных экологических исследованиях».

Сборник включает тезисы пленарных лекций, устных и стендовых докладов, а также публикации по следующим направлениям: физико-химические методы при междисциплинарных исследованиях; фундаментальные и прикладные вопросы физико-химических процессов на границе раздела фаз; синтез, строение, физико-химические свойства и применение новых сорбционных и хроматографических материалов для промышленного и аналитического применения; научные и практические аспекты разработки и применения сорбционных технологий при переработке природного и техногенного, в том числе, радиоактивного, сырья и отходов; физико-химические механизмы образования комплексов биологически важных продуктов; исследование биогеохимических процессов в Мировом океане; радиохимические методы в исследовании экосистем и анализе объектов окружающей среды; применение биофизических и биохимических методов при мониторинге прибрежной зоны Черного моря; применение физико-химических методов при оценке физических и химических факторов загрязнения окружающей среды; применение физико-химических методов для изучения гидробионтов и культур сельскохозяйственного назначения; физико-химические методы при оценке качества пищевой продукции, фармацевтической продукции, строительных материалов и других объектов исследований; история физико-химических методов (круглый стол); применение физико-химических методов при оценке физических и химических факторов загрязнения окружающей среды.

Тезисы докладов представлены в авторской редакции.

Для широкого круга химиков, физиков, экологов, специалистов научно-исследовательских групп, организаций, аспирантов и студентов.

ISBN 978-5-00202-421-6

© Авторы научных статей, 2023
© ИФХЭ РАН, 2023

СПИСОК УСТНЫХ ДОКЛАДОВ

- 1 Хамизов Р.Х.
ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫЕ ПРОЦЕССЫ
ВЫДЕЛЕНИЯ ЛИТИЯ ИЗ МОРСКОЙ ВОДЫ И ПРИРОДНЫХ
РАССОЛОВ СОРБЦИОННЫМИ МАТЕРИАЛАМИ
- 2 М.П. Цюрупа, А.Ю. Попов, Б.Р. Сайфутдинов, Ю.А. Давидович,
В.А. Даванков
ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ФОРМУ ИЗОТЕРМ
АДСОРБЦИИ ПАРОВ СВЕРХСШИТЫМИ ПОЛИМЕРАМИ
- 3 Зенкевич И.Г., Деруши А.
РЕКУРРЕНТНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ ВРЕМЕН
УДЕРЖИВАНИЯ В ОБРАЩЕННО-ФАЗОВОЙ ВЭЖХ КАК
СПОСОБ ВЫЯВЛЕНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ
АНАЛИТОВ
- 4 Долгоносов А.М.
НАБУХАЕМОСТЬ И СЕЛЕКТИВНОСТЬ ПОЛИМЕРНЫХ
ИОНИТОВ
- 5 Зайцева Е.А., Долгоносов А.М.
РАСЧЕТ ПАРАМЕТРА ДИСПЕРСИОННЫХ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ МЕТОДА ТРЕХПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ
ХАРАКТЕРИСТИКИ ХРОМАТОГРАФИЧЕСКИХ ФАЗ
- 6 Хабаров В.Б.
О НОРМАТИВНОМ ПРАВОВОМ ОБЕСПЕЧЕНИИ
САНИТАРНО-ХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК
ТЕПЛОВОЙ ИЗОЛЯЦИИ ИЗ РАСПЛАВА МИНЕРАЛЬНОГО
СЫРЬЯ МЕТОДОМ ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ
- 7 Варфоломеева В.В., Терентьев А.В.
СТРУКТУРНО-КИНЕТИЧЕСКИЙ АСПЕКТ УПРАВЛЕНИЯ
РЕАКЦИЕЙ В ГОМОГЕННОЙ СРЕДЕ И НА ГРАНИЦЕ
РАЗДЕЛА ФАЗ

УДК 543.544.5

**РЕКУРРЕНТНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ ВРЕМЕН УДЕРЖИВАНИЯ В
ОБРАЩЕННО-ФАЗОВОЙ ВЭЖХ КАК СПОСОБ ВЫЯВЛЕНИЯ
ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ АНАЛИТОВ**

Зенкевич И.Г., Деруиш А.

*Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии,
Университетский просп., 26, Санкт-Петербург 198504, Россия
e-mail: izenkevich@yandex.ru*

Рекуррентная аппроксимация зависимостей параметров удерживания от концентрации органического компонента элюента в обращенно-фазовой ВЭЖХ подтверждает, что часть номалий обусловлена не вариациями механизмов сорбции, а химическими трансформациями аналитов.

Recurrent approximation of retention parameters dependencies vs. concentration of organic component of an eluent confirms that at least part of anomalies is caused not by variations of sorption mechanisms, but chemical transformations of analytes.

Зависимости времен удерживания аналитов (t_R) в обращенно-фазовой (ОФ) ВЭЖХ от содержания органического компонента элюента (C) – распространенный прием характеристики как аналитов, так и сорбентов хроматографических колонок. Наблюдаемые при этом аномалии значений t_R часто объясняют вариациями механизмов удерживания. Однако не менее важной причиной представляется изменение химической природы аналитов за счет взаимодействия с компонентами элюента (преимущественно, водой). Поскольку зависимости $t_R(C)$ чаще всего соответствуют убывающим экспоненциальным или гиперболическим функциям, выявление слабо выраженных аномалий t_R на этом «фоне» затруднительно. Такие приемы как численное дифференцирование или метод конечных разностей для анализа зависимостей $t_R(C)$ непригодны. Информативной оказалась только их рекуррентная аппроксимация [1]:

$$t_R(C + \Delta C) = at_R(C) + b \quad (1)$$

где $\Delta C = \text{const}$ – постоянный «шаг» изменения концентрации органического компонента элюента, коэффициенты « a » и « b » вычисляются методом наименьших квадратов.

