



XXII МЕНДЕЛЕЕВСКИЙ СЪЕЗД
ПО ОБЩЕЙ И ПРИКЛАДНОЙ ХИМИИ

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

В 7 ТОМАХ

ТОМ 2

7 — 12.10.2024

Федеральная территория «Сириус»



XXII МЕНДЕЛЕЕВСКИЙ СЪЕЗД ПО ОБЩЕЙ И ПРИКЛАДНОЙ ХИМИИ

*Посвящённый 190-летию Д.И. Менделеева
и 300-летию основания Российской академии наук*

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

Том 2

Сборник тезисов в 7 томах

7 –12 октября, 2024
Федеральная территория «Сириус», Россия

УДК 54+66
ББК 24+35
М501

М501 XXII Менделеевский съезд по общей и прикладной химии, 7-12 октября, 2024, Федеральная территория «Сириус», Россия. Сборник тезисов докладов в 7 томах. Том 2. — М.: ООО «Адмирал Принт», 2024. — 528 с. — ISBN 978-5-00202-666-1 (т. 2)

ISBN 978-5-00202-664-7

В сборнике представлены материалы XXII Менделеевского съезда по общей и прикладной химии, которая проходит с привлечением ведущих экспертов на должном международном уровне.

Тезисы докладов представлены в авторской редакции.

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

ISBN 978-5-00202-666-1 (т. 2)
ISBN 978-5-00202-664-7

© Авторы научных статей, 2024
© ООО «Адмирал Принт», 2024

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

СОПРЕДСЕДАТЕЛИ



Красников Г.Я.

Президент Российской академии наук, Академик РАН



Фальков В.Н.

Министр науки и высшего образования РФ



Шмелева Е.В

Председатель Совета федеральной территории «Сириус», Руководитель Образовательного Фонда «Талант и успех»



Цивадзе А.Ю.

Президент РХО имени Д.И. Менделеева, Академик РАН

ЧЛЕНЫ ОРГКОМИТЕТА

Алдошин С.М.

Академик РАН, Вице-президент РАН

Анаников В.П.

Академик РАН, Заместитель академика-секретаря ОХНМ РАН

Белецкая И.П.

Академик РАН

Бухтияров В.И.

Академик РАН

Васильева Т.В.

Советник Министра просвещения Российской Федерации на общественных началах

Горбунова Ю.Г.

Академик РАН, Вице-президент РХО им. Д.И. Менделеева, Заместитель академика-секретаря ОХНМ РАН, ученый секретарь Съезда

Григорович К.В.

Академик РАН, Заместитель академика-секретаря ОХНМ РАН

Егоров М.П.

Академик РАН, Академик – секретарь ОХНМ РАН

Золотов Ю.А.

Академик РАН, Вице-президент РХО им. Д.И. Менделеева

Иванов В.П.

Президент Российского союза химиков

Каблов Е.Н.

Академик РАН, Заместитель Президента РАН

Калмыков С.Н.

Академик РАН, Вице-президент РАН, заместитель сопредседателей

Ковальчук М.В.

Член-корреспондент РАН, Президент Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

Кропачев Н.М.

Член-корреспондент РАН, Ректор Санкт-Петербургского государственного университета

Кузнецов Н.Т.

Академик РАН

Кукушкин В.Ю.

Академик РАН, Вице-президент РХО им. Д.И. Менделеева, Заместитель академика-секретаря ОХНМ РАН

Леонтьев Л.И.

Академик РАН

Литвиненко В.С.

Ректор Санкт-Петербургского горного университета

Лысак В.И.

Академик РАН

Максимов А.Л.

Член-корреспондент РАН

Милёхин Ю.М.

Академик РАН, Заместитель академика-секретаря ОХНМ РАН

Мухомеджан Ф.Р.

Директор фонда «Искусство, наука и спорт»

Мясоедов Б.Ф.

Академик РАН

Минкин В.И.

Академик РАН

Новаков И.А.

Академик РАН

Орыщенко А.С.

Член-корреспондент РАН

Панкин А.А.

Заместитель министра иностранных дел РФ

Панченко В.Я.

Академик РАН, вице-президент Российской академии наук

Пармон В.Н.

Академик РАН, вице-президент Российской академии наук, председатель Сибирского отделения РАН

Ремпель А.А.

Академик РАН

Рудской А.И.

Академик РАН, Председатель Санкт-Петербургского отделения РАН

Русанов А.И.

Академик РАН, Вице-президент РХО им. Д.И. Менделеева

Рыбников М.К.

Генеральный директор ПАО «ФосАгро»

Садовничий В.А.

Академик РАН, Ректор Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова

Секиринский Д.С.

Заместитель Министра науки и высшего образования Российской Федерации, заместитель сопредседателей

Сергиенко В.И.

Академик РАН

Синяшин О.Г.

Академик РАН, Заместитель академика-секретаря ОХНМ РАН

Сорокин П.Ю.

Заместитель министра энергетики Российской Федерации

Тарасова Н.П. Член-корреспондент РАН,

Вице-президент РХО им. Д.И. Менделеева

Тетенькин Д.Д.

Заместитель министра природных ресурсов и экологии РФ

Трубников Г.В.

Академик РАН

Чарушин В.Н.

Академик РАН

Шевченко В.Я.

Академик РАН

Юрин М.Н.

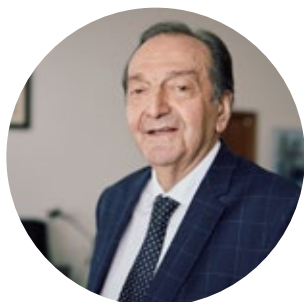
Заместитель министра промышленности и торговли РФ



ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ

УЧЁНЫЙ СЕКРЕТАРЬ



Цивадзе А.Ю.

Президент РХО имени
Д.И. Менделеева,
Академик РАН



Горбунова Ю.Г.

Академик РАН

ЧЛЕНЫ ПРОГРАММНОГО КОМИТЕТА

Алдошин С.М.

Академик РАН

Анаников В.П.

Академик РАН

Антипов Е.В.

Чл.-корр. РАН

Бачурин С.О.

Академик РАН

Донцова О.А.

Академик РАН

Бухтияров В.И.

Академик РАН

Егоров М.П.

Академик РАН

Ерёменко И.Л.

Академик РАН

Золотов Ю.А.

Академик РАН

Иванов В.К.

Чл.-корр. РАН

Калмыков С.Н.

Академик РАН

Леонтьев Л.И.

Академик РАН

Лысак В.И.

Академик РАН

Музафаров А.М.

Академик РАН

Мясоедов Б.Ф.

Академик РАН

Пономаренко С. А.

Чл.-корр. РАН

Трифонов А.А.

Чл.-корр. РАН

Хохлов А.Р.

Академик РАН

Чарушин В.Н.

Академик РАН



МЕЖДУНАРОДНЫЙ КОМИТЕТ

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ

УЧЁНЫЙ СЕКРЕТАРЬ



Панченко В.Я.

Вице-президент РАН,
Академик РАН



Цивадзе Н.А.

ЧЛЕНЫ МЕЖДУНАРОДНОГО КОМИТЕТА

Нифантьев Н.Э.

Член-корреспондент РАН (Россия)

Тарасова Н.П.

Член-корреспондент РАН (Россия)

Трифонов А.А.

Член-корреспондент РАН (Россия)

Сагонян А.С.

Академик НАН Республики Армения
(Армения)

Журинов М.Ж.

Академик НАН Республики Казахстан
(Казахстан)

Четто Крамиш А.М.

Мексика

Ньюконг Т.

Южная Африка

Коронадо Е.

Испания

Мёллер М.

Германия

Ганеш К.

Индия

Агабеков В.Е.

Беларусь

Торрес Т.

Испания



ОРГАНИЗАТОРЫ И ПАРТНЕРЫ

ОРГАНИЗАТОРЫ



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ
И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



ФЕДЕРАЛЬНАЯ
ТЕРРИТОРИЯ
«СИРИУС»



XXII МЕНДЕЛЕЕВСКИЙ СЪЕЗД ПРОВОДИТСЯ
ПОД ЭГИДОЙ МЕЖДУНАРОДНОГО СОЮЗА ПО
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И ПРИКЛАДНОЙ ХИМИИ
(IUPAC)



КЛЮЧЕВОЙ ПАРТНЕР



ИСКУССТВО
НАУКА И СПОРТ

ГЕНЕРАЛЬНЫЙ СПОНСОР



ЗОЛОТОЙ СПОНСОР



БРОНЗОВЫЕ СПОНСОРЫ



РУСАТОМ
МЕТАЛЛТЕХ
РОСАТОМ



НАУКА
И ИННОВАЦИИ
РОСАТОМ



ГИРЕДМЕТ
РОСАТОМ

СПОНСОРЫ И УЧАСТНИКИ



АКСЕЛЬФАРМ



ЭКСПОНЕНТЫ



СПОНСОР



ОРГАНИЗАЦИОННЫЕ ПАРТНЕРЫ



СОДЕРЖАНИЕ

СЕКЦИЯ 3

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ

МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ 12

Ключевые доклады	13
Приглашенные доклады	17
Устные доклады	33
Постерные доклады	69

СЕКЦИЯ 4

РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ, ЭКОЛОГИЧЕСКАЯ

БЕЗОПАСНОСТЬ И ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ

ПРОЦЕССЫ В ЭКОНОМИКЕ ЗАМКНУТОГО ЦИКЛА 105

Ключевые доклады	106
Приглашенные доклады	110
Устные доклады	126
Постерные доклады	158

СЕКЦИЯ 5

ХИМИЯ ИСКОПАЕМОГО И ВОЗОБНОВЛЯЕМОГО

УГЛЕВОДОРОДНОГО СЫРЬЯ 249

Ключевые доклады	250
Приглашенные доклады	253
Устные доклады	265
Постерные доклады	291

СЕКЦИЯ 6

АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ: НОВЫЕ МЕТОДЫ

И СРЕДСТВА ДЛЯ ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИИ

И АНАЛИЗА 306

Ключевые доклады	307
Приглашенные доклады	311
Устные доклады	328
Постерные доклады	359



СЕКЦИЯ 3

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ
ОСНОВЫ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ
ПРОЦЕССОВ**

СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ КОНТРОЛЯ И КОРРЕКТИРОВКИ ТЕХНОЛОГИЙ ПРОИЗВОДСТВА СТАЛЕЙ

Григорович К.В.

*Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской Академии Наук (ИМЕТ РАН),
119991, Москва, Ленинский проспект 49,
e-mail: konstantin.grigorovich@gmail.com*

Разработка и оптимизация промышленных металлургических технологий производства сталей является сложным процессом, требующим значительных материальных и временных затрат. Одним из важнейших контролируемых параметров качества сталей является чистота по примесям и неметаллическим включениям с определением их состава, морфологии и размерных распределений. Был разработан метод анализа и оптимизации технологий производства качественных сталей включающий использование методов ФГА, растровой электронной микроскопии с рентгеновским микроанализом и математического компьютерного моделирования. Математическое компьютерное моделирование технологий, позволяющее адекватно описывать реальные высокотемпературные химические и физические процессы в металлургических агрегатах существенно удешевляет процессы оптимизации действующих и разработку новых технологий производства сталей. Поэтому разработка комплексных динамических моделей агрегатов выплавки и внепечной обработки, включающие модели отдельных агрегатов, является весьма актуальным направлением исследований. Применение разработанных методов контроля и оптимизации технологий обеспечит повышение качества стали и снижение ее себестоимости, высокую стабильность производства и конкурентоспособность предприятия на рынке металла.

В докладе будут показаны возможности совместного применения методов ФГА, микрозондового анализа и оптической эмиссионной PDA спектроскопии для контроля чистоты стали. Будут обсуждены возможности разработанного метода для оптимизации технологий внепечной обработки стали. Будут приведены примеры анализа и корректировки технологий выплавки и ковшевой обработки стали различных марок в условиях действующего производства.

ПОВЕДЕНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ ПРИ ВЫПЛАВКЕ СТАЛИ В ДУГОВЫХ СТАЛЕПЛАВИЛЬНЫХ ПЕЧАХ

Еланский Д.Г.

*Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»,
119049, Москва, Ленинский проспект 4, стр. 1;
Выксунский филиал НИТУ «МИСИС», 607036, Нижегородская область,
г. Выкса, р.п. Шиморское, ул. Калинина, 206
e-mail: de-misis@inbox.ru*

Современные сталеплавильные процессы проходят в две стадии, окислительную в основном сталеплавильном агрегате, конвертере или дуговой сталеплавильной печи (ДСП) и восстановительную при ковшевой обработке.

Выполненный анализ плавов крупнотоннажных ДСП показал, что в результате окислительного рафинирования выход годного от металлошихты до жидкого полупродукта на выпуске составляет 84-93% и зависит от практики работы конкретной печи и, в меньшей степени, от сортамента. Оценили коэффициенты усвоения элементов для, низко- и средне-углеродистого сортамента, по технологической цепочке от ДСП до разливки. Нестабильность состава лома в завалке ДСП вносит большой вклад в разброс получаемых результатов, вариации состава лома иллюстрирует содержание меди в металле на выпуске из ДСП¹.

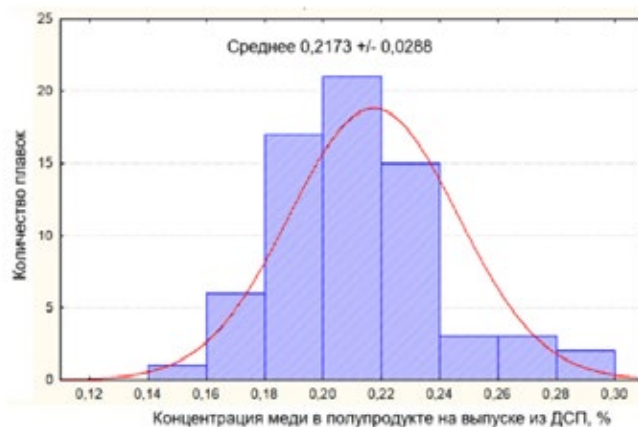


Рисунок 1. Распределение концентрации меди в полупродукте на выпуске из ДСП.

Полученные коэффициенты усвоения элементов в ДСП носят оценочный характер, но более точны для ковшевой обработки и разливки, например, для марганца: ДСП – 0,11; ковш-печь – 0,50 и выше, разливка – 0,98.

Литература

1. Еланский Д.Г. 8-я Международная промышленная конференция «ЭЛЕКТРОСТАЛЬ: ТЕХНОЛОГИЯ, ОБОРУДОВАНИЕ, МАТЕРИАЛЫ», Москва, 16.02.2024. Электронный документ.

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ СОЗДАНИЯ ФЕРРОСПЛАВОВ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ

Заякин О.В., Жучков В.И., Кель И.Н.

*Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук,
620016, Россия, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 101,
e-mail: zferro@mail.ru*

Основным видом продукции ферросплавных заводов являются стандартные ферросплавы, которые зачастую не обладают всеми необходимыми служебными характеристиками, а развивающаяся прогрессивная технология сталеплавильного производства вынуждена приспосабливаться к существующему сортаменту ферросплавов, стандарты на которые не обновлялись несколько десятилетий. Кроме того, поменялись источники и рынки ферросплавного сырья, снизилось его качество и содержание ведущих элементов, что затрудняет или исключает возможность получения ферросплавов по существующим стандартам. В связи с этим требуется создание более эффективных ферросплавов нового поколения, пригодных для прогрессивных процессов развивающихся областей металлургии и выплавляемых из доступного минерального и техногенного сырья.

В ИМЕТ УрО РАН разработан комплексный подход к оценке физико-химических характеристик ферросплавов, ответственных за усвоение элементов в жидком металле и его качество, включающий определение: температур начала и конца плавления; плотности; кинетики окисления; количества и формы образующихся неметаллических включений в обрабатываемом расплаве; теплового эффекта взаимодействия ферросплава с железоуглеродистым расплавом; продолжительности плавления ферросплава, его механических и теплотехнических характеристик.

В работе показано, что из нетрадиционного отечественного рудного сырья на основе глубоких физико-химических и технологических изысканий реально создавать новые процессы и комбинации разных видов ферросплавов, не уступающих по своим технико-экономическим показателям продукции, полученной из богатых импортных материалов.

Схема создания ферросплавов нового поколения базируется на комплексной оценке металлургических характеристик существующего минерального и техногенного сырья, развитии новых ресурсо- и энергосберегающих химико-технологических и металлургических процессов, изучении физико-химических характеристик получаемых ферросплавов и оценке качества обрабатываемой ими стали.

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН.

ВЛИЯНИЕ ВОДОРОДА НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТРУБНЫХ СТАЛЕЙ

Пышминцев И.Ю., Хаткевич В.М., Худнев А.А.

*ООО «ИЦ ТМК», 121205, Москва, Большой б-р, дом 5,
e-mail: igor.pyshmintsev@tmk-group.com*

Нарастающее внимание к вопросам декарбонизации промышленности и транспорта обуславливает интерес к альтернативным источникам энергии для создания комплекса «зелёной» энергетики. Важной составляющей концепции является использование водорода, который не участвует в образовании парниковых газов, а в силу физико-химических особенностей применимость материалов для его производства, транспортировки, хранения и непосредственного использования требует исследований.

В докладе представлены обобщённые данные о различных видах деградации свойств металлических материалов при взаимодействии с водородом, таких как высокотемпературная водородная коррозия и водородное охрупчивание. Рассмотрены основные механизмы влияния водорода на свойства трубных сталей различных классов.

Представлены результаты исследования поведения материалов при взаимодействии с водородосодержащей средой, полученные в научных центрах компании ТМК (АО «РусНИТИ», ООО «ИЦ ТМК»). Установлены закономерности насыщения металла водородом из газовой фазы в зависимости от уровня приложенных напряжений и пластической деформации на примере низкоуглеродистой стали. Проведена оценка стойкости к водородному охрупчиванию металла труб большого диаметра при давлении водорода 10 МПа. Определено влияние наводороживания на механические свойства среднеуглеродистых трубных сталей при сероводородной коррозии. Установлена зависимость степени деградации механических свойств от уровня прочности при интенсивном электролитическом наводороживании среднеуглеродистой стали. Определены принципы легирования, обеспечивающие сочетания высокой прочности со стойкостью к водородному охрупчиванию.

На основе анализа современных представлений и результатов исследований в техническом комитете по стандартизации ТК357 «Стальные и чугунные трубы и баллоны» разработан проект стандарта на стальные бесшовные трубы для транспортировки газообразного водорода и на стальные баллоны для его хранения, перевозки и использования. При разработке учитывались требования ASME 31.12 «Hydrogen piping and pipelines», IGC DOC 121/14 “Hydrogen pipeline systems» и ряда других международных стандартов, а также результаты собственных исследований.

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ СОЗДАНИЯ ИННОВАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ ПРОИЗВОДСТВА КОНСТРУКЦИОННЫХ СТАЛЕЙ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ С КОМПЛЕКСОМ ПОВЫШЕННЫХ СВОЙСТВ

Бабенко А.А., Смирнов Л.А., Уполовникова А.Г., Сметанников А.Н.

*Институт металлургии УрО РАН, 620016, Екатеринбург, Амундсена, 101,
e-mail: babenko251@gmail.com*

В ряду приоритетных задач развития металлургического комплекса страны сохраняется актуальность проблемы повышения качества и снижения себестоимости металлопродукции. Повышение качественных характеристик конструкционных сталей осуществляется на всех технологических переделах производства стали. Исследованы термодинамика реакции окисления фосфора, макрокинетика окислительных процессов, фазовый состав, структура и физико-химические свойства многокомпонентных шлаков системы $\text{CaO-SiO}_2\text{-FeO-MnO-P}_2\text{O}_5\text{-MgO}$ и $\text{CaO-SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$, включающих вязкость, равновесное межфазное распределение серы и бора при внепечной обработке стали.

Результаты фундаментальных исследований положены в основу разработки инновационных технологических решений, обеспечивающих:

-выплавку стального полупродукта в кислородных конвертерах и современных ДСП под магнизальными шлаками рационального состава с гарантированно низким содержанием фосфора и высокой стойкостью огнеупорной футеровки сталеплавильных агрегатов;

-глубокую десульфурацию и прямое микролегирование конструкционных марок стали бором на установках ковш – печь с использованием экологически чистых борсодержащих шлаков.

Внедрение разработанных инновационных технологических решений обеспечило производство экономнолегированных марганцем низкоуглеродистых борсодержащих конструкционных сталей нового поколения с низким содержанием фосфора, серы и комплексом повышенных механических свойств, в т.ч. для труб большого диаметра категории прочности X80 без термообработки с перспективой выхода на категорию прочности X100-X120.

ОСОБЕННОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ С ПЕРЕХОДНЫМИ И РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫМИ МЕТАЛЛАМИ

Бажин В.Ю., Пиирайнен В.Ю.

*Санкт-Петербургский горный университет императрицы
Екатерины II факультет переработки минерального сырья
199106, Санкт-Петербург, Васильевский остров, 21 линия д.2
e-mail: bazhin-alfoil@mail.ru*

Алюминиевые сплавы, легированные и модифицированные переходными металлами вместе с редкоземельными металлами все больше находят свое применение для материалов стратегического назначения. В новейших технологиях используются уникальные физические свойства редкоземельных металлов (РЗМ) в совокупности с переходными металлами. В настоящее время комплексные лигатуры легких металлов получают прямым сплавлением компонентов, алюмотермическим восстановлением оксидов, фторидов, нитридов и галогенидов. Изучен процесс получения алюминиевых лигатур, синтезируемых восстановлением соединений РЗМ и переходных металлов в сплаве алюминий – магний, при образовании интерметаллических соединений заданного состава. При помощи специальных разработанных программ ЭВМ определены термодинамические условия для образования интерметаллидов с РЗМ и переходными металлами в расплавах галогенидов с необходимой стехиометрией. Проведенные исследования эндогенного процесса получения алюминиевых лигатур с переходными и редкими металлами показывают, что интерметаллиды синтезируются в форме, приближенной прямоугольной, и в их центральной части наблюдается свободное пространство, заполненное материалом матрицы, содержащей 0,2-1% переходного металла. В случае наличия в шихте соединений эрбия и иттербия, синтезируются коагулированные кристаллы, состоящие из Mn_3Er и Mg_5Yb . Путем изменения состава исходных реагентов, добавок легирующих редких элементов, подбора различных режимов процесса (температуры, ультразвука, перемешивания и др.) можно заранее прогнозировать структуру, технологические и рабочие характеристики синтезируемых лигатур на основе алюминия.

Литература

1. Бажин В.Ю., Суслов А.П., Котова Е.Л. Современный взгляд на аномалии в группах металлов Периодической системы Д.И. Менделеева. *Записки Горного института*. 2019. Т. 239. С. 520-527.
2. Bazhin V.Yu., Savchenkov S.A., Gordevnin N.A. Investigation of the ytterbium reduction process in the synthesis of Al–Yb master alloys for the modification of aluminum alloys. *Non-Ferrous Metals*. 2022. No. 2. pp. 65–72.

ВЛИЯНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПРОЦЕССА СЛП НА ТЕКСТУРУ АУСТЕНИТНОГО СПЛАВА 03X17H14M3

Базалеева К.О., Железный М.В., Голубничий А.А.

*Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы
117198, Москва, ул. Миклухо-Маклая, 10/2
e-mail: bazaleeva-ko@rudn.ru*

Известно, что технологические параметры селективного лазерного плавления (СЛП) оказывают влияние на структурные характеристики материала, в том числе на его текстуру¹. В данной работе исследовалось воздействие защитной атмосферы на структуру аустенитного сплава 03X17H14M3 после СЛП.

Образцы стали были синтезированы из порошка дисперсностью $20 \div 50$ мкм на установке Trumpf TruPrint 1000 при мощности лазерного излучения 110 Вт, скорости сканирования 750 мм/с, расстоянии между лазерными треками 50 мкм и шахматной стратегии плавления. В качестве защитной атмосферы для первой партии образцов использовался N_2 , для второй – Ar.

Образцы, полученные в различных защитных атмосферах, подвергались сравнительному структурному анализу методами металлографии, растровой электронной микроскопии, рентгеновской дифракции, также определялась их микротвердость.

В результате было выявлено, что единственным существенным отличием структур, сформированных СЛП в различных защитных атмосферах, является их различная текстура: в образцах, синтезированных в среде N_2 , плоскость сканирования лазера преимущественно совпадала с кристаллографической плоскостью типа $\{100\}$, а в среде Ar с плоскостью типа $\{110\}$ (рис.1).

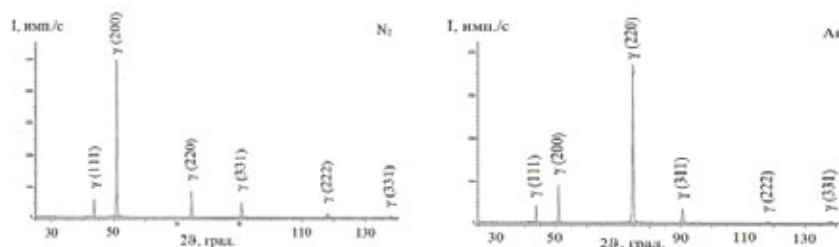


Рисунок 1. Дифрактограммы образцов стали 03X17H14M3 после СЛП в среде N_2 и Ar.

Литература

1. J.J. Marattukalam et al. Materials and Design, 2020, **193**, 108852.

Публикация выполнена в рамках проекта №202516-2-000 системы грантовой поддержки научных проектов РУДН.

ВЛИЯНИЕ МИКРОЛЕГИРУЮЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ НА ФОРМИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ВЫДЕЛЕНИЙ ПРИ ТЕРМОДЕФОРМАЦИОННОЙ ОБРАБОТКЕ ВЫСОКОПРОЧНЫХ НИЗКОУГЛЕРОДИСТЫХ СТАЛЕЙ

Дагман А.И.,^а Колдаев А.В.,^б Арутюнян Н.А.,^в Казарин А.Ю.^а

*^аПАО «НЛМК», 398005, Липецк, площадь Metallургов, 2,
e-mail: dagman_ai@nlmk.com*

^бФГУП «ЦНИИчермет им. ИП. Бардина», 105005, Москва, улица Радио, 23/9, стр. 2

^вХимический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы, 1, стр. 3

В настоящее время в мировом и отечественном автомобилестроении сохраняется тенденция роста объемов потребления горячекатаных и холоднокатаных высокопрочных микролегированных сталей. Для разработки экономичных вариантов легирования, обеспечивающих достижение заданных механических свойств, ведутся активные исследования в разных направлениях. Особое место среди них занимает поиск закономерностей влияния химического состава и параметров термомеханической обработки металла на формирование системы наноразмерных фазовых выделений разных типов и, в результате, получаемые показатели механических свойств.

В докладе обобщены результаты исследований горячекатаного и холоднокатаного проката высокопрочных низкоуглеродистых сталей, микролегированных Ti, Nb, V, Mo в различных сочетаниях. В зависимости от системы микролегирования и параметров термомеханической обработки в микроструктуре проката в разном количестве присутствуют наноразмерные карбидные (карбонитридные) выделения нескольких типов. Аустенитные выделения обуславливают формирование мелкозернистой микроструктуры, ферритные - вносят вклад в дисперсионное твердение. Образующиеся в процессе $\gamma \rightarrow \alpha$ превращении межфазные выделения способствуют реализации обоих механизмов упрочнения.

Для анализа типа и количества присутствующих в прокате наноразмерных фазовых выделений использовали метод просвечивающей электронной микроскопии и термодинамический расчет температурных зависимостей равновесного фазового состава исследуемых сталей. Установлено, что наиболее высокую предрасположенность к образованию межфазных выделений имеют титан и ванадий. Присутствие в составе стали молибдена стимулирует ускорение зарождения карбидных (карбонитридных) выделений, но сдерживает их рост. Показано, что при разработке экономичной системы микролегирования титан имеет преимущества по сравнению с ванадием.

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ И ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ЦИФРОВЫХ ДВОЙНИКОВ АГЛОКОКСОДОМЕННОГО ПРОИЗВОДСТВА И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ НА ПРАКТИКЕ

Дмитриев А.Н., Витькина Г.Ю., Золотых М.О.

*Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук,
620016, Россия, Екатеринбург, ул. Амундсена, 101,
e-mail: andrey.dmitriev@mail.ru*

Показана роль математических моделей в совершенствовании технологии доменной плавки. Приведены примеры новых разработок Института металлургии УрО РАН в области цифровых моделей доменного производства, в частности, одномерные, двумерные и трехмерные математические модели различных зон доменной печи, включающие в себя анализ и прогноз явлений газодинамики, теплообмена, восстановления в доменной печи¹; мониторинг состояния огнеупорной футеровки и наполнения горна доменной печи; прогноз содержания кремния в чугунах и шлаке на основе нейросетевых технологий; оптимизацию состава и улучшение металлургических характеристик железорудного сырья (агломерат, окатыши) и кокса с целью повышения эффективности доменной плавки и анализ эффективности работы доменных печей на основе расчета минимального расхода кокса^{2,3}. В основе данных моделей лежат физико-химические и теплофизические явления, протекающие в доменной печи, с учетом их двумерности, заложенной при постановке задачи. Новые разработки в области анализа и контроля явлений, происходящих в различных зонах доменной печи, позволяют поднять на принципиально новый уровень технологию и способы ведения доменной плавки, позволяющие экономить топливно-энергетические ресурсы. Показана возможность использования цифровой модели в темпе с процессом при использовании показаний датчиков через систему управления базами данных доменного цеха металлургического комбината.

Литература

1. Dmitriev A.N. *Mathematical Modeling of the Blast Furnace Process.* – Cambridge, UK. Cambridge Scholars Publishing Ltd., 2019. – 209.
2. Дмитриев А.Н., Золотых М.О., Витькина Г.Ю. *Черная металлургия. Бюллетень научно-технической и экономической информации.* 2020, **76**, 339.
3. Дмитриев А.Н., Золотых М.О., Витькина Г.Ю. *Черная металлургия. Бюллетень научно-технической и экономической информации.* 2023, **79**, 455.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ИМЕТ УрО РАН.

ПОВЫШЕНИЕ КАЧЕСТВА ЖЕЛЕЗОРУДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ПЕРСПЕКТИВНОЕ НАПРАВЛЕНИЕ ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ВЫПЛАВКИ ЧУГУНА В ДОМЕННОЙ ПЕЧИ

Загайнов С.А.,^а Ковалев Д.А.^б

^а *Уральский федеральный университет. 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира 19, s.a.zagaynov@urfu.ru*

^б *ПАО «ТЛМК» 398040, н.п. Металлургов 2*

Основным показателем качества любого шихтового материала является стабильность всех его характеристик. Из всех характеристик агломерата в основном рассматриваются показатель холодной прочности и содержание фракции – 5 мм. Снижение доли фракции -5 мм в шихте доменных печей достигается путем смешивания агломерата с окатышами в системе шихтоподачи.

Фракционный состав агломерата во многом определяет развитие физико-химических процессов, протекающих в доменной печи. крупная фракция (+25 мм) определяет сегрегацию, а нестабильность содержания этой фракции в шихте затрудняет формирование оптимального распределения рудной нагрузки по радиусу печи. Частицы малого диаметра могут заполнять межкусковое пространство частиц крупного диаметра и, тем самым, снижают газопроницаемость слоя. Для неподвижного слоя критическим отношением диаметра мелких и крупных частиц составляет 0,15, а для движущегося слоя может достигать до 0,30.

Интенсивность теплообмена и восстановления с повышением диаметра частиц снижается. Зависимость суммарного коэффициента теплопередачи и скорости восстановления куска от диаметра кусков обратно пропорциональна. При этом показатель степени при диаметре составляет 1,3–1,6 (зависит от коэффициента теплопроводности и пористости куска).

С использованием моделирования газодинамики верхней зоны печи, закономерностей теплообмена и восстановления установлено, что оптимальным размером частиц железорудных материалов является диаметр 5–20 мм. При работе доменных печей с таким гранулометрическим составом может быть достигнуто снижение удельного расхода суммарного углерода топлива на 3–5 кг на тонну чугуна.

Другим источником снижения удельного расхода суммарного углерода топлива является повышение стабильности химического состава шихты. Снижение среднеквадратичного содержания железа в ЖРМ и основности в два раза позволит снизить расход суммарного углерода топлива не менее чем на 5 кг на тонну чугуна.

ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССОВ ПРЯМОГО ВОССТАНОВЛЕНИЯ ЖЕЛЕЗОРУДНЫХ КОНЦЕНТРАТОВ В ВОДОРОДНОЙ СРЕДЕ

Кожухов А.А., Черменев Е.А., Фомин В.И.

*Старооскольский технологический институт им. А.А. Угарова (филиал)
Национального исследовательского технологического университета «МИСИС»,
309516, Старый Оскол, Белгородская обл., микрорайон им. Макаренко, д. 42,
e-mail: kosuhov@yandex.ru*

Одним из перспективных направлений позволяющим сделать процесс получения железа в различных агрегатах более экологичным является расширение использования водорода при осуществлении технологических процессов.

С целью оценки возможности прямого восстановления железорудного концентрата водородом был проведен комплекс лабораторных исследований. В качестве исходных материалов для изучения процесса прямого восстановления железорудного концентрата водородом использовали магнетитовый железорудный концентрат и магнетитовый концентрат, предварительно окисленный при температуре 800°C.

В ходе исследований изучался химический и гранулометрический состав концентратов, а также анализировалась микроструктура. Процесс восстановления изучался на термоанализаторе SDT Q600 при постоянной подаче аргона с расходом 100 мл/мин и водорода – 6 л/ч. Восстановление проводили при нагреве до 1000°C с постоянной скоростью 20°C/мин.

Гранулометрический анализ показал, что при окислении исходного магнетитового концентрата в статической печи при температуре 800°C приводит к росту среднего размера частиц с 19,0 мкм до 26,6 мкм, что говорит об укрупнении частиц концентрата при окислительном обжиге. Анализ микроструктуры показал существенные различия в размере частиц концентрата, при этом следует отметить, что у частиц исходного концентрата грани частиц острые, а у окисленного сглаженные и произошло объединение части частиц, возможно за счет сплавления.

Проведенный термогравиметрический анализ показал возможность осуществления процесса прямого восстановления, как исходного магнетитового концентрата, так и предварительно окисленного при температуре 800°C.

В ходе анализа установлено, как с точки зрения энергетических затрат так и, скорости протекания процесса прямого восстановления железорудного концентрата водородом, наиболее целесообразно использовать предварительно окисленный концентрат.

РОЛЬ МЕТАЛЛОВЕДЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ ПРИ ОСВОЕНИИ НОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ И СТАЛЕЙ ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА ТРУБ

Кудашов Д.В.,¹ Волкова Е.А.,¹ Эфрон Л.И.,³ Мунтин А.В.,³ Комиссаров А.А.²

¹ НИТУ МИСИС г. Выкса,

² НИТУ МИСИС г. Москва

³ АО «ВМЗ»,

Научные разработки в направлении развития технологий производства как сварных, так и бесшовных труб связаны, в первую очередь, с поиском оптимальных композиций легирующих элементов с учетом технологической цепочки производства.

В рамках данной работы рассмотрены подходы к созданию новых трубных сталей с учетом технологии производства начиная от лабораторных исследований до промышленного опробования. На примерах технологии лабораторных экспериментов с применением металлургических подходов к исследованиям структуры на различных этапах производства показана возможность получения сварных и бесшовных труб с повышенной стойкостью к водородному растрескиванию и повышенной хладостойкости на основе низкоуглеродистых низколегированных сталей с различными системами микролегирования. Выявлено, что в сварных трубах возможно достижение перспективных характеристик как с применением, так и без применения объемной термообработки труб. В бесшовных трубах оптимальная комбинация коррозионных и механических свойств в экономнолегированных сталях достигается после объемной термической обработки состоящей из закалки и отпуска. Микроструктурные исследования и термодинамические расчеты показали, что использование ниобия и ванадия в качестве микролегирующих добавок, хоть и может приводить к сопоставимым эффектам с точки зрения влияния на дисперсионное твердение, однако, механизмы влияния на окончательную структуру труб могут значительно отличаться.

Часть работа была выполнена в рамках комплексного проекта по теме «Разработка и внедрение комплексных технологий производства бесшовных труб из сталей нового поколения с управляемой коррозионной стойкостью при осложненных условиях эксплуатации для топливно-энергетического комплекса Российской Федерации» в рамках Соглашения №075-11-2023-011 от 10.02.2023 г. по постановлению Правительства РФ №218 от 09.04.2010 г

СОВРЕМЕННЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ПОРОШКОВОЙ МЕТАЛЛУРГИИ

Логачёва А.И., Логачев И.А., Басков Ф.А.

*АО «Композит»,
kompozit0102@mail.ru*

В работе рассмотрены современные и перспективные направления в области порошковой металлургии применительно к жаропрочным сплавам, используемым для изготовления наиболее ответственных и тяжелонагруженных элементов конструкции. Технология порошковой металлургии включает следующие основные операции: получение исходных порошковых материалов; формование порошков в заготовки с заданными размерами; термическая обработка.

Одним из направлений порошковой металлургии является гранульная металлургия, сочетающая затвердевание расплава в виде микрослитков – гранул – с высокой скоростью кристаллизации и последующую их консолидацию в формообразующей оснастке до беспористого состояния. Для консолидации гранул используют методы горячего изостатического прессования (ГИП), вакуумное горячее прессование, пластическая деформация или их сочетание (изостатическая штамповка). Одним из основных преимуществ гранульной металлургии является возможность управления процессами фазо- и структурообразования, а, следовательно, и механическими характеристиками сплавов, посредством использования порошкового сырья различного гранулометрического состава, и варьирования режимов ГИП и последующей термической обработки.

Другим перспективным и активно развивающимся направлением изготовления изделий из порошковых материалов является аддитивное производство (АП). АП представляет собой совокупность технологий создания трехмерных физических объектов по данным исходных электронных моделей путем послойного добавления материала с использованием селективного подвода энергии (лазерный или электронный луч, электрическая дуга). Интерес к технологиям АП обусловлен возможностью изготовления сложнопрофильных деталей с высокой точностью построения и относительно низкой шероховатостью поверхности. Кроме того, технологии АП позволяют реализовывать возможности топологической оптимизации деталей и узлов, что способствует улучшению массово-габаритных и функциональных характеристик изделий. В процессе послойного синтеза происходит расплавление порошкового материала и последующая кристаллизация при высоких скоростях охлаждения. В результате материал характеризуется сильными термическими напряжениями, структурной анизотропией, а также возможным наличием дефектов в виде пор и трещин. Для устранения перечисленных недостатков применяют различные термические постобработки, в том числе ГИП, отжиг и закалку с последующим старением.

СВС ТЕХНОЛОГИЯ ПЕРЕРАБОТКИ ПЫЛЕЙ ФЕРРОСПЛАВНОГО ПРОИЗВОДСТВА

Зиатдинов М.Х.^а, Манашев И.Р.^б, Манашева Э.М.^б

^а ФГБОУ ВО «НИ ТГУ», 634050, г. Томск, пр-кт Ленина, д. 36

^б ФГБОУ ВО «МГТУ им. Г.И. Носова», 455000, г. Магнитогорск, пр-кт Ленина, 38,
e-mail: mirney@ya.ru

Россия является крупным производителем ферросплавов (рис. 1), в процессе изготовления которых образуется значительное количество различных отходов и некондиционных материалов, требующих утилизации¹. Твёрдые отходы в значительном количестве продолжают складироваться в отвалы, занимающие обширные территории. Для переработки мелкодисперсных ферросплавов предложен металлургический СВС-процесс², отличающийся высокой энергоэффективностью и экологичностью. Показана целесообразность использования новой СВС-технологии для переработки циклонных пылей и отсевов крупно и мелкотоннажных ферросплавов, с получением продуктов в виде товарных азотированных ферросплавов и композиционных материалов на основе нитридов, боридов и карбидов для сталелитейной и огнеупорной промышленности.

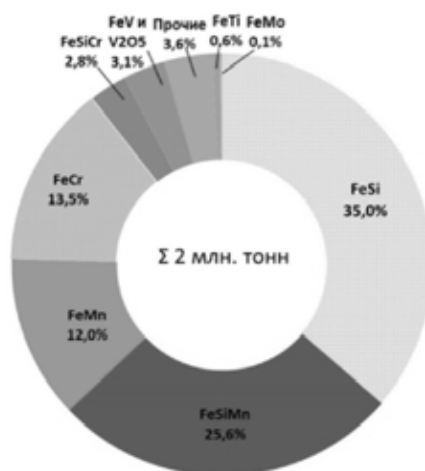


Рисунок 1. Структура ферросплавного производства России (2023 г.)

Литература

1. Жучков В.И., Романова О.А., Заякин О.В., Сиротин Д.В. Техногенные ресурсы ферросплавной отрасли промышленности // Фундаментальные исследования и прикладные разработки процессов переработки утилизации техногенных образований: труды V Конгресса с международным участием и Конференции молодых ученых «ТЕХНОГЕН-2021». – Екатеринбург: УрО РАН, 2021. – С. 36-40.
2. Манашев И.Р., Гаврилова Т.О., Шатохин И.М., Зиатдинов М.Х., Леонтьев Л.И. Утилизация дисперсных отходов ферросплавного производства на базе металлургического СВС-процесса // Известия высших учебных заведений. Черная Металлургия. – 2020. – № 63(8). – С. 591-599.

ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ПРОИЗВОДСТВА СТАЛЬНОЙ ПОЛОСЫ РАЗЛИЧНОГО СОРТАМЕНТА НА ЛИТЕЙНО-ПРОКАТНЫХ КОМПЛЕКСАХ

Мунтин А.В.

*АО «Выксунский металлургический завод», г. Выкса, ул. Братьев Бата-шевых, д.45,
e-mail: muntin_av@vsw.ru*

Актуальность научного исследования обусловлена следующим:

1. Производство горячекатаной стальной полосы на литейно-прокатных комплексах (ЛПК) является одной из наиболее востребованных технологий, в мире на более чем 70 комплексах производится более 120 млн. тонн стальной полосы в год и объём постоянно растёт;
2. Прокатка на ЛПК имеет особенности, которые отличают её от ши-рокополосных станов с повторным нагревом слябов, что открывает новое направление для исследования;
3. В подходах к проектированию новых цехов технология входит в основополагающие аспекты, но до сих пор не предпринята попытка обобщить соответствующие рекомендации для прокатных станов в составе ЛПК, а имеющийся в мире опыт разрознен и в публикациях разных организаций встречаются противоречивые результаты.

Целью работы является обобщение и развитие теоретических и практических результатов исследований технологии совмещённого процесса разливки и прокатки на ЛПК, а также разработка концепции выбора рационального состава технологического оборудования станов для формирования требуемого качества горячекатаных полос различного сортамента.

Для достижения поставленной цели решены следующие задачи:

1. Сбор данных и анализ оборудования литейно-прокатных комплексов в мире, а также технологических режимов и производимой продукции;
2. Разработка методической базы исследования новых технологий и оборудования литейно-прокатных комплексов на основе системы исследований и разработок;
3. Определение особенностей влияния состава оборудования и технологических параметров производства горячекатаных полос из низколегированных низкоуглеродистых, среднеуглеродистых, микролегированных, кремнистых электротехнических и других сталей, выявление рациональных технических и технологических приёмов для каждого вида продукции;
4. Обобщение результатов и разработка научнообоснованной методики выбора рационального состава оборудования прокатных станов ЛПК;
5. Промышленное опробование и внедрение отдельных результатов работы в условиях действующего литейно-прокатного комплекса.

СИНТЕЗ И ОБРАБОТКА ПОРОШКОВ НА ОСНОВЕ ВОЛЬФРАМА В ПОТОКАХ ТЕРМИЧЕСКОЙ ПЛАЗМЫ

**Самохин А.В., Алексеев Н.В., Фадеев А.А., Асташов А.А.,
Синайский М.А., Дорофеев А.А., Калашников Ю.П.**

*Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН,
119334, Москва, Ленинский проспект, 49
e-mail: asamokhin@imet.ac.ru*

В докладе приводится описание плазменных технологий и оборудования, разработанных в ИМЕТ РАН для получения нанопорошков W, W-5Ni-2Fe, W-20Cu, W-7C, W-7C-10Co, а также микропорошков этих материалов, состоящих из сферических частиц.

Все нанопорошки были получены в потоке водородсодержащей термической плазмы электродугового плазматрона из порошков оксидов металлов. Наночастицы в плазмохимическом синтезе образуются в результате химической конденсации из газовой фазы при охлаждении плазменной струи, распространяющейся в охлаждаемом объеме реактора.

Полученные нанопорошки состоят из агрегированных наночастиц, размер которых не превышает 100 нм. Наночастицы псевдосплавов имеют структуру ядро (W) – оболочка (Ni-Fe/Cu) из-за сильной разницы температур конденсации отдельных металлов.

Полученные нанопорошки W, W-Ni-Fe, W-Cu использовали для приготовления водных наносuspensions, из которых методом распылительной сушки были получены соответствующие наноструктурные микрогранулы. Выход микрогранул фракции 20-60 мкм при распылительной сушке составил более 50%.

Наноструктурированные микрогранулы были обработаны в потоке термической плазмы электродугового плазматрона для уплотнения и сфероидизации. В результате были получены микропорошки W, W-Ni-Fe, W-Cu, (W-C)-Co, состоящие из плотных сферических частиц. Микроструктура частиц характеризуется размерами зерен преимущественно в диапазоне микронных размеров.

Плазменные технологии позволяют получать порошки на основе вольфрама как в виде нанопорошков с размером частиц менее 100 нм, так и микропорошков, состоящих из частиц размером 20 - 50 мкм, для получения компактов различными методами, включая современные аддитивные технологии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 22-19-00112.

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФТОРИДНЫХ РАСПЛАВОВ, ПЕРСПЕКТИВНЫХ ДЛЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

**Ткачева О.Ю.,^{а,б} Мушников П.Н.,^а Руденко А.В.,^а Редькин А.А.,^а
Худорожкова А.О.,^а Зайков Ю.П.^{а,б}**

^а *Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Академии наук РФ,
620099, Екатеринбург, Академическая 20
e-mail: o.tkacheva@ihte.ru*

^б *Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
620002, Екатеринбург, проспект Мира 19*

Одна из ключевых задач атомной энергетики - переработка в промышленных масштабах отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) атомных электростанций, направленная на минимизирование радиационной опасности, выделение полезных веществ (U, Pu) для их дальнейшего применения, а также безопасную утилизацию неиспользуемых компонентов, обладающих высокой радиоактивностью. Для эффективной переработки минор-актинидов предложено использовать жидкосольевые ядерные реакторы (ЖСР), обладающие целым рядом экономических и экологических преимуществ, а также повышенной безопасностью. Перспективными средами для обеспечения работы ЖСР являются расплавы солей фторидов на основе систем FLiNaK (эвтектика LiF-NaF-KF) и FLiBe (эвтектика LiF-BeF₂), которые характеризуются хорошими теплофизическими, нейтронно-физическими и физико-химическими свойствами.

В работе приводятся результаты систематических исследований базовых физико-химических свойств фторидных расплавленных смесей на основе системы FLiNaK, содержащей фториды редкоземельных металлов (РЗМ). В широком температурном интервале определено влияние добавок фторидов РЗМ на температуру ликвидуса методами термического анализа, плотность и вязкость с использованием гидродинамического и ротационного методов, теплопроводность и температуропроводность методом лазерной вспышки.

Температурные и концентрационные зависимости физико-химических свойств системы FLiNaK-(РЗМ)F₃ хорошо согласуются с известными в литературе, однако, в то же время, многие данные получены впервые.

Экспериментальные результаты, полученные на модельных расплавленных системах, могут быть положены в основу математического моделирования методами молекулярной динамики и квантово-механических расчетов, что позволит определить оптимальные составы расплавленных смесей и технологические режимы, оценить влияния тепловыделения делящихся материалов на физико-химические и теплофизические свойства.

РАФИНИРОВАНИЕ МЕТАЛЛА ПРИ ЭШП

Чуманов И.В.

*Южно-Уральский государственный университет (НИУ),
454080, Россия, г. Челябинск, пр. Ленина 76,
e-mail: chunanoviv@susu.ru*

Эффективной технологией для получения сталей и сплавов с низкой концентрацией неметаллических включений является ЭШП, где рафинирующей средой является рабочий флюс. Процесс предполагает три границы взаимодействия жидкого металла с рафинирующей средой: металлическая пленка на поверхности оплаваемого электрода – флюс, капля электродного металла – флюс, зеркало ванны жидкого металла – флюс. Степень очистки на этих границах не равнозначна. Основное рафинирование протекает на оплаваемой поверхности электрода, когда образуются жидкая металлическая пленка. Снижение концентрации включений на этой границе пропорционально их размеру в плёнке жидкого металла – чем тоньше плёнка, тем полнее рафинирование. Прежде всего от включений, размер которых равен толщине пленки или превышающей ее. Размер пленки жидкого электродного металла на оплаваемой поверхности электрода – не одинаков, ее толщина увеличивается по мере приближения к оси переплавляемого электрода. То есть, наиболее загрязненные включениями области переплавляемого электрода приходятся на худшие условия рафинирования. Необходимо обеспечить утонение жидкой металлической пленки на отправляемой поверхности расходоуемого электрода, особенно в области наибольших загрязнений без снижения и так низкой производительности процесса. Так же нужно уменьшить размер капель электродного металла и увеличить время их контакта с рабочим флюсом, исключить доставку капель в жидкую ванну по оси формируемого слитка. Создать условия для обеспечения не глубокой, равномерной по высоте металлической ванны, что позволит создать осевую кристаллическую структуру и исключит блокирование всплывания включений. Из исследований, направленных на решение рассматриваемой задачи, стоит остановиться на хорошо апробированной в условиях производства технологии с вращением расходоуемого электрода. Управляя возникающими в этом случае центробежными силами, удаётся комплексно решать задачу снижения концентрации неметаллических включений размером 10 мкм и менее, при этом сохраняя все преимущества электрошлаковой технологии. Получение неглубокой плоской жидкой металлической ванны создаёт благоприятные условия для формирования многослойных заготовок, что может служить новой областью развития технологии.

ФОРМИРОВАНИЕ РАЦИОНАЛЬНОГО СОСТАВА ШЛАКА В АКП С ЦЕЛЬЮ УЛУЧШЕНИЯ ДЕСУЛЬФУРАЦИИ И СНИЖЕНИЯ РАСХОДА ШЛАКООБРАЗУЮЩИХ МАТЕРИАЛОВ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ МАРКИ СТАЛИ

Метелкин А.А.,^{а,б} Савельев М.В.,^а Шешуков О.Ю.,^{б,в}
 Егизарьян Д.К.,^{б,в} Ткачев А.С.,^а Елин В.Ю.^а

^а АО «ЕВРАЗ НТМК», 622025, Нижний Тагил, Металлургов 1,
 e-mail: anatoly.metelkin@evraz.com

^б Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
 «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»,
 620002, Екатеринбург, Мира 28,
 e-mail: o.j.sheshukov@urfu.ru

^в Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии
 Уральского отделения РАН, 620016, Екатеринбург, Амудсена 101

В работе рассмотрены вопросы по определению рационального состава шлака, формируемого в агрегате «ковш-печь» (АКП), обладающего максимальными десульфурирующими свойствами.

Рафинировочные свойства шлаков определяются наличием «свободных» анионов кислорода (O^{2-}).¹⁻² В шлаке, формируемом в АКП, присутствуют оксиды, которые являются источниками « O^{2-} » (CaO и MgO) и оксиды, которые их поглощают (SiO_2). Дополнительно, в шлаке присутствует амфотерный оксид Al_2O_3 . Была предложена формула, в которой оксиды, проявляющие основные свойства суммируются, а оксиды проявляющие кислые свойства вычитаются, дополнительно учитывается влияние амфотерного оксида Al_2O_3 .

$$\Lambda^* = \sum_{i=1}^n (X_i \cdot \Lambda_i^*)_{\text{осн}} - \sum_{i=1}^n (X_i \cdot \Lambda_i^*)_{\text{кис}} + X_{Al_2O_3} \cdot Y_{Al_2O_3}$$

В условиях технологических операций АО ЕВРАЗ НТМК, был определен состав шлака с рациональными рафинировочными свойствами: CaO – 53,3 %; Al_2O_3 – 17,8 %; SiO_2 – 18,8%; MgO – 8,0 %; $FeO+MnO < 1,5$ %. В результате общий расход шлакообразующих материалов был снижен на 7,5 %, улучшена десульфурация для различных групп марок сталей с 7,6 до 18,8 %.

Литература

1. О.Ю. Шешуков, И.В. Некрасов, А.А. Метелкин [и др.]. Современная сталь: теория и технология: учебное пособие /– Нижний Тагил : НТИ (филиал) УрФУ, 2020. – 400 с.
2. А.М. Бигеев, В.А. Бигеев, Металлургия стали. Теория и технология плавки стали [Текст]: учеб. для вузов /– 3-е изд., перераб. и доп. – Магнитогорск: МГТУ, 2000. – 544.

ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ СВАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ СВАРНЫХ ТРУБ

Степанов П.П., Эфрон Л.И.

*АО «Выксунский металлургический завод»,
607060, Нижегородская обл., г. Выкса, ул. Братьев Баташевых, д. 45,
e-mail: Lefron@omk.ru*

Проведены систематические исследования структуры основного металла и сварных соединений труб \varnothing 60–1420 мм из низкоуглеродистых микролегированных сталей, произведенных с использованием различных видов сварки (дуговой под слоем флюса и высокочастотной), установлены основные связи между их структурой и свойствами, определены и ранжированы микроструктурные механизмы, определяющие сопротивление разрушению основного металла и сварных соединений при исследованных видах сварки.

Увеличение скорости охлаждения грубозернистой области ЗТВ при сварке сопровождается повышением в микроструктуре плотности высокоугловых границ, что обусловлено замещением гранулярного бейнита реечным и увеличением вклада границ зерен бывшего аустенита.

Влияние параметров термического цикла сварки и соответствующего изменения микроструктуры на ударную вязкость ЗТВ сталей, может быть ограничено в случае воздействия более сильных охрупчивающих факторов, например, неметаллических включений, действующих как места зарождения хрупких трещин.

Показано, что группы смежных зерен феррита (кристаллографические кластеры), у которых плоскости {001} близки к потенциальной поверхности разрушения ($\pm 20^\circ$), способствуют образованию транскристаллитного скола. В сварном соединении ТВЧ снижение ударной вязкости и хладостойкости связано с увеличенной в 2–3 раза долей кластеров {001} по линии сплавления в сравнении с основным металлом, при этом размер наиболее крупной фракции кластеров примерно в 5 раз превышает размер наиболее крупных зерен α -фазы.

При дуговой сварке наибольшее негативное влияние на хладостойкость оказывают крупные кластеры {001} размером до 160 мкм, расположенные по центру сварного шва на участках зернограничного феррита.

Предложены пути совершенствования структуры и свойств сварных соединений, разработаны, опробованы и внедрены новые и усовершенствованные технологии и стали, освоено массовое производство новых видов трубной продукции с уникальным сочетанием эксплуатационных свойств.

ТЕМПЕРАТУРНЫЕ И КОНЦЕНТРАЦИОННЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ВЯЗКОСТИ РАСПЛАВОВ Fe-(B,Si) И Co-(B,Si)

Бельтюков А.Л., Олянина Н.В., Ладьянов В.И.

*Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской Академии Наук,
426067, Ижевск, ул. Т. Барамзиной 34,
e-mail: albeltyukov@udman.ru*

Системы Fe(Co)-B-Si являются основой промышленного производства аморфных и нанокристаллических сплавов используемых в качестве магнитомягких материалов. Структура и свойства таких сплавов в значительной степени зависят от структурного состояния исходной жидкой фазы. При изучении особенностей строения жидких сплавов и анализе межчастичного взаимодействия в них часто используются косвенные методы, основанные на измерении температурных и концентрационных зависимостей их структурно-чувствительных свойств, к которым относится вязкость.

В работе методом крутильных колебаний изучены температурные и концентрационные зависимости кинематической вязкости расплавов бинарных и трехкомпонентных систем Fe-(B,Si) и Co-(B,Si).

Для всех изученных жидких сплавов температурные зависимости вязкости, полученные в режимах нагрева и охлаждения, совпадают и удовлетворительно описываются экспоненциальным уравнением Аррениуса.

Концентрационные зависимости вязкости бинарных систем (Fe-B, Fe-Si, Co-B и Co-Si) имеют монотонный куполообразный вид, свидетельствующий о сильном химическом взаимодействии в расплавах между атомами разного сорта. Особенности изотерм вязкости являются косвенным подтверждением структурных изменений, происходящих в расплаве, при варьировании состава и возможности реализации в жидких сплавах ближнего упорядочения типа соединений.

При изучении трехкомпонентных систем построены концентрационные зависимости квазибинарных срезов $\text{Fe}(\text{Co})_x\text{Si}_{(100-x)}-\text{Fe}(\text{Co})_x\text{B}_{(100-x)}$. Изотермы вязкости расплавов каждой квазибинарной системы имеют монотонный вид и близки к аддитивной сумме значений вязкости составляющих её бинарных систем. По-видимому, в трехкомпонентных расплавах Fe(Co)-B-Si реализуется химически микронеоднородная структура, составляющими которой являются атомные микрогруппировки с ближним упорядочением характерным для сплавов бинарных систем Fe(Co)-B и Fe(Co)-Si.

СХЕМА ПОЛУЧЕНИЯ ФЕРРОНИКЕЛЯ И ЧУГУНА ИЗ РУДЫ САХАРИНСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ КОМБИНИРОВАННЫМ УГЛЕРОДНО-ВОДОРОДНЫМ МЕТОДОМ

Бигеев В.А., Харченко А.С., Сибатуллин С.К., Потапова М.В.

*Магнитогорский государственный технический университет им. Г. И. Носова»,
455000, Магнитогорск, пр. Ленина 38,
e-mail:marina_potapova8@mail.ru*

Получены результаты исследований по разработке технологической схемы передела Сахаринской никельсодержащей руды с получением водородного ферроникеля, чугуна и отвального шлака. С использованием ранее полученных расчетных данных в лабораторных условиях подтверждена реализация каждого этапа предлагаемой технологии от обогащения исходного сырья до получения ферроникеля, чугуна и отвального шлака¹. Исследования показали, что восстановление никеля из руды водородом заканчивается при температурах 700-900 °С. Оксиды железа в этих условиях восстанавливаются в основном до FeO, частично (на 5-15 %), до металлического железа. При изучении процесса восстановления железа и никеля из оксидного расплава показана возможность разделения их по различным продуктам путем точной дозировки восстановителя.

В результате проведенных лабораторных исследований по переделу Сахаринских руд методом селективного водородного твердофазного восстановления получены ферроникель и железистый шлак. Из руды с содержанием никеля 0,4-0,8 % Ni получен ферроникель с содержанием никеля в сплаве 4-15 %. Показано, что извлечение никеля достигает 80-85 %. Железистый шлак затем подвергли жидкофазному карботермическому восстановлению с получением чугуна с содержанием углерода 4,12 %, кремния - 0,86 %, хрома - 0,65 % и отвального шлака.

Реализация технологии на металлургических предприятиях страны позволит вовлечь в активный баланс значительное количество забалансовых никельсодержащих руд Уральского региона и обеспечит отечественную промышленность ферроникелем и качественной шихтой.

Литература

1. Определение расхода водорода для твердофазного селективного восстановления комплексного железорудного сырья в лабораторных исследованиях / Бигеев В.А., Сибатуллин С.К., Харченко А.С., Потапова М.В. // Черные металлы. 2021. № 12. С. 25-30.

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИМИТАЦИЯ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ПРИ РАЗРАБОТКЕ СТАЛИ ДЛЯ ОБСАДНЫХ ТРУБ

Ворожева Е.Л., Сметанин К.С., Хлыбов О.С.

АО «Выксунский металлургический завод», 607060, Выкса, Нижегородская обл., ул. Бр. Баташевых, 45
e-mail: vorozheva_el@vsw.ru

В ходе разработки технологии производства проката стали 30Г для обсадных труб используется моделирование процессов, выполняются лабораторные и промышленные эксперименты. Полосчатая феррито-перлитная структура, возникающая при прокатке низко- и среднеуглеродистых сталей является неблагоприятным структурным фактором, повышающим анизотропию механических свойств в прокате. Полосчатость является следствием дендритной сегрегации в стали¹. Вид деформированной дендритной структуры после имитации прокатки на dilatометре, приведён на рисунке 1.



Рисунок 1. Вид деформированной дендритной структуры

Инструментом для прогнозирования дендритных сегрегаций является математическое моделирование процессов затвердевания в Thermo-Calc². Дендритная структура, в стали марки 30Г, является картиной распределения элементов Si и Mn.

Для снижения дендритной сегрегации и улучшения микроструктуры с целью получения требуемых механических характеристик было скорректировано содержание химических элементов в прокате стали 30Г.

Литература

1. A Review of Microsegregation Induced Banding Phenomena in Steels / John D. Verhoeven // Journal of Materials Engineering and Performance. – 2000. – Volume 9(3) – pp.286-296.
2. Thermo-Calc Software // сайт. – 2021. – URL: https://thermocalc.com/content/uploads/Application_Examples/Microsegregation_Solidification/analysis-of-microsegregation-during-solidification.pdf (дата обращения 13.01.2023)

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ОСНОВНОСТИ АГЛОМЕРАТА НА ЕГО СТРУКТУРУ И МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Вязникова Е.А., Дмитриев А.Н., Витькина Г.Ю., Катаев В.В.

*Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук
(ИМЕТ УрО РАН), 620016, Екатеринбург, Амундсена, 101,
e-mail: vjaznikova@mail.ru*

Такие металлургические характеристики агломератов, как механическая прочность, прочность при восстановлении, восстановимость и температуры начала и конца размягчения зависят, в первую очередь, от химического, фазового и минералогического составов агломератов. Вариативность основности агломератов весьма широка и ее принудительное изменение позволит получать агломераты с заданными характеристиками. В работе исследованы образцы железорудных агломератов с основностью от 1,2 до 3,0. Основными фазами агломератов являются магнетит, гематит, силикоферрит кальция и алюминия с переменным составом (SFCA) и двухкальциевые силикаты.¹ Получено, что с увеличением основности агломератов увеличивается количество фазы SFCA, а в ее составе увеличивается содержание Са. Исследовано изменение фазового состава агломератов в процессе нагрева с твердым восстановителем от 500 до 1200 °С. Фаза-связка SFCA легко восстанавливается в низкоосновных агломератах до магнетита и геленита, в высокоосновных – до магнетита, трехкальциевого силиката и небольшого количества сребродолскита. Исследованы прочность при восстановлении и интервал размягчения агломератов с различной основностью. Лучшие значения термомеханической прочности показали агломераты с основностью 1,8-2,0.² Температуры начала и конца размягчения агломератов с увеличением основности от 1,2 до 3,0 повышаются и интервал размягчения сужается, что благоприятно скажется на ходе доменной плавки.³

Литература

1. Вязникова Е.А., Дмитриев А.Н., Витькина Г.Ю., Ведмидь Л.Б. *Черная металлургия. Бюллетень научно-технической и экономической информации*, 2023, **78** (11), 935.
2. Dmitriev A.N., Vyaznikova E.A., Vitkina G.Yu., Alektorov R.V. *Defect and Diffusion Forum*, 2023, **429**, 144.
3. Dmitriev A.N., Vyaznikova E.A., Vitkina G.Yu., Alektorov R.V. *Defect and Diffusion Forum*, 2022, **420**, 63.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ИМЕТ УрО РАН в рамках Программы фундаментальных исследований государственных академий (№ 122020100125-6).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДОЛИВКИ РАСПЛАВА В ПРИБЫЛЬНУЮ ЧАСТЬ СЛИТКА НА ПРОЦЕСС ЗАТВЕРДЕВАНИЯ И СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЕ

Гаманюк С.Б., Руцкий Д.В., Кириличев М.В., Никитин М.С.

*ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет»,
400005, Волгоград, проспект им. В.И. Ленина, 28,
e-mail: gamanuk@mail.ru*

Повышение качества литого металла крупных слитков невозможно без знаний о механизме и условиях, при которых происходит образование внутренних дефектов литого металла. Одним из легко реализуемых и воспроизводимых способов исследования процессов, протекающих при затвердевании слитков является физическое моделирование, которое позволяет определить интенсивность продвижения твердой и твердожидкой фаз, конвективного перемешивания и как следствие влияние этих процессов на степень развития внутренних дефектов¹.

В работе представлены результаты лабораторного исследования процесса затвердевания и развития дефектов слитка при доливке расплавом прибыльной части, через определенный интервал времени после заливки тела слитка при разных температурах доливаемого расплава. Исследования проводили методом физического моделирования на лабораторной установке (изложница-кристаллизатор) модели слитка массой 19,6 т. Разливка расплава выполнялась сверху. В качестве моделирующего раствора использовали натрий серноватистокислый. Установлено, что доливка расплава в прибыль способствовала подпитки «междендритного» пространства в теле слитка и продолжению роста зоны столчатых кристаллов, и как следствие привело к плотной структуре модельных слитков. Слитки с доливкой прибыли отличаются от обычного слитка плотной бездефектной структурой в теле слитка. Усадочная раковина концентрируется в объеме прибыли. Полученные результаты обуславливают возможность разработки технологии, дифференцированной разливки слитков при наполнении их прибыли расплавом через определенный интервал времени после заливки тела слитка, что позволит воздействовать на процесс формирования структуры металла и сокращения дефектных зон.

Литература

1. Гаманюк С. Б., Руцкий Д. В., Зюбан Н. А., Кириличев М. В. Моделирование процесса затвердевания кузнечного слитка при доливке прибыльной части расплавом // Черные металлы. 2023. № 10. С. 57-62. DOI: 10.17580/chm.2023.10.09.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-29-00973, <https://rscf.ru/project/23-29-00973/>

ЭКСТРАКЦИОННАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ИЗВЛЕЧЕНИЯ НИКЕЛЯ И КОБАЛЬТА ИЗ РАСТВОРОВ ВЫЩЕЛАЧИВАНИЯ ОКИСЛЕННЫХ НИКЕЛЕВЫХ РУД

Григорьева Н.А.,^а Флейтлих И.Ю.,^а Плешков М.А.^б

^а *Институт химии и химической технологии Сибирского отделения Российской академии наук – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, 660036, Красноярск, Академгородок 50/24, e-mail: natasha@icct.ru*

^б *ООО «Институт Гипроникель», 195220, Санкт-Петербург, Гражданский проспект 11*

Окисленные никелевые руды (ОНР) составляют около 80% мировых запасов никеля. При автоклавном серноокислотном выщелачивании ОНР получаются растворы сложного состава, которые, кроме никеля и кобальта, содержат значительное количество примесей. Типичный состав раствора приведён ниже, г/л: Ni-3÷6; Co-0,3÷0,6; Zn-0,1÷0,2; Mn-2,0÷3,0; Ca-0,4÷0,6; Mg-6,0÷8,0. Для выделения Co и Ni из этих растворов наиболее эффективными являются экстракционные процессы.

Изучена экстракция указанных металлов смесями бис(2,4,4-триметилпентил)дитиофосфиновой кислоты (Суапех 301; HR) с индивидуальными аминами (первичными, вторичными и третичными). Наибольший интерес представляют смеси HR и триалкиламина (ТАА), как с точки зрения эффективной экстракции кобальта и никеля, так и (особенно) их реэкстракции растворами серной кислоты.

Оптимальный состав экстрагента для указанных условий - раствор 0,4 моль/дм³ Суапех 301; 0,5 моль/дм³ ТАА и 20% трибутилфосфата (ТБФ) в алифатическом разбавителе. Определены основные параметры для группового извлечения Co и Ni из растворов выщелачивания ОНР (кинетика экстракции/реэкстракции, влияние кислотности на извлечение Co и Ni, получены данные по основным экстракционным равновесиям). Извлечение Co и Ni из растворов составляет не менее 98%.

На основании полученных данных разработана принципиальная технологическая схема и выданы рекомендации по процессу группового выделения никеля и кобальта из сульфатных растворов выщелачивания ОНР, содержащих примеси кальция, магния, марганца и цинка.

Предложенный процесс представляет несомненный интерес и при переработке никелевого сульфидного сырья, в частности, для растворов автоклавного и био-выщелачивания, предлагая новый путь в гидрометаллургии никеля и кобальта.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИХХТ СО РАН (проект FWES-2021-0014).

ФОРМИРОВАНИЕ НЕМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ВКЛЮЧЕНИЙ ПРИ КОВШОВОЙ ОБРАБОТКЕ СТАЛИ МАРКИ 08X18H10T

Ем А.Ю., Комолова А.О., Григорович К.В.

*Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН,
119334, Москва, Ленинский проспект 49
e-mail: tony.yem1994@gmail.com*

В работе был проведен анализ технологии выплавки, ковшевой обработки и разливки коррозионностойкой стали 08X18H10T с целью выявления факторов, оказывающих неблагоприятное влияние на качество и разливаемость стали. Заращение сталеразливочных стаканов происходит из-за высокого содержания неметаллических включений (НВ) в стали, таких как оксиды хрома, марганца, кремния, алюминия, титана.

Для определения типа неметаллических включений (НВ) было проведено исследование отобранных проб металла методом фракционного газового анализа (ФГА). ФГА позволяет оперативно получить информацию о содержании кислорода распределенного в различных типах НВ. Для определения химического состава неметаллических включений и основных типов НВ, был использован растровый электронный микроскоп с рентгеновским микроанализом Jeol JXA ISP 100 EPMA.

В ходе проведения работы были проанализированы образцы четырех плавов коррозионностойкой стали 08X18H10T, плавки №1 и №2 до изменения технологических параметров производства стали, а плавки №3 и №4 после корректирующих действий.

Показано, что в исследуемых образцах стали преобладают такие НВ как: алюминаты, оксиды хрома, марганца, кремния и титана.

Установлено, что изменение состава покровного шлака привело к уменьшению размеров неметаллических включений (плавки №3 и №4). Морфология и состав включений не изменились. Включения оксида алюминия удаляются из металла почти полностью (плавки №3 и №4). В шлак удаляются также и нитриды титана (пробы ВД3 – ВД4).

Присутствие протяженных пленочных включений на основе оксидов титана в металле было обнаружено только в пробах металла, отобранных на разливке, что может быть связано с процессами вторичного окисления расплава. Это вероятно обусловлено подсосом воздуха или недостаточной работой покровного шлака по ассимиляции включений. Количество и размеры пленочных включений в металле были меньше, на плавке №3 и №4. На плавке №3 и №4 заращение стаканов не наблюдалось.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ НЕМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ВКЛЮЧЕНИЙ ПРИ ВЫПЛАВКЕ ДУПЛЕКСНЫХ КОРРОЗИОННОСТОЙКИХ СТАЛЕЙ В ОТКРЫТОЙ ИНДУКЦИОННОЙ ПЕЧИ

Житенев А.И.^а, Карасев В.С.^б, Рябошук С.В.^б

^а ПАО «НЛМК», 119017, Москва, ул. Большая Ордынка 40

^б Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая 29,
email: zhitenev.ai1991@gmail.com

При выплавке дулексных коррозионно-стойких сталей (ДКС) в открытой индукционной печи (ИП) с ограниченными возможностями для рафинирования важно прогнозировать тип и количество формирующихся неметаллических включений (НВ) в зависимости от объема печи, условий ввода раскислителей и скорости перемешивания. Это позволит повысить металлургическое качество ДКС и улучшить их свойства. Поэтому целью настоящей работы было создание кинетической модели формирования включений в ДКС при раскислении титаном.

При описании образования НВ в печи весь объем тигля был разделен на 10 зон. Перенос элементов последовательно осуществлялся от первой зоны (область ввода ферросплава) ко второй соседней, затем от второй к третьей, и так далее. Скорость переноса всех компонентов, в первую очередь, титана между соседними зонами зависела от удельной площади взаимодействия, коэффициента массообмена и разницы в концентрации элементов. Внутри каждой зоны выравнивание концентраций реагентов происходило мгновенно.

В первый момент времени в первой зоне задавали концентрацию титана, отвечающую полному растворению введенного ферросплава. Затем рассчитывали тип и массу формирующихся первичных НВ, после чего задавали приращение по времени и определяли концентрацию реагентов и массу НВ для каждой зоны на следующем шаге в результате массопереноса. Для прогнозирования типа и количества НВ рассчитывали константы соответствующих реакций образования оксидов или нитридов титана. Для того, чтобы учесть перекристаллизацию включений до равновесного состояния на каждом следующем шаге по времени ввели коэффициент перекристаллизации α . Рассмотрели три случая: полная перекристаллизация НВ ($\alpha=1$); отсутствие перекристаллизации ($\alpha=0$); частичная перекристаллизация ($0<\alpha<1$).

В результате получены зависимости концентраций реагентов в расплаве, количество и тип НВ для каждой расчетной зоны, а также для всего объема печи. Исследовано, как эволюционируют НВ в зависимости от параметров плавки. Показана хорошая согласованность результатов расчетов с экспериментальными данными исследования кинетики формирования НВ в индукционной печи.

ФОРМИРОВАНИЕ НИЗКОЛЕГИРОВАННОГО ПОДСЛОЯ СО СТРУКТУРОЙ БЕЙНИТА ДЛЯ НАПЛАВКИ ДЕТАЛЕЙ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКОГО ОБОРУДОВАНИЯ

Зорин И.В., Фастов С.А., Лысак В.И.

*Волгоградский государственный технический университет,
400005, Волгоград, проспект им. В.И.Ленина, д. 28,
e-mail: zorin.iv@vstu.ru*

Выявление концепции комплексного влияния состава наплавочных материалов и технологии упрочняющей наплавки на механические и эксплуатационные свойства трубопрокатного и трубопрошивного инструмента, изготавливаемого из сталей с повышенным содержанием углерода, представляет актуальную задачу научных исследований.

С целью повышения стойкости рабочих поверхностей наплавленного изделия к образованию трещин термической усталости предварительно на поверхности упрочняемого изделия методом наплавки формировали промежуточный слой (подслой) из низкоуглеродистого низколегированного металла системы C-Si-Mn-Cr-Ni-Mo-Cu-Al-Ti-La бейнитного класса.

Такой подход к разработке металла для подслоя дает возможность повысить энергию зарождения и развития трещины в нем и получить хорошее сочетание пластических (относительное удлинение до 30 %) и прочностных (предел текучести условный до 620 МПа, предел прочности до 780 МПа) свойств, обуславливающих способность металла в системе «основной металл - подслоя - износостойкий металл» сопротивляться циклическому термосиловому воздействию.

Установлено, что применение разработанного металла подслоя повышает стойкость наплавленного износостойкого сплава (25X5ФМС и 3X2B8) к возникновению трещин термической усталости с поверхности в металл изделия, что подтверждается наибольшим количеством циклов до появления первой трещины в процессе периодического теплового воздействия в диапазоне температур (800-50 °С). Достижение этого результата обусловлено целенаправленным формированием структуры металла подслоя при распаде аустенита в бейнитной области и малой ее чувствительности к циклам повторных нагревов и охлаждений в условиях многослойной наплавки. Основой такой структуры является бейнитный феррит гранулярного типа, в котором доля мартенситно-аустенитной составляющей не превышает 2-3 об.%, а содержание вырожденного перлита в зависимости от высоты подслоя варьируется в диапазоне 5-10 об.%.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-23-20068, <https://rscf.ru/project/24-23-20068/> и гранта Администрации Волгоградской области по соглашению № 7 от 31.05.2024 г.

РАЗРАБОТКА ВЫСОКОПРОЧНОГО ТЕПЛОСТОЙКОГО МАТЕРИАЛА ДЛЯ КОРПУСОВ ПЕРСПЕКТИВНЫХ РЕАКТОРОВ ТИПА ВВЭР-СКД

Иванов И.А., Дуб В.С., Баликоев А.Г., Шурыгин Д.А., Мальгинов А.Н., Бубнёнков Б.Б., Соловьева М.С., Тохтамышев А.Н.

*АО «НПО «ЦНИИТМАШ», 115088, Москва, ул. Шарикоподшипниковская, дом 4,
e-mail: IAIvanov@cniitmash.com*

Увеличение эффективности и безопасности ядерной энергетики требует разработки новых типов реакторов, обладающих высоким КПД, эффективностью использования ядерного топлива, длительным сроком эксплуатации, высокой надежностью и безопасностью. Перспективным направлением является создание водородных энергетических реакторов поколения IV+ со сверхкритическими параметрами теплоносителя (ВВЭР-СКД).

Анализ научных источников, результатов предыдущих исследований позволили выделить основные направления разработки конструкционного материала КР ВВЭР-СКД, а именно мелкозернистой высоконикелевой композиции на основе системы Cr-Ni-Mo-V-Nb со сверхнизким содержанием вредных и примесных элементов, в качестве кандидатного материала была выбрана сталь 10ХН5МФБА-А.

Проведенный комплекс механических испытаний и структурных исследований позволил оценить свойства полученного металла, а также особенности микроструктуры. Сделаны выводы о влиянии содержания химических элементов: более высокими характеристиками обладает состав – никель на уровне 5,1 %. В качестве основного фактора, обеспечивающего высокий уровень служебных характеристик – мелкозернистая структура.

Разработана технология производства опытной ступенчатой поковки из данной марки стали, имитирующей различные варианты толщин стенок обечаек КР ВВЭР-СКД, на промышленной площадке завода-изготовителя оборудования АЭУ.

