
**TOMSK
POLYTECHNIC
UNIVERSITY**



**ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ**

МАТЕРИАЛЫ

**XXV Юбилейной Международной научно-практической
конференции студентов и молодых ученых**

ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ В XXI ВЕКЕ ТОМ 2 ХХТ-2024

**20 – 24 мая 2024 г.
г. Томск**

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**
ИНЖЕНЕРНАЯ ШКОЛА ПРИРОДНЫХ РЕСУРСОВ
ИНЖЕНЕРНАЯ ШКОЛА НОВЫХ ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ
ИНЖЕНЕРНАЯ ШКОЛА ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ ШКОЛА ХИМИЧЕСКИХ И БИОМЕДИЦИНСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ

ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ В XXI ВЕКЕ

Материалы
XXV Юбилейной Международной научно-практической конференции
студентов и молодых ученых
имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера,
посвященной 100-летию со дня рождения
профессора В.П. Лопатинского

Том 2

20–24 мая 2024 г.

Томск 2024

УДК 54+66(063)
ББК 24+35л0
Х46

Химия и химическая технология в XXI веке : материалы XXV Юбилейной Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера, посвященной 100-летию со дня рождения профессора В.П. Лопатинского. В 2 томах. Том 2 (г. Томск, 20–24 мая 2024 г.) / Томский политехнический университет. – Томск : Изд-во Томского политехнического университета, 2024. – 423 с.

ISBN 978-5-4387-1196-4 (т. 2)
ISBN 978-5-4387-1194-0

В сборнике представлены материалы XXV Юбилейной Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых «Химия и химическая технология в XXI веке». В материалах конференции обсуждаются различные проблемы современной химической науки. Большое внимание уделено малотоннажным химическим производствам. Описаны новые подходы к лабораторному синтезу специальных материалов, к анализу их свойств. Значительная часть работ посвящена исследованию объектов окружающей среды, в том числе и расположенных за рубежом. Ряд работ молодых ученых выполнен на английском языке и посвящен самым разнообразным проблемам химической технологии. Большой интерес представляют работы школьников, посвященные природным объектам и синтезу химических соединений.

УДК 54+66(063)
ББК 24+35л0

Оргкомитет
конференции:

634050, Томск, пр. Ленина, 43а, ТПУ, ауд. 136,
ОХИ ИШПР ТПУ
Тел. +7-913-809-91-17
e-mail: orgcomННТ@tpu.ru
hht.tpu.ru