Для некоторых синтетических лекарственных препаратов и N-замещенных сульфонамидов в элюентах «ацетонитрил-вода» было выявлено обратимое образование гидратов. Другим примером являются оксимы некоторых ароматических карбонильных соединений в элюентах «метанол-вода». Так, по графику зависимости $t_R(C)$ для оксима 2-метоксибензальдегида (Рис. 1) в интервале концентраций метанола $30 \leq C(\text{CH}_3\text{OH}) \leq 80$ аномалию максимального значения $t_R(30)$ выявить сложно. На графике же рекуррентной аппроксимации (1) этой зависимости (Рис. 2) точка $[t_R(30) - t_R(40)]$ расположена *ниже* линии регрессии. Следовательно, значение $t_R(30)$ больше ожидаемого, что соответствует

образованию более гидрофильной гидратной формы аналита. Такой же вид рекуррентных зависимостей наблюдается и для других оксимов.

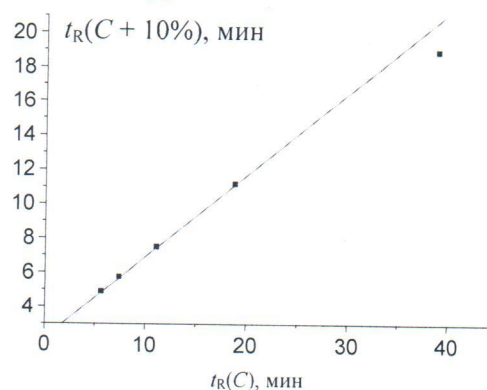
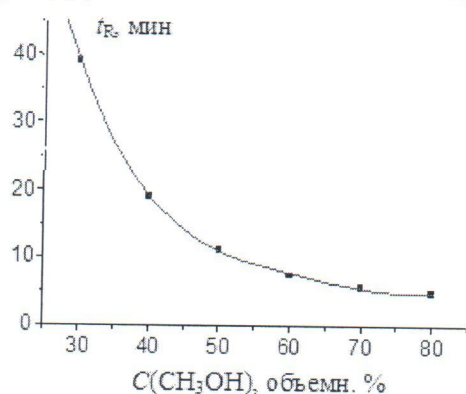


Рис. 1. Типичная зависимость $t_R(C)$ (элюент метанол - вода) для оксима 2-метоксибензальдегида.

Рис. 2. Рекуррентная аппроксимация зависимости $t_R(C)$ для оксима 2-метоксибензальдегида.

Для некоторых аналитов, например, оксима 4-гидроксибензальдегида, точки, соответствующие высокому содержанию воды в элюенте, на графиках рекуррентных аппроксимаций зависимостей $t_R(C)$ расположены *выше* линии регрессии (Рис. 3, 4). Следуя той же логике, это может соответствовать образованию более гидрофобных форм аналитов, однако такой вывод требует подтверждения на примере соединений других классов.

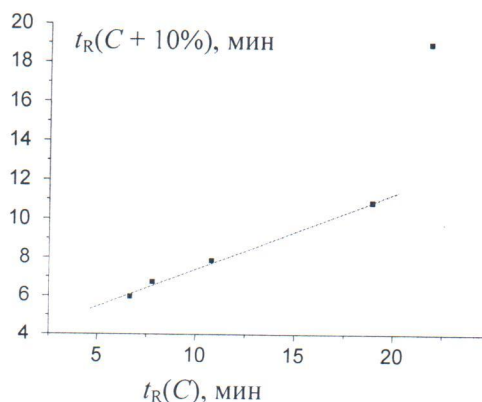
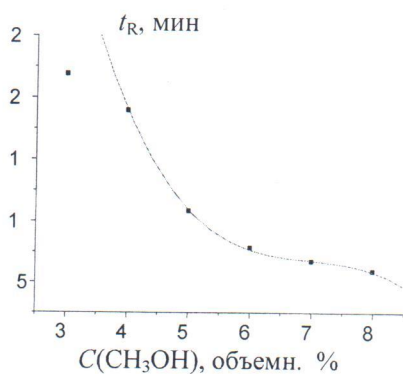


Рис. 3. Зависимость $t_R(C)$ (элюент метанол - вода) для оксима 4-гидроксибензальдегида.

Рис. 4. Рекуррентная аппроксимация зависимости $t_R(C)$ для оксима 4-гидроксибензальдегида.

Таким образом, рекуррентная аппроксимация параметров удерживания в ОФ ВЭЖХ подтверждает, что, по крайней мере, часть наблюдаемых аномалий не связана с изменением механизмов сорбции, а определяется химическими превращениями аналитов в хроматографической системе.

Литература

1. Zenkevich I.G., Derouiche A. // J. Liquid Chromatogr. Related Technol. 2021. V. 44. № 11-12. P. 588-598. doi: 10.1080/10826076.2021.1998905.