Полученная опытная заготовка обладает высокими прочностным и вязкопластическим свойствам и соответствует требованиям по обеспечению категории прочности не ниже КР65 при 450 °С, удовлетворяет требованиям по металлургическому качеству по содержанию вредных примесных элементов и по балльности неметаллических включений: не более 1,0 балла типа оксиды точечные и силикаты недеформирующиеся, силикаты хрупкие не обнаружены. Результаты оценочных испытаний на длительную прочность металла поковки из стали 10ХН5МФБА на временной базе 500 000 часов показали, что обеспечено требуемое значение условного предела длительной прочности металла на уровне более 300 Н/мм² при 450 °С.

ВЛИЯНИЕ КАЧЕСТВА НАПОЛНИТЕЛЯ КАЛЬЦИЙСОДЕРЖАЩЕЙ ПРОВОЛОКИ НА СОДЕРЖАНИЕ И СОСТАВ ОКСИДНЫХ НЕМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ВКЛЮЧЕНИЙ ПРИ ПРОИЗВОДСТВЕ ВЫСОКОУГЛЕРОДИСТОЙ СТАЛИ

**Католиков В.Д.,^а Хорошилов А.Д.,^а Бондарев С.С.,^б
Жигарев М.А.,^б Щеглов С.М.^б**

^аООО «Росатом МеталлТех» 123098, Москва, ул. Рогова, д. 5а,

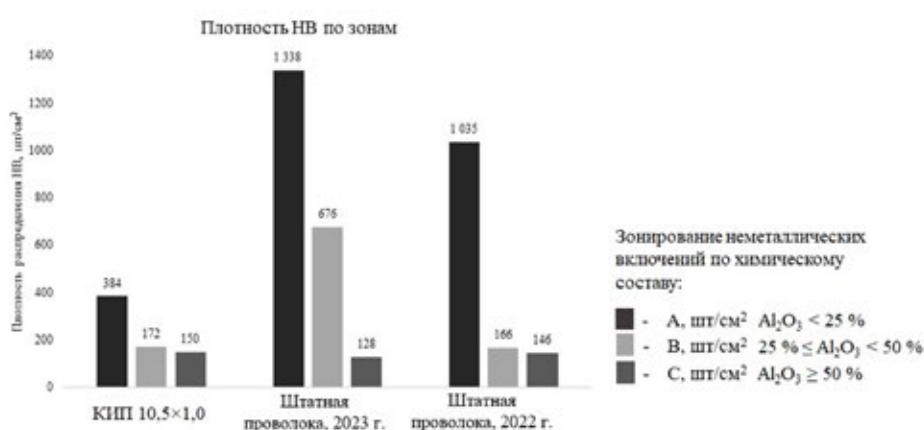
e-mail: VDKatolikov@rosatom.ru

^бООО «ПромСорт-Тула», 300016, Тула, ул. Пржевальского, д. 2

Механические и эксплуатационные свойства металлопродукции, как правило, определяются качеством непрерывно литой заготовки, которая во многом зависит от наличия оксидных неметаллических включений (НВ). Состав таких НВ и $[O]_{\text{общ}}$ зависит от большого количества факторов, основными из которых можно выделить качество используемых материалов раскислителей и модификаторов, последовательность, количество и способ их введения¹.

Проведены сравнительные исследования плотности и химического состава НВ в высокоуглеродистой стали не раскисленной алюминием. Экспериментальные плавки были обработаны кальциевой инжекционной проволокой (КИП), представляющей собой стальную оболочку с монокристаллическим наполнителем различной химической чистоты – кальций электролитического и алюмотермического способа получения. В качестве объектов исследования использовали пробы от жидкой стали марок 70/80. Качественный и количественный анализ оксидных НВ осуществляли с помощью сканирующего электронного микроскопа, содержание общего кислорода определяли методом восстановительного плавления и ФГА.

По результатам исследования установлено, что при использовании кальция электролитического способа производства достигается значительное снижение общей плотности НВ и $[O]_{\text{общ}}$.



Литература

1. Григорович К.В., Красовский П.В., Трушников А.С. Анализ неметаллических включений – основа контроля качества стали и сплавов. *Аналитика и контроль*, 2002, №2, С. 133-142.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ БОРСОДЕРЖАЩИХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ВЫПЛАВКЕ НЕРЖАВЕЮЩЕЙ СТАЛИ АКР-ПРОЦЕССОМ

Кель И.Н., Бабенко А.А., Шартдинов Р.Р., Уполовникова А.Г.

*Институт металлургии Уральского Отделения Российской Академии Наук,
620016, Екатеринбург, ул. Амундсена, 101,
e-mail: dunnington@mail.ru*

Основным способом получения нержавеющей стали является дуплекс-процесс, состоящий из выплавки в дуговой сталеплавильной печи углеродистого полупродукта и последующей обработки его в агрегате аргоноокислородного рафинирования (АКР), в котором металл подвергается сначала окислению углерода, а затем восстановлению хрома из шлака с последующим доведением стали до заданного химического состава. Процесс обезуглероживания сопровождается частичным окислением хрома в связи с чем в шлаки восстановительного периода обладают высокой температурой плавления и вязкостью¹. Для улучшения жидкоподвижности данных шлаков используют плавиковый шпат (CaF_2), ввод которого помимо снижения вязкости способствует образованию вредных летучих соединений. В связи с этим рационально использовать в качестве флюса иные экологически безопасные добавки, например, борсодержащие материалы (колеманит/борат кальция).

В лабораторных условиях экспериментально проведена оценка влияния замены плавикового шпата борсодержащим материалом (колеманит) на физико – химические характеристики шлака. Для этого на поверхности металла, соответствующего химическому составу начала периода восстановления (0,03% C, 16% Cr, 7% Ni, Fe, Si, Mn – ост.), наводили шлак (40-50% CaO, 25-30% SiO_2 , 17,5% Cr_2O_3 , 8,4% MgO и 3,2% Al_2O_3 , 3-6% B_2O_3) в количестве 14% от массы стали. Отмечено, что формирование шлаков с 4-6% B_2O_3 обеспечивает достаточно хорошую жидкоподвижность. При этом, наряду с высокой степени восстановления хрома, отмечается микролегирование стали бором в количестве 0,005-0,006%, что благоприятно сказывается на эксплуатационных свойствах металла.

Литература

1. Токовой О.К. Аргоноокислородное рафинирование нержавеющей стали. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2015. - 250 с.

Работа выполнена по госзаданию ИМЕТ УрО РАН FUMR-2022-0003.

ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОЛИКВАЦИОННОЙ НЕОДНОРОДНОСТИ И РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ В НИЗКОЛЕГИРОВАННЫХ СТАЛЬНЫХ СЛИТКАХ И НЕПРЕРЫВНОЛИТЫХ ЗАГОТОВКАХ

Кириличев М.В., Зюбан Н.А., Руцкий Д.В.

*Волгоградский государственный технический университет, 400005,
Волгоград, пр. им. Ленина, 28,
e-mail: Misha_1992@mail.ru*

Проблемы химической неоднородности на сегодняшний день являются актуальными и значимыми т.к. развитие микроликвационных процессов сопровождается формированием зональной ликвации в различных частях слитка и непрерывнолитой заготовки (НЛЗ), что приводит к снижению качества металла и сдаточных характеристик заготовок. Особые сложности вызывает наличие микроликвационной неоднородности в НЛЗ, учитывая особенности перераспределения примесей и их растворимости в условиях ускоренного охлаждения.

Исследовали особенности формирования микроликвационной неоднородности в лабораторных слитках массой 40 кг из стали 15ХН2ФА, отлитых при различных условиях охлаждения, и в вакуумном слитке массой 24,2 т из стали 38ХНЗМФА. Установлено, что в лабораторных слитках определяющим фактором, воздействующим на микроликвационные процессы, является исходный химический состав, в частности содержание серы, увеличение концентрации которой способствует микроликвационным процессам почти по всем элементам. В крупном слитке изменение концентрации элементов тесным образом связано с особенностями формирования макроструктуры. Более стабильное распределение элементов наблюдается на нижнем горизонте слитка, что обусловлено ускоренными процессами кристаллизации.

При исследовании дендритной ликвации круглых НЛЗ стали 26ХГМФА было установлено, что по степени ликвации элементы находятся в следующей последовательности Mo, Mn, Cr, V, Si. Было установлено, что коэффициенты ликвации в слитке в 1,2-1,6 раза выше, чем в НЛЗ, что обусловлено особенностями протекания тепловых процессов в конце затвердевания слитка. Для снижения микроликвационной неоднородности слитков и НЛЗ и уменьшения возможных проблем при их термообработке необходимо создание условий для более интенсивного теплоотвода расплава как на этапе кристаллизации, так и в зоне вторичного охлаждения.

Исследование выполнено за счет средств программы развития ВолгГТУ «Приоритет 2030», в рамках научного проекта № 6/643-24

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ПО ИСПОЛЬЗОВАНИЮ БРИКЕТОВ НА ОСНОВЕ КОВШЕВОГО ШЛАКА В КАЧЕСТВЕ ЧАСТИЧНОЙ ЗАМЕНЫ ИЗВЕСТИ ПРИ ВЫПЛАВКЕ СТАЛЬНОГО ПОЛУПРОДУКТА В ДСП

Крылов А.П.

*АО «Выксунский металлургический завод», 607060 г. Выкса, ул. Братьев Баташевых, зд. 45,
e-mail: Krylov_AP@omk.ru*

Цель работы: подтверждение возможности замены части металлургической извести шлакообразующими брикетами, на основе ковшевого шлака, без ухудшения качества стали и параметров выплавки в дуговой электросталеплавильной печи.

Внедрение данной технологии позволит решить следующих основные задачи:

- снизить себестоимость жидкой стали за счет частичной замены извести на шлакообразующие брикеты;
- исключить образование ковшевого шлака (не ликвидного материала) как отдельного вида побочной продукции [1].

В ходе первого этапа эксперимента произведены брикеты размером 40*30*20 мм. Брикеты изготовлены на технологической линии брикетирования с использованием валкового пресса.

На втором этапе эксперимента проведены опытные плавки, где шлакообразующие брикеты использовались как шлакообразующий флюс, заменяющий часть металлургической извести собственного производства.

В ходе эксперимента, не отмечено ухудшение параметров выплавки стали в ДСП.

Сравнение химического состава стального полупродукта опытных и сравнительных плавок приведен в таблице 1.

Средний углерод	Массовая доля химических элементов, %			
	C	P	S	O ppm
Сравнительные	0,057	0,004	0,030	691
Опытные	0,056	0,005	0,041	680

Таблица 1. Химического состава стали опытных и сравнительных плавок

Сравнение химического состава шлака опытных и сравнительных плавок приведен в таблице 2.

Средний углерод	Массовая доля компонентов шлака, %									
	S	P ₂ O ₅	FeO	MnO	Cr ₂ O ₃	SiO ₂	Al ₂ O ₃	MgO	TiO ₂	CaO
Сравнительные	0,074	0,41	39,45	6,80	1,25	13,35	3,10	2,11	0,46	26,58
Опытные	0,069	0,36	39,16	6,15	1,39	13,63	5,10	2,99	0,50	25,10

Таблица 2. Химический состав шлака ДСП перед выпуском полупродукта

Состав шлака опытных плавок не приводит к ухудшению процесса дефосфорации стального полупродукта. Увеличение серы в полупродукте, не влияет на итоговое содержание в рулонном прокате.

Литература

1. Шешуков О. Ю. и др. Вопросы утилизации рафинировочных шлаков сталеплавильного производства. – 2017.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ СВАРКИ ВЗРЫВОМ С ОДНОВРЕМЕННЫМ ВОЗДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАЗВУКА ДЛЯ СОЗДАНИЯ НОВЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Кузьмин Е.В., Королев М.П., Кузьмин С.В., Лысак В.И.

*ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет»,
400005, г. Волгоград, проспект им. В.И. Ленина, д. 28
e-mail: e.v.kuzmin@yandex.ru*

Актуальным направлением создания композиционных материалов различного назначения является поиск новых путей формирования их структуры и свойств с применением различных комбинированных методов, основанных на воздействии нескольких источников энергии или совмещении различных способов ее подвода. Всестороннее изучение совместного воздействия нескольких видов высококонцентрированных источников энергии позволит раскрыть фундаментальные механизмы их влияния на характеристики и поведение материалов в экстремальных условиях, в результате чего создается возможность получения уникальных физических, механических и эксплуатационных свойств, как самих материалов, так и их соединений, которые невозможно достичь внешними источниками энергии иной природы. Новые перспективы создания подобных материалов открываются при применении ультразвукового воздействия на вещество, находящееся как в твердом, так и в жидком состоянии¹.

Введение дополнительной энергии ультразвука в процессе сварки взрывом позволяет повысить качество соединений, проявляющееся в изменения структуры зоны соединения, росте прочности, существенном уменьшении количества оплавленного металла по сравнению со сваркой взрывом без применения ультразвука. Технология сварки взрывом с одновременной воздействием ультразвука позволяет существенно расширить область свариваемости различных пар металлов, что позволяет получать на низкоинтенсивных режимах сварки равнопрочные соединения с минимальным развитием структурной и механической неоднородностей².

Литература

1. Kuz'min E.V., Lysak V.I., Kuz'min S.V., Korolev M.P. *Journal of Manufacturing Processes*, 2021, **71**, 734.
2. Kuz'min E.V., Korolev M.P., Kuz'min S.V., Lysak V.I. *Journal of Physics: Conference Series*, 2024, **2697**, 012051.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-13-00354, <https://rscf.ru/project/23-13-00354/>

ЭВОЛЮЦИЯ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ МАТЕРИАЛА ИЗ СПЛАВА АЖК, ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ СЕЛЕКТИВНОГО ЛАЗЕРНОГО СПЛАВЛЕНИЯ В СОЧЕТАНИИ С ПОСТ-ОБРАБОТКОЙ

Логачев И.А., Логачёва А.И., Басков Ф.А.

*АО «Композит»,
kompozit0102@mail.ru*

Селективное лазерное сплавление (СЛС) является одной из перспективных технологий изготовления деталей сложной формы из жаропрочных никелевых сплавов (ЖНС). Главным образом это связано с отсутствием необходимости в последующей сложной механической постобработке изделий из ЖНС, отличающихся плохой обрабатываемостью, и, как следствие, снижением материальных и трудовых затрат на изготовление изделий. Сущность процесса СЛС заключается в послойном избирательном сплавлении порошкового материала на металлической плите по ранее сформированной 3D модели. Особенностью процесса послойного синтеза является кристаллизация материала в метастабильном состоянии, а также возможное образование дефектов в виде пор, трещин, локальных несплавлений. Кроме того, в процессе СЛС может подавляться выделение упрочняющих фаз (карбиды, γ' -фаза и др.) в ЖНС. Для устранения перечисленных недостатков и повышения эксплуатационных свойств синтезированный материал подвергают различным видам пост-обработки. Наиболее распространенной схемой обработки СЛС-материала является отжиг для снятия термических напряжений, горячее изостатическое прессование (ГИП), позволяющее уменьшить количество дефектов сплошности материала, и упрочняющая термическая обработка (ТО) по типу закалка с последующим старением.

Объектом исследования данной работы являлся сплав АЖК, предназначенный для изготовления тяжелонагруженных корпусных деталей с рабочей температурой до 800 °С.

Установлено, что максимальный уровень свойств СЛС-образцов из сплава АЖК достигается за счет проведения операций ГИП и ТО, что связано с устранением характерной СЛС структуры (границы ванны расплава, лазерные треки), уменьшением объемной пористости и выделением упрочняющей γ' -фазы и карбидов в объеме и по границам зерен. В результате проведения пост-обработки прочность СЛС-образцов на растяжение увеличилась более чем на 30 % с сохранением высокого показателя пластичности свыше 20 %.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ И ИЗУЧЕНИЕ ОСНОВНЫХ НАПРАВЛЕНИЙ УДАЛЕНИЯ УГЛЕРОДА ИЗ РАСПЛАВА В ЦИРКУЛЯЦИОННОМ ВАКУУМАТОРЕ

**Метелкин А.А.,^{а,б} Шешуков О.Ю.,^{б,в} Плешивцев К.Н.,^г
Роговский А.Н.,^г Егиазарьян Д.К.^{б,в}**

^а АО ЕВРАЗ НТМК, 622005, Нижний Тагил, ул. Metallургов 1,
e-mail: anatoliy82@list.ru

^б Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»,
620002, Екатеринбург, ул. Мира 19,
e-mail: o.j.sheshukov@urfu.ru

^в Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии
Уральского отделения РАН, 620016, Екатеринбург, ул. Амундсена 101

^г ЛГТУ, Липецкий государственный технический университет, 398020, Липецк, ул. Ленина 42

Получение ультранизкого содержания углерода в стали (менее 0,002 %) является важной практической и теоретической задачей.

Рассматривая процесс декарбонизации расплава в циркуляционном вакууматоре, можно выявить несколько факторов влияющих на скорость удаления углерода и достижения минимальных концентраций данного элемента в расплаве:

1. Технологические факторы;
2. Работа и эксплуатация оборудования;
3. Состав огнеупорных материалов;
4. Конструкция установки циркуляционного вакуумирования стали.

Для достижения требуемой концентрации углерода в стали необходимо изучить каждый из факторов и определить взаимосвязи между ними.

В работе рассмотрено влияние четвертого фактора на декарбонизацию расплава. Показано, что при износе футеровки впускного патрубка, условия удаления углерода изменяются, поэтому необходимо вносить изменения в технологические параметры обработки стали.

Определены технологические и конструкционные параметры циркуляционного вакууматора, позволяющие достигать наилучших показателей по интенсивности удаления углерода из расплава. Наилучшие показатели достигаются при расходе транспортирующего газа в интервале 66,0-90 м³/час и внутреннем диаметре впускного патрубка 0,43-0,50 м.

Теоретические расчеты показывают, что для 160 тонного циркуляционного вакууматора, по мере износа футеровки, необходимо постепенно увеличивать расход газа до значений 105-110 м³/час.

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ВЫПЛАВКИ ПОЛУПРОДУКТА В ДУГОВОЙ СТАЛЕПЛАВИЛЬНОЙ ПЕЧИ ПОД МАГНЕЗИАЛЬНЫМИ ШЛАКАМИ

Бабенко А.А.,^а Ушаков М.В.,^б Михайлова Л.Ю.^а

^а *Институт металлургии УрО РАН, 620016, Россия, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 101,
E-mail: ferrostal@bk.ru*

^б *Акционерное общество «Северский трубный завод»,
623388, Свердловская область, город Полевской, ул. Вершинина, д. 7*

В настоящее время в структуре сталеплавильного производства прослеживается устойчивая тенденция к увеличению доли выплавки стали в дуговых сталеплавильных печах (ДСП), которая достигает более 30 %. Одним из основных направлений улучшения технологических и технико-экономических показателей является работа современных ДСП под магнезиальными шлаками. Результаты теоретических и экспериментальных исследований были положены в основу разработки по периодам плавки в ДСП-135 технологии¹ формирования магнезиальных шлаков рационального состава. Внедрение разработанных технологических режимов обеспечило высокий уровень основных технологических и технико-экономических показателей процесса. Продолжительность работы печи под током сократилась в среднем на 1,5 мин, удельный расход электроэнергии уменьшился в среднем на 15 кВт·ч/т. Достигнута рекордная стойкость огнеупорной футеровки печи (РНИ), превышающая более 2000 плавов за кампанию. Отмечено сокращение расхода огнеупорных материалов на футеровку и обслуживание печи (торкрет-массы, заправочные материалы) в среднем на 3,76 кг/т. При этом формируемые шлаки сохраняют высокие рафинирующие свойства, обеспечивая среднее содержание фосфора в металле в конце окислительного периода плавки на уровне 0,005 %.

Литература

1. Патент РФ №2493263 С21С 5/52. Способ выплавки стали в дуговой сталеплавильной печи / Бабенко А.А., Бурмасов С.П., Воронцов А.В., С /Житлухин Е.Г., Ушаков М.В., Зуев М.В., Зубаков Л.В., Мурзин А.В., Петров С.М., Спирин С. А., Степанов А.И. Заявитель и патентообладатель: ОАО «Северский трубный завод» (RU); Заявка № 2012131249/02; Заявл. 20.07.2012; Опубл. 20.09.2013; Бюл. № 26.

Работа выполнена по госзаданию ИМЕТ УрО РАН.

ПРОМЫШЛЕННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ГЛУБОКОЙ ДЕСУЛЬФУРАЦИИ ТРУБНЫХ МАРОК СТАЛИ В УСЛОВИЯХ ЛИТЕЙ-ПРОКАТНОГО КОМПЛЕКСА АО «ВМЗ»

Мурысев В.А.^а, Сафонов В.М.^б, Сомов С.А.^а, Ярмухаметов М.Р.^а

^а АО «Выксунский металлургический завод, г. Выкса, Россия,
e-mail: muzysev_va@vsw.ru, somov_sa@vsw.ru, jarmuhametov_mr@vsw.ru

^б д.т.н., Выксунский филиал Национального исследовательского университета «МИСиС», г. Выкса, Россия,
e-mail: wmsafonov@gmail.com

При производстве трубных марок стали одной из основных технологических операций является десульфурация металла, цель которой гарантированное получение содержания серы менее 0,001%.

По нашим оценкам, в ходе производства стали по цепочке: ДСП- Выпуск-АКП скорость десульфурации составляет:

Этапы производства	ДСП	Выпуск	АКП
Скорость десульфурации, ррт/мин	3,5		6

Таблица 1. Степень десульфурации по этапам производства.

Установлено, что максимальная скорость десульфурации стали соответствует максимальной концентрации серы в металле и составляет около 12 ррт/мин, далее при снижении содержания серы ниже 0,005% скорость падает более чем в 10 раз. Минимальная скорость удаления серы зафиксирована в диапазоне ее сверхнизких концентраций от 0,0013 до 0,0010 % и составляет 0,2 ррт/мин.

Принято считать, что концентрацию серы в стали по ходу экстракции под рафинирующим шлаком в агрегате ковш-печь с достаточной точностью можно оценить, применив известное соотношение¹:

$$\frac{[\%S] - [\%S]_p}{[\%S]_н - [\%S]_p} = \exp(-k \times t)$$

Где: [%S], [%S]_н, [%S]_р - текущая, начальная и равновесная концентрация серы в металле соответственно;
t - продолжительность процесса десульфурации (мин);
k – коэффициент массопереноса (мин⁻¹).

Список литературы

1. Safonov V.M., Smirnov A.N., Proskurenko D.V, Pismarev K.E. The investigation of the oxidizing process of steel in a ladle // SCANMET IV – 4th International Conference on Process Development in Iron and Steelmaking, Luleå, Sweden. - 10-13 June, 2012.

СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ МОДИФИЦИРОВАНИЯ СТАЛИ ПРИ ВНЕПЕЧНОЙ ОБРАБОТКЕ

Никитин М.С.,^а Морозов В.В.,^а Зюбан Н.А.,^б Руцкий Д.В.,^б Дроздов А.В.^б

^а АО «ВТЗ», 404119, Волгоградская обл, г Волжский, пр. Metallургов, д 6
e-mail: fantoman666@gmail.com

^б Волгоградский государственный технический университет, 400005, Волгоград, пр. им. Ленина, 28

Наиболее распространенным модификатором, используемым в настоящее время для обработки стали в процессе внепечной обработки, является кальций, который чаще всего вводят в расплав в составе проволоки марки СК-30(40) с порошкообразным наполнителем.

Модифицирование стали двухкомпонентным не всегда обеспечивает полное превращение оксидных включений из тугоплавких в легкоплавкие алюминаты кальция, что ухудшает свойства готовой металлопродукции [1, 2]. Например, использование СК-30 при производстве серосодержащего сортамента ухудшает разливаемость стали на МНЛЗ из-за чрезмерного образования сульфидов CaS, которые приводят к зарастанию стенок сталеразливочного тракта [3].

В работе были опробованы схемы введения модификатора на окончательном этапе внепечной обработки (до- и после вакуумирования). Установлено, что момент ввода модифицирующей добавки оказывает значительное влияние на процесс образования легкоплавких алюминатных включений. Применение для модифицирования расплава трехкомпонентного модификатора, содержащим в своем составе дополнительно барий, позволяет в большей степени влиять на морфологию и фазовый состав неметаллических включений за счет его влияния на модифицирующие свойства кальция.

Литература

1. Исследование и анализ причин зарастания сталеразливочного тракта при получении стали С45Е / Н.А. Зюбан, Д.В. Руцкий, М.С. Никитин, М.В. Кириличев // Черные металлы. - 2023. - № 10 (1102). - 70-77. - DOI: 10.17580/chm.2023.10.11.
2. Производство непрерывнолитных заготовок из стали 26ХМФБА для обсадных труб с применением барийсодержащей лигатуры / Д.В. Руцкий, В.В. Морозов, Н.А. Зюбан, М.В. Кириличев, М.С. Никитин, Р.М. Войтенко, В.О. Харламов // Металлург. - 2022. - № 5. - С. 45-55. - DOI: 10.52351/00260827_2022_05_45.
3. Выявление природы образующихся «наростов» на внутренней стенке разливочного стакана при непрерывной разливке стали марки С45Е / Агарков А.Ю., Руцкий Д.В., Зюбан Н.А., Бабин Г.В., Кириличев М.В., Морозов В.В. // Теория и технология металлургического производства. 2020. № 1 (32). С. 11-17.

МЕТАЛЛОПОРОШКОВЫЕ КОМПОЗИЦИИ ИЗ ЖАРОПРОЧНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДНЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ АЛЮМИНИДОВ ТИТАНА ДЛЯ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Панин П.В.,^а Богачев И.А.,^а Лукина Е.А.^б

^а НИЦ «Курчатовский институт» - ВИАМ, 105005, Москва, ул. Радио 17,
e-mail: paninrav@yandex.ru

^б Московский авиационный институт, 125993, Москва, Волоколамское ш. 4

Представлены исследования структуры и технологических свойств трех фракций (10–63, 40–100, 80–120 мкм) металлопорошковых композиций (МПК) на примере нового шестикомпонентного гамма-TiAl-сплава с микродобавкой гадолиния: Ti–31,0Al–2,5V–2,5Nb–2,5Cr–0,4Gd, масс.% (Ti–44,5Al–2V–1Nb–2Cr–0,1Gd, ат.%)¹, полученных методом бестигельной атомизации расплава (табл. 1) и предназначенных для изготовления деталей методом селективного электронно-лучевого сплавления (СЭЛС).

Фракция, мкм	Вытянутость, l_{\max}/l_{\min}	Параметр формы, P/\sqrt{S}
10 – 63	1,09 ± 0,01	3,89 ± 0,01
40 – 100	1,10 ± 0,01	3,96 ± 0,01
80 – 120	1,08 ± 0,01	3,94 ± 0,01

Таблица 1. Параметры вытянутости и формы частиц для различных фракций МПК

Показано, что химический состав МПК по основным элементам соответствует химическому составу электрода; превышение содержания кислорода в МПК до 1,5 раз обусловлено естественным окислением частиц порошка при контакте с воздушной средой вследствие развитой удельной поверхности. Установлено, что качественный фазовый состав МПК ($\gamma+\alpha(\alpha_2)+\beta$) отличается от равновесного фазового состава электрода ($\gamma+\alpha_2+\beta_0/V2$) и соответствует быстрозакаленному метастабильному состоянию, что свидетельствует о высоких скоростях кристаллизации в процессе атомизации, превышающих критические скорости охлаждения сплава. Полученные фракции МПК 40–100 и 80–120 мкм применимы для аддитивного синтеза по технологии СЭЛС.²⁻³

Литература

1. Каблов Е.Н., Ночовная Н.А., Каблов Д.Е., Антипов В.В., Панин П.В., Кочетков А.С. Патент RU 2606368 Российская Федерация, 2017.
2. Панин П.В., Лукина Е.А., Богачев И.А., Медведев П.Н., Наприенко С.А. *Металлург*, 2023, 3, 55.
3. Панин П.В., Лукина Е.А., Богачев И.А., Наприенко С.А. *Металлург*, 2023, 5, 54.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-19-00717, <https://rscf.ru/project/24-19-00717/>.

ПОВЫШЕНИЕ КАЧЕСТВА СТАЛИ КРИОГЕННОГО НАЗНАЧЕНИЯ

Парыгина С.А., Голованов М.А.

*Череповецкий государственный университет, 162602, Россия, Вологод-ская обл., г. Череповец, пр-т Луначарского, д. 5,
e-mail: saparygina@chsu.ru, magolovanov@chsu.ru*

Неизбежным процессом высокотемпературного нагрева является образование оксидной окалины на поверхности стали, что в полной мере относится к стали криогенного назначения, во многом, вследствие особенностей её химического состава¹. По причине добавления в криогенные стали Ni, в процессе горячей обработки на поверхности образуется сложная многокомпонентная окалина, включающая в себя внешний оксидный слой и дополнительный внутренний оксидный слой².

Внешний слой растёт за счёт диффузии железа наружу, внутренний слой увеличивается за счёт диффузии кислорода внутрь. По мере окисления образуется неравномерная граница раздела окалина/сталь³.

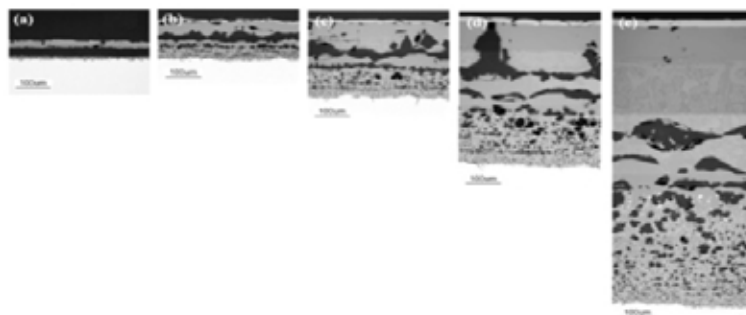


Рисунок 1. Микроструктура поперечного сечения сплава Fe-5% Ni, окисленного при температуре 1200 °С для (а) 1, (b) 5, (с) 15, (d) 30 и (е) 60 мин.⁴

В нашем исследовании критический анализ роста слоев окалины проведён с помощью инструментов математического моделирования и искусственного интеллекта, в результате получены рекомендации по корректировке значимых параметров нагрева криогенной стали перед прокаткой.

Литература

1. Вознесенская Н.М., Тоньшева О.А., Елисеев Э.А. *Жаропрочные сплавы и стали. Труды ВИАМ*, 2020, **1 (85)**, 3-14.
2. Hegang D., Naoran S. and others. *Environmental Degradation of Materials*, 2023, 10.
3. Fukagawa T., Okada H., Maehara Y. *Tetsu-to-Hagané*, 1996, **1 (82)**, 63-68.
4. Harashima A., Kondo Y., Hayashi S. *ISIJ International*, 2020, **2 (60)**, 352-358.

Работа выполнена в рамках гранта Минобрнауки РФ на поддержку передовых инженерных школ (п. 4 ст. 78.1 Бюджетного кодекса РФ от 24.01.2024, № 075-15-2024-018).

РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ФОРМИРОВАНИЯ НЕМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ВКЛЮЧЕНИЙ В ПРОЦЕССЕ КОВШЕВОЙ ОБРАБОТКИ МЕТАЛЛА

**Погодин А.М., Ем А.Ю., Морозов А.О., Жемков А.А.,
Комолова О.А., Григорович К.В.**

*Институт металлургии и материаловедения имени А. А. Байкова РАН,
119334 Москва, Ленинский проспект 49,
e-mail: lpog11@yandex.ru*

Одним из главных параметров металлургического качества стали является количество содержащихся в ней неметаллических включений (НВ). Известно, что НВ крайне негативно влияют на свойства готовой стали, являясь источниками таких дефектов, как образование трещин, плен и несплошностей, и являются причиной зарастания сталеразливочной оснастки. Поэтому крайне важно контролировать уровень включений в процессе внепечной обработки стали. С этой целью, для прогнозирования образования НВ и определения возможности их удаления была разработана математическая модель, позволяющая рассчитывать количество образующихся первичных оксидных включений, которые формируются во время ковшевой обработки стали, и определять их остаточное количество.

В качестве исходных данных алгоритма модели образования НВ указывается информация о массе, температуре и химическом составе металла, а также его окисленности. На выходе алгоритма может быть получена информация о типах и объемной доле включений, которые могут быть образованы при заданных параметрах процесса на агрегате ковш-печь (АКП).

Для определения количества удаленных неметаллических включений в качестве исходных указывается информация о типах и размерах включений, вязкости жидкого металла и интенсивности продувки инертным газом. На выходе алгоритма может быть получена информация о возможности удаления НВ, времени, за которое они могут быть удалены, и их остаточное количество в агрегате.

Разработанная математическая модель образования и удаления НВ реализована в виде программного приложения. В работе методом фракционного газового анализа (ФГА) проведены исследования проб металла, отобранных в начале обработки на АКП для трубных сталей К-56, 09Г2С, КЕИ-55, коррозионностойкой аустенитной стали 08Х18Н10Т и стали марки IF-ВН, определены общее содержание кислорода, характерные типы НВ и их количество. Произведено сравнение результатов расчетов содержания НВ в отобранных пробах металла по разработанной программе с результатами ФГА. Показана удовлетворительная сходимость расчетных значений с экспериментальными данными.

ИЗУЧЕНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ СЕЛЕКТИВНОГО ИЗВЛЕЧЕНИЯ СВИНЦА И ЦИНКА ИЗ ПЫЛИ ДСП В ВОССТАНОВИТЕЛЬНОЙ СРЕДЕ

Подусовская Н.В., Комолова О.А., Григорович К.В.

*Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова
Российской академии наук, 119334, Москва, Ленинский проспект 49,
e-mail: npodusovskaya@imet.ac.ru*

Электросталеплавильная пыль, образующаяся в процессе производства стали в электропечах, содержит железо (35–55 мас. %), цинк (15–25 мас. %) и свинец (до 3 мас. %), которые, в соответствии с концепцией экономики замкнутого цикла, должны быть возвращены в производство.

Объект исследования – пыль ДСП из рукавных фильтров. Содержание элементов, мас. %: Fe–41,4; Zn–14,5; Ca–6,2; Na–2,8; Mn–2,5; Cl–1,7; C–1,7; Mg–1,5; Si–1,3; K–1,1; Pb–1,0; S–0,74; Cr–0,2; Cu–0,2; Al–0,2; Ti–0,1; P–0,1; остальное, предположительно, кислород. Методом PCA были обнаружены основные фазы: (Zn,Mn,Fe)O₄, Fe₃O₄, ZnO.

Исследовано поведение Zn и Pb при нагреве 5 г пыли ДСП в горизонтальной трубчатой печи в среде аргона с избытком восстановителя (сажа) 20 мас. % при ступенчатом нагреве. Первая ступень: нагрев до 1100 °С с выдержкой 1 час. Вторая ступень: нагрев до 1200 °С с выдержкой 1 час. В ходе эксперимента осуществляли отбор отходящих газов. После охлаждения, внутри печи, на газоотводящей трубке была обнаружена тонкая металлическая фольга. Полученные продукты и оста-ток исследованы на растровом электроннозондовом микроанализаторе JEOL JSX ISP 100.

Нагрев и выдержка образца при 1100 °С привели к совместному удалению из пыли ДСП свинца и цинка. При последующем нагреве до 1200 °С и выдержке 1 час в составе возгонов обнаружен цинк без наличия свинца.

Согласно результатам определения химического состава и элементного картирования областей на микроанализаторе JEOL JSX ISP 100, охлаждение возгонов вне печи привело к образованию оксидов свинца и цинка. При этом охлаждение возгонов непосредственно в печи в инертной среде позволяет получить продукт в металлическом виде.

Фазовый анализ остатка пыли ДСП показал восстановление железосодержащей фазы до α-Fe, отмечено присутствие фазы Fe₃C, что связано с избытком восстановителя; степень экстракции свинца составила 95 отн. %; цинка – 99,8 отн. %.

В результате разработана методика селективного разделения свинца и цинка при нагреве пыли ДСП и построена математическая модель, позволяющая предварительно оценить селективное разделение этих цветных металлов при разных условиях.

РАЗРАБОТКА НОВОЙ МЕТОДИКИ ВЫПОЛНЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ПЛАВОК

**Ригина Л.Г.^а, Костина М.В.^б, Лобов А.В.^а, Мальгинов А.Н.^а,
Уткина К.Н.^а, Кудряшов А.Е.^б, Федорцов Р.С.^б, Спицина И.В.^б**

^а АО «НПО «ЦНИИТМАШ», Москва, 115088, ул. Шарикоподшипниковская, 4.

^б ИМЕТ РАН, Москва, 119334, Ленинский просп. 49;

e-mail: mvk@imet.ac.ru,

Разработка новых составов сталей с заданными свойствами затратна ввиду расходов на выплавку серий пробных составов. Предложена экономичная методика проведения таких работ. Для выплавки композиций на базе стали X13 с добавками N, Mn, Mo, V, Nb на основе одной большой плавки базового состава получали несколько слитков с разным легированием. Из металла базовой плавки Fe-C-Cr-Mn делали отбор пробы (ОП) для анализов и заливку слитка (ЗС) №1. После продолжали плавку металла в печи и вводили дополнительный легирующий элемент (Mo); после ОП делали ЗС №2, системы Fe-C-Cr-Mn-Mo. Далее последовательно вводили N, Nb, V, получая отливки требуемых композиций (Рисунок 1).

Легирование стали азотом повышает её прочность и коррозионную стойкость. Для оценки растворимости азота в твердом металле важен, в т.ч., коэффициент композиционной устойчивости K_y . Он отражает распределение азота между жидкой и твердой фазами¹. Для композиции Fe-13Cr-(N, Mn, Mo, V, Nb) с использованием новой методики определяли K_y . Схема работ: выплавка базового металла, ОП, ЗС №1 с %N₁. Шаг 2 – введение азотсодержащей лигатуры по расчету, ОП после усвоения азота, ЗС №2 с %N₂ = N₁ + 0,01%, и т.д. Наблюдали за кристаллизацией вплоть до проявления «рослости» после ЗС. Она свидетельствовала о том, что %N₁ в предыдущем бездефектном слитке и является композиционно устойчивым. Так без использования серии плавок определили эффективный K_y .



Рисунок 1. Темплеты слитков стали Fe-13Cr-(N, Mn, Mo, V, Nb) при определении K_y

Литература

1. М.В. Костина, Л. Г. Ригина. Известия высших учебных заведений. Черная Metallургия. 2020; 63(8):606-622. <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2020-8-606-622>

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 22-23-01036

ВЛИЯНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОГО НАГРЕВА ПЕРЕД ОБЕЗУГЛЕРОЖИВАНИЕМ НА ТЕКСТУРУ ВЫСОКОПРОНИЦАЕМОЙ ЭЛЕКТРОТЕХНИЧЕСКОЙ АНИЗОТРОПНОЙ СТАЛИ

**Ролдугина А.С., Рязанов М.В., Парий И.О., Ильясов Р.Р.,
Ишимов А.С., Паршина А.С.**

*Новолипецкий металлургический комбинат, 398005, Липецк, пл. Металлургов 2,
e-mail: rolduginaas@gmail.com*

Высокоскоростной нагрев высокопроницаемой электротехнической анизотропной стали перед обезуглероживанием позволяет улучшить магнитные свойства материала¹. Улучшение магнитных свойств при высокоскоростном нагреве объясняется увеличением интенсивности ребровой компоненты (текстуры Госса) $\{110\}\langle 001\rangle$ в текстуре первичной рекристаллизации².

Исследование проводилось на образцах высокопроницаемой электротехнической анизотропной стали различных составов: сталь А с высоким содержанием олова (0,08-0,1% (масс.)) и сталь В с низким содержанием олова (0,03-0,05% (масс.)). Проводилось физическое моделирование по двум режимам: 1) нагрев с типичной скоростью 25-30°C/с; 2) нагрев со скоростью 150°C/с.

Анализ текстуры проводился методами EBSD и дифрактометрического анализа. Измерения по обоим методам показали, что высокоскоростной режим нагрева приводит к увеличению интенсивности ребровой текстуры: в стали А количество ребровой текстуры с разориентировкой 7° по данным EBSD-анализа увеличилось в 7,5 раз, в стали В – в 12 раз. Данные дифрактометрического исследования показывают аналогичные тренды увеличения содержания Госса при высокоскоростном нагреве, и сохраняется закономерность большего содержания Госса в стали В.

Проведен анализ влияния высокоскоростного нагрева на такие текстурные компоненты первичной рекристаллизации, как $\{411\}\langle 148\rangle$, $\{311\}\langle 136\rangle$, $\{111\}\langle 112\rangle$, а также на интенсивность текстурных волокон α , α' и γ после первичной рекристаллизации.

Проведена оценка влияния олова как легирующего элемента на формирование структуры и текстуры при высокоскоростном нагреве.

Литература

1. Park N., Lee E., Joo H., Park J. *ISIJ International*, 2011, **51**, 975-981
2. Choi S., Park N., Joo H., Park J. *Journal of the Korean Institute of Metals and Materials*, 2016, **54(7)**, 540-545

СОВРЕМЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ВЫПЛАВКИ МЕТАЛЛА С ТВО В БОЛЬШЕГРУЗНЫХ ДУГОВЫХ СТАЛЕПЛАВИЛЬНЫХ ПЕЧАХ

Лубяной Д.А.,^а Сомов С.А.,^б Ворожева Е.Л.,^б Мурысев В.А.,^б Некрасов И.В.^б

^а Филиал КузГТУ им. Т.Ф. Горбачева (г. Прокопьевск, Россия).
lubjanou@yandex.ru,

^б АО «Выксунский металлургический завод», г. Выкса, Россия,
somov_sa@vsw.ru

Работы по выплавке металла с термовременной обработкой стали (ТВО) развивались школами Самарина-А.М., Баума Б.А., Еланского Г.Н. и Кудрина В.А.. В настоящее время это получило широкое развитие в электро-сталеплавильном цехе Евраз-ЗСМК¹. Там были разработаны оптимальные температура металла в печи перед выпуском плавки, определено время обработки металла в печи, найдена температура начала и конца обработки металла на АКП, оценено время обработки металла, режимы вакуумирования и разливки металла¹.

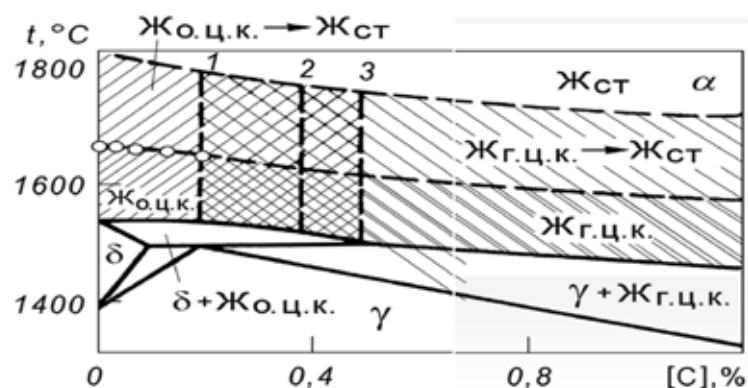


Рисунок 1 - Структура ближнего порядка расплавов Fe-C².

Аналогичные работы выполняются сейчас на ВМЗ. Результаты исследований позволяют констатировать, что перегрев расплава трубной марки стали до температуры аномалии может вызывать перестройку всей структуры расплава.

Литература

1. Использование науглероживателей и термовременной обработки для производства рельсовой стали Бойков Д.В., Лубяной Д.А., Мамедов Р.О., Лубяной Д.Д. Сталь. 2019. № 7. С. 23-26.
2. Свойства и строение расплавов на основе железа Еланский Г.Н., Кудрин В.А. Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Металлургия. 2015. Т. 15. № 3. С. 11-19.

АНАЛИЗ ИЗЛОМОВ НИЗКОЛЕГИРОВАННЫХ СТАЛЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОМПЬЮТЕРНОГО ЗРЕНИЯ

Кантор М.М., Судьин В.В., Боженев В.А.

*ИМЕТ им. А.А. Байкова РАН, 119334, г. Москва, Ленинский просп., 49
e-mail: sudyin.v@imet.ac.ru*

Испытания образцов низколегированных сталей на ударный изгиб используют для оценки качества и надёжности металла. В результате испытаний получают информацию о совершенной работе разрушения интегрально и по стадиям в виде динамической кривой в координатах усилие-прогиб, а также информацию о строении излома. Анализ изломов в ручном режиме выполняется по субъективной оценке, часто неточен, а также трудозатратен¹. При этом, по сути, выделение излома на снимке и различных областей на изломе является задачей семантической сегментации, решение которой возможно с применением современных алгоритмов компьютерного зрения на основе нейронных сетей. Целью этой работы была разработка эффективных методов автоматического анализа фрактографической информации из цифровых снимков изломов образцов низколегированных сталей.

Для работы использовали изображения изломов основного металла и сварных соединений сталей 09Г2С, 17Г1С в состоянии после горячей прокатки и после термического улучшения. Изломы образцов на ударный изгиб были получены в интервале вязко-хрупкого перехода и содержали два типа поверхности разрушения – вязкий ямочный и хрупкий фасеточный.

Было проведено сравнение двух подходов к анализу изломов. Первый заключался в выделении из изображений текстурных признаков и их использовании в качестве вектора входного сигнала для полносвязной нейронной сети прямого распространения (архитектура Multilayer Perceptron, MLP). Для получения пространственной информации о строении излома использовали метод скользящего окна. Второй подход заключался в использовании свёрточной нейронной сети с архитектурой кодировщик-декодировщик (U-Net). В качестве входного сигнала использовали фрагменты анализируемого изображения с последующим объединением. Было показано, что использование архитектуры U-Net позволяет получить модель с большей точностью чем MLP (98,88% на тестовой выборке против 92,43%). При этом, архитектура MLP подходит для использования в системах с низкой производительностью без графических процессоров, требуемых для дообучения и использования U-Net.

Литература

1. Manahan M. P., McCowan C. N. *Journal of ASTM International*, 2008, 5(7), 1-15.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ РАФИНИРОВАНИЯ РЕЛЬСОВОЙ СТАЛИ ОТ НЕМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ВКЛЮЧЕНИЙ ПРИ ВАРЬИРОВАНИИ ПАРАМЕТРОВ ПРОДУВКИ ИНЕРТНЫМ ГАЗОМ В СТАЛЕРАЗЛИВОЧНОМ КОВШЕ

Уманский А.А., Протопопов Е.В., Думова Л.В.

*Сибирский государственный индустриальный университет,
654007, Кемеровская область - Кузбасс, г. Новокузнецк, Центральный р-н, ул. Кирова, зд. 42.,
e-mail: umanskii@bk.ru*

Эксплуатационная стойкость железнодорожных рельсов в значительной степени зависит от типа, концентрации и расположения неметаллических включений¹. При этом, исходя из физической сущности процессов, протекающих при производстве рельсовой стали в современных сталеплавильных цехах^{2,3}, концентрация неметаллических включений в ней и, соответственно в готовых рельсах значимо определяется режимами продувки расплава инертным газом в сталеразливочном ковше.

В работе представлены результаты комплексных исследований процесса рафинирования рельсовой стали от неметаллических включений при ее продувке аргоном на агрегате «ковш-печь» применительно к условиям электросталеплавильного цеха АО «ЕВРАЗ ЗСМК». Указанные исследования включали в себя математическое моделирование эффективности перемешивания и протекания диффузионных процессов в расплаве рельсовой стали при продувке инертным газом в сталеразливочном ковше через донные фурмы, натурные эксперименты по определению загрязненности рельсовой стали неметаллическими включениями различных типов в зависимости от режимов ее продувки аргоном.

По результатам проведенных исследований установлены закономерности влияния параметров продувки рельсовой стали инертным газом в процессе обработки на агрегате «ковш-печь» на содержание в ней неметаллических включений и разработаны режимы продувки, обеспечивающие повышение чистоты рельсовой электростали по неметаллическим включениям.

Литература

1. Добужская А.Б., Галицын Г.А., Юнин Г.Н., Полевой Е.В., Юнусов А.М. Сталь, 2020, **12**, 52-55.
2. Кудрин В.А. Внепечная обработка чугуна и стали. – М.: Металлургия. 1992. – 336 с.
3. Дюдкин Д.А., Кисиленко В.В. Производство стали. Том 1. Процессы выплавки, внепечной обработки и непрерывной разливки. – М.: «Теплотехник», 2008. – 528 с.

ОКСИДЫ РЗМ И ИХ ВЛИЯНИЕ НА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ШЛАКОВ КОВШЕВОЙ МЕТАЛЛУРГИИ СТАЛИ

Уполовникова А.Г., Бабенко А.А., Сметанников А.Н., Шартдинов Р.Р.

*Институт металлургии УрО РАН, 620016, Екатеринбург, Амундсена, 101,
e-mail: upol.ru@mail.ru*

Разработка эффективных технологических приемов управления неметаллических включений является перспективным направлением улучшения комплекса свойств и качественных характеристик сталей. Одним из факторов регулирования количества, морфологии и распределения по объему металла сульфидных включений является содержание серы. Для организации производства стали с низким (до 0,003 – 0,005%) содержанием серы процесс десульфурации осуществляют на установках ковш – печь с формированием основных шлаков системы CaO-SiO₂-Al₂O₃ и глубоким раскислением стали алюминием. При этом одним из основных оксидных включений в стали, раскисленной алюминием, является корунд (Al₂O₃), который ухудшает свойства стали и приводит к «зарастанию» внутренней поверхности погружного стакана при непрерывной разливке. Негативное влияние корунда в стали может быть нейтрализовано путем его удаления в формируемый на установке ковш-печь основной жидкоподвижный шлак за счет снижения активности Al₂O₃. Однако на практике чрезмерное повышение основности рафинировочного шлака для снижения активности Al₂O₃ сопровождается, как правило, гетерогенизацией шлака, повышением температуры его плавления и снижением рафинирующих свойств. Одним из перспективных направлений снижения коэффициента активности Al₂O₃ в основных рафинировочных шлаках может быть использование оксидов РЗМ. Применение оксидов РЗМ обеспечивает снижение температуры их плавления, повышение жидкоподвижности, увеличение коэффициента межфазного распределения серы и снижение коэффициента межфазного распределения РЗМ. В работе приведены результаты исследования влияния оксида церия в шлаках системы CaO-SiO₂-Al₂O₃-MgO-Ce₂O₃ на физико-химические свойства. Показано положительное влияние температурного фактора, основности шлаков и содержания оксида церия в исследованном диапазоне химического состава на процесс восстановления церия.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-29-00975, <https://rscf.ru/project/22-29-00975/>.

КОМПОЗИЦИОННЫЙ ПОДХОД К ПРЕДОТВРАЩЕНИЮ АЗОТНОЙ ПОРИСТОСТИ СЛИТКОВ АУСТЕНИТНО-ФЕРРИТНОЙ СТАЛИ

Уткина К.Н., Корзун Е.Л., Левков Л.Я., Шипова Е.В., Ярополова Е.И., Пчёлкин А.И.

АО «НПО «ЦНИИТМАШ», 115088, г. Москва, ул. Шарикоподшипниковская 4,
e-mail: KNUtkina@cniitmash.com

Механизм кристаллизации аустенитно-ферритных сталей (АФС) определяется балансом концентраций элементов – ферритизаторов (Cr, Mo, Nb, Si, Al) и аустенизаторов (Ni, N, Mn, C), выраженным через соотношение хромового и никелевого эквивалентов. Кристаллизация протекает через 100% δ-феррит¹ при $C_{req} / Ni_{eq} > 2$ (Рисунок 1).

Содержание азота в АФС выше 0,2 % масс. при кристаллизации способно вызывать выделение избыточного азота в газовую фазу с образованием пор, что значительно усложняет производство поковок и заготовок и снижает выход годного. В докладе раскрыта суть композиционного подхода – оптимизация содержания легирующих элементов в пределах марочного состава стали UNS S32750, позволяющая управлять качеством слитка. Предложенная методика основана на решении системы регрессионных уравнений, описывающих условия достижения прямых и косвенных показателей качества в зависимости от химического состава стали. Наряду с использованием определённых технологических приёмов², этот подход позволяет предотвратить образование азотных пор при кристаллизации слитка.

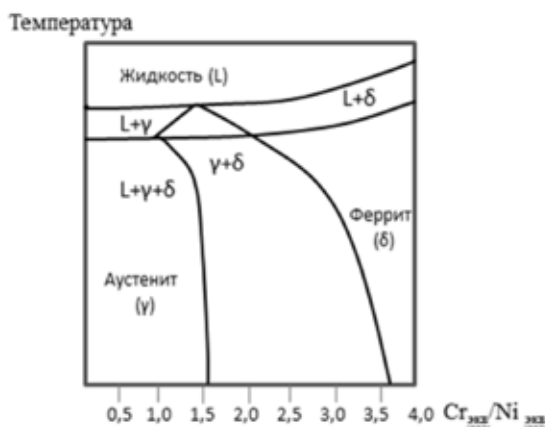


Рисунок 1. Высокотемпературная область псевдобинарной диаграммы для химических составов АФС нержавеющей сталей¹

Литература

1. Messer, B. Duplex stainless steel welding. Best practices / B. Messer, A. Wright, V. Oprea // Stainless Steel Word – 2007, December. – P.53-63.
2. Уткина К.Н. Исследование особенностей формирования и эволюции фазового состава и структуры супердуплексных сталей / К.Н. Уткина, Е.Л. Корзун, Ж.К. Каширина и др. // Тяжёлое машиностроение – 2023, №9. – С.2-10.

УПРАВЛЕНИЕ КАЧЕСТВОМ ДУПЛЕКСНЫХ КОРРОЗИОННОСТОЙКИХ СТАЛЕЙ

Федоров А.С.,^а Карасев В.С.,^а Ковалев П.В.,^а Житенев А.И.^б

^а Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого (СПбПУ),
195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29,
e-mail: fedorov_as@spbstu.ru

^б ПАО «НЛМК», 119017, Москва, ул. Большая Ордынка, 40 с3

Дуплексные коррозионностойкие стали (ДС) обладают уникальным соотношением коррозионной стойкости и высокой прочности. Повышение спроса на детали из них ставит задачу перед металлургами по их освоению и совершенствованию. Поэтому целью настоящей работы было создание подхода к выбору химического состава этих сталей с учетом особенностей фазообразования при выплавке, затвердевании и последующей термической обработки для управления эксплуатационными свойствами. Для достижения этой цели была решена задача количественной оценки фазового состава ДС с учетом вторичных фаз; определены критические точки фазовых равновесий в сплаве и допустимые отклонения от них; на основе этих критических точек разработана оптимизационная модель выбора химического состава сплава в зависимости от требований к свойствам.

Методика количественной оценки фазового состава ДС основана на селективном травлении реактивом Бераха и металлографической оценке. Такой способ травления позволяет точно оценивать количество аустенита, феррита, определять размеры фазовых составляющих, а также оценить объемную долю σ -фазы и карбонитридов. Показано, что точность этой оценки значительно выше, чем у рентгенофазного метода.

Определены критические точки фазовых равновесий ДС, управление которыми позволяет получать требуемый комплекс механических и коррозионных свойств. Первая точка $T_{50/50}$ – это температура, при которой аустенит и феррит находятся в равных количествах. Вторая и третья точки – T_{σ}^0 и T_{Cr2N}^0 ; соответственно, температуры начала образования σ -фазы и нитрида хрома, катастрофически снижающих коррозионные и механические свойства. Исследовано влияние химического состава ДС разных классов на эти точки и экспериментально определены допустимые отклонения критических точек от их «идеальных» значений.

Разработана оптимизационная модель, представляющая собой систему уравнений, связывающих предложенные критические точки сплава с химическим составом, механическими и коррозионными свойствами. Приведены примеры практического применения оптимизационной модели для управления работоспособностью существующих и разрабатываемых ДС.

МЕТОДЫ АНАЛИТИЧЕСКОЙ ХИМИИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ: КОНТРОЛЬ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И КАЧЕСТВА ПРОДУКЦИИ

Филатова Д.Г.

*Институт металлургии и материаловедения имени А.А. Байкова Российской академии наук,
Москва, Ленинский проспект, 49
gakl.analyt@gmail.com*

Определение качественного и количественного состава сталей и сплавов является важной частью управления качеством продукции на всех стадиях: соответствие исходных материалов требуемой марке, разработка новых составов, изготовление, эксплуатация. Методы анализа сталей и сплавов для подтверждения химического состава регламентируются по ГОСТу, при этом чаще описаны одноэлементные спектрофотометрические и атомно-абсорбционные методы (обычно пламенные) для растворов образцов. Современная альтернатива – многоэлементные методы, основанные на возбуждении в индуктивно связанной плазме с масс-спектральным или оптико-эмиссионным детектированием (ИСП МС и ИСП ОЭС) в сочетании с методами газового анализа. С применением разработанных подходов к пробоподготовке образцов нами получены результаты определения примесей в сталях и сплавах с метрологической оценкой их надежности. Актуальным остается поиск подходов к прямому анализу твердых образцов. Поэтому практическая реализация метода электротермической атомно-абсорбционной спектроскопии высокого разрешения с непрерывным источником излучения (ВР НИ ЭТААС) представляет интерес, особенно для определения металлов и неметаллов по молекулярным линиям. В частности, для определения S, P по линиям PO 246.40 нм, серы – по линии CS 258.056 нм. Для определения галогенов используют молекулы GaF, AlCl, AlBr и BaI по линиям 211.248 нм, 261.42 нм, 278.914 нм и 538.308 нм соответственно. Кроме того, есть возможность многоэлементного анализа, например, Cr, Fe и Al (425,433 нм, 425,076 нм и 425,315 нм соответственно). Для контроля технологических процессов и готовой продукции неразрушающий рентгенофлуоресцентный метод применен в новых технических решениях – с полным внешним отражением (РФА ПВО) и микро-РФА с поликапиллярной оптикой. Предложены подходы к созданию базы стандартных образцов.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА МОДИФИЦИРОВАНИЯ КАЛЬЦИЕМ НЕМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ВКЛЮЧЕНИЙ В НИЗКОЛЕГИРОВАННЫХ СТАЛЯХ РАСКИСЛЕННЫХ АЛЮМИНИЕМ

Хорошилов А.Д.,^а Григорович К.В.,^б Католиков В.Д.^а

^а ООО «Росатом МеталлТех», 123098, Москва, улица Погова, 5 А,

e-mail: ADmKhoroshilov@rosatom.ru

^б Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук,

119334, Москва, Ленинский пр-кт, 49,

e-mail: grigorov@imet.ac.ru

В условиях современного сталеплавильного производства продукты раскисления стали – неметаллические включения, не имеют достаточного временного запаса для полной флотации и удаления из металлического расплава. От количества, состава и морфологии неметаллических включений зависят важные технологические и эксплуатационные свойства стали, в частности: разливаемость металлического расплава, уровень поверхностных и внутренних дефектов стального проката, коррозионные и механические свойства металлопродукции и пр. Эффективным способом управления химическим и фазовым составом неметаллических включений является обработка расплава стали кальцийсодержащими модификаторами¹. Образование жидкофазных включений позволяет исключить случаи затягивания огнеупорной разливочной фурнитуры и избежать формирования опасных макроскопических неметаллических включений, ускорить процесс рафинирования стали. Концентрация кальция в расплаве стали, равновесная с жидкой фазой неметаллических включений, непостоянна и зависит от ряда факторов². В рамках данного доклада рассмотрены термодинамические зависимости целевого диапазона содержания кальция в расплаве низколегированных раскисленных алюминием сталей от химического состава и температуры расплава при обработке стали кальцием. Результаты теоретических расчетов сопоставлены с промышленными данными по разливаемости стального расплава и лабораторными исследованиями образцов стали.

Литература

1. Roney Eduardo Lino, Ângelo Máximo Fernandes Marins, Leandro Aparecido Marchi, et al. Journal of Materials Research and Technology, 2017, 6-1, 50

2. А.Д. Хорошилов, К.В. Григорович. Известия ВУЗов. Черная металлургия., 2019, 11, 860

СТРУКТУРНЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ЖИДКИХ СЛОЖНОЛЕГИРОВАННЫХ ЧУГУНАХ Fe-25Cr-3C И ТЕМПЕРАТУРНАЯ ОБРАБОТКА РАСПЛАВА

Чикова О.А.^а, Синицин Н.И.^а, Цепелев В.С.^а, Вьюхин В.В.^а, Потапов М.Г.^б

^а Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19,
e-mail: O.A.Chikova@urfu.ru

^б ФГАОУ ВО «Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова»,
455000, г. Магнитогорск, пр. Ленина, 38

Получены оригинальные экспериментальные данные о температурных зависимостях кинематической вязкости $\nu(T)$, удельного электросопротивления $\rho(T)$ плотности $d(T)$ и поверхностного натяжения $\sigma(T)$ расплавов Fe-25%Cr-3%C-2%Ni (жидкий чугун марки ИЧХ28Н2) и Fe-25%Cr-3%C-4%V (жидкий чугун марки ИЧ300Х30Ф4Н5КБ) в интервале температур от температуры ликвидус до 1950К. Жидкий чугун понимался как микронеоднородный расплав, претерпевающий температурно индуцированный структурный переход «жидкость – жидкость», при температуре T^* .¹ Анализ $\nu(T)$, $\rho(T)$, $d(T)$ и $\sigma(T)$ жидких чугунов позволил определить $T^*=1740$ К (чугун марки ИЧ300Х30Ф4Н5КБ) и $T^*=1760$ К (чугун марки ИЧХ28Н2). По $\nu(T)$ жидких чугунов определен размер дисперсных(коллоидных) частиц ~ 25 нм (расплав ИЧХ28Н2), ~ 3 нм (расплав ИЧ300Х30Ф4Н5КБ). По $\rho(T)$ жидких чугунов определен размер кластеров $D(T)$; $D(1700)= 3,4$ нм и $D(1900)=1,7$ нм для расплава ИЧХ28 и $D(1700)=1,7$ нм и $D(1900)=1,2$ нм для расплава ИЧ300Х30Ф4Н5КБ.² Ранее обнаружено, что температурная обработка расплава заэвтектического хромистого чугуна при 1800 К приводит к разрушению композиционно стабильных кластеров и обеспечивает изменение структуры и свойств слитка³, что подтверждает вывод авторов о величине T^* .

Литература

1. Tsepelev V., Chikova O., Shmakova K. Metallurgical and Materials Transactions B: Process Metallurgy and Materials Processing Science, 2022, **53(6)**, 3825
2. Чикова О.А. Известия вузов. *Черная металлургия*. 2020, **63(3-4)**, 261
3. Panichkin A., Wieleba W., Kenzhegulov A., Uskenbayeva A., Mamaeva A., Imbarova A., Kvyatkovskii S., Kasenova B. *Mater. Res. Expres*, 2023, **10(8)**, 086502

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ШЛАКОВ ПЕРИОДА ДЕСУЛЬФУРАЦИИ АКР-ПРОЦЕССА

Бабенко А.А., Шартдинов Р.Р., Лобанов Д.А., Сметанников А.Н., Уполовникова А.Г.

*Институт металлургии УрО РАН, 620016, Россия, Екатеринбург, ул. Амундсена, 101,
e-mail: rr.shartdinov@gmail.com*

Используя метод симплексных решеток планирования эксперимента, исследованы физико-химические характеристики шлаков системы $\text{CaO-SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-2\%Cr}_2\text{O}_3\text{-3\%Al}_2\text{O}_3\text{-8\%MgO}$ с основностью 1,0-2,5 и содержанием 0-6% B_2O_3 . Результаты экспериментальных исследований вязкости шлаков представлены графически в виде диаграммы состав – свойство (Рисунок 1). Установлено, что ввод до 6% оксида бора в шлак, несмотря на рост сложности его структуры, обеспечивает в рассматриваемом диапазоне основности достаточно высокую жидкоподвижность расплава. Вязкость шлаков изменяется от 0,12 Па·с в диапазоне основности 1,0-1,3 до 0,2 Па·с при основности 2,5. При этом формируемые шлаки вязкостью 0,2-0,3 Па·с в диапазоне основности 2,0-2,5, содержащие 4,0-6,0% оксида бора, сохраняют возможность достаточно глубокой десульфурации металла, обеспечивая содержание серы в нем на уровне 0,003-0,004%. Формируемые шлаки в рассматриваемой области химсостава при температурах периода десульфурации находятся в гомогенной области, обладая температурой начала кристаллизации, не превышающей 1500 °С.

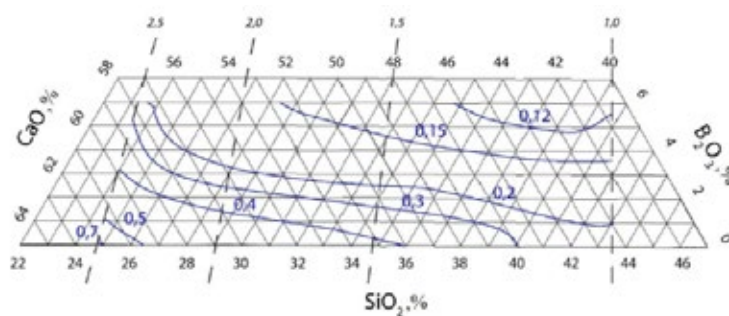


Рисунок 1. Диаграмма вязкости системы $\text{CaO-SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-2\%Cr}_2\text{O}_3\text{-3\%Al}_2\text{O}_3\text{-8\%MgO}$ при температуре 1600 °С: сплошные линии — вязкость, Па·с; пунктирные линии — основность

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН.

ПЛАЗМОХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В СТРУЙНОМ ВЫСОКОЧАСТОТНОМ ЕМКОСТНОМ РАЗРЯДЕ ПОНИЖЕННОГО ДАВЛЕНИЯ ДЛЯ СОЗДАНИЯ НАНОДИФФУЗИОННЫХ СЛОЕВ В МЕТАЛЛАХ И ИХ СПЛАВАХ

Абдуллин И.Ш.^а, Миронов С.В.^б, Некрасов И.К.^{а,б}

^а ООО «Плазма-ВСТ», 420081, г. Казань, ул. Курская 27, оф. 1000,
e-mail: 2960091@mail.ru

^б Казанский (приволжский) федеральный университет, 420008, г. Казань, ул. Кремлевская 18,
e-mail: ygor05071997@mail.ru

Представлены результаты исследования процесса формирования нанодиффузных покрытий на поверхности конструкционных материалов с помощью плазмы струйного высокочастотного емкостного разряда пониженного давления в атмосфере химически активных газов. Обработка велась на ВЧ плазменной установке с плоскими электродами, расположенными внутри вакуумной камеры.¹

Выполненные экспериментальные исследования позволили установить, что в диапазоне энергии ионной бомбардировки 10-100 эВ и плотности ионного тока на поверхность 0,1-5 А/м² происходит модификация поверхностного слоя исследованных материалов толщиной 70-420 нм, в том числе изменение состава приповерхностного нанослоя.

Результаты экспериментальных исследований показали, что при добавлении в плазмообразующий газ реагирующих газов (N₂, O₂, CO₂, CH₄, C₃H₈+C₄H₁₀) состав образцов из металлов и сплавов изменяется в большей степени, чем при обработке в среде чистого аргона.

Совокупность результатов по модификации поверхности сплава ВК6-ОМ, сталей, титановых сплавов в потоке плазмы струйного высокочастотного емкостного разряда пониженного давления свидетельствует о том, что на поверхности образуются нанодиффузные покрытия.

Так, например, при обработке вольфрамо-кобальтового сплава в среде углекислого газа на глубине менее 10 нм, структура соответствует – графитной. Далее связь С-С соответствует разупорядоченному углероду, а с 30 нм и далее растет интенсивность пика карбида вольфрама.

Литература

1. Абдуллин И.Ш., Желтухин В.С., Кашапов Н.Ф. Высокочастотная плазменно-струйная обработка материалов при пониженных давлениях. Теория и практика применения – Казань. Изд-во Казанского ун-та. 2000. – 348 с.

ВЛИЯНИЕ ОБЖИГА ПОРОШКА СТАБИЛИЗИРОВАННОГО ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ НА РАСПРЕДЕЛЕНИЕ И ТИП ПОР

Бастриков Р.М., Тюшняков М.И., Поливода Д.О., Карташов В.В.

*Уральский федеральный университет, 620002, Екатеринбург, ул. Мира 19
e-mail: romanbastrikov@gmail.com*

Благодаря сочетанию прочности, термостабильности, высокой биосовместимости и доступности прекурсоров для синтеза, порошки на основе стабилизированного диоксида циркония широко используются в качестве сырья для формирования биосовместимой керамики.

В рамках проекта было проведено исследование влияния обжига на распределение и тип пор порошка стабилизированного диоксида циркония для формирования биосовместимой керамики. Порошок получали при помощи метода контролируемого двухструйного осаждения при pH=8. После осаждения осадок подвергали термообработке при 120, 1050, 1100, 1150, 1200 °С и исследовали распределение пор. Изотермы адсорбции/десорбции азота представлены на рис. 1а и рис. 1б.

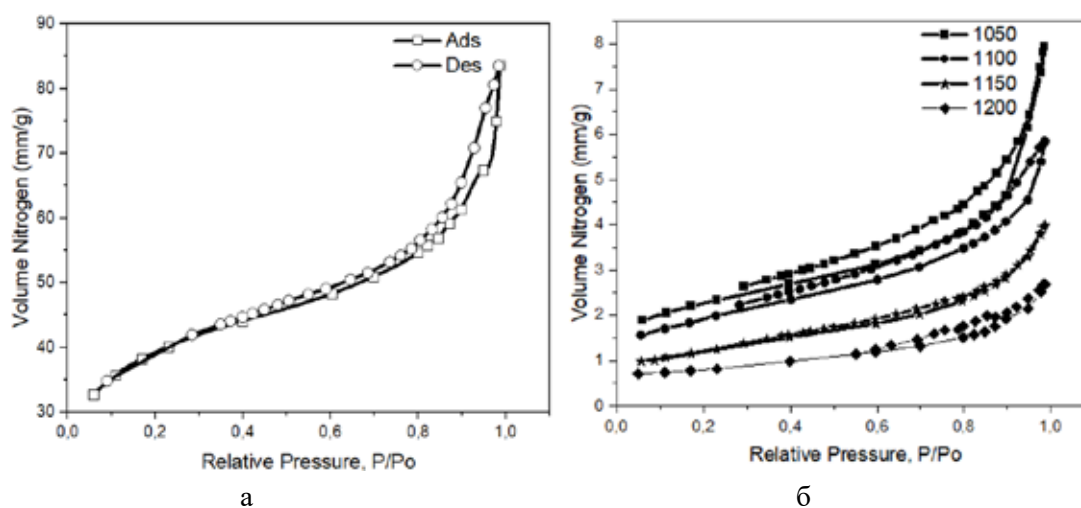


Рисунок 1. Распределение пор при термообработке 120 °С (а) и при 1050, 1100, 1150, 1200 °С (б)

Порошок, подверженный термообработке при 120 °С, среди остальных образцов обладает самым высоким объемом пор – 0,1300 мл/г/нм и высокой удельной площадью поверхности – 135 м²/г, тогда как порошок, обожженный при 1200 °С, характеризуется низким объемом пор – 0,0042 мл/г/нм, малой площадью поверхности – 2,4 м²/г и узким распределением пор. После обжига образцы подвергаются помолу в планетарной мельнице для повышения удельной площади поверхности.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА ФЕХТОВАЛЬНЫХ КЛИНКОВ ИЗ МАРТЕНСИТНОСТАРЕ- ЮЩЕЙ СТАЛИ

Бахтиярова Ю.В.,^а Романов С.Р.,^а Качмаржик С.Е.,^а Бахтиярова В.С.^б

^а Химический институт им. А.М. Бутлерова Казанского (Приволжского) федерального университета, 420008, Казань, Кремлевская 18, Россия

^б ГБПОУ МО Училище (техникум) олимпийского резерва №1, г. Краснознаменск, Россия
e-mail: julbakh@mail.ru

Клинки, используемые в спортивном фехтовании, делятся на два больших сегмента – для начинающих и для профессионалов. В нашей работе мы рассматривали рапирные клинки из марагеновской стали различных производителей, как отечественных, так и зарубежных.

Исследование фехтовальных клинков проводилось с помощью сканирующей автоэмиссионной электронной микроскопии на приборе Merlin ZEISS.

№	Fe	Ni	Co	Mo	Ti	Al	Cr
1	63.10	17.05	8.88	4.95	0.69	0.11	-
2	64.64	17.47	9.10	4.23	0.75	0.12	-
3	59.30	16.06	8.95	4.51	0.73	0.16	0.05
4	61.33	17.30	8.95	4.60	0.72	0.20	0.12
5	63.44	17.05	8.40	4.60	0.71	0.27	0.12
6	65.20	17.90	9.20	5.03	0.69	0.13	0.15

Таблица 1. Содержание элементов в образцах марагеновской стали, % по массе

По результатам исследований можно утверждать, что образцы сталей разных производителей не сильно отличаются друг от друга и соответствуют марке 300 по американскому стандарту.

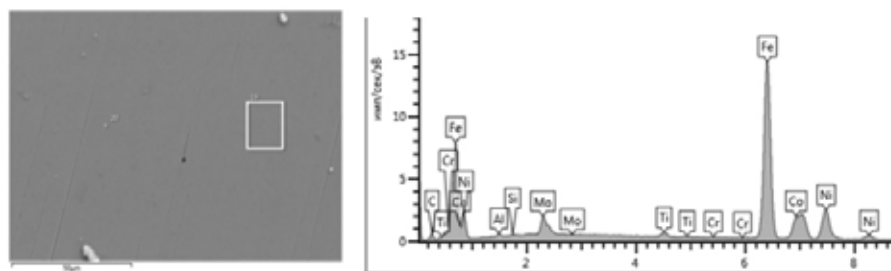


Рисунок 1. Срез клинка 6 и его элементный состав

Среди образцов выявлен один клинок, который состоит из двух разных сортов стали. Ручка данного образца не соответствовала составу мартенситносталяющей стали. В некоторых образцах обнаруживались белые включения, соответствующие кристаллам NaCl.

Работа выполнена при поддержке программы Сириус. Лето: Начни свой проект.

КРИТЕРИЙ РАВНОМЕРНОСТИ СМЕШИВАНИЯ НАНО- И МИКРО- ПОРОШКОВ

Вахрушев Р.А.,^{а,б} Дзидзигури Э.Л.^а

^а Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет МИСИС», 117049, Москва, Ленинский проспект 4, e-mail: vakhrushev.r.a@yandex.ru

^б Федеральное государственное бюджетное учреждение науки институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова российской академии наук, 119334, Москва, Ленинский проспект 49

В настоящее время смешивание нано- и микро материалов используется во многих передовых технологиях. Однако реализация данного процесса обусловлена рядом факторов такими как, плотность, размер и форма частиц и др., что может приводить к получению различных по равномерности перемешивания компонентов смесей. Поэтому для получения качественной продукции должен проводиться контроль смешивания.

Исходя из этого, цель данной работы заключалась в подборе критериев для количественной оценки качества смешивания.

Для проведения математических расчётов принято, что при идеальном смешивании на поверхности микронной частицы образуется слой из наночастиц. Схема опудривания микронной частицы представлена на рисунке 1а. Для оценивания равномерности смешивания предложено использование величины суммарной площади участков, занятых наночастицами на EDX-картах элементов. На рисунке 1б представлена карта распределения смеси $\text{Cu}-\text{Co}_3\text{O}_4$. Данный критерий опробован на смесях микронных порошков Cu , Ni , W и наноразмерного порошка Co_3O_4 .

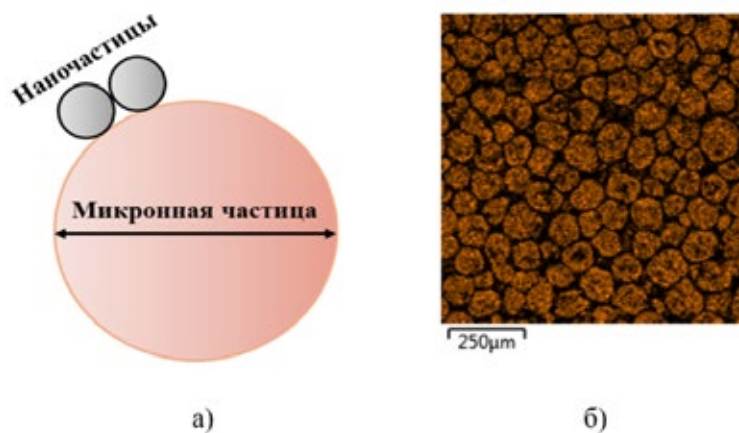


Рисунок 1. Схема опудривания наночастицами микронной частицы (а) и карта распределения меди (б) в смеси $\text{Cu}+\text{Co}_3\text{O}_4$

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 19-79-30025-П).

ОЦЕНКА ХАРАКТЕРИСТИК ТИТАНОМАГNETИТОВЫХ ЖЕЛЕЗОРУДНЫХ МАТЕРИАЛОВ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИХ ИХ СПОСОБНОСТЬ К МЕТАЛЛИЗАЦИИ

Витькина Г.Ю., Дмитриев А.Н., Вязникова Е.А., Алекторов Р.В.

*Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук
(ИМЕТ УрО РАН), 620016, Россия, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 101,
e-mail: 20procents@mail.ru*

Неклассическое использование уральских титаномагнетитовых руд требует разработки инновационных технологий¹⁻³, например, металлизация титаномагнетитовых окатышей с их последующей электроплавкой. Современные технологии электросталеплавильного производства предъявляют определенные требования к материалам – степень металлизации выше 90 %, высокое содержание железа металлического, низкое содержание FeO и др. (например, прочность). В ИМЕТ УрО РАН проводятся работы по изучению возможности получения титаномагнетитовых металлизированных окатышей, пригодных для дальнейшего сталеплавильного передела, из дообогащенных концентратов Гусевогорского и Первоуральского месторождений. Определены схемы обогащения, исследованы химический, фазовый и минералогический составы полученных концентратов (содержание железа общего в результате дообогащения составило более 65 % для обоих месторождений) и окатышей. Результаты показали пригодность титаномагнетитового железорудного сырья для процесса металлизации: степень металлизации материалов достигала 92 % и выше при восстановлении газом в определенных условиях.

Литература

1. Dmitriev A.N., Petukhov R.V., Vitkina G.Yu. et al. *Defect and Diffusion Forum*, 2016, **369**, 6.
2. Dmitriev A.N., Vitkina G.Yu., Petukhov R.V. *Pure and Applied Chemistry*, 2017, **89**, 1543.
3. Dmitriev A.N., Alektorov R.V., Vitkina G.Yu. et al. *Defect and Diffusion Forum*, 2019, **400**, 176.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ИМЕТ УрО РАН в рамках Программы фундаментальных исследований государственных академий (№ 122020100125-6).

РАСЧЕТ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ КРИСТАЛЛОГИДРАТОВ, ДВОЙНЫХ И ОСНОВНЫХ СОЛЕЙ С УЧЕТОМ ДОЛЕВОГО ВКЛАДА ЭНЕРГИЙ СВЯЗЕЙ

Выдыш С.О., Богатырева Е.В.

*НИТУ МИСИС, 119049, Москва, Ленинский проспект 4, стр.1
e-mail: vydyshso@yandex.ru, bogatyreva.ev@misis.ru*

Энтальпия образования химических соединений, в том числе природного происхождения, определяет тепловые эффекты реакций химико-металлургических процессов и удельную энергию атомизации – энергоплотность, которая связана с физическими свойствами химического соединения.

На основании анализа расчета энтальпий образования сорока сложных неорганических соединений меди, никеля, цинка, железа, свинца и РЗМ по уравнению В.В. Зуева¹, разработанному с применением концепции электроотрицательности, выявлена необходимость уточнения расчета энтальпии образования для кристаллогидратов, двойных и основных солей. Разработано уравнение, учитывающее долевого вклад энергий связей и взаимодействия водородных групп в кристаллогидратах:

$$\Delta H_{298}^{\circ}((M_1)_{k_1} \dots (M_n)_{k_n} A_m) = \sum_{n=1}^N [x_n \cdot \Delta H_{298}^{\circ}((M_n)_{y_n} A_{x_n})] - \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \left[\frac{1}{K\mathcal{C}_i} \cdot \left(\sum_{z=1}^{K\mathcal{C}_i} \frac{q_z}{\sqrt{Q_z - 1}} \right) \cdot \left(\frac{\mathcal{E}\sigma_i - \mathcal{E}\sigma_j}{0,102} \right)^2 \right],$$

где КЧ – координационное число атома;

z – счетчик связей координационного числа менее электроотрицательного атома;

q – количество одноименных атомов $M_i(A_i)$, находящихся в связи с более электроотрицательным атомом/ами $M_j(A_j)$ через общий атом (M_i-A-M_j/A_i-M-A_j) ;

Q – суммарное количество связей общего атома;

r – показатель, учитывающий варианты взаимодействия водородсодержащих групп (H_2O) в кристаллогидратах

Ошибка расчета по сравнению со справочными данными снизилась для антлерита с 25,7 до 1,1 %, лангита с 20,1 до 0,6 %, девиллина с 25,9 до менее 0,1 %, лантарита с 8,7-9,1 до менее 0,3 %.

Литература

1. Зуев, В.В. Зависимость энтальпии образования из окислов сложных кристаллов от разности электроотрицательности катионов – Геохимия – 1986 – №8 – С. 1160-1169.

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ЛАЗЕРНОЙ ПЕЧАТИ НА СТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ, ИЗГОТОВЛЕННЫХ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ 3Д ПЕЧАТИ

Давыдов Д.И.^а, Казанцева Н.В.^а, Ежов И.В.^а, Пильщиков А.А.^б

^а *Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук,
620108, г. Екатеринбург,*

ул. Софьи Ковалевской, 18, e-mail: davidov@imp.uran.ru

^б *Снежинский физико-технический институт НИЯУ МИФИ,
456776, Челябинская область, г. Снежинск, ул. Комсомольская, 8*

Аддитивные технологии являются перспективным направлением для получения металлических изделий со сложной геометрической формой и особенно актуальны для авиационной и атомной промышленности, в которой широко используются жаропрочные сплавы на основе никеля.

Проведено исследование структуры, фазового состава, текстуры и анизотропии механических свойств образцов никелевого жаропрочного сплавов ХН58МБЮ (ВЖ159) системы Ni–Cr–Mo–Nb–Al, полученных с помощью селективного лазерного сплавления.

На формирование структуры изделия, в процессе селективного лазерного плавления, влияют ряд факторов, в первую очередь, теплофизические свойства материала порошка, мощность лазерного излучения, скорость сканирования лазерного луча, диаметр пятна лазера, количество расстояние между соседними треками, толщина порошкового слоя и фракционный состав порошка. Кроме этого, важно учитывать скорость охлаждения и направления градиента температур при охлаждении готового изделия, а также особенности формирования структуры при последующей термической обработке образцов или готовых деталей. Этот вопрос особенно актуален для сложнолегированных многокомпонентных никелевых жаропрочных сплавов, в которых в условиях неравновесной кристаллизации возможно образование различных интерметаллидных фаз^{2,3}.

Литература

1. Dubiel, B., & Sieniawski, J. *Materials*, 2019, **12**(7), 1144.
2. Лукина Е.А., Филонова Е.В., Тренингов И.А. *Авиационные материалы и технологии*, 2017, **46**, 38.
3. Евгенов А.Г., Базылева О.А., Головлев Н.А., Зайцев Д.В. *Труды ВИАМ Жаропрочные сплавы и стали*, 2018, **12** (72), 25

Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (тема «Давление», № 122021000032-5)

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЗАГОТОВКИ ИЗ ЖАРОПРОЧНОГО НИКЕЛЕВОГО СПЛАВА ЭП741НП ИЗ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ПОРОШКА, ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ ГАЗОВОЙ АТОМИЗАЦИИ

Демченко А.А.,^а Хлыбов А.А.,^а Демченко А.И.,^б Калистов С.В.^в

^а НГТУ им. Р.Е. Алексеева, 603155, г. Нижний Новгород, ул. Минина, 24
e-mail: alinademchenko88@gmail.com

^б ООО «Гранком», 607018, Нижегородская обл., г. Кулебаки, ул. Восстания, д. 1/14, пом.2

^в АО «Русполимет», 607018, Нижегородская область, г. Кулебаки, ул. Восстания, 1/15

На основании полученных статистических данных была построена гистограмма распределения размера частиц порошка сплава ЭП741НП в мкм (рис.1), а также получено графическое представление частотного распределения, разбитого по интервалам (гистограмма), отражающее степень неравноосности исследуемых частиц порошка сплава ЭП741НП¹.

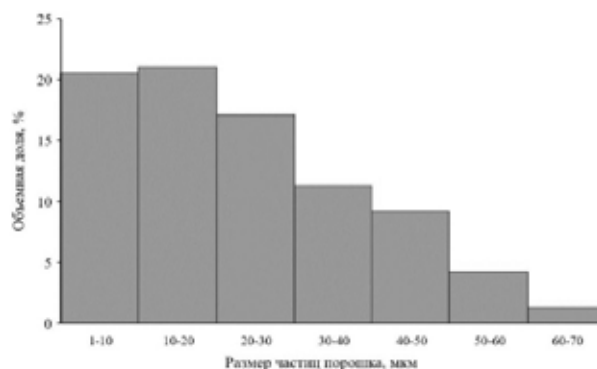


Рисунок 1. Гистограмма распределения размера частиц порошка ЭП741НП

Литература

1. Демченко А.А. Исследование возможности изготовления заготовок дисков ГТД из сплава ЭП741НП из металлического порошка, полученного методом газовой атомизации / А.А. Демченко, А.А. Хлыбов / Материалы VII Всероссийской научно-практической конференции - г. Пермь, 2023. - С. 89-92.

ПРЕКУРСОРЫ ДЛЯ 3D ТЕХНОЛОГИЙ ИЗ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ТУГОПЛАВКИХ NiAl И RuAl

Дроздов А.А.,^{а,б} Самохин А.В.,^б Поварова К.Б.,^б Скачков О.А.^а

^а ФГУП ГНЦ РФ «ЦНИИчермет им. И.П.Бардина», 105005, Москва, ул. Радио 23/9, стр. 2,
e-mail: aadrozdov76@mail.ru

^б Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН,
119334, Москва, Ленинский проспект 49

Достоинствами моноалюминидов β -RuAl/ β -NiAl, как основы новых легких, жаростойких, жаропрочных и термостабильных сплавов для ответственных деталей образцов новой техники способных работать в условиях гиперзвукового потока в атмосфере, содержащей до 23% кислорода при температурах торможения газового потока 1500-3000 К, при скоростях полета свыше 5 Махов, являются более высокая температура плавления (2100°C/1638°C), чем у современных жаропрочных никелевых сплавов (ЖНС) и сплавов на основе γ' -Ni₃Al, относительно низкая плотность (7,97/5,86 г/см³, соизмеримая с плотностью низколегированных и более легкоплавких никелевых сплавов, или ниже), модуль Юнга (267/284,2 ГПа), устойчивая теплопроводность (70–80 Вт/м К), в 3-8 раз выше теплопроводности ЖНС, высокая стойкость к окислению в интервале температур 1100–1200°C. Коэффициент термического расширения RuAl почти равен таковому для α -Al₂O₃ в диапазоне температур от ~150 до 1500°C. Для теплонагруженных узлов газотурбинных авиационных двигателей, трансзвуковых и гиперзвуковых летательных аппаратов и их двигателей необходимы детали сложной формы, в том числе миниатюрные. Для изготовления таких деталей необходимо использование аддитивных технологий, в том числе метода 3D – печати, с минимальной итоговой механообработкой (селективного лазерного плавления или селективного лазерного спекания). Аддитивное производство основано на цифровом проектировании/моделировании и использовании сферических микропорошков-прекурсоров, пригодных для получения методом 3D – печати плотных компактных заготовок/изделий сложной формы. Порошки должны соответствовать определенным требованиям: строго регламентированный гранулометрический состав, хорошая текучесть и свободная от оксидов поверхность. В настоящей работе оценены достоинства и недостатки известных способов получения прекурсоров применительно к моноалюминидам, приведены экспериментальные данные о прекурсорах из сплавов на основе NiAl, RuAl и FeCrAl, полученных плазменной сфероидизацией из различных исходных порошков по разработанной авторами технологии.

ВЫДЕЛЕНИЕ ИОНОВ Li, Co, Mn, Ni, Ti ИЗ ИХ СМЕСИ ГИДРОФОБНЫМ ГЛУБОКИМ ЭВТЕКТИЧЕСКИМ РАСТВОРИТЕЛЕМ НА ОСНОВЕ ТОФО И Д2ЭГФК

**Еремченко А.Е.,^{a,б} Кожевникова А.В.,^a Милевский Н.А.,^a
Заходяева Ю.А.,^a Вошкин А.А.^a**

^a *Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,
119991, Москва, Ленинский проспект 31*

^б *Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева,
125047, Москва, Миусская площадь, д. 9, стр. 1
e-mail: arterema19042003@gmail.com*

Li-ионные аккумуляторы – один из наиболее востребованных и доступных способов хранения энергии в настоящее время, благодаря своей высокой плотности энергии, отличной цикличности и долгого срока службы¹. Аккумуляторы с анодом типа LTO ($\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$) могут работать эффективно в широком диапазоне температур, что делает их очень востребованными. Количество отработавших аккумуляторов растёт, и возникает потребность в поиске и исследовании рациональных способов их переработки.

Выщелачивание и последующая жидкость-жидкостная экстракция отлично подходит для задач выделения и разделения металлов из их смеси. Однако существует проблема – популярные органические растворители для экстрагентов (керосин, толуол) являются легколетучими и горючими жидкостями. Глубокие эвтектические растворители являются отличной альтернативой, так как они не имеют упомянутого недостатка².

В данной работе представлены результаты исследования экстракции ионов Li, Co, Mn, Ni, Ti гидрофобным глубоким эвтектическим растворителем на основе двух промышленных экстрагентов: триоктилфосфиноксида (ТОФО) и ди(2-этилгексил)фосфорной кислоты (Д2ЭГФК). Был подобран состав смеси ТОФО, Д2ЭГФК и ментола, который дает синергетический эффект в экстракции исследуемых металлов, установлены зависимости степени извлечения ионов металлов от кислотности водной фазы, объёмного соотношения водной и органической фаз и времени проведения экстракции.

Литература

1. Xu J. et al. High-energy lithium-ion batteries: recent progress and a promising future in applications //Energy & Environmental Materials. – 2023. – Т. 6. – №. 5. – С. e12450.
2. Yuan Z. et al. Status and advances of deep eutectic solvents for metal separation and recovery //Green Chemistry. – 2022. – Т. 24. – №. 5. – С. 1895-1929.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 20-13-00387, <https://rscf.ru/project/20-13-00387/>.

АНАЛИЗ И КОРРЕКТИРОВКА ТЕХНОЛОГИИ КОВШЕВОЙ ОБРАБОТКИ ИЗОТРОПНОЙ СТАЛИ

**Жемков А.А., Румянцева С.Б., Демин К.Ю.,
Комолова О.А., Григорович К.В.**

*ИМЕТ РАН, 119334, Москва, Ленинский проспект 49
e-mail: zhemkov96@mail.ru*

В работе был проведен анализ паспортов плавов и исследование проб металла, отобранных на основных этапах выпечной обработки (циркуляционный вакууматор, установка доводки металла), от промежуточного ковша, от непрерывно литых заготовок (НЛЗ) и горячекатаного листа изотропной стали. Исследование проб проводили методом фракционного газового анализа (ФГА) и растровой электронной микроскопии с рентгеновским микроанализом. Для оценки размеров, морфологии и химического состава включений применялся метод рентгеноспектрального микроанализа. Целью данной работы был анализ причин образования различных типов неметаллических включений и корректировка технологии для снижения общей загрязненности металла.

Результаты ФГА показали динамику изменения содержания различных типов неметаллических включений на всех этапах технологии. Установлено, что кислород содержится в четырёх основных типах НВ: силикатах, оксинитридах, алюминатах и шпинелях. В пробах металла, отобранных с этапов ковшевой обработки, методом электронной микроскопии были обнаружены крупные оксидные неметаллические включения и плёны. В пробах, отобранных из промежуточного ковша, отмечено наличие оксисульфидных включений, представляющих собой оксисульфиды на основе CaS с различными оксидами на основе системы Al-Mg-Ca-O. В пробах, отобранных от НЛЗ и горячекатаного листа, были обнаружены сульфидные и оксисульфидные включения на основе CaS, нитриды алюминия (AlN), сложные нитриды на основе Al-Mg-N, оксинитриды и различные оксиды на основе Al-Mg-O.

Исходя из анализа паспортов плавов и проведенных лабораторных исследований, были даны рекомендации по корректировке технологии ковшевой обработки металла.

Были проведены опытные плавки с учетом данных рекомендаций и выполнен анализ металла аналогично отобранных проб. Методом электронной микроскопии в отобранных пробах были обнаружены неметаллические включения аналогичные тем, что были в пробах плавов до введения корректирующих действий. При этом метод ФГА показал снижение загрязненности оксидными НВ в пробах, отобранных от НЛЗ.

ПРОИЗВОДСТВО «ЗЕЛЕННОЙ СТАЛИ» И ВОДОРОДНАЯ МЕТАЛЛУРГИЯ: КРАТКИЙ ОБЗОР ИССЛЕДОВАНИЙ

Зиновеев Д.В., Дюбанов В.Г.

*Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова Российской академии наук,
119334, Москва, Ленинский проспект 49
e-mail: ZinoveevIMET@yandex.ru*

В настоящее время металлургическая промышленность сталкивается с требованиями к снижению выбросов углекислого газа. Известно, что сталеплавильный сектор ответственен за 7-8% выбросов CO₂, поэтому металлургические компании стремятся внедрять технологии позволяющие производить металлургическую продукцию с минимальным использованием ископаемого топлива. По предварительным оценкам Bloomberg, для достижения нулевого уровня выбросов в отрасль до 2050 года придется инвестировать от 215 до 278 млрд. \$

Учитывая объем необходимых инвестиций правительства и, производители в разных странах стремятся объединить усилия для достижения общей цели. Так, консорциум Производителей стали в Европе со сверхнизким выбросом CO₂ (ULCOS) поставил цель снизить количество выбросов CO₂ более чем на 50% в ближайшие 5-15 лет. Такие компании как Vale (Бразилия), Jindal Shadeed Group (Индия), H₂ Green Steel (Канада), Thyssenkrupp (Германия), Blast (Финляндия), Hyslum Steel (Испания), Oshivela (Намибия), Nippon Steel (Япония), Baowu и HBIS Group (Китай), Металлоинвест (Россия) и др. инвестируют значительные средства в строительство новых мощностей на основе низко углеродных технологий.

При этом значительное внимание уделяется технологии прямого восстановления железа с использованием в качестве восстановителя «зеленого водорода», который получен путем электролиза с применением возобновляемой энергии. Процесс включает стадии подготовки руды, восстановления водородом в шахтной печи (Midrex) и плавку металлизированного полупродукта в электродуговой сталеплавильной печи. Первый в мире пилотный сталеплавильный завод, использующий данную технологию (HYBRIT) открыт в 2020 в Швеции.

Учитывая актуальность вопроса, в мире наблюдается рост количества научных исследований посвященных различным аспектам производства металлов без использования ископаемого топлива. Так с 2010 по 2024 год количество таких исследований возросло более чем в 6 раз и только обзорных статей опубликовано более 50.

В данной работе приведен анализ публикаций по данной тематике.

Работа выполнена по государственному заданию №075-00320-24-00

ПОИСК РАЦИОНАЛЬНЫХ ПУТЕЙ ВВОДА КАЛЬЦИЯ В СТАЛЬ

Исаев М.К.

*Магнитогорский государственный технический университет им Г.И. Носова,
455000, Магнитогорск, проспект Ленина 38,
e-mail: isaev98@inbox.ru*

Кальций имеет важную роль при выплавке стали, так как является глубоким раскислителем, а также выступает в роли модификатора, благодаря кальцию происходит процесс превращения твердых частиц глинозема в жидкие включения алюмината кальция¹.

Рациональным способом введения кальция в сталь является порошковая проволока. Выход кальция при обработке кальцием во многом зависит от скорости подачи проволоки, соотношения диаметра и высоты ковша, а также от технологического процесса линии подачи проволоки. Среди них скорость подачи является ключевым фактором, определяющим, возможность достижения желаемого эффекта. Оптимальная скорость подачи практически не зависит от температуры обрабатываемого расплава стали. Существует только одна оптимальная скорость для порошковой проволоки, и она может быть грубо выражена следующим образом:

$$V=K \cdot H$$

где V – Оптимальная скорость линии подачи, м/мин

H – Истинная глубина расплавленной стали, м

K – Поправочный коэффициент скорости

Оптимальная скорость подачи проволоки зависит только от глубины жидкого металла. Для наилучшего усвоения кальция сталью статическое давление расплавленной стали должно быть больше-1,8 атм (паров давления кальция)². Чем стабильнее скорость подачи проволоки, тем лучше эффект усвоения кальция.

Температура металла напрямую влияет на выход кальция. Чем выше температура обрабатываемого расплавленного металла, тем выше давление паров кальция. Это означает, что кальций быстрее выходит из расплавленного металла, сокращая время его пребывания в стали. В результате эффективность модификации снижается.

Литература

1. Обработка стали кальцием Материалы международного симпозиума по обработке стали кальцием, Глазго, Великобритания, 30 июня 1988 г.
2. Математическое моделирование кинетики растворения реагентов при внепечной обработке черных металлов / А. Ю. Никулин // Диссертация на соискание ученой степени доктора технических наук – 1997

УПРАВЛЕНИЕ ЭКСПЛУАТАЦИОННЫМИ СВОЙСТВАМИ ДУПЛЕКСНОЙ КОРРОЗИОННОСТОЙКОЙ СТАЛИ С ПОМОЩЬЮ МОДИФИЦИРОВАНИЯ РЗМ

Карасев В.С., Коджаспиров Г.Е., Федоров А.С., Житенев А.И.

*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая 29,
email: karasev_vs@spbstu.ru*

Расширение сферы использования отливок из дулексных коррозионностойких сталей (ДКС) и ужесточение требований к их эксплуатационным свойствам требует поиска новых путей повышения их металлургического качества и управления структурной неоднородностью. Одним из способов достижения этого является модифицирование редкоземельными металлами (РЗМ). Поэтому в настоящей работе рассмотрены некоторые вопросы влияния РЗМ на структуру и свойства ДКС и разработаны технологические рекомендации по их использованию.

Методом термодинамического моделирования рассчитаны типы и количество неметаллических включений (НВ), образующихся в жидкой и затвердевающей стали при модифицировании разным количеством РЗМ. Для наиболее полного удаления НВ за счет формирования большого количества первичных НВ, легко удаляющихся из жидкой стали, требуется присадка 0,05% РЗМ. При больших остаточных концентрациях из-за большого количества образующихся оксидов происходит их коагуляция и загрязненность увеличивается. Показано, что в присутствии РЗМ повышается растворимость азота, что позволяет значимо увеличить его усвоение при легировании.

Изучено влияние РЗМ на литую структуру отливок и наследственность при дальнейшей выдержке при температуре 1100°C с закалкой в воду. В литом состоянии присадки РЗМ снижают протяженность зоны столбчатых дендритов из-за увеличения числа центров зарождения при затвердевании. Кроме того, в литом состоянии снижается доля аустенита видманштеттовой морфологии, что наследуется при термообработке.

Показано благоприятное влияние РЗМ на свойства ДКС. Присадка 0,05% РЗМ из-за повышения однородности отливки и повышения содержания азота позволяет увеличить пределы текучести и прочности на ~7% и ~4%, соответственно, а относительное удлинение на ~4%. За счет формирования оксидов РЗМ, обладающих большим электрохимическим потенциалом, чем оксиды хрома и кремния, формирующиеся в ДКС без модифицирования, повышается стойкость к локальной коррозии: потенциал питтингообразования увеличивается с 1,058 В до 1,087 В, а базис питтингоустойчивости с 1,150 В до 1,230 В.

ОРГАНИЗАЦИЯ ЦИФРОВОЙ ОБРАБОТКИ РЕЗУЛЬТАТОВ ИСПЫТАНИЯ НА УДАРНЫЙ ИЗГИБ ПАДАЮЩИМ ГРУЗОМ В МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ЛАБОРАТОРИЯХ

[Карпов И.Д.](#)

*ФГАОУ ВО Санкт-Петербургский Политехнический Университет Петра Великого
e-mail: Karpov_id@spbstu.ru*

В данной работе представлено исследование, посвященное разработке прототипа мобильного приложения для анализа изображений изломов образцов с использованием нейронных сетей. Основной целью проекта является создание надежного и эффективного инструмента для определения доли вязкой составляющей в изломе, что является важным параметром в материаловедении и анализе разрушений.

Разработка прототипа мобильного приложения для Android включала создание бэкенда, настройку взаимодействия между сервером и клиентом, интеграцию нейронной сети для анализа изображений и реализацию удобного пользовательского интерфейса. Все компоненты были протестированы и оптимизированы для обеспечения высокой производительности и надежности приложения. Стабильная связь между мобильным приложением и сервером позволяет эффективно передавать изображения для анализа и получать результаты в реальном времени. Использование Microsoft Visual Studio обеспечило удобную разработку клиентской части, делая приложение доступным и простым в использовании. Основное внимание было уделено точному определению доли вязкой составляющей в изломах, что делает приложение важным инструментом для материаловедов и инженеров.

НОВЫЕ ДОСТИЖЕНИЯ В ТЕХНОЛОГИИ ПРОИЗВОДСТВА КОНСТРУКЦИОННЫХ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ СПЛАВОВ МОЛИБДЕНА, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ВАКУУМНОГО ПЛАВЛЕНИЯ

Карпов М.И., Гнесин И.Б.

*Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия,
karpov@issp.ac.ru*

В период существования СССР в стране было разработано большое количество сплавов на основе молибдена, изготавливаемых методами вакуумной плавильной технологии. Основная часть продукции выплавлялась методом дуговой вакуумной плавки, позволявшей получать слитки с содержанием кислорода на уровне 30 ppm с размером зерна 3-5 мм. В конце 70-х стала развиваться технология изготовления слитков методом электронно-лучевой вакуумной плавки, позволившая снизить содержание кислорода в слитках до уровня 10 ppm. Но такие слитки из-за более крупного зерна были мало технологичны при последующей обработке давлением. В начале 21-го века в России стало очевидным, что качество продукции из молибдена из слитков вакуумной дуговой плавки уже не отвечает современным требованиям. Новым центром развития металлургии вакуум плавленного молибдена стал ИФТТ РАН, сохранивший после распада СССР мощную исследовательскую и опытно-промышленную базу для разработки новых сплавов и новых технологий производства продукции из тугоплавких металлов. Все исследования в институте проводятся в тесном контакте с отечественными предприятиями аэрокосмической, атомной, электронной промышленности, институтами РАН и ведущими университетами страны. Одной из первых новых технологий стал «дуплекс процесс» изготовления слитков. Изготовление слитков по этой технологии позволило существенно повысить качество продукции из наиболее востребованных в настоящее время сплавов молибдена еще советской разработки: МЧВП, ТСМ, ЦМ2А. Разработаны новые технологии производства гранул из сплавов молибдена, показана возможность их применения в аддитивных технологиях, основанных на лазерной 3d печати или в технологиях порошковой металлургии. Разработаны новые сплавы на основе молибдена, значительно превосходящие по своим прочностным характеристикам существующие. Создано новое направление в материаловедении сплавов на основе молибдена – сильно легированные сплавы, принципиально отличающиеся по своей структуре от мало легированных сплавов.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ИФТТ РАН

УЛУЧШЕНИЕ ОБРАБАТЫВАЕМОСТИ АВТОМАТНЫХ МАРОК СТАЛИ НЕ СОДЕРЖАЩИХ СВИНЦА

Кожухов А.А., Чернов К.А., Фомин В.И.

*Старооскольский технологический институт им. А.А. Угарова (филиал) Национального исследовательского технологического университета «МИСИС», 309516, Старый Оскол, Белгородская обл., микрорайон им. Макаренко, д. 42,
e-mail: kosuhov@yandex.ru*

Одним из направлений повышения технико-экономических показателей механической обработки на машиностроительных заводах является применение для изготовления деталей машин стали с повышенными технологическими свойствами, в том числе с повышенной обрабатываемостью резанием. В России задачу повышения обрабатываемости стали достаточно долго решали путем предварительной термообработки заготовок с формированием в металле благоприятной микроструктуры. Однако повысить обрабатываемость стали возможно и на стадии металлургического передела, а иногда это и единственно возможный способ решения.

Многочисленные исследования, показали, что для обеспечения оптимальной обрабатываемости необходимо сформировать в металле равномерно распределенные включения определенной формы. В автоматной стали сера содержится в основном в виде сульфидов марганца, объем которых зависит от содержания серы, а их морфология – от степени раскисления и скорости охлаждения металла при кристаллизации.

Различают включения сульфидов марганца трех морфологических типов: 1-й тип – глобулярные или малодеформированные включения; 2-й тип – пленочные или эвтектические включения, выделяющиеся на последних стадиях кристаллизации в междендритных пространствах и по границам кристаллов в виде тонких пленок и эвтектических колоний; 3-й тип – включения с кристаллическим строением, образующиеся при избыточном раскислении стали и выделяющиеся на какой-либо твердой подложке.

Для получения оптимальной обрабатываемости автоматной стали необходимо, чтобы в структуре металла преобладали крупные слабдеформированные включения сульфидов 1-го типа.

В ходе проведенных исследований в условиях сталеплавильной научно-технической лаборатории СТИ НИТУ «МИСИС» разработана технология производства автоматных марок стали не содержащих свинца, обеспечивающая получение равномерно распределенных в стали включений 1-го типа.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КОВШЕВОЙ ОБРАБОТКИ СТАЛИ

Комолова О.А.

*Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук,
119334, Москва, Россия
e-mail: o.a.komolova@gmail.com*

Моделирование процессов, происходящих при выплавке и внепечной обработке стали, является сложной задачей, требующей разработки физико-химических моделей и математических алгоритмов, позволяющих описать высокотемпературные процессы, протекающие в открытых неравновесных металлургических системах.

Даная работа посвящена созданию математических моделей процессов обработки металла на агрегате ковш-печь, ковшевом и циркуляционном вакууматорах, агрегате вакуум-кислородного рафинирования.

Для решения этой задачи были разработаны физико-химические модели, учитывающие состав взаимодействующих фаз, тепловые режимы, отражающие динамические характеристики процессов плавления и растворения присадок, перемешивания, позволяющие рассчитывать скорости реакций взаимодействия между всеми компонентами системы.

На основе разработанных моделей было создано оригинальное программное обеспечение, имитирующее процесс обработки металла на агрегате ковш-печь, ковшевом и циркуляционном вакууматорах, агрегате вакуум-кислородного рафинирования. Входной информацией для программного обеспечения являются: геометрические размеры ковша, начальная температура, масса и химический состав шлака и металла, время и масса вводимых присадок, время и интенсивность продувки инертным газом, электрический режим, база термодинамических данных и т.д.

Адекватность разработанного программного обеспечения проверяли по данным промышленных плавов. Сравнение результатов расчета с использованием разработанного программного обеспечения показало хорошее соответствие экспериментальным данным. Разработанное программное обеспечение может быть использовано для динамического моделирования и оптимизации технологий обработки металла на агрегате ковш-печь, ковшевом и циркуляционном вакууматорах, агрегате вакуум-кислородного рафинирования.

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ПЕРЕРАБОТКИ ОТХОДОВ ЛИТЕЙНОГО ПРОИЗВОДСТВА

Крылосов А.В.^а, Скрипченко С.Ю.^а, Чернышов М.В.^б

^а *Физико-технологический институт Уральский федеральный университет,
620002, Екатеринбург, Мира, 21,*

e-mail: avkrylosov@urfu.ru

^б *ООО «Химтим», 620062, Екатеринбург, проспект Ленина, 101, корпус 2*

Основным элементом, который содержится в отходах литейного производства, является кремний. Вовлечение его в производственный оборот представляет собой высокую ценность, а получение сплавов, содержащих кремний, представляет собой задачу, которую необходимо решать промышленности.

Предложен способ переработки отходов литейного производства в качестве сырья для изготовления строительных материалов¹. Предлагается способ переработки, который включает в себя, окомковывание смеси, который проводят без добавления металлического восстановителя, а сам процесс ведут при помощи газа-восстановителя (H_2 или CO), а затем осуществляют переплав в электродуговой печи².

Предлагаемый способ переработки отходов литейного производства представляет собой получение сплавов на основе кремния, содержащих другие элементы, который представляют интерес для широких сфер промышленности.

Данный способ переработки включает в себя изменение элементного состава реакционной смеси путём введения добавки солевой композиции на основе галогенидов щелочных металлов с одновременным понижением температуры плавления солевой смеси, на основе диаграмм состояния соответствующих солевых смесей, ниже $1000^\circ C$.

Восстановление полученного солевого флюса, с одновременным сплавообразованием, предлагается вести смешанным восстановителем при температурах выше точки плавления соответствующей металлической составляющей. Полученный солевой флюс предлагается использовать повторно, до достижения определенного элементного состава, а затем осуществлять переработку на соответствующих предприятиях.

Литература

1. Жариков В.В., Езерский В.А., Кузнецова Н.В., Стерхов И.И. *Вестник МГСУ*, 2011, 3, 189.
2. Сафронов Н.Н., Воронин Е.М. *Патент RU9611784A*, 1996.

РАЗРАБОТКА МАТЕРИАЛОВ И ТЕХНОЛОГИЙ ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА ОБОРУДОВАНИЯ АЭС С РЕАКТОРНОЙ УСТАНОВКОЙ ВВЭР-С-1000, ОБЕСПЕЧИВАЮЩИХ РЕСУРС ЭКСПЛУАТАЦИИ ДО 80 ЛЕТ

**Иванов И.А., Дуб В.С., Баликоев А.Г., Шурыгин Д.А., Мальгинов А.Н.,
Бубнёнков Б.Б., Соловьева М.С., Тохтамышев А.Н.**

*АО «НПО «ЦНИИТМАШ»,
115088, Москва, ул. Шарикоподшипниковская, дом 4,
e-mail: ANMalginov@cniitmash.com*

В настоящее время срок службы основного оборудования АЭС с реакторами поколения III+ ВВЭР-1200 (проект АЭС-2006) и ВВЭР-ТОИ из сталей семейства 15X2НМФА и 15X2МФА, соответственно, составляет не менее 60 лет.

Данные марки стали имеют достаточно высокий комплекс служебных и технологических свойств, однако реакторы четвертого поколения выдвигают новые требования. При сохранении текущего уровня прочностных характеристик корпусных сталей при комнатной и повышенных температурах максимальное сечение корпуса реактора в активной зоне может достигать до 300 мм, что приведет к укрупнению корпусных элементов, тем самым требуя решения серьезных металлургических и технологических вопросов.

Сталь 15X2НМФА-А(М) характеризуется более высокими кратковременными характеристиками прочности, удовлетворяющими категории прочности КП50 при температуре 400 °С, по сравнению со сталями семейств 15X2НМФА и 15X2МФА (КП45 при 350 °С, ресурс – не менее 60 лет) при низких значениях критической температуры хрупкости T_{K0} , что позволит решить технологические проблемы, касающиеся промышленного изготовления корпуса на имеющихся мощностях отечественной машиностроительной отрасли, в случае изготовления оборудования КР для проекта ВВЭР-С-1000.

Полученная опытная заготовка из стали 15X2НМФА-А(М) обладает высокими прочностным и вязкопластическим свойствам и соответствует заявленному уровню свойств по обеспечению категории прочности не ниже КП50 при 400°С, удовлетворяет требованиям по металлургическому качеству по содержанию вредных примесных элементов и по балльности неметаллических включений: не более 1,0 балла типа ОТ (оксиды точечные) и типа СН (силикаты недеформирующиеся), СХ (силикаты хрупкие) не обнаружены.

ВЛИЯНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ТИТАНА И ПАРАМЕТРОВ ТЕРМО-ДЕФОРМАЦИОННОЙ ОБРАБОТКИ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЫСОКОПРОЧНЫХ НИЗКОУГЛЕРОДИСТЫХ СТАЛЕЙ

Машарипов С.З.^а, Колдаев А.В.^а, Арутюнян Н.А.^б, Дагман А.И.^в

^а ФГУП «ЦНИИчермет им. ИП. Бардина», 105005, Москва, улица Радио, 23/9, стр. 2
e-mail: s.masharipov@chermet.net

^б Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Ленинские горы, 1, стр. 3
^в ПАО «НЛМК», 398005, Липецк, площадь Металлургов, 2

Новые высокопрочные низкоуглеродистые микролегированные стали широко применяются в транспорте, строительстве, машиностроении и других отраслях современной промышленности. Это обусловлено превосходными показателями трудно сочетаемых технологических, прочностных и других служебных свойств, что достигается благодаря суперпозиции дисперсной ферритной матрицы и объемной системы наноразмерных карбидных выделений. При этом для сталей разного уровня прочности экономическое преимущество имеет микролегирование титаном. Его максимально эффективному использованию способствует целенаправленное формирование наиболее оптимального структурного состояния.

Для решения этой задачи проведено исследование влияния содержания титана и параметров термомеханической обработки на механические свойства, микроструктуру и характеристики формирующихся фазовых выделений горячекатаных низкоуглеродистых сталей с 0,045-0,170 масс.% Ti, как на лабораторных, так и на промышленных образцах. Для изучения структурного состояния использовали оптическую, сканирующую и просвечивающую электронную микроскопию. Для анализа условий образования наноразмерных выделений разного типа и их количества проводили термодинамический расчет температурных зависимостей равновесного фазового состава исследуемых сталей.

Установлено, что прочностные характеристики стали закономерно возрастают при увеличении концентрации титана. Использование повышенных температур конца прокатки и смотки способствует как формированию мелкодисперсной и однородной микроструктуры рассматриваемых сталей, так и достижению высокого уровня прочности и пластичности благодаря формированию выделений межфазного типа. При повышенной скорости охлаждения после прокатки (30°C/с) наноразмерные выделения образуются в феррите, что снижает степень их влияния на дисперсионное твердение. Однако в этом случае имеет место значительно более высокий уровень зернограницного и дислокационного упрочнения.

ОСОБЕННОСТИ ЭКСТРАКЦИИ ПРАЗЕОДИМА И НЕОДИМА ИЗ АЗОТНОКИСЛЫХ РАСТВОРОВ СМЕСЯМИ ЭКСТРАГЕНТОВ

Мельник Ф.^а, Шулин С.С.^б, Богатырева Е.В.^а

^а НИТУ МИСИС, 119049, Москва, Ленинский проспект 4, стр.1

^б NUKEM Technologies GmbH, Москва, ул. Ленинская слобода, д. 26, стр.5

e-mail: filippmelnic@gmail.com, shulinsergei@yandex.ru,

bogatyreva.ev@misis.ru

Низкий коэффициент разделения по линии Nd/Pr в системе ТБФ- HNO_3 ($\beta=1,2$) определяет многоступенчатость экстракционных каскадов. С учетом возрастающей потребности в неодиме совершенствование существующих и поиск новых систем экстрагентов своевременно и актуально.

Ограниченное количество исследований синергетной экстракции РЗМ легкой группы смесями солей ЧАО и ТБФ (рисунок 1а)¹ определило направление исследований, результаты которого приведены на рисунке 1б.

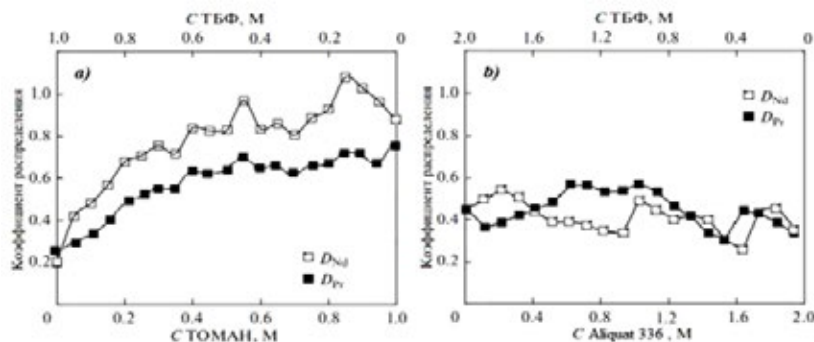


Рисунок 1. Зависимости коэффициента распределения D_{Nd} и D_{Pr} от состава изомолярных смесей ТОМАН–ТБФ¹ в толуоле (а) и Aliquat 336–ТБФ в ТС-1 (б) из растворов, содержащих:

а) 0,429 М $\text{Nd}(\text{NO}_3)_3$ /0,487 М $\text{Pr}(\text{NO}_3)_3$; 4,0 М NH_4NO_3 ; 0,01 М HNO_3 ;

б) 1,0 М $\text{Nd}(\text{NO}_3)_3$ / $\text{Pr}(\text{NO}_3)_3$; 2,0 М NH_4NO_3 ; pH=2

Установлены области синергетной и антисинергетной экстракции смесями Aliquat 336–ТБФ из концентрированных растворов Nd и Pr (1,0 М). Различие в проявлении этих эффектов для Nd и Pr при изменении концентрации Aliquat-336 0,1-0,3 М и 0,6-1,0 М перспективно для их разделения.

Литература:

1. Степанов С.И., Нгуен Тхи Иен Хоа, Чекмарев А.М., Цивадзе А.Ю. Химия экстракции $\text{Nd}(\text{NO}_3)_3$ и $\text{Pr}(\text{NO}_3)_3$ из нитратных растворов смесями ТОМАН–ТБФ в толуоле// Доклады Российской академии наук. Химия, науки о материалах. – 2021. – Т.496. – С.37-43. – DOI 10.31857/S2686953521010118

СРАВНЕНИЕ МЕТОДОВ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ НЕМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ВКЛЮЧЕНИЙ В ОБРАЗЦАХ СТАЛИ

Морозов А.О.¹, Комолова О.А.¹, Григорович К.В.¹, Якубенко Е.В.², Орехова Ю.Н.², Дагман А.И.²

¹ *Институт металлургии и материаловедения имени А.А. Байкова РАН, 119334, Москва, Россия, e-mail: morozov-morozov.an@yandex.ru*

² *ПАО «НЛМК», 398005, Липецк, площадь Металлургов, 2,*

Определение содержания неметаллические включения (НВ) в стали проводится методами оптической, электронной микроскопии и фракционного газового анализа (ФГА), которые не позволяют оперативно определять НВ в процессе производства из-за длительности проведения анализа. Поэтому актуальной является разработка оперативного метода контроля НВ на основе оптико-эмиссионного анализа PDA, который способен в течение 5-8 минут предоставить результат о составе и количестве НВ в пробе металла.

Для разработки метода было проведено сравнение результатов определения НВ в образцах, вырезанных из различных частей слябов низколегированной и динамной стали методами оптической металлографии по стандарту ASTM E1245-03, фракционным газовым анализом ФГА и оптико-эмиссионным анализом PDA. Было проведено определение содержания включений в образцах с помощью оптико-эмиссионного анализа PDA. При исследовании образцов методом PDA определяли количество вспышек интенсивности спектральных линий основных элементов, образующих неметаллических включений в стали. Среднее значение интенсивности соответствует содержанию растворенного элемента в матрице выделенный элемент, а выброс соответствует попаданию искры в НВ. Было проведено сравнение результатов определения объемной доли неметаллических включениях методами ФГА и оптической металлографией с количества включений, определенных в пробах методом PDA. Сравнение результатов определения НВ показывает возможность оценки загрязнённости НВ с помощью метода PDA. На основании результатов определения объемной доли включений методом ASTM E1245-03 была найдена связь объемной доли неметаллических включений с интенсивностями спектральных линий выделенных элементов. На основании полученных результатов было установлено корреляционное уравнение и рассчитаны объемные доли неметаллических включений в пробах металла.

Результаты расчета массивов спектральных данных сравнили с результатами определения объемной доли неметаллических включений с помощью количественной оптической микроскопии по стандарту ASTM E1245-03. Результаты показали хорошую сходимость.

ПОЛУЧЕНИЕ ПОРОШКОВОЙ КОМПОЗИЦИИ ИЗ СПЛАВА 42ХНМ И СИНТЕЗ ОБРАЗЦОВ ДЛЯ ИСПЫТАНИЙ ПО ТЕХНОЛОГИИ ПОСЛОЙНОЙ ЛАЗЕРНОЙ НАПЛАВКИ

Орлов Ю.А.^а, Соловьев Н.П.^а, Севрюков О.Н.^б, Рассказов Р.С.^б

^а АО «ГНЦ РФ-ФЭИ», Калужская область, г. Обнинск, пл. Бондаренко, 1,
e-mail: yaorlov@ippe.ru

^б НИЯУ МИФИ, г. Москва, Каширское шоссе, 31

Сплав 42ХНМ представляет собой перспективный материал для атомной энергетики. Обладая высокой коррозионной стойкостью в воде высоких параметров, сплав не склонен к коррозионному растрескиванию под напряжением и паро-циркониевой реакции, не подвержен коррозии под облучением. Изначально сплав 42ХНМ использовался в качестве материала активных зон реакторов ВВЭР. В настоящее время сфера применения оболочек из сплава 42ХНМ существенно расширилась¹.

42ХНМ представляет значительный интерес с точки зрения производства сплава методами аддитивных технологий. Целесообразность применения аддитивных технологий по сравнению с традиционными, требует тщательного изучения, что невозможно без исследования изменения структуры и свойств наплавленного материала.

В настоящей работе приведены результаты металлографических, рентгенофазовых исследований и электронной микроскопии порошка сплава 42ХНМ, полученного методом газовой атомизации. Рассмотрено влияние параметров атомизации на гранулометрический состав и морфологию полученного порошка. Из порошка методом послойного лазерного наплавления были изготовлены образцы для механических испытаний. Для сравнения были изготовлены образцы из этого же сплава, полученного традиционным способом. Сравнительные механические испытания на разрыв показали лучшие свойства у образцов, изготовленных литым способом. Показано, что получение необходимой микроструктуры материала, устранение пористости и повышение механических свойств изделий, полученных аддитивным способом, могут быть достигнуты соответствующим подбором режимов лазерного плавления.

Литература

1. Фазовые превращения в облученном сплаве 42ХНМ после отжига при повышенных температурах, а также после быстрого отжига, имитирующего условия максимальной проектной аварии. - Режим доступа: https://niiar.ru/sites/default/files/safety20/10_2019-_42hnm-gurovich_niiar.pdf

РАСЧЕТ СИСТЕМЫ Ag–Pd–Sn С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДЛЯ РАСПЛАВА МОДЕЛИ АССОЦИИРОВАННОГО РАСТВОРА

Павленко А.С., Пташкина Е.А., Кабанова Е.Г., Кузнецов В.Н.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, 119991, Москва, Ленинские горы д. 1, стр. 3,
e-mail: a.s.pav@yandex.ru*

Сплавы на основе палладия применяются в различных отраслях промышленности. При разработке новых материалов необходимо опираться на диаграммы состояния. Термодинамическое моделирование обобщает всю экспериментальную информацию о фазовых границах и термодинамических свойствах фаз, позволяет экстраполировать эти данные как в неисследованные области составов, так и на системы более высокого порядка. Это позволяет значительно сократить временные и материальные затраты на построение диаграмм состояния многокомпонентных систем.

Выполненный ранее расчет системы Ag–Pd–Sn с описанием расплава моделью Редлиха-Кистера-Муггину¹, показал ряд проблем, главной из которых являлась сильная тенденция к образованию фиктивных областей несмешиваемости в расплаве и ГЦК-твердом растворе. Поэтому в настоящей работе выполнен новый CALPHAD-расчет этой системы с описанием расплава моделью ассоциированного раствора, которая считается более эффективной для описания систем с сильными межатомными взаимодействиями.

Оптимизация параметров моделей фаз выполнялась в модуле PARROT программы Thermo-Calc®. Исходными данными для оптимизации служили результаты экспериментальных исследований фазовых равновесий² при температурах 500 и 800 °С, энтальпий образования расплава³ и активностей компонентов в расплаве⁴. Кроме того, эти данные были дополнены изучением температур и теплот плавления сплавов из области гомогенности ГЦК-твердого раствора методом ДТА/ДСК (Jupiter STA 449 F1).

Использование модели ассоциированного раствора позволило получить более корректное термодинамическое описание системы Ag–Pd–Sn. Было достигнуто хорошее согласие с экспериментом как по фазовым границам, так и по термодинамическим свойствам расплава. При этом во всем интервале составов и широком интервале температур не наблюдалось фиктивных областей расслоения.

Литература

1. Павленко А.С. и др. *Журнал физической химии*, 2023, **97**, 1329-1335.
2. Pavlenko A.S. et al. *CALPHAD*, 2023, **81**, 102533.
3. Luef C. et al. *Journal of alloys and compounds*, 2005, **391**, 67-76.
4. Laurie G.H. et al. *Transactions of the Faraday Society*, 1964, **60**, 1391-1401.

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ВКЛЮЧЕНИЙ И ДИСПЕРСНЫХ ФАЗ В ЭЛЕКТРОТЕХНИЧЕСКИХ ИЗОТРОПНЫХ СТАЛЯХ

Паршина А.С.,^{а,б} Житенев А.И.^а

^а Новолипецкий металлургический комбинат, 398040, Липецк, площадь Металлургов, 2
e-mail: parshina_as@nlmk.com

^б Воронежский государственный университет, 394018, Университетская площадь, 1

Неметаллические включения (НВ) значимо влияют на технологические и эксплуатационные свойства изотропных электротехнических сталей (ЭИС). Для управления количеством включений необходимо их идентифицировать, получить статистически значимые данные о количестве и размерах, определить, на какой стадии производства произошло их формирование.

В данной работе были исследованы НВ и дисперсные фазы в сталях, содержащих 3%Si, 1%Al. Образцы отличались промежуточной толщиной холодной прокатки (≈ 0.6 мм и ≈ 1 мм) и содержанием Mn – 0.1-0,3%, 0.5-0,7% и 0,8-1,2%.

Для оценки крупных первичных и вторичных неметаллических включений, формирующихся при выплавке, ковшевой обработке и разливки стали, и приводящих к поверхностным дефектам и снижению технологичности, применен автоматический анализ частиц на основе SEM-EDS, Tescan Mira 3. Первая группа включений это алюминаты кальция $nAl_2O_3 \cdot mCaO$ с высоким содержанием CaO, а также включения CaS, формирующимися на этапе ковшевой обработки при модифицировании кальцием. Вторая группа – включения магнезиальной шпинели и чистого оксида магния, природа образования которых связана с активным взаимодействием расплава и футеровки. Третья группа – это включения на основе нитрида алюминия, формирующиеся при затвердевании из-за ликвации азота.

Оценку четвертичных НВ, образующихся в твердом металле, и снижающих магнитные свойства ЭИС, провели количественным методом с помощью ПЭМ, Talos F200i. Идентификация проводилась при помощи энергодисперсионного анализа. Установлено наличие нитридов алюминия и титана, а также сульфидов меди. Их образование возможно только на завершающей стадии обработки при охлаждении после рекристаллизационного отжига.

КИНЕТИКА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВОЛЬФРАМИТОВОГО КОНЦЕНТРАТА С КАРБОНАТОМ КАЛИЯ

Пикулин К.В., Галкова Л.И., Гуляева Р.И., Гаева С.А.

*Институт металлургии УрО РАН, 620016, Екатеринбург,
ул. Амундсена, 101,
e-mail: pikulin.imet@gmail.com*

Широкое распространение при переработке вольфрамитовых концентратов получил способ спекания с Na_2CO_3 . Одним из недостатков использования солей натрия при спекании является образование легкоплавких соединений, влияющих на кинетику процесса. Известны [1] исследования, направленные на интенсификацию технологических процессов путем замены Na_2CO_3 на K_2CO_3 . Однако данные о кинетике и механизме взаимодействия в смесях вольфрамит ($\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{WO}_4$) – карбонат калия при нагреве весьма ограничены.

По данным термического анализа начало взаимодействия вольфрамитового концентрата с K_2CO_3 отмечено при 520 °С (Рисунок), сопровождающееся снижением массы и выделением CO_2 в газовую фазу. Эндотермический эффект с началом/максимумом при 699/721 °С отвечал плавлению эвтектики $\text{K}_2\text{WO}_4\text{-K}_2\text{CO}_3$.

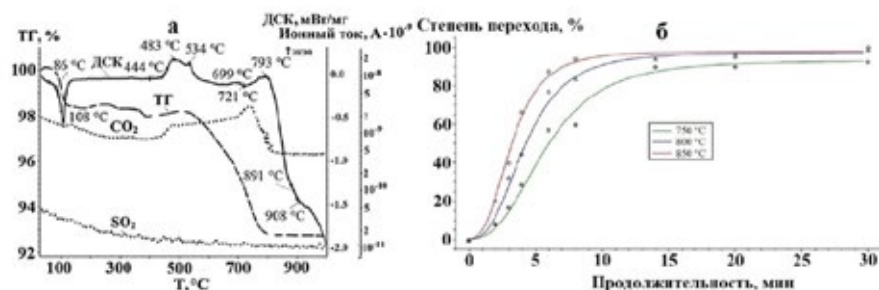


Рисунок. Спекание W-концентрата с K_2CO_3 : непрерывный (а) и изотермический нагрев (б)

По результатам изотермических экспериментов по спеканию (воздух, 750–850 °С) смесей концентрата с K_2CO_3 и последующему водному выщелачиванию спека (ж:т = 10, 90 °С, 60 мин) получены кривые, связывающие степень перехода вольфрама в K_2WO_4 с продолжительностью обжига. Обработка экспериментальных данных в программном комплексе Netzsch Thermokinetics 3.0 позволила выявить лучшую кинетическую модель процесса спекания с лимитирующей стадией автокаталитического зародышеобразования Праута-Томпкинса с энергией активации, равной 56,8 кДж/моль.

Литература

1. Бельский С.С. *Вестник ИГТУ*, 2018, **22**, 186.

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН (№ госрегистрации темы: 122020100404-2) с использованием оборудования ЦКП «Урал-М».

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ПРОИЗВОДСТВА ВИСМУТСОДЕРЖАЩИХ ГРУПП МАРОК АВТОМАТНЫХ СТАЛЕЙ

Ровбо А.С.^а, Житенев А.И.^б, Рябошук С.В.^в, Альхименко А.А.^а

^а Научно-технологический комплекс "Новые технологии и материалы", Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 195251, Санкт-Петербург, Россия,
e-mail: rovboanna@yandex.ru

^б ПАО «Новолипецкий металлургический комбинат», Москва, Россия

^в Институт машиностроения, материалов и транспорта,
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
195251, Санкт-Петербург, Россия

Висмут является одним из наиболее перспективных элементов, позволяющих в значительной мере отказаться от применения серы и свинца, добавляемых в современные автоматные стали¹. В данной работе разработана технология получения висмутсодержащих групп марок автоматных сталей. Выполнено проектирование технологии получения стали с висмутом. Проведено тестирование технологии в лабораторных и промышленных условиях.

На основе экспериментального и расчетного исследования определены оптимальные концентрации висмута и серы, необходимые для формирования требуемого количества включений².

Литература

1. Zivkovic D., Strbac N., Ekinovic S., Begovic E. Lead-free free-cutting steels as modern environmentally friendly materials, *Ecologica*, 2011, **T. 18**, 451-456.
2. Zhitenev A.I., Rovbo A.S., Nechaev D.V., Ryaboshuk S.V. Behavior of bismuth and manganese sulfide in free-cutting steel//*Chernye Metally*, 2024, **N 2**, С. 46-52.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках программы Исследовательского центра мирового уровня: Передовые цифровые технологии (соглашение № 075-15-2020-311 от 20.04.2022).

ВЛИЯНИЕ B_2O_3 НА ВЯЗКОСТЬ ВЫСОКОМАГНЕЗИАЛЬНЫХ ДОМЕННЫХ ШЛАКОВ

Вусихис А.С., Михеенков М.А., Леонтьев Л.И., Сергеева С.В.

*Институт металлургии Уральского отделения Российской Академии наук,
620016, Екатеринбург, Амундсена, 101
e-mail: vas58@mail.ru*

Несмотря на острый дефицит железорудного сырья, карбонатные железные (сидеритовые) руды Бакальского месторождения, балансовые запасы которых составляют около 1 млрд. тонн, не пользуются спросом у металлургов Урала из-за высокого содержания магния.

В шлаках переход от твердого состояния к жидкому происходит в определенном интервале температур, поэтому температура плавления ($T_{пл}$)- величина условная. Часто за нее принимают температуру, при которой шлак начинает свободно вытекать из коковой насадки, что возможно, когда его вязкость становится менее 2,5 Па·с.

Для успешного хода доменной плавки и обеспечения безопасности производства доменной печи $T_{пл}$ шлака должна быть ниже 1400 °С, а при температурах выпуска (T_b) (1400 до 1500 °С) он должен обладать хорошей подвижностью (вязкость менее 0,5 Па·с).

В шлаковых системах $CaO-SiO_2-Al_2O_3-MgO-B_2O_3$ с содержанием

$$\frac{CaO}{SiO_2} = R = 0,9 \div 1,2, MgO = 15 - 36\%, B_2O_3 = 0 - 15\%, Al_2O_3 = 5 - 20\%$$

в отсутствие борного ангидрида, при основности менее 1,1, содержании MgO менее 20% и соотношении Al_2O_3/MgO более 0,5 $T_{пл}$ находится в интервале температур 1300-1400 °С, а вязкость 0,5 Па·с, достигается при температурах 1320-1440 °С. Доменная плавка на шлаках такого состава будет протекать без затруднений.

Дальнейшее увеличение содержания оксида магния до 36% приводит к резкому увеличению температуры плавления вплоть до 1500 °С с уменьшением интервала кристаллизации, а температуры, при которых достигается вязкость на выпуске, повышаются вплоть до 1540 °С, что делает плавку на таких шлаках затруднительной или невозможной.

Добавки B_2O_3 приводят к тому, что $T_{пл}$ снижается, и при содержании в расплаве 15% B_2O_3 составляет менее 1150 °С, а T_b – менее 1500 °С. Шлаки становятся длинными и устойчивыми, что делает возможным ведение доменной плавки на шлаках, содержащих около 40% MgO, что соответствует доле сидеритов в исходной шихте 40-50%.

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН с использованием оборудования ЦКП «Урал-М».

ВЯЗКОСТЬ ШЛАКОВ РУДНОЙ ПЛАВКИ МЕДНОГО И НИКЕЛЕВОГО СЫРЬЯ

**Сергеева С.В., Клюшников А.М., Гуляева Р.И., Вусихис А.С.,
Удоева Л.Ю., Тюшняков С.Н., Леонтьев Л.И.**

*Институт металлургии УрО РАН, 620016, Екатеринбург, ул. Амундсена, 101,
e-mail: amk8@mail.ru*

Выполнена оценка вязкости расплавленных шлаков совместной плавки окисленной никелевой и сульфидной медной руд. Для проведения исследований синтезированы близкие по составу и структуре к реальным образцам базовые модельные шлаки, ограничивающие исследуемый диапазон составов (% масс.): железистый шлак (8,9 CaO, 11,8 MgO, 12,5 Al₂O₃, 47,4 SiO₂, 13,3 FeO и 5,0 Fe₂O₃) и образованный путём удаления из него оксидов железа безжелезистый шлак (12,5 CaO, 16,0 MgO, 9,4 Al₂O₃ и 58,3 SiO₂). Теоретическая (расчёт по модели Калмановича–Франка) оценка вязкости (η) показала, что в интервале 1400–1550 °С возможно непрерывное удаление до 80 % оксидов железа из железистого образца с поддержанием уровня вязкости ($\eta = 70$ дПа·с), приемлемого для практики рудных плавов; при более глубоком удалении оксидов железа (для перехода к базовому безжелезистому модельному шлаку) необходима корректировка состава за счёт добавления оксидов кальция или магния. Полученные вибрационным методом экспериментальные значения η для железистого (1550–1300 °С) и безжелезистого (1550–1400 °С) базовых модельных шлаков находятся в диапазонах 3,1–23,3 и 12,8–45,5 дПа·с соответственно. Проведён регрессионный анализ экспериментальных данных в рамках модели Веймана–Френкеля–Урбана, определены значения энергии активации вязкого течения (E_{η}) базовых модельных шлаков, показано, что сокращение основности шлака с 0,7 (железистый шлак) до 0,6 (безжелезистый шлак) ведёт к росту E_{η} с 204 до 236 кДж/моль. Предложены оригинальные эмпирические модели, позволяющие получать уточнённые значения вязкости железистого и безжелезистого шлаков в рассмотренном диапазоне температур. Установлено, что для получения шлаков оптимальной вязкости совместную сократительную плавку окисленных никелевых и сульфидных медных руд исследуемых составов следует вести при температуре не ниже 1400 °С. Полученные результаты могут быть использованы при разработке и совершенствовании технологий пирометаллургической переработки минерального и техногенного сырья цветной и чёрной металлургии, а также в стекольной и керамической отраслях промышленности.

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН (№ госрегистрации темы: 122020100404-2).

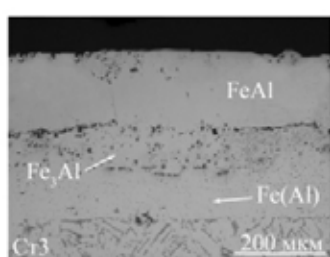
ИЗНОСОСТОЙКИЕ СЛОИСТЫЕ ПОКРЫТИЯ ИЗ АЛЮМИНИДОВ ЖЕЛЕЗА НА УГЛЕРОДИСТОЙ СТАЛИ

Слаутин О.В., Шморгун В.Г., Проничев Д.В., Кузнецов С.А.

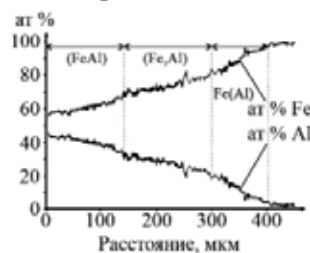
*Волгоградский государственный технический университет
400005, Волгоград, пр. им. Ленина, 28
e-mail: slautin@vstu.ru*

Одним из путей минимизации износа транспортирующего, накопительного, смешивающего, прессового и другого оборудования в анодном производстве алюминиевых заводов является формирование на поверхности контактирующих с анодной массой частей оснастки из углеродистых или низколегированных сталей покрытий на основе алюминидов железа $FeAl$ и Fe_3Al . Интерметаллиды на основе алюминия и железа обладают достаточно высокими показателями твердости и износостойкости. Такие покрытия могут реализовать комплекс наиболее востребованных функциональных характеристик на необходимом уровне и уменьшить количество стальных частиц, попадающих в состав сырья при чистке стенок оборудования.

Покрытия $FeAl/Fe_3Al/Fe(Al)$ сформированы на стальной основе с использованием сварки взрывом стали Ст3 с алюминием АД1 и последующей термообработки (рис. 1). Термическая обработка включает нагревы $660\text{ }^\circ\text{C}$, 3 ч + $640\text{ }^\circ\text{C}$, 3 ч, обеспечивающие формирование Fe_2Al_5 и отделение непрореагировавшего алюминиевого слоя и $1100\text{ }^\circ\text{C}$, 1,5 ч для трансформации поверхности покрытия до интерметаллида $FeAl$.



a



б

Рисунок 1. Структура покрытия (а) и распределение химических элементов (б)

Испытания покрытий в условиях горячего износа показали, что основным механизмом разрушения является когезионный. Отслоение и скалывание покрытий происходит только при больших нагрузках. Установлено, что твердость слоистого $FeAl/Fe_3Al/Fe(Al)$ покрытия толщиной 440 мкм от подложки к поверхности увеличивается, на расстоянии 200 мкм от поверхности достигает максимума, а затем снижается за счет увеличения пористости. Его относительная износостойкость в $\sim 1,5$ раза выше основы из стали Ст3.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-29-00231, <https://rscf.ru/project/24-29-00231/>

ТЕХНОЛОГИЯ ДЕСУЛЬФУРАЦИИ И МИКРОЛЕГИРОВАНИЯ НИЗКОУГЛЕРОДИСТОЙ СТАЛИ БОРОМ ПОД ШЛАКАМИ СИСТЕМЫ $\text{CaO-SiO}_2\text{-MgO-Al}_2\text{O}_3\text{-B}_2\text{O}_3$

Сметанников А.Н., Бабенко А.А., Уполовникова А.Г.

*Институт металлургии УрО РАН, 620016, Екатеринбург, Амундсена, 101,
e-mail: artem.smetannikov.89@mail.ru*

Одним из факторов, влияющим на качество стали, является содержание серы в металле. Для получения сталей с низким (0,010-0,015%) и сверхнизким (0,002-0,004%) содержанием серы процесс десульфурации осуществляют на установках ковш-печь (УКП). Процесс формирования высокоосновных шлаков системы $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ проводится с добавлением плавикового шпата. Однако кратковременное действие плавикового шпата на физико-химические свойства шлака не обеспечивает необходимой десульфурации стали. Экологическая вредность летучих фторидов и их агрессивность по отношению к оборудованию и огнеупорной футеровки сталеразливочных ковшей вызывают необходимость разработки безфтористых шлаков с низкой вязкостью и высокими рафинирующими свойствами. Одним из направлений решения проблемы является использование оксидов бора взамен плавикового шпата.

Наряду с глубокой десульфурацией металла перспективным направлением решения проблемы повышения качества и снижения себестоимости металлопродукции является микролегирование стали. Особое место среди микролегирующих элементов занимает бор, введение которого в металл в количестве 0,001–0,003 % дает возможность увеличить прочность стали без снижения пластичности.

Микролегирование стали бором осуществляют, как правило, за счет присадок борсодержащих ферросплавов, использование которых увеличивает себестоимость стали. Одним из направлений решения проблемы микролегирования стали бором с минимальными затратами может быть прямое микролегирование за счет восстановления бора из оксидной системы.

В работе приведены результаты фундаментальных исследований физико-химических свойств оксидной системы $\text{CaO-SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3$, содержащей 15% Al_2O_3 и 8% MgO .

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН

ОБ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ПОДВОДНОЙ ПЛАЗМЫ ДЛЯ МОДИФИКАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ ЛЕНТОЧНЫХ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ FeSiB

Хлюстова А.В.,^а Сироткин Н.А.,^а Каминская Т.П.,^б Степович М.А.,^в
Стулов А.В.,^г Шипко М.Н.,^д Савченко Е.С.^е

^а *Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, 153045, Иваново, ул. Академическая, 1,
e-mail: avlada5577@gmail.com*

^б *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
физический факультет, 119991, ГСП-1, Москва*

^в *Калужский государственный университет им. К.Э. Циолковского,
248023, Калуга, ул. Степана Разина, 26,
e-mail: m.stepovich@mail.ru*

^г *ООО «Научно-производственный комплекс «Автоприбор»,
600016, Владимир, ул. Большая Нижегородская, 94*

^д *Ивановский государственный энергетический университет
им. В.И. Ленина, 153003, Иваново, ул. Рабфаковская, 34*

^е *Национальный исследовательский технологический университет
«МИСИС», 119049, Москва, Ленинский пр., 4*

Образцы аморфной электротехнической стали (фольги) представляли собой ленту толщиной около 100 мкм, шириной 45 мм, которые были получены методом сверхбыстрого охлаждения при распылении расплава на вращающемся медном барабане. Последующая обработка материалов проводилась в импульсной подводной низкотемпературной плазме [1]. Структура поверхности фольги изучалась методами атомной силовой микроскопии. Также изучалось влияние слабых импульсов магнитного поля [2, 3] на аморфные сплавы. Исследовались неотожжённые аморфные сплавы состава $Fe_{73}Si_9B_{13}$ и с добавкой 1 % Cu, влияющей на процесс кластеризации в процессе последующего термического отжига. Описано влияние режимов обработки в низкотемпературной плазме и магнитоимпульсной обработки на структуру поверхности и магнитные свойства материалов.

Литература

1. Хлюстова А.В., Сироткин Н.А., Агафонов А.В., Степович М.А., Шипко М.Н. *Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед.*, 2023, № 2, 57.
2. Шипко М.Н., Каминская Т.П., Степович М.А., Вирюс А.А., Тихонов А.И. *Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед.*, 2023, № 2, 17.
3. Шипко М.Н., Степович М.А., Полетаев В.А., Костюк В.Х. *Вестник Ивановского гос. энергетич. ун-та.*, 2011, № 5, 49.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда и Правительства Калужской области № 23-21-10069, <https://rscf.ru/project/23-21-10069/>.

ВОЗДЕЙСТВИЕ УЛЬТРАЗВУКА НА СТРУКТУРУ КРИСТАЛЛИЗУЮЩЕГОСЯ МАТЕРИАЛА В АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ

Фатталова Д.Р.^а, Гордеев Г.А.^б, Ломаев С.Л.^а

^а Удмуртский Федеральный Исследовательский Центр Уральского Отделения Российской Академии Наук,
426067, Ижевск, ул. Татьяны Барамзиной, 34
e-mail: w_c_b_and_a@bk.ru

^б Удмуртский государственный университет, 426034, Ижевск, Университетская, 1

Вследствие больших градиентов температур, металлический материал, выращиваемый порошковыми методами печати, имеет вытянутую, неравноосную форму. Как следствие, свойства металла ухудшаются, появляется анизотропия свойств. При воздействии ультразвука в процессе печати, зеренная структура металла получается более равноосной и мелкой¹. Один из механизмов, объясняющий воздействие ультразвука на формирование структуры: ультразвуковая кавитация. Под действием ультразвуковых волн, пузырьки, находящиеся в бассейне расплава, схлопываются и образуют ударную волну, которая, в свою очередь, разбивает растущий металлический кристалл на мелкие части.

Существует два режима схлопывания пузырьков: резонансный и безрезонансный. Наиболее эффективный режим, где присутствует резонанс, так как внешнее давление, необходимое для схлопывания пузырька, требуется меньше.

Были проведены расчеты для парогозовых пузырьков, с радиусами, лежащими в диапазоне (10^{-4} - 10^{-6}) м в расплавах нержавеющей стали 316L и титановом сплаве ВТ6.

При отхождении от резонансной частоты, акустическое давление, необходимое для схлопывания кавитационных пузырьков, увеличивается.

Литература

1. Todaro C. J. et al. *Grain structure control during metal 3D printing by high-intensity ultrasound*, 2020, Nature communications, **11**, 142
2. Ivanov I. A. et al. *Effect of laser-induced ultrasound treatment on material structure in laser surface treatment for selective laser melting applications*, 2021, Scientific Reports, **11**, 23501.

Работа выполнена при финансовой поддержке государственного задания Министерства Образования и Науки РФ (№ ВВ_2021_121030100003 7).

ПЕРСПЕКТИВЫ ЭФФЕКТИВНОГО ПОЛУЧЕНИЯ НИКЕЛЯ И КОБАЛЬТА ИЗ ЛАТЕРИТНЫХ РУД С НИЗКИМ СОДЕРЖАНИЕМ ЦЕННЫХ КОМПОНЕНТОВ

**Хасанов М.Ш., Садыхов Г.Б., Анисонян К.Г.,
Заблоцкая Ю.В., Олюнина Т.В.**

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии и материаловедения
им. А.А. Байкова Российской академии наук (ИМЕТ РАН), 119334, Москва, Ленинский проспект 49,
e-mail: khasanov.m.sh@mail.ru*

Никель является одним из необходимых для современной промышленности металлов. Основные области его применения – производство нержавеющей стали, электротехники, аккумуляторов для электротранспорта, гальванических покрытий, химических катализаторов и др.

В мире разведано более 400 месторождений никелевых руд, в том числе около 240 сульфидных и более 150 окисленных руд. Доля латеритного никеля составляет примерно 70%, а сульфидного – 30%¹. Крупными производителями никеля из латеритных никелевых руд являются Китай, Индонезия, Филиппины, Канада, Австралия, Новая Каледония, Бразилия. Около 60% никеля производится электроплавкой, 14% - шахтной плавкой, 14% - аммиачно-карбонатной технологией и 12% сернокислотным автоклавным выщелачиванием. Однако количество пригодных для экономически эффективного извлечения никеля месторождений ограничено. Сульфидные руды хорошо изучены и активно перерабатываются, тогда как окисленные руды возможно эффективно перерабатывать только при содержании никеля более 1,3%. Эти руды составляют лишь 30% всех запасов в пересчете на никель. Так же важным компонентом никелевых руд является кобальт, потребность в котором для промышленности непрерывно увеличивается.

В лаборатории №1 ИМЕТ РАН ведутся исследования по разработке эффективного способа переработки латеритных никелевых руд с содержанием никеля ок. 1% с целью его селективного извлечения, а также попутного извлечения кобальта и отделения основной части железа.

Литература

1. Резник, И.Д. Никель / И.Д. Резник, Г.П. Ермаков, Я.М. Шнеерсон Т. 2 М.: ООО «Наука и технологии» 2004. 486с.

Работа выполнена по государственному заданию № 075-00320-24-00.

ГАЛЛИЕВЫЕ ПАСТЫ: ОДНОКОМПОНЕНТНЫЙ ИСХОДНЫЙ МАТЕРИАЛ И СИНТЕЗ ЖИДКОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ IN SITU

Шубин А.Б.

*Институт металлургии Уральского отделения Российской Академии Наук,
620016, Екатеринбург, улица Амундсена 101,
e-mail: fortran@list.ru*

Одна из важнейших областей использования сплавов на основе галлия – диффузионно-твердеющие сплавы и бессвинцовые композиционные припой. Их уникальным свойством является возможность приготовления, формовки и отверждения при комнатной температуре.

Представленный в данном сообщении способ синтеза полужидкой твердеющей пастообразной композиции исключительно из твердых предварительно измельченных компонентов позволил обеспечить наилучшие параметры изготовления материала, исследовать структурные и физико-механические характеристики исходных компонентов, галлиевых паст и затвердевших сплавов.

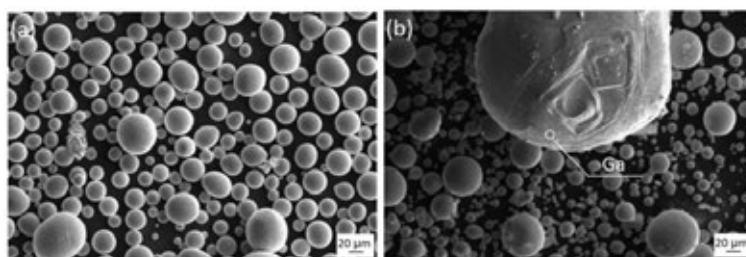


Рисунок 1. (а) – сферические частицы смеси порошков-наполнителей Cu_3Sn и Sn ; (b) – частица твердого дисперсного галлия на фоне порошков-наполнителей в массе исходного материала (SEM, детектор вторичных электронов (SE)).

Полученная исходная смесь (Рисунок (1b)) является устойчивой при комнатной температуре. Она не демонстрирует признаков взаимодействия компонентов до интенсивного вибрационного воздействия в амальгамосмесителе (в специальных капсулах).

Литература

1. Shubin A.B., Gilev I.O. *Trans Indian Inst Met.*, 2024, 77, 1063.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ИМЕТ УрО РАН.



СЕКЦИЯ 4

**РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ,
ЭКОЛОГИЧЕСКАЯ
БЕЗОПАСНОСТЬ И ХИМИКО-
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ
В ЭКОНОМИКЕ ЗАМКНУТОГО
ЦИКЛА**

МЕТОДОЛОГИЯ ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЙ ДИАГНОСТИКИ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ЭНЕРГОРЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТИ И ЭКОЛОГИЧЕСКОЙ БЕЗОПАСНОСТИ ХИМИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ

Буряк А.К.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина
Российской Академии Наук, 119071, Москва, Ленинский проспект 31, к. 4,
e-mail: dir@phychе.ac.ru*

Создание новых химических технологий - фундаментальная задача современной науки. Учитывая сложность, длительность и ресурсоемкость таких разработок особое значение приобретают методы, позволяющие быстро и надежно проводить их оценку. Одним из таких методов может быть хромато-масс-спектрометрия.

Традиционно хромато-масс-спектрометрия (ХМС) рассматривается только как аналитический метод, однако современные достижения позволили расширить область применения и использовать для определения физико-химических характеристик веществ и материалов. Многочисленные варианты ХМС: газовая, сверхкритическая и жидкостная хроматография с масс-спектрометрией, двумерные варианты методов (ГХ/ГХ, МС/МС) в варианте on-line, тонкослойная в варианте off-line, позволяют охватить все задачи, возникающие при оценке технологий.

Особенностью современной ХМС является комплексный подход к получению результата, основанный на совместном использовании масс-спектрометрических, хроматографических и расчетных данных, полученных классическими и новыми методами, в том числе, с помощью нейронных сетей.¹

В докладе на примере технологий, применяемых в ракетно-космической отрасли, показаны преимущества и ограничения ХМС метода при оценке технологий. Рассмотрены технологии производства ракетных и реактивных топлив, каталитические процессы, используемые при применении топлив, технологии нейтрализации поверхностей конструкционных материалов и оптимизация экологических технологий, направленных на снижение негативных последствий ракетно-космической деятельности.²

Литература

1. Шолохова А.Ю., Боровикова С.А., Матюшин Д.Д., Буряк А.К. Идентификация компонентов озонированной пиролизной жидкости с использованием газовой хромато-масс-спектрометрии, ионной жидкости в качестве неподвижной фазы и машинного обучения. // Сорбционные и хроматографические процессы. – 2022. – Т. 22 – N 4.
2. Пат. RU 2765077 С1. Торфо-шунгитный сорбент-катализатор для нейтрализации 1,1-диметилгидразина. Миненкова И.В., Ульянов А.В., Попова С.В., Соболев А.А., Буряк А.К. 25.01.2022. Заявка № 2021104780 от 02.04.2021.

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ, НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЕ РАЗРАБОТКИ И ВНЕДРЕНИЕ РЕСУРСОЭНЕРГОЭФФЕКТИВНОЙ ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНОЙ ПЕРЕРАБОТКИ ОТХОДОВ С ИЗВЛЕЧЕНИЕМ ГАММЫ ЦВЕТНЫХ И РЕДКИХ МЕТАЛЛОВ

Козлов П.А., Паньшин А.М., Якорнов С.А.

*Технический университет Уральской горно-металлургической компании,
624091, Россия, Свердловская область, г. Верхняя Пышма, пр. Успенский, 3
p.kozlov@tu-ugmk.com*

На предприятиях черной и цветной металлургии, химической промышленности накоплены сотни миллионов тонн цинксодержащих отходов 2-4 классов опасности, переработка которых позволяет восполнить сырьевую базу заводов, улучшить экологическую ситуацию и решить главную задачу экономики замкнутого цикла по созданию безотходного производства.