ISBN 978-5-4387-1196-4 (т. 2)
ISBN 978-5-4387-1194-0

© ФГАОУ ВО НИ ТПУ, 2024

Синтез крупных кристаллов U_iO_6 для приложений нелинейной оптики и микроэлектроники	312
<i>Е. А. Оконешникова, Н. А. Жёсткий, С. А. Поваров, С. В. Бачинин, П. В. Алексеевский</i>	
Взаимосвязь электронного транспорта и тензорезистивных свойств в полимерных композиционных материалах на основе хитозана	314
<i>Д. В. Побеленская, Н. А. Акулова, Д. И. Гапич, Р. С. Кумарбаев, А. С. Буинов, Б. Ч. Холхоев, В. Ф. Бурдуковский, В. А. Кузнецов</i>	
Высокоэффективный катод на основе никеля и молибдена для получения водорода путем электролиза щелочного водного электролита	315
<i>Ю. Ю. Потанина, А. Н. Кузнецов, Д. В. Козлов</i>	
Легирование высшего борид вольфрама атомами переходных металлов для целей катализа	316
<i>А. Д. Радина, А. Г. Квашнин</i>	
Мультифункциональные материалы с сорбционными и фотокаталитическими свойствами на основе слоистых двойных гидроксидов магния и алюминия	317
<i>К. И. Рашитова, С. А. Герасимов</i>	
Многоцелевая целлюлозная матрица	318
<i>Д. В. Репин</i>	
Изучение агрегативной устойчивости наночастиц селена, стабилизированного бычьим сывороточным альбумином	320
<i>З. А. Рехман, А. А. Блинова, Е. Д. Назаретова</i>	
Исследование вида носителя для цинкооксидных катализаторов отверждения полимеров	321
<i>М. А. Савастьянова, К. О. Ухин, Н. Б. Кондрашова, В. А. Вальцифер, В. Н. Стрельников</i>	
Влияние примеси и структурных дефектов на термоЭДС однослойного графена	322
<i>Т. А. Сапежинская, А. А. Белослудцева</i>	
Исследование микроструктуры наноразмерного диоксида марганца, стабилизированного алкилдиметиламинооксидом	324
<i>А. О. Сенкова, А. А. Нагдалян, П. С. Леонтьев, З. А. Рехман, Н. М. Бочаров</i>	
Новые полупроводниковые материалы на основе алкилсилилзамещенных гетероциклов для перовскитных солнечных батарей	325
<i>М. Е. Сидельцев, И. Е. Кузнецов, А. Н. Живчикова, М. М. Теплякова, А. А. Пирязев, А. Ф. Ахьямова, Н. Г. Никитенко, А. В. Аккуратов</i>	
Оптические свойства тонкопленочных гетероструктур на основе оксидов олова (IV) и церия (IV)	327
<i>Д. М. Скрылева, О. С. Халипова</i>	
Применение нановолокнистого углерода в газовой сенсорике	328
<i>А. Р. Смагулова, А. Г. Баннов</i>	
Допированный медью трититанат натрия с иерархической микро-нано архитектурой для отрицательного электрода натрий-ионных аккумуляторов	329
<i>А. А. Соколов, В. В. Железнов, Д. П. Опра, С. Л. Синебрюхов, А. Б. Подгорбунский, С. В. Гнеденков</i>	
Самосборка гибридных бифункциональных катализаторов на основе двумерных неорганических наночастиц и органических хромофоров методом нековалентной самосборки	330
<i>М. Р. Соколов, К. А. Тумбинский, М. А. Калинина</i>	
Сравнительное исследование физико-химических свойств твёрдых композиционных электролитов на основе солей тетрабутиламмония и наноалмазов	332
<i>И. А. Стебницкий</i>	
Физико-химическая механика синтеза композиционных порошков «алюминий-активированный уголь-графит»	333
<i>А. В. Тимаков, Д. А. Булатников, А. В. Ишутин</i>	
Разработка полимерных композиционных материалов на основе полилактида и коллагена	334
<i>Н. Ф. Тимофеева, С. Ф. Артахинова</i>	

из водного раствора этанола и перевода CO_2 в метан.

Однако в ходе каждой из реакций существуют энергетические барьеры, которые должны быть преодолены. Одним из возможных путей повышения эффективности катализатора является легирование его атомами более активных элементов. Так как высший борид вольфрама имеет довольно сложную структуру, во избежание её деформации были рассмотрены атомы металлов, имеющих радиус, близкий к радиусу вольфрама – Mo и Cr. В качестве референсного значения были выбраны энергии адсорбции в случае легирования поверхности атомом Rh, так как родий является одним из самых эффективных катализаторов.

Все вычисления выполнялись с использованием теории функционала электронной плотности при помощи программного пакета VASP. В ходе легирования один атом вольфрама из приповерхностного слоя заменялся на атом легирующей примеси. Во избежание нереалистичных взаимодействий в ходе релаксации, между поверхностями был сформирован вакуумный промежуток в 25 Å. Молекулы CO, NO, O_2 и CO_2

помещались на расстоянии 1,8 Å над активными центрами.

Таким образом показано, что каждый из атомов примеси встроился в решётку WB_{5-x} , не вызвав существенных деформаций структуры. Аналогично случаю адсорбции на поверхности чистого WB_{5-x} , молекула O_2 безбарьерно диссоциирует, что даёт возможность предположить эффективность WB_{5-x} в качестве катализатора для различных реакций окисления [1]. Однако энергии адсорбции NO и CO для легированного материала выше, чем для чистого, а диссоциации молекулы CO_2 , типичной для чистого материала, в случае легирования практически не наблюдается.

Для установления причин подобных неожиданных изменений в энергиях адсорбции и связанных с ними энергетических барьерах реакций, будут проанализированы изменения в электронной плотности, происходящие при легировании, а также изменения поверхностных зарядов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант РНФ 24-23-00125).

Список литературы

1. Avelino C., Hermenegildo G. // *Chemical Society Reviews*, 2008. – V. 37. – № 9. – P. 2096–2126.

МУЛЬТИФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ С СОРБЦИОННЫМИ И ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ НА ОСНОВЕ СЛОИСТЫХ ДВОЙНЫХ ГИДРОКСИДОВ МАГНИЯ И АЛЮМИНИЯ

К. И. Рашитова, С. А. Герасимов
 Научный руководитель – к.х.н., доцент О. М. Осмоловская
 Санкт-Петербургский государственный университет
 rashitovaki@gmail.com

В условиях непрерывного ухудшения качества окружающей среды и повышенного загрязнения промышленных сточных вод, токсичные ионы тяжелых металлов и многие органические соединения становятся источником серьезной экологической тревоги. Эти загрязнения приводят к дестабилизации естественных водоемов и угрожают доступности качественной питьевой воды для общества.