Базовая научно-техническая идея, заложенная в основу технологии вельцевания состоит в дистилляционном разделении элементов поликомпонентных оксидных систем в восстановительных условиях.

Проведен комплекс исследований, разработка внедрение вельц-процесса для извлечения цинка, свинца, олова, индия, кадмия, а также комбинированной технологии по получению продукции в форме компактных металлов, порошков, концентратов, солей и окислов.

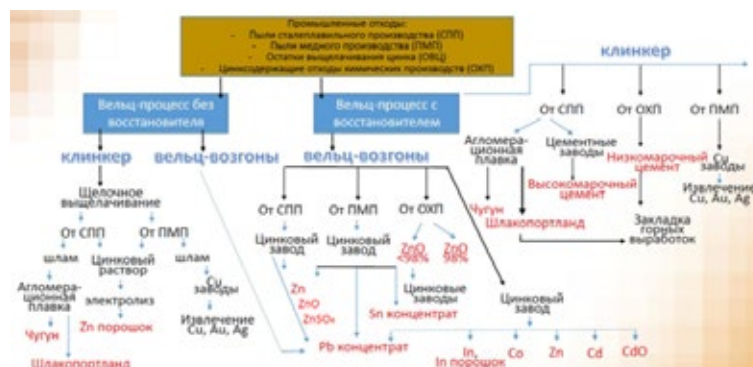


Рисунок 1. Блок схема переработки промышленных отходов

Блок схема создана на основании научно-исследовательских работ, запатентованных технических решений, выполненных в ТУ УГМК и внедренных на Челябинском цинковом заводе. В компании ООО «ЦИНКУМ» ведутся работы по пуску комплекса по переработке более 100т.тн в год пыли сталеплавильного производства.

ЗАДАЧИ НАУЧНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНОЙ КОМПЛЕКСНОЙ ПЕРЕРАБОТКИ МИНЕРАЛЬНОГО И ТЕХНОГЕННОГО СЫРЬЯ В ЦЕЛЯХ РАЗВИТИЯ ЭКОНОМИКИ ЗАМКНУТОГО ЦИКЛА

Леонтьев Л.И.,^{а,б,в} Маршук Л.А.,^б Пономарев В.И.^б

^а*Президиум Российской академии наук,*

119991, Москва, Ленинский проспект, 14, leo@presidium.ras.ru

^б*Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук,*

620016, Екатеринбург, ул. Амундсена, 101,

^в*ЦНИИчермет им. И.П. Бардина, 105005, Москва, ул. Радио, 23/9*

Обсуждается объективная необходимость перехода от развития хозяйственной деятельности по линейной модели к построению экономики замкнутого цикла. Проводится анализ причин недостаточной обеспеченности российской металлургической промышленности отечественными материальными ресурсами. Дается краткий обзор неиспользуемых в настоящее время месторождений минерального сырья и огромных объемов не переработанных техногенных отходов, содержащих значительное количество дефицитных элементов. Потребность российской экономики по ряду стратегических металлов полностью обеспечивается за счет импорта, что в условиях нестабильной международной обстановки несет угрозу экономическому суверенитету страны. Обсуждается возможность расширенного использования комплексной сырьевой базы Северо-Западного региона России. В качестве одного из аспектов решения проблемы дефицита сырья, а также устранения экологически опасного воздействия на окружающую среду и здоровье человека, ведется поиск технологических решений, направленных на повторное использование текущих отходов и ранее накопленных техногенных образований. Особо важное значение придается развитию технологий извлечения редких и редкоземельных элементов, используемых в высокотехнологичных, в том числе оборонных, отраслях промышленности. Сбору, обсуждению и систематизации информации о проводимых разработках посвящена деятельность конгрессов «ТЕХНОГЕН», проходящих с 2012 г. в Екатеринбурге с периодичностью раз в два года. По результатам представленных исследований определяется круг разработчиков конкретных проблем, ведется продолжающийся реестр ресурсосберегающих технологических решений, часть из которых сегодня уже внедрена в производство и вносит вклад в создание экономики замкнутого цикла. Рассматривается ряд примеров перспективных технологий переработки отходов в черной и цветной металлургии, утилизации твердых бытовых и органических антропогенных продуктов. Отмечается необходимость ускорения темпов внедрения инноваций в практику.

НАУЧНЫЕ ОСНОВЫ ИНЖИНИРИНГА РЕСУРСОЭНЕРГОЭФФЕКТИВНЫХ МАЛООТХОДНЫХ ЦИФРОВИЗИРОВАННЫХ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Мешалкин В.П.

¹РХТУ имени Д.И. Менделеева, Россия, 125047, г. Москва, Миусская площадь, д. 9,

²Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия,

³СПб Государственный технологический институт (технический университет), СПб, Россия,

⁴Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия,

e-mail: vpmeshalkin@gmail.com

Выполнен системный анализ основных видов и направлений инжиниринга, методов интенсификации и обеспечения ресурсоэнергоэффективности химико-технологических систем (ХТС), представляющих собой взаимосвязанную совокупность процессов и аппаратов некоторого химического производства.¹

Изложены методы и способы обеспечения экологической безопасности и ресурсоэнергоэффективности производства соединений титана; химико-энерготехнологических систем (ХЭС) переработки отходов добываемого горнорудного сырья; комбинированных технологий обработки промышленных стоков и ресурсоэнергоэффективных технологий очистки почв, загрязнённых нефтепродуктами.

Обоснованы направления инжиниринга цифровизированных ресурсоэнергоэффективных ХТС; применения методов оптимизации показателей надежности, цифровизированного управления рисками и безопасностью при инжиниринге энергоресурсоэффективных ХТС.

Разработан оригинальный нейросетевой алгоритм глубокого самообучения цифрового двойника, используемого в системе оптимального управления ХЭС производства фосфора.

Выполнен системный анализ концепций наилучших доступных технологий (НДТ) с позиций сближения с принципами «зеленой» химии. Сформулирована сущность эколого-технологической концепции НДТ.

Литература

1. Meshalkin V.P., Belyakov A.V., Butusov O.B., Burukhina T.F., Khodchenko S.M., Garabadzhiu A.V., Dovi V.G., Bobkov V.I. State of the art and research development prospects of energy and resource-efficient environmentally safe chemical process systems engineering // Mendeleev Communications. 2021. T.31. №5. pp. 593–604.

СИСТЕМАТИЗАЦИЯ ЭКОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛИМЕР-НЕОРГАНИЧЕСКИХ КОМПОЗИТОВ

Васильев А.В.

*Самарский государственный технический университет,
443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244,
e-mail: avassil62@mail.ru*

В настоящее время в связи с резким возрастанием применения полимерных композитных материалов возникает необходимость диагностики их характеристик, а также инжиниринга новых экологически безопасных композитов с улучшенными эксплуатационными характеристиками.

Автором проведена систематизация экологических характеристик полимер-неорганических композитов, включающая химические компоненты; токсикологические характеристики; радиационные свойства; шумо- и виброметрию; возможности утилизации и др.

Предложена методика балльно-рейтингового ранжирования экологических характеристик полимер-неорганических композитов, основанная на оценке степени потенциальной экологической опасности, воздействию на человека и др. Суммарный рейтинговый балл определяется суммированием составляющих балльной оценки. Его предлагается оценивать согласно следующей шкале: 12-15 баллов – максимально высокая экологическая опасность; 8-11 баллов – высокая экологическая опасность; 4-7 баллов – средняя экологическая опасность; 1-3 баллов – низкая экологическая опасность. Таким образом, суммарный рейтинговый балл имеет четыре градации, отражающие степень негативного экологического воздействия полимер-неорганических композитов на человека и окружающую среду.

С использованием предложенных подходов к систематизации и методики балльно-рейтингового ранжирования проведена оценка потенциальных компонентов полимер-неорганических композитов, оказывающих химическое загрязнение воздушной среды.

Результаты исследования позволяют определить эксплуатационные возможности существующих и новых композитов с точки зрения экологической безопасности, разработать новые методы и технические решения по снижению негативного воздействия полимер-неорганических композитов на человека и окружающую среду и др.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания вузам, тема FSSE-2023-0003.

ЦИФРОВИЗИРОВАННЫЙ ПОДХОД К ВЫБОРУ ЭКОЛОГИЧЕСКИ-РАЦИОНАЛЬНЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ РАСТВОРОВ ДЛЯ НАНЕСЕНИЯ ЗАЩИТНО-ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ПОКРЫТИЙ

Винокуров Е.Г., Бурухина Т.Ф.

*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,
125047 г. Москва, Миусская пл., д.9,
e-mail: vin-62@mail.ru vinokurov.e.g@muctr.ru*

Ресурсосбережение представляет собой основу концепции создания экологически безопасных, бережливых технологических процессов и является важнейшим направлением развития промышленности и, в том числе, гальванотехники.

Большую актуальность для специалистов, работающих в области гальванотехники, представляет обобщенная информация о наилучших доступных технологиях, составах используемых растворов, свойствах получаемых покрытий, характеристиках процесса, а также ресурсоемкость технологических составов.

Теоретически обоснована и сформирована система показателей ресурсоемкости, а также определены их граничные значения для классификации и цифровизированного выбора составов растворов.

Рассчитаны критерии составов растворов для электроосаждения металлических покрытий Zn, Ni, Cu, Sn, Pb, Fe, Cr и другими металлами.

Согласно предложенным критериям, при классификации составов технологических растворов для электроосаждения металлических покрытий можно выделить три группы составов: ресурсоемкие составы – малоустойчивые (I группа), обычные составы (II группа) и ресурсосберегающие составы – устойчивые (III группа). Составы II и III групп можно отнести к наилучшим доступным технологиям.

Разработана инфологическая модель и создана информационная система в основу которой легли базы данных исходных составов растворов, классификация их по ресурсоемкости, свойствам покрытий, характеристикам растворов и процессов электроосаждения. Для наполнения системы использованы данные более, чем для 100 растворов.

Информация, представленная в разработанной системе, позволяет по пользовательскому запросу определить, к какому типу ресурсоемкости относится искомый состав и, соответственно, спрогнозировать ресурсопотребление и экологическую опасность гальванического производства. При этом система позволяет получить информацию по свойствам получаемого покрытия и важную для технологов – по характеристикам процесса.

РОЛЬ МЕМБРАННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ РАЗДЕЛЕНИЯ СРЕД НЕФТЕГАЗОВОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ В ЭКОНОМИКЕ ЗАМКНУТОГО ЦИКЛА РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Воротынцев И.В.

*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
125047, Москва, Миусская площадь, д. 9, стр. 1
e-mail: vorotyntsev.i.v@muctr.ru*

Современные запросы промышленности и общества требуют интенсивного развития технологии разделения и очистки веществ, в том числе и газовых сред, особенно в контексте современных трендов промышленности, направленных на декарбонизацию и формирование экономики замкнутого цикла. Поскольку окружающая среда находится под постоянным воздействием различных антропогенных факторов, то задача интенсификации производств в части их энергоёмкости и снижения выбросов является одной из ключевых на сегодняшний день.

В рамках настоящей работы были предложены мембранные и мембранно-газогидратные технологии улавливания диоксида углерода из дымовых газов ТЭЦ. Для оценки показателей разделительного процесса, реализуемого в таких аппаратах, было выполнено моделирование технологических схем с применением пользовательских блоков Aspen Custom Modeler в технологической среде Aspen Plus. Результаты математического моделирования были верифицированы с использованием лабораторных экспериментальных стендов. Такой комплексный подход был направлен на определение ключевых показателей разделительных процессов, реализуемых в различных вариантах технологических схем, а также на оценку себестоимости продукта путем выполнения технико-экономического анализа рассчитанной технологической схемы промышленного масштаба.

В результате такого исследования была продемонстрирована перспективность применения мембранной и мембранно-газогидратной технологических схем в задачах улавливания диоксида углерода из дымовых газов ТЭЦ. Экспериментально была установлена возможность достижения заявленных показателей процесса, а именно, содержание диоксида углерода в выходном потоке ≥ 95 мол.%, в потоке очищенного газа < 2 мол.% при степени его извлечения ≥ 90 %. Достигнутые результаты в полной мере соответствуют современным требованиям к проведению такого процесса, а проведенный технико-экономический анализ демонстрирует экономическую эффективность применения таких технических решений на объектах энергетической инфраструктуры Российской Федерации.

НАУЧНЫЕ ОСНОВЫ ИНТЕНСИФИКАЦИИ ПРОЦЕССОВ ПЛАСТИЧЕСКОГО ФОРМООБРАЗОВАНИЯ ПУТЕМ ФОРМИРОВАНИЯ ПРИ ПРОКАТКЕ ОПТИМАЛЬНОЙ КРИСТАЛЛОГРАФИИ СТРУКТУРЫ ЗАГОТОВОК

Гречников Ф.В.,^{а,б} Ерисов Я.А.^а

*^аСамарский национальный исследовательский университет
им. ак. С.П. Королева, 443086, Самара, Московское шоссе, 34,
e-mail: erisov@ssau.ru*

*^бСамарский федеральный исследовательский центр Российской академии наук,
443001, Самара, Студенческий переулок, 3А*

При прокатке необходимо формировать в листовых материалах такую кристаллографию структуры, при которой обеспечивается повышение коэффициента использования материала, деформационных возможностей заготовок и эксплуатационных характеристик изделий.

Для решения задач расчета и управления формированием в конструкционных материалах оптимальной кристаллографической ориентации структуры разработан вариант теории пластичности, в основные уравнения которого введены такие параметры строения материалов, как упругие константы кристаллической решетки и ориентационные факторы текстуры. Эти уравнения позволяют решать прямую задачу, то есть определять напряженно-деформированное состояние, усилие и предельную степень деформации текстурированных заготовок в конкретных процессах обработки давлением, а также обратную задачу – позволяют по заданным параметрам процессов обработки давлением определить расчетным путем необходимую кристаллографическую ориентацию структуры материала и соответствующие ей значения показателей анизотропии, отвечающие требованиям интенсификации процессов формообразования, а в конечном итоге – создать расчетную модель состава компонент текстуры идеального конструкционного материала и разработать технологические рекомендации по ее реализации при прокатке и термической обработке листовых заготовок.

В целом, в результате проведенных исследований сформулировано направление интенсификации процессов деформирования и повышения эксплуатационных характеристик изделий. Его суть заключается в том, что с помощью текстурного дизайна можно изменять преимущественное развитие деформаций при обработке давлением в пользу тех направлений, которые приведут к повышению предельного формоизменения заготовок, точности геометрических параметров и усталостных характеристик изделий.

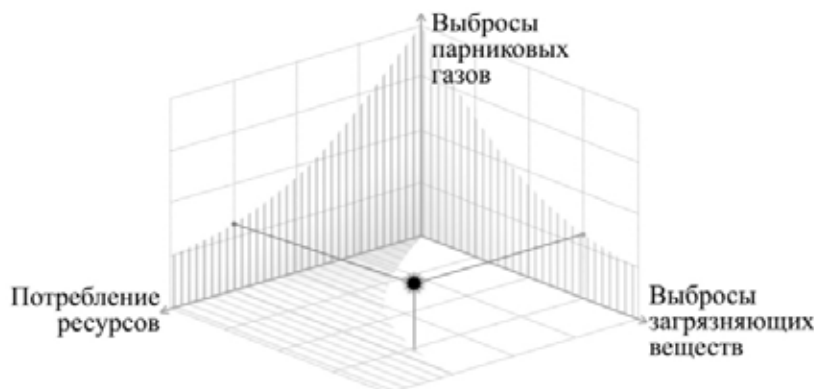
РОЛЬ НАИЛУЧШИХ ДОСТУПНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В ПОВЫШЕНИИ РЕСУРСНОЙ И ЭКОЛОГИЧЕСКОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРОИЗВОДСТВА

Гусева Т.В., Волосатова А.А.

*Научно-исследовательский институт «Центр экологической промышленной политики»,
1150541, Москва, Стремянный переулок, 38,
e-mail: Tatiana.V.Guseva@gmail.com*

Наилучшие доступные технологии (НДТ) представляют собой совокупность технологических, технических и организационных решений, практическое применение которых позволяет промышленным предприятиям добиваться высокой ресурсной и экологической эффективности (в том числе снижения выбросов парниковых газов).¹

В России требование внедрения НДТ распространяется на более чем 40 отраслей промышленности; для всех отраслей разработаны информационно-технические справочники (ИТС) НДТ, в которых в результате проведения отраслевого бенчмаркинга устанавливаются три группы показателей – показатели эмиссии загрязняющих веществ, показатели потребления ресурсов, а также индикативные показатели выбросов парниковых газов. ИТС НДТ применяются в эколого-технологическом регулировании, а также для стимулирования промышленных предприятий к повышению ресурсной эффективности и выполнению зеленых проектов.²



Инвестиции в проекты эколого-технологической модернизации промышленности на базе НДТ, запланированные (и уже реализуемые) на период с 2019 по 2028 г., превышают уже 3 триллиона рублей.

Литература

1. Бобылев С.Н., Кудрявцева О.В., Скобелев Д.О. и др. НДТ: новая российская техно-логическая революция. – М.: ЦЭПП, 2021. – 246 с.
2. Никитин Г.С., Скобелев Д.О. *Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. Серия: Социальные науки*, 2022, **4(68)**, 32-41.

АЛГОРИТМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА УПРАВЛЕНИЯ РАЗРАБОТКОЙ И ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ В ПРОМЫШЛЕННОМ ПРОИЗВОДСТВЕ РЕСУРСОЭНЕРГОСБЕРЕГАЮЩИХ ТЕХНОЛОГИЙ

Жаров В.С.

*Институт экономических проблем им. Г.П.Лузина ФИЦ
«Кольский научный центр» Российской Академии Наук,
184209, Апатиты, ул. Ферсмана 24а, e-mail: zharov_vs@mail.ru*

Одним из важнейших направлений экономики замкнутого цикла является снижение материалоемкости производства (МЕ), в том числе его энергоемкости, за счет использования ресурсоэнергосберегающих технологий, однако этим процессом при разработке и использовании технологий необходимо управлять. При этом, с одной стороны, для оптимизации снижения уровня МЕ необходима алгоритмизация самого процесса управления, а с другой - разрабатываемые технологии должны обеспечивать повышение уровня устойчивости промышленного производства. Соответственно требуется максимально возможное, но экономически обоснованное увеличение материалоемкости, то есть снижение уровня МЕ.

Критерии и показатели-индикаторы выделения уровней устойчивости для энергоемких промышленных предприятий определены в работе¹, но при соответствующей трансформации их можно использовать и для разработки отдельных технологий, в том числе для переработки отходов производства.²

Обоснована процедура выбора наилучшего варианта технологии, обеспечивающего максимальный уровень устойчивости, при ее разработке на стадиях научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ, в том числе при изменении состава и цен используемых материально-энергетических ресурсов и оборудования, а также при выпуске из отходов нескольких видов продукции.

Предложен алгоритм достижения экономического предела совершенствования существующей технологии производства и, в случае необходимости, ее замены на новую.

Литература

1. Meshalkin V. P., Zharov V. S., Leontiev L. I., Nzioka A. M., Belozersky A. Y. Sustainable Environmental Impact Assessment Using Indicators for Sustainable Energy-Intensive Industrial Production. *Energies*, 2023, **16**(7), 3172.
2. Жаров В.С., Мешалкин В.П., Леонтьев Л.И., Nzioka А.М. Проблемы оценки влияния энергоресурсосберегающих технологий переработки промышленных отходов на устойчивое развитие территории. МНПК «Экология и общество: баланс интересов», 2023, Вологда, 49-55.

ИННОВАЦИОННЫЕ ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫЕ ТИТАНОВЫЕ СПЛАВЫ

Колмаков А.Г., Севостьянов М.А., Конушкин С.А., Каплан М.А.

*ИМЕТ РАН, 119334, Москва, Ленинский проспект, 49,
imetranlab10@mail.ru*

В настоящее время очень актуальна разработка материалов, безопасных для человека и окружающей среды на всех этапах их службы.

Титановые сплавы являются одним из основных конструкционных материалов, применяемых в высокотехнологичных отраслях промышленности. В частности, ВТ6, Ti-6Al-4V, ВТ22, ВТ23, ПТ-3В, ПТ-3М, ПТ-1М, ПТ-7М, ТЛ-3, ТЛ-5, Т-А4D3V и 4Al-3Mo-1V имеют в зависимости от состава и обработки следующие механические свойства: $E = 104...115$ ГПа, $\sigma_{0,2} = 800...1100$ МПа, $\sigma_B = 850...1200$ МПа, $\delta = 4...16$ %. Такие сплавы как ВТ6 и нитинол Ti-Ni используются для производства имплантатов различного назначения. Большинство сплавов в качестве легирующих элементов содержат V, Cr и Al, а сплав с памятью формы Ti-Ni содержит Ni. Все эти элементы в ходе производства, эксплуатации и переработки отходов выходят в жидкие среды или попадают в окружающую среду в виде частиц и пыли, откуда уже поступают в живые организмы, в т.ч. в организм человека, вызывая очень неприятные заболевания (включая онкологию, генетические повреждения и сильные аллергические реакции).

В области медицинских изделий, где требования к безопасности и биосовместимости изначально очень высокие, относительно недавно началась разработка новых титановых сплавов, не содержащих Cr, Ni, V и Al. В новых сплавах вместо опасных легирующих элементов предлагается использовать не токсичные для человека и не выходящие в окружающую среду Nb, Ta, Mo, Zr, а иногда Hf и Fe. В связи с этим в ИМЕТ РАН разработан ряд сплавов систем Ti-Nb-Ta, Ti-Nb-Ta-Zr и Ti-Nb-Mo, которые имеют вполне сравнимый с традиционными сплавами комплекс механических свойств: $\sigma_{0,2} = 220...810$ МПа, $\sigma_B = 620...1100$ МПа, $\delta = 5...14$ %. В частности, Ta и Zr улучшают качество пассивационных оксидных слоев и повышают коррозионную стойкость по сравнению с существующими титановыми сплавами и чистым Ti. Данные сплавы в определенной степени являются также природоподобными материалами, так как их модуль упругости $E = 47...59$ ГПа приближается к модулям упругости природных материалов, в том числе человеческих костей, а их высокая экологическая безопасность позволяет использовать изделия из них даже внутри человеческого организма.

Исследования выполнены при поддержке гранта РФФ № 24-13-00186.

ТЕОРЕТИКО-ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОБОСНОВАНИЕ ЭНЕРГОРЕСУРСОЭФФЕКТИВНОЙ ТЕХНОЛОГИИ ПОВЫШЕНИЯ СТЕПЕНИ ИЗВЛЕЧЕНИЯ НЕФТИ ИЗ ОБВОДНЕННЫХ СКВАЖИН НА ОСНОВЕ ПРИМЕНЕНИЯ ОРГАНО-ГИБРИДНЫХ СОСТАВОВ.

Якубов Р.Н., Купавых В.А., Ленченкова Л.Е.

*ФГБОУ ВО Уфимский государственный нефтяной технический университет,
ул. Космонавтов, 1, Уфа, 450062, РФ,
e-mail: lenchenkova@mail.ru*

В последние годы для регулирования коэффициента охвата пласта заводнением для неоднородных коллекторов широкое распространение получили различные гелеобразующие составы с регулируемыми свойствами. Основной целью работы было обоснование и разработка термически устойчивых органо-гибридных составов (ОГС) на основе сшитых полимерных систем, обладающих вязкоупругими и вязкопластичными свойствами.¹

В работе обоснована трёхкомпонентная сшитая полимерная система (органогибридный состав) на основе силиката натрия, ацетата хрома и ПАА. Состав экспериментально исследован для последующего применения в качестве базового при разработке нового органо-гибридного комплекса с добавкой органической дисперсной фазы. Для качественного анализа реологических и структурных свойств ОГС использован релаксметр, на котором определяли время жизни полимерной нити. Наблюдение за макротопологией формирования жидких нитей (образующихся только в сшитых в системах) позволило обосновать методику сшивки полимерных составов по времени жизни жидкой нити. Результаты осцилляционных исследований ОГС позволили количественно определить вязкоупругие и вязкопластичные свойства с применением механических моделей Бургерса.

Экспериментальные исследования позволили обосновать органо-гибридную систему с заданными свойствами и регулируемыми характеристиками, в поровой среде способную формировать прочный барьер на пути фильтрации воды, предотвращая возможные процессы преждевременного обводнения скважин.

Литература

1. Meshalkin, V.; Akhmetov, A.; Lenchenkova, L.; Nzioka, A.; Politov, A.; Strizhnev, V.; Telin, A.; Fakhreeva, A. *Energies* 2022, **15**, 9216.

Исследование выполнено в рамках реализации стратегического проекта «Новые технологические решения в ТЭК» (Приоритет 2030). Научно-исследовательский проект «Разработка технологии кислотного воздействия с внутрислововым отклонением с целью выравнивания профиля притока в карбонатных коллекторах».

РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ, ЭКОЛОГИЧЕСКАЯ БЕЗОПАСНОСТЬ, ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ И ЭКОНОМИКА ЗАМКНУТОГО ЦИКЛА ПРИ ПЕРЕРАБОТКЕ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ОТХОДОВ В КИСЛЫХ ИНДУКЦИОННЫХ ПЕЧАХ В СИБИРСКОМ РЕГИОНЕ

**Лубяной Д.А.^а, Маркидонов А.В.^б, Лубяной Д.Д.^а,
Пудов Е.Ю.^а, Кузин Е.Г.^а, Лубяная К.Д.^а**

^а*Филиал Кузбасского Государственного Технического университета им. Т. Ф. Горбачева в г. Прокопьевске, 653039, Кемеровская область, г. Прокопьевск, ул. Ноградская, 19а, lubjanou@yandex.ru.*

^б*Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета, 654041, Кемеровская область, г. Новокузнецк, ул. Циолковского, 23*

В настоящее время актуальна переработка металлургических отходов (отмагниченных королек чугуна и стали, шлаковых отвалов, переработка лома поддонов и изложниц, и т.д.). Для данных типов отходов характерно повышенное содержание серы, фосфора, нестабильная структура изделий из чугуна, полученного из разнородной шихты, повышенное газосодержание металла. В Сибирском регионе на ряде предприятий отработана технология выплавки чугуна, включающая переработку как чугуна, так и стального лома и отходов. Разработанная технология отличалась получением изделий со стабильной, прогнозируемой микроструктурой и заданными механическими свойствами чугуна, и требуемыми эксплуатационными показателями изделий из данного чугуна. Высокие показатели изделий обусловлены главным образом применением в этой технологии режимов термовременной обработки и внепечной расплава методом резонансно-пульсирующего рафинирования. Методики определения оптимальных температурных режимов обработки расплава базировались на подходах развитых в школе Самарина А.М., а также осуществлялись совместно со школами Баума Б.А., Кудрина В.А. и Еланского Г.Н. Особенность данной технологии заключается в том, что при ее реализации минимизируются процессы окисления легирующих элементов, тем самым во многом решена задача ресурсосбережения, существенно сокращен расход ферросплавов и, как следствие этого, существенно повышена экологическая безопасность данной технологии. Фактически реализована экономика замкнутого цикла при производстве сменного термостойкого металлургического оборудования. Данная технология реализована на крупных металлургических и опробована на ряде машиностроительных предприятий в Сибирском регионе. Построена математическая модель для исследования влияния фосфора на свойства железа.

СВЕРХКРИТИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ИННОВАЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Меньшутин Н.В.

*РХТУ им. Д.И. Менделеева, 125480, г. Москва, ул. Героев Панфиловцев, дом 20,
chemcom@muctr.ru*

Сверхкритические технологии (СКТ) являются «зелеными», ресурсо- и энергосберегающими технологиями, позволяющими получать новые по структуре и свойствам материалы. В мире СКТ используют для получения аэрогелей, для производства печатных плат, для выделения ценных компонентов из растительного сырья, для проведения уникальных химических реакций, получения нанопокровов и прочее¹. В качестве сверхкритического флюида чаще всего используется диоксид углерода, характеризующийся невоспламеняемостью, нетоксичностью, доступностью и низкой стоимостью. Сверхкритическое состояние диоксида углерода соответствует давлению 73,8 бар и температуре 31,1 °С. В диоксид углерода может быть добавлен полярный соразтворитель, если это необходимо.

Выделяют следующие процессы, протекающие в среде сверхкритического флюида: химические реакции; процессы адсорбции или импрегнации, позволяющие получать композиционные или функциональные материалы; вспенивание полимеров; процессы сушки с целью получения пористых материалов; процессы экстракции; процессы диспергирования методом сверхкритического флюидного антирастворителя, позволяющие получать вещества в аморфном наноразмерном состоянии, а также наносить тонкие пленки.

Используя золь-гель технологию и сверхкритическую сушку, можно производить аэрогели. Производство аэрогелей является крайне важной задачей для экономики Российской Федерации. Аэрогели – это материалы с высокой пористостью, низкой теплопроводностью, негорючие, которые применяются для теплоизоляции труб, контейнеров с сжиженным газом, автомобиле- и ракетостроении, в качестве строительного материала в условиях Арктики и Северных регионов. Добавление в аэрогели нанотрубок приводит к возникновению электропроводящих свойств, которые можно применять в качестве датчиков, сорбентов, фильтров, искусственных управляемых протезов. Аэрогели на основе полисахаридов, белков нашли применение в фармацевтике как средства доставки лекарственных препаратов, и в медицине, как медицинские изделия и имплантаты.

Литература

1. Гумеров Ф.М., Лунин В.В., Хайрутдинов В.Ф. и др. Метод сверхкритического флюидного антирастворителя. – Казань: Изд-во Академии наук РТ. 2018. – 292 с.

ИНЖИНИРИНГ ОТЕЧЕСТВЕННОГО ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ ЭКОЛОГИЧЕСКОЙ БЕЗОПАСНОСТЬЮ ХИМИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ

Мошев Е.Р.^а, Мешалкин В.П.^б, Ромашкин М.А.^а

^а*Пермский национальный исследовательский политехнический университет,
614990, Пермь, Комсомольский проспект, 29,
e-mail: erm@pstu.ru*

^б*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
125047, Москва, Миусская площадь, д. 9, стр. 1*

В условиях действующих химических производств техническое состояние эксплуатируемого оборудования является важнейшим фактором, влияющим на промышленную и экологическую безопасность предприятий и прилегающих к нему территорий. На практике поддержание оборудования в надёжном и работоспособном состоянии обеспечивается системой технического обслуживания (ТО) и ремонта¹, которая предполагает выполнение большого количества инженерно-технических мероприятий, позволяющих заранее выявлять и предупредить варианты аварийного развития событий.

Большое количество оборудования, находящегося на балансе крупных предприятий, делает процесс ТО очень затратным как по стоимости, так и по времени. Это обусловлено наличием большого количества рутинных процедур, связанных с выполнением инженерно-технических расчётов, формированием схем и отчётных документов. В результате снижается возможность своевременного и точного выявления критических дефектов, а следовательно, возникают условия опасной эксплуатации предприятий.

Исходя из сказанного при участии авторов было разработано специальное программное обеспечение (ПО) «ЭЛПАС Предприятие»². Использование указанного ПО позволяет не только в разы уменьшить трудозатраты на ТО оборудования, но и существенно повысить его качество. Что существенно снижает риск возникновения на производстве аварийных ситуаций и, как следствие, повышает промышленную и экологическую безопасность химико-технологических предприятий в целом.

Литература

1. Мешалкин В.П., Мошев Е.Р., Белов В.Д. и др. Логико-информационные модели процессов технического обслуживания котельных установок химико-технологических систем // Теорет. Основы хим. Технологии. 2022, том 56, № 1, с. 111.
2. Мошев Е.Р., Мешалкин В.П. Автоматизированная система логистического обеспечения технического обслуживания и ремонта оборудования химических производств // Теорет. Основы хим. технологии. 2014. Т. 48. № 6. С. 709.

ОТРАБОТКА БИОТЕХНОЛОГИИ АНАММОКС ДЛЯ ОЧИСТКИ СТОЧНЫХ ВОД ОТ АЗОТА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЛАБОРАТОРНЫХ БИОРЕАКТОРОВ

**Пименов Н.В.^а, Николаев Ю.А.^а, Дорофеев А.Г.^а,
Каллистова А.Ю.^а, Марданов А.В.^б**

^аФИЦ Биотехнологии РАН, Институт микробиологии им. С.Н. Виноградского,
119071, Москва, пр-т 60-летия Октября, д. 7, корп. 2
primenov@mail.ru

^бФИЦ Биотехнологии РАН, Институт биоинженерии им. К.Г. Скрябина,
19071, Москва, пр-т 60-летия Октября д. 7, корп. 1

Одна из самых молодых и наиболее эффективных технологий биологической очистки сточных вод от азота основана на процессе анаммокс, заключающемся в микробиологическом окислении аммония нитритом с образованием молекулярного азота. По сравнению с традиционными технологиями, технология Анаммокс характеризуется меньшими капитальными и эксплуатационными расходами, более высокими скоростями удаления азота и снижением выбросов CO_2 и N_2O .

В ФИЦ Биотехнологии РАН были разработаны биореакторы для исследования биотехнологии Анаммокс, включающей протекание в одном биореакторе двух сопряжённых процессов, упрощенная схема которых: окисление аммония до нитритов $\text{NH}_4^+ + \text{O}_2 \rightarrow \text{NO}_2^-$ и собственно процесс анаммокс $\text{NH}_4^+ + \text{NO}_2^- \rightarrow \text{N}_2$. Исследования проведены с использованием комплекса лабораторных биореакторов (рис.)



Рисунок. Лабораторные автоматизированные биореакторы, работающие по технологии Анаммокс

Показана устойчивость процесса к фторидам и сульфидам, а также стрессозащитная роль фолата и формиата. Исследовано влияние на эффективность процесса анаммокс рН и концентрации кислорода. Определены технологически оптимальные загрузочные материалы, используемые в биореакторах для прикрепления биомассы и повышения производительности процесса.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 21-64-00019) и Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

ЭВОЛЮЦИЯ ТЕХНОЛОГИЙ: АСПЕКТЫ ПОВЫШЕНИЯ РЕСУРСНОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

Скобелев Д.О.

*Научно-исследовательский институт «Центр экологической промышленной политики»,
1150541, Москва, Стремянный переулок, 38,
e-mail: DSkobelev@eipc.center*

Реализация Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации предполагает создание Справочника (классификатора) технологий и его последующую интеграцию в информационные системы Минпромторга и Минобрнауки. По замыслу авторов Справочник должен стать действенным инструментом в определении приоритетных направлений технологической политики и оценивании результатов ее реализации.

В предложенном Справочнике сделана попытка построения классификации путем создания перечня известных на сегодня технологических решений: применен экстенциональный подход на основе только внешних признаков объекта классификации, при этом неоднозначно определенное.

Формируемая дескриптивная классификация уже на начальном этапе разработки демонстрирует искусственное объединение в общие таксоны (раздел, класс и пр.) объектов, сильно различающихся по своей природе, что ведет к противоречиям при дальнейшем расширении объема Справочника.

Такая классификация – перечень – не позволяет рассматривать сущности объектов и расширять классификационное поле, то есть, не сможет иметь предсказательной силы. Планируемая интеграция Справочника приведет к миграции закладываемых в его основание противоречий в другие информационные системы и созданию проблем в определении приоритетов и направлений научно-технологического развития страны. Можно привести десятки примеров, в частности, касающихся химических и нефтехимических технологий. Предложения по корректировке подходов таковы.

Необходимо принять во внимание, что технология – это, прежде всего, идея, которая не может жить и развиваться без ее носителей, важнейшим элементом любой технологии служит человеческий фактор, знания, умения, навыки и культурные особенности людей.

Иерархическую структуру можно сохранить, но необходимо увеличить число измерений. Минимальная размерность пространства должна иметь ось назначения (результата) технологии (зачем), ось технического решения (что) и ось природного эффекта, на основе которого возможно получить это решение (как).

Для определения приоритетов и ключевых направлений научно-технологического развития страны необходима экспертиза Российской академии наук.

МЕТОДОЛОГИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ РАЗРАБОТКИ РЕГИОНАЛЬНЫХ ПРОГРАММ ПО ЭКОНОМИКЕ ЗАМКНУТОГО ЦИКЛА В КОНТЕКСТЕ УСТОЙЧИВОГО РАЗВИТИЯ

Старцева О.П.

*Институт экономики УрО РАН,
620014, Екатеринбург, Московская, 29,
e-mail: sop65@mail.ru*

В 2021 г. дан старт стратегической инициативе «Экономика замкнутого цикла» (ЭЗЦ), а в 2022г. утверждена федеральная программа с одноименным названием. В 2023г. Минприроды разослало в регионы рабочую концепцию нового федерального закона по ЭЗЦ. Регионам предложено, не дожидаясь закона, начать разработки региональных программ по ЭЗЦ. Процесс осложняет то, что экспертное сообщество пока не договорилось даже об основных понятиях и принципах ЭЗЦ в целом, и подходу к составлению региональных программ по ЭЗЦ, в частности. Исследователем предлагается версия основных терминов, принципы, механизмы и инструменты интеграции и перехода к ЭЗЦ в России, а также что нужно сделать, чтобы это заработало в регионах, с учетом социо-эколого-экономических рисков, корректировки стратегии развития территорий и верификации этого развития.

Литература

1. Бобылев, Сергей Николаевич. Экономика устойчивого развития: учебник / С.Н. Бобылев. — Москва: КНОРУС, 2021. — 672 с.
2. Вклад науки и производства в реализацию федерального проекта «Экономика замкнутого цикла» / Л. И. Леонтьев, Л. А. Маршук, В. И. Пономарев // Труды VI Конгресса с международным участием «ТЕХНОГЕН-2023», Екатеринбург, 11–14 июля 2023 года. – Екатеринбург: ООО Универсальная типография «Альфа Принт», 2023. – С. 16-26.
3. Вержанский, А. П. Особенности перехода к экономике замкнутых сырьевых циклов / А. П. Вержанский // Энергетическая политика. – 2020. – № 1(143). – С. 80–87.
4. Власова, М. А. Циркулярная экономика как механизм реализации концепции устойчивого развития: проблемы и перспективы развития / М. А. Власова, Е. Е. Баженова // Друкеровский вестник. – 2021. – № 1(39). – С. 19-30.
5. Глобальные тренды и решения по переходу к экономике замкнутого цикла: версия 1.0 // Лаборатория устойчивых решений Керт – 77с.
6. Дорохина, Елена Юрьевна. Экономика замкнутых циклов: тенденции и перспективы: монография / Е.Ю. Дорохина, Д.Е. Кучер, С.Г. Харченко; под ред. Е.Ю. Дорохиной. – Москва: МАКС Пресс, 2023. – 128 с.
7. Курносов, В. В. Элементы циркулярной экономики в процессе обеспечения устойчивого развития регионов / В. В. Курносов, Д. А. Степаненко // Вестник Новгородского филиала РАНХиГС. – 2020. – Т. 10, № 1(12). – С. 43-52.
8. Свалов Е.А. Создание экономики замкнутого цикла в Свердловской области // Управление техносферой: электрон. журнал, 2022. Т.5. Вып.2.
9. Экономика замкнутого цикла. Обзор международных подходов. 2021. Минэкономразвития России, Департамент многостороннего экономического сотрудничества и специальных проектов, проектно-аналитический отдел – 34с.

УПРАВЛЕНИЕ ВТОРИЧНЫМИ РЕСУРСАМИ В ДЕЯТЕЛЬНОСТИ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКОГО ПРЕДПРИЯТИЯ

Харузин А.В.^а Исмагилова Г.В.^б

^аАО «ТАГМЕТ», 347905, Таганрог, ул. Заводская, д. 1
e-mail: aleksandr.kharuzin@tmk-group.com

^бФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина»,
620002, Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Управление вторичными ресурсами дает возможность минимизировать генерацию отходов и способствовать экологической устойчивости территории присутствия промышленного предприятия. Позволит промышленным предприятиям уменьшить техногенную нагрузку на окружающую среду и внести свой вклад в круговорот экономики замкнутого цикла.¹

Таблица 1. Образование побочных продуктов в основных цехах АО «ТАГМЕТ»

Наименование цеха	Наименование отхода / побочного продукта
ТПЦ	Окалина (прокатного производства)
ЭСПЦ	Полупродукт шлаковый
	Лом оборотный чёрного металла
	Пыль газоочистки чёрного металла

Эффекты при переработке окалины прокатного производства: позволят снизить объём образования отходов и сократить затраты на утилизацию.

Эффекты при переработке полупродукта шлакового металлургического расплава электросталеплавильного производства: позволят получить фракционный шлаковый щебень, сократить использование вспомогательных материалов за счёт рециклинга доли извлекаемого скрапа, увеличить выручку за счёт реализации шлакового продукта сторонним потребителям.

Эффекты по лому оборотному чёрному металлургическому: позволят вовлечь повторно (рециклинг) в производство по средствам переплавки в виде шихтовых материалов и снизить себестоимость выпускаемой продукции.

Эффекты по пыли газоочистки чёрных металлов: позволят получить выручку за счёт изменения утилизации на реализацию полупродукта

Для металлургической отрасли очень важно принять и внедрить лучшие мировые практики для обеспечения долгосрочной устойчивости и улучшения экологии и уровня жизни в регионах присутствия.

Литература:

1. Харузин А.В., Исмагилова Г.В., Кейс АО ТАГМЕТ: Управление использованием вторичных ресурсов в производстве // Российские регионы в фокусе перемен. Сборник докладов XVII Международной конференции. Екатеринбург, - 2023.

ИННОВАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ПРОЕКТИРОВАНИЯ ЦИФРОВЫХ ИНФОРМАЦИОННЫХ МОДЕЛЕЙ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ С РЕСАЙКЛИНГОМ ОТХОДОВ

Чистякова Т.Б.

*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет),
Лаборатория мирового уровня, 190013, Санкт-Петербург, Московский проспект, 24-26/49, литер А,
e-mail: nov@technolog.edu.ru*

Исследование многоассортиментных промышленных производств (нефтеперерабатывающих, сталеплавильных, полимерных) с ресайклингом отходов (РО) показало актуальность решения комплексной задачи ресурсосберегающего проектирования и управления производствами с учетом энергетических и материальных ресурсов. Рассматриваемые производства характеризуются большими массивами информации, отличаются многофакторными взаимодействиями и связями, наличием изменяющегося состава сырья, строгими требованиями к отходоёмкости и экологическим характеристикам.¹ Для решения задачи проектирования химико-технологических объектов (ХТО) с РО предложены инновационные технологии (ИнТ) разработки цифровых информационных моделей (ЦИМ), включающих настраиваемые базы данных характеристик ХТО, базы правил проектирования ХТО, виртуальных моделей оборудования, библиотеки математических моделей для поверочных расчетов оборудования и исследования причинно-следственных связей в объекте управления.² ЦИМ позволяют формировать множество проектных решений, отображающих характеристики ХТО в виде совокупности информационно насыщенных элементов в соответствии с требованиями технического задания, а также формировать многоязычную проектную документацию. ЦИМ разработаны с применением технологий искусственного интеллекта, машинного обучения, интеллектуального анализа больших промышленных данных, виртуальной и дополненной реальности. Применение ИнТ проектирования ЦИМ ХТО с РО позволяет сократить время и число ошибок при проектировании и формировании документации, повысить уровень автоматизации этапов проектирования.

Литература

1. Meshalkin, V. etc. (2021). Methods of Digital Engineering of Resource Energy-Saving Environmentally Safe Chemical Process Systems. 10.17277/vestnik.2021.04.pp.564-575.
2. Chistyakova, T.B. etc. (2023). *Intelligent Technologies for Designing Digital Information Models of Chemical and Technological Objects*. 10.1007/978-3-031-44615-3_18

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 21-79-30029.

РАЗРАБОТКА СТРУКТУРЫ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ СИСТЕМЫ ЗАМКНУТОГО ВОДОБОРОТА СТОКОВ ХИМИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ

Аверина Ю.М.

*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева
125047, Москва, Миусская пл., 9
e-mail: averina.i.m@muctr.ru*

С применением методологии системного анализа обоснована целесообразность и актуальность организации замкнутых систем водооборота предприятий химической промышленности. С помощью инструментов математического моделирования описана операторная схема производственного процесса с замкнутой системой водооборота и возможностью рекуперативной переработкой отходов на основании, которой можно построить расчетную схему замкнутого контура водооборота производственного процесса и сформулировать математическую модель замкнутой системы водооборота. Предметом исследования в данной работе является система замкнутого оборота, объектом – химическое производство. Научная новизна данной работы заключается в принципе проектирования промышленных предприятий, с принципиальной возможностью дифференцированной очистки после каждой промышленной операции для рекуперации ценных компонентов с последующим объединением в общий замкнутый цикл водоочистки. Практическая значимость исследования заключается в оптимальной структуре замкнутых систем водооборота производств с минимизацией сброса загрязненных технологических потоков воды в природные водоемы.

Систему замкнутого водооборота стоков лакокрасочного предприятия можно представить, как химико-технологический комплекс (цех) по производству чистой воды внутри предприятия. Система замкнутого водооборота является частью общей системы производства товарного продукта, общая операторная схема которой представлена на рис. 1. В этом случае система водооборота является неотъемлемой и одной из главных составных частей безотходного производства.

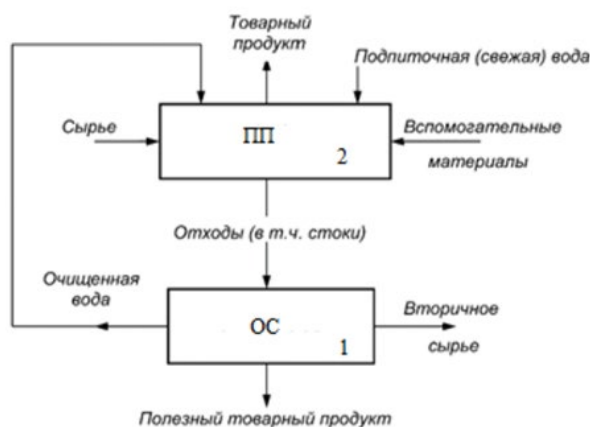


Рис. 1. Общая операторная схема производства товарного продукта с системой замкнутого водооборота.

Таким образом, на основании общей операторной схемы производственного процесса с замкнутой системой водооборота можно построить расчетную схему замкнутого контура водооборота производственного процесса и сформулировать математическую модель замкнутой системы водооборота.

ФРАГМЕНТАРНАЯ МОДЕЛЬ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ АМОРФНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Алейникова К.Б., Зинченко Е.Н.

*Воронежский государственный университет,
394018, Воронеж, Университетская пл., 1
e-mail: xenale@mail.ru*

В основе фрагментарной модели, разработанной авторами, лежит предположение о том, что структура аморфного вещества представляет собой мозаику из фрагментов структур кристаллических фаз, образование которых возможно при заданном элементном составе. Экспериментальную функцию радиального распределения атомов (ФРРА) с областью упорядочения ~ 1 нм анализируют с помощью модельных ФРРА. Модельную ФРРА рассчитывают методом функций пар атомов, используя межатомные расстояния фазы кристаллической, по формулам, предложенным авторами.^{1,2} Если максимумы модельной ФРРА совпадают по положениям с максимумами экспериментальной ФРРА во всей области упорядочения, то можно утверждать, что в аморфном веществе содержатся кристаллические зародыши той фазы, по межатомным расстояниям которой построена модель. Модельная и экспериментальная ФРРА никогда не совпадают полностью, так как модель строят по межатомным расстояниям идеального кристалла, а эксперимент получают от реального образца, содержащего дефекты и границы раздела нанокристаллитов. Исследование разнообразных аморфных материалов позволило установить следующее.

Аморфные металлические сплавы (АМС) на основе Al неоднородны. Они состоят из кристаллических зародышей Al и интерметаллических фаз.

Спектрально чистый устойчивый к нагреву SiO_2 содержит кристаллические зародыши β -кварца и β -тридимита.

Из фрагментов структур слоистых и молекулярных кристаллических фаз образована структура стеклообразных As_2S_3 и AgGeAsSe_3 . Структура As_2S_3 сформирована из фрагментов слоев аурипигмента, скрепленных молекулами As_4S_3 . В стекле AgGeAsSe_3 присутствуют фрагменты слоев соединений GeAsSe и GeSe₂. Атомы серебра замещают германий в тетраэдрах из селена.

Устойчивость к воздействию мощного лазерного импульса фосфидов и арсенидов цинка и кадмия определяли, анализируя структуру тонких аморфных конденсатов на их основе.

Литература

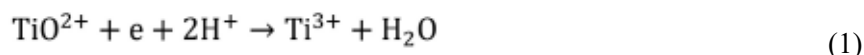
1. Алейникова К.Б., Зинченко Е.Н. *ЖСХ*, 2009, **50**, Приложение, 100.
2. Aleinikova K.B., Zinchenko E.N. and Zmeikin A.A. *Journal of Physics: Conference Series*, 2021, **1942**, 012011.

КАТАЛИТИЧЕСКОЕ ВОССТАНОВЛЕНИЕ СЕЛЕНАТ-ИОНОВ ИЗ ОТРАБОТАННЫХ РАСТВОРОВ И СТОЧНЫХ ВОД В ПРИСУТСТВИИ ИОНОВ ТИТАНА (IV)

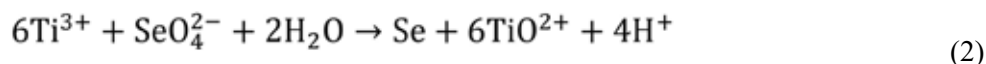
Баешов А., Баешова А.К., Алимжанова А.

*Казахский национальный университет имени аль-Фараби,
Центр физико-химических методов анализа и исследования,
050000, Республика Казахстан, г. Алматы, пр. аль-Фараби,
e-mail: bayeshov@mail.ru*

При электрорафинировании меди образуются медеэлектролитные шламы, которые являются одним из основных источников получения селена. Однако выделение селена из таких шламов представляется очень сложной задачей, так как при их переработке селен переходит в трудновосстанавливаемую форму – селенат-ион.¹⁻³ К настоящему времени нет приемлемых способов восстановления селенат-иона.⁴ Восстановить селенат-ион трудно и электрохимическим способом, так как оксоанионы селена заряжены отрицательно и отталкиваются от поверхности катода. В этой связи мы рассмотрели возможность восстановления трудновосстанавливаемых селенат-ионов при помощи окислительно-восстановительной системы Ti (IV)-Ti (III). При этом на катоде происходит восстановление ионов титана (IV) (реакция 1).



Ионы титана (III), образующиеся в прикатодном пространстве, восстанавливают селенат-ионы, т. е. протекает реакция (2), в результате которой ионы титана (IV) регенерируются, затем вновь разряжаются на катоде.



Таким образом, показано, что процесс является каталитическим, селенат-ион, называемый «трудновосстанавливаемым» анионом, можно восстанавливать в присутствии переменновалентных катионов титана, являющихся переносчиками заряда.

Литература:

1. Петров, Г. В., Беленький, А. М., Андреев, Ю. В., & Ковалев, В. Н., Труды СПбГТУ, 2009, 510, 70.
2. Zha G. et al. Separation and Purification Technology. – 2021. – Т. 266. – С. 118536.
3. Kilic Y., Kartal G., Timur S. International Journal of Mineral Processing. – 2013. – Т. 124. – С. 75-82.
4. Грейвер Т. Н., Зайцева И.Г., Косовер В.М. Селен и теллур. Новая технология получения и рафинирования. – М.: Металлургия, 1977. 296 с.

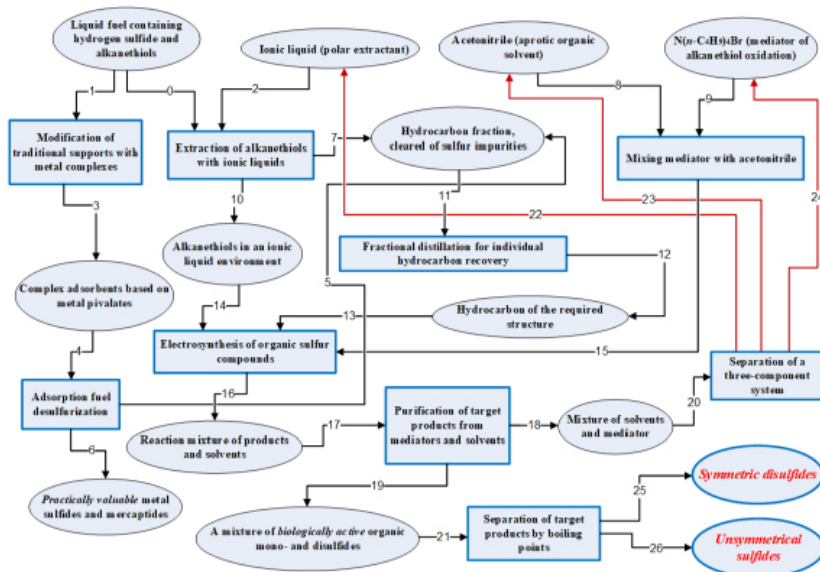
Работа выполнена при финансовой поддержке МВОН РК, проект № AP 23486503

КОМБИНАЦИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ИЗВЛЕЧЕНИЯ СЕРОСОДЕРЖАЩИХ ОТХОДОВ ИЗ ЖИДКИХ ТОПЛИВ И ИХ ПЕРЕРАБОТКИ В ПРАКТИЧЕСКИ ПОЛЕЗНЫЕ ОРГАНИЧЕСКИЕ ПРОИЗВОДНЫЕ СЕРЫ

Берберова Н.Т., Тишков А.А., Стороженко В.Н., Шинкарь Е.В.

*Астраханский государственный технический университет,
ул. Татищева, 16, г. Астрахань, 414056, Россия,
e-mail: nberberova@astu.org*

Глобальная индустриализация и чрезмерная зависимость от невозобновляемых источников энергии привели к увеличению количества отходов и негативному изменению климата. Данная проблема требует решения в виде разработки стратегии внедрения циркулярной экономики в промышленном секторе, особенно в нефтегазоперерабатывающей отрасли. Сернистые промышленные отходы оказывают существенное воздействие на окружающую среду и отрицательно влияют на здоровье человека. Предложенная в работе комбинированная технология, включающая утилизацию алкантиолов (сероводорода) с последующей их переработкой в биологически активные сероорганические соединения, обеспечит экономическую и экологическую безопасность реализации токсичных отходов и эффективную сероочистку жидкого топлива. Логико-информационная модель разработанной технологии представлена ниже.



Адсорбционная очистка жидкого топлива с использованием пивалатных комплексов цинка способствует превращению серосодержащих компонентов в сульфиды, обладающие антибактериальными и противогрибковыми свойствами. Объединение двух направлений использования растворителей нового поколения (ионных жидкостей) в качестве экстрагентов и электропроводящих сред для электросинтеза позволит существенно повысить эффективность этой технологии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-13-00201.

ИНЖИНИРИНГ ЭНЕРГОРЕСУРСОЭФФЕКТИВНОЙ ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНОЙ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ПЕРЕРАБОТКИ ОТХОДОВ РУДНОГО СЫРЬЯ

Незамаев С. В.,^а Бобков В.И.^б

^аРоссийский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева,
125047, Москва, Миусская площадь, 9

^бФилиал ФГБОУ ВО «НИУ «МЭИ» в г. Смоленске,
214013, Смоленск, Энергетический проезд, 1,
e-mail: vovabobkoff@mail.ru

Проблема рационального использования сырьевых и топливно-энергетических ресурсов особенно важна для энергоемких промышленных производств, к которым относятся конвейерные обжиговые и агломерационные машины для переработки рудного сырья, представляющие собой сложные химико-энерготехнологические системы (ХЭС).¹ Режимы функционирования ХЭС и завершенность протекающих в них взаимосвязанных химико-энерготехнологических процессов (ХЭП) - сушки, прокали и спекания, обеспечивающих конечную прочность движущейся на конвейере плотной многослойной массы окатышей, определяют качество их термической обработки.²

Цифровизированный инжиниринг энергоэффективности ХЭС с использованием современных интеллектуальных методов и многомасштабных математических моделей сложных ХЭП, адаптация эффективных технических решений и технологических режимов функционирования ХЭС к периодически меняющимся свойствам добываемого рудного сырья представляют собой сложную научно-техническую проблему.³ Цифровизация и инжиниринг режимов обжига движущейся плотной многослойной массы рудного сырья в сложной ХЭС позволит повысить энергоэффективность ХЭС в результате интенсификации и оптимизации теплообменных процессов.

Литература:

1. Мешалкин В.П., Бобков В.И., Длин М.И. Автоматизированная система поддержки принятия решений по управлению энергоэффективностью химико-энерготехнологической системы обжига фосфоритовых окатышей // Теоретические основы химической технологии. 2019. Т. 53. № 6. С. 609-616.
2. Пучков А.Ю., Прохимнов Н.Н., Рысина Е.И., Шутова Д.Ю. Нейрорегулятор комплексной технологической системы переработки рудных отходов Прикладная информатика. 2023. Т. 18. № 5. С. 91-105.
3. Vereykina, E. K., Orekhov, V. A. Study of Thermal Deformations in Iron ore Raw Materials at high Temperature Roasting // AIP Conference Proceedings, 2023, 2999(1), 020050.

Работа выполнена в рамках государственного задания, проект № FSWF-2023-0012.

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ЭКСТРАКЦИЯ-ЭЛЕКТРОЛИЗ ДЛЯ ВЫДЕЛЕНИЯ ЦЕННЫХ КОМПОНЕНТОВ ИЗ ПРОМЫШЛЕННЫХ ОТХОДОВ И БЕДНЫХ РУД

Бродский В.А., Максимов И.С., Яворский А.Р.

*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
Миусская пл., 9, Москва, Российская Федерация, 125047
e-mail: vladimir_brodsky@mail.ru*

Для извлечения меди из растворов применяется метод «экстракция - электролиз» (SX-EW).¹ Цель работы - выделение ценных компонентов из промышленных отходов на примере печной пыли производства бронзы (РФА: Cu - 48,742, Zn – 33,405 масс.%). Медный кек после выщелачивания в H₂SO₄ подвергнут медно-аммиачному МА, и медно-хлоридному МХ выщелачиванию. Экстракция меди проведена с использованием экстрагентов различной природы и концентрации (Рис.1). Наибольшая эффективность процесса достигнута в растворе LIX 54 (50%).

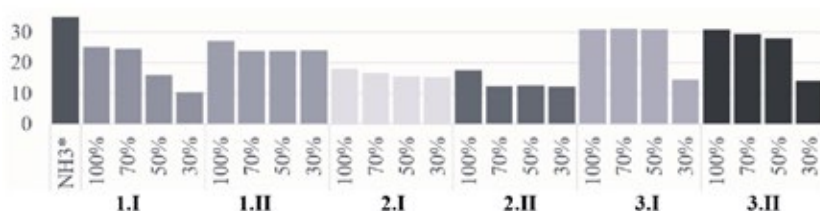


Рисунок 1. Эффективность извлечения Cu²⁺ из травильного раствора в экстрагент (I) и H₂SO₄ (II) в интервале концентраций экстрагента (%) 1. Д2ЭГФК, 2. ДХ510А, 3. Lix54

Эффективность извлечения меди из МХ раствора в экстрагент и HCl - 35 и 32 г/л соответственно. Эффективность извлечения из МА раствора в экстрагент и H₂SO₄ - 32 и 30 г/л. Результаты электроэкстракции меди и основные параметры процесса представлены в таблице:

Таблица 1. Основные параметры процесса выделения меди из промышленных отходов

Выщелачивание кека МА/МХ (кек после сернокислого выщелачивания)	T = 25 °C (МА p-p); T = 50 °C (МХ p-p); τ = 40 мин
Экстракционное извлечение меди из МА/МХ растворов	Экстрагент LIX54-1 50% в керосине; τ = 20 мин; Соотношение фаз 1:1
Электровыделение меди из сернокислого реэкстрагирующего раствора	i _к = 0,6 А/дм ² ; τ = 90 мин.; ВТ= 65%

Литература

1. Davenport W.G, King M., Schlesinger M., Biswas A.K. Extractiv metallurgy of copper. – Pergamon, 2002. – 434 p.

МЕМБРАНЫ ДЛЯ НЕФТЕПЕРЕРАБОТКИ И НЕФТЕХИМИИ

**Волков А.В., Юшкин А.А., Борисов И.Л.,
Анохина Т.С., Баженов С.Д.**

*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 29,
e-mail: avolkov@ips.ac.ru*

В мире на различные процессы разделения приходится 10-15% общего потребления энергии, что делает актуальным поиск более совершенных и энергоэффективных подходов к разделению и очистке соединений. Сегодня порядка 100 млн. баррелей сырой нефти ежедневно перерабатывается на нефтеперерабатывающих заводах в мире, при этом основным используемым методом разделения являются атмосферная и вакуумная перегонка. В то же самое время, мембранные процессы разделения широко рассматриваются в качестве альтернативы дистилляции благодаря отсутствию фазового перехода. Так, например, обратный осмос является основным промышленным способом опреснения морской воды в мире. В ИНХС РАН были разработаны фильтрационные мембраны на основе полиакрилонитрила, которые позволяют осуществлять прямое фракционирование нефти, обеспечивающие отделение соединений с молекулярной массой ниже 600 г/моль при полном удалении асфальтенов (99,9%).

Снижение углеродного следа в процессах нефтехимии и нефтепереработки может достигаться за счет улавливания углекислого газа, внедрения процессов получения водорода без выделения углекислого газа (например, термическое разложение метана), так и благодаря выделению и возврату ценных компонентов из различных газовых потоков. В докладе будут представлены результаты по ряду газоразделительных мембран, разработанных для различных процессов, включая задачи по выделению диоксида углерода, водорода, углеводородов C₂₊. При создании мембран в качестве мембранных материалов использовалось доступное полимерное сырье, в том числе произведенное в Российской Федерации.

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственного задания ИНХС РАН.

РАЗРАБОТКА И ВНЕДРЕНИЕ «ЗЕЛЕННЫХ» ИНГИБИТОРОВ ГАЗОГИДРАТООБРАЗОВАНИЯ НА НЕФТЯНЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЯХ

Волошин А.И., Докичев В.А.

*Уфимский Институт химии УФИЦ РАН,
450054, Уфа, проспект Октября, 71,
voloshinai3@mail.ru*

При разработке и эксплуатации нефтегазовых месторождений образование газогидратов в добыче нефти становится серьезной проблемой как для обеспечения потока и управления давлением в стволе скважины, так и транспорта углеводородного сырья. Для предупреждения образования газовых гидратов используют термодинамические ингибиторы газогидратообразования (ИГ), такие как метанол, гликоли, солевые растворы, изменяющие условия гидратообразования и кинетические ИГ – поли(N-винилпирролидон) (PVP), поли(N-винилкапролактан) (PVCap) увеличивающие индукционный период и снижающие скорость гидратообразования. Основной целью данной работы является разработка перспективных «зеленых» нефтепромысловых реагентов на основе полисахаридов.

Было установлено, что полисахариды изменяют условия газогидратообразования, проявляя свойства термодинамического и кинетического ИГ с эффективностью, превосходящей метанол в десятки раз в зависимости от выбранного полисахарида.¹ Предполагается, что ингибирование обусловлено электростатическим взаимодействием ионизированных карбоксильных групп с молекулами воды, и в результате образования водородных связей с атомами кислорода и ОН-группами D-глюкозных фрагментов. Проведённые исследования положены в основу разработанной линейки новых ингибиторов газогидратообразования для предотвращения образования газогидратных отложений в нефтепромысловых системах.² Препаративные формы ИГ прошли опытно-промышленные испытания на скважинах нефтяных месторождений Западной Сибири, определены эффективные дозировки ИГ, разработаны рекомендации к их промышленному применению.

Литература:

1. Fakhreeva A.V., Nosov V.V., Voloshin A.I., Dokichev V.A. *Polymers*, 2023, **15**, 1789.
2. Алимбеков Р.И., Волошин А.И., Греков С.Н., Докичев В.А. и др. *Патент 2787673 РФ*, 2023.

РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ В ТЕХНОЛОГИИ ПРОИЗВОДСТВА НЕФТЯНЫХ ТОПЛИВ ЗА СЧЕТ ВОВЛЕЧЕНИЯ ПОБОЧНЫХ ПРОДУКТОВ НЕФТЕПЕРЕРАБОТКИ И НЕФТЕХИМИИ

Дьячкова С.Г.

*Иркутский национальный исследовательский технический университет,
664033, г. Иркутск, ул. Лермонтова, 83.
e-mail: dsg2108@gmail.com*

Нефтесодержащие отходы и побочные продукты являются источником ценных углеводородов, поэтому поиск новых путей их извлечения и использования в качестве компонентов топлив является актуальной ресурсосберегающей и экологической задачей.

Установлена возможность вовлечения в топливо маловязкое судовое (ТМС) побочных утяжеленных фракции первичной и вторичной переработки нефти: 10-12 % утяжеленной дизельной фракции, 47-60 % прямогонной среднестиллятной фракции, 2-10 % тяжелой дизельной фракции, 35 % вакуумного дистиллята, 10 % кубового остатка блоков гидрирования, 4-10 % легкого газойля каталитического крекинга.¹

Найден новый путь применения побочного продукта нефтехимии - низкомолекулярного полиэтилена (НМПЭ) в качестве компонента ТМС. Доказана эффективность его действия на температуру застывания ТМС с содержанием до 75 %, утяжеленных фракций. Показано, что применение низкомолекулярного полиэтилена позволит исключить использование дорогостоящих депрессорных присадок из приготовления топлива.²

Получен новый компонент автомобильных бензинов на базе побочных продуктов – легкокипящих дистиллятов фракционирования реакционной смеси синтеза бутиловых спиртов и гексановой фракции процесса изомеризации легкого прямогонного бензина.³

Из отходов товарного парка после их обезвоживания выделены фракции, позволяющие получить новые компоненты автомобильных бензинов и топлива маловязкого судового. Разработана технологическая схема, базирующаяся на процессах смешения и сепарации.⁴

Литература

1. Artemeva Zh.N, Dyachkova S.G., Kuzora I.E., Vakulskaya T.I., Pavlov D.V // *Petroleum Chemistry*, 2020, **60**, N 9, 1100.
2. Artemeva, Zh.N. Dyachkova S.G., Kuzora I.E., Zabrodina S.V. *Ecology and Industry of Russia*, 2020, **24**, N 12, 23.
3. Ганина А.А., Дьячкова С.Г., Кузора И.Е., Дубровский Д.А., Семёнов И.А. *Теоретические основы химической технологии*, 2020, **54**, N 4, 452.
4. Ковалева Е.Б., Дьячкова С. Г., Кузора И. Е., Ганина А.А. *Известия вузов прикладная химия и биотехнология*, 2023, **13**, 133.

ОСНОВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ РЕЦИКЛИНГА КЛИНКЕРА ВЕЛЬЦЕВАНИЯ ПЫЛЕЙ ЭЛЕКТРОСТАЛЕПЛАВИЛЬНОГО ПРОИЗВОДСТВА

Дюбанов В.Г., Грудинский П.И.

*Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской Академии Наук,
119334, Москва, Ленинский проспект, 49,
e-mail: vdyubanov@imet.ac.ru*

Вельц-процесс – основная технология для переработки пылей электросталеплавильного производства с извлечением цинка в вельц-оксид, который используется в качестве сырья на цинковых предприятиях. Побочный продукт переработки пылей этим способом – клинкер, содержащий до 45% железа, до 20% углерода и остаточный цинк. В настоящее время большая часть образующегося клинкера не утилизируется и направляется в отвалы. Объём его образования составляет около 600–800 кг на тонну перерабатываемой пыли, что влечёт за собой накопление значительного количества отходов.

В мире проводятся исследования по изучению возможности применения клинкера в дорожном строительстве, при изготовлении бетона, цемента, кирпича и других строительных материалов. Для чёрной металлургии представляет интерес извлечение из него железа. Утилизация клинкера в чёрной металлургии ограничена главным образом из-за высокого содержания остаточного цинка, который является вредной примесью для процесса выплавки чугуна в доменных печах. Содержание цинка в клинкере может варьироваться в пределах 0,2–6%.

В ИМЕТ РАН проводятся исследования по разработке различных технологических схем переработки клинкера с извлечением ценных элементов в отдельные продукты с использованием стадий магнитной сепарации, флотации, восстановительной плавки, восстановительного обжига, выщелачивания. Разрабатываемые схемы показали возможность получения из клинкера продуктов, пригодных для дальнейшего использования.

Утилизация клинкера увеличит технико-экономическую эффективность переработки пыли электросталеплавильного производства и будет способствовать уменьшению негативного влияния на окружающую среду в местах его образования и хранения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-23-00507.

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЙ ИНЖИНИРИНГ ПОРШКОВО-АКТИВИРОВАННЫХ КОМПОЗИТОВ НА МИНЕРАЛЬНЫХ ВЯЖУЩИХ

Мешалкин В.П.,^а Ерофеев В.Т.,^б Тараканов О.В.,^в Ерофеева И.В.^б

*^аРоссийский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
Россия, 125047, г. Москва, Миусская площадь, д. 9,
vpmeshalkin@gmail.com*

*^бНациональный исследовательский Московский государственный строительный университет,
Россия, 129337, г. Москва, Ярославское шоссе, д. 26,
erofeevvt@bk.ru*

*^вПензенский государственный университет архитектуры и строительства,
Россия, 440028, г. Пенза, ул. Германа Титова, 28,
tarov60@mail.ru*

Современное строительство, включающее возведение высотных зданий, большепролетных мостов и других уникальных сооружений, потребовало разработки высокопрочных бетонов нового поколения. Высокопрочные композиты – это многофункциональные материалы, сочетающие в себе, наряду с высокой прочностью (100–150 МПа), другие важнейшие свойства: морозостойкость, водонепроницаемость и др. Важной особенностью высокопрочных композитов также является замена крупных фракций заполнителя мелкими, что уменьшает объем микрооднородностей в структуре материала. Дозировка цемента, повышенная в высокопрочных материалах, составляет 700–1000 кг/м³ при очень низком содержании воды. Однако повышенное количество цемента приводит ко многим недостаткам, таким как повышенная теплота гидратации, большая усадка и т. д. Приемлемой альтернативой для замены цемента служат минеральные добавки, такие как диоксид кремния, зола-унос, доменный шлак и т. д. Являясь гидратационно инертной по отношению к воде, каменная мука, полученная на основе прочных и плотных горных пород, в большей степени, чем цементы, подвержена разжижающему влиянию суперпластификаторов (СП) в цементно-минеральных смесях, способствует созданию реологически активной матрицы, что повышает эффективность действия СП и позволяет в большей степени понижать водопотребность смесей, в отличие от чисто цементных смесей. При проектировании комплексных органоминеральных добавок значительные синергетические эффекты могут быть получены при использовании бинарных тонкомолотых микрозаполнителей. Например, добавок содержащих аморфный кремнезем в смеси с кальцитом. Результаты исследований характера изменения прочности композита с подобными добавками показали, что бинарные органоминеральные добавки являются более эффективными чем индивидуальные.

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЙ ИНЖИНИРИНГ ДОЛГОВЕЧНЫХ ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫХ КЕРАМИЧЕСКИХ СТРОИТЕЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Мешалкин В.П.^а, Ерофеев В.Т.^б, Желдаков Д.Ю.^в

^а*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
125047, г. Москва, Миусская площадь, д. 9*

^б*Московский государственный строительный университет
129337, г. Москва, Ярославское шоссе, д. 26*

^в*Научно-исследовательский институт строительной физики РААСН,
г. Москва, Локомотивный проезд, д. 21, djeld@mail.ru*

Впервые доказано, что процесс разрушения изделий строительной керамики протекает по типу хемомеханического процесса.¹ Рассмотрение процесса деструкции материала керамических изделий по типу хемомеханического процесса позволило получить количественную оценку долговечности материала строительной керамики.

Авторами впервые разработан и доказан теоретически, на основании термодинамических расчетов, и экспериментально, на основании лабораторных исследований, химизм процесса деструкции материала строительной керамики. Доказано, что деструкция материала строительной керамики определяется внутренним двухстадийным химическим процессом, протекающим в материале постоянно при его увлажнении.² На основании экспериментальных исследований определены основные кинетические характеристики каждой стадии процесса деструкции. Получено феноменологическое уравнение для определения долговечности материала строительной керамики.

Исследование долговечности строительной керамики в первую очередь направлено на создание научно обоснованных предложений для модернизации и технологическому совершенствованию процесса производства изделий строительной керамики с заданным периодом сохранения физических свойств, в том числе прочности. Выпуск изделий с заданной долговечностью позволит сократить энергопотребление не только на этапе производства материала, но и на этапе утилизации, что в конечном счете будет способствовать снижению технологической нагрузки на окружающую среду.

Литература

1. Академик РАН В. П. Мешалкин, О. Б. Бутусов, Р. Р. Кантюков, А. Ю. Белозерский локально-потенциально-морфометрический алгоритм информационно-энтропийной оценки воздействия техногенных химических загрязнений на лесные массивы // Доклады Российской академии наук. Химия, науки о материалах, 2020, Т. 495, № 1, стр. 35–41.
2. Желдаков Д.Ю., Ерофеев В.Т. Определение долговечности строительной керамики // Вестник МГСУ №3(19). 2024. С.394-402.

КОНЦЕПЦИЯ БЕЗОТХОДНОЙ ПЕРЕРАБОТКИ МИНЕРАЛЬНОГО И ТЕХНОГЕННОГО СЫРЬЯ СЕВЕРНОГО УРАЛА КОМПЛЕКСНЫМ СПОСОБОМ

Климентенок Г.Н.,^а Климентенок Г.Г.,^а Хайруллина Р.Т.^б

^аФГУП ИГИ, 119071, Москва, Ленинский пр-кт, д. 29,
e-mail: infoszka@mail.ru

^бНИТУ МИСИС, 119049, Москва, Ленинский пр-кт, д. 4, стр. 1,
e-mail: rimma09@mail.ru

Экономика замкнутого цикла предусматривает создание во всех сферах материального производства безотходных технологических процессов. При этом дополнительные природные материальные ресурсы должны использоваться в минимально необходимом количестве. Еще с конца 70-х годов прошлого века отечественных ученых заинтересовала возможность комплексной переработки красных шламов глиноземных заводов СССР с целью решения проблемы экономически эффективного извлечения скандия. На основе результатов многочисленных исследовательских работ, выполненных в разные годы коллективами УралВАМИ, ИМЕТ УрО РАН, МЕХАНОБР, УралМЕХАНОБР, МИСИС, ИХТТ УрО РАН, ФизТех УрФУ, Русредмет, ВАМИ, ВНИИХТ, была разработана безотходная и экологически безопасная концепция утилизации красного шлама Богословского алюминиевого завода.

В основу данной концепции положены следующие принципы:

1. Основными и вспомогательными сырьевыми материалами производственных процессов являются исключительно промышленные отходы (кроме специфических реагентов);
2. Полное исключение складирования для длительного хранения на земной поверхности каких-либо твердых или жидких отвальных материалов;
3. Район расположения предприятия должен обладать необходимыми энергетическими и водными ресурсами;
4. Необходимо иметь устойчивый рынок сбыта товарной продукции.

Учитывая особенности химического и минерального состава красных шламов, наличие близкорасположенных кальцийсодержащих породных отвалов Североуральского бокситового рудника и кварц-глауконитового песка вскрышных пород Тынинского месторождения карбонатных марганцевых руд, появляется возможность создания горно-металлургического комплекса по утилизации перечисленных отходов с получением широкой гаммы высоколиквидных продуктов (в том числе до 120 т оксида скандия ежегодно).

ЗАМКНУТЫЙ ЦИКЛ ПЕРЕРАБОТКИ ТОЛУОЛА В ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ МАЛОТОННАЖНОЙ ХИМИИ

Князев М.Ю., Траханова Е.В., Дюбанов М.В., Артемов А.В.

*Общество с ограниченной ответственностью «Инвестиционно-промышленный концерн «Звезда»,
123610, Краснопресненская набережная, д. 12, г. Москва, Россия
e-mail: info@zvezda.global*

Приведены данные о процессах глубокой переработке толуола – одного из наименее востребованного как сырьевого источника углеводорода, содержащегося в составе легкой фракции ароматических углеводородов (бензол, толуол, ксилолы и др.). Переработка толуола основана на объединении физических, химических и технологических процессов в единый комплекс, который получил название «Производственный комплекс глубокой переработки толуола» (рисунок 1).¹

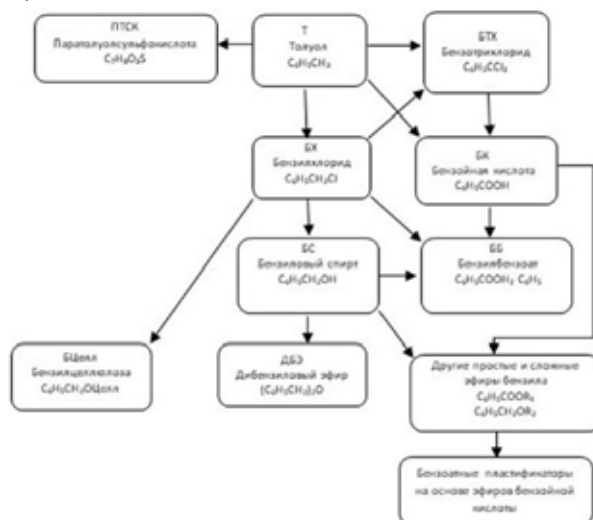


Рисунок 1. Производственный комплекс глубокой переработки толуола

Приведены данные об особенностях химико-технологических процессов, входящих в состав «Производственный комплекс глубокой переработки толуола».

Литература

1. Траханова Е.В., Князев М.Ю., Артемов А.В., Дюбанов М.В. // Российский химический журнал. 2024. Т. 68. № 1. С. 74.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства промышленности и торговли Российской Федерации, соглашение № 020-11-2022-1598 от 15.12.2022.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРОИЗВОДСТВА L-МОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ И ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫХ ХИМИЧЕСКИХ ПРОДУКТОВ НА ЕЕ ОСНОВЕ

**Козловский Р.А., Кузнецов А.Е., Белодед А.В., Козловский И.А.,
Козловский М.Р., Ибатов Я.А., Коноплев И.А.,
Воронов М.С., Староверов Д.В.**

*ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет имени
Д.И. Менделеева», 125047, Москва, Миусская площадь, д. 9
e-mail: kozlovskii.r.a@muctr.ru*

Представлены результаты комплексных фундаментальных и прикладных исследований в области экологически, экономически и технологически эффективной переработки возобновляемого сахаросодержащего сырья в востребованные химические продукты через стадию высокопроизводительной ферментации сырья в оптически чистую L-молочную кислоту (L-МК)¹⁻³ с использованием природного штамма молочнокислых бактерий. Ферментация проводится без отвода биомассы из зоны биосинтеза отъемно-доливным методом в мембранном биореакторе, который обеспечивает удельную производительность на порядок выше, чем традиционные способы культивирования в периодическом режиме. Это позволяет увеличить выход L-МК до 90–95% с оптической чистотой последней не менее 99%, снижение содержания побочных продуктов биосинтеза в получаемой постферментационной среде до минимальных величин и затрат на ростовые факторы в 3 раза, что делает L-МК приемлемым по стоимости полупродуктом для дальнейшей химической переработки. Последующее выделение L-МК из культуральной жидкости осуществляется в виде L-бутиллактата (L-БЛ) без образования отходов в виде сульфата кальция (в традиционном производстве образуется около 1 т гипса на 1 т L-МК). Получаемый L-БЛ не только является экологически безопасным растворителем, но и промежуточным продуктом для получения других алкиловых эфиров молочной кислоты, L-МК высокой чистоты, 1,2-пропиленгликоля, биоразлагаемого пластика – полилактида. Полилактид не только биоразлагаем, но и может быть термодинамически переработан в исходный мономер – лактид, что может служить основой замкнутого жизненного цикла такого полимера.

Литература

1. Kozlovskiy R., Shvets V., Kuznetsov A. *Journal of Cleaner Technology*, 2017, **155**, 157.
2. Kuznetsov A., et al. *Clean Technologies and Environmental Policy*, 2017, **19**, 3, 869.
3. Кузнецов А.Е., Козловский Р.А. и др. *Химическая промышленность сегодня*, 2022, **3**, 2.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СВОЙСТВ ЭКОЛОГИЧЕСКИ-БЕЗОПАСНОГО СОРБЕНТА НА ОСНОВЕ ПЕРЕРАБОТКИ СЕЛЬСКО-ХОЗЯЙСТВЕННЫХ ОТХОДОВ

**Кудрявцева Т.Ю., Родионова М.А.,
Схведиани Е.А., Смятская Ю.А.**

*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29, литера Б,
e-mail: tankud28@mail.ru*

Состав и характеристики отходов растительного происхождения варьируется в широком диапазоне и зависят от сорта растения, условий выращивания, климатических условий и других факторов. Целью выполнения данного исследования являлась разработка программы для предиктивного анализа сорбционных свойств материалов на основе растительных отходов сельского хозяйства для очистки загрязнений тяжелыми металлами.

Использование методов машинного обучения позволяет найти закономерности между режимами термической обработки (время, температура) и сорбционными свойствами материалов, а также провести анализ использования сорбционных материалов при различных факторах для дальнейшей прогнозной оценки влияния таких факторов, как концентрация загрязняющего вещества, мешающие примеси, вид поллютанта, на сорбционные свойства материалов. Полученные результаты влияния факторов приведены на рисунке 1.

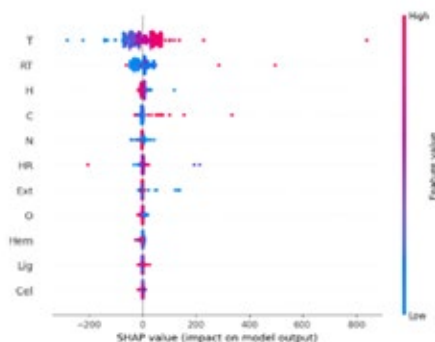


Рисунок 1. Влияние факторов на удельную поверхность сорбента

Метод XGBoost регрессии позволил построить прогнозную модель сорбционной емкости с коэффициентом детерминации 84%. Фрагмент прогнозной оценки приведен в таблице 1.

Наблюдение	Фактическое значение	Прогнозное значение
0	3,8	3,5
1	6,2	6,5

Таблица 1. Прогнозная оценка сорбционной емкости

Работа выполнена при финансовой поддержке Blue Sky Research, проект BSR-2023-9.

СТОЙКИЕ ОРГАНИЧЕСКИЕ ЗАГРЯЗНИТЕЛИ: ПРОБЛЕМЫ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ОБЕЗВРЕЖИВАНИЯ

Куликова Т.В.^а, Майорова А.В.^а, Горбунова Т.И.^б, Шуняев К.Ю.^а

^а*Институт металлургии Уральского отделения Российской Академии Наук,
620016, Екатеринбург, Амундсена 101,
e-mail: kuliko@gmail.com*

^б*Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского
Уральского отделения Российской Академии Наук,
620108, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, д. 22*

Проблема уничтожения стойких органических загрязнителей (СОЗ) на сегодняшний день является очень актуальной. Вопрос загрязнения окружающей среды СОЗ выделен Организацией Объединенных Наций в разряд приоритетных экологических проблем. В 2001 г. была подписана международная Стокгольмская конвенция о СОЗ. Россия в 2011 г. ратифицирует эту конвенцию федеральным законом от 27.06.2011 № 164-ФЗ. Конвенция ставит своей целью не только запрещение производства и использования СОЗ, но также и уничтожение имеющихся запасов этих веществ к 2028 г. Обезвреживание СОЗ является важной международной проблемой, поскольку не существует до сих пор общепринятой, безопасной технологии.

В работе проведено комплексное систематическое исследование (расчет, эксперимент) двухстадийного метода уничтожения СОЗ на примере полихлорированных бифенилов – ПХБ, с помощью химической функционализации и последующей безопасной термической деструкции новых производных ПХБ:



Схема 1. Этапы комплексного метода переработки хлорсодержащих техногенных отходов.

В работе получены научные фундаментальных знания о термодинамических свойствах хлорсодержащих СОЗ, разработан способ прогнозирования их поведения в термических и химических процессах и обоснованы возможные подходы к решению проблемы безопасного уничтожения хлорсодержащих техногенных отходов.

«НУЛЕВОЙ ЖИДКИЙ СБРОС» НА ПРИМЕРЕ ПРЕДПРИЯТИЯ ЦВЕТНОЙ МЕТАЛЛУРГИИ

**Курдюмов В.Р., Тимофеев К.Л., Субботин Е.Е.,
Воинков Р.С., Субботина И.Л.**

*АО «Уралэлектромедь», 624090, Верхняя Пышма, проспект Успенский, 1,
e-mail: vasily.kurdyumov@gmail.com*

Одной из основных концепций, внедряемых в области водопользования на промышленных предприятиях и вписывающихся в стратегию перехода к экономике замкнутого цикла, является «нулевой жидкий сброс» (или ZLD – zero liquid discharge), предполагающий полное повторное использование сточных вод после соответствующей обработки без их сброса в водоемы.

В АО «Уралэлектромедь» переход к ZLD был завершён в 2023 г. за счёт внедрения технологии, основанной на баромембранных методах очистки вод: ультрафильтрации и обратном осмосе. Она позволила объединить два принципиально разных направления водопользования на предприятии: очистку стоков и подготовку деионизованной воды, – за счёт вовлечения первых в производство последней. Комбинированную схему переработки сточных вод можно представить следующим образом (стадии внедренной технологии выделены курсивом): сточная вода → обработка щелочью → коагуляция и флокуляция → осветление → фильтрация → *корректировка pH* → *ультрафильтрация* → *I ступень обратного осмоса* → *II ступень обратного осмоса* (переработка концентратов I ступени) → *декарбонизация пермеата* → сорбция на угле → ионный обмен на катионите → ионный обмен на слабоосновном анионите → ионный обмен на сильноосновном анионите → корректировка pH → деионизованная вода. С учетом солесодержания в исходной сточной воде на уровне 1 г/дм³ удалось достичь общего выхода пермеата с установок обратного осмоса на уровне 94%; при этом его солесодержание не превышает 25 мг/дм³, что в 5-6 раз меньше, чем в технической (озерной) воде – сырьё для получения деионизованной воды. Конечный концентрат перерабатывается на существующей выпарной установке до солей, состоящих в основном из сульфата и хлорида натрия.

В результате перехода к ZLD был достигнут эколого-экономический эффект в размере 175 руб. за 1 м³ перерабатываемых стоков. Реализация проекта позволила: 1) исключить сброс сточных вод и нанесение ущерба водным объектам; 2) сократить потребление технической воды; 3) улучшить технико-экономические показатели технологии получения деионизованной воды ввиду использования более чистого сырья и, как следствие, сокращения затрат на регенерирующие реагенты, энергоресурсы и переработку элюатов; 4) устранить необходимость в регулярной разработке и актуализации проекта НДС, в постоянном мониторинге за качеством воды на водо-выпуске и непосредственно за состоянием водных объектов.

МАТЕРИАЛЫ С МОЗАИЧНОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ ДЛЯ ЛИКВИДАЦИИ АВАРИЙНЫХ РАЗЛИВОВ НЕФТИ

Миронов М.А., Алкубелат Р.С., Антонов Д.О.

*Химико-технологический институт, Уральский федеральный университет,
620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19,
e-mail: m.a.mironov@urfu.ru*

Загрязнение окружающей среды при добыче и транспортировке нефти представляет значительную проблему, особенно в районах Крайнего Севера, куда сейчас перемещаются основные мощности.

Данный проект сфокусирован на получении покрытий с переключаемой при изменении рН гидрофильно-гидрофобной поверхностью. Его практическая значимость заключается в получении регенерируемых материалов для ликвидации аварийных разливов нефти. В активированном состоянии, когда поверхность материала гидрофобная он может использоваться как сорбент для сбора нефти с поверхности воды. Затем, при изменении рН поверхность материала становится гидрофильной и нефть легко удаляется с его поверхности и может быть собрана и использована как коммерческий продукт. При этом толщина мозаичного покрытия настолько мала, что оно не будет негативно отражаться на стоимости. Материал с мозаичной поверхностью может использоваться множество раз без необходимости его утилизации или захоронения.

Мозаичные покрытия были получены путем осаждения микрогелей целлюлозы со средним диаметром 150–450 нм на стекловолокне или ткани.¹ Для всех полученных в работе микрогелей был проведен комплекс исследований структуры, включая ¹H ЯМР, ИК, ЭПР, динамическое светорассеяние (ДРС) и сканирующая зондовая микроскопия. Эти исследования выявили доменную структуру полученных микрогелей. Домены размером 20–30 нм, состоящие из более плотного материала, соединены более мягким гелем в единую структуру размерами 200–300 нм.² Химическая модификация отдельных доменов позволила получить мозаичную структуру, которая сохранялась при осаждении частиц микрогеля на волокне и формировании покрытия. В настоящее время проводится комплексное исследование свойств полученных материалов.

Литература

1. Alqubelat, R.S., Kuznetsova, A.D., Antonov, D.O., Mironov, M.A. *Chimica Techno Acta*, 2023, **10(4)**, 202310415.
2. Mensah E.O., Alqubelat R.S., Menzorova Ya.A., Minin A.S., Mironov M.A. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, 2024, **236**, 113827.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-23-00125.

ПЕРЕРАБОТКА ЦИНКСОДЕРЖАЩИХ ПЫЛЕЙ ЧЕРНОЙ МЕТАЛЛУРГИИ С ПРОМПРОДУКТАМИ ЦВЕТНОЙ ПОДОТРАСЛИ – ПУТЬ К РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЮ

Найманбаев М.А.

*АО «Институт металлургии и обогащения», Казахстан,
050010, Алматы, ул. Шевченко, 29/133, e-mail: madali_2011@inbox.ru*

Увеличение производства цинка путем вовлечения в переработку некондиционных видов сырья является важной задачей. Содержание цинка в пыли доменных сталеплавильных печей достигает 5-7%, в пыли электросталеплавильных печей – на уровне 10-25%. Проблема переработки цинксодержащих пылей актуальна как для черной, так и для цветной металлургии.¹ Различие пирометаллургических способов извлечения цинка заключается в параметрах технологического процесса, видах используемого восстановителя и топлива и конструктивном оформлении установок.² Проведены исследования влияния на процесс восстановления цинка из окисленной цинковой руды с добавкой лежалой пыли газоочистки доменной плавки связующего при брикетировании шихты, вида и расхода восстановителя, тонины помола компонентов шихты.³ В качестве связующего при брикетировании шихты испытывали бентонит, гашеную известь и патоку. Установлено, что оптимальным связующим является патока в количестве 4,5-5,0 мас. % от массы шихты. Показано, что остаточное содержание цинка в продукте обжига при использовании спецкокса в 1,9 раз меньше, чем при использовании антрацита и 3,3 раза, чем при использовании металлургического кокса. Расход углерода при восстановлении цинка из окисленной руды с добавкой пыли снижается на 22-24%. Установлено, что измельчение шихты до класса +0,071-0,04 мкм снижает степень возгонки цинка. Высокая эффективность восстановления достигается при следующем составе шихты, мас. % : цинковая руда 53,8; пыль газоочистки доменной плавки 26,9; спецкокс 21,0; патока 5,3.

Литература

1. Леонтьев Л.И., Брянцева О.С., Дюбанов В.Г. Использование сырьевого потенциала техногенных минеральных ресурсов в условиях модернизации цинковой отрасли. Экономика региона, 2012, - №4, - с. 166-173.
2. Найманбаев М.А., Лохова Н.Г., Балтабекова Ж.А., Абишева А.Е. Анализ существующих способов переработки окисленных цинковых руд и цинксодержащих пылей доменной плавки. Вестник КазНАЕН. – 2016. – № 1, – с.55-60.
3. Найманбаев М.А., Лохова Н.Г., Балтабекова Ж.А., Баркытова Б.Н. О возможности переработки цинксодержащих пылей ЗСМК и Северстали с рудой месторождения Шаймерден. Труды конгресса Техноген-2017, г. Екатеринбург, – с. 146-151.

СОЗДАНИЕ ЗАМКНУТОГО ЦИКЛА ПОТРЕБЛЕНИЯ ЦИНКА В РФ

Митрофанов П.А., Овсянников А.О., Стушков Д.В.

ООО «Цинкум»,
307170, Курская область, г. Железногорск, Промплощадка 7, зд. 1, к. 3,
e-mail: ovsyannikov@urban-mining.eco

Потребность РФ в цинке имеет тенденцию к росту и превышает объемы производства. Дефицит покрывается за счет импорта цинка из стран СНГ.

При этом в России накоплены значительные объемы техногенного цинк-содержащего сырья в виде пылей газоочисток электросталеплавильного производства. Ежегодно в РФ образуется до 300 тыс. т пылей с содержанием цинка свыше 10%¹, переработка которых широко развита в мире.

В 2022 г. началась реализация проекта ООО «Цинкум» (Курская обл., г. Железногорск) для безотходной переработки пылей по технологии вельцевания (НДТ) на основании российских разработок и оборудования.

С 2025 г. проект будет перерабатывать свыше 100 тыс. т/г пылей и возвращать цинк в экономику в виде вторичного сырья (вельц-оксид цинка, $Zn > 70\%$), что позволит цинковым заводам увеличить извлечение цинка.²

Проект ООО «Цинкум» соответствует концепции «Urban Mining»³, включен в отраслевую стратегию Федерального проекта «Экономика Замкнутого Цикла» в РФ и позволяет «замкнуть» цикл потребления цинка:



Рисунок 1. Цикл потребления цинка в России с учетом ООО «Цинкум»

Литература

1. Леонтьев Л.И., Брянцева О.С., Дюбанов В.Г. *Экономика региона*, 2012, 4, 166.
2. Решетников Ю.В., Беляков О.В., Козлов К.М. *Цветные металлы*, 2015, 5, 36.
3. Luis Tercero Espinoza, Leon Rostek, *CRU World Copper Conference*, 2021, 4.

ТВЕРДЫЕ КОММУНАЛЬНЫЕ ОТХОДЫ В ЭКОНОМИКЕ ЗАМКНУТОГО ЦИКЛА

Озерова Е.М.

*Санкт-Петербургская ассоциация рециклинга (СПО СПАР),
Санкт-Петербург, 22 линия, д.3,
e-mail: emoz@yandex.ru*

Твердые коммунальные отходы (ТКО) являются сложной фракцией при обращении с отходами.

Целью законодательства РФ является вовлечение отходов в хозяйственный оборот. Есть несколько путей при обращении с ТКО: поготовка RDF-топлива для цементной промышленности и металлургии, рециклинг стекла, шин, пластиков. Объект исследования: обращение с твердыми коммунальными отходами, мусоросортировочные комплексы, извлечение стекла, бумаги, металлов и пластиков на мусоросортировочных комплексах, подготовка RDF-топлива. Изначально проводится изучение морфологического состава твердых коммунальных отходов, определение состава и калорийности RDF, оценка рынка применения вторичных компонентов, RDF, расчет экономических показателей вовлечения отходов на потенциальных предприятиях, в том числе стоимость оборудования на мусоросортировочных комплексах, применение RDF топлива в цементной промышленности и металлургии.

Законодательством РФ определена необходимость подготовки и применение твердого топлива, полученного из отходов, возможность применения которого закреплено в Информационно-техническом справочнике по наилучшим доступным технологиям ИТС 6-2015 «Производство цемента», утвержденного приказом Федерального агентства по техническому регулированию и метрологии от 15.12.2015 № 1576.

Эту задачу успешно реализовали группой HeidelbergCement (Хайлельберг цемент), в ПГТ Новогуровском Тульской области, и г. Стерлитамак, группой LafargeHolcim (Лафарж Цемент), площадки г. Щуровск Московской области и дер. Ферзиково Калужской области. В настоящее время над данным вопросом работает «ЦЕМРОС» (холдинг Евроцемент) площадки г. Сланцы Ленинградской области и в ПГТ Подгоренский Воронежской области. В настоящее время ведутся работы по добавлению в RDF отходов кордового текстиля, образующегося при утилизации шин.

Таким образом, происходит минимизация захоронения ТКО, только 20-30% хвостов пойдет на захоронение на полигоны, это одна из целей Экономики замкнутого цикла.

ВКЛАД ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ НАФТЕНОВЫХ КИСЛОТ В ОБРАЗОВАНИЕ ОТЛОЖЕНИЙ В НЕФТЕПРОМЫСЛОВОМ ОБОРУДОВАНИИ

Полякова Н.В., Задорожный П.А., Суховерхов С.В.

*Институт химии Дальневосточного отделения Российской Академии Наук,
690022, Владивосток, Проспект 100-летия Владивостока, 159
e-mail: polyakova@ich.dvo.ru*

Высокомолекулярные нафтенновые кислоты (ВНК) – класс четырехосновных органических кислот с M_w 1200-1400 а.е.м. Считается, что их источником в нефти являются обнаруживаемые в нефтеносных пластах микроорганизмы домена *Archaea*¹. Несмотря на низкое содержание ВНК в сырой нефти (~20 ppm)² они образуют значительное количество нерастворимых нафтенатов, преимущественно с катионами щелочноземельных металлов. Характерной особенностью таких отложений является термическая нестабильность: при повышении температуры происходит декарбоксилирование с резким увеличением объема, с образованием твердой пластикоподобной массы при застывании, что значительно осложняет эксплуатацию систем подготовки товарной нефти. Цель работы – разработка способа выделения, идентификации и количественного определения ВНК в сырой нефти и отложениях.

Для извлечения ВНК использовали системы органических растворителей с переводом анализа в кислотную либо в солевую форму. Для стабилизации ВНК проводили этерификацию. Идентификацию проводили методами ИК-спектроскопии, пи-ГХ/МС, ВЭЖХ/МС. На пирограммах ВНК преобладают сигналы разветвленных алифатических и алициклических углеводородов. ESI-МС в режиме детектирования отрицательных ионов показывает присутствие одно- и двухзарядных ионов с m/z 1230, 615, что соответствует кислоте с эмпирической формулой $C_{80}H_{142}O_8$. Метилловые эфиры ВНК дают масс-спектрометрический сигнал в режиме регистрации положительных ионов (область m/z 1306-1314). Для их разделения методом ВЭЖХ-МС использовали привитую тетраметилсилильную фазу, в качестве элюента применяли смесь метанола и изопропанола. Доля высокомолекулярных нафтенатов в отложениях составила от 1,6 до 21 % в зависимости от узла отбора образца.

Литература

1. Barros E.V., Filgueiras P.R., Lacerda V.Jr., Rodgers R.P., *Fuel*, 2022, **319**, 123775.
2. Суховерхов С.В., Полякова Н.В., Задорожный П.А. *Патент 2800377 РФ*, 2023.

Работа выполнена на оборудовании ЦКП ДВЦСИ ИХ ДВО РАН по государственному заданию № FWFN-2022-0002.

ПРОИЗВОДСТВО ВОДОРОДА В РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ: СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ

Потемкин Д.И.

*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск
e-mail: potema@catalysis.ru*

Производство водорода играет одну из ключевых ролей в российской химической промышленности, обеспечивая производство дизельного топлива, метанола, аммиака и продуктов их дальнейшей переработки. Водород производится преимущественно из природного газа в ходе многостадийного процесса с применением ассортимента катализаторов: сероочистки природного газа, первичного и вторичного реформинга, среднетемпературной и низкотемпературной паровой конверсии CO, метанирования оксидов углерода, адсорбентов сероводорода и короткоциклового адсорбции. Используемые в азотной промышленности катализаторы и адсорбенты отличаются большим разнообразием химической состава от нанесенных Ni/Al₂O₃ до смешанных оксидных Fe₃O₄Cr₂O₃ и массивных Fe(K, CaO) катализаторов.

В докладе рассмотрены объем рынка различных катализаторов современное состояние производства и разработок катализаторов и адсорбентов для производства водорода в РФ.

ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА ВЫПЛАВКИ ЧУГУНА В РОТОРНО-НАКЛОННОЙ ПЕЧИ ИЗ ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ ОТХОДОВ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКОГО ПРОИЗВОДСТВА

Просвиркин С.П.

*АО «Выксунский металлургический завод»,
607060, Выкса, Нижегородская обл., ул. Бр. Баташевых, 45
e-mail: prosvirkin_sp@vsw.ru*

В ходе разработки технологии переработки железосодержащих отходов металлургического производства были проведены лабораторные исследования и промышленные эксперименты в роторно-наклонной печи по извлечению железа из брикетированных железосодержащих отходов и углерода.

В ходе лабораторных исследований были разработаны оптимальные составы брикетов с добавлением минеральных компонентов, обеспечивающих легкоплавкость образующегося шлака, определены температурные параметры процесса и факторы, влияющие на процесс восстановления железа и его науглероживание.

В ходе проведения промышленных экспериментов в роторно-наклонной печи были отработаны режимы твердофазного восстановления железа, режимы перехода от твердофазного процесса к жидкофазному и режимы жидкофазного процесса, позволяющие достаточно эффективно разделять шлак и металл.

Проведенная работа позволила определить основные технологические параметры восстановительной плавки и технические характеристики роторно-наклонной печи для выплавки чугуна из железосодержащих отходов металлургического производства.

Литература

1. Ровин С.Л., Ровин Л.Е. Процессы жидкофазного восстановления окалины в ротационных печах// *Литье и металлургия*. 2012;(3):11-20.
2. Ровин С.Л., Ровин Л.Е., Заяц Т.М. Восстановление оксидов железа в ротационных печах// *Литье и металлургия*. 2011-№1-с.38-45.
3. О механизме жидкофазного восстановления железа твердым углеродом/ Баласанов А.В., Колесников Ю.С., Лехерзак В.Е., Усачев А.Б.// *Известия ВУЗов. Черная металлургия*. – 2005-№7. – с.5-9.
4. Кинетика жидкофазного восстановления железа дисперсным твердым углеродом/ Лехерзак В.Е., Усачев А.Б., Баласанов А.В., Колесников Ю.С.// *Известия ВУЗов. Черная металлургия*. – 2006- №7. -с.5-9.

РЕЦИКЛИНГ ОТРАБОТАННЫХ ЛИТИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ БЫТОВОЙ ТЕХНИКИ И ЭЛЕКТРОНИКИ

Соколова Ю.В.

*Акционерное общество Ведущий научно-исследовательский
институт химической технологии, 111524, г. Москва, Электродная ул., д. 2, стр. 1,
e-mail: YuVaSokolova @rosatom.ru*

Проблема утилизации отработанных литий-ионных аккумуляторов (ЛИА), которые относятся к отходам 2 класса опасности, становится все более острой. В России в настоящее время отработанные ЛИА представлены в основном, аккумуляторами из бытовой техники и электроники, но, согласно концепции развития электротранспорта в РФ, к 2030 году будут выпускаться порядка 220 тыс. электрокаров в год, а общее число транспортных средств на электротяге превысит 1,4 млн.¹. К этому времени в мире масса отработанных ЛИА составит более 600 кт/год при переработке около 45%². В 2022 году около 44 компаний в Канаде и США и 47 компаний в Европе занимались переработкой литиевых батарей или планировали их переработку; переработка ЛИА в России сейчас осуществляется в незначительных количествах.

Среди используемых методов переработки ЛИА наиболее эффективным считается гидрометаллургический, который позволяет получать фракции нержавеющей стали, пластика, графит, растворители, отдельные соединения элементов, востребованные рынком, а также прекурсоры катодных материалов.

В результате механической переработки партии смеси отработанных ЛИА бытовой техники и электроники получен концентрат (черная масса), и катодная масса. Изучены физико-химические характеристики, рассмотрены варианты вскрытия и дальнейшей переработки черной массы и катодного материала.

Литература

1. Черашев Д.В., Черашева О.Ю. Российский экономический вестник. 2023. №4. С. 88-108.
2. Latini D., Vaccari M., Lagnoni M., et al. J. of Power Sources, 2022. V. 546. 231979. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2022.231979>

Работа выполнена при финансовой поддержке АО «Наука и инновации», проект ЕОТП –МТ-492.

ИННОВАЦИОННАЯ ТЕХНОЛОГИЯ КОМПЛЕКСНОЙ ПЕРЕРАБОТКИ ХВОЙНОЙ ДРЕВЕСНОЙ ЗЕЛЕНИ В БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫЕ ВЕЩЕСТВА И МАТЕРИАЛЫ, ПРИМЕНИМЫЕ В РАСТЕНИЕВОДСТВЕ, ЖИВОТНОВОДСТВЕ И МЕДИЦИНЕ

Удоратина Е.В., Чукичева И.Ю., Хуршкайнен Т.В., Кучин А.В.

*Институт химии ФИЦ Коми научного центра Уральского отделения РАН
167000, Республика Коми, Сыктывкар, Первомайская, 48
e-mail: udoratina-ev@chemi.komisc.ru*

Использование природных соединений из растительных источников в качестве сырья для получения лекарственных препаратов, средств защиты растений и животных является мировой тенденцией последних лет. Нами разработана и реализована технология комплексной переработки древесной зелени хвойных пород с использованием эмульсионной экстракции водными растворами оснований. В технологическом цикле отсутствуют токсичные и экологически опасные реагенты. При этом в одном потоке выделяются липиды, терпеноиды и лигнотетрагидрокарбонный комплекс, а на их основе можно получить препараты для растениеводства, животноводства и медицины. В результате внедрены в производство высокоэффективные средства защиты и стимуляторы роста растений Вэрва и Вэрва-ель, кормовая добавка Вэрва. Низкомолекулярные экстрактивные компоненты растительного сырья применены в качестве платформы лекарственных препаратов для лечения и профилактики социально-значимых заболеваний. Шрот – побочный продукт экстракции древесной зелени – использован в качестве сырья для получения лигноцеллюлозных материалов и эфиров целлюлозы широкого спектра назначения.



Выполненная работа направлена на решение фундаментальной научной проблемы в области комплексного изучения перспективных технически ценных видов растений, являющихся частью природных ресурсов России, с целью создания биопрепаратов, востребованных для развития высокопродуктивного и экологически чистого агро- и лесного хозяйства, а также медицины.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-73-20091, <https://rscf.ru/project/21-73-20091/>).

ИНЖИНИРИНГ ВОДОРОДНО-ВОЗДУШНЫХ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ДЛЯ ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫХ ТРАНСПОРТНЫХ СРЕДСТВ

**Фазуллин Д.Д.¹, Маврин Г.В.¹, Панкратов Д.Л.¹,
Фардеев Л.И.², Корнилов С.В.²**

¹*Набережночелнинский институт (филиал) Казанского (Приволжского) федерального университета,
423810, г. Набережные Челны, пр. Мира, 68/19,
e-mail: fazullindd@yandex.ru*

²*Центр электроники и элементов питания ПАО «КАМАЗ»,
423827, г. Набережные Челны, пр-кт Автозаводский, д. 2*

Электромобили на топливных элементах могут внести значительный вклад в глобальное сокращение выбросов парниковых газов и загрязняющих веществ в атмосферный воздух. Многие коммерческие модели транспортных средств (ТС) на топливных элементах, обладающие средними значениями запаса хода и производительности, уже доступны на рынке ТС.

В работе приведены характеристики батарей топливных элементов для электромобилей. Исследованы рабочие характеристики малоразмерных водородно-воздушных топливных элементов для экологически безопасных транспортных средств на электрической тяге. По результатам исследования установлена зависимость плотности тока и плотности мощности топливного элемента от толщины каталитического слоя и удельной площади носителя катализатора. Проведены исследования состава и свойств образующейся воды – единственного побочного продукта работы водородно-воздушных топливных элементов, качество которой по результатам количественно-химического анализа соответствует чистой.

По результатам испытания установлено напряжение разомкнутой цепи (НРЦ) и вольтамперная характеристика (ВАХ) и плотность мощности топливных элементов. Проба воды, отобранная на выходе из топливного элемента, исследовалась методами ионной хроматографии и атомно-абсорбционной спектроскопии.

Максимальные значения плотности мощности изготовленных топливных элементов составили: 0,268 и 0,578 Вт/см² для составов каталитических чернил №1 и №2 соответственно. В результате уменьшения толщины каталитического слоя в 4,7 раза плотность тока топливных элементов увеличилась в 2,5 раза. Полученный мембранно-электродный блок по составу №2 может быть использован для изготовления батареи топливных элементов для электрохимических генераторов ТС на электрической тяге.

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ И ЭКОЛОГИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ПРОИЗВОДСТВА ИЗ ОТХОДОВ ФТОРОПЛАСТА-4 УЛЬТРА-ДИСПЕРСНОГО ПОЛИТЕТРАФТОРЭТИЛЕНА И РЕСУРСО-ЭНЕРГОСБЕРЕГАЮЩИХ МАТЕРИАЛОВ НА ЕГО ОСНОВЕ

Цветников А.К.

*ИХ ДВО РАН,
Владивосток, 690022, пр-т 100-летия Владивостока, 159
e-mail: tsvetnikov@ich.dvo.ru*

Уникальная технология получения ультрадисперсного низкомолекулярного политетрафторэтилена¹ (УНПТФЭ) из отходов фторопласта-4 (рис.1) создана на основе термоградиентного метода синтеза высших фторидов элементов². Налажен выпуск продукции на основе УНПТФЭ и ведется глубокое исследование нового полимера и его производных³.

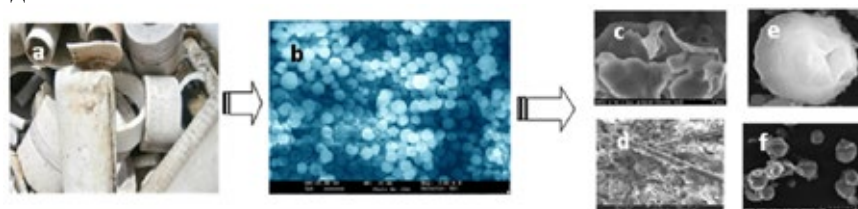


Рисунок 1. Отходы фторопласта-4 (а). СЭМ: УНПТФЭ (b), нанопленки УНПТФЭ (с), микротрубки из нанопленок УНПТФЭ (d), частица УНПТФЭ ~ 1 мкм (е), частицы вы-сокотемпературных фракций УНПТФЭ (f).

Неконтролируемая утилизация отходов фторопласта-4 может привести к образованию высокотоксичных перфторизобутилена и фторфосгена, поэтому предложенная технология не только решает экологическую проблему, но и позволяет создать новый материал, формирующий антифрикционное, противоизносное, химически стойкое, биологически инертное, гидрофобное и высокотемпературное покрытие на любой поверхности. Энергоресурсосбережение достигается тем, что в разы сни-жается износ деталей и повышаются рабочие характеристики двигателей, трансмиссий и других механизмов, существенно снижается расход топлива и смазочных масел. УНПТФЭ, фрикционно нанесенный на поверхность или введенный в состав судовых красоккратно продлевает срок службы противообрастающих покрытий подводной части судов и защищает от обледенения надводную часть⁴.

Литература

1. Цветников А.К. Патент 2035308 РФ, 1995.
2. Цветников А.К. *Вестник ДВО РАН*, 2009, 2, 18.
3. Цветников А.К., Матвеев Л.А., Машгалар Д.В., Егоркин В.С., Голуб А.В., Павлов А.Д., Масленников С.И., Николенко Ю.М. Гнеденков С.В. *Химическая технология*, 2019, 20, 626.
4. Цветников А.К. *Вестник ДВО РАН*, 2021, 5, 79.

СИСТЕМА ОЦЕНКИ ПОКАЗАТЕЛЕЙ НАДЕЖНОСТИ ОБОРУДОВАНИЯ ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ ОБЪЕКТОВ

Швецова-Шиловская Т.Н., Иванов Д.Е., Громова Т.В.

ФГУП «ГосНИИОХТ»,
111024, Москва, шоссе Энтузиастов, 23,
e-mail: tn56@narod.ru

Эксплуатация производственных объектов сопряжена с возможностью возникновения аварийных ситуаций. Объективная невозможность полностью исключить аварии, происходящие во всем мире на опасных производственных объектах, выявила существенную роль и значимость научных разработок теории безопасности производственных объектов и привела к развитию нового научного направления – управление техногенной опасностью. Одной из важных проблем новой науки важной и актуальной является проблема безопасности и надежности оборудования промышленных производственных объектов, которая является многоаспектовой и мультидисциплинарной.^{1,2}

Производственные объекты включают химико-технологические системы, отличающиеся количеством и разнотипностью оборудования, сложностью алгоритмов управления. Проблема безопасности и надежности оборудования промышленных производственных объектов является комплексной, охватывает все этапы жизненного цикла оборудования и рассматривается с позиции системно-целостного подхода.

Создана система оценки показателей надежности, готовности и ремонтпригодности и прогноза остаточного ресурса технологического оборудования химических объектов, позволяющая оценивать надежность оборудования и разрабатывать программу мероприятий по обеспечению безопасности объектов. Система включает модели и методы анализа надежности систем сложной структуры, информационное, алгоритмическое, программное обеспечение, а также технологии сопряжения с зарубежными (Relex) и отечественными (АРБИТР) программными комплексами.

Практическое применение системы показало ее эффективность при построении высоконадежных, безопасных технологических систем, которые должны удовлетворять и требованиям конкурентоспособности на рынке.

Литература

1. Методическое и программное обеспечение для оценки надежности и безопасности функционирования химико-технологического оборудования: монография / Швецова-Шиловская Т.Н., Кондратьев В.Б., Горский В.Г. и др. М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2016. – 370 с.
2. Швецова-Шиловская Т.Н., Горский В.Г., Терещенко Г.Ф., Шаталов А.А. Частотный анализ – Смоленск, Ойкумена, 2004. – 208 с.

РАЗРАБОТКА ЭФФЕКТИВНЫХ ЭКОЛОГИЧЕСКИ БЕЗОПАСНЫХ ПРОТИВООБРАСТАЮЩИХ ПОКРЫТИЙ

**Шилова О.А.,^а Халаман В.В.,^{а,б} Комендантов А.Ю.,^б
Вошиков В.И.,^а Глебова И.Б.,^а Горшкова Ю.Е.,^в Соколов Г.С.,^а
Кондратенко Ю.А.,^а Кочина Т.А.^а**

^а*Институт химии силикатов им. И.В. Гребениčkова - НИЦ Курчатовский институт,
199034, Санкт-Петербург, набережная Макарова, 2,
e-mail: olgashilova@bk.ru*

^б*Зоологический институт Российской академии наук,
199034, Санкт-Петербург, Университетская набережная, 1*

^в*Объединенный институт ядерных исследований,
141980, Московская область, Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6*

Проблема предотвращения морского биообрастания волнует человечество на протяжении сотен лет, со времени зарождения мореплавания. Одним из наиболее распространённых методов защиты являются противообрастающие покрытия. Однако до настоящего времени нет идеальных способов защиты от этого природного явления. В докладе будут рассмотрены современные мировые тенденции по разработке противообрастающих покрытий. В последние годы особое внимание стало уделяться защите окружающей среды, в частности, выбору экологически безопасных биоцидных добавок, придающих покрытиям противообрастающие свойства.¹ 1-3 Будут представлены результаты многолетних натурных стендовых испытаний, проведенных на Беломорской биологической станции «Картеш», расположенной в Карелии, в губе Чупа Кандалакшского залива Белого моря, в 30 км от Северного полярного круга.¹⁻³ Будет обсуждаться влияние на степень обрастания следующих факторов: природы связующих (виниловых олигомеров, эпоксидной смолы, акрилатов и их аддуктов); состояния поверхности, эффектов выщелачивания и самополирования; природы биоцидных добавок: микро- и наночастиц оксидов, атранов, комплексных соединений металлов, в т.ч. на пористом носителе, природного антифоулянта (экстракта морской губки *Halichondria panicea*); видов обрастателей. Будут обоснованы перспективные направления исследований.

Литература

1. Шевченко В.Я., Шилова О.А., Кочина Т.А., Барина Л.Д., Белый О.В. *Вестник Российской академии наук*, 2019, 89, 593.
2. Шилова О.А., Раилкин А.И., Ефимова Л.Н., Шевченко В.Я. *Патент 2606777 РФ*, 2015.
3. Кочина Т.А., Кондратенко Ю.А., Шилова О.А., Власов Д.Ю. *Физикохимия поверхности и защита материалов*, 2022, 58, 86.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ВНУТРИПЛАСТОВОЙ ВОДОИЗОЛЯЦИИ НЕФТЕДОБЫВАЮЩИХ СКВАЖИН МЕТОДОМ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Якубов Р.Н.

*ФГБОУ ВО Уфимский государственный нефтяной технический университет,
ул. Космонавтов, 1, Уфа, 450062, РФ,
e-mail: rav_rb@bk.ru*

Технологические процессы водоизоляционных работ в добывающих скважинах являются сложной, но крайне актуальной задачей. Для ограничения притока воды и контроля профиля притока могут применяться эмульсионные системы, гидрогелевые композиции, пенные системы, смолы и др. Для повышения эффективности таких работ широко распространено применение математического моделирования.

Ранее авторами была разработана модель технологического процесса водоизоляционных работ.¹ Модель отличается от ранее представленных прогнозированием не только размещения водоизолирующих составов в ПЗП и изменения фильтрационно-емкостных характеристик горной породы, но и динамики дебитов по нефти и воде при последующей эксплуатации скважины, за счет изменения направления фильтрационных потоков в околоскважинной зоне пласта и деградации блокирующего экрана. Дальнейшее совершенствование модели связано с моделированием реологических структурно-механических свойств водоизолирующих композиций и их поведения в пористой среде и трещинах продуктивного коллектора, что позволяет не только повысить успешность прогнозирования стартовых показателей скважины для заданного режима работы, но и динамики её последующего обводнения. В модели учитываются результаты реологических и фильтрационных исследований составов, а именно – зависимости фактора остаточного сопротивления от градиента давления в призабойной зоне пласта, напряжения сдвига от скорости сдвига, а также величина модуля упругости состава.

Литература

1. Мешалкин В.П., Якубов Р.Н., Ленченкова Л.Е., Челноков В.В. Доклады Российской академии наук. Химия, науки о материалах, 2021, 501, 37-42.

Исследование выполнено в рамках реализации стратегического проекта «Новые технологические решения в ТЭК». Научно-исследовательский проект «Разработка технологии кислотного воздействия с внутрипластовым отклонением с целью выравнивания профиля притока в карбонатных коллекторах»

ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ БАКАЛЬСКИХ СИДЕРИТОВ В МЕТАЛЛУРГИИ ЧУГУНА

Вусихис А.С., Леонтьев Л.И., Агафонов С.Н.

*Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук,
620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 101,
e-mail: vas58@mail.ru*

Доля местного железорудного сырья металлургических предприятий Уральского региона составляет 50-60 %. Остальное завозится из Центральной России, Кольского полуострова и Казахстана. Вопрос замены привозного сырья на местное, более дешевое, является весьма актуальным. Однако, из 50 месторождений железных руд Урала эксплуатируется менее половины, а интенсивность добычи на них часто не совпадает с возможностями. В частности, добыча сидеритовой железной руды Бакальского месторождения (Южный Урал), запасы которой составляют около 1 млрд т во много раз меньше, чем это позволяют горно-геологические условия, что связано с незначительным спросом на это сырье из-за низкого качества. Высокое содержание в руде оксида магния делает затруднительным или невозможным ведение доменной плавки с использованием более 20 % сидеритов в шихте. Шлаки, содержащие более 20 % MgO, являются короткими и тугоплавкими.

Доля сидеритов в шихте, может быть увеличена до 40-50 % если в нее дополнительно ввести 3 % борного ангидрида. Образующиеся в процессе плавки шлаки будут длинными и устойчивыми. При температуре на выпуске (1450-1500 °С) их вязкость не превышает 0,5 Па·с, плавно увеличиваясь до 2,5 Па·с при температурах около 1150 °С. В результате плавки получается чугун, легированный бором.

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН с использованием оборудования ЦКП «Урал-М».

ОЦЕНКА ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ СОВМЕСТНОГО КАРБОТЕРМИЧЕСКОГО ВОССТАНОВЛЕНИЯ ИЛЬМЕНИТОВОГО И ПЕРОВСКИТОВОГО КОНЦЕНТРАТОВ

**Агафонов С.Н., Удоева Л.Ю., Вусихис А.С.,
Леонтьев Л.И., Крылов А.А.**

*Институт металлургии УрО РАН,
620016, Екатеринбург, ул. Амундсена, 101,
e-mail: AgafonovS@yandex.ru*

Преимущества предлагаемой совместной переработки ильменитового и перовскитового сырья пирометаллургическим способом заключаются в возможности в рамках одной технологии получать богатые титановые шлаки из концентратов разного типа руд и избирательно переводить редкоземельные металлы в шлак, а редкие – в металлическую фазу, отделяя их от титана.

Согласно полученным термодинамическим моделям, процесс совместного восстановления ильменитового (ИК) и перовскитового (ПК) концентратов протекает с образованием железного сплава и высокотитанистого шлака (более 70% TiO_2). Состав продуктов плавки зависит от температуры и расхода углерода. При стехиометрически необходимом количестве углерода возможен полный переход ниобия в металлическую фазу (чугун) в виде карбида. При соотношении ПК/ИК $<0,5$ можно ожидать образование шлаков с содержанием TiO_2 более 80%, но концентрация извлекаемого в сплав Nb будет низкой, а содержание в шлаке РЗЭ сократится в несколько раз по сравнению с исходным в ПК. При соотношении ПК/ИК равном 1.0, температуре 1500 °С и расходах углерода выше стехиометрически необходимого для полного восстановления железа можно получить богатый по титану шлак (62-74% TiO_2) и полностью перевести в сплав весь ниобий и тантал в виде карбидов (3,4% NbC и 0,06% TaC).

В результате экспериментальной проверки термодинамических моделей карботермического восстановления титановых концентратов показана возможность их использования для прогнозирования состава продуктов взаимодействия и оптимизации режимных параметров процесса – температуры, расхода реагентов, соотношения ИК и ПК при совместной переработке.

Совместная переработка титаносодержащих руд, позволит повысить экологическую и экономическую эффективность новых и существующих способов переработки минерального и техногенного сырья тяжелых цветных металлов и титана в России.

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН (№ госрегистрации темы: 122020100404-2)..

РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ И ПРИМЕНЕНИЯ ЗЕРНОВЫХ ПАТОК В РАЦИОНАХ ПРОДУКТИВНЫХ ЖИВОТНЫХ

Аксенов В.В., Зайцев В.И.

*Институт химии твердого тела и механохимии Сибирского Отделения Российской Академии Наук,
630090, Новосибирск, Кутателадзе 18,
e-mail: padova2008@yandex.ru*

На данный момент агрономические хозяйства Российской Федерации столкнулись с проблемой профицита зерновых культур, связанных с рекордными урожаями последних лет, а также санкционными ограничениями экспорта. С другой стороны, в животноводческих предприятиях наблюдается хронический дефицит углеводов в рационах продуктивных животных – от 40 % до 70 %, что является одной из причин снижения рентабельности ведения данного бизнеса.¹

Одним из путей решения данной проблемы является переработка зерна на кормовые энергетические ингредиенты, содержащие 25–32% легкоусвояемых углеводов. Кормовые энергетические ингредиенты подходят для использования в рационах всех видов животных: «жидкие» – для коров, лошадей, коз, овец; «влажные» для свиней, телят, гусей, уток; «сухие» для бройлеров, несушек, индюшек. Технология внедрена в ряде хозяйств РФ и ЕС. Имеет широкий типоразмерный ряд технологической линии: от 60 кг до 70 т и более продукции в сутки. Обладает техническим и технологическим суверенитетом. Статус – импортоопережение.

Литература

1. Ширина Н. М. Животноводство и кормопроизводство. 2018. №1. С. 123–124.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки, проект №122011700261-3.

ЭКОЛОГИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ПЕРЕРАБОТКИ СУЛЬФИДНЫХ МОЛИБДЕНОВЫХ КОНЦЕНТРАТОВ

Алешин Д.С., Танутров И.Н., Крашенинин А.Г., Гаврилов А.С.

*Институт металлургии Уральского отделения Российской Академии Наук,
620016, Екатеринбург, Амундсена, 101,
e-mail: dmitriy.aleshin1@yandex.ru*

В институте ИМЕТ УРОРАН продолжаются исследования по разработки экологически чистой технологии извлечения молибдена из сульфидных концентратов. Одним из главных этапов производство молибдена является окислительный обжиг, в процессе обжига в атмосферу выделяется опасный газ SO_2 . Авторами исследовано два метода снижения серы в концентрате и газовой фазе.

В качестве одного из способов снижения серы в исходном сульфидном концентрате рассмотрено биовыщелачивание бактериями *Acidithiobacillus ferrooxidans*. Исходный сульфидный концентрат в основном состоит из 37% Mo, 35,4% S, 5% Fe по массе. В результате биовыщелачивания часть серы переходит в раствор, образуя серную кислоту. Однако при длительной продолжительности процесса в раствор начинает переходить молибден.

В другом варианте концентрат смешивается с гидроксидом кальция и обжигается при $T = 600^\circ\text{C}$, $\tau = 120$ мин. Основными фазами в полученном огарке являются CaMoO_4 и CaSO_4 рис. 1.

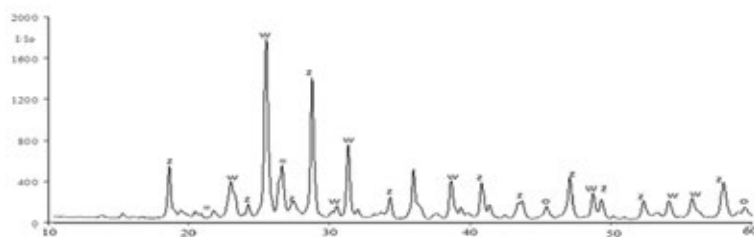


Рисунок 1. Фазовый состав огарка = - SiO_2 , x - CaSO_3 , v- MoS_2 ,
o- $\text{Mg}(\text{Al,Fe})\text{O}_4$, w- CaSO_4 , z - CaMoO_4

В процессе окислительного обжига полностью отсутствует выделение SO_2 , также отпадает необходимость подачи дополнительного воздуха в печь, за счет использования $\text{Ca}(\text{OH})_2$.

ПОЛУЧЕНИЕ МИКРО-И МЕЗОПОРИСТЫХ АЛЮМОСИЛИКАТОВ В ПРИСУТСТВИИ ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ

**Арефьева О.Д.,^{а,б} Ковехова А.В.,^{а,б} Петин В.С.,^а
Шишелов А.Ф.,^а Цветнов М.А.,^а Панасенко А.Е.^б**

^аДальневосточный федеральный университет
690922, Приморский край, г. Владивосток, о. Русский, п. Аякс, 10
e-mail: arefeva.od@dvfu.ru

^бИнститут химии ДВО РАН
690022, г. Владивосток, пр. 100-летия Владивостока, 159

Темплатный синтез является перспективным методом получения мезопористых материалов, позволяющих контролировать диаметр пор и площадь поверхности.¹ Пористая структура задается путем выбора соответствующего темплата, который служит центром, вокруг которого организуются основные структурные единицы матрицы и формируется каркас. Одним из наиболее распространенных неиногенных полимеров является гидрофильный полимер полиэтиленгликоль (ПЭГ), который в зависимости от молекулярной массы и концентрации способен формировать трехмерные структуры в водных растворах.

Цель настоящего исследования – получение образцов алюмосиликата калия из шелухи риса темплатным синтезом с применением ПЭГ-6000.

В работе были получены образцы алюмосиликата калия Al(K)-x (где x= 5; 10; 15; 20 ммоль/л ПЭГ). В качестве источника кремния использовали солому риса (*Oryza sativa*).

Установлено, что с увеличением концентрации ПЭГ структура материала становится более выраженной и четкой. Наиболее структурированным являлся образец с концентрацией ПЭГ 20 ммоль/л. Визуально определенные границы между частицами указывают на организованный характер поверхности. Поверхность образца имеет губчатую структуру, состоящую из частиц неправильной формы.

Изучение структурных характеристик образцов алюмосиликатов калия по низкотемпературной адсорбции азота, показало, что введение структуроуправляющего агента ПЭГ-6000 приводит к уменьшению удельной поверхности и увеличению доли пор с большим размером.

Литература

1. Филиппова Е.О., Виноградов К.Ю., Шафигулин Р.В., Буланова А.В. *Сорбционные и хроматографические процессы*, 2020, **20**, 696.

Работа выполнена в рамках государственного задания Института химии ДВО РАН (FWFN(0205)-2022-0002).

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ СВЕРХКРИТИЧЕСКОЙ ФЛЮИДНОЙ ЭКСТРАКЦИИ ДЛЯ ВЫДЕЛЕНИЯ ЦЕННЫХ КОМПОНЕНТОВ ИЗ РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ

Артемьев А.И., Демкин К.М., Меньшутина Н.В., Панфилов В.И.

*Российский химико-технологический университет им. Д.И.Менделеева,
Миусская площадь, д. 9, стр. 1, Москва
e-mail: artemev.a.i@muctr.ru*

Разработка и масштабирование технологической схемы сверхкритической флюидной экстракции (СКФЭ) позволяет прогнозировать работу оборудования [1]. С помощью пакета программ ChemCad разработана модель технологической схемы лабораторной установки СКФЭ для получения биологически активных веществ – флавоноидов – из плодово-ягодного растительного сырья.

Подобраны процессные модули и модели аппаратов для отображения технологической схемы процесса СКФЭ. Применяемые процессные модули точно описывают поведение сверхкритического флюида при процессе СКФЭ и отображают процесс растворения целевых компонентов в потоке экстрагента. Прогнозирование поведения процесса СКФЭ нацелено на решение проблемы построения системы регулирования сложного химико-технологического оборудования. На основании данных моделей построены фазовые диаграммы трехкомпонентной системы «этанол – вода – диоксид углерода» при 323,2 К.

В процессе моделирования рассмотрены технологические потоки в аппарате, рассчитаны энергетические затраты на теплообменные процессы и требуемую мощность оборудования.

На основании модели технологической схемы лабораторной установки проведено масштабирование на полупромышленную установку для проведения процесса сверхкритической экстракции с целью ресурсосбережения путем рецикла и рекуперации диоксида углерода. Разработанная схема позволила определить технические параметры проведения процесса и рассчитать энергетические затраты на работу оборудования.

Литература

1. Кафаров В.В. Системный анализ процессов химической технологии: основы стратегии. – М.: Издательство Юрайт, 2024. – 499с.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект №24-19-00298.

ОПТИМИЗАЦИЯ МЕМБРАННО-АБСОРБЦИОННОГО МЕТОДА УЛАВЛИВАНИЯ ДИОКСИДА УГЛЕРОДА С ТОЧКИ ЗРЕНИЯ КОНФИГУРАЦИИ АППАРАТА И СОСТАВА АБСОРБЕНТА

**Атласкин А.А., Атласкина М.Е., Крючков С.С.,
Степакова А.Н., Смородин К.А., Воротынцев И.В.**

*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
125047, Москва, Миусская площадь, д. 9, стр. 1
e-mail: vorotyntsev.i.v@muctr.ru*

В настоящее время повсеместно применяемой технологией удаления и улавливания кислых газов является химическая абсорбция с применением водных растворов аминспиртов. Несмотря на то, что этот процесс активно применяется, он имеет ряд недостатков, таких как потеря абсорбента в связи с его деградацией и образование химически активных веществ. Кроме того, этот подход характеризуется высокой энергоемкостью, обусловленной, главным образом, стадией регенерации абсорбента, и высокими капитальными затратами вследствие сложного аппаратного оформления и больших габаритов.

Настоящее исследование посвящено продолжению разработки, усовершенствованию и оптимизации нового гибридного метода разделения – мембранно-абсорбционного газоразделения, который предназначен для удаления кислых газов. В рамках работы была предложена новая конфигурация мембранно-абсорбционного газоразделительного модуля на основе полых волокон.

Основной особенностью мембранно-абсорбционного газоразделительного модуля, используемого в настоящем проекте, является применение комбинированной системы из двух типов полых волокон. В такой конфигурации модуля, газоразделительное полое волокно размещается внутри ультрафильтрационного волокна и используется для удаления непрерывно десорбируемого газа из жидкости. Использование газоразделительной мембраны с непористым селективным слоем позволяет избежать протечек используемой жидкости и вносит дополнительный вклад в общую селективность процесса. Таким образом, жидкий абсорбент расположен в замкнутом объеме между двумя полыми полимерными волокнами, через одно из которых подаваемая газовая смесь контактирует с жидким абсорбентом, а через другое удаляется абсорбированный компонент.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10288.

ГИБРИДНЫЙ ЭНЕРГОЭФФЕКТИВНЫЙ МЕТОД - МЕМБРАННО-АБСОРБЦИОННОЕ ГАЗОРАЗДЕЛЕНИЕ ДЛЯ ЗАДАЧ УДАЛЕНИЯ И УЛАВЛИВАНИЯ КИСЛЫХ ГАЗОВ

**Атласкин А.А., Атласкина М.Е., Крючков С.С.,
Степакова А.Н., Смородин К.А., Воротынцев И.В.**

*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
125047, Москва, Миусская площадь, д. 9, стр. 1
e-mail: vorotyntsev.i.v@muctr.ru*

В настоящее время повсеместно применяемой технологией удаления и улавливания кислых газов является химическая абсорбция с применением водных растворов аминспиртов. Несмотря на то, что этот процесс активно применяется, он имеет ряд недостатков, таких как потеря абсорбента в связи с его деградацией и образование химически активных веществ. Кроме того, этот подход характеризуется высокой энергоемкостью, обусловленной, главным образом, стадией регенерации абсорбента, и высокими капитальными затратами вследствие сложного аппаратного оформления и больших габаритов.

Разработанный метод мембранно-абсорбционного газоразделения направлен на повышение эффективности процесса улавливания и удаления кислых газов за счет применения энергоэффективного и высокоселективного гибридного метода. Это процесс газоразделения, реализующийся в непрерывном стационарном режиме под действием перепада давления, включает абсорбцию газа жидким абсорбентом, расположенным на поверхности газоразделительной мембраны. Условно процесс можно разделить на несколько этапов: ввод газовой смеси непосредственно в слой абсорбента, абсорбция кислых газов, диффузия газа через толщу абсорбента, десорбция с обратной стороны и перенос газа через высокопроницаемую полимерную мембрану. В таком процессе селективность, главным образом, обеспечивается жидким абсорбентом, а производительность - высокопроницаемой полимерной мембраной.

В результате разделения восьмикомпонентной смеси, имитирующей природный газ, удалось снизить концентрацию диоксида углерода с 5.40 до 0.07 мол. %. Концентрация сероводорода была снижена шестикратно (с 1.39 до 0.23 мол. %). Таким образом, достигнутый состав потока ретентата удовлетворяет требованиям ГОСТ 5542-2022 в части содержания диоксида углерода в товарном природном газе.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10288.

ВЛИЯНИЕ АНТИОКСИДАНТОВ НА УСТОЙЧИВОСТЬ РАПСОВОГО МАСЛА ВЫСОКОВОЛЬТНОГО ЭЛЕКТРОБОРУДОВАНИЯ К ОКИСЛЕНИЮ

**Багавеев А.М.,^а Ахмадуллин Р.М.,^б
Мусин Л.И.,^б Файзуллин И.З.^а**

^аКазанский Национальный Исследовательский Технологический Университет,
420015, Казань, ул. Карла Маркса, 68, e-mail: office@kstu.ru

^бООО «НТЦ «Ахмадуллины»

Исследована возможность замены минерального трансформаторного масла на растительное масло, с добавкой антиоксидантов.

Таблица 1. Испытание образцов на стабильность против окисления.

Вид масла	Количество АО, %	Содержание летучих низко-молекулярных кислот, мг КОН/1 г масла	Кислотное число, мг КОН/1 г масла	Содержание осадка, %
Рафинированное рапсовое масло без антиоксидантов	-	5,990	5,105	0,2770
Трансформаторное масло MIDEL eN 1204 Fluid, CAS 68956-68-3	*	3,630	3,840	0,0054
Рапсовое масло с АО: ОМ АГ-2 БФ-5	0,083 0,083 0,083	4,635	4,200	0,0306
Рапсовое масло с АО: ОМ АГ-2 БФ-5	0,167 0,167 0,167	2,870	3,665	0,0008
Рапсовое масло с АО: ОМ АГ-2 БФ-5	0,333 0,333 0,333	3,150	3,750	0
Рапсовое масло с АГ-2	0,5	3,790	4,190	0
Рапсовое масло с ОМ	0,5	2,740	3,660	0,0072
Рапсовое масло с БФ-5	0,5	2,220	3,290	0,0009
Рапсовое масло с ТТБФФ	0,5	3,060	3,570	0,0424

*Количество и вид АО неизвестны.

Результаты, полученные при исследовании окисления рапсового масла, могут быть использованы при разработке технологии приготовления трансформаторных масел на основе растительного сырья. Таким образом, в перспективе возможно замещение трансформаторного масла MIDEL eN 1204 Fluid на отечественное трансформаторное масло, изготовленное с добавлением антиоксиданта БФ-5.

СИНТЕЗ ХЛОРИРОВАННОГО ФТАЛОЦИАНИНА КОБАЛЬТА

**Багавеев А.М.,^а Ахмадуллин Р.М.,^б
Мусин Л.И.,^б Файзуллин И.З.^а**

^аКазанский Национальный Исследовательский Технологический Университет,
420015, Казань, ул. Карла Маркса, 68, e-mail: office@kstu.ru

^бООО «НТЦ «Ахмадуллины»

На сегодняшний день в нефтеперерабатывающей отрасли существует потребность в разработке отечественных катализаторов регенерации щелочного раствора, содержащего меркаптиды. Наиболее высокую активность при регенерации сернисто-щелочных стоков проявляет фталоцианин кобальта и его производные.

Цель работы заключается в синтезе низкохлорированного сульфотфалоцианина кобальта для регенерации щелочного раствора. После синтеза продукт анализировали на каталитические свойства в реакции окисления изопропилмеркаптида натрия в сравнении с тетрасульфотфалоцианином кобальта (ТСФК), американским катализатором марки «Metrox» и товарным дихлордисульфотфалоцианином кобальта (ДХДСФЦК). Полученный продукт в соотношении 1:4 (МНСФК:СФМ) проявлял каталитическую активность на уровне товарного ДХДСФЦК.

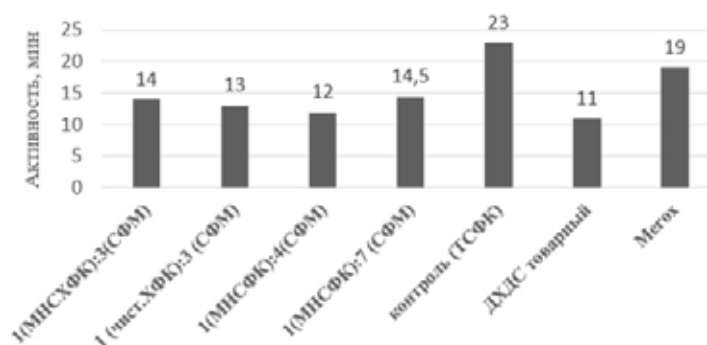


Рисунок 1. Зависимость активности ФЦК от концентрации МНСФК

Судя по анализу ЯМР спектров, полученных образцов моновалентной соли 4-хлорфталевоуксусной кислоты, химические сдвиги дублетов 7.03-7.07; 7.12-7.14 и 7.29-7.31 относятся к хлорпроизводному фталата натрия.

Работа выполнена при финансовой поддержке ООО «НТЦ «Ахмадуллины»

ПРЕДОТВРАЩЕНИЕ ДЕГРАДАЦИИ АМИННЫХ АБСОРБЕНТОВ ГАЗООЧИСТКИ И ОБРАБОТКИ ДЫМОВЫХ ГАЗОВ: ВОЗМОЖНОСТИ ДЛЯ МЕМБРАН

**Баженов С.Д.,^а Грушевенко Е.А.,^а Калмыков Д.О.,^а
Широких С.А.,^а Волков А.В.,^а Шутова А.А.^б**

*^аИнститут нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН,
119991, Москва, Ленинский пр-т 29,
e-mail: sbazhenov@ips.ac.ru*

^бООО «Реокат», 141075, Московская обл., г. Королев, ул. Декабристов 8

Абсорбция CO_2 алканаминами – технология, которая широко используется для очистки природного газа и может быть легко внедрена на промышленных предприятиях для предотвращения выбросов CO_2 . Недостатком технологии является деградация абсорбентов в присутствии O_2 , которая ускоряется при повышенных температурах десорбции CO_2 . При окислительной деградации образуется смесь продуктов – карбоновых кислот, амидов, альдегидов, аммиака, и т.д. Взаимодействие амина с образующимися кислотами приводит к образованию термостабильных солей (ТСС), интенсифицирующих процессы коррозии. Первым направлением увеличения срока службы абсорбента является удаление продуктов деградации. Коллективом ИНХС РАН реализован цикл фундаментальных исследований мембранной фильтрации и электродиализной очистки абсорбентов от ТСС. В результате ИНХС РАН и ООО «Реокат» разработана демонстрационная мобильная контейнерная установка для промышленной очистки аминных абсорбентов производительностью 2,5 м³/ч. Второе направление борьбы с деградацией – удаление растворенного O_2 из абсорбентов перед термической регенерацией (деоксигенация абсорбента). Этот процесс может быть реализован в компактных и модульных полволоконных мембранных контакторах «газ-жидкость». Коллективом ИНХС РАН разработаны композиционные мембраны и продемонстрирована эффективность контакторов при деоксигенации модельного абсорбента на основе моноэтаноламина. Оценена площадь мембран, требуемых для системы по улавливанию CO_2 из дымовых газов с расходом абсорбента 120 м³/ч. В докладе будут представлены результаты мембранных разработок в обоих направлениях.

Часть работы (первые и пилотные результаты электродиализной очистки абсорбентов) реализована в рамках программы FP7 ЕС по соглашению № 295645 (OCTAVIUS). Часть работы (мембранная фильтрация и электродиализ промышленных абсорбентов; научное сопровождение и авторский надзор демо-установки) выполнена в рамках госзадания ИНХС РАН (FFZN-2022-0004 Улавливание и утилизация углекислого газа, № 123012300040-4). Мембранная оксигенация реализована на базе ИНХС РАН при финподдержке Российского научного фонда в рамках проекта № 21-79-10400. СДБ, ДОК и САШ выражают благодарность РНФ за поддержку.

НОВЫЕ ПОЛИИМИДЫ ДЛЯ МЕМБРАННОГО ГАЗОРАЗДЕЛЕНИЯ В АММИАЧНОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

**Баженов С.Д.,^а Матвеев Д.Н.,^а Анохина Т.С.,^а
Борисов И.Л.,^а Шалыгин М.Г.,^а Белов Н.А.,^а Banerjee S.^б**

^а*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН,
119991, Москва, Ленинский пр-т 29,
e-mail: sbazhenov@ips.ac.ru*

^б*Indian Institute of Technology, Kharagpur, West Bengal 721302, India*

Производство аммиака – это многотоннажный промышленный процесс. Для повышения его эффективности широко распространено извлечение водорода из продувочных газов и возврат H_2 в производственный цикл. С другой стороны, переход к низкоуглеродной энергетике предполагает развитие водородной инфраструктуры, и одним из её компонентов является разработка безопасных методов хранения и транспортировки H_2 . Аммиак считается перспективным носителем H_2 благодаря его легкой сжижаемости и относительно высокой емкости по H_2 . Каталитическое разложение NH_3 приводит к образованию смесей H_2/N_2 и H_2/NH_3 , разделение которых требуется для получения высокочистого водорода. Для извлечения и очистки H_2 перспективно мембранное газоразделение. Этот подход обладает рядом преимуществ: модульностью, компактностью, простотой эксплуатации, обслуживания и масштабируемости. Мембраны на основе полиимидов обладают значительным потенциалом благодаря удачному комплексу свойств (высокая механическая прочность, высокая химическая стабильность, относительно высокая проницаемость и селективность по H_2). Один из подходов к направленному синтезу полиимидов с требуемыми транспортными и разделительными свойствами предполагает введение в структуру полимера объемных заместителей. Однако этот метод часто приводит к увеличению проницаемости при резком снижении селективности, что исключает применение таких материалов для мембранного газоразделения. Выбор заместителей, которые улучшают свойства полиимидов, является важным и актуальным с фундаментальной и практической точек зрения. Введение фосфорсодержащих групп улучшит их растворимость в органических растворителях, что важно для производства мембран. Кроме того, высокая огнестойкость этих материалов вносит значительный вклад в обеспечение безопасности процессов с их использованием. Таким образом, в докладе будут представлены первые результаты проекта по созданию новых полиимидов и газоразделительных мембран на их основе для разделения H_2 -содержащих смесей аммиачной промышленности.

Работа выполнена на базе ИНХС РАН при финансовой поддержке Российского Научного Фонда в рамках проекта № 24-49-02058, <https://rscf.ru/en/project/24-49-02058/>

ФРАКЦИОНИРОВАНИЕ БИОМАССЫ БУРЫХ ВОДОРОСЛЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АЛКИЛИМИДАЗОЛИЕВЫХ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ

Белесов А.В., Львова Д.А., Косяков Д.С.

*Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова,
163002, Архангельск, наб. Северной Двины 17,
e-mail: a.belesov@narfu.ru*

Арктические бурые водоросли считаются перспективным источником биологически активных субстанций в виде полисахаридов, полифенолов и низкомолекулярных вторичных метаболитов в промышленных масштабах. Существующие технологии их переработки направлены в основном на выделение полисахаридов и связаны с использованием опасных растворителей.

В настоящей работе предложен «зеленый» подход к фракционированию биомассы бурых водорослей, основанный на растворении в ионных жидкостях (ИЖ) с катионом 1-бутил-3-метилимидазолия (bmim) с последующим последовательным осаждением полисахаридов и полифенолов ацетоном и водой, соответственно.

С помощью ИК-Фурье и ЯМР-спектроскопии, а также эксклюзионной хроматографии и моносахаридного анализа изучено влияние природы катиона ИЖ, температуры и продолжительности обработки на процесс растворения биомассы водорослей (*Fucus vesiculosus*), выход фракций и их химический состав. Показано, что использование ацетата bmim обеспечивает практически полное растворение растительного сырья после 24 ч обработки при 150 °С и раздельное выделение смеси полисахаридов (альгинатов, целлюлозы и фукоидана) и полифенолов (флортанинов) с выходами ~40 и ~10% соответственно. Практически количественное выделение полифенольной фракции со средневзвешенной молекулярной массой 10–20 кДа достигается даже в мягких условиях (80–100 °С). Эффективное выделение полисахаридов требует жестких условий. Повышение температуры способствует увеличению содержания фукоидана в полисахаридной фракции.

Проведенное концептуальное исследование открывает перспективы для разработки новых подходов к валоризации биомассы водорослей с целью экологически устойчивого производства различных продуктов с добавочной стоимостью.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-23-20092,
<https://rscf.ru/project/24-23-20092/>*

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ТРАВЛЕНИЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОСТАТОЧНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ В ТРУБАХ

Шимов Г.В., Бушуева Н.И., Логинов Ю.Н.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
ул. Мира, д. 19, г. Екатеринбург, Россия, 620002,
e-mail: n.i.bushueva@urfu.ru

Метод послойного травливания слоев металла с последующим определением упругих реакций тела и косвенной оценки остаточных напряжений известен в классической научной литературе^{1,2}. В работе метод применялся для расчета остаточных напряжений в стенке труб 16x1,5 из стали 08X18H10T. Выбран состав электролита и сила тока для равномерного травливания и получения гладкой поверхности трубы.



Рисунок 1. Сборка стенда электрохимического травления: 1 – зажим; 2 – стеклянный стакан со стальной лентой; 3 – выпрямитель, 4 – подготовленный образец

В качестве электролита использовался раствор кислот, содержащий H_3PO_4 – 85%, Cr_2O_3 – 13% (в граммах) и H_2SO_4 – 2%. Установлено, что для достижения качественной поверхности следует использовать ток не более 1-2 А, поскольку при большой скорости травления возможно вытравление границ зерен с не равномерным снятием слоя металла.

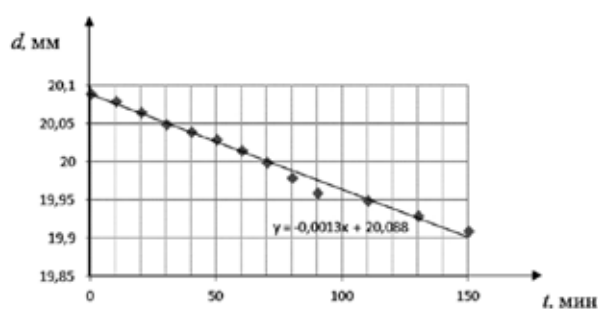


Рисунок 2. Изменение диаметра образца в процессе травления

В результате по выбранному режиму были проведены эксперименты на партии труб с расчетом распределения остаточных напряжений по стенке³.

Литература

1. Биргер И. А. Остаточные напряжения. М.: Машгиз, 1963. 232 с.
2. Буркин С. П., Логинов Ю. Н., Тропотов А. В. [и др.] Достижения в теории и практике трубного производства: материалы 1-й Российской конференции по трубному производству «Трубы России - 2004», [Екатеринбург, 10-12 марта 2004 г.]. Издательство Уральского государственного технического университета, 2004. с. 87–97.
3. Shimov, G. V. Rapid Method for Determining the Distribution of Residual Stresses in Pipes. *ASTM International. Matls. Perf. Charact.* October 2018; **7(4)**: 526–535. <https://doi.org/10.1520/MPC20170050>

СОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ТРИКАЛЬЦИЙФОСФАТА ПО ОТНОШЕНИЮ К ИОНАМ SR(II)

Волков И.В., Иошин А.А., Поляков Е.В.

*Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской Академии Наук,
620108, Екатеринбург, ул. Первомайская 91,
e-mail: ilyavolkov@ihim.uran.ru*

Изучено сорбционное поведение трикальцийфосфата $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ (β -ТСП) в водных растворах, содержащих микроконцентрации ионов Sr(II). Установлено влияние на сорбцию pH, концентрации Sr(II), гуминовой кислоты и фосфат-анионов. Перед экспериментальным исследованием выполнено термодинамическое моделирование растворимости β -ТСП, которое показало, что в зависимости от pH раствора равновесными являются фазы $\text{CaHPO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{OH}$ (гидроксиапатит). Стехиометрическое отношение Ca/P в растворе соответствует присутствию данных фаз, однако анализ сорбента после контакта с раствором показал присутствие только фазы $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$. Сделано предположение, что наблюдаемое равновесие относится не к основной массе зерен β -ТСП, а к некоторой ее части в виде поверхностного слоя.¹

Сопоставление изотермы сорбции с изменением растворимости сорбента по Ca и P показало, что взаимодействие с поверхностью сорбента происходит в форме фосфатного комплекса. Полученные в области Генри (< 5 мкмоль/л) результаты интерпретировали по механизму поверхностного комплексообразования: образованием электронейтрального комплекса стронция SrHPO_4^0 и его поглощением отрицательно заряженными фосфатными группами ($\equiv\text{P}-\text{O}-$). Установлено, что в этой области трикальцийфосфат способен извлекать Sr(II) из водных растворов с K_d до $2 \cdot 10^3$ мл/г в диапазоне pH 7–11. С ростом концентрации Sr(II) выше 10 мкмоль/л начинается переход к ионообменному механизму замещения Ca(II)–Sr(II) в твердой фазе с падением K_d до $2 \cdot 10^2$ мл/г. Присутствие гуминовых кислот до концентрации ~150 мг/л не влияет на сорбцию.² Введение дополнительно фосфат-ионов в раствор существенно изменяет характер зависимости pH– K_d и механизм растворения β -ТСП из-за исчезновения гидроксиапатита на поверхности. Результаты исследования найдут применение в биологии, геохимии, агрохимии, в частности при дезактивации почв и земель сельскохозяйственного назначения.

Литература

1. Dorozhkin S.V. *World J. Methodol*, 2012, **2**, 1.
2. Иошин А.А., Волков И.В., Поляков Е.В. *Радиохимия*, 2023, **65**, 546.

Работа выполнена по плану НИР ИХТТ УрО РАН 2023-2028 гг.

ИЗУЧЕНИЕ ФАЗОВОГО РАВНОВЕСИЯ В СИСТЕМЕ СПИРТ-СЛОЖНЫЙ ЭФИР С УЧАСТИЕМ ГЛУБОКОГО ЭВТЕКТИЧЕСКОГО РАСТВОРИТЕЛЯ НА ОСНОВЕ ХОЛИНА ХЛОРИДА

Володина Н.Ю., Приходько И.В., Самаров А.А.

*Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии,
199034, г. Санкт-Петербург, Университетская набережная, д. 7/9,
e-mail: natalya-volodina-2012@mail.ru*

Проблема разделения сложных эфиров и спиртов является достаточно распространённой в производственных процессах, сопровождающихся реакцией этерификации, поскольку эти два компонента могут образовывать азеотропы. В настоящее время для разделения подобных смесей используются органические растворители. Однако, современные тенденции отказа от использования токсичных и агрессивных растворителей и реагентов приводят к необходимости использования более экологически безопасных реактивов. Поэтому основные направления исследований в последнее время сосредоточены на поиске новых, эффективных, экологически безопасных растворителей и экстрагентов, для разделения гомогенных смесей. Одним из результатов таких исследований явилось внедрение в химическую практику нового вида растворителей – глубоких эвтектических растворителей. Данные растворители изготавливаются из природных компонентов, таких как холин хлорид, карбоновые кислоты, глицерин, мочевины, сахара, и в настоящее время позиционируются как экологически безопасные аналоги органических растворителей и ионных жидкостей. Считается, что образование глубокого эвтектического растворителя происходит за счет образования водородной связи между донором водорода и акцептором водорода, что в свою очередь обуславливает понижение температуры плавления конечного растворителя и делает его жидким при комнатной температуре.

В данной работе был проведен синтез глубокого эвтектического растворителя на основе холина хлорида и глицерина, а также проведено экспериментальное исследование фазового равновесия жидкость-жидкость в системах н-бутанол– н-пропилацетат– ГЭР (холин хлорид:глицерин), н-бутанол– этилацетат– ГЭР (холин хлорид:глицерин), н-бутанол– н-пропилпропионат– ГЭР (холин хлорид:глицерин), н-бутанол– этилпропионат– ГЭР (холин хлорид:глицерин) при температурах 293,15 К и 313,15 К. На основе экспериментальных данных были рассчитаны коэффициенты распределения спирта и сложного эфира, а также селективности извлечения спирта.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 24-23-00054.