В настоящее время существующие методы удаления тяжёлых металлов из сточных вод включают применение мембранных технологий, процессов ионного обмена и химического осаждения с последующей фильтрацией. Однако, эти методы не всегда эффективны или доступны, особенно при работе с водой, содержащей низкие концентрации ионов. В связи с этим поиск эффективных и доступных по стоимости сорбентов для удаления тяжёлых металлов (Pb^{2+} ,

Co^{2+} , Cu^{2+} , Ni^{2+} , Fe^{3+}) из сточных вод продолжает оставаться важной проблемой, требующей непрерывного исследования и разработки инновационных технологий.

Фотокатализ относят к передовым технологиям в области разложения органических загрязнений в водных средах. Однако, в данной области существует проблема с тем, что большинство современных работ посвящено исследованию эффективности на модельных системах. При переносе технологии на реальные объекты, оказывается, что они показывают низкую эффективность из-за быстрого загрязнения поверхности материала различными ионами, так как реальные образцы представляют собой сложные многокомпонентные системы.

Для решения задачи удаления ионов тяжёлых металлов и циклических органических соединений нами предлагается использование материалов на основе слоистых двойных гидроксидов (СДГ) в качестве multifunctionального материала, сочетающего в себе функции сорбента и фотокатализатора. СДГ представляют собой положительно заряженные бруситоподобные слои и компенсирующие заряд анионы в межслоевом пространстве. Засчёт такой особенности строения СДГ, как слоистая структура, ионы сорбируются между слоями. Это предотвращает загрязнение поверхности фотокатализатора, что в перспективе может увеличить эффективность очистки сточных вод.

Данная работа была посвящена разработке допированных медью и хромом слоистых двойных гидроксидов на основе магния и алюминия, и их апробации в качестве multifunctionальных сорбентов и фотокатализаторов. Синтез проводили в щелочной среде, полученные методом (со)осаждения осадки далее выдерживали при нагревании. Фазовый состав образцов (гидроталькит) был доказан методом порошковой рентгеновской дифракции, состав поверхности

был исследован методом ИК-спектроскопии, морфология образцов и карты распределения элементов получали методом СЭМ. Ширина запрещённой зоны для всех образцов рассчитывалась из спектров поглощения и спектров отражения. Элементный состав образцов и степени окисления допантов были определены методом РФЭС.

Для всех полученных образцов был проведён скрининг сорбционной активности против ионов тяжёлых металлов (Pb^{2+} , Cu^{2+} , Fe^{3+} , Co^{2+} , Ni^{2+}); в качестве варьируемых параметров выступали температура и pH раствора, длительность сорбции, концентрация загрязнителя. На основании комплекса полученных экспериментальных данных была проведена оптимизация процесса удаления загрязнителя, что позволило достичь 90 % экстракции ионов металлов за 1 час инкубации.

На следующем этапе было проведено изучение фотокаталитической активности допированных Cu и Cr образцов на примере модельного красителя метиленового синего (МС) при облучении светом видимого диапазона. Сначала выбрали оптимальный образец, показавший лучший результат (58 %) в реакции разложения красителя. Для него выбрали оптимальные условия (температура, время, количество фотокатализатора) проведения фотокаталитического разложения красителя. Также провели изучение multifunctionальных свойств – одновременной сорбции тяжёлых металлов и фотокаталитического разложения органического красителя.

Автор работы выражает благодарность Ресурсному парку СПбГУ: РЦ «Нанотехнологии», «Оптические и лазерные методы исследования вещества», «Физические методы исследования поверхности», «Рентгенодифракционные методы исследования» и «Методы анализа состава вещества».

МНОГОЦЕЛЕВАЯ ЦЕЛЛЮЛОЗНАЯ МАТРИЦА

Д. В. Репин

Научный руководитель – д.х.н., профессор В. А. Винокуров

ФГАОУ ВО «РГУ нефти и газа (НИУ) имени И. М. Губкина»

d.repin2124@yandex.ru

Значительные усилия современных учёных направлены на исследование «зелёных» технологий для производства чистой воды. Использование солнечного света в качестве возобновля-

емого источника энергии для получения влаги является многообещающим подходом к решению проблемы нехватки чистой воды при минимальном воздействии на окружающую среду [1].