СИНЕРГЕТИЧЕСКОЕ ВЛИЯНИЕ ПОЛИСАХАРИДОВ И ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ПРОЦЕСС КРИСТАЛЛИЗАЦИИ КАРБОНАТА КАЛЬЦИЯ

Алимбекова С.Р.,^а Ишмуратов Ф.Г.,^а Волошин А.И.,^б Докичев В.А.^б

^аУфимский университет науки и технологий, 450076, Уфа, ул. Заки Валиди, 32

^бУфимский институт химии УФИЦ РАН, 450054, Уфа, Проспект Октября, 71,
e-mail: voloshinai3@mail.ru

Нежелательная кристаллизация CaCO_3 является осложняющим фактором в производственных процессах добычи нефти и газа.^{1,2} Для предупреждения кристаллизации и отложения соли используются ингибиторы в основном фосфонатные, карбоксилатные и сульфонатные соединения. В работе исследовано комбинированное действие модифицированных полисахаридов и электромагнитного поля (ЭМП) на кристаллизацию CaCO_3 . Среди большой группы моносахаридов, дисахаридов, олигосахаридов, полисахаридов и их карбокси- и сульфопроизводных, арабиногалактан, функционализированный фосфатными группами и Na-карбоксиметилцеллюлоза (NaКМЦ) проявили высокую ингибирующую кристаллизацию карбоната кальция эффективность (более 90% при нестехиометрических дозировках). При одновременном воздействии полисахаридов и ЭМП наблюдался синергетический эффект проявляющийся в уменьшении размеров образующихся кристаллов (d) и сдвига интервала распределения в наноразмерную область и преимущественном образовании ватерита и арагонита.

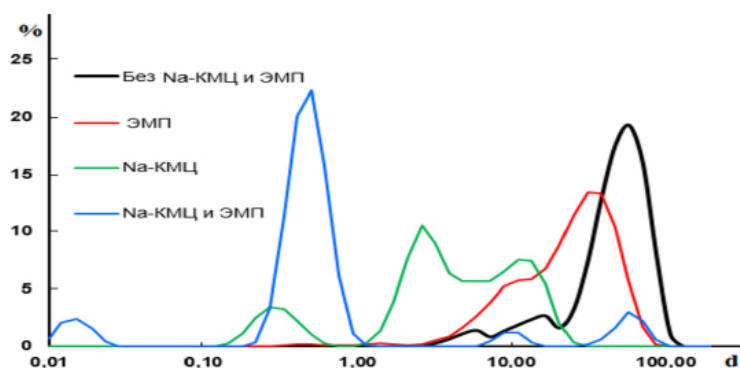


Рисунок 1. Влияние одновременного воздействия ЭМП и NaКМЦ на распределение частиц CaCO_3 по размерам.

Предложен механизм взаимного влияния ЭМП и полисахаридов на кристаллизацию.

Литература

1. Волошин А.И., Гусаков В.Н., Фахреева А.В., Докичев В.А. *Нефтепромысловое дело*, 2018, **11**, 60.
2. Fakhreeva A.V., Nosov V.V., Voloshin A.I., Dokichev V.A. *Polymers* 2023, **15**, 1478.

АЛЬТЕРНАТИВНЫЙ ФЛЮС В ПРОИЗВОДСТВЕ ОКАТЫШЕЙ ДЛЯ ДОМЕННОГО ПРОИЗВОДСТВА И МЕТАЛЛИЗАЦИИ

Вохмякова И.С.,^а Полуяхтов Р.А.,^а Овсянников А.О.,^б

*^аООО «НПВП ТОРЭКС», 620902, Екатеринбург, Старожилов, 72,
e-mail: i.vohmyakova@torex-npvp.ru*

*^бООО «ЦИНКУМ», 307170, г. Железногорск, Промплощадка-7
e-mail: ovsyannikov@urban-mining.eco*

Технологический процесс производства вельц-оксида цинка с использованием пылей газоочисток электросталеплавильных цехов возможен во вращающихся трубчатых печах, в которых цинк и другие летучие металлы возгоняются в газовую фазу, выносятся газовым потоком из рабочего пространства теплового агрегата и улавливаются в аппаратах газоочистки. Обесцинкованный твердый материал, выгружаемый из вращающейся печи, представляет собой клинкер, содержащий железо (30...40%) в виде оксидов, оксиды кальция и магния (25...35%), кремния и остаточное содержание цинка (до 0,6 %) и углерода (до 7 %). Химический состав клинкера делают его интересным материалом в качестве флюсующей добавки в производстве окисленных окатышей с частичной или полной заменой традиционного флюса (известняк)¹.

Выполнены лабораторные и полупромышленные испытания с различным содержанием клинкера в шихте окатышей различного назначения: для доменной печи и печи металлизации твердофазного восстановления с определением комплекса свойств, т.е. физико-химические и металлургические. Основным железорудным сырьём в опытах были железорудные концентраты АО «Михайловский ГОК» (г. Железногорск) и АО «Лебединский ГОК» (г. Губкин).

Результаты исследований позволили сделать следующие выводы, что содержание клинкера вельц-процесса в шихте при производстве:

- для доменных окатышей может достигать до 75 %;
- для окатышей для металлизации может достигать до 50 %.

Технологические и теплотехнические расчеты показали эффективность использования клинкера в шихте окатышей:

- снижение количества выбросов CO₂ (сокращение углеродного следа);
- снижение расхода природного газа;
- снижение расхода концентрата на 1 т обожжённых окатышей;
- увеличение производительности обжиговой машины.

Литература

1. Патент 2820429 Способ получения железорудных окатышей.

РАЗРАБОТКА ТРЁХМЕРНЫХ МОДЕЛЕЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ЛИНИЙ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕДПРИЯТИЙ

**Гайдамовичюте В.В., Никитин Е.В., Индейкина В.А.,
Шишканова К.И., Василенко В.А., Филиппова Е.Б., Бродский В.А.,
Колесников А.В., Кольцова Э.М.**

*ФГБОУ ВО «РХТУ им. Д.И. Менделеева»,
Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, 9.
e-mail: mgaivik@yandex.ru*

Технологии Индустрии 4.0 открывают важные перспективы для будущих инноваций в производстве и промышленности. Одним из перспективных направлений, развивающейся в рамках Индустрии 4.0 является создание цифровых двойников¹.

На первом этапе создания виртуального пространства цифрового двойника, проектируется трехмерная модель, которая является аналогом химического производства с учетом регламента и спецификации². Для создания трехмерной модели технологических линий промышленного предприятия применялся набор инструментов моделирования компании Autodesk. В настоящее время осуществляется переход на отечественные продукты информационного моделирования, в частности NanoCAD.

На основе данных разработанной конструкторской документации и описания химико-технологического процесса проектируется трехмерная модель линии предприятия, эта задача выполняется в несколько этапов:

- разработка трехмерных моделей технологических аппаратов согласно спецификации оборудования;
- проектирование структурной сетки и металлоконструкций;
- размещение спроектированных моделей аппаратов в соответствии с конструкторской документацией;
- создание трубопроводов, штуцеров, насосного оборудования и контрольно-измерительных приборов.

Трехмерные модели предоставляют возможность качественного расчета геометрических параметров для последующей интерпретации на реальном производстве, а также могут быть использованы в качестве тренажеров для обучения студентов и персонала предприятий.

Литература

1. Perno M., Hvam L., Haug A. Implementation of digital twins in the process industry: A systematic literature review of enablers and barriers. Computers in Industry. – 2022.

2. Лобанов А.В., Сидоренко Н.В., Филиппова Е.Б. Разработка модели технологического производства метанола и аммиака в виртуальной среде. Успехи в химии и химической технологии. – 2022.

ДЕСТРУКЦИЯ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТОВ В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОМ БАРЬЕРНОМ РАЗРЯДЕ НА ПРИМЕРЕ ПАРАЦЕТАМОЛА

Извекова А.А., Квиткова Е.Ю., Гущин А.А.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
г. Иваново, Шереметевский пр., д. 7,
e-mail: esket@yandex.ru*

Загрязнение водных ресурсов лекарственными средствами становится серьезной экологической проблемой во всем мире, поскольку эти вещества, находясь в поверхностных водах, могут наносить вред водным организмам, а при попадании в питьевую воду – и человеку. Известно, что даже в очень малых концентрациях фармацевтические средства и их производные могут оказывать значительное негативное воздействие на окружающую среду¹.

Традиционные системы очистки не могут эффективно удалять фармацевтические препараты из сточных вод, поэтому нами был изучен современный способ водоочистки с использованием диэлектрического барьерного разряда (ДБР). Эксперименты проводились на модельных растворах парацетамола в диапазоне концентраций 5-30 мг/л, для приготовления которых использовался лекарственный препарат «Парацетамол» в таблетках с содержанием активного вещества 500 мг (изготовитель ПФК «Обновление», Россия).

Установлено, что процесс удаления парацетамола из воды в реакторе ДБР протекает эффективно (степень разложения достигает 99,9 %). Оценка кинетических параметров протекающих процессов разложения парацетамола позволила установить характерное время его разложения – оно возрастает с увеличением начальной рабочей концентрации с 0,8 до 2,75 с. При окислительной деструкции исследуемого вещества в ДБР происходит образование неорганических соединений азота (нитрит-, нитрат-ионов и ионов аммония), причем последние доминируют. Одним из основных продуктов разложения парацетамола являются карбоновые кислоты, доля выхода которых составляет 29-55 % от начального содержания углерода в системе.

Таким образом, ДБР может использоваться в качестве одной из ступеней очистки воды от фармацевтических препаратов.

Литература

Прожерина Ю. А. Фармацевтические отходы как новая экологическая проблема. Ремедиум. Журнал о российском рынке лекарств и медицинской технике, 2017, (11), 14-19.

Работа выполнена в рамках государственного задания на выполнение НИР (FZZW-2023-0010).

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ИСТОЧНИКОВ УФ-ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ ОЧИСТКИ СТОЧНЫХ ВОД ОТ ОРГАНИЧЕСКИХ ЗАГРЯЗИТЕЛЕЙ

**Кулебякина А.И., Дубровина В.Н., Гришанов П.С.,
Весельчаков Б.Я., Шашковский С.Г., Гонопольский А.М.**

*ООО «Научно-Производственное Предприятие «Мелитта»,
117997, Москва, ул. Миклухо-Маклая, д.16/10,
e-mail: kaleria0510@gmail.com*

В последние десятилетия для удаления органических загрязнителей из сточных вод завоевали популярность технологии, называемые усовершенствованными процессами окисления (AOPs). Наибольшее распространение получили процессы, основанные на использовании УФ-излучения¹. Источники такого излучения могут быть существенно различны по потребляемой и излучаемой мощности, спектру, габаритам, поэтому выбор лампы для таких процессов является комплексной задачей.

В данной работе качестве монохроматических источников были использованы ртутная лампа низкого давления (РЛНД), эксимерные лампы на основе KrCl и KrBr. Спектры излучения РЛНД и эксимерных ламп KrBr, KrCl имеют выраженные пики на 254, 207 и 222 нм соответственно. В качестве источников сплошного спектра – ртутная лампа среднего давления (РЛСД) и импульсная ксеноновая лампа (ИКЛ).

В работе провели сравнительное исследование эффективности различных источников для фотолиза модельных растворов по нескольким параметрам: коэффициент полезного действия излучения ламп, квантовый выход реакции, удельные энергозатраты E_{EM} и удельные эксплуатационные затраты.

Литература

1. Parsons S. Advanced Oxidation Processes for Water and Wastewater Treatment. London: IWA Publishing, 2004. 370 pp
2. М.И. Ломаев, В.С. Скакун, Э.А. Соснин, В.Ф. Тарасенко, Д.В. Шитц, М.В. Ерофеев. Эксимерные лампы – эффективные источники спонтанного УФ- и ВУФ-излучения // Успехи физических наук, 2003. pp. 201-217.
3. И.С. Маршак, А.С. Дойников, В.П. Жильцов и др. Импульсные источники света. 2nd ed. Москва: Энергия, 1978. 472 pp.
4. А.И. Кулебякина, В.Н. Дубровина, С.Г. Киреев, Н.А. Иванцова, С.Г. Шашковский. Об оценке эффективности процесса высокоинтенсивного окисления // Изв. вузов. Химия и хим. технология, Vol. 65, No. 11, 2022.

СИНТЕЗ АЭРОГЕЛЬНЫХ И КРИОГЕЛЬНЫХ ФОРМ НАНОКОМПОЗИЦИОННЫХ СОРБЕНТОВ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК И ОКСИДА ГРАФЕНА

**Кузнецова Т.С., Бураков А.Е., Буракова И.В., Дьячкова Т.П.,
Ананьева О.А., Ткачев А.Г.**

*Тамбовский государственный технический университет,
392000, Тамбов, ул. Советская, 106/5, помещение 2
e-mail: dyachkova_tp@mail.ru*

В докладе представлены методики получения многофункциональных нанокomпозиционных материалов для эффективной сорбционной очистки воды от загрязнителей различной химической природы. Разрабатываемые сорбенты представляют собой нанокomпозиты на основе восстановленного оксида графена (в-ОГ), модифицированного функциональным органическим компонентом – полианилином, включающий также в качестве структурообразователя окисленные углеродные нанотрубки (УНТ). Использование полианилина позволяет значительно увеличить сорбционную активность и емкость синтезируемых материалов. Авторами разработан ряд нанокomпозитов, отличающихся финишной стадией технологии получения – обработкой предварительно приготовленного гидрогеля: конвективная (образец №1), лиофильная сушка (образец №2), а также сушка в среде сверхкритического флюида – изопропилового спирта (образец №3). Кроме того, авторами изучено влияние дополнительной стадии карбонизации образцов в инертной среде при 800 °С. По адсорбции азота величина удельной поверхности составила: образец №1 – 80 м²/г, образец №2 – 180 м²/г, образец №3 – 290 м²/г. Стадия карбонизации позволяет увеличить величину удельной поверхности до 350 м²/г. Данный факт может объясняться частичной термической деструкцией полианилина и аморфного углерода, а также внутренней переструктуризацией графеновых агломератов, содержащих УНТ. Авторами исследована статическая сорбционная емкость нанокomпозитов в условиях ограниченного объема по отношению к органическим красителям (метиленовый синий (МС) и солнечный желтый (СЖ)), а также к тяжелым металлам (на примере ионов цинка). Отмечается, что более 90% загрязнителей удаляется в течение 30 мин, время наступления адсорбционного равновесия составило 40 мин во всех случаях. Установлено, что величина сорбции составляет по МС от 1380 до 1800 мг/г, по СЖ от 159 до 300 мг/г, по цинку – от 31 до 230 мг/г. При этом лучшие характеристики показал образец, обработанный в сверхкритических условиях с последующей карбонизацией.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 22-13-20074), <https://rscf.ru/project/22-13-20074>

ПОЛУЧЕНИЕ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ПУТЕМ ПЛАЗМЕННОЙ ПЕРЕРАБОТКИ ОТХОДОВ НЕФТЯНОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ В ПЛАЗМЕ ДУГОВОГО РАЗРЯДА ПРИ РАЗНЫХ УСЛОВИЯХ

**Егорова В.В.,¹ Поваляев П.В.,^{1,2} Зеленцов Д.О.,¹
Францина Е.В.,^{1,2} Петрова Ю.Ю.¹**

¹*Сургутский государственный университет,
628400, г. Сургут, пр. Ленина, 1
arkachenkova_vv@surgu.ru*

²*Томский политехнический университет,
634050, г. Томск, пр. Ленина, 30*

В условиях экологического развития и большого внимания к проблемам рационального использования природных ресурсов, становится актуальным поиск новых альтернативных способов переработки и применения нефтяных остатков.

Целью исследования является разработка технологии получения углеродных материалов путем переработки отходов нефтяной промышленности.

Объектом исследования послужили асфальтосмолопарафиновые образования (АСПО), тяжелые нефтяные отложения на внутренней поверхности нефтепромыслового оборудования и затрудняющие его добычу. Исследуемое АСПО относится к парафиновому типу отложений ($\beta=0.418$), содержание механических примесей 0.92 масс. %. Основным элементом в молекуле АСПО является углерод (99.5 масс. %). Деструкция АСПО происходит в интервале температур 250-500 °С при разрушении углерод-углеродных и углерод-гетероатомных связей.

Термическую переработку АСПО проводили в электродуговом безвакуумном реакторе в разных условиях (сила тока, время воздействия): 50 – 125 А, 30 с; 100 А, 5 – 30 с. Установили, что 5 с при 100 А и 30 с при 50 А для полной переработки АСПО в углеродные материалы недостаточно, поскольку продукт плазменной переработки содержит аморфную фракцию. Рентгенофазовый анализ показал, что оптимальными условиями для переработки АСПО являются 100 А и 30 с.

Таким образом в работе была подтверждена возможность получения углеродных материалов из нефтяных отходов и подобраны оптимальные условия для плазменной переработки нефтяных отходов с низкими энергетическими затратами (100 А, 30 с).

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 22-13-20016) в СурГУ и ТПУ.

ПОЛУЧЕНИЕ ФОРМИАТА КАЛИЯ КОНВЕРСИОННЫМ МЕТОДОМ

Елохов А.М., Кудряшова О.С.

*Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614068, Пермь, ул. Букирева, 15
e-mail: elhalex@yandex.ru*

Формиат калия, вследствие низких температур кристаллизации водных растворов и малой коррозионной активности, широко используется в качестве компонента хладоносителей, противогололедных материалов и буровых растворов. Кроме этого формиат калия нашел применение в качестве компонента жидких удобрений и кормовых добавок в животноводстве.

Прямой синтез из муравьиной кислоты, ее эфиров, формальдегида или монооксида углерода, а также гидроксида, карбоната или гидрокарбоната калия является многостадийным, требует высоких температур и давления. Альтернативный вариант получения формиата калия – обменная реакция между формиатом натрия и водорастворимыми солями калия ($\text{NaHCOO} + \text{KAn} \rightleftharpoons \text{KHCOO} + \text{NaAn}$).

Экспериментально доказано, что получение формиата калия возможно при использовании в качестве исходных солей только гидрокарбоната, карбоната или сульфата калия. При использовании в качестве сырья хлорида, нитрата, дигидрофосфата или гидрофосфата калия конверсия невозможна.

На основании исследования фазовых равновесий в четверных взаимных системах K^+ , $\text{Na}^+ // \text{HCO}_3^-$, $\text{HCOO}^- - \text{H}_2\text{O}$ и K^+ , $\text{Na}^+ // \text{CO}_3^{2-}$, $\text{HCOO}^- - \text{H}_2\text{O}$ при 25°C обоснован процесс конверсионного получения формиата калия. В результате взаимодействия исходных солей образуется кристаллический карбонат или гидрокарбонат натрия, а также маточный раствор содержащий формиат калия. В оптимальных условиях возможно получение растворов формиата калия с плотностью 1,45–1,49 г/см³ и содержанием карбонатов менее 5,0 мас.%, а также кристаллического безводного карбоната натрия. Синтез с использованием гидрокарбоната калия менее предпочтителен, так как из-за его меньшей растворимости в воде образуются более разбавленные растворы формиата калия.

Таким образом, проведенные исследования позволили предложить новый малоотходный способ производства формиата калия из доступного сырья.

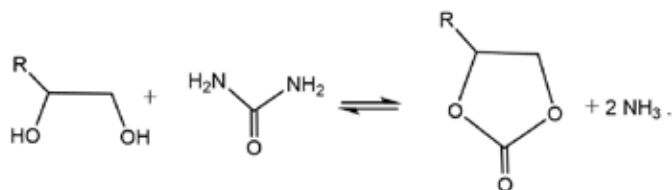
БИФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ПРОПИЛЕНКАРБОНАТА ИЗ МОЧЕВИНЫ И ПРОПИЛЕНГЛИКОЛЯ

Елпашев А.С., Лысикова А.С., Самуилов А.Я., Самуилов Я.Д.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, ул. Карла Маркса, 72
e-mail: elpashev1999@mail.ru*

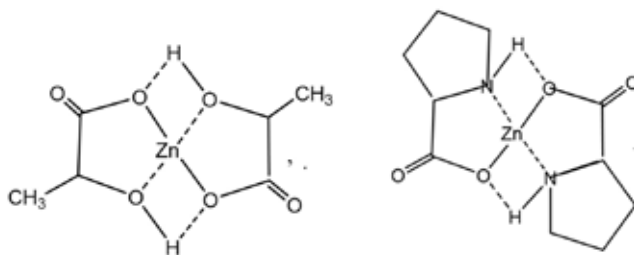
Циклические карбонаты, благодаря своей низкой токсичности и легкой биоразлагаемости, нашли широкое применение в качестве растворителей в различных химических превращениях. Они используются в качестве электролита в литий-ионных аккумуляторах¹. Полиэтилен- и полипропиленкарбонат применяют в производстве биоразлагаемых упаковочных материалов. Этиленкарбонат и его гомологи используются для получения других диалкилкарбонатов, глицеролкарбоната².

Среди различных методов получения циклических карбонатов наиболее экологичным является взаимодействие 1,2-диола с мочевиной:



Единственным побочным продуктом в ходе этого взаимодействия является аммиак, который может быть использован для получения мочевины. Это обстоятельство делает этот подход безотходным.

Нами было показано, что эффективными катализаторами взаимодействия 1,2-пропиленгликоля с мочевиной с образованием пропиленкарбоната являются бифункциональные катализаторы – цинковые соли молочной кислоты и L-пролина:



Обсужден вероятный механизм влияния бифункциональных катализаторов на рассматриваемое взаимодействие. Обсуждено влияние температуры, времени превращения, соотношения концентраций реагентов на выход пропиленкарбоната.

Литература:

1. Ярмоленко О.В., Юдина А.В., Игнатова А.А. Электрохимическая энергетика, 2016, **16**, 4, 155-195.
2. Zhao X., Zhang Y., Wang Y. Ind. Eng. Chem. Res., 2004, **43**, 4038-4042

ВОДОРОД-ГЕНЕРИРУЮЩАЯ СИСТЕМА НА ОСНОВЕ АЛЮМИНИЯ И НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОЛЕЙ

Загороднова А.С., Долганов А.В.

ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарёва»,
430005, Республика Мордовия, г. Саранск, ул. Большевикская 68а,
e-mail: zagorodnova01@mail.ru

Алюминий представляет собой перспективный энергоноситель, имеет высокую энергетическую плотность и обладает высокой стабильностью, что позволяет ему сохранять свои энергетические свойства в течение длительного времени. Однако главными недостатками использования его в качестве энергоносителя остается сложность его активации, подбор и использование дорогостоящих катализаторов, а также трудность в технологическом процессе протекания процесса окисления алюминия водой.

Разработана водород-генерирующая система позволяющая активировать алюминий любого типа при обычных условиях путем введения электролитов – неорганических солей (хлорида натрия и хлорида меди).

На основе экспериментальных данных показаны основные характеристики водород-генерирующей системы: степень извлечения – более 90 %; средняя скорость выделения водорода ~ 100-150 мл/мин. Был рассмотрен вариант постепенного приливания раствора электролита со скоростью 1 мл в 30 сек, который показал возможность получения водорода порционно с сохранением общего количества. Рассмотрен вариант масштабирования данной водород-генерирующей композиции, показывающий успешные результаты без потери количественных характеристик системы.

Все это приводит к выводу об эффективности использования предложенной системы в качестве водород-генерирующей композиции и широкие возможности ее применения в качестве частей автономных источников электроэнергии, в частности портативных мобильных энергоустановок.

Литература

1. Ouyang L., Liu M., Chen K., Liu J., Wang H., Zhu M., Yartys V. *Journal of Alloys and Compounds*, 2022, **910**, 164831.
2. Sevastyanova L.G., Klyamkin S.N., Stupnikov V.A., Ilyukhina A.V., Bulychev B.M. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2024, **54**, 428.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 124031100029-1) в рамках государственного задания Мордовского государственного национального исследовательского университета им Н.П. Огарева (создание новых молодежных лабораторий).

ЭКСТРАКЦИЯ В ПРОЦЕССАХ УТИЛИЗАЦИИ НЕОДИМОВЫХ МАГНИТОВ

**Заходяева Ю.А., Чикинёва Т.Ю., Зиновьева И.В.,
Кожевникова А.В., Вошкин А.А.**

*Институт общей неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 31,
e-mail: yz@igic.ras.ru*

В настоящее время неодимовые магниты являются самыми мощными и коммерчески доступными. Они широко используются в различных отраслях, начиная от бытовой техники и медицинского оборудования до промышленных ветрогенераторов и ветротурбин, автомобилей с гибридными электродвигателями и лазерного оборудования¹⁻³.

Количество отходов от производства постоянных неодимовых магнитов составляет 15–40% от массы самих магнитов и это огромные потери ценного сырья. Кроме того, выработавшие свой ресурс магниты NdFeB являются потенциальным вторичным ресурсом стратегических редкоземельных элементов. Несмотря на то, что в последние годы активно разрабатываются методы переработки неодимовых магнитов, они еще не применяются на практике.

В настоящей работе предложен гидрометаллургический способ переработки неодимовых магнитов с применением селективных гидрофобных глубоких эвтектических растворителей на основе фосфорорганических соединений. Определены условия количественного кислотного выщелачивания ионов металлов из неодимовых магнитов. Установлены физико-химические закономерности экстракции ряда редкоземельных элементов (Nd, Pr, Dy, Tb) из кислых растворов предложенными глубокими эвтектическими растворителями. Показана перспективность применения экстракционного метода для переработки неодимовых магнитов.

Литература

1. Yu G., Ni S., Gao Y., Mo D., Zeng Z., Sun X. *Hydrometallurgy*, 2024, **223**, 106209.
2. Kaya M. *Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry*, 2024, **46**, 100884.
3. Kumari A., Sahu S.K. *Separation and Purification Technology*, 2023, **317**, 123527.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-29-00667,
<https://rscf.ru/project/24-29-00667/>*

ПИРОМЕТАЛЛУРГИЧЕСКАЯ ПЕРЕРАБОТКА ПРОМЫШЛЕННЫХ ОТХОДОВ С ИЗВЛЕЧЕНИЕМ МЕТАЛЛОВ И ПОЛУЧЕНИЕМ СТРОИТЕЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Зиновеев Д.В., Грудинский П.И., Дюбанов В.Г.

*Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова Российской академии наук,
119334, Москва, Ленинский проспект 49
e-mail: ZinoveevIMET@yandex.ru*

В России накоплено большое количество различных железосодержащих промышленных отходов, в частности, более 600 млн т. красных шламов, 1,5 млрд т зол тепловых электростанций, десятки миллионов тонн пылей и шламов доменного производства, более 140 млн т медных шлаков, большое количество нефтехимических катализаторов. С внедрением в РФ технологии рециклинга пылей электросталеплавильного производства вельц-процессом ежегодно образуется до 100 тыс. тонн клинкера вельцевания с высоким содержанием железа. Накопление этих отходов наносит значительный вред человеку и окружающей среде, а на обслуживание отвалов и шламохранилищ ежегодно затрачиваются значительные средства. При этом эти отходы содержат такие ценные элементы как Fe, Al, Ti, Cu, Zn, PЗМ и другие.

Предложенные в настоящее время технологии переработки таких отходов в основном предусматривают извлечение из них на первом этапе железа методами пирометаллургии с дальнейшим получением из оставшихся хвостов или шлаков ценных элементов методами гидрометаллургии. Такие схемы позволяют получить большое количество ценной продукции, но также они отличаются сложностью реализации, необходимостью большого объема изначальных инвестиций, ограниченностью рынка сбыта произведенной продукции, экологическими последствиями из-за образования отработанных растворов кислот и щелочей.

Альтернативным подходом является использование таких отходов для получения наряду с металлической продукцией строительных материалов. Такие процессы требуют меньших изначальных затрат, так как они могут быть реализованы непосредственно в плавильном агрегате в одну стадию. При этом возможность управления скоростью охлаждения получаемых шлаков позволяет регулировать свойства строительных материалов.

В настоящем докладе представлен краткий обзор работ зарубежных и отечественных исследователей по данному вопросу, а также разработки ИМЕТ РАН в этой области.

Работа выполнена по государственному заданию №075-00320-24-00

ЭКСТРАКЦИОННАЯ ПЕРЕРАБОТКА LFP АККУМУЛЯТОРОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ ГИДРОФОБНЫХ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ

**Зиновьева И.В.,^а Саломатин А.М.,^{а,б} Кожевникова А.В.,^а
Лобович Д.В.,^а Милевский Н.А.,^а Заходяева Ю.А.,^а Вошкин А.А.^а**

^а*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект, 31*

^б*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»,
101000, Москва, ул. Мясницкая, 20
e-mail: iz@igic.ras.ru*

Гидрометаллургический подход является наиболее актуальным для переработки активных материалов отработанных литий-железо-фосфатных аккумуляторов ввиду имеющихся преимуществ: высокая эффективность извлечения, низкое энергопотребление, незначительное выделение вредных газов и низкие капитальные затраты¹. Переработка использованных LFP аккумуляторов поможет восполнить нехватку ценных элементов, сократить эксплуатацию природных ресурсов, снизить негативное влияние на окружающую среду и обеспечить устойчивое развитие человеческого общества. На сегодняшний день исследований по переработке отработанных LFP аккумуляторов существует ограниченное количество, а разработанные технологии все еще находятся на начальной стадии^{2,3}.

В настоящей работе предложены решения для задач выделения и разделения ионов металлов, которые являются основными в составе катода и анода LFP аккумуляторов, из водных сред с использованием гидрофобных эвтектических растворителей. Определены оптимальные условия для полного выщелачивания металлов из активных материалов. Разработаны физико-химические основы экстракции Li(I), Cu(I), Fe(III) и Al(III) гидрофобными эвтектическими растворителями на основе фосфорорганических реагентах. Установлена возможность регенерации и повторного использования эвтектических растворителей. Показана перспективность использования предложенных решений для создания современных технологий замкнутого цикла.

Литература

1. Gerold E., Lerchhammer R., Antrekowitsch H. *Metals*, 2022, **12**, 1706.
2. Wang W., Wu Y. *Resour Conserv Recycl*, 2017, **127**, 233.
3. Forte F., Pietrantonio M., Pucciarmati S., Puzone M., Fontana D. *Crit Rev Environ Sci Technol*, 2021, **51**, 2232.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 23-79-10275,
<https://rscf.ru/project/23-79-10275/>.*

ТЕХНОГЕННЫЕ ОТХОДЫ И МАТЕРИАЛЫ НА ИХ ОСНОВЕ КАК СЫРЬЕ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ КЕРАМИЧЕСКИХ МАТРИЦ ДЛЯ ИММОБИЛИЗАЦИИ КОБАЛЬТА-60 И СТРОНЦИЯ-90

Шичалин О.О.,^а Дикая А.С.,^б Ярусова С.Б.,^в Иванов Н.П.,^а
 Иванец А.И.,^б Буравлев И.Ю.,^а Буланова С.Б.,^в Белов А.А.,^а
 Папынов Е.К.,^а Гордиенко П.С.^в

^аДальневосточный федеральный университет, 690922, Владивосток, остров Русский, п Аякс, д. 10,

^бИнститут общей и неорганической химии Национальной академии наук Беларуси,
 220072, Минск, Сурганова, 9/1,

^вИнститут химии Дальневосточного отделения Российской академии наук,
 Россия, 690022, Владивосток, пр. 100-летия Владивостока, 159,
 e-mail: yarusova_10@mail.ru

Исследована эффективность керамических матриц из отходов борного производства (борогипса), полученных методом искрового плазменного спекания (ИПС) и холодного прессования и спекания (ХПС), для иммобилизации радионуклидов ⁶⁰Co, ⁹⁰Sr^{1,2} (Таблица).

Таблица 1. Сравнительный анализ показателей качества керамических матриц

Образец	Температура консолидации (Т), °С	Метод получения	Скорость выщелачивания (R _{Co} /R _{Sr}), г·см ⁻² ·сут ⁻¹
Борогипс	800	ИПС(R _{Sr})	3.67·10 ⁻⁵
	900		3.74·10 ⁻⁵
	1000		3.69·10 ⁻⁵
CoCaSiO ₃ из борогипса	800	ИПС(R _{Co})	1.08·10 ⁻⁶
	900		8.19·10 ⁻⁷
	1000		2.04·10 ⁻⁷
	1000	ХПС (R _{Co})	2.81·10 ⁻⁶

Литература

- Shichalin O.O., Yarusova S.B., Ivanov N.P., Papynov E.K., Belov A.A., Azon S.A., Buravlev I.Yu, Myagchilov A.V., Fedorets A.N., Rastorguev V.L., Zernov Ya.G., Budnitskiy S.Yu., Mayorov V.Yu, Gridasova E.A., Tananaev I.G., Ivanets A.I., Gordienko P.S. *Journal of Water Process Engineering*, 2024, **59**, 105042.
- Шичалин О.О., Дикая А.С., Ярусова С.Б., Иванов Н.П., Драньков А.Н., Иванец А.И., Буравлев И.Ю., Буланова С.Б., Белов А.А., Нехлюдова Е.А., Папынов Е.К., Гордиенко П.С. *Физико-химические проблемы адсорбции, структуры и химии поверхности нанопористых материалов: всероссийский симпозиум с международным участием*, 16–20 октября, 2023. М.: ИФХЭ РАН, 2023. С. 250.

Исследование выполнено в рамках Государственного задания № FZNS-2024-0013, тема: «Спектроскопия рентгеновского поглощения на источниках синхротронного излучения для направленного химического синтеза функциональных материалов востребованных в атомной промышленности».

СИНТЕТИЧЕСКОЕ СОЕДИНЕНИЕ АМ-4 КАК АНАЛОГ РЕДКОГО МИНЕРАЛА И ОСНОВА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ РЯДА НОВЫХ ПОЛЕЗНЫХ СОЕДИНЕНИЙ В ОБЛАСТИ КАТАЛИЗА, РАДИО- И ЭЛЕКТРОХИМИИ ПРИ ПЕРЕРАБОТКЕ ОТХОДОВ ГОРНОРУДНЫХ ПРОИЗВОДСТВ

**Калашникова Г.О.,^а Тимофеева М.Н.,^б Паникоровский Т.Л.,^а
Яковенчук В.Н.,^{а,в} Грязнова Д.В.,^а Селиванова Е.А.,^{а,в}
Пахомовский Я.А.,^{а,в} Папынов Е.К.,^г Милютин В.В.^д**

^аФИЦ Кольский научный центр РАН,
Российская Федерация, 184209, г. Апатиты, ул. Ферсмана, д. 14,
e-mail: g.kalashnikova@ksc.ru

^бИнститут катализа им. Г.К. Борескова СО РАН,
Российская Федерация, 630090, г. Новосибирск, пр-т Академика Лаврентьева, д. 5

^вГеологический институт ФИЦ КНЦ РАН,
Российская Федерация, 184209, г. Апатиты, ул. Ферсмана, д. 14

^гДальневосточный федеральный университет,
Российская Федерация, 690922, остров Русский, пос. Аякс, д. 10

^дИнститут физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина,
Российская Федерация, 119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31

Синтетическое соединение АМ-4 является единственным аналогом редких минералов группы линтисита (Хибинский щелочной массив, Кольский полуостров, Россия). Новые области перспективного применения данных минералов подтверждены экспериментально как в результате многолетнего изучения природных образцов, так и их синтетического аналога. В настоящей работе приведены данные по лабораторному и укрупненно-лабораторному синтезу АМ-4 на основе доступного, недорогого и нуждающегося в дополнительной переработке титансодержащего сырья Кольского полуострова. Показано, что исследуемый материал может справедливо дополнить список уже известных гетерогенных катализаторов для фармацевтической и лакокрасочной промышленности, сорбентов для селективного извлечения ионов иода и радиоизотопов ¹³⁷цезия, а также выступать в качестве интересной основы для получения композитных материалов сложного химического состава для задач электрохимии и катализа. В работе также приведены данные о методах гранулирования АМ-4 и его модификаций при помощи разных видов грануляции: центробежной, шнекороторной и грануляции образцов в псевдооживленном слое.

Работа выполнена в рамках проекта РНФ 24-23-00374 и темы государственного задания FMEZ 2022–0019.

РАЗДЕЛЕНИЕ ПРОМЫШЛЕННОЙ СМЕСИ ПРОДУКТОВ ФТОРИРОВАНИЯ ДЕКАЛИНА ИЛИ НАФТАЛИНА. ПЕРФТОРДЕКАЛИН – ПЕРФТОРБУТИЛЦИКЛОГЕКСАН

**Кисель А.В., Лупачев Е.В., Полковниченко А.В.,
Квашнин С.Я., Вошкин А.А.**

*Институт общей и неорганической химии имени Н. С. Курнакова РАН,
119991, Москва, Ленинский проспект, 31,
e-mail: kisel.al@mail.ru*

Перфтордекалин (ПФД) широко используется в медицине и различных областях химии. Основным промышленным методом получения ПФД является фторирование декалина или нафталина. При этом происходит разрушение углеродной цепи части молекул и образование примесей, в том числе перфтор(бутилциклогексана)¹ (БЦГ), который имеет собственную товарную ценность. В промышленности смесь ПФД–БЦГ разделяют кристаллизацией, которая направлена лишь на получение ПФД.

Ректификация обладает рядом преимуществ по сравнению с кристаллизацией, однако разделение ПФД и БЦГ осложнено термодинамическими ограничениями². Собственные экспериментальные данные показали отсутствие разделения при ректификации смеси цис-ПФД – БЦГ на колонне, имеющей эффективность в 85 теоретических тарелок.

В рамках настоящего исследования для интенсификации ректификационного разделения смеси цис-ПФД – БЦГ нами предложено использовать метод гетероазеотропной ректификации в присутствии воды. В данном процессе БЦГ концентрируется в кубе, а ПФД – в дистилляте. Этот метод позволяет получать БЦГ и цис- ПФД чистотой до 99.7 и 99.8% масс. соответственно. Следует отметить, что вода, из-за низкой взаимной растворимости с ПФД и БЦГ (порядка 15 ppm), может быть отделена декантированием. Кроме того, вода является безопасной и нетоксичной, что особенно важно ввиду применения ПФД в медицине.

Литература

1. L.L. Gervits Perfluorocarbon-Based Blood Substitutes Russian Experience // Fluorine in Medicine in the 21st Century Conference Paper UMIST (UK) 1994
2. Lupachev, E.V. et al. Separation of an Industrial Mixture of Decalin or Naphthalene Fluorination Products: Cis-Perfluorodecalin, Trans-Perfluorodecalin and Perfluoro(butylcyclohexane): Physicochemical, Thermophysical, and Spectral Data. Processes 2023, 11, 3208. <https://doi.org/10.3390/pr11113208>

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института общей и неорганической химии им. Курнакова РАН.

Исследования проводились с использованием оборудования ЦКП ФМИ ИОНХ РАН

СОРБЦИЯ РАСТВОРЕННЫХ НЕФТЕПРОДУКТОВ УГЛЕРОДСОДЕРЖАЩИМИ МАТЕРИАЛАМИ ИЗ РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ

**Ковехова А.В., Арефьева О.Д., Чудовский А.С.,
Петрова С.Э., Пустовойт К.Д.**

*Дальневосточный федеральный университет
690922, Приморский край, г. Владивосток, остров Русский, п. Аякс, д. 10;
e-mail: kovekhova.av@dvfu.ru*

На сегодняшний день нефть остается главным энергоресурсом в мире. В процессе добычи, переработки и транспортировки из-за аварий или разливов значительная часть нефти попадает в природные и сточные воды. Сейчас активно разрабатываются новые и улучшаются уже известные методы очистки сточных вод от нефтепродуктов, среди которых важное место занимает адсорбция. Большое внимание в качестве сорбентов привлекает растительное сырье, в том числе отходы сельского хозяйства, которые ежегодно образуются в больших количествах на предприятиях по переработки зерновых культур.

Цель работы: исследовать сорбцию растворенных нефтепродуктов материалами, полученными из отходов производства риса и подсолнечника.

В качестве объекта исследования использовали углеродсодержащие материалы, полученные из рисовой (РШ) и подсолнечной (ПШ) шелухи. Образцы сорбентов получали обжигом РШ и ПШ в условиях недостатка кислорода¹.

В работе дана сравнительная характеристика образцов по физико-химическим показателям: насыпной плотности, значению рН водной вытяжки, содержанию водорастворимых веществ и зольности.

Методом газовой хромато-масс-спектрометрии исследованы экстракты нефтесодержащих вод до и после процесса сорбции. Показано, что в состав растворенных нефтепродуктов входят разветвленные и неразветвленные алканы с разной длиной углеродной цепи. Эффективность извлечения декана составляет практически 100 %, углеводородов с длиной цепи C_{16} - C_{20} – 30 %.

Обработка кинетических данных по моделям псевдо-первого, псевдо-второго порядков, Еловича и Морриса-Вебера показала, что процесс сорбции лимитируется взаимодействием с неоднородной поверхностью углеродсодержащих материалов.

Литература:

1. Arnal P.M. *MethodsX*, 2015, **2**, 198-203.

ГЛУБОКИЙ ЭВТЕКТИЧЕСКИЙ РАСТВОРИТЕЛЬ НА ОСНОВЕ Д2ЭГФК И ТБФ ДЛЯ ПЕРЕРАБОТКИ LFP-БАТАРЕЙ

**Кожевникова А.В., Лобович Д.В., Милевский Н.А.,
Зиновьева И.В., Заходяева Ю.А., Вошкин А.А.**

*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 31,
e-mail: ak@igic.ras.ru*

На сегодняшний день литий-железо-фосфатные батареи (LFP) являются перспективными источниками тока для различного типа электронного оборудования. Однако ввиду такой высокой востребованности в последующие десятилетия может образоваться чрезмерное количество аккумуляторов с истекшим сроком эксплуатации, в связи с чем возникает острая необходимость разработки стратегии переработки LFP-батарей. Гидрометаллургические методы переработки источников тока, включающие выщелачивание с последующим экстракционным разделением металлов, являются наиболее перспективными.

В данной работе предложен новый гидрофобный глубокий эвтектический растворитель на основе ди(2-этилгексил)фосфорной кислоты (Д2ЭГФК), трибутилфосфата (ТБФ) и ментола в качестве экстрагента для ионов металлов, входящих в состав литий-железо-фосфатных батарей. Ранее смесь Д2ЭГФК и ТБФ растворяли в летучих органических растворителях и использовали для синергетической экстракции металлов из их водных растворов¹. В настоящей работе используется более безопасный и экологический подход – замена пожароопасного растворителя на вещество природного происхождения – ментол. Образование глубокого эвтектического растворителя Д2ЭГФК/ТБФ/ментол было подтверждено ИК-спектроскопией. Изучены как физические свойства данного экстрагента (плотность, вязкость, показатель преломления), так и экстракционные по отношению к ряду ионов металлов (Li, Fe, Cu, Al) в зависимости от условий проведения процесса. Также был проведен поиск синергизма исследуемого экстрагента путем сравнения экстракционных свойств Д2ЭГФК/ТБФ/ментол с Д2ЭГФК/ментол и ТБФ/ментол.

Литература

1. Azizitorghabeh A. et al. Synergistic extraction and separation of Fe(III) and Zn(II) using TBP and D2EHPA. Sep Sci Technol. 2016. 52(3). 476-486.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 23-79-10275,
<https://rscf.ru/project/23-79-10275/>.*

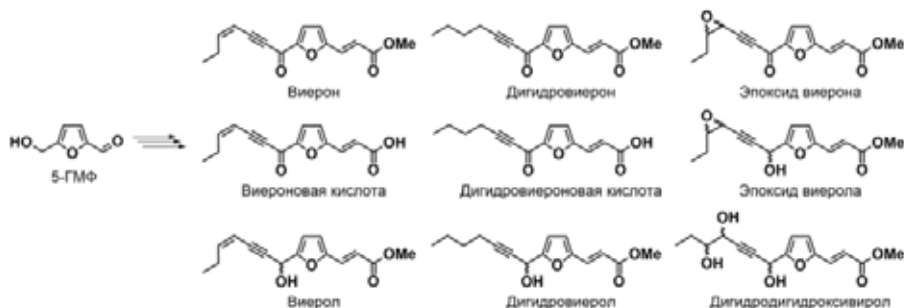
СИНТЕЗ СОЕДИНЕНИЙ ВИЕРОНОВОГО РЯДА ИЗ 5-(ГИДРОКСИМЕТИЛ)ФУРФУРОЛА

Козлов К.С., Ромашов Л.В., Анаников В.П.

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН,
119991, Москва, Ленинский проспект, 47,
e-mail: kozlovks@ioc.ac.ru*

Конверсия биомассы является одним из наиболее перспективных направлений современной зеленой химии. Основным продуктом конверсии гексоз является 5-(гидроксиметил)фурфурол (5-ГМФ), который был включен в список соединений-платформ для химической технологии будущего.

В ходе работы из 5-ГМФ были синтезированы природные фунгициды из класса фураноацетиленов, выделяемые бобовыми при инфицировании плесневыми грибами.¹ К фураноацетиленам относятся соединения виеронового ряда, являющиеся фитоалексинами – низкомолекулярными веществами, быстро вырабатываемыми растениями в ответ на контакт с фитопатогеном. Фитоалексины являются частью иммунной системы растений, и рассматриваются как природные фунгициды, инсектициды и гербициды.²



Лабораторный синтез таких природных средств защиты растений является актуальной задачей, поскольку позволит существенно снизить затраты на их производство, по сравнению с выделением фитоалексинов из продуцирующих их растений. Ведутся работы по изучению эффективности и токсичности полученных соединений виеронового ряда.

Литература:

- Hargreaves J.A., Mansfield J.W., Coxon D.T. *Phytochemistry*, 1976, **15**, 5, 651-653.
- Santra H.K., Banerjee D. *Natural bioactive products in sustainable agriculture*, 2020, 131-219.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 20-73-00117.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ БЕТОННЫХ СМЕСЕЙ НА ОСНОВЕ ГЛИНОЗЁМИСТОГО И ОБЫЧНОГО ПОРТЛАНДЦЕМЕНТА ДЛЯ ГЕОЛОГИЧЕСКОЙ ИЗОЛЯЦИИ РАДИОАКТИВНЫХ ОТХОДОВ

Тюпина Е.А.,^а Козлов П.П.,^а Крупская В.В.^б

*^аРоссийский Химико-Технологический Университет им. Д.И. Менделеева,
125047, Москва, Миусская пл., 9
e-mail: tk1972@mail.ru*

*^бИнститут геологии рудных месторождений, петрографии,
минералогии и геохимии Российской Академии Наук,
119017, Москва, Старомонетный пер., 35*

Во многих концепциях пунктов глубинного захоронения радиоактивных отходов (ПГЗРО) рассматривается применение цементных материалов для создания инженерных барьеров безопасности (ИББ)¹. Важным критерием, определяющим способ изготовления ИББ на основе цементных вяжущих, является подвижность используемых бетонных смесей, на основании которой выбирается наиболее эффективный способ их нанесения на поверхности подземных выработок. Также, существенным параметром бетонных ИББ в ПГЗРО является коэффициент фильтрации подземной воды, значения которого для рассматриваемых материалов не должны превышать величины, полученные для горных пород, в которых будет осуществляться изоляция радиоактивных отходов¹.

Целью данной работы является определение подвижности смесей на основе обычного портландцемента (портландцементный бетон (ПБ) и цементный буфер NRVB) и глинозёмистого цемента (алюминатный бетон (АБ)), а также коэффициента фильтрации модельного раствора подземной воды участка «Енисейский» для исследуемых бетонов.

По методике ГОСТ 5802-86 и критериям ГОСТ 28013-98 установлено, что NRVB и АБ могут быть нанесены с помощью механизированных средств, в то время как ПБ может использоваться при ручном нанесении. Показано, что коэффициент фильтрации ПБ, NRVB и АБ не превышает по порядку величины значения 10^{-8} см/с¹, характерные для гранитных пород, аналогичных «Енисейскому» участку Нижнеканского массива, выбранного для сооружения ПГЗРО в России. Таким образом, можно говорить, что исследуемые составы являются перспективными для создания ИББ в ПГЗРО в виду низкой проницаемости для подземных вод и выявленных способов их эффективного применения.

Литература

1. Тюпина Е.А., Kozlov P.P., Krupskaya V.V. *Energies*, 2023, **16**, 605.

ОПТИМИЗАЦИЯ МЕМБРАННО-АБСОРБЦИОННОГО МЕТОДА УЛАВЛИВАНИЯ ДИОКСИДА УГЛЕРОДА С ТОЧКИ ЗРЕНИЯ КОНФИГУРАЦИИ АППАРАТА И СОСТАВА АБСОРБЕНТА

**Атласкин А.А., Атласкина М.Е., Крючков С.С.,
Степакова А.Н., Смородин К.А., Воротынцев И.В.**

*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
125047, Москва, Миусская площадь, д. 9, стр. 1
e-mail: kriuchkov.ss@gmail.com*

В настоящее время повсеместно применяемой технологией удаления и улавливания кислых газов является химическая абсорбция с применением водных растворов аминспиртов. Несмотря на то, что этот процесс активно применяется, он имеет ряд недостатков, таких как потеря абсорбента в связи с его деградацией и образование химически активных веществ. Кроме того, этот подход характеризуется высокой энергоемкостью, обусловленной, главным образом, стадией регенерации абсорбента, и высокими капитальными затратами вследствие сложного аппаратного оформления и больших габаритов.

Настоящее исследование посвящено продолжению разработки, усовершенствованию и оптимизации нового гибридного метода разделения – мембранно-абсорбционного газоразделения, который предназначен для удаления кислых газов. В рамках работы была предложена новая конфигурация мембранно-абсорбционного газоразделительного модуля на основе полых волокон.

Основной особенностью мембранно-абсорбционного газоразделительного модуля, используемого в настоящем проекте, является применение комбинированной системы из двух типов полых волокон. В такой конфигурации модуля, газоразделительное полое волокно размещается внутри ультрафильтрационного волокна и используется для удаления непрерывно десорбируемого газа из жидкости. Использование газоразделительной мембраны с непористым селективным слоем позволяет избежать протечек используемой жидкости и вносит дополнительный вклад в общую селективность процесса. Таким образом, жидкий абсорбент расположен в замкнутом объеме между двумя полыми полимерными волокнами, через одно из которых подаваемая газовая смесь контактирует с жидким абсорбентом, а через другое удаляется абсорбированный компонент.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10288

ИССЛЕДОВАНИЕ ГАЗОТРАНСПОРТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПО ИНДИВИДУАЛЬНЫМ ГАЗАМ И КОМПОНЕНТАМ ГАЗОВОЙ СМЕСИ ПОЛИМЕРНЫХ ПОЛОВОЛОКОННЫХ МЕМБРАН ДЛЯ РАЗДЕЛЕНИЯ ВОЗДУХА

**Крючков С.С., Смородин К.А., Атласкин А.А., Цивковский Н.С.,
Степакова А.Н., Атласкина М.Е., Петухов А.Н., Воротынцев И.В.**

*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
125047, г. Москва, Миусская площадь, д. 9,
e-mail: kriuchkov.ss@gmail.com*

Разделение воздуха является одним из основных процессов химической технологии. Мембранная технология позволяет получать азот с концентрацией более 99 об.% и характеризуется высокой энергоэффективностью в сравнении с конкурентами – криогенным и сорбционным методами.

Традиционно исследование одной из основных газотранспортных характеристик мембранных элементов – проницаемости – проводится по индивидуальным чистым газам. Измеряются проницаемости по каждому из компонентов газовой смеси отдельно и сравниваются между собой для оценки селективности. Такой подход не позволяет объективно измерить проницаемость из-за невозможности учесть явления конкурентной сорбции и пластификации полимера.

Альтернативным методом исследования проницаемости является метод с использованием масс-спектрометрического комплекса, который позволяет в режиме реального времени регистрировать поток пермеата одновременно по каждому компоненту газовой смеси. Такой подход позволяет получить проницаемости по компонентам газовой смеси в процессе газоразделения.

В настоящей работе было проведено сравнение двух описанных подходов к изучению проницаемости на примере разделения воздуха. Использовали мембранные элементы из пяти перспективных коммерчески доступных полимерных полволоконных газоразделительных мембран: из полисульфона (ПСФ), полифениленоксида (ПФО), полиэфиримида (ПЭИ), полиимида (ПИ) и полиэфиримида с полиимидом (ПЭИ+ПИ). Результаты эксперимента показали существенные отклонения. Проницаемость полиэфиримидной мембраны по азоту в составе воздушной смеси составила 4,33 GPU, а по чистому азоту – 3,45 GPU, что на 25,5 % ниже, а в среднем расхождение проницаемости мембран по азоту составило 17,3 %.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках научного проекта по государственному заданию № FSSM-2023-0004.

АГРОНОМИЧЕСКАЯ ЭФФЕКТИВНОСТЬ СТРУВИТА, ПЛУЧЕННОГО ПО МОДИФИЦИРОВАННОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Кузнецова Ю.В., Леонтьева Г.В.

*Пермский Национальный Исследовательский Политехнический Университет,
614990, г.Пермь, Комсомольский проспект 29,
e-mail: julietta44perm@mail.ru*

Струвит ($MgNH_4PO_4 \cdot 6H_2O$) применяется в качестве ключевого компонента для получения удобрения пролонгированного действия¹. Однако скорость высвобождения питательных элементов струвитом, полученным по традиционной технологии (St_{trad}) оказывается ниже скорости потребления N и P сельхозкультурами и возникает необходимость дополнительно решать проблему соблюдения баланса выделения и потребления необходимых элементов. Разработка модифицированной технологии химического осаждения струвита (St_{mod}), основанной на ведении процессов нуклеации и фазообразования по низкобарьерному механизму фазообразования с участием пренуклеационных и ионноассоциированных кластеров², открыла перспективу существенного повышения эффективности использования удобрения на основе St_{mod} при выращивании сельскохозяйственных культур.

На примере выращивания редиса сорта Сакса РС (Gardenstar) с использованием в качестве удобрения St_{mod} и St_{trad} , а также коммерческого удобрения - суперфосфат аммонизированный «Фаско», была определена агрономическая эффективность. На рис. 1 представлены результаты эксперимента, проведенного на песчаной почве.

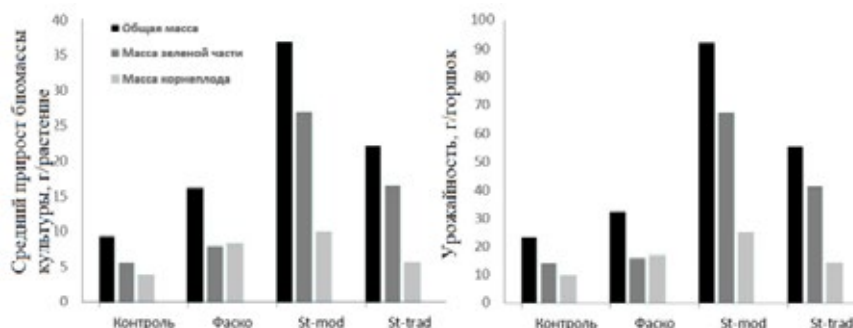


Рисунок 1. Зависимость среднего прироста биомассы и урожайности в зависимости от вида вносимого удобрения.

Результаты вегетационных экспериментов подтвердили высокую агрономическую эффективность St_{mod} по сравнению с St_{trad} и коммерческим минеральным фосфатсодержащим удобрением.

Литература

- Hertzberger A. J., Cusick R. D., Margenot A. J. *Nutrient Management & Soil & Plant Analysis*, 2020, 84, 653.
- Кузнецова Ю.В., Вольхин В.В., Пермякова И.А. *ЖПХ*. 2022, 95(4), 531.

СОРБЦИЯ ТБФ ПОЛИМЕРНЫМ СОРБЕНТОМ ПОЛИСОРБ-1

Кулемин В.В., Кулюхин С.А., Румер И.А.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук,
19071, г. Москва, Ленинский проспект 31-4,
e-mail: kulem-ipc@yandex.ru*

В настоящей работе с применением методов малоуглового рассеяния рентгеновских лучей получены данные о пористой структуре и механизме адсорбции ТБФ на полисорбе-1, представляющего собой сополимер стирола с 40% дивинилбензола в присутствии 100% порообразователя - бензина БР-1.

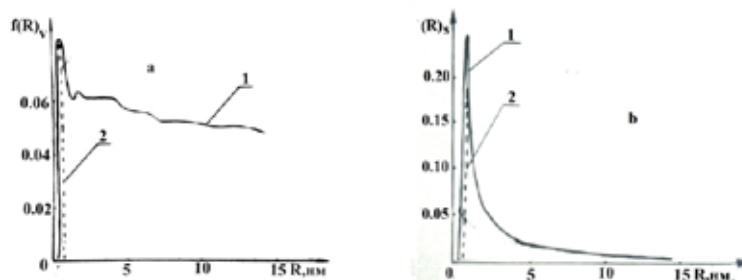


Рисунок 1. Дифференциальные кривые распределения объемов пор (а) и поверхностей пор (б) по радиусам инерции: 1 - сухой образец; 2 - образец, насыщенный ТБФ

Распределение пор по размерам включает в себя микро-, супер-микро- и мезо-поры. Сорбент, имеет один максимум при $R=0.5-0.6$ нм соответствующий микропорам. Из сопоставления кривых 1 и 2 (кривая 2 при $R \geq 0.8$ нм совпадает с кривой 1) можно сделать вывод, что мезо-поры и часть супер-микропор заполняется ТБФ. Минимальный радиус инерции пор, заполняемых ТБФ, равен 0.5-0.6 нм и положение максимума распределения сдвигается к 0.7-0.8 нм, а высота его уменьшается. При адсорбции ТБФ из водного раствора первостепенное значение приобретает распределение поверхности пор. Это связано с тем, что энергия связи диполь-дипольного взаимодействия между молекулами ТБФ меньше, чем энергия водородной связи фосфорильного кислорода в молекуле ТБФ с протоном воды¹ и адсорбция в этом случае должна носить мономолекулярный характер. Сорбция ТБФ происходит, в основном, в мезо-порах при $R \geq 1$ нм, что составляет ~80% общей поверхности пор.

Литература

1. Хансон К. Последние достижения в области жидкостной экстракции. - М.: Химия, 1974. - С. 44.

ИЗВЛЕЧЕНИЕ ТРИКАРБОНАТНОГО КОМПЛЕКСА УРАНИЛА ГЛИНИСТЫМИ МАТЕРИАЛАМИ ИЗ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ

**Кулюхин С.А., Красавина Е.П., Арзуманова К.Г., Бессонов А.А.,
Гордеев А.В., Бомчук А.Ю., Жаркова В.О., Мартынов К.В.**

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской Академии Наук,
119071, Москва, Ленинский проспект 31-4,
e-mail: kulyukhin@ipc.rssi.ru*

Важной составляющей системы инженерных барьеров безопасности (ИББ) на объектах захоронения или хранения радиоактивных отходов (РАО) является глинистый буферный материал, основным назначением которого является ограничение и задержка выхода радионуклидов в окружающую среду. При долговременной эксплуатации хранилищ РАО не исключается вероятность проникновения воды внутрь изоляционного контура вследствие изменения гидрологического режима, геологических, техногенных или других процессов. Для прогнозирования состояния ИББ после проникновения воды необходимы исследования свойств барьерных смесей и их поведения при различных сценариях обводнения. Глины обладают высокой адсорбционной способностью по отношению к катионам, причем наиболее высокие значения свойственны минералам группы монтмориллонита, самые низкие значения – каолинитам. Адсорбция анионов проявляется слабее адсорбции катионов и происходит на боковых сколах глинистых частиц. Площадь сколов составляет ничтожную долю всей поверхности частиц в целом. В тоже время в результате как активации поверхности глин, так и включения в структуру глин различных анионов, способных к обмену, возможно увеличить адсорбционную способность глин в отношении анионов. Перспективным методом активации глин является щелочная активация. Щелочная активация природных алюмосиликатов по сравнению с кислотной имеет ряд принципиальных отличий, связанных как с механизмом растворения глинистых минералов, так и с составом продуктов, образующихся в растворе.

В работе исследованы процессы извлечения трикарбонатного комплекса уранила $[\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3]^{4-}$ из водных растворов на глинопорошках из каолиновых глин месторождения «Кампановское» и из бентонитовых глин месторождений «10-й Хутор» и «Динозавровое», а также их смесях. Исследования проводились с глинопорошками как необработанными, так и обработанными водой, растворами 0.5 моль/л Na_2CO_3 и NaNO_3 , 2 моль/л растворами NaOH . Комплекс $[\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3]^{4-}$ не сорбируется на глинистых материалах из водных растворов в статических условиях. Фильтрация водного раствора $[\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3]^{4-}$ - через колонки со смесями глин позволяет извлечь до 87% урана от его количества, пропущенного через колонку.

НОВЫЙ ПОДХОД К ПЕРЕРАБОТКЕ КРЫШЕК И ФИКСИРУЮЩИХ КОЛЕЦ ОТ ПЛАСТИКОВЫХ БУТЫЛОК

Кулюхин С.А., Гордеев А.В., Красавина Е.П., Арзуманова К.Г.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской Академии Наук,
119071, Москва, Ленинский проспект 31-4,
e-mail: kulyukhin@ipc.rssi.ru*

Интенсивное потребление изделий из пластмасс создало проблему накопления пластиковых отходов. Увеличение объема потребления полимерных материалов ведет к накоплению неразлагающегося мусора из отслуживших свой срок пластмассовых изделий, что в итоге приводит к загрязнению воздуха, почвы, грунтовых вод продуктами неполного разложения, в том числе нано- и микрочастицами полимеров. В общей массе полимерных отходов основной удельный вес занимают полиэтилен высокого и низкого давления (ПЭВД, ПЭНД), пропилен (ПП) и полиэтилентерефталат (ПЭТФ), проблема переработки отходов из этих пластиков является актуальной в настоящее время.

Ранее для утилизации бутылочных отходов из ПЭТФ предложен новый физико-химический метод, основанный на их газофазной обработке в нитрирующей атмосфере с последующей утилизацией продуктов конверсии. Данный метод позволяет утилизировать бутылочные отходы из ПЭТФ независимо от их цвета. В тоже время бутылочные отходы содержат кольца и пробки, произведенные из других видов пластика (например, ПЭВД, ПП). В настоящее время производственные процессы переработки бутылочных отходов, за исключением механической и термической переработки, требуют отделения пробок с кольцами от бутылок. В связи с этим представляло интерес выяснить возможность переработки колец и пробок от пластиковых бутылок путем их газофазной обработки в нитрирующей атмосфере с последующей утилизацией продуктов конверсии.

В работе рассмотрен новый метод переработки пластиковых отходов (фиксирующие кольца и крышки от пластиковых бутылок из-под минеральной и газированной воды), основанный на их газофазной обработке в нитрирующей атмосфере с последующей утилизацией продуктов конверсии. Установлено, что выдержка образцов крышек (ПЭВД, ПП, ПЭТФ) в нитрирующей атмосфере, полученной в результате испарения 12 моль/л HNO_3 , при температурах 403-423 К в течение 24 ч с последующим растворением продуктов конверсии в 1.0 моль/л NaOH и озонированием полученных растворов позволяет провести эффективную утилизацию бутылочных отходов независимо от типа и цвета пластика.

РАЗРАБОТКА ЭКОНОМИЧЕСКИ ЭФФЕКТИВНОЙ СХЕМЫ ПЕРЕРАБОТКИ ЗОЛОШЛАКОВЫХ ОТХОДОВ

Лавриненко А.А., Кунилова И.В., Крылов И.О.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт проблем комплексного освоения недр
им. академика Н.В. Мельникова Российской академии наук,
111020, Москва, Крюковский туп., 4,
e-mail: kunilova_i@ipkonran.ru*

В России накоплено, по разным оценкам, свыше 1,7-1,9 млрд т золошлаковых отходов (ЗШО) от сжигания углей. Актуальность исследований обусловлена низкой степенью их утилизации (в среднем 10-15%) и необходимостью достижения к 2035 году 50%-го уровня утилизации от годового объема образования золошлаковых отходов, запланированного в Энергетической стратегии России¹. Решение экологической проблемы ликвидации отвалов золошлаковых отходов позволит одновременно расширить сырьевую базу страны за счет вовлечения в переработку данного алюмосиликатного минерального сырья.

В настоящее время основным направлением утилизации является использование ЗШО в строительной отрасли, дорожном строительстве и сельском хозяйстве. Однако их непосредственное применение часто ограничено из-за необходимости соблюдения повышенных требований к составу и физико-химическим свойствам заменяемых компонентов (песка и пр.), что является одной из основных причин низкого спроса. Перспективным способом решения экологических проблем, связанных с размещением золошлаковых отходов, является их комплексная переработка с целью производства товарной продукции.

Анализ результатов технико-экономической оценки разработанной в ИПКОН РАН схемы показал возможность практически полной переработки золы, образующейся от сжигания золошлаковых отходов, при производительности 100 т/час, с получением товарных продуктов: угольного концентрата с содержанием углерода 58%, железосодержащего концентрата (58% Fe₂O₃) и алюмосиликатного продукта для строительной, дорожно-строительной и других отраслей промышленности, при дисконтированном сроке окупаемости 1,84 года.

Литература

1. Энергетическая стратегия Российской Федерации до 2035 года. Утверждена распоряжением Правительства Российской Федерации от 9 июня 2020 г. № 1523-р. [Электронный ресурс]: <https://minenergo.gov.ru/system/download-pdf/1026/119047> (дата обращения 11.03.2024).

АНАЛИЗ РЕАЛИЗАЦИИ ПРОЦЕССОВ ТЕХНИКИ ЖИДКИХ ПСЕВДОМЕМБРАН С ЕСТЕСТВЕННОЙ И ПРИНУДИТЕЛЬНОЙ ЦИРКУЛЯЦИЕЙ МЕМБРАННОЙ ФАЗЫ

Лобович Д.В., Милевский Н.А., Заходяева Ю.А., Вошкин А.А.

*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 31,
e-mail: ldv@igic.ras.ru*

Проблема утилизации отработанных источников энергии требует поиска современных эффективных экологически безопасных технологий их переработки. Жидкостная экстракция глубокими эвтектическими растворителями решает проблемы, связанные с применением традиционных экстрагентов¹. Одним из ключевых достоинств глубоких эвтектических растворителей является возможность тонкой настройки экстракционных свойств в зависимости от условий проведения процесса, что делает их перспективными для реализации многоступенчатых процессов экстракционного разделения с использованием техники жидких псевдомембран. В этих условиях глубокий эвтектический растворитель выполняет роль подвижной жидкой мембраны, которая не выводится из аппаратов, а циркулирует между фазами исходного раствора и реэкстрагента².

В работе представлены результаты математического моделирования и экспериментального исследования влияния способа организации циркуляции мембранной фазы в каскаде смесительно-отстойных экстракторов, организованных по принципу жидких псевдомембран на эффективность экстракции Fe³⁺ гидрофобным глубоким эвтектическим растворителем на основе додекановой кислоты, ментола и трибутилфосфата. Анализ полученных данных показал, что эффективность извлечения Fe³⁺ увеличивается с увеличением скорости циркуляции органической фазы, при этом максимальная эффективность достигается при работе установки без принудительной циркуляции.

Литература

1. Kozhevnikova, A. V., et al. Application of hydrophobic deep eutectic solvents in extraction of metals from real solutions obtained by leaching cathodes from end-of-life Li-ion batteries. *Processes*. **2022**. 10(12). 2671.
2. Kostanyan, A. E. et al. On the Operation of a Cascade of Mixing and Settling Extractors in the Modes of Chromatography and in Free Liquid Membranes. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. **2023**. 57(4). 764-769.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 20-13-00387
<https://rscf.ru/project/20-13-00387/>*

ВЛИЯНИЕ ЗАРЯДА И РАЗМЕРА ДИСПЕРСНОЙ ФАЗЫ НА ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ЭЛЕКТРОФЛОТАЦИОННОГО ИЗВЛЕЧЕНИЯ СВЕЖЕОСАЖДЕННОГО СУЛЬФАТА БАРИЯ

Малькова Ю.О., Бродский В.А., Колесников А.В.

*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
Миусская пл., 9, Москва, Российская Федерация, 125047
e-mail: juli.malkova@mail.ru*

Сульфат бария является важным компонентом для отрицательной электродной пасты свинцово-кислотного аккумулятора¹. Благодаря своей высокой отражательной способности $BaSO_4$ представляет интерес и практическую значимость в качестве светоотражающего пигмента на терморегулирующих покрытиях космических аппаратов и ракет². Целью работы является исследование влияния физико-химических характеристик дисперсной фазы на эффективность электрофлотационного извлечения свежесосажденного $BaSO_4$ из сточных вод. Выделение его как ценного компонента из жидких техногенных отходов.

Были проведены исследования размера частиц (d_{av} , мкм) и значений электрокинетического потенциала (ζ , мВ) дисперсной фазы $BaSO_4$. Установлено, что использование катионного флокулянта Superfloc C-454 и неонного Praestol 2500 способно увеличить степень извлечения $BaSO_4$ до 99,7% и снизить остаточную концентрацию в фильтрате до 0,15 мг/л. Такая высокая степень извлечения $BaSO_4$ обусловлена слипанием частиц, до значений d_{av} дисперсной фазы в интервале 26-31 мкм. При этом ζ -потенциал становится положительным (12,7 мВ) или приближается к изоэлектрической точке (-4,4 мВ).

Флокулянт	Марка	d_{av} , мкм	ζ , мВ	$\alpha_{эф}$, %	$\alpha_{эф+ф}$, %	$C_{ост(эф+ф)}$, мг/л
Без флокулянтов		20	-32	59	99,2	0,38
Катионный	Superfloc C-454	31	12,7	95,7	99,7	0,15
	Praestol 854	24	20	88,2	97,2	1,4
Анионный	Superfloc A-110	31	-35	75,3	97,5	1,25
	Praestol 25-40	26	-35	87,9	97,7	1,15
Неионный	Superfloc N-300	42	-4,4	77,5	98,7	0,65
	Praestol 2500	20	-4,4	95,2	99,7	0,16

Литература

1. Гречушников Е.А., Харсеев В.А. Разрядные характеристики отрицательного электрода свинцово-кислотного аккумулятора в присутствии сульфата бария, Евразийский Союз ученых, 2015, №12(21) 42-47 р.
2. Михайлов М.М., Ловицкий А.А. О возможности использования порошков $BaSO_4$ в качестве пигментов терморегулирующих покрытий космических аппаратов, Решетневские чтения, 2018, Т1 539-540 с.

ПОЛУЧЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ БИОУГЛЕЙ ИЗ ОТХОДОВ БИОМАССЫ

**Степачёва А.А., Манаенков О.В., Луговой Ю.В.,
Косивцов Ю.Ю., Сульман М.Г.**

*Тверской государственной технической университет,
170026, Тверь, наб. А. Никитина 22,
e-mail: a.a.stepacheva@mail.ru*

Биоуголь – это углеродсодержащий продукт, получаемый из биомассы. Биоуголь широко используется в качестве источников энергии, сорбентов, катализаторов и т.д. Состав и свойства биоуглей сильно зависят от природы сырья и методов получения. Среди методов получения биоуглей можно выделить пиролиз, торрефикацию и гидротермальную карбонизацию. Превращение отходов биомассы в полезные материалы, такие как биоуголь, является перспективным методом повышения ценности отходов. Развитие технологии производства биоуглей позволяет получать наноразмерные материалы с увеличенной площадью поверхности и улучшенными структурными характеристиками. Однако необходимы дальнейшие исследования, чтобы обеспечить высокий выход биоугля, а также разработка методов производства углеродсодержащих композитов. Существующие технологии производства биоугля из отходов нуждаются в совершенствовании. Ключевым направлением для повышения эффективности процесса карбонизации является оптимизация технологических условий, разработка новых подходов к карбонизации и т.д. Это позволит увеличить выход биоугля и его качество.

В данной работе было проведено сравнение биоугля из березовых и сосновых опилок, полученных путем пиролиза, торрефикации и гидротермальной карбонизации. Были изучены выход биоугля, удельная поверхность, содержание углерода и стойкость к истиранию при использовании в качестве исходного сырья древесных опилок и твердых остатков после гидролиза и ожижения. Впервые было изучено влияние добавления модифицирующих агентов (соли металлов и алкоксисиланы) на свойства биоугля. Было найдено, что введение дополнительных минеральных компонентов в состав биоуглей повышает их стойкость к истиранию за счет создания дополнительного неорганического «каркаса».

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 22-79-10096.

РИСКИ ДЛИТЕЛЬНОГО ХРАНЕНИЯ ХВОСТОВ ОБОГАЩЕНИЯ МОНАЦИТА И ВОЗМОЖНЫЕ ПУТИ ИХ ПЕРЕРАБОТКИ

**Маркин Н.С., Иванников С.И., Шамрай Е.И.,
Мацкевич А.И., Земскова Л.А.**

*Институт химии Дальневосточного отделения Российской академии наук,
690022, Владивосток, проспект 100-летия Владивостока, 159
e-mail: markkin.ns@gmail.com*

Результаты полевой дозиметрии, выполненной на территории неэксплуатируемого хранилища хвостов обогащения монацита, расположенного в г. Балей, Забайкальского края¹⁻³, и лабораторной гамма-спектроскопии отобранных образцов грунта свидетельствуют о неблагоприятной радиоэкологической обстановке на объекте. Выполненная оценка эквивалентных доз облучения населения города указывает на необходимость утилизации накопленных минеральных отходов. Дополнительным фактором, обуславливающим необходимость переработки накопленных отходов является характер распределения радионуклидов по классам крупности почв – удельная активность актиноидов в тонкой фракции грунта (диаметр частиц <100 мкм) приближена к значению, соответствующего очень низкоактивным радиоактивным отходам.

Рассмотрена возможность концентрирования актиноидов и редкоземельных элементов (РЗЭ) методами гравитационного разделения и просеивания. Изучено перераспределение этих элементов в процессе обогащения. Применение комбинированной технологии, сочетающей методы гравитационной сепарации и классификации пород позволяет сократить объём отходов с повышенным содержанием нуклидов в 5 раз, концентрируя целевые элементы в мелкой фракции грунта. Полученный в ходе передела монацит и сопутствующие ему минералы (ильменит, рутил) могут стать сырьем для добычи полезных элементов (РЗЭ и титана), а очищенные грунты могут быть вовлечены в строительство.

Литература

1. Корольков А. Т. *Науки о Земле и недропользование*, 2016, 1, 96.
2. Крюков О. В. и др. *Ликвидация ядерного наследия: 2008-2015 годы*. – М.: Энергопроманалитика, 2015. – 160 с.
3. Маркин Н. С., Иванников С. И., Егорин А. М. *Экология и промышленность России*, 2022, 26, 37

*Работа выполнена в рамках государственного задания ФГБУН Института химии ДВО РАН,
проект № FWFN (0205)-2022-0002*

ПОЛУЧЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ ИЗ КРЕМНИЙСОДЕРЖАЩЕГО ТЕХНОГЕННОГО СЫРЬЯ

Медянкина И.С., Пасечник Л.А., Скачков В.М.

*Институт химии твердого Уральского отделения Российской Академии Наук,
620990, Екатеринбург, улица Первомайская, 91,
e-mail: lysira90@mail.ru*

Создание технологии для извлечения ценных компонентов из техногенных отходов является актуальной задачей металлургической промышленности. Мы применили гидрофторидную технологию для вскрытия силикатов входящих в состав, как красного шлама, так и хвостов мокрой магнитной сепарации с получением смеси простых фторидов, комплексных фторометаллатов и раствора $(\text{NH}_4)_2\text{SiF}_6$, пригодного для синтеза аморфного кремнезема¹. Показали, что реакции сложных силикатных фаз $\text{Ca}_2\text{Mg}_5\text{Si}_8\text{O}_{22}(\text{OH})_2$ и $\text{NaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$ с NH_4HF_2 протекают с экзоэффектами и характеризуются отрицательными значениями ΔG_{298}^0 . Выявили, что при выщелачивании растворами 20-30 масс. % NH_4HF_2 , Т:Ж=1:100 и температуре ~95 °С степень извлечения кремния достигает не менее 98% за 2-3 часа². Полученный аморфный кремнезем соответствует ГОСТ 14922-77. Материалы, синтезированные на основе такого высокодисперсного кремнезема, могут быть использованы в качестве пигментирующих наполнителей. Предложено получение алюмината кобальта CoAl_2O_4 в матрице SiO_2 пропиткой влажного кремнегеля растворами солей алюминия и кобальта с последующей упаркой суспензии до сухих солей. Формирование ярко-синего цвета CoAl_2O_4 в продуктах отжига на фоне SiO_2 установлено при температурах 800-1050 °С. Таким образом, температура образования цветоносной фазы из стехиометрической смеси формиатов металлов снижается до 850 °С. При этом кристаллизация кристобаллита начинается при 1200 °С, что позволяет сохранять высокую удельную площадь поверхности образцов. Повышение температуры отжига до 1050 °С приводит к смещению цветовых координат в системе CIE 1931 в более яркую область синего цвета до $x=0,158$; $y=0,176$, что позволяет использовать $\text{CoAl}_2\text{O}_4/\text{SiO}_2$ в качестве пигментного материала.

Литература

1. Medyankina, I.S., Pasechnik L.A. // *ChemChemTech*, 2023, **66**, 70-77.
2. Medyankina I.S., Pasechnik L.A. // *AIP Conference Proceedings*, 2020, **2313**, 050020.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ИХТТ УрО РАН (№ АААА-А19-119031890025-9.).

ГИДРОМЕТАЛЛУРГИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ПЕРЕРАБОТКЕ АККУМУЛЯТОРОВ С ЛИТИЙ-ТИТАНАТНЫМ АНОДОМ

**Милевский Н.А., Кожевникова А.В., Уварова Е.С.,
Лобович Д.В., Заходяева Ю.А., Вошкин А.А.**

*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 31,
e-mail: mna@igic.ras.ru*

Литий-титанатный анод значительно улучшает эксплуатационные характеристики литий-ионных аккумуляторов, и такие аккумуляторы уже повсеместно применяются, но в ближайшее время их срок эксплуатации закончится, ввиду чего отработанные аккумуляторы одновременно будут представлять собой отход 1 класса опасности и ценное сырье с высокой концентрацией ценных элементов (Li, Co, Ni, Ti, Mn).

В данной работе предложен комплексный подход к переработке отработанных литий-ионных батарей типа NMC-LTO. Было изучено влияние ключевых параметров на процесс выщелачивания активного материала аккумуляторов с использованием соляной кислоты и смеси серной кислоты и перекиси водорода: времени, температуры, соотношения фаз и концентрации кислот. На основании полученных данных была предложена последовательная схема выщелачивания с оптимальными условиями, которая позволяет получить концентрат титана со степенью выщелачивания >99%. В качестве экстрагента для экстракционного разделения раствора выщелачивания был использован гидрофобный глубокий эвтектический растворитель на основе промышленного экстрагента – Aliquat 336/ментол¹. Применение этого класса экстрагентов снижает опасность пожара на производстве, поскольку исключается использование органических растворителей. Высокая эффективность и селективность, которая была показана для Aliquat 336/ментол, позволяет последовательно выделить Mn, Co, Ni и Li с получением концентратов высокой чистоты (>99,9%), варьируя концентрацию соляной кислоты в растворе. Таким образом, была разработана эффективная ресурсосберегающая схема переработки литий-ионных батарей типа NMC-LTO с научно- и технологически обоснованными решениями.

Литература

1. Milevskii N. A. et al. Separation of Li(I), Co(II), Ni(II), Mn(II), and Fe(III) from hydrochloric acid solution using a menthol-based hydrophobic deep eutectic solvent. *Hydrometallurgy*. **2022**. 207. 105777.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 20-13-00387,
<https://rscf.ru/project/20-13-00387/>*

МЕТАЛЛУРГИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ТЕХНОГЕННЫХ ОТХОДОВ ПРОИЗВОДСТВА ФЕРРОМАРГАНЦА

Михайлова Л.Ю., Жучков В.И., Заякин О.В., Сычев А.В.

*Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук,
620016, Россия, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 101,
e-mail: ferrostal@bk.ru*

В применяемых в современных условиях технологических схемах производства марганцевых ферросплавов от руды до готового сплава теряется порядка 50% марганца, добытого из недр, образуется большое количество побочных продуктов: шлаков, отсевов мелких фракций рудного сырья и готовой продукции, шламов, пылей и ряда других материалов, использование и переработка которых позволяют сократить потребление исходного минерального сырья, повысить эффективность основного производства, существенно сократить загрязнение окружающей среды. Основными направлениями повышения сквозного извлечения марганца являются совершенствование технологических процессов получения ферросплавов и доизвлечение ценных элементов из техногенных отходов производства.

По разработанному ранее авторами методологическому подходу к оценке техногенных отходов ферросплавного производства выполнена металлургическая оценка ряда марганецсодержащих материалов. Для изучения отобраны образцы промышленных отходов производства марганцевых сплавов: шлаков, пылей и шламов от выплавки высокоуглеродистого ферромарганца марки ФМн78 и ферросиликомарганца марки МнС17. Проведен анализ химического, фракционного и фазового составов материалов. Показано, что наиболее ценными по содержанию марганца являются пыли газоочистки, образующиеся при выплавке марганцевых сплавов, состоящие в основном из пылевидной фракции марганцевой руды. Методом термодинамического моделирования показана принципиальная возможность применения до 25% марганецсодержащих пылей и шлаков взамен рудных материалов в составе шихты, однако при использовании шлака наблюдается снижение степени извлечения марганца до 3%. Одним из положительных аспектов применения техногенных материалов может являться изменение состава шлака при использовании различных типов рудных материалов. Наиболее перспективным направлением использования марганецсодержащих отходов производства является возможность их применения в технологической цепочке получения комплексных ферросплавов.

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН.

СПОСОБЫ ЗАЩИТЫ ОТ КОРРОЗИИ В ГАЛОГЕНИДНЫХ РАСПЛАВАХ

Никитина Е.В., Карфидов Э.А., Дедюхин А.Е., Зайков Ю.П.

*Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Российской Академии наук,
620066, Екатеринбург, ул. Академическая, 20
e-mail: neekeetina@mail.ru*

Расплавленные соли обладают рядом уникальных свойств, которые делают их чрезвычайно востребованными в разрабатываемых современных электрохимических технологиях, а их использование не приводит к накоплению жидких отходов производства, нуждающихся в утилизации.

Для реализации технологии переработки отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) с использованием расплавленных солей необходимы конструкционные материалы, обладающие химической и механической устойчивостью в этих средах. Высокотемпературные расплавы фторидных и хлоридных солей щелочных металлов перспективны для применения в жидкосолевых ядерных реакторах (ЖСР), однако известно, что они вызывают коррозию металлических конструкционных материалов, которая при длительной эксплуатации реакторной установки приведет к повреждениям, напрямую влияющим на срок службы материалов и безопасность работы оборудования.

Разработка эффективных методов предотвращения коррозии представляет большой интерес при выборе конструкционных материалов, используемых в ЖСР. Известно, что контроль значения окислительно-восстановительного потенциала в расплаве соли позволяет мониторить момент возникновения условий, способствующих окислению конструкционных материалов.

В солевых расплавах высокая температура и концентрация агрессивных веществ, высокая скорость протекания процесса коррозии, разнообразие характера коррозионных поражений ограничивают методы снижения коррозионных потерь.

В высокотемпературных расплавах возможно нанесение защитных металлических и других неорганических покрытий различными способами, в том числе непосредственно в солевом расплаве, пассивация продуктами коррозии, снижение агрессивного действия коррозионной среды.

Для мониторинга коррозии материалов в технологических процессах можно использовать определение технологических свойств коррозионной среды (окислительно-восстановительного потенциала, наличия продуктов растворения элементов металлической конструкции, изменения концентрации коррозионно-активных агентов и др.), определение электродного потенциала металла.

ОТХОДЫ ПРОИЗВОДСТВА СОДЫ КАК СЫРЬЕ ДЛЯ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗА ВОЛЛАСТОНИТА

Николаева А.Д., Логинов С.В.

*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет),
190013, Санкт-Петербург, Московский проспект, дом 24-26/49 литера А
e-mail: nkvitova@list.ru*

Отходы химических предприятий могут представлять серьезную опасность для окружающей среды. Одним из многотоннажных отходов, которые оказывают существенное влияние на экологическую обстановку, является дистиллерная жидкость. Существующие технологии переработки не полностью решают проблему, и отходы часто скапливаются в шламонакопителях или сбрасываются в водоемы.

Одним из направлений по переработке дистиллерной жидкости является получение из нее востребованных материалов, например силикатов кальция, к которым относится широко применяемый во многих областях промышленности волластонит.

В результате работы из дистиллерных жидкостей АО «Башкирская содовая компания» и АО «Крымский содовый завод» низкотемпературным способом получен хорошо окристаллизованный волластонит с низким содержанием примесей.

Разработаны технологические схемы получения волластонита из дистиллерной жидкости, проведена предварительная экономическая оценка целесообразности такого производства и разработана предварительная схема для создания передвижной пилотной установки, включающая 4 блока:

1 блок – хранение реактивов (жидкого стекла), с поддержанием необходимых условий: отсутствие взаимодействия с атмосферой, оптимальная температура 20 ± 10 °С;

2 блок – зона проведения процесса, включает в себя: реактор с перемешивающим устройством, автоматическую систему подачи жидкого стекла из блока 1 и подачи дистиллерной жидкости из шламонакопителя или производства.

3 блок – фильтрации и промывки, включающий фильтровальную установку и выпарной аппарат с конденсатором.

4 блок – хранение продуктов: волластонит и хлорид натрия. Условия хранения: сухой воздух, температура 30 ± 10 °С.

Работа выполнена в рамках гранта РНФ (проект №21-79-30029) «Разработка комплекса технологий переработки отходов 3-5 классов опасности с получением полезных продуктов»

СПОСОБ УТИЛИЗАЦИИ СУЛЬФИДНО-МЫШЬЯКОВИСТОГО КЕКА

Новиков Д.О., Краухин С.А.

*Технический университет УГМК,
624090, Верхняя Пышма, Свердловская область, Россия, Успенский проспект 3,
e-mail: Dm93nvk@gmail.com*

При переработке сульфидных медно-цинковых концентратов на медеплавильных заводах формируются сульфидно-мышьяковистые кеки, которые требуют утилизации¹. Для решения экологических проблем, связанных с мышьяком в металлургической и горнодобывающей промышленности, необходимо надежно концентрировать и фиксировать мышьяк в технологических отходах с последующей их утилизацией.

Сплавление сульфидно-мышьяковистого кека с элементной серой (15-20 % от массы кека)² приводит к образованию стеклообразных нерастворимых форм сульфида мышьяка менее токсичных и компактных по сравнению с порошкообразным кеком. Полученный нестехиометрический сульфид мышьяка, обладает высокой химической устойчивостью, подтвержденной результатами выщелачивания по методике TCLP³.

Была идентифицирована структура утилизируемого сульфидно-мышьяковистого кека. Методами термодинамического моделирования оценены количество и состав равновесных фаз, оптимизировано количество вводимых добавок элементной серы. Построена адекватная математическая модель, позволяющая анализировать процесс получения химически инертных соединений мышьяка и минимизировать количество дорогостоящих и трудоёмких установочных опытов. Предложена технологическая схема переработки кеков, путем сплавления с элементной серой для получения малорастворимых сульфидов, пригодных для длительного хранения или захоронения на полигонах⁴.

Литература

1. Selivanov E. N. et al. Arsenic in Chemical and Metallurgical Conversions of Copper-zinc Concentrates //KnE Materials Science. – 2020. – С. 446–450-446–450.
2. Новиков Д.О., Галкова Л.И., Мальцев Г.И. *Патент 2789975 РФ*, 2023.
3. Novikov D. O., Galkova L. I., Maltsev G. I. The disposal of sulfide-arsenic cake //NON-FERROUS METALLURGY. – 2023. – Т. 29. – №. 1. – С. 16-25.
4. Новиков Д.О. Физико-химическое обоснование утилизации мышьяковистых кеков медно-цинкового производства.: дис. ... канд. техн. наук: 05.16.02: защищена 22.04.2022: утв. 14.10.2022 – М., 2022. – 144 с.

АЗОТНОЕ ПОСТДОПИРОВАНИЕ УГЛЕЙ, ПОЛУЧЕННЫХ ИЗ ЗОЛЫ РИСОВОЙ ШЕЛУХИ

Новоторцев Р.Ю., Харитонов Л.Д., Савилов С.В.

*МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет,
119234, Москва, Ленинские горы 1/3,
e-mail: suspect11@gmail.com*

Адсорбенты на основе активированного угля востребованы во многих областях науки и техники. Поиск эффективных методов получения и активации углей является актуальной задачей по настоящее время¹. С другой стороны, существует еще одна актуальная проблема - утилизация отходов сельского хозяйства. Например, при производстве риса остается отход, рисовая шелуха (РШ), а ее количество достигает 150 млн тонн в год². При этом рисовую шелуху можно использовать в качестве сырья для получения углей, что станет хорошим методом переработки этого отхода.

В данной работе изучены угли, выделенные из золы РШ после пиролиза и обработанные азотсодержащими реагентами термическим и гидротермальными методами. Исследована возможность химической модификации поверхности угля и изменение текстурных характеристик при допировании поверхности азотом с использованием мочевины, аммиака и аминоксидина. В результате получены угли, содержащие до 6.8 ат.% азота на поверхности и обладающие удельной площадью поверхности до 910 м²/г.

Также исследованы адсорбционные свойства углей в отношении диклофенака и бензойной кислоты. Показано, что полученные угли демонстрируют высокую адсорбционную ёмкость. При этом азотирование углей открывает возможность направленного улучшения адсорбционных характеристик.

Литература

- 1 M. Tsarpali et al. Activated carbon production from algal biochar: Chemical activation and feasibility analysis. Fuel Communications, 19 (2024), pp. 100-115.
2. W.-T. Tsai, Y.-Q. Lin, H.-J. Huang. Valorization of rice husk for the production of porous biochar materials. Fermentation, 7 (2021), pp. 70-82.

Работа выполнена в рамках государственного задания «Физикохимия поверхности, адсорбция и катализ» № АААА-А21-121011990019-4.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АНОДОВ НА ОСНОВЕ PbO_2 В ПРОЦЕССЕ ПОЛУЧЕНИЯ ХЛОРАТОВ НАТРИЯ

Ньеин Ч. М., Хейн Т.А., Бродский В. А., Перфильева А.В.

*Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева,
Российская Федерация, 125047 Москва, Миусская пл. 9,
e-mail: chanmoe12693@gmail.com*

Аноды на основе PbO_2 относятся к малоизнашивающимся электродам, находящим применение в электрохимическом синтезе в качестве нерастворимых анодных материалов¹. Проведено исследование электрохимического синтеза хлоратов в электролизёрах: с мембраной (МК-44), без мембраны (в присутствии дихромата натрия), без мембраны без дихромата натрия. Условия эксперимента: $i = 1 \text{ А/дм}^2$, $V_{\text{анолита и католита}} = 250 \text{ мл}$, катод- нержавеющая сталь, анод PbO_2/Ti .

Таблица 1. Сравнение эффективности процесса получения хлората натрия

Электролиз	E_{max} , мВ	pH (τ_{max})	τ (мин)	ВТ, %
С мембранной	1134,6	2,15	30	20
С дихроматом натрия	940	8,75	360	37
Без дихромата натрия	909	8,803	360	11,6

Наибольший выход по току (ВТ), 37% достигается при электролизе с дихроматом натрия за 360 минут. В электролизере с мембраной ВТ - 20 % (30 минут). На рисунке 1 (а, б) представлены зависимости электродного потенциала и рН от времени электролиза в различных условиях, что позволяет оценить полноту и скорость электрохимического синтеза.

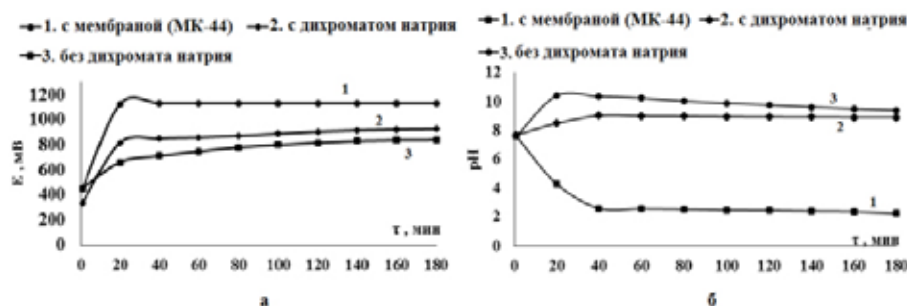


Рисунок 1. Физико-химическое поведение электродов $PbO_2 + TiO_2$ (1 г/л)

Литература

1. Ньеин Ч.М., Абакумов М.В., Бродский В.А., Колесников А.В. Получение новых анодных материалов на основе диоксида свинца с введением композиционных добавок в их структуру. Материалы Международного молодежного научного форума «ЛОМОНОСОВ-2023» С. 1.

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ РАЗДЕЛЕНИЯ РАДИОАКТИВНЫХ БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Осипенко А.А.

ФГАОУ ВПО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»,
620002, Екатеринбург, улица Мира 19,
e-mail: vida1995@yandex.ru

Радиоактивные благородные металлы (РБМ - Rh, Ru, Pd, Ag) находятся в отработанном ядерном топливе (ОЯТ) в виде металлических включений – сплава Mo–Pd–Tc–Ru–Rh с актинидами и продуктами деления (ПД), а также соединений с неметаллическими ПД, например, иодид палладия¹. При переработке ОЯТ в пурекс-процессе РБМ распределяются по двум продуктам: частицы металлического сплава в основном – в нерастворимые осадки (НО) узла растворения, а остальное – в рафинаты первого экстракционного цикла². Выделение актинидов и РБМ из НО позволит снизить радиотоксичность отходов, подготовит отходы к захоронению, вернет актиниды в топливный цикл и за счет короткоживущих и стабильных изотопов родия и рутения оплатить часть переработки ОЯТ³. Устойчивой технологической средой к тепловыделению, радиолизу, вызывающему вторичное осадкообразование, являются расплавы хлоридов. Для разработки и оптимизации процессов выделения благородных металлов необходимы данные об их физико-химических свойствах и поведении в рабочих средах.

В настоящей работе методом абсорбционной спектроскопии была доказана температурная устойчивость хлоридов родия и палладия в расплаве LiCl-KCl-CsCl до 923 К. Комбинированным методом определена температура начала разложения трихлорида рутения в LiCl-KCl-CsCl. Методом ЭДС определены температурные зависимости условных стандартных потенциалов рутения, родия, палладия и серебра, изменения энергии Гиббса, энтальпии и энтропии образования хлоридов этих БМ и соответствующие коэффициенты активности в LiCl-KCl-CsCl. Проведена оценка максимальных коэффициентов очистки и радиоактивности конечных продуктов электролиза при внутригрупповом разделении РБМ.

Переработка НО позволит выделить и очистить от примесей родий и рутений, которые после распада их короткоживущих изотопов, будут иметь активность меньше МЗА и пригодны для различного применения.

Литература

1. Matsui T., Ohkawa M., Sasaki R., Naito K. *Journal of Nuclear Materials*, 1993, **200**, 11–15.
2. Беляев А.В. *Ж. структурной химии*, 2003, **44** (1), 39-47.
3. IAEA *Technical Report Series*, 1990, **308**, 18-19.

КОМПЛЕКСНЫЕ СУЛЬФАТЫ В ГИДРОМЕТАЛЛУРГИИ СКАНДИЯ

Пасечник Л.А., Медянкина И.С., Липина О.А.

ФГБУН Институт химии твердого тела УрО РАН,
620990, Екатеринбург, ул. Первомайская, 91,
e-mail: pasechnik@ihim.uran.ru

Создание эффективных технологий и развитие перспективных областей материаловедения являются необходимыми условиями перехода к ресурсосбережению. Не менее важными являются поиск перспективных сырьевых источников редких металлов, в том числе скандия. С целью разработки селективного выделения скандия из многокомпонентных серноокислых растворов нами предлагается его осаждение в виде комплексных сульфатов. Кристаллизация двойных сульфатов редкоземельных элементов (РЗЭ) является классическим методом их разделения¹. В то же время, скандий в отличие от РЗЭ проявляет некоторую аномалию свойств и большее сходство с металлами с малым ионным радиусом (Fe^{3+} , Al^{3+} , Ti^{4+} , Zr^{4+} и др.). Поэтому в многокомпонентных растворах возможно проявление эффектов взаимного влияния элементов, осаждения, соосаждения и маскирования свойств индивидуальных соединений. Такое поведение объясняет необходимость детального изучения комплексных сульфатов в системах $\text{M}^+\text{SO}_4\text{-Sc}_2(\text{SO}_4)_3\text{-H}_2\text{O}$, в частности составов $\text{MSc}(\text{SO}_4)_2$ и $\text{M}_3\text{Sc}(\text{SO}_4)_3$.

Для разделения скандия и сопутствующих металлов, присутствующих в скандиевом концентрате², полученном из красных шламов глиноземного производства, нами уже разработаны способы, которые могут быть реализованы до выделения чистых соединений. Селективное осаждение комплексов скандия основано на снижении растворимости при повышении кислотности в присутствии ионов-комплексобразователей. При изучении модельных систем впервые получены структурные данные для некоторых соединений, а на основе комплексных сульфатов скандия синтезированы новые перспективные оптические материалы^{3,4}.

Литература

1. Коровин С.С., Зимина Г.В., Резник А.М., Букин В.И., Корнюшко В.Ф. Редкие и рассеянные элементы. Химия и технология. – М.: МИСИС, 1996. – 376 с.
2. Pasechnik L.A., Skachkov V.M., Chufarov A.Yu. et al. *Hydrometallurgy*, 2021, **202**, 105597.
3. Pasechnik L.A., Tyutyunnik A.P., Enyashin A.N. et al. *CrystEngComm*, 2018, **20**, 3772.
4. Pasechnik L.A., Lipina O.A., Medyankina I.S. et al. *J. Alloys Compd.*, 2024, **98415**, 173968

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 24-29-20278.

РЕГЕНЕРАЦИЯ ОТРАБОТАННЫХ МОТОРНЫХ МАСЕЛ ВЫСОКОКРЕМНИСТЫМ СОРБЕНТОМ

**Пестерникова Г.Г., Шарифуллин А.В., Обухова В.Б.,
Фазлыев А.Р., Каримуллин А.Н.**

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,
420015, Российская Федерация, Республика Татарстан, Казань, ул. К.Маркса, 68,
e-mail: pest_gal@mail.ru*

Рост объемов производства и потребления смазочных материалов обуславливает постоянное увеличение объемов отработанных масел. На территории Российской Федерации только за год собирается порядка 2 млн. тонн различных отработанных масел, при этом на переработку отправляется только 3,3% от общего объема потребления, остальная часть, по причине отсутствия надлежащей системы сбора и рекуперации, сжигается. С целью ресурсосбережения и снижения экологической нагрузки на окружающую среду, возникает острая необходимость в создании технологии регенерации с выделением ценных компонентов масел.

Цель исследования – разработка эффективной технологии регенерации отработанных моторных масел с применением вакуумной дистилляции и сорбционной доочистки и получение масляной основы по физико-химическим и эксплуатационным характеристикам, соответствующей нормативным требованиям.

В качестве сорбента испытывался опытный образец «Силином-СОРБ», разработанный на кафедре «Технология неорганических веществ и материалов» ФГБОУ ВО «КНИТУ». Сорбент представляет собой микронизированный мезопористый аморфный диоксид кремния с удельной поверхностью 460 м²/г. Определено, что синтезированный сорбент имеет высокую адсорбционную активность, селективность по отношению к смолистым веществам и серосодержащим соединениям отработанных масел, с достижением дезодорирующего эффекта. Содержание общей серы в исходном отработанном масле 0,229 % масс., после вакуумной дистилляции снижается в пять раз до 0,045 % масс. и после сорбционной доочистки – 0,016 % масс. Показатель содержания смолистых веществ также существенно изменяется, в отработанном масле составляет 24,6 % масс., в восстановленном 0,2 % масс.

В результате проведенных исследований установлено, что комплексный метод регенерации отработанных моторных масел с использованием высококремнистого сорбента позволяет восстановить показатели качества масел до требований для марки индустриального масла И-12А согласно ГОСТ 20799 – 2022 (Масла индустриальные. Технические условия).

ПЛАЗМЕННО-ДУГОВОЙ ЭЖЕКТОР ДЛЯ ПЕРЕРАБОТКИ ОТХОДОВ

Петренко П.И., Артемов А.В., Воцинин С.А., Переславцев А.В.

*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»,
123182, Россия, Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1,
e-mail: petrenko_pi@nrcki.ru*

Для решения экологических проблем актуальным является размещение установок плазменной переработки отходов на мобильной платформе (железнодорожном вагоне, морских и речных судах). Одним из перспективных решений данной задачи представляется использование плазменно-дугового эжектора. Нами разработана математическая модель такого эжектора.

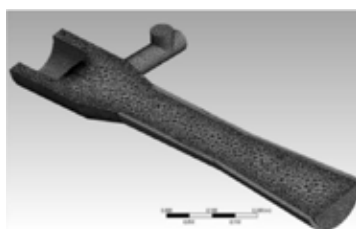


Рисунок 1. Сетчатая модель плазменно-дугового эжектора.

На основе проведенного анализа литературы¹ и расчетов материального и теплового баланса выполнено математическое моделирование плазменного эжектора с целью получения основных характеристик данного узла.

С использованием модели рассчитаны основные параметры и распределения температур, скорости и линий тока газа. На основе расчетов планируется спроектировать экспериментальную установку.

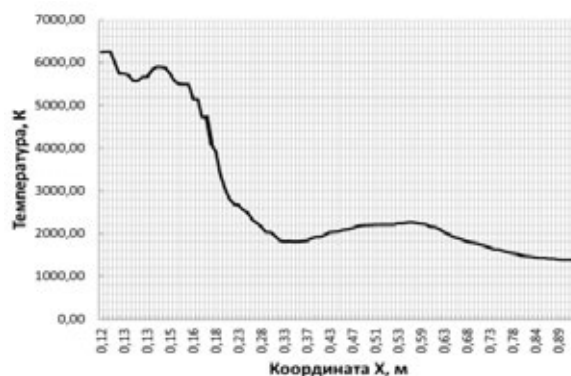


Рисунок 2. Распределение температур по оси эжектора.

Литература

1. Wood S. et al. Review of state-of-the-art waste-to-energy technologies //Stage Two Report–Case studies, WSP, London, UK. 2013.

МОБИЛЬНЫЕ МАЛОГАБАРИТНЫЕ УСТАНОВКИ ДВОЙНОГО НАЗНАЧЕНИЯ ДЛЯ ПЛАЗМЕННОЙ ПЕРЕРАБОТКИ ОТХОДОВ

Петренко П.И., Артемов А.В., Воцинин С.А., Переславцев А.В.

*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»,
123182 Россия, Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1,
e-mail: petrenko_pi@nrcki.ru*

Разработаны мобильные малогабаритные установки пламенной переработки отходов производительностью 1300 и 6250 т/год для работы, как в стационарном, так и в передвижном варианте. Установки смонтированы в одном (1300 тонн отходов в год) или в трех (6250 тонн отходов в год) стандартных 40-футовых контейнерах. Установка, представленная на рисунке 1 изготавливается в заводских условиях.

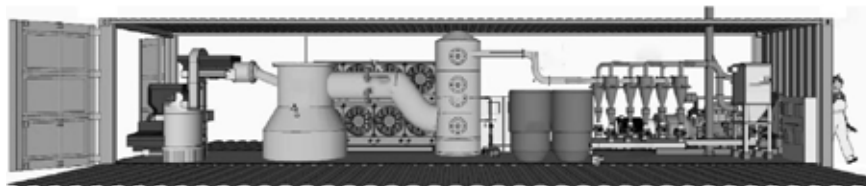


Рисунок 1. Установка пламенной переработки отходов производительностью 1300 тонн отходов в год.

Установка, представленная на рисунке 2 монтируется на месте из 3-х контейнеров с оборудованием, изготовленных в заводских условиях.

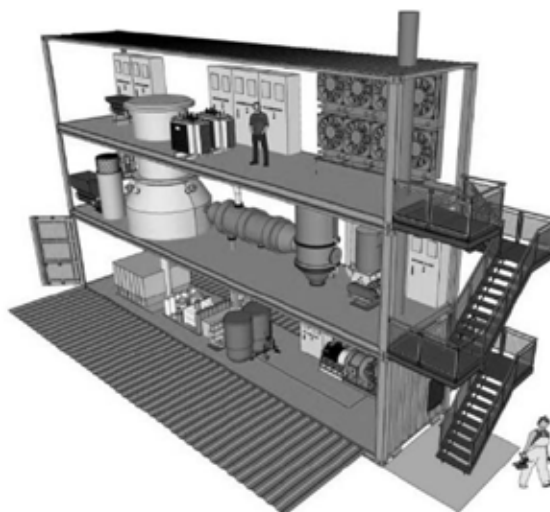


Рисунок 2. Модульная установка пламенной переработки отходов производительностью 6250 тонн отходов в год.

Мобильные и модульные установки плазменной переработки отходов могут использоваться в гражданском секторе и на кораблях и базах ВМФ России на Арктическом побережье для переработки любых видов отходов, включая опасные отходы.

Литература

1. А.В. Переславцев, С.А. Воцинин, А.В. Артемов. Плазменная переработка отходов – Инфра-инженерия, 2023 – 436с.

СРАВНЕНИЕ ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЭКСТРАКТОВ РАСТВОРЁННОГО ОРГАНИЧЕСКОГО ВЕЩЕСТВА И МОРСКОЙ ВОДЫ МОРЕЙ АРКТИЧЕСКОГО ШЕЛЬФА

Печникова Г.С., Хрептугова А.Н., Перминова И.В.

*Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет
119991, Москва, Ленинские горы 1-3,
e-mail: pechnikovagalina2000@yandex.ru*

Более 50% общемировых запасов органического вещества сосредоточено в многолетнемерзлых отложениях арктического региона¹. Деградация вечной мерзлоты приводит к высвобождению растворенного органического вещества (РОВ) в моря Арктического шельфа, что влияет на их молекулярный состав и оптические характеристики РОВ.

Цель работы - сравнение оптических характеристик РОВ морской воды Арктического шельфа и образцов РОВ, выделенных при помощи твердофазной экстракции (ТФЭ). Образцы воды (22 шт.) и РОВ (22 шт.) были отобраны в 2020 г. во время 82-й экспедиции НИС «Академик Мстислав Келдыш» в трех районах шельфа: Карском море, море Лаптевых и Восточно-Сибирском море. Оптические свойства образцов изучались с использованием флуоресцентной и Уф-видимой спектроскопии.

Для образцов морской воды и экстрактов РОВ получены значения $SUVA_{254}$ составляющие 0,026 и 0,029 см*Л/мг в Карском море, 0,017-0,022 и 0,017-0,029 см*Л/мг в море Лаптевых, 0,010-0,013 и 0,010-0,020 см*Л/мг в Восточно-Сибирском море. Значения ASM_{350} для тех же образцов составили 4,77 и 4,88 в Карском море, 4,85-5,72 и 4,32-5,52 в море Лаптевых, 5,28-6,06 и 5,01-5,90 в Восточно-Сибирском море. Полученные значения параметра $SUVA_{254}$ снижаются в направлении с запада на восток, что соответствует уменьшению содержания ароматических структур. Увеличение значения ASM_{350} наблюдалось по мере снижении влияния пресноводного стока и терригенного выноса, отражая переход к автохтонному типу РОВ. Значения асимметрии для проб морской воды превышают значения для экстрактов РОВ (7-20%) для всех изученных образцов, что свидетельствует о большем «синем» вкладе белковоподобных алифатических структур в пул РОВ морской воды.

Литература

1. Tamocai C., Canadell J. G., Schuur E. A. G., Kuhry P., Mazhitova G., Zimov S. Soil organic carbon pools in the northern circumpolar permafrost region // *Global Biogeochem Cycles*, 2009, **23**, № 2.

Работа в части измерения спектров флуоресценции выполнена при финансовой поддержке проекта КНП № 075-15-2024-533.

2,2,3,3,4,4,4-ГЕПТАФТОРБУТИЛАЦЕТАТ. ПОЛУЧЕНИЕ И ОЧИСТКА МЕТОДОМ РЕАКЦИОННОЙ ДИСТИЛЛЯЦИИ

Полковниченко А.В., Лупачев Е.В.

*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,
119991 Москва, Ленинский проспект, 31
e-mail: polkovnichenkoav@gmail.com*

Фторированные эфиры востребованный продукт, который широко используемый в различных областях промышленности. При этом, традиционный химический метод получения таких веществ характеризуется большим количеством технологических стадий и аппаратов, низкими конверсией и выходом по целевому продукту, чем и обусловлена высокая стоимость этих соединений. Такая классическая схема структуры процесса может быть существенно улучшена в результате интеграции реакции и подсистемы разделения в одном многофункциональном аппарате.

Объектом исследования в настоящей работе является процесс реакционной дистиляции, направленный на получение гептафторбутилацетата, который входит в состав фармацевтических аэрозольных композиций; выступает в качестве сополимера при обработке поверхностей; используется при получении радиационно-чувствительных смол, сульфата этиллития, среды для удержания заряда (электрета), при производстве пленочных внешних батарей и батарейных модулей (мембран и диафрагменных вставок); является прекурсором управляемых радикальных инициаторов.

При получении гептафторбутилацетата за основу процесса реакционной дистиляции была взята реакция этерификации гептафторбутанола и уксусной кислоты в присутствии кислого катализатора. Процесс осуществляли на ректификационной колонне периодического действия. Такая интеграция позволила существенно повысить эффективность процесса: преодолены термодинамические ограничения на процесс разделения реакционной смеси, обеспечены высокие конверсия и выход продукта и, что весьма важно, процесс осуществлен по более простой технологии в одном аппарате за один технологический цикл.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 23-79-01164. Исследования проводились с использованием оборудования ЦКП ФМИ ИОНХ РАН.

ВЛИЯНИЕ ДЕТОНАЦИОННЫХ НАНОАЛМАЗОВ НА АНТИКОРРОЗИОННЫЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИЦИЙ ИНГИБИРОВАННЫХ ОЛЕОГЕЛЕЙ

Риоева А.Г., Иванов М.Г., Иванов Д.М.

*УРФУ им. Первого президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
e-mail: azizarioeva02@gmail.com*

Изучение и разработка защитных покрытий для объектов этнографического наследия является предметом постоянных исследований, основной целью которых является обеспечение защиты музейных предметов на как можно длительный период. Целью настоящей работы явилось исследование влияния детонационных наноалмазов (ДНА) на антикоррозионные свойства олеогелей на основе пчелиного воска в условиях воздействия в камере солевого тумана¹. ДНА диспергировали в углеводородном растворителе с использованием УЗИ в присутствии синтетических нейтральных сульфатов и пчелиного воска.

Были использованы наноалмазы производства ООО НПП «Сидал», г. Качканар, полученные методом «сухого синтеза» с бронированием заряда ВВ с последующим окислением на воздухе в присутствии борного ангидрида. Методами РФА (Bruker D8 Advance), растровой микроскопии и микроанализа, проведенных на рэм ZEISS Auriga с системой энергодисперсионного анализа Oxford Instruments Energy250 (детектор X-Max 80)(Рис) установлено наличие графита в исследуемых образцах ДНА, а также присутствие борной кислоты.

Результаты исследования синтезированных олеогелей, модифицированных ДНА показали, что антикоррозионное действие (в условиях испытаний в камере солевого тумана, при 45 °С) композиций в присутствии ДНА усиливается в несколько раз, это проявляется как по площади поражения поверхности за определенное время, так и по времени начала появления коррозии.

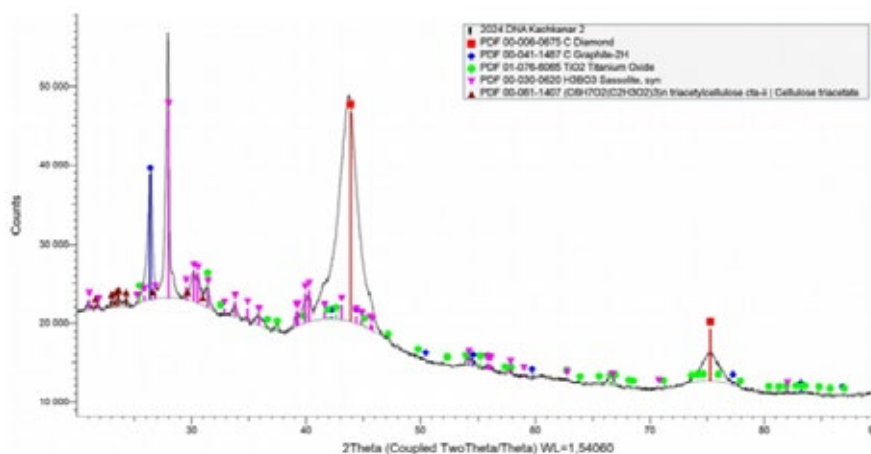


Рисунок 1. Качественный фазовый анализ пробы «ДНА Качканар-2» (DiffracSuite EVA v6.0; ICDD RDF-2 2023)

Литература

1. Иванов М.Г., Иванов Д.М., Риоева А.Г., Бурая И.В. Закономерности изменения антикоррозионного действия присадки НССК-30 в базовом масле и олеогелях: влияние щелочного числа. Бутлеровские сообщения. 2023, Т.76. №10. С.46-54

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В ОКСИДАХ ПРИ ВОССТАНОВЛЕНИИ МЕТАЛЛОВ В МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ АГРЕГАТАХ

Рощин В.Е., Гамов П.А.

*Южно-Уральский государственный университет (НИУ),
454080, г. Челябинск, проспект Ленина 76,
e-mail: roshchinve@susu.ru*

Известно, что в материалах, подвергаемых переработке в металлургических агрегатах – в самих металлах, а также в твёрдых рудах и расплавленных шлаках нет ни атомов, ни молекул. В металлах и рудах есть катионы металлов и так называемые «свободные» (валентные) электроны, а в рудах и шлаках – те же катионы и те же валентные электроны атомов металла, которые в значительной степени связаны уже с анионами и обеспечивают связь последних с катионами. Суть превращения металлов в оксид при окислении любым окислителем и восстановления металлов из руды любым восстановителем заключается в перераспределении валентных электронов атомов металла. Эти процессы описываются электрохимическими реакциями $Me^0 = Me^{2+} + 2e$ и $Me^{2+} + 2e = Me^0$ соответственно. Кроме того, известно, что при параметрах T и P_{O_2} , существующих в восстановительных агрегатах, газовая фаза представляет собой низкотемпературную плазму, в которой наряду с молекулами и атомами присутствуют ионы и свободные электроны, а оксиды обладают ионной и электронной проводимостью.

Исходя из представлений об окислительно-восстановительных реакциях как процессах обмена внешними («валентными») электронами, нами разработаны электронная теория и методы селективного бесконтактного восстановления металлов в объёме твёрдых оксидов, основанные на разном средстве катионов к электрону¹. Согласно электронной теории, электрохимическая реакция восстановления может протекать внутри твёрдой оксидной фазы, если к катионам поступают свободные электроны либо катионы дрейфуют к источнику электронов. В первом случае в оксиде образуется россыпь частиц не загрязнённого восстановленного металла, во втором – металлическая оболочка на оксиде. Приведены результаты экспериментального подтверждения теории и возможности практического использования результатов в новых технологических процессах.

Литература:

1. В.Е. Рощин, А.В. Рощин. Физика пирометаллургических процессов. Учебник. – Москва; Вологда: Инфра-Инженерия, 2021. – 304 с.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-29-10119,
<https://rscf.ru/project/23-29-10119/>»*

ПЕРЕРАБОТКА ВЫСОКОМИНЕРАЛИЗОВАННЫХ ТЕХНОГЕННЫХ ОТХОДОВ

Рубин Е. М., Бродский В. А., Колесников А. В.

*Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева,
125047, Москва, Миусская пл., 9
e-mail: egor.rubin@list.ru*

В настоящее время система обращения с отходами в Российской Федерации претерпевает существенные изменения. Основные нововведения связаны именно с особоопасными отходами I–II классов опасности¹. Значительное количество подобных отходов представляет собой жидкую фракцию с высокой минерализацией. Примерами могут служить: отработанные сернокислые растворы, гальваношламы и пр. В настоящее время подобные отходы захораниваются или термически обезвреживаются.

Очевидно, что данный подход не удовлетворяет современным требованиям по обращению с отходами. Все больше научных изысканий посвящаются получению новых продуктов из различных отходов. В работе проведен обзор наиболее перспективных направлений, а также полученных на данном этапе результатов исследований РХТУ им. Д. И. Менделеева.

Наиболее перспективной технологией в области утилизации жидких отходов в настоящее время является обратный осмос (ОО), это подтверждается отечественными и зарубежными исследованиями². Правильно спроектированная установка позволяет одновременно достичь существенной степени концентрирования отхода и получить очищенную воду. Высокоминерализованный поток ОО является перспективным сырьем для получения полезных продуктов. Синтез новых полезных компонентов возможен с применением электрохимических технологий.

В настоящее время сформирована концепт-схема подобной технологии, а также проводится ряд экспериментов по получению полезных продуктов, среди которых: пероксодисерная кислота, пероксид водорода³, гидроксид натрия и гипохлорит. Результаты работы найдут применение в общей химической технологии и в государственных проектах, к примеру в комплексах по переработке особоопасных отходов, проектируемых ФГУП «ФЭО».

Литература

1. Техногенные отходы I–II классов опасности - ресурс для получения вторичных продуктов / А. Г. Мажуга, В. А. Колесников, Д. А. Сахаров, М. В. Корольков // Теоретическая и прикладная экология. – 2020. – № 4. – С. 61–67. – DOI 10.25750/1995-4301-2020-4-061-067. – EDN QXMDTY.
2. Десятов, А. В. Обратноосмотическая очистка высокоминерализованных сточных вод с внутрицикловым выделением кристаллических солей / А. В. Десятов, Т. А. Павлицева, А. В. Колесников // Теоретическая и прикладная экология. – 2022. – № 4. – С. 124–130. – DOI 10.25750/1995-4301-2022-4-124-130. – EDN QQPAAE.
3. Разработка современной электрохимической технологии получения концентрированного пероксида водорода высокой чистоты / А. В. Колесников, М. В. Абакумов, В. А. Бродский [и др.] // Технологии переработки отходов с получением новой продукции: 2022. – С. 40–44. – EDN HNUESC.

ВЫДЕЛЕНИЕ Li, Fe И Al ИЗ ОТРАБОТАННЫХ LFP АККУМУЛЯТОРОВ

Саломатин А.М.,^{a,b} Зиновьева И.В.,^a Заходяева Ю.А.,^a Вошкин А.А.^a

^a*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект, 31
e-mail: amsalomatina@edu.hse.ru*

^b*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»,
101000, Москва, ул. Мясницкая, 20*

Повсеместное повышение спроса на литий-ионные аккумуляторы, а также современные экологические тенденции устойчивого развития приводят к необходимости создания новых технологий переработки химических источников тока, таких как литий-железо-фосфатные аккумуляторы (LFP), которые являются одним из наиболее перспективных источников энергии в электромобилях будущего.

Гидрометаллургический метод уже успешно применяется для переработки источников тока¹, однако процесс комплексной переработки активных материалов LFP до сих пор не описан. Кроме того, перспективным является применение более экологичных современных экстрагентов – эвтектических растворителей².

В данной работе изучен процесс выщелачивания LFP с использованием ряда минеральных кислот при варьировании условий. Результаты исследований показали, что наибольшая степень выщелачивания (>85%) Li, Fe и Al достигается 2M раствором HCl при комнатной температуре и соотношении твердое: жидкость = 1:25 в течение 5 ч.

Для экстракции Li(I), Fe(III) и Al(III) из хлоридных растворов выщелачивания LFP предложен гидрофобный эвтектический растворитель трибутилфосфин сульфида/ментол(3:7). Изучена его экстракционная способность по отношению к ряду исследуемых металлов. Установлены зависимости степени извлечения металлов от концентрации HCl и NaCl, соотношения фаз и исходной концентрации металла, позволяющие охарактеризовать механизм межфазного распределения металлов в предложенной системе. Установлены термодинамические параметры процесса экстракции. Показана легкая регенерация эвтектического растворителя и возможность его многократного использования.

Литература

1. Davis K., Demopoulos G.P. *RSC Sustainability*, 2023, **1**, 1932.
2. Zante G., Boltoeva M. *Sustainable Chemistry*, 2020, **1**, 238.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 23-79-10275.
<https://rscf.ru/project/23-79-10275/>.*

ЭФФЕКТИВНОСТЬ РАЗДЕЛЕНИЯ СИСТЕМ СПИРТ – СЛОЖНЫЙ ЭФИР С ПОМОЩЬЮ ГЛУБОКИХ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ

Смирнов А.А., Голикова А.Д., Самаров А.А., Тойкка М.А.

*Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии,
198504, Санкт-Петербург, Университетский пр. 26,
e-mail: a.a.smirnov97@yandex.ru*

Глубокие эвтектические растворители (ГЭР) являются прорывной альтернативой ионным жидкостям и летучим органическим растворителям в разных областях химической технологии¹. В последнее время ГЭР хорошо зарекомендовали себя в качестве экстрагентов для разделения азеотропных смесей². В данной работе проведен комплекс исследований по оценке эффективности разделения различных систем спирт – сложный эфир с помощью ГЭР на основе хлорида холина. Для этого было проведено исследование фазового равновесия жидкость-жидкость в псевдотройных системах спирт – сложный эфир – ГЭР, и затем рассчитаны коэффициенты распределения и показания селективности. Количественный анализ равновесных фаз проводили методом ¹H ЯМР спектроскопии. На рисунке 1 приведен пример зависимостей селективности разделения системы 1-бутанол – 1-бутилформиат от содержания спирта в системе с помощью 4 различных ГЭР.

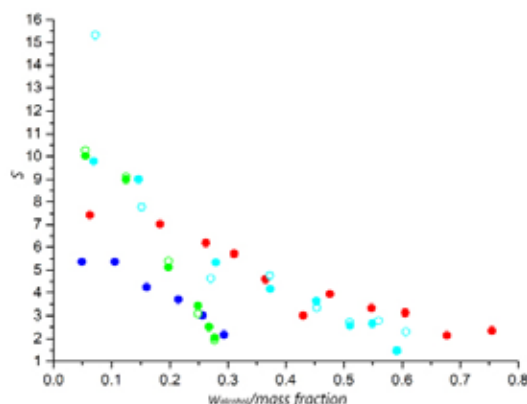


Рисунок 1. Зависимость селективности (S) от массовой доли спирта в системе 1-бутанол – 1-бутилформиат – ГЭР

Литература

1. Mgxadeni N. et al., *Journal of Ionic Liquids*, 2023, **3** (2), 100065.
2. Gilani A., et al., *Journal of Molecular Liquids*, 2021, **340**, 117196.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 20-73-10007, <https://rscf.ru/en/project/20-73-10007/>). Аналитическая часть работы выполнена при помощи ресурсного центра «Магнитно-резонансные методы исследования» СПбГУ.

КОМПЛЕКСНАЯ ПЕРЕРАБОТКА МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ШЛАКОВ С УТИЛИЗАЦИЕЙ ТЕПЛА

Смирнов Л.А., Демин Б.Л.

*АО «Уральский институт металлов»,
620062 Екатеринбург, ул. Гагарина, 14,
e-mail: smirnov@uim-stavan.ru*

Металлургические шлаки - восполняемый сырьевой ресурс для стройиндустрии, металлургии, сельского хозяйства и других отраслей промышленности. Основные процессы переработки шлаков – охлаждение, дробление, извлечение металла и сортировка по крупности.

Нерешенными остаются вопросы утилизации тепла шлаковых расплавов, повышения качества получаемой продукции и сокращения пылегазовых выбросов.

Созданы научные основы технологии и конструкции образцов оборудования для переработки металлургических шлаков в жидком состоянии¹. Технология продана в КНР и широко применяется на предприятиях Юго-Восточной Азии.

Сущность технологи заключается подаче расплава на движущие металлические тела (шары), помещенные в колосниковый барабан-ротатор.

В межшаровом пространстве расплав интенсивно отдает тепло и образует развитую поверхность теплообмена, что позволяет отбирать и утилизировать тепло с различными энергетическими характеристиками по мере охлаждения расплава².

Изменяя характер движения шаровой насадки, отношение масс расплава и шаров, параметры охлаждающих сред, создаются условия для управления процессом охлаждения, видом и качеством получаемого продукта, локализации парогазовых выбросов³.

Литература

1. Демин Б.Л., Сорокин Ю.В., Щербаков Е.Н. и др. Перспективы применения установок барабанного типа для переработки металлургических шлаков / *Металлург* № 11 2016 г. С 31-33.
2. Патент RU № 2513384 Установка для переработки шлака с утилизацией тепла/ Б.Л. Демин, Ю.В. Сорокин, Л.А. Смирнов, Е.Н. Щербаков // Заявка 2012144468/03 от 18.10. 2012, Публ. 20.04.2014 Бюл. №11.
3. Б.Л. Демин, Л.А. Смирнов, Ю.В. Сорокин, Е.Н. Щербаков Установки роторного типа для переработки жидких шлаков/Черные металлы № 5 2021 г. С 50-56.

МЕМБРАННЫЙ КАСКАД ТИПА «НЕПРЕРЫВНАЯ МЕМБРАННАЯ КОЛОННА» - ЭНЕРГОЭФФЕКТИВНОЕ РЕШЕНИЕ ДЛЯ УЛАВЛИВАНИЯ ДИОКСИДА УГЛЕРОДА ИЗ ДЫМОВЫХ ГАЗОВ ТЭЦ

**Смородин К.А., Атласкин А.А., Петухов А.Н., Зарубин Д.М.,
Цивковский Н.С., Крючков С.С., Воротынцев И.В.**

*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
125047, Москва, Миусская площадь, д. 9, стр. 1
e-mail: smorodin.kirill.a@gmail.com*

За последнее столетие концентрация углекислого газа в атмосфере резко увеличилась с 275 до 387 ppm и привела к ощутимому повышению температуры на планете, а именно, средняя температура поверхности Земли в XXI веке превышает такое же значение XX века на 0.8–1.2°C. Если накопление CO₂ продолжится с текущими темпами, к 2060 году оно превысит 560 ppm, что более чем вдвое превысит уровень доиндустриального периода. Разработанные климатические модели предсказывают, что установившаяся тенденция отрицательно повлияет на глобальный климат к 2100 году.

Настоящая работа посвящена комплексному моделированию процесса улавливания CO₂ с использованием мембранного каскада типа «Непрерывная мембранная колонна» на примере разделения четырехкомпонентной газовой смеси (O₂ / H₂O / CO₂ / N₂ = 4.4 / 11 / 11.6 / 73 мол.%). Этот мембранный каскад включает в себя три мембранных блока: один блок – в секции обеднения (производит поток, обедненный диоксидом углерода), два блока – в секции обогащения (производит концентрат CO₂).

В ходе многопараметрического анализа было установлено влияние газотранспортных характеристик мембраны на площадь мембраны, необходимую для каждой секции каскада, и определена взаимосвязь между площадью мембраны каждой секции, степенью извлечения CO₂ и его чистотой. В оптимальных условиях мембранный каскад обеспечивает эффективное разделение, улавливая более 90% CO₂ с его концентрацией в потоке продукта более 95 мол.%.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках научного проекта по государственному заданию № FSSM-2022-0005

ВЛИЯНИЕ МЕТОДА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ГАЗОТРАНСПОРТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МЕМБРАННЫХ ЭЛЕМЕНТОВ НА РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОРАЗДЕЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ

**Сморозин К.А., Крючков С.С., Атласкин А.А., Степакова А.Н.,
Атласкина М.Е., Петухов А.Н., Воротынцев И.В.**

*Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева,
125047, Москва, Площадь Миусская 9,
e-mail: smorodin.kirill.a@gmail.com*

Существует множество научных публикаций, посвященных симуляции процессов мембранного газоразделения, большая часть которых построена на моделях с большим количеством упрощений, а именно моделирование с учетом лишь идеальных транспортных характеристик мембран. Данный подход не позволяет дать адекватную оценку эффективности и целесообразности разработки предлагаемых технологических решений.

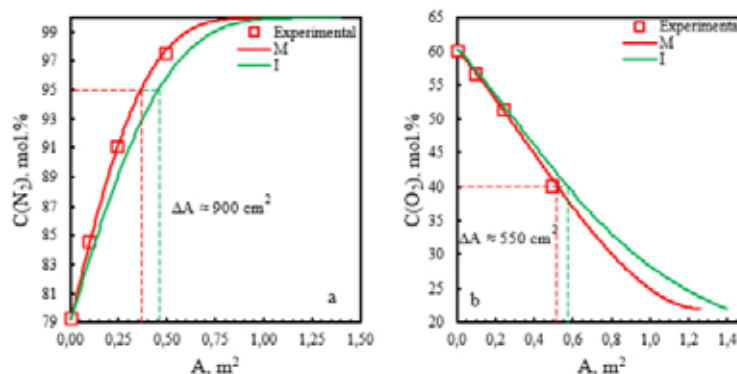


Рисунок 1. Зависимость концентрации (а - N₂ в потоке ретентата; б - O₂ в потоке пермеата) от эффективной площади РРО мембраны во всем диапазоне stage-cut.; М – моделирование на основе эффективных газотранспортных характеристик; I – моделирование на основе идеальных характеристик.

В результате исследования, установлено, что при моделировании на основе идеальных газотранспортных характеристик для чистых газов отличие концентрации целевого компонента в потоке продукта, составляет от 1,5 до 8,8% по сравнению с экспериментально полученными значениями для такого же модуля. Это может привести к ошибкам в проектировании аппаратов, так и неправильной технико-экономической оценке процесса. При проектировании технологических линий с использованием средств математического моделирования необходимо использовать эффективные газотранспортные характеристики материала и/или изделия.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках научного проекта по государственному заданию № FSSM-2023-0004

«ЗЕЛЕННЫЕ» ТЕХНОЛОГИИ В КОМПЛЕКСНОЙ ПЕРЕРАБОТКЕ ПОДСОЛНЕЧНОГО ШРОТА

Смятская Ю.А., Павлова А.А.

*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.
195251, Санкт-Петербург, Политехническая 29,
e-mail: Smyatskaya_yua@spbstu.ru*

Экологические проблемы, связанные с очисткой водных сред, требуют более эффективных, селективных и недорогих решений, а также безопасных технологий при изготовлении сорбентов.

Другая не менее важная проблема связана с обеднением пищевого рациона населения белком¹. Предложена технология комплексной переработки подсолнечного шрота с целью получения белка и с последующим получением сорбента из депротанизованного шрота.

Шрот подсолнечника является перспективным вторичным сырьем масложировой промышленности, ценным свойством которого является высокое содержание белка. Предложено проводить предварительную дефенолизацию слабым раствором янтарной кислоты и проведением ферментативной экстракции (Протосубтилин ГЗх) в слабощелочной среде, что позволило значительно увеличить выход белка (до 60%) и снизить содержание фенольных соединений (на 68%).

Образующийся после извлечения белка депротенинизированный шрот подсолнечный предлагается использовать в качестве сорбента для извлечения ионов металлов. Сорбент показал высокую эффективность извлечения от цинка, кадмия, меди и свинца. Результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1.

Сорбент	Эффективность очистки, %			
	Zn	Cd	Pb	Cu
Подсолнечный шрот	65	49	55	45
Депротенинизированный шрот подсолнечный	88	75	72	83

У подсолнечного шрота эффективность очистки ниже, чем у депротенинизованного шрота подсолнечного, возможно это связано с тем, что обработка янтарной кислотой позволило увеличить удельную поверхность сорбента и соответственно увеличить эффективность очистки.

Литература

1. Троцок Д.В., Медведев Д.С., Макаренко С.В., Юшкова И.Д., Лапотников А.В. Современные проблемы науки и образования, 2020, № 2.

КАВИТАЦИОННОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ НА ГИДРОБИОНТЫ

Степнова А.Ф.,^{а,б} Казиев Г.З.,^б Дину М.И.^в

^аМПГУ, 119991, Россия, Москва, ул. Малая Пироговская, 1/1.

^бРУДН, 117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, 6,

e-mail: stepnova_af@pfur.ru

^вГЕОХИ РАН, 119991 ГСП-1 Москва, ул. Косыгина, 19

Для аналитического исследования растительных и промысловых пищевых продуктов необходимы технологичные методы с минимальным использованием промежуточных стадий. Перспективным способом получения вытяжек из природных объектов является использование роторно-пульсационного аппарата, в котором сырье подвергается процессу кавитации¹. Нами продемонстрирован способ исследования биохимического состава рыбной продукции (сельдь тихоокеанская) с использованием кавитационной пробоподготовки (температура 40 °С, скорость вращения ротора 3000 об/мин, время воздействия 5 мин) и хромато-масс-спектрометрического измерения (спектрометр LCMS-8060 Shimadzu). В табл.1 представлен состав липидной фракции исследуемого образца.

Таблица 1. Показатели биохимического состава образца

расшифровка	полиненасыщенные жирные кислоты	относительная интенсивность 100%		
		свободная кислота	метиловый эфир	этаноламид
АЛК	18:3 ω 3	280	290	322
ОДТК	18:4 ω 3	276	287	320
АК	20:4 ω 6	305	320	350
ЭПК	20:5 ω 3	300	315	345
ДПК	22:5 ω 6	330	350	375
ДГК	22:6 ω 3	329	340	370

18:3 ω 3 – α -линоленовая кислота (АЛК); 18:4 ω 3 – стеарионовая кислота (ОДТК);

20:4 ω 6 – арахидоновая кислота (АК); 20:5 ω 3 – эйкозапентаеновая кислота (ЭПК);

22:5 ω 6 – докозапентаеновая кислота (ДПК); 22:6 ω 3 – докозагексаеновая кислота (ДГК).

Полученные данные указывают на возможность измерения указанным способом биологических проб без многостадийных этапов разложения и экстракции.

Литература

1. Просин М.В., Потапов А.Н., Иванова А.С., Полищук Е.С. Известия ВУЗов. Прикладная химия и биотехнология, 2014, 5(10), с.71-75.

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ НАГРЕВА И СОСТАВА КОМПОЗИЦИОННОГО ТОПЛИВА НА ПРОДУКТЫ СТАДИЙ ТЕРМИЧЕСКОЙ КОНВЕРСИИ

Стрижак П.А.,^{a,b} Романов Д.С.,^{a,b} Вершинина К.Ю.,^a Скорюпин В.В.^a

^a*Томский политехнический университет,
634050, Томск, пр. Ленина, 30*

^b*Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН,
630090, Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 1,
e-mail: pavelspa@tpu.ru*

Производство энергии и продуктов с добавленной стоимостью из биомассы и отходов рассматривается как перспективное направление для решения проблем экологии и энергетики. Широкий перечень компонентов может использоваться для прямого сжигания, пиролиза и газификации. Свойства топлива, химический состав, наличие примесей влияют на распыление, смешивание с воздухом, скорости испарения, зажигания и выгорания. Одной из проблем в обозначенной научно-технологической области является низкая эффективность полного цикла использования сырья, высокие выбросы опасных веществ, высокая стоимость установок и их обслуживания.

В настоящей работе проанализированы промежуточные и конечные газовые продукты, образующиеся при термическом разложении и горении топлив на основе низкосортных твердых (бурый уголь, древесина, угольный шлам) и жидких (растительные масла, отработанное масло) компонентов. Экспериментальная методика включала нагрев топлива в модельной камере сгорания с обеспечением отбора газовой пробы для анализа состава. Результаты, полученные в экспериментах, подтвердили значительное влияние температуры нагрева и состава несущей среды (воздух, смеси воздуха и азота, водяных паров) на формирование продуктов полной и частичной конверсии исходного сырья. Выделена неаддитивная взаимосвязь концентраций компонентов дымового газа и компонентного состава топливных смесей. Обоснованы синергетические эффекты при совместном химическом реагировании. Показана возможность повторного применения промежуточных и конечных продуктов реакций, определены рациональные условия для обеспечения минимальных концентраций вредных продуктов сгорания и зольных отложений. Полученные результаты являются основой для проектирования установок совместной термической конверсии новых видов композиционных жидких топлив из промышленных отходов, газогидратных соединений, а также традиционных ископаемых топлив.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, Соглашение от 24.04.2024 № 075-15-2024-543.

ВЛИЯНИЕ ИОНОВ МЕТАЛЛОВ И pH СРЕДЫ НА ПРОЦЕСС ОКИСЛЕНИЯ СЕРОВОДОРОДА СОЛЯМИ ЖЕЛЕЗА

Першин Н.А.,^а Судьин В.В.,^а Григорьев В.В.^б

^аООО «Салфокс», 119048, г. Москва, ул. Лужники, д. 24, с. 9.

^бООО «ИТИ», 129110, г. Москва, Банный пер. д.2, стр.1, эт 1, пом 1А
e-mail: sulphox@sulphox.ru

Сероводород является частым загрязнителем окружающей среды, обладающим высокой токсичностью и неприятным запахом. Типичными источниками его выброса в населенных пунктах являются коммунальные сооружения обработки сточных вод и нефтеналивные терминалы. Снижение вредного воздействия сероводорода на окружающую среду возможно путём его окисления кислородом воздуха с образованием элементарной серы – твёрдого вещества с низким классом опасности (IV). Для реализации экономически целесообразного процесса окисления используют жидкие катализаторы на основе металлов переменной валентности, чаще всего – железа [1,2]. Целью работы было исследование механизма окисления сероводорода и поиск путей его ускорения.

Было проведено исследование кинетики реакции окисления сероводорода с использованием катализаторов различного состава. Газовый выброс имитировали при помощи синтетической смеси воздуха с сероводородом контролируемого состава. Концентрацию сероводорода в воздухе определяли с использованием газового хроматографа Хромос ГХ- 1000 (РФ) с пламенным фотодетектором.

Было показано, что при концентрациях типичных выбросов, стадией, определяющей скорость процесса, является перенос сероводорода через границу фаз газ-жидкость. Скорость окисления растворенного сероводорода слабо влияет на общую скорость процесса. Перенос сероводорода через границу фаз происходит с образованием ионов HS^- и S^{2-} . Процесс переноса через границу фаз ускоряется при повышении pH раствора катализатора или при добавлении ионов переходных металлов, образующих сульфиды с низким ПР, например, Cu^{2+} и Ag^+ . Повышение концентрации ионов Cu^{2+} приводит к увеличению скорости процесса.

Результаты, полученные в лабораторных испытаниях, были проверены на реальном жидкостном насадочном скруббере, установленном в систему очистки выбросов канализационно-насосной станции.

Литература

1. Kasper P. L., Anders F. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, 2019, 94(5), 1593.
2. Velasco A., Morgan-Sagastume J. M., González-Sánchez, A. *Chemosphere*, 2019, 222, 732.

ОБЕСКРЕМНИВАНИЕ МАГНЕТИТОВОГО КОНЦЕНТРАТА ГИДРОФТОРИДОМ АММОНИЯ

Делицын Л.М.,^а Кулумбегов Р.В.,^а Сульман М.Г.,^б Попель О.С.^а

^аФедеральное государственное бюджетное учреждение науки
Объединенный институт высоких температур РАН
125412, Москва, Ижорская ул., д. 13. к. 2.
e-mail: delitzin@ihed.ras.ru

^бТверской государственный технологический университет,
170026, г. Тверь, наб. А.Никитина, д. 22

Получаемый из золошлаковых отходов тепловых электростанции методом мокрой магнитной сепарации железосодержащий концентрат содержит в своем составе многочисленные примеси (табл.1), затрудняющие его применения в черной металлургии.

Таблица 1. Химический состав железосодержащих концентратов, К1- выделенный магнитной сепарацией из ЗШО, К2 обескремненный гидрофторидом аммония К1

% мас.	Na ₂ O	MgO	Al ₂ O ₃	SiO ₂	K ₂ O	CaO	TiO ₂	MnO	Fe ₂ O ₃	P ₂ O ₅	SO ₃
К1	0.26	2.36	9.65	23.40	0.50	1.98	0.45	1.41	59.50	0.28	0.21
К2	0.28	3.14	12.30	2.18	0.24	2.49	0.55	1.82	76.24	0.32	0.44

Ввиду сложного состава ферросфер, относящихся к системе - FeO-SiO₂-Al₂O₃-CaO-MgO^{1,2}, физические методы обогащения имеют известные ограничения. Один из эффективных методов вскрытия силикатных пород основан на фтораммонийной технологии³. Механизм взаимодействия оксида кремния с бифторидом аммония можно представить следующим образом: SiO₂ + 3NH₄F•HF → (NH₄)₂SiF₆ + NH₃ + 2H₂O. Образующийся в результате реакции гексафторсиликат аммония при нагревании возгоняется, тем самым из системы выводится оксид кремния. Фторирование концентрата К1 при температуре 400 °С позволяет удалить кремнезем из него на 90,6 %.

Литература

1. Vassilev S.; Menendez R.; Borrego A. et al. *Fuel* 2004, **83**, 1563-1583.
2. Sokol E.V.; Kalugin V.M.; Nigmatulina E.N. et al. *Fuel* 2002, **81**, 867-876.
3. Medkov M.A.; Krysenko G.F.; Eпов D.G. *Bulletin of the Far East Branch of the Russian Academy of Sciences* 2011, **5(159)**, 60-65.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 21-79-30004.

ХАРАКТЕРИСТИКИ ГАЗОПЫЛЕВЫХ ОТХОДОВ ФЕРРОСПЛАВНОГО ПРОИЗВОДСТВА

Сычев А.В., Жучков В.И., Заякин О.В.

*Институт металлургии УрО РАН,
620106, Екатеринбург, Амундсена 101,
e-mail: ntm2000@mail.ru*

При получении марганцевых, хромовых и кремнистых ферросплавов в рудовосстановительных электропечах в РФ образуется около 1,5 млн т пылей. Для рационального использования этих материалов необходимо знать их основные физико-химические и технологические характеристики.

Для изучения характеристик были использованы промышленные образцы пылей, образующихся при производстве: кристаллического кремния (КК), 75%-ного ферросилиция (ФС75), низко и высокоуглеродистого феррохрома (ФХНУ и ФХВУ), силико- и ферромарганца (МnC17 и ФМн78). Химический состав пылей приведён в таблице 1.

Таблица 1. Химический состав пылей, %

Наименование	Cr ₂ O ₃	MnO	SiO ₂	FeO	CaO	Al ₂ O ₃	MgO	Si _{мет}	C
Пыль КК			92,0	0,9	0,4	0,6		0,3	3,3
Пыль ФС 75			87,0	3,5	1,1	1,3		0,2	1,3
Пыль ФХНУ	26,5		16,5	9,8	21,3	7,5	19,2		0,3
Пыль ФХВУ	15,5		67,3	7,6	0,8	1,7	7,2		6,5
Пыль МnC17		21,7	29,4	0,6	9,6	5,9			
Пыль ФМн78		45,1	10,6	2,6	7,3	4,6			

Пыль КК и ФС75 является высококремнистым дисперсным материалом – микрокремнезёмом. Его минеральные фазы представлены β-кristобалитом, α-кварцем, карбидом SiC, алюмосиликатами Al₂O₃·SiO₂, шпинелью FeO·Al₂O₃ и аморфным кремнием.

Фракционный состав микрокремнезёма (микросилики): менее 2 мкм составляет 90,1%, остальное не более 15 мкм. Пыль газоочистки при выплавке высоко- и низкоуглеродистого феррохрома имеет размер частиц менее 0,038 мм около 50%, а менее 0,22 мм 90%. Плотность пыли ФХНУ составляет 3,44 г/см³, пыли ФХВУ 2,74 г/м³. Температура плавления пыли ФХНУ 1590-1690 °С, пыли ФХВУ 1460-1480 °С.

Основу фазового состава пыли ФХНУ составляют, %: 56,4 шпинелида, 23,0 – мервинита CaMg(SiO₄)₂, 12,6 ортосиликата кальция. Пыль ФХВУ состоит из, %: 32,0 шпинелида, 55,0 стеклофазы, 8,0 монтичеллита.

В составе пыли газоочистки ФМн78 содержатся: гаусманит Mn₃O₄, тетрагональный оксид марганца, K_{0,7}Na_{0,7}Cl, пыли МnC17 - гаусманит, кварц, K_{0,7}Na_{0,3}Cl. Размер частиц пыли сплавов МnC17 и ФМн78 менее 0,15 мм составляет до 50%, а менее 0,54 мм до 90 %.

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН.

ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ПОДХОД К ОЦЕНКЕ СООТВЕТСТВИЯ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ПРИНЦИПАМ ЗЕЛЁНОЙ ХИМИИ

Толстов М.А., Занин А.А.

*Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева,
125047, г. Москва, Миусская площадь, д. 9,
e-mail: maxjpeg@mail.ru*

Современное общество сталкивается с неотложной потребностью в разработке инновационных высоко-технологичных подходов к реализации химических процессов и тщательному планированию синтезов с целью минимизации негативного воздействия на окружающую среду¹. В работе представлен процесс разработки функциональной части программного обеспечения для оценки химических процессов с помощью численных показателей, основанных на 12 принципах зелёной химии. Для каждого принципа зелёной химии разработана математическая формула для расчёта показателей, позволяющих сравнить химико-технологические процессы. Алгоритмы основаны на известных массовых показателях процесса с учётом специфических коэффициентов, влияющих на экологическую эффективность процесса. Исходные формулы разработаны с учётом доступных данных из нормативных документов Российской Федерации, включая ГОСТ 32419-2022. «Классификация опасности химической продукции. Общие требования»². Созданные математические алгоритмы обеспечивают возможность сравнения экологической эффективности и безопасности различных химических процессов, которые направлены на получение одного и того же химического продукта.

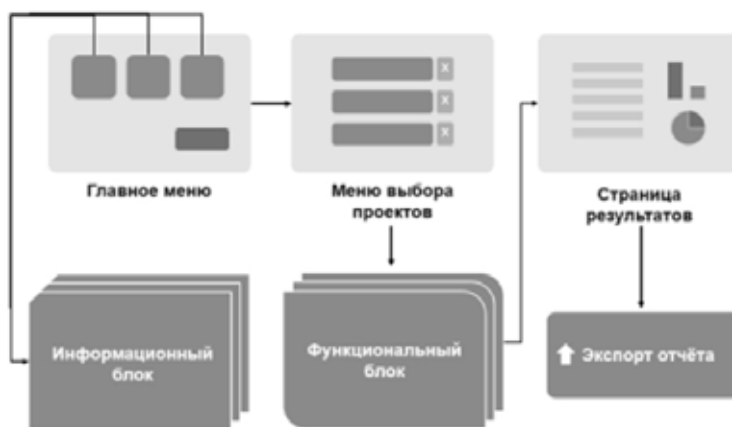


Рисунок 1. Блок-схема функционала программного обеспечения

Литература

1. Constable D.J.C. *iScience*, 2021, **24**, 103489.
2. Межгосударственный стандарт ГОСТ 32419-2022 «Классификация опасности химической продукции. Общие требования».

ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ БАКАЛЬСКИХ СИДЕРИТОВ В МЕТАЛЛУРГИИ СТАЛИ

Вусихис А.С., Леонтьев Л.И., Тюшняков С.Н.

*Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук,
620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 101,
e-mail: vas58@mail.ru*

Высокая чистота сидеритов по фосфору и цветным металлам делает их высококачественным сырьем для получения металлизированного концентрата методами бескоксовой металлургии.

Затраты электроэнергии на плавку в электрической печи металлического лома и металлизированного сидеритового концентрата, содержащего 30 % пустой породы и загружаемого в печь при температуре выше 1000 °С, близки. Это позволяет исключить из схемы переработки сидеритов операцию снижения содержания пустой породы в металлизированном концентрате методом магнитной сепарации.

Предложена технология, включающая восстановление исходной сидеритовой руды во вращающейся печи до степени металлизации 95 % и разделительную плавку получаемого металлизированного концентрата, в горячем виде (при температуре выше 1000 °С) загружаемого в сталеплавильную печь. Получающийся в результате жидкий металл может быть подвергнут доводке в агрегате ковш-печь или после разливки использован в качестве металла-полупродукта для замены лома.

Пустая порода металлизированного сидеритового концентрата содержит большое количество оксида магния, что делает ее тугоплавкой. Для получения жидкого шлака предложено использовать добавку борного ангидрида в виде колеманита.

Добавка 60-120 кг колеманита на 1 т концентрата позволяет получить шлак, обладающий при температуре выпуска (1600 °С) низкой вязкостью (менее 3,65 Пз).

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН с использованием оборудования ЦКП «Урал-М».

МЕТАЛЛОТЕРМИЯ КАК СПОСОБ ПИРОМЕТАЛЛУРГИЧЕСКОГО ОБОГАЩЕНИЯ БЕДНОГО РЕДКОМЕТАЛЛЬНОГО СЫРЬЯ

**Тюшняков С.Н., Гуляева Р.И., Удоева Л.Ю., Пикулин К.В.,
Агафонов С.Н., Красиков С.А.**

*Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук,
620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 101,
e-mail: tyushnyakov.sn@gmail.com*

Востребованность ниобия и тантала в различных отраслях промышленности диктует необходимость развивать производство редкометалльной продукции, используя отечественные природные ресурсы. На сегодняшний день нет приемлемой технологии извлечения тантала и ниобия, удовлетворяющей экономическим и экологическим критериям эффективности переработки бедного рудного и техногенного сырья. Предлагаемое в настоящей работе решение основано на применении пирометаллургического обогащения некондиционных концентратов и металлоотходов, позволяющее повысить комплексность их переработки и извлечение целевых металлов.

На примере бедных танталовых концентратов Орловского, Этыкинского месторождений (~3,5% Nb₂O₅ + Ta₂O₅) и Ta-W кеков выщелачивания рения из оксидно-металлических отходов, оптимизированы режимные параметры и оценены технологические показатели металлотермического (восстановители – Al либо Ca-Al лигатура¹) концентрирования Nb и Ta в сплав на основе железа. Экспериментально показана возможность обогащения и селекции металлов при восстановлении оловянно-редкометалльного Этыкинского концентрата с переводом тугоплавких редких металлов в сплав на основе железа, а олова – в возгоны (1700-1750 °С, расходы алюминия – 8,5 %, CaO – 30 % и Fe₂O₃ – 9 % от массы концентрата). Высокие показатели извлечения (99,9 % Ta и 97,7 % Nb) металлов получены при восстановительной плавке и с Al, и с Ca-Al лигатурой. Коэффициенты распределения металлов между сплавом и шлаком при алюминотермическом восстановлении Орловского концентрата в оптимальных условиях составили для Ta и Nb значения 71 и 135, а степень извлечения в сплав – 93 и 87 %, соответственно. При плавке техногенного сырья (Ta-W кека) практически весь вольфрам, 95,7 % Mo и 92,5 % Ta переходят в железистый сплав, а весь цирконий остается в шлаке.

Литература

1. Гуляева Р.И., Тюшняков С.Н., Пикулин К.В., Удоева Л.Ю., Галкова Л.И., Агафонов С.Н. Патент 2797102 РФ, 2023.

Работа выполнена по Государственному заданию ИМЕТ УрО РАН с использованием оборудования ЦКП «Урал-М».

РАЗВИТИЕ ПИРОМЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ НА БАЗЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ДИСПЕРСНОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

Амдур А.М.,^а Федоров С.А.^{а,б}

^аУральский государственный горный университет, 620144, Екатеринбург, ул. Куйбышева, 30
^бИнститут металлургии Уральского отделения Российской академии наук,
620016, Екатеринбург, ул. Амундсена, 101,
e-mail: saf13d@mail.ru

Основным способом получения металлов из руды со времен возникновения металлургии была продувка воздухом кусков топлива и рудной компоненты. Только во второй половине XIX века появились примеры того, что с точки зрения экономии энергии целесообразней сжигать не куски угля, а угольную пыль или распыленное в форсунках жидкое топливо, то есть перейти к дисперсным системам. Потребовалось еще 100 лет, чтобы дисперсные системы стали использоваться в пирометаллургических процессах: пылеугольное топливо, губчатое железо для выплавки стали и другие. В настоящее время выходит на первый план и другая проблема: богатые месторождения металлов, например, золота, практически выработаны, а в упорных рудах и техногенных образованиях, где сосредоточено около 60% его мировых запасов, оно находится в ультрадисперсном состоянии. Таким образом дисперсное состояние вещества становится основой развития пирометаллургических технологий.

На основе экспериментальных лабораторных исследований, включающих изучение процессов термической деструкции и горения, и промышленных экспериментов разработана методика выбора компонентов пылеугольного топлива для доменных печей и установлена возможность использования фрезерного торфа в составе шихты.

Роль дисперсного сажистого углерода особенно велика в бескоксовой металлургии. Содержание углерода в металлизированных продуктах должно соответствовать марке выплавляемой стали. Установлено, что частицы сажистого углерода, полученного по реакции Будуара, имеют сложную ажурную структуру, включающую глобулярные аморфные и графитизированные кристаллические элементы, соединенные перемычками, размеры которых находятся в нанометровом диапазоне. Следствием высокодисперсной и аморфной структуры сажистого углерода является повышение энергии Гиббса и высокая кинетическая активность.

На базе экспериментальных данных установлен механизм перехода золота и платины в шлак в печах цветной металлургии: капли штейна вместе с ассоциированными с ними частицами благородных металлов размерами не более 5-7 мкм выносятся в шлак пузырьками газов путем флотации. Рассмотрены стадии и общий механизм флотации дисперсных сульфидных и металлических капель в неметаллических расплавах.

Исследование выполнено в соответствии с государственным заданием, выданным Минобрнауки РФ, на выполнение НИР для ФГБОУ ВО «Уральский государственный горный университет» № 075-03-2024-132 от 17.01.2024 и государственным заданием ИМЕТ УрО РАН с использованием оборудования ЦКП «Урал-М».

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СТАТИЧЕСКИХ И КИНЕТИЧЕСКИХ ТЕСТОВ ДЛЯ ОЦЕНКИ ВОЗДЕЙСТВИЯ ОТХОДОВ ДОБЫЧИ УГЛЕЙ НА ОКРУЖАЮЩУЮ СРЕДУ

Хао Цзе, Кочеткова Е.М., Эпштейн С.А.

*ФГАОУ ВО Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»
(ФГАОУ ВО НИТУ «МИСИС»), 119049, Москва, Ленинский проспект 4,
e-mail: haoj1127@gmail.com*

В мировой практике для оценки влияния отходов добычи и переработки углей на окружающую среду при их размещении в отвалах или дальнейшем вторичном использовании применяют статические и кинетические тесты на «вымываемость» макро- и микроэлементов. На основании статических тестов проводится предварительная оценка миграционной опасности потенциально опасных макро- и микроэлементов, входящих в состав отходов добычи углей, в то время как кинетические тесты позволяют оценить динамику изменения элементного состава таких отходов в течение длительного промежутка времени¹. В Российской Федерации в качестве статического теста разработан и применяется ГОСТ Р 58914-2020², в то время как нормативно-техническая база для оценки безопасности отходов добычи углей при их длительном размещении в отвалах в настоящее время отсутствует.

В НИТУ «МИСИС» разработана методика по оценке долговременной «вымываемости» макро- и микроэлементов из отходов добычи и переработки углей. Методика основана на длительной обработке отходов в условиях постоянной влажности (95 %) и температуры (25 °С) с последующим определением содержания в отходах серы, рН водной вытяжки, а также выхода и состава водорастворимых форм веществ на контрольных точках (3, 6, 9, 12 и т.д. недель). Методика была опробована на отходах добычи углей, имеющих различный минеральный и химический состав. Полученные данные показали, что длительное размещение отхода с высоким содержанием серы приводит к окислению серосодержащих минералов, увеличению кислотности водных вытяжек и повышению мобильности соединений Fe, Ca, Mg и S. Для отходов с низким содержанием серы не было отмечено существенных изменений концентрации водорастворимых форм элементов, а характер полученных водных вытяжек был близок к нейтральному.

Литература

1. Acharya B. S., Kharel G. Journal of Hydrology, 2020, 588, 125061.
2. Гущина Т.О., Силютин С.А., Соколовская Е.Е., Эпштейн С.А. ГИАБ, 2020, 5, 5-16.

Работа выполнена в рамках Стратегического проекта «Технологии устойчивого развития» Программы стратегического академического лидерства «Приоритет 2030».

МОДИФИКАЦИЯ УГЛЕЙ ИЗ РИСОВОЙ ШЕЛУХИ ДЛЯ УЛУЧШЕНИЯ АДСОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ

Харитонов Л.Д., Новоторцев Р.Ю., Михеев И.В.

*МГУ им.М.В. Ломоносова, химический факультет,
119234, Москва, Ленинские горы 1/3,
e-mail: lidakharitonova@mail.ru*

В настоящее время актуальной является проблема очистки сточных вод от различных техногенных загрязнений, включая лекарственные препараты. Широко используемым лекарством является, в частности, диклофенак, малые количества которого негативно воздействуют на окружающую среду.¹ Поиск эффективных адсорбентов для его удаления - важная задача. Другая актуальная проблема - утилизация отходов сельского хозяйства. Так, при культивации риса образуется рисовая шелуха (РШ), при этом её производство достигает 140 млн тонн в год.² Использование рисовой шелухи в качестве сырья для получения адсорбентов может стать потенциальным решением проблемы её утилизации.

В данной работе исследованы сорбционные свойства угля, полученного в результате пиролиза РШ, в отношении диклофенака. Исследована возможность химической модификации поверхности угля и изменение физико-химических свойств при допировании поверхности азотом с использованием различных методов. В результате синтеза получен уголь, содержащий до 6.5 ат.% азота в поверхности и обладающий удельной площадью поверхности 630 м²/г.

Исследования адсорбционного равновесия с участием диклофенака показали, что полученные угли из рисовой шелухи демонстрируют высокую адсорбционную ёмкость. При этом при модификации азотсодержащими соединениями увеличивается эффективность адсорбции, на основании чего был сделан вывод о возможности направленного улучшения адсорбционных характеристик угля при аминировании.

Литература

1. Espindola, J., Selim, O.M., Amano, R.S.. Co-Pyrolysis of Rice Husk and Chicken Manure // J. Energy Resour. Technol. 2021. Vol. 143(2). 022101.
2. Salvestrini, S., Fenti, A., Chianese, S., Iovino, P., Musmarra, D. Diclofenac sorption from synthetic water: Kinetic and thermodynamic analysis // J. Environ. Chem.. 2020. Vol. 8(5). 104105.

*Работа выполнена в рамках государственного задания «Физикохимия поверхности, адсорбция и катализ»
№ АААА-А21-121011990019-4.*

НЕОБРАТИМОЕ ОБЕСЦВЕЧИВАНИЕ И ДЕТОКСИКАЦИЯ ПИЩЕВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ

Холодкова Е. М., Пономарев А. В.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина
Российской Академии Наук, 119071, Москва, Ленинский просп., 31, стр. 4,
e-mail: ponomarev@ipc.rssi.ru*

Электронно-лучевая обработка (радиолиз) растворов пищевых красителей показывает возможность эффективного необратимого разрушения систем сопряженных связей. Для 10 представителей хинофталоновых, индигоидных, трифенилметановых и азокрасителей наблюдается однотипная корреляция между поглощенной дозой и степенью обесцвечивания. При концентрации красителя 20 мг/дм³, полное обесцвечивание наблюдается при дозе около 1 кГр (1 кДж/кг). Эффект достигается в условиях дефицита растворенного кислорода. Именно такие условия наиболее привлекательны для обезвреживания окрашенных сточных вод с использованием мощных электронных ускорителей¹⁻³.

Основные превращения обусловлены диссоциативным присоединением радикалов ОН к сопряженным связям. Например, при дозе 1-1.5 кГр каждая растворенная молекула красителя E124 может взаимодействовать с несколькими радикалами ОН и, таким образом, терять все боковые группы без образования мутагенных продуктов. Происходит деградация хромофорной системы с отщеплением соединительного мостика и боковых заместителей за счет образования новой функциональной группы ОН, энергия связи которой выше, чем у сульфогрупп и диазомостика. Исходно краситель E124 в 0.02% водном растворе является неспецифическим мутагеном. Без метаболической активации он индуцирует переходы G→A, а также мутации со сдвигом рамки +1 и -1. В свою очередь, в присутствии ферментов печени он вызывает мутации первых двух типов. Снижение окраски и мутагенности происходит параллельно и обусловлено одними и теми же радикальными процессами, причем мутагенная активность уменьшается до уровня спонтанного мутагенеза.

Литература

1. Ponomarev A.V., Kholodkova E.M., Bludenko A.V. *Radiat. Phys. Chem.*, 2022, **199**, 110357.
2. Ponomarev A.V. *Radiat. Phys. Chem.*, 2020, **172**, 108812.
3. Ponomarev A.V., Kholodkova E.M., Zotova I.V., Shumega A.R., Stepchenkova E.I. *High Energy Chem.*, 2023, **57**, 454.

Работа выполнена в рамках НИР 122011300061-3 Российской академии наук.

РАЗРАБОТКА КОМПЛЕКСНОЙ ТЕХНОЛОГИИ ПЕРЕРАБОТКИ ДРЕВЕСНОЙ ЗЕЛЕНИ СОСНЫ

Хуршкайнен Т.В., Скрипова Н.Н., Кучин А.В.

*Институт химии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН,
167000, г.Сыктывкар, ул. Первомайская 48;
e-mail: hurshkainen@mail.ru*

Комплексная рациональная переработка возобновляемого растительного сырья, в том числе отходов лесозаготовок, с применением принципов зеленой химии для получения практически значимых биопрепаратов является актуальной задачей лесохимии. В Институте химии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН разрабатываются научные основы создания новых препаратов на основе экстрактивных соединений хвойной древесной зелени, обладающих биологической активностью. Новизна подхода заключается в применении экологически безопасного эмульсионного способа извлечения ценных экстрактивных компонентов.

Проведены исследования по разработке способа комплексной переработки древесной зелени сосны путем извлечения полисахаридов и последующей эмульсионной экстракции низкомолекулярных компонентов. Выход полисахаридов сосны составил до 3.56% от массы сухого сырья. Последующей эмульсионной экстракцией сырья выделены экстрактивные компоненты сосны с выходом до 3.25 % от массы сухого сырья¹.

Природные полисахариды обладают антикоагулянтной, противовирусной, антиоксидантной, противоопухолевой, противовоспалительной активностью. Низкомолекулярные соединения сосны отличаются высоким содержанием дитерпеновых кислот с доказанными антиоксидантными и иммуностимулирующими свойствами². Выделенные компоненты могут быть использованы в фармацевтической промышленности, в сельском хозяйстве.

Хвойный шрот, образующийся после извлечения полисахаридов и экстрактивных веществ, промывается водой, сушится при температуре 50-60 °С и используется в качестве кормовой добавки для животных в дозе 2-6% от основного рациона.

Вовлечение в хозяйственный оборот древесных отходов способствует рациональному и экономному использованию лесных ресурсов.

Литература

1. Хуршкайнен Т.В., Скрипова Н.Н., Кучин А.В. Патент RU 2815032. 2024.
2. Васильев С.Н., Рошин В.И., Ягодин В.И. Растительные ресурсы. 1995. Т.31. Вып.2. С.79-119.

*Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда, проект № 21-73-20091,
<https://rscf.ru/project/21-73-20091/>.*

ИССЛЕДОВАНИЯ ЭМУЛЬСИОННЫХ ЭКСТРАКТОВ СОСНЫ И ПИХТЫ МИКРОСКОПИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

Хуршкайнен Т.В., Никонова Н.Н., Кучин А.В.

*Институт химии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН,
167000, г.Сыктывкар, ул. Первомайская 48;
e-mail: hurshkainen@mail.ru*

Хвойная древесная зелень (ДЗ) является богатым источником соединений, которые обладают поверхностно-активными свойствами (соли смоляных и жирных кислот, фосфолипиды, глицериды и т.д.), влияющими на образование эмульсии в процессе экстракции сырья. Задача данной работы заключается в исследовании технологических условий, влияющих на формирование эмульсии из ДЗ пихты и сосны.

Нами изучено действие концентрации водного раствора щелочи, гидромодуля и продолжительности экстракции на формирование эмульсии и ее качество (размер частиц дисперсионной фазы и их распределение). Для оценки влияния технологических параметров на формирование эмульсии проведен анализ экстрактов микроскопическим методом с определением среднего диаметра микрокапель дисперсной фазы и их распределение в дисперсионной среде.

Установлено, что в оптимальных условиях образуется эмульсия типа «масло в воде» со средним размером частиц дисперсной фазы экстракта сосны¹ 2.5 мкм и экстракта пихты – 2.7 мкм (рис.). Частицы дисперсной фазы представляют собой липофильную фракцию компонентов ДЗ, дисперсионная среда – водно-щелочной раствор с содержанием водо-растворимых соединений сырья.

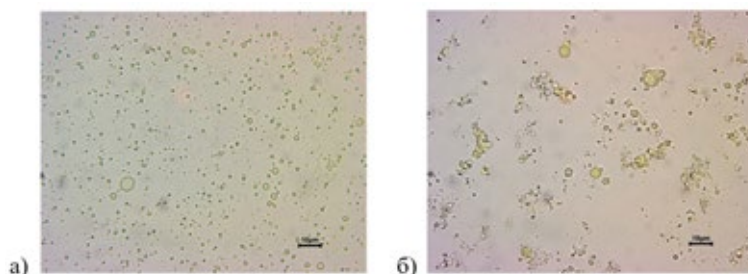


Рисунок 1. Микрофотографии эмульсионных экстрактов ДЗ сосны (а) и пихты (б)

Литература

1. Никонова Н.Н., Легкий Ф.В., Хуршкайнен Т.В., Кучин А.В. Химия растительного сырья. 2023. №2. С.319-325.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (гос. задание № 122040600073-3).

ЭКСТРАКЦИЯ Pr^{3+} , Nd^{3+} , Dy^{3+} и Tb^{3+} ГЛУБОКИМИ ЭВТЕКТИЧЕСКИМИ РАСТВОРИТЕЛЯМИ НА ОСНОВЕ ДИАЛКИЛФОСФИНОВЫХ КИСЛОТ

Чикинёва Т.Ю., Зиновьева И.В., Заходяева Ю.А., Вошкин А.А.

*Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект, 31
e-mail: chikinevaty@gmail.com*

Лантаноиды и их соединения применяются в различных флуоресцентных материалах, магнитах, сверхпроводниках, лазерах и многих других материалах. При этом, постоянное расширение областей их применения приводит к увеличению спроса на лантаноиды высокой чистоты¹. Одним из этапов их получения является экстракция из кислых растворов и для оптимизации этого процесса продолжается активная разработка новых экстрагентов. Одним из новых поколений экстрагентов являются глубокие эвтектические растворители, которые привлекают все большее внимание за счет своей коммерческой доступности, простоты синтеза и меньшей опасности².

В данной работе представлены результаты исследований экстракции Pr^{3+} , Nd^{3+} , Dy^{3+} и Tb^{3+} глубокими эвтектическими растворителями на основе ди(2,4,4-триметилпентил)дитиофосфиновой и ди(2,4,4-триметилпентил)фосфиновой кислот³. В качестве акцепторов водородной связи использовали ментол и фенол.

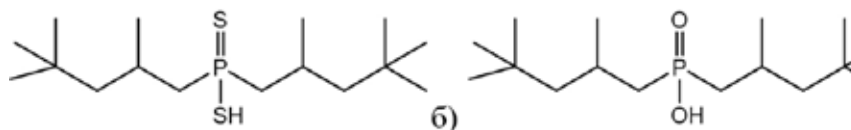


Рисунок 1. Структурные формулы а) ди(2,4,4-триметилпентил)дитиофосфиновой кислоты и б) ди(2,4,4-триметилпентил)фосфиновой кислоты.

Были получены фазовые диаграммы двухкомпонентных систем, исследованы их физические свойства. Установлены количественные характеристики экстракции Pr^{3+} , Nd^{3+} , Dy^{3+} и Tb^{3+} предложенными глубокими эвтектическими растворителями. Показано, что данные эвтектические растворители являются перспективными экстрагентами для совместной экстракции лантаноидов из водных растворов.

Литература

1. Dehghani F., *Journal of Supercritical Fluids*, 1996, **9**, 263–272.
2. Abranches D.O., Coutinho J.A.P., *Annual Reviews of Chemical Biomolecular Engineering*, 2023, **14**, 141-163.
3. Basudev S., Emmanuel O.O., *Separation and Purification Technology*, 2011, **83**, 82–90.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-29-00667,
<https://rscf.ru/project/24-29-00667/>.

ИЗУЧЕНИЕ ВОДНОГО ФИЛЬТРАТА ПОЛИГОНА

Чугунова И.Д.

*ФГБОУ ВО «КГТУ» (Калининградский государственный технический университет)
236022, Россия, г. Калининград, Советский проспект, д. 1,
e-mail: tchugunova.ilona@yandex.ru*

Цель работы - выявить причины неприятного запаха на полигоне ТБО «Барсуковка» в Калининградской области и подготовить рекомендации по устранению его причин.

Полигоны ТБО рассматриваются как сложные природно-техногенные системы. В их массивах протекают процессы разложения отходов, формирующие эмиссии загрязняющих веществ в виде биогаза и фильтрата¹. Каждому периоду жизненного цикла полигона соответствует своя фаза биохимической деструкции отходов. По мере использования запасов кислорода активность аэробных процессов снижается, и в захороненных отходах начинают преобладать анаэробные процессы, вызываемые деятельностью анаэробных микроорганизмов, среди которых преобладают сульфатвосстанавливающие бактерии².

В зонах поступления промышленно-коммунальных сточных вод проходит активация процесса сульфатредукции, который является причиной появления в воде и донных отложениях сульфидов. Только сульфатвосстанавливающие бактерии могут использовать сульфат как конечный акцептор водорода при анаэробном дыхании.

Рассматриваются пробы, взятые в марте 2024 г. В ходе исследования были определены степень загрязнения воды (окисляемость), водородный показатель проб, химический состав методом ИК-спектроскопии. Это позволило выявить наличие в пробах сульфатвосстанавливающих бактерий.

Выработан ряд рекомендаций по устранению неприятного запаха: упаковка иловых отложений в резервуары, смешивание отстоявшихся отложений с адсорбционным материалом и обеззараживание оставшейся водной фракции хлорированием или пероксидом водорода, который можно получать путём утилизации пероксида натрия, накопленного на военных судах в качестве источника кислорода в чрезвычайных ситуациях и тоже нуждающимся в утилизации по окончании срока хранения.

Литература

1. Брянкин, К. В. Утилизация иловых отложений органических отходов с использованием энерго-информационного воздействия органических соединений, *Современные тенденции развития науки и технологи.*- 2017.-№1-2.
2. Лемешко, М. А. Метод утилизации иловых осадков водоочистных сооружений, *Форум молодых учёных.*-2018.-№9(25).

ПОЛУЧЕНИЕ ПОЧВОГРУНТОВ ДЛЯ БИОЛОГИЧЕСКОЙ РЕКУЛЬТИВАЦИИ

Шайхислам Г., Кондратьев Н.Н., Соловьев Т.М., Эпштейн С.А.

*НИТУ МИСИС, 119049, Москва, Ленинский пр-кт, д. 4
e-mail: gulshatshaikhislam@gmail.com*

Важным элементом восстановления нарушенных земель является этап биологической рекультивации¹, целью которой является осуществление комплекса агротехнических мероприятий, направленных на возобновление флоры и фауны. В связи с этим актуальным является разработка почвогрунтов обеспечивающих необходимый набор агрохимических показателей. Одним из вариантов являются почвогрунты на основе остатков сжигания углей (ЗШО), бурых и окисленных каменных углей². При этом окисленные угли являются источником гуминовых веществ, которые в свою очередь, позитивно влияют на рост растений, а золошлаковые отходы являются щелочным реагентом для выделения гуминовых и выступают как поставщики таких агрохимических важных элементов, как фосфор, калий, марганец и т.п.

В настоящей работе проведена оценка почвогрунтов разного состава: почвогрунт №1 – 90 мас.% ЗШО и 10 мас.% окисленного каменного угля; почвогрунт №2 содержал равное количество обоих компонентов. Почвогрунты получали путем механохимической активации с использованием ультразвука в течение 1 часа с добавлением воды (в соотношении Т: Ж – 2:1). После активации смесь сушили при 80°C до воздушно-сухого состояния.

Полученные данные показали, что увеличение в почвогрунте №2 содержания окисленного угля приводит к снижению рН водной вытяжки до 8,1 (для почвогрунта №2 рН составил 10,1). Для оценки биологической активности почвогрунтов определяли всхожесть семян овса Виленского на разных смесях-основах. В качестве субстратов использовали потенциально плодородные смеси горных пород из суглинков и четвертичных отложений, а также песок. Показано, что внесение 10 % почвогрунта в субстраты приводит к разрыхлению глинистых пород, повышает всхожесть растений на 2,2 раза. Наилучшие результаты получены на почвогрунте № 2 с содержанием равное количество окисленного каменного угля и ЗШО.

Литература

1. Чибрик Т.С. Основы биологической рекультивации, 2002, **14**, 172.
2. Фоменко Н. А. ГИАБ, 2019, 4, 1-15.

Работа выполнена в рамках Стратегического проекта «Технологии устойчивого развития» Программы стратегического академического лидерства «Приоритет 2030».

ГАЗОАНАЛИТИЧЕСКИЕ СЕНСОРНЫЕ ПРИБОРЫ ДЛЯ НЕПРЕРЫВНОГО ЭКОЛОГИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА

Шапошник А.В.^а, Звягин А.А.^а, Васильев А.А.^б, Куль О.В.^в

^аВоронежский государственный аграрный университет,
394087, Воронеж, ул. Мичурина, 1, e-mail: a.v.shaposhnik@gmail.com

^бГосударственный университет «Дубна», 141908, г. Дубна, ул. Университетская, 19

^вООО «С-компонент», 141980, г. Дубна, ул. Приборостроителей, д. 2

Для предотвращения аварий и проведения непрерывного экологического мониторинга в труднодоступных местах необходимо использовать газоаналитические приборы нового поколения. Полупроводниковые металлоксидные газовые сенсоры позволяют определять сероводород, угарный газ, оксиды азота и другие токсичные газы даже в том случае, когда их концентрация существенно ниже ПДК. Тем не менее, необходимость поддержания рабочей температуры газочувствительного материала 200-400 °С ограничивает время автономной работы прибора, так как требует значительного расхода электроэнергии.

Наша группа использует несколько подходов для снижения расхода электроэнергии металлоксидных газовых сенсоров. Первый из них связан с синтезом полупроводниковых наноматериалов, обладающих чувствительностью к токсичным газам даже при низких температурах, и не нуждающихся в нагреве.

Второй подход связан с разработкой и созданием специальных диэлектрических подложек, в которых миниатюрный газочувствительный элемент находится на тонкослойной консоли. В 2024 году началось промышленное производство таких подложек на предприятии «С-Компонент».

Третий подход предполагает использование температурной модуляции. Импульсный нагрев сенсора позволяет решить несколько важных проблем. Во-первых, увеличение скважности (промежутка между тепловыми импульсами) приводит к существенной экономии электроэнергии. Во-вторых, нестационарные режимы позволяют выявить индивидуальные особенности газа-аналита, существенно повысить селективность анализа¹. В-третьих, импульсный нагрев приводит в некоторых случаях к существенному повышению чувствительности и стабильности анализа².

Литература

1. Shaposhnik A.V. et al. *Chemosensors*, 2021, **9**, 203.
2. Shaposhnik A.V. et al. *Sensors&ActuatorsB*, 2020, **334**, 129376.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-23-00329.

ТЕХНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СМЕСЕВЫХ ТОПЛИВ НА ОСНОВЕ БУРОГО УГЛЯ И ПИХТОВОГО ШРОТА

Янковская Н.С.,^а Янковский С.А.,^{а,б} Заворин А.С.^а

^аНациональный исследовательский Томский политехнический университет,
634050, Российская Федерация, Томск, пр-кт Ленина, д. 30
e-mail: jankovsky@tpu.ru

^бКузбасский государственный университет имени Т.Ф. Горбачева,
650000, Российская Федерация, Кемерово, ул. Весенняя, д. 28

На предприятиях, связанных с получением полезных косметических продуктов из пихтовых пород древесины, сталкиваются с существенной проблемой по утилизации отходов производства. Решение полезной энергоэффективной переработки данных отходов является актуальной задачей предприятий, работающих в направлении биотехнологий. Одним из возможных решений данной проблемы может стать совместная утилизация отработанной биомассы (пихтового шрота) совместно с углем¹. Методика подготовки топлив приведена в работе¹. Технический анализ смесевых топлив выполнен в соответствии известными ГОСТами¹. В таблице 1 приведены результаты исследования смесевых топлив.

Таблица 1. Полный технический анализ смесевых топливных композиций на основе угля и шрота после его обработки

Показатели	Наименование проб						
	Шрот орг	Бурый уголь	Б/Шо 90/10	Б/Шо 85/15	Б/Шо 80/20	Б/Шо 75/25	Б/Шо 50/50
W ^а	5,3	13,7	8,24	8,0	8,04	7,73	7,24
A ^а , %	3,9	2,96	3,43	3,38	3,51	3,48	3,68
V ^{daf} , %	81,1	46,66	48,27	49,52	51,87	53,07	62,02
Q ^{daf} _{gr}	22,19	29,07	28,71	28,21	27,99	27,87	25,92
Коксовый остаток	порошкообразный						

Анализ экспериментальных исследований показал, что смесевые топлива, получаемые при добавлении шрота в уголь пригодны для сжигания в энергетических котлах малой мощности.

Литература

1. Yankovsky S, Tolokol'nikov A, Gorshkov A, Misyukova A, Kuznetsov G. Justification of the reduction possibility of sulfur oxides and fly ash emissions during co-combustion of coal and waste from woodworking enterprises. Applied Sciences (Switzerland) 2021;11. <https://doi.org/10.3390/app112411719>.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации из проекта 075-03-2023-105/1 (FSWW-2022-0018).

ВОЗМОЖНОСТЬ ИСПЫТАНИЯ ПИЛОТНОЙ ГЕОЭС 25 КВТ НА РАЗВЕДЫВАТЕЛЬНОЙ СКВАЖИНЕ

Янковский С.А.,^{а,б} Янковская Н.С.,^а Цибульский С.А.^а

^а*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
634050, Российская Федерация, Томск, пр-кт Ленина, д. 30
e-mail: jankovsky@tpu.ru*

^б*Кузбасский государственный университет имени Т.Ф. Горбачева,
650000, Российская Федерация, Кемерово, ул. Весенняя, д. 28*

Энергетический сектор имеет стратегическое значение в каждой стране и оказывает важное влияние на экономическое и устойчивое развитие.

Основное предназначение геотермальной энергетики – это замещение традиционных ископаемых видов топлива, запасы которых истощаются, а сжигание вызывает загрязнение окружающей среды¹.

Применение геотермальной тепловой энергии задает особые условия по бурению скважин, обустройству месторождений и сооружению систем энергоснабжения. Выработка электрической энергии осуществляется на одноконтурных станциях прямого цикла с температурой геотермального источника более 160 °С. Станции с бинарной схемой могут генерировать электрическую энергию, используя геотермальный источник с меньшей температурой.

В России разведано более 60 месторождений гидротермальных источников с температурой воды от 40 °С до 250 °С, прогнозные запасы которых составляют около 20 млн. м³/сут, что соответствует сжиганию 40 млн т.у.т. в год². На этих месторождениях встречаются сероводородные, азотные, азотно-углекислые, сероводородно-углекислые, углекислые, метановые и азотно-метановые воды².

Цель работы заключается в установлении возможности апробации пилотной установки на действующей скважине. Разработана принципиальная тепловая схема ГеоЭС с органическим циклом Ренкина (ОЦР), мощностью 25 кВт.

Литература

1. Alekseenko S. и др. Analysis of the cycle arrangement of a binary geothermal power plant using a low- and medium-temperature source // Therm. Sci. Eng. Prog. 2024. Т. 48. С. 102400.
2. Kononov V.I., Polyak B.G., Khutorskoy M. D. Hydrogeothermal resources of Russia. Georesources 2005; 2: 29-33.

Работа выполнена в рамках программы развития ТПУ «Приоритет-2030-ЭБ-016-202-2024».



СЕКЦИЯ 5

**ХИМИЯ ИСКОПАЕМОГО
И ВОЗОБНОВЛЯЕМОГО
УГЛЕВОДОРОДНОГО СЫРЬЯ**

НОВЫЕ НАНОРАЗМЕРНЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ ПРЕВРАЩЕНИЯ ТЕРПЕНОИДОВ В ПРОДУКТЫ РАЗЛИЧНОГО ФУНКЦИОНАЛЬНОГО НАЗНАЧЕНИЯ

Агабеков В.Е., Сидоренко А.Ю.

Институт химии новых материалов НАН Беларуси, 200084, ул.Скорины, 36

Природные галлуазитовые нанотрубки (ГНТ) являются основой для создания новых катализаторов для превращения возобновляемых терпеноидов в высокоценные продукты [1]. Так, в присутствии модифицированных соляной кислотой ГНТ, конденсация терпеноидов (-)-изопулегола и *n*-мента-1,8-диен-5,6-диола с рядом карбонильных соединений протекает с высокоселективным (до 90,0%) образованием замещенных хроменолов, которые обладают высокой анальгетической активностью [2, 3]. Реакция 2-карена с анисовым альдегидом на ГНТ приводит к изобензофурановым соединениям (71,0%), которые проявляют нейротропные свойства [4]. Коммерческий монтмориллонит К-10 эффективно катализирует каскадную конденсацию Принса-Фриделя-Крафтса 4-гидроксиметил-2-карена с ароматическими альдегидами в полициклические соединения, обладающие цитостатической активностью [5]. Установлено, что SO₃H-функционализированные галлуазитовые и углеродные нанотрубки, а также биоуголь являются эффективными катализаторами реакции Принса-Риттера для синтеза биоактивных амидов на основе (-)-изопулегола [6].

Литература

1. Massaro, M, Noto, R, Riela, S. *Catalysts*, 2022, **12**, 149.
2. Sidorenko A.Yu., Kravtsova A.V., Aho A., Heinmaa I., Pazniak H., Volcho K.P., Salakhutdinov N.F., Murzin D.Yu., Agabekov V.E. *J. Catal.*, 2019, **374**, 360.
3. Sidorenko A.Yu., Kurban Yu.M., Il'ina I.V., Li-Zhulanov N.S., Korchagina D.V., Ardashov O.V., Wärnå J., Volcho K.P., Salakhutdinov N.F., Murzin D.Yu., Agabekov V.E. *Appl. Catal. A: Gen.*, 2021, **618**, 118144.
4. Sidorenko A.Yu., Kravtsova A.V., Mäki-Arvela P., Aho A., Sandberg T., Il'ina I.V., Li-Zhulanov N.S., Korchagina D.V., Volcho K.P., Salakhutdinov N.F., Murzin D.Yu., Agabekov V.E. *Mol. Catal.*, 2020, **490**, 110974.
5. Sidorenko A.Yu., Kurban Yu.M., Kravtsova A.V., Il'ina I.V., Li-Zhulanov N.S., Korchagina D.V., Sánchez-Velandia J.E., Aho A., Volcho K.P., Salakhutdinov N.F., Murzin D.Yu., Agabekov V.E. *Appl. Catal. A: Gen.*, 2022, **629**, 118395.
6. Sidorenko A.Yu., Kurban Yu.M., Peixoto A.F., Li-Zhulanov N.S., Sánchez-Velandia J.E., Aho A., Wärnå J., Gu Y., Volcho K.P., Salakhutdinov N.F., Murzin D.Yu., Agabekov V.E. *Appl. Catal. A: Gen.*, 2023, **649**, 118967.

ОСОБЕННОСТИ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ МЕТАН- И ВОДОРОДСОДЕРЖАЩИХ ГАЗОВ И ИХ ВЛИЯНИЕ НА ДЕТОНАЦИОННУЮ СТОЙКОСТЬ ГАЗОВЫХ ТОПЛИВ

Арутюнов В.С.

*Федеральный исследовательский центр химической физики
им. Н.Н. Семенова Российской академии наук,
119991, Москва, Косыгина 4 e-mail: v_arutyunov@mail.ru*

Наблюдаемые изменения климата и их предполагаемая связь с антропогенными выбросами CO_2 стимулируют более широкое использование низкоуглеродных топлив, таких как природный газ и водородсодержащие газы – метановодородные смеси, синтез-газ.¹ Наиболее распространенный диапазон начальных условий их применения в энергетике (ГТУ) и на транспорте (ДВС) $T = 500\text{--}900\text{ К}$ и $P = 1\text{--}40\text{ атм}$, который практически недоступен для наиболее распространенной методики исследования высокотемпературных реакций – методу ударных труб. Но именно в этом диапазоне происходят серьезные изменения в механизмах окисления и метана, и водорода, связанные с изменением роли в них пероксидных соединений,² серьезно осложняющие прогнозирование параметров их воспламенения и детонационной стойкости.

В этом диапазоне температур ниже 900 К, практически важном не только для оптимизации режимов работы энергетических установок и автомобильных ДВС, использующих газы, содержащие метан и водород, но и для обеспечения безопасной работы с этими газами, наблюдается ряд неожиданных и парадоксальных явлений. Такой критический параметр, определяющий склонность метановодородных смесей к воспламенению, как энергия активации задержки их воспламенения, вблизи 900 К может изменяться в 4–5 раз. Добавки H_2 могут ингибировать воспламенение метана, а добавки CO – промотировать воспламенение водорода.

Резкое различие между влиянием водорода и неизбежно присутствующих в реальном природном газе более тяжелых алканов на воспламенение метана³ сильно осложняет определение детонационной стойкости газомоторных топлив, делая неприменимой такую ее распространенную характеристику, как метановое число.

Литература

1. Makaryan I.A., Sedov I.V., Salgansky E.A., Arutyunov A.V., Arutyunov V.S. *Energies* 2022, **15**, 2265.
2. Арутюнов В.С., Арутюнов А.В., Беляев А.А., Трошин К.Я. *Успехи химии* 2023, **92**, RCR5084.
3. Трошин К.Я., Никитин А.В., Беляев А.А., Арутюнов А.В., Кирюшин А.А., Арутюнов В.С. *Физика горения и взрыва* 2019, **55**, 17–24.

РАЗВИТИЕ КАТАЛИЗАТОРОВ ГИДРОПРОЦЕССОВ НЕФТЕПЕРЕРАБОТКИ

Казаков М.О.

*Институт катализа СО РАН, 630090, Новосибирск, Пр-т Академика Лаврентьева 5,
e-mail: kazakov@catalysis.ru*

Гидроочистка и гидрокрекинг входят в число ключевых процессов нефтеперерабатывающей промышленности. В среднесрочной перспективе мировые мощности установок гидроочистки и гидрокрекинга будут увеличиваться, что в свою очередь будет определять рост потребности в катализаторах для данных процессов. Ужесточение требований к характеристикам нефтепродуктов наряду с изменяющейся сырьевой базой процессов нефтепереработки в свою очередь определяет необходимость разработки и внедрения новых более совершенных катализаторов.

В докладе приведен анализ исследований в области катализаторов гидроочистки и гидрокрекинга нефтяных фракций, представлены новые разработки и перспективные направления развития катализаторов гидропроцессов. Среди тенденций, которые будут определять дальнейшее развитие катализаторов гидропроцессов, можно выделить изменение сырьевой базы за счет утяжеления сырья, роста доли дистиллятов вторичных процессов и увеличения доли сырья ненефтяного происхождения (продукты пиролиза биомассы, пластика и пр.), а также изменение спроса на различные нефтепродукты.

IN-SITU КОНВЕРСИЯ И ПОВЫШЕНИЕ НЕФТЕОТДАЧИ ТЯЖЕЛОЙ НЕФТИ В ПЛАСТЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВНУТРИПЛАСТОВОГО ГОРЕНИЯ

Варфоломеев М.А., Нурғалиев Д.К.

*ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет»,
420008, Казань, ул. Кремлевская 18
e-mail: Mikhail.varfolomeev@kpfu.ru*

Месторождения тяжелой нефти рассматриваются как один из перспективных источников углеводородов для удовлетворения растущего спроса на энергию из-за истощения запасов традиционной легкой нефти. Однако разработка подобных месторождений не так проста, как в случае легких нефтей. Внутрипластовое горение (ВПГ) может быть перспективным методом извлечения тяжелой нефти. В ходе закачки воздуха и окисления нефти происходит образование фронта горения, который позволяет вытеснять нефть в добывающие скважины за счет комбинированного механизма воздействия горячей воды, пара и дымовых газов, что, таким образом, позволяет достигать высокого коэффициента нефтеотдачи. Это более энергосберегающий, экологически чистый и эффективный метод повышения нефтеотдачи по сравнению с другими термическими методами. Кроме того, при его применении можно проводить облагораживание (частичную переработку) тяжелой нефти в пласте.

В рамках работы были проведены систематические исследования процессов окисления нефти различных типов и состава, ее отдельных групповых фракций и их смесей, а также модельных соединений в присутствии и отсутствии породы. Для определения параметров процессов окисления исследуемых систем при различных условиях были использованы методы термического анализа и калориметрии, что позволило судить о количестве основных стадий процесса и их механизме. Для анализа стабильности фронта горения и оценки эффективности нефтевытеснения использованы специальные установки по изучению ВПГ в динамических условиях – трубы горения. Для решения проблемы стабилизации фронта горения и регулирования процессов окисления в пластовых условиях была использована серия каталитических систем.

Полученные в ходе выполнения исследований новые данные позволят создать новые технологии добычи тяжелой нефти, основанные на совместном применении закачки воздуха и катализаторов окисления.

Работа выполнена при финансовой поддержке при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в соответствии с соглашением № 075-15-2022-299 в рамках программы развития исследовательского центра мирового уровня “Рациональное освоение запасов жидких углеводородов планеты”.

ГИДРОФОРМИЛИРОВАНИЕ: НОВЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ И ПОДХОДЫ К РЕАЛИЗАЦИИ

Горбунов Д.Н., Ненашева М.В.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, 119991, Москва, Ленинские горы 1с3,
e-mail: gorbunovdn@petrol.chem.msu.ru*

Реакция гидроформилирования (ГФ) – взаимодействие синтез-газа и олефинов с образованием альдегидов – лежит в основе промышленных процессов производства пластификаторов, ПАВ, растворителей, компонентов лекарственных и косметических средств. В промышленном ГФ используются преимущественно гомогенные каталитические системы, содержащие гидридокарбонилы кобальта или родия¹. Основные научные проблемы, связанные с ГФ, заключаются в сложности отделения дорогостоящего катализатора от продуктов реакции, токсичности некоторых компонентов каталитических систем (СО и фосфиновые лиганды), необходимости дополнительных стадий для получения ценных продуктов переработки альдегидов, таких как первичные спирты, ацетали и амины. Наша группа проводит исследования в данных направлениях. Разработаны легкоотделяемые двухфазные каталитические системы для tandemных реакций восстановительного ГФ, гидроаминометилирования² и ГФ-ацетализации³ – такие системы позволяют получать продукты с более высокой добавленной стоимостью в один технологический прием; для всех систем показана возможность многократного использования. Интересные результаты достигнуты в области разработки твердых катализаторов ГФ на основе полимеров⁴ и гибридных полимерно-силикатных материалов⁵, в том числе, активных в восстановительном ГФ⁶. В сотрудничестве с коллегами из ЮФУ и Курчатовского института, группа занимается *in situ* исследованиями с использованием синхротронного излучения, направленными на изучение состояния активного металла в условиях tandemных реакций⁷. Проводятся исследования ГФ с использованием альтернативных источников синтез-газа⁸.

Литература

1. Franke R., Selent D., Börner A. *Chem. Rev.*, 2012, **112**, 5675.
2. Nenasheva M., Gorbunov D., Karasaeva M. et al. *Mol. Catal.*, 2021, **516**, 112010.
3. Gorbunov D., Nenasheva M., Matsukevich R. et al. *React. Chem. Eng.*, 2021, **6**, 839.
4. Горбунов Д. Н., Ненашева М. В., Теренина М. В. и др. *Наногет. катал.*, 2021, **6**, 17.
5. Gorbunov D., Safronova D., Kardasheva, Y. et al. *ACS Appl. Mater. Inter.*, 2018, **10**, 26566.
6. Gorbunov D., Nenasheva M., Naranov E. et al. *Appl. Catal. A Gen.*, 2021, **623**, 118266.
7. Gorbunov D. N., Nenasheva M. V., Baravoi I. A. et al. *J. Catal.*, 2023, **428**, 115194.
8. Gorbunov D., Nenasheva M., Terenina M. et al. *ChemistrySelect*, 2020, **5**, 6407.

Исследование выполнено в рамках государственного задания №121031300092-6 «Нефтехимия и катализ. Рациональное использование углеродсодержащего сырья».

ПОТЕНЦИАЛ БИОМАССЫ И ПОЛИМЕРНЫХ ОТХОДОВ ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА ТОПЛИВА И ОСНОВНЫХ НЕФТЕХИМИЧЕСКИХ ПРОДУКТОВ

Дементьев К.И., Максимов А.Л.

*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН,
119991, г. Москва, Ленинский проспект, д.29,
e-mail: kdementev@ips.ac.ru*

Одним из направлений Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации по переходу к экологически чистой и ресурсосберегающей энергетике является создание технологий замкнутого углеродного цикла, предполагающих нулевой баланс потребляемого и выбрасываемого в атмосферу углерода. Переход к экономике такого типа возможен за счет постепенного отказа от ископаемых источников энергии одновременно с вовлечением в переработку возобновляемого сырья и углеродосодержащих отходов.

Одним из возможных заменителей ископаемого сырья может стать биомасса различных видов. Она содержит углерод, водород и кислород; соответственно, ее потенциально можно использовать для производства топлив и продуктов нефтехимии. Основными преимуществами использования биомассы в качестве источника энергии и химического сырья являются огромное количество доступных ресурсов, быстрое их воспроизводство и отсутствие влияния на баланс углерода в биосфере.

Несмотря на развитие ряда процессов производства биотоплив, основная задача по переработке лигноцеллюлозной биомассы в моторное топливо и сырье для нефтехимии далека от завершения из-за сложности полной деоксигенации биомассы и продуктов ее переработки. Наиболее перспективным является комплексный подход, основанный на частичном гидрировании продуктов биомассы с последующим каталитическим крекингом или гидроконверсией. Существенной особенностью данного подхода является конверсия совместного сырья, содержащего бионефть и традиционные нефтяные фракции, что позволяет осуществить полную гидродеоксигенацию бионефти в мягких условиях.

Полимерные отходы являются еще одним потенциальным типом углеродсодержащего сырья. Учитывая, что значительная часть полимеров используется в упаковке, при современном объеме производства и потребления пластмасс в современном мире уже накопились миллиарды тонн отходов синтетических полимеров, и это количество непрерывно увеличивается. Глубокая химическая переработка таких отходов является одной из глобальных задач мировой химической науки и промышленности. В то же время очевидно, что такая переработка может стать основой высококорентабельной отрасли, если используемые для этого методы и процессы будут не только эффективными, но и экологически чистыми, отвечающими строгим требованиям «зеленой химии».

ВКЛАД РОССИЙСКИХ УЧЕНЫХ В РАЗВИТИЕ ТЕХНОЛОГИЙ ПО ПЕРЕРАБОТКЕ НЕФТИ

Капустин В.М.,^а Чернышева Е.А. ^а

*^аФедеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Российский государственный университет нефти и газа (национальный исследовательский университет) имени И.М. Губкина»,
119991, г. Москва, проспект Ленинский, дом 65, корпус 1,
e-mail: vmkapustin@mail.ru , kapustin.v@gubkin.ru*

После ухода ведущих иностранных технологических компаний с российского рынка перед отечественными учеными и специалистами встала важнейшая задача поддержания существующих на НПЗ западных технологий и их замена на российские аналоги. Что изменилось за два года? Первое это переход на китайские катализаторы, присадки и оборудование. Второе - широкие возможности для реализации российских разработок.

Многие российские технологии уже давно освоены на НПЗ. Это, например, первичная переработка нефтяного сырья, изомеризация легких углеводородов C_5 - C_6 , каталитический крекинг вакуумного газойля, замедленное коксование гудрона, сернокислотное алкилирование изобутана бутиленами. На НПЗ есть возможность использовать практически полную линейку российских катализаторов нефтепереработки за исключением катализаторов гидрокрекинга, риформинга с движущимся слоем катализатора, гидроочистки бензинов каталитического крекинга.

Большой интерес представляют новые технологии ведущих российских ученых. Прежде всего, это гидроконверсия гудрона, алкилирование на цеолитах ИНХС РАН, получение игольчатого кокса и пека (разработка УГНТУ совместно с Губкинским университетом), катализаторов гидроочистки и гидрокрекинга ООО «РН-ЦИР», АО «ВНИИ НП» и ФИЦ «ИК СО РАН», изомеризации C_7 , ООО «НПП Нефтехим», риформинга ФИЦ «ИК СО РАН» и РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина. Получены значительные достижения в области российских катализаторов. Новые технологические решения ученых Институты ПАО «НК «Роснефть» позволили занять передовые позиции в таких процессах, как гидроочистка, гидрокрекинг, каткрекинг, где сегодня российские катализаторы активно вытесняют зарубежные. Полномасштабные промышленные испытания подтверждают российские разработки. Основные проблемы на сегодняшний день остаются с российскими технологиями гидрокрекинга. В это трудное время для всей российской науки необходимо сплотиться вокруг совместных разработок и внедрять современные российские технологии переработки нефтяного сырья.

ПОЛУЧЕНИЕ СИНТЕТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ ТОПЛИВНОГО И НЕФТЕХИМИЧЕСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ ИЗ БИОМАССЫ

Куликова М.В., Максимов АЛ.

*Институт нефтехимического синтеза им. А.В.Топчиева Российской академии наук (ИНХС РАН)
119991, ГСП-1, Москва, Ленинский проспект, 29
m_kulikova@ips.ac.ru*

Биомасса в настоящее время рассматривается как воспроизводимое сырье для производства тепловой и электрической энергии. Однако, как известно, области применения биомассы не ограничиваются энергетикой.

В первую очередь это процессы, позволяющих осуществлять глубокую переработку углеродсодержащего сырья с использованием принципов «зеленой» химии, в том числе позволяющих нивелировать «углеродный след»: конверсия синтез-газа в спектр продуктов как топливного, так и нефтехимического назначения.

В ИНХС РАН ведутся систематические исследования по переработке растительной биомассы методом гидротермальной карбонизации в биоуголь – полупродукт производства синтетических углеводородов, как в одну стадию, так и через стадию получения синтез-газа методом газификации. Показана возможность получения экологически чистых топливных компонентов методом гидрогенизационного каталитического ожижения биоугля и по методу Фишера-Тропша – из синтез-газа газификации биоуглей разной природы. В ИНХС РАН ведутся исследования по сокращения содержания кислорода в продуктах преобразования биомассы в целях их дальнейшего применения в дорожном строительстве в виде модификаторов для традиционных марок битума или даже индивидуальных биобитумов. В качестве таких обескислороженных продуктов ожижения биомассы более всего подходит искусственная нефть (бионефть), полученная термическим растворением биоугля, произведенного, в свою очередь, гидротермальной карбонизацией биомассы для минимизации содержания кислорода. Такие исследования являются в полной мере пионерскими, так как практически не имеют описанных в мировой научной литературе аналогов.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ИНХС РАН.

НОВЫЕ УСТОЙЧИВЫЕ К ЗАУГЛЕРОЖИВАНИЮ КАТАЛИЗАТОРЫ УГЛЕКИСЛОТНОЙ КОНВЕРСИИ МЕТАНА В СИНТЕЗ-ГАЗ

Локтев А.С.^{а, б} Дедов А.Г.^{а, б}

^а*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 29,
e-mail: al57@ips.ac.ru, al57@rambler.ru,*

^б*Российский государственный университет нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина,
119991, Москва, Ленинский проспект 65*

Углекислотная конверсия метана (УКМ) – каталитический процесс, позволяющий эффективно утилизировать парниковые газы – CO₂ и метан с образованием эквимолярной смеси CO и H₂ (синтез-газ). Синтез-газ такого состава - удобный полупродукт для синтеза углеводородов по Фишеру-Тропшу и ряда оксигенатов, а также может использоваться в различных топливных элементах. Катализаторы процесса УКМ также позволяют получать синтез-газ из биогаза, других продуктов переработки биомассы и отходов. Однако процесс УКМ осложнён высокой эндотермичностью, образованием коксовых отложений и «спеканием» активных центров катализаторов. Реализация процесса УКМ требует создания стабильных и устойчивых к зауглероживанию катализаторов. Разработанные нами подходы к созданию таких катализаторов включают: синтез катализаторов, содержащих никель и/или кобальт, диспергированные в матрице оксидных носителей с развитой поверхностью (цеолиты, алюмомагниево-оксиды, оксиды РЗЭ)¹⁻³ или перовскитоподобных сложных оксидов кобальта и РЗЭ, диспергированных в матрице карбида кремния⁴. Эти каталитические материалы обеспечивают количественное образование синтез-газа на протяжении не менее 50 ч проведения УКМ, практически не подвержены зауглероживанию и «спеканию» сформировавшихся наноразмерных металлических активных центров.

Литература

1. Моисеев И.И., Локтев А.С., Шляхтин О.А., Мазо Г.Н., Дедов А.Г. *Нефтехимия*, 2019, **59**(8), 833.
2. Локтев А.С., Архипова В.А., Быков М.А., Садовников А.А., Дедов А.Г. *Нефтехимия*, 2023, **63**(1), 88.
3. Dedov A.G., Loktev A.S., Arkhipova, V.A., Bykov, M.A., Sadovnikov A.A., Cherednichenko K.A., Shandryuk G.A. *Processes*, 2023, **11**(8), 2296.
4. Локтев А.С., Архипова В.А., Быков М.А., Садовников А.А., Дедов А.Г. *Нефтехимия*, 2023, **63**(3), 416.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-13-00098 и 20-13-00138.

КАТАЛИТИЧЕСКАЯ ТРАНСФОРМАЦИЯ КОМПОНЕНТОВ РАСТИТЕЛЬНОЙ БИОМАССЫ В ПРИСУТСТВИИ БИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СИСТЕМ

**Матвеева В.Г.,^а Никошвили Л.Ж.,^а Манаенков О.В.,^а Лисичкин Д.Р.,^а
Григорьев М.Е.,^а Сараев А.А.,^б Герасимов Е.Ю.,^б Каичев В.В.^б**

*^аТверской государственной технической университет,
170026, Тверь, наб. А. Никитина 22,
e-mail: matveeva@science.tver.ru*

*^бИнститут катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской Академии Наук,
630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева 5*

Конверсия лигноцеллюлозной биомассы в химические вещества с добавленной стоимостью и компоненты жидких топлив требует комплексного подхода, подразумевающего, в том числе, разработку эффективных вариантов каталитической трансформации таких биополимеров, как целлюлоза, гемицеллюлозы и инулин. Среди «соединений-платформ», получаемых переработкой растительной биомассы, особое место занимает левулиновая кислота (ЛК) и продукт каталитического гидрирования ЛК – гамма-валеролактон (ГВЛ), а также фурановые соединения (фурфурол (ФФ) и 5-гидроксиметилфурфурол).

Процессы трансформации растительных полисахаридов, а также получения ГВЛ и фурановых соединений идут в присутствии гетерогенных катализаторов, которые для обеспечения высокой эффективности должны содержать активные центры различной природы. В рамках данной работы было показано, что бифункциональные системы (катализаторы на основе металлосодержащих частиц, иммобилизованных в порах оксидных носителей; катализаторы на основе моно- и биметаллических частиц металлов (Ru, Pd, Co, Cu), а также магнитных частиц, иммобилизованных в порах шитых полимеров) могут быть успешно использованы в процессах трансформации растительных полисахаридов, а также таких «соединений-платформ», как ЛК и ФФ.

Было показано, что в случае каталитических систем на основе оксидных носителей важна сила кислотных центров: слишком высокая кислотность, хотя и позволяет заметно ускорить процесс, одновременно с этим приводит к карбонизации поверхности катализатора и снижению его активности при повторном использовании. Каталитические системы на основе полимерных носителей, не содержащих функциональных групп, лишены этого недостатка. В этом случае повысить активность катализатора возможно путем внедрения второго металла-модификатора.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-79-00009.

ВОЗМОЖНОСТИ СНИЖЕНИЯ ЭМИССИИ CO₂ В ГАЗОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ

Седов И.В., Арутюнов В.С., Макарян И.А., Никитин А.В., Савченко В.И.

*Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, 142432 Черноголовка, Россия,
isedov@icp.ac.ru*

Снижение эмиссии диоксида углерода при производстве продукции является одним из главных трендов современной нефтегазохимии. Наиболее реальная возможность этого – использование диоксида углерода, образующегося в технологических процессах, в качестве сырья для получения различных химических продуктов. Максимальный эффект при этом может быть достигнут при производстве таких крупнотоннажных продуктов, как синтез-газ, водород и метанол. Помимо широко обсуждаемых каталитических процессов углекислотного риформинга и три-риформинга природного газа в синтез-газ, CO₂ может также быть успешно использован в различных некаталитических автотермических процессах на основе природного газа. Например, практически полностью избежать эмиссию диоксида углерода при производстве метанола и водорода можно в комбинированном процессе их получения на основе автотермической матричной конверсии природного газа, в котором подавляющая часть содержащегося в природном газе углерода переходит в получаемый метанол. Это практически исключает эмиссию диоксида углерода в атмосферу при производстве метанола, которая даже в процессах на основе три-риформинга достигает 0.91 т CO₂/т CH₃OH.

Реакция гидрирования CO₂ представляет интерес в качестве одного из путей реализации стратегии улавливания и утилизации диоксида углерода CCU в борьбе с техногенными выбросами парниковых газов. При высоких температурах (1200 К и выше) термодинамически предпочтительным путем гидрирования является эндотермическая обратная реакция водяного газа RWGS, ведущая к образованию CO и H₂O, тогда как при температурах 500—900 К в присутствии катализаторов (обычно никелевых) протекает экзотермическая реакция Сабатье (взаимодействие CO₂ с H₂ с образованием метана). Использование катализаторов позволяет комбинировать указанные реакции с реакциями последующего селективного превращения CO в метанол, диметиловый эфир и углеводороды C₂₊, включая олефины.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект № 22-13-00324)

СИНТЕЗ И МОДИФИЦИРОВАНИЕ КАТАЛИЗАТОРОВ ПОЛУЧЕНИЯ НИЗШИХ ОЛЕФИНОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СВЕРХКРИТИЧЕСКИХ ФЛЮИДНЫХ СРЕД.

Синев М.Ю.

*Федеральный исследовательский центр химической физики
им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, 119991, Москва, Косыгина 4,
e-mail: mysinev@yandex.ru*

Получение низших олефинов – этилена и пропилена – в процессах превращения лёгких алканов (ЛА) – основных компонентов природного и попутных нефтяных газов – способствует расширению сырьевой базы производства продуктов нефтехимического и основного органического синтеза. Особый интерес представляют окислительные превращения ЛА с получением олефинов (окислительная конденсация метана, окислительное дегидрирование этана и пропана, окислительный крекинг алканов C_{3+}), не имеющие термодинамических ограничений. Практическая реализация такого рода процессов в значительной мере сдерживается отсутствием активных, селективных и стабильных катализаторов.

С точки зрения синтеза материалов с определённым фазовым составом, пористой структурой и величиной поверхности, а также оптимизации их каталитических свойств особый интерес представляют подходы, связанные с использованием сверхкритических (СК) флюидов как среды и реагента. В отличие от «традиционных» методов термического синтеза, обработка в среде СК флюидов предполагает возможность варьирования нескольких параметров (помимо температуры и продолжительности процесса), таких как плотность и состав флюида, а в случае обработки материалов в среде водных флюидов (ВФ) – регулирование кислотно-основного и окислительно-восстановительного потенциалов среды.

В качестве примеров рассмотрены

- формирование фазового состава и морфологии оксидов кремния и алюминия, используемых в качестве носителей катализаторов, при обработке их предшественников в среде ВФ;
- синтез алюминатов щелочноземельных и редкоземельных элементов в среде ВФ;
- влияние условий синтеза и структуры материалов на их каталитические свойства в процессах окислительных превращений C_1 - C_3 алканов – с получением этилена и пропилена.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 23-13-00360, <https://rscf.ru/project/23-13-00360/>.

SAF- И LCAF-ТОПЛИВА: ВЫЗОВЫ И ДОСТИЖЕНИЯ ОТЕЧЕСТВЕННОЙ И МИРОВОЙ НАУКИ

Стрижак П.А., Антонов Д.В., Ивашкина Е.Н., Яновский Л.С.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
634050, Томск, Ленинский проспект 30,
e-mail: pavelspa@tpu.ru*

Основная мотивация в мире при создании SAF- и LCAF-топлив заключается в снижении углеродного следа при эксплуатации воздушных летательных аппаратов¹. Эти категории топлив также называют альтернативными авиационными биотопливами. В мире известны примеры создания SAF-топлив в виде смесей компонентов, произведенных из традиционных углеводородов с добавками компонентов из растительного сырья². Известны примеры создания 100% биокеросина на растительном компоненте. Чаще всего в программах развития авиационных отраслей в ряде государств (Европа, США, Китай) вносятся составы с добавлением 1-15% компонентов на растительном сырье к традиционному углеводородному топливу³.

Анализ доступных данных в международной периодической литературе показывает, что в качестве сырья для изготовления SAF-топлив используются: рапсовое, талловое, рыжиковое масла, кулинарные жиры. Наиболее часто в качестве технологий для изготовления компонентов SAF-топлив применяются: синтез Фишера-Тропша, гидрокрекинг, каталитический крекинг. С учетом одновременного учета экологических, энергетических, экономических, технологических, эксплуатационных и иных индикаторов возможно применение других технологий и сырья. При этом LCAF-топлива характеризуются многостадийным уменьшением углеродного следа вплоть до нуля^{2,3}.

В России на сегодняшний день нет технологий для заводского производства SAF- и LCAF-топлива. Потребность в создании таких топлив острая, так как в развитых и развивающихся странах имеются такие топлива, и они включены в реестры для авиационных средств. Отсутствие в России таких топлив накладывает ограничения на продажу отечественной техники за рубеж, полеты судов отечественных компаний над территориями государств, которые накладывают ограничения на антропогенные выбросы.

Литература

1. Liu D. *International Energy Agency (IEA)*, 2021.
2. Sustainable Aviation Fuels Guide: International Civil Aviation Organization. Canada. 2018.
3. Seyam S., Dincer I., Agelin-Chaab M. *V-th Fuel*, 2022, **319**, 123748.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-69-10006.

КАТАЛИТИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ ПО ПЕРЕРАБОТКЕ РАСТИТЕЛЬНОЙ БИОМАССЫ

**Яковлев В.А., Алексеева М.В., Кукушкин Р.Г.,
Селищева С.А., Дубинин Ю.В.**

*Институт катализа СО РАН, 630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева 5,
e-mail: yakovlev@catalysis.ru*

Роль катализа в переработке биосырья представляется ключевой. Специфика перерабатываемого растительного сырья (как правило сложная смесь соединений, высокое содержание кислорода, воды, низкая термическая стабильность, наличие различных функциональных групп в соединениях) накладывает определенные требования к катализаторам и условиям процесса в целом.

В связи с этим разработка катализаторов селективного гидрирования, окисления, а также для процессов этерификации, гидролиза и дегидратации продуктов первичной переработки является актуальной и представлена в данной работе. Под первичной переработкой следует понимать процессы быстрого пиролиза, экстракции, отпарки, гидролиза, в результате которых растительная биомасса переходит в жидкое, растворенное состояние и может подвергаться дальнейшей каталитической переработке.

В работе сделан акцент на каталитическую переработку фурфурола – продукта гидролиза гемицеллюлоз – до фурфурилового спирта и 2-метилфурана, которые позиционируются как «строительный» материал для органического синтеза и октаноповышающие добавки. В качестве катализаторов использовались Cu-Fe- и Ni-Mo - катализаторы, обладающие высокой селективностью к целевому продукту. Топливное направление представлено процессами переэтерификации метанолом и гидрооблагораживания растительных липидов – триглицеридов жирных кислот и свободных жирных кислот с получением биодизеля и нормальных алканов, соответственно. Для получения более качественного топлива из последних требуется гидроизомеризация до изо-алканов, которая протекает на Pt-катализаторах с применением кислотных носителей, типа цеолиты ZSM-5, Y.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта ББФ 2024-2028 № FWUR-2024-0038.

ОСОБЕННОСТИ СОСТАВА АСФАЛЬТЕНОВ И СМОЛ В ОСТАТОЧНОМ ПРОДУКТЕ ГИДРОКРЕКИНГА ГУДРОНА И ПЕРСПЕКТИВЫ ЕГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ВЫСОКОМАРЖИНАЛЬНЫХ ПРОДУКТОВ

Якубов М.Р.^а, Борисов Д.Н.^а, Идрисов М.Р.^б, Храмов А.А.^с

*^аИнститут органической и физической химии им. А.Е. Арбузова - ОСП ФИЦ КазНЦ РАН,
420088, Казань, ул. Академика Арбузова 8
e-mail: yakubovmr@mail.ru*

^бАО «ТАИФ», 420012, г. Казань, ул. Щапова, д.27

^сАО «ТАИФ-НК», 423574, г. Нижнекамск, ул. Соболековская, д. 45

На нефтеперерабатывающем заводе ТАИФ-НК эксплуатируется комплекс глубокой переработки тяжелых остатков, включающий уникальную установку суспензионного комбинированного гидрокрекинга, что обеспечивает выход светлых нефтепродуктов до 98,2% и глубину переработки до 98,6%. На первой стадии в процессе жидкофазного гидрокрекинга гудрона при температуре 430-470 °С и давлении 200-210 атм. в присутствии специальной угольной добавки без каталитического воздействия получается очищенный от соединений металлов гидрогенизат, при этом в качестве побочного продукта формируется до 5% неконвертированных тяжелых остатков. Специалистами АО ТАИФ разработан принципиально новый технологический подход, позволяющий извлечь дополнительное количество дистиллятных фракций из данного остатка, в результате чего также получается уникальный продукт КОГГ, являющийся концентратом асфальтенов и смол. В настоящее время известно о возможности получения на основе нефтяных асфальтенов различных высокомаржинальных продуктов – углеродных материалов, катализаторов, наполнителей полимеров, сорбентов и др.^{1,2} Для определения наиболее перспективных направлений практического использования КОГГ проведено его исследование с выявлением особенностей состава и структуры асфальтенов и смол различными методами (ИК-Фурье, ЭПР, ТГА, МАЛДИ). Показано, что использование КОГГ в смеси с полиэтиленом и полипропиленом увеличивает показатель текучести расплава композиций в 1,5-2 раза при наполнении до 15 мас.%. Кроме того, использование КОГГ в качестве наполнителя позволяет повысить температуру разложения полиолефиновых композиций (до 20°C по данным ТГА).

Литература

1. Kamkar M., Giovanniantonio N. *Fuel*, 2021, **285**, 119272.
2. Enayat S., Tran M., Salpekar D., Kabbani M., Babu G. *Fuel*, 2020, **263**, 116641.

ПОЛУЧЕНИЕ НАФТЕНОВЫХ МАСЕЛ ИЗ ТЯЖЕЛОГО НАФТЕНО-АРОМАТИЧЕСКОГО СЫРЬЯ

Антонов С.А.,^{а,б} Матвеева А.И.,^{а,б} Никульшин П.А.^{а,б}

^а АО «ВНИИ НП», 111116, Москва, ул. Авиамоторная д. 6 стр. 2,
e-mail: antonovsa@vniinp.rosneft.ru

^б ФГАОУ ВО «РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина», 119991, Москва, Ленинский проспект, 65

Нафтенческие масла являются востребованным продуктом и широко используются в качестве трансформаторных масел, основ смазок, масел-пластификаторов и т.д. В настоящий момент производство нафтенческих масел на территории РФ отсутствует, а потребность в них удовлетворяется за счет импорта. С учетом наличия производственных мощностей, катализаторов и сырьевой базы – нафтенческо-ароматических нефтей на территории нашей страны (Русская, Северо-Комсомольская, Пангодинская, Ярегская и др.)¹, актуальной является разработка отечественной технологии производства нафтенческих масел.

В мировой практике используются различные технологии получения нафтенческих масел: кислотная, контактная очистка, однако, наиболее эффективной является гидрокаталитическая переработка нафтенческо-ароматического сырья.

В данной работе проведены исследования по гидрооблагораживанию фракций НК-350, 350-400, 400-450, 450-500 °С нафтенческо-ароматической нефти в присутствии отечественного промышленного Al-Ni-Mo катализатора при 360-400 °С, 4-10 МПа, объемной скорости – 0,5 ч⁻¹, соотношении водород : сырье – 1200 нм³/м³.

Из гидрогенизата фр. НК-350 °С получен аналог импортного маловязкого нафтенческого масла с температурой застывания ниже минус 72 °С. С использованием данного образца приготовлена и с положительными результатами испытана квалификационными методами опытная партия гидравлического масла МГЕ-10А. Также гидрогенизат, полученный из данной фракции может использоваться в качестве компонента зимнего и арктического дизельного топлива и других базовых основ масел.

Из фракций 350-400, 400-450, 450-500 °С показана возможность получения линейки нафтенческих масел с кинематической вязкостью при 40 °С от 2,0 до 180,0 мм²/с, которые могут использоваться в качестве компонентов моторных, трансмиссионных, турбинных и других масел, для смазывания компрессоров высокого давления, в качестве масел-мягчителей, растворителей и диспергаторов при производстве различных технологических препаратов, при изготовлении резин и т.д.

Литература

1. Певнева Г.С., Фурсенко Е.А., Воронецкая Н.Г. и др. Геология и геофизика, 2017, т. 58, № 3–4, с. 522–532.

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ УТИЛИЗАЦИИ ДЫМОВЫХ ГАЗОВ ГПА И ТЭС С ПОЛУЧЕНИЕМ ВТОРИЧНЫХ ЭНЕРГОНОСИТЕЛЕЙ

Афокин М.И.^а, Магомедова М.В.^а, Ерпалов М.В.^б, Чистяков К.А.^в

^а*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 29,
e-mail: m_afokin@ips.ac.ru*

^б*Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Российской Академии Наук,
620066, г. Екатеринбург, ул. Академическая, д.20*

^в*Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского Уральского отделения Российской Академии Наук,
620108, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, д. 22/20*

Одним из крупнейших источников выбросов CO₂ в России являются дымовые газы тепловых электростанций (ТЭС) и газоперекачивающих агрегатов (ГПА). На территории Российской Федерации насчитывается более 370 крупных ТЭС с суммарной установленной мощностью около 163,5 ГВт, использующих в качестве топлива природный газ в Европейской части страны, и уголь, ПНГ, коксовый газ или торф¹. Помимо этого, по состоянию на 2020 г. на территории России эксплуатировалось 3781 газоперекачивающих агрегатов, суммарной мощностью 46.8 млн. кВт², работающих за счет сжигания природного газа.

В данной работе проведен расчет технологических схем переработки дымовых газов ТЭС и ГПА различного состава и параметров во вторичные энергоносители (метанол и ДМЭ), а также оценена их энергетическая эффективность и углеродный след.

Основываясь на результатах моделирования различных технологических схем был предложен маршрут утилизации дымовых газов, включающий стадии адсорбционного выделения CO₂, высокотемпературного электролиза смеси CO₂/пар и синтеза метанола. Данная схема реализована на опытной установке мощностью 1 т/год по метанолу и успешно испытана на компрессорной станции Шатровская в Курганской области в декабре 2022 г.

Литература

1. Системный оператор единой энергетической системы. Отчет о функционировании ЕЭС. <https://www.so-ups.ru/functioning/tech-disc/tech-disc-ups/>.
2. Справочник «Газпром в цифрах 2016–2020» Отчет ПАО «Газпром» за 2020 г. С.52.

Расчетная работа выполнена за счет средств государственного задания ИИХС РАН (FFZN-2022-0004 Улавливание и утилизация диоксида углерода № 123012300040-4).

Проектная и конструкторская работа, а также опытный пробег проведены за счет средств договора с ООО «Газпром Трансгаз Екатеринбург»

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ ВЫДЕЛЕНИЕ ЧИСТОГО ВОДОРОДА ИЗ ПРОДУКТОВ ПАРОВОЙ КОНВЕРСИИ МЕТАНОЛА, ДИМЕТИЛОВОГО ЭФИРА И ДИМЕТОКСИМЕТАНА

Бадмаев С.Д.,^а Беляев В.Д.,^а Собянин В.А.,^а Снытников П.В.^а

*^аИнститут катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской Академии Наук,
630090, Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева 5,
e-mail: sukhe@catalysis.ru*

В работе представлены результаты электрохимического выделения чистого водорода из реформата паровой конверсии оксигенатов, таких как метанол, диметоксиметан (ДММ) и диметиловый эфир (ДМЭ) с помощью водородного насоса с полимерной протонпроводящей мембраной на основе полибензимидазол [1].

Показано, что бифункциональные катализаторы $\text{CuO-ZnO}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ и $\text{CuO-CeO}_2/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$, разработанные в Институте катализа весьма эффективны в реакциях паровой конверсии вышеупомянутых оксигенатов [2,3]. В частности, эти катализаторы при атмосферном давлении, 300 °С обеспечивают полное превращение сырья и получение обогащенной водородом (~70 об.%) смеси с незначительным содержанием CO (< 1 об.%), которую без какой-либо предварительной очистки можно подавать в водородный насос для выделения чистого водорода. Показано, что при плотностях тока 0,33-0,35 А/см² обеспечивается 90-95% извлечения водорода с чистотой ~99,95 об.%. Изучены вольтамперные характеристики водородного насоса и оценена его эффективность. Так, например, эффективность электрохимического выделения водорода из реформата паровой конверсии оксигенатов (метанол, ДМЭ и ДММ) составляет ~80 %, от энергии заключенной в очищаемом водороде. Результаты исследования имеют важное значение для разработки компактного устройства получения чистого водорода.

Литература

1. Бадмаев С.Д., Кузнецова А.Д., Беляев В.Д., Снытников П.В., Собянин В.А. Патент 216707 РФ, 2023.
2. Badmaev S.D., Sobyenin V.A. Catalysis Today, 2020, **348**, 9.
3. Pechenkin A.A., Badmaev S.D., Belyaev V.D., Sobyenin V.A. Appl. Catal. B, 2015, **166-167**. 535.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (государственное задание Института катализа СО РАН, проект FWUR-2024-0033).

СВС КАТАЛИЗАТОРЫ СЕЛЕКТИВНОГО ГИДРИРОВАНИЯ CO₂ ДО ТЯЖЕЛЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ

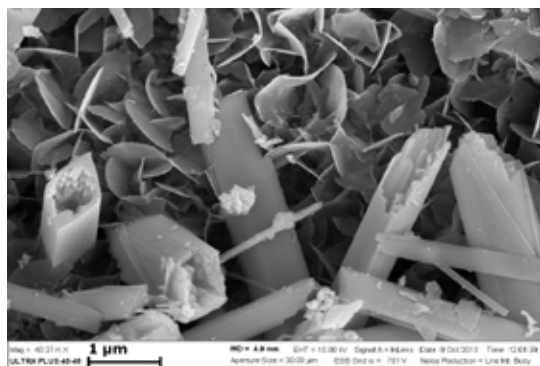
Борщ В.Н.^а, Пугачева Е.В.^а, Жук С.Я.^а, Дифеко Т.Д.^б, Андреев Д.Е.^а, Агафонов Ю.А.^в, Елисеев О.Л.^в

^аИнститут структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г.Мержанова Российской академии наук, 142432, Московская область, г. Черноголовка, улица Академика Осипьяна, 8
e-mail: borsch@ism.ac.ru

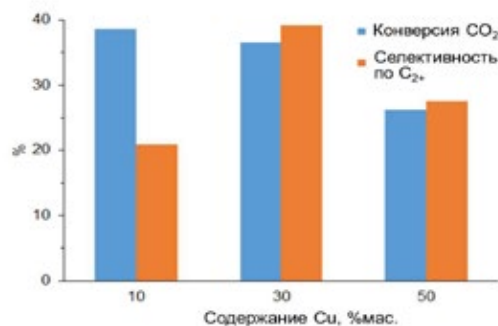
^бРоссийский университет дружбы народов, Москва, 117198, ул. Миклухо-Маклая, 6

^вИнститут органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук, 119991 Москва, Ленинский проспект, 65

На основе сложных интерметаллидов, полученных методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС), разработаны полиметаллические катализаторы с наноструктурированной поверхностью состава (95-х)Co-хCu-5La (х=10,30,50% мас.) (I), 80Mo-20Ni (II), 80Mo-20Co (III) и 80Mo-10Ni-10Co (IV). Катализаторы были испытаны в процессе гидрирования CO₂ при сравнительно мягких условиях (Т=200°C и Р=1 МПа), соотношении H₂:CO₂ = 3:1 и объемной скорости газа 2нл·г⁻¹·ч⁻¹. На катализаторе группы (I) (х=30) при конверсии CO₂ ~ 40% была получена селективность по тяжелым углеводородам (УВ) C₂₊, равная 39%, в том числе 25% по жидким УВ¹. Самые высокие показатели при тех же условиях были получены на катализаторе (IV), где при конверсии CO₂ 58% выход жидкой фракции достиг 46.9%. Повышение температуры до 300°C увеличивает конверсию CO₂ до 96%, но в продуктах превалирует метан (98%).



(а)



(б)

Рисунок 1. Морфология поверхности катализатора (95-х)Co-хCu-5La при х=30 (а) и зависимость конверсии CO₂ и селективности по C₂₊ от х (б).

Литература

1 V.N. Borshch, S.Ya. Zhuk, T.V. Pugacheva, T.D. Dipheko, D.E. Andreev, Yu.A. Agafonov, and O.L. Eliseev. Mendeleev Communications, 2023, 33, 55.

СОВРЕМЕННЫЕ ПОДХОДЫ К УЛАВЛИВАНИЮ CO₂ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫХ КОМПОЗИТНЫХ СОРБЕНТОВ

Веселовская Ж.В., Шешковас А.Ж., Козлов Д.В.

*Институт катализа им. Борескова СО РАН,
630090, Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева 5,
e-mail: jvv@catalysis.ru*

Задача сокращения выбросов парниковых газов актуальна для всего мира, в том числе для РФ. С целью снижения уровня CO₂ в атмосфере разрабатываются системы для его сорбции (поглощения) из различных газовых источников (дымовые газы, биогаз, атмосферный воздух). Эти источники характеризуются разным содержанием CO₂ и других компонентов, способных оказать негативное влияние на работу сорбента. CO₂, извлечённый при помощи сорбента из газового источника, может в дальнейшем захоронить или использовать в промышленности или сельском хозяйстве. Кроме того, в последнее время активно развиваются методы каталитической конверсии CO₂ в ценные химические продукты.

На данный момент наибольшее развитие получили низкотемпературные абсорбционные технологии улавливания CO₂ водно-аминовыми растворами. Их недостатками являются коррозионная активность аминов, их высокая летучесть и нестабильность в кислородсодержащей среде. Для решения проблемы с уносом летучего амина предлагается использовать нелетучие аминсодержащие полимеры или ионные жидкости, нанесенные на пористые носители для ускорения процесса сорбции.

Альтернативой аминсодержащим композитным материалам являются низкотемпературные сорбенты на основе карбоната калия, который является недорогим и широкодоступным химическим реактивом. Карбонат калия способен поглощать CO₂ в присутствии паров воды: $K_2CO_3 + CO_2 + H_2O = 2KHCO_3$. При использовании K₂CO₃ в чистом виде скорость поглощения CO₂ очень мала, поэтому его диспергируют в порах носителя. Карбонатная технология позволяет извлекать CO₂ из влажных газовых смесей с высоким содержанием кислорода, поскольку K₂CO₃ не подвержен окислению. Основной недостаток композитных сорбентов на основе K₂CO₃ – достаточно высокие энергозатраты на термическую регенерацию материала.

В целом, выбор сорбентов CO₂ для промышленного применения будет, судя по всему, определяться оптимальным балансом между себестоимостью материала и его физико-химическими характеристиками, определяющими энергоэффективность процесса улавливания CO₂ и срок службы сорбента.

Работа выполнена при поддержке РФФ (грант № 23-23-10080, <https://rscf.ru/project/23-23-10080/>) и Новосибирской области (соглашение № р-47 от 03.04.2023).

КЛАСТЕР ПРОИЗВОДСТВ ХИМИЧЕСКИХ ПРОДУКТОВ НА БАЗЕ РАСТИТЕЛЬНЫХ МАСЕЛ

**Воронов М.С., Сапунов В.Н., Козловский Р.А., Сучков Ю.П.,
Князев Д.С., Козеева И.С., Савельев Е.А., Ибатов Я.А., Петрова В.Э.,
Якубов К.Ш., Качаева А.С., Пастухова Д.А.**

*ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»,
125047, Москва, Миусская площадь, д.
e-mail: voronov.m.s@muctr.ru*

Рассмотрены химические и технологические аспекты использования возобновляемого сырья на основе растительных масел для отечественного производства широкого спектра химических продуктов высоких переделов.

Благодаря химической структуре (наличию реакционноспособных сложноэфирных и олефиновых групп в составе триглицеридов) растительные масла и их производные находят широкое применение в различных отраслях народного хозяйства¹. Показаны различные пути переработки растительных масел в ценные продукты. Физические методы переработки позволяют получить витаминные концентраты (витамин Е), лецитины, сквалены и др., находящие применение в косметической и фармацевтической промышленности. Химическими методами масла могут быть эффективно переработаны в топливные углеводороды², высшие жирные кислоты (в т.ч. дикарбоновые кислоты) и спирты³, экологически безопасные пластификаторы и стабилизаторы ПВХ⁴, широкий спектр функциональных добавок (присадок) для нужд малотоннажной химии, лакокрасочной, полимерной промышленности, а также индустрии синтетических моющих средств.

Дополнительно продемонстрированы пути переработки сопутствующего продукта – глицерина – в ценные продукты органического синтеза.

Литература

1. Г.А. Тептерева, С.И. Пахомов, И.А. Четвертнева, Э.Х. Каримов и др. Известия Вузов. Химия и химическая технология, 2021, **64(9)**, 5-122.
2. Meshalkin V., Sapunov V., Kozlovskiy R., Kozlovskiy I. et al. Processes, 2021, **9**, 1488, 1-12.
3. Wu L., Li L., Li B., Zhao Ch. Chem. Commun. 2017, **53**, 6152.
4. В.Н. Сапунов, М.С. Воронов, С.А. Юдаев, А.А. Макаров и др. ЖПХ, 2017, **90(10)**, 1315-1322.

Работа выполнена в рамках программы развития РХТУ им. Д.И. Менделеева «Приоритет-2030».

ДЕГИДРИРОВАНИЕ ПРОПАНА НА γ - Al_2O_3 , МОДИФИЦИРОВАННОМ МАРГАНЦЕМ

Восмери́ков А.А., Степа́нов А.А., Восмери́кова Л.Н.

*Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук,
634055, Томск, Академический проспект 4
e-mail: antonvosmerikov@gmail.com*

В настоящее время дегидрированию пропана уделяется большое внимание как важному источнику получения пропилена. В качестве катализатора дегидрирования пропана наиболее часто рассматривается оксид алюминия. Среди различных кристаллических фаз Al_2O_3 большое внимание привлекает γ - Al_2O_3 из-за меньшего образования на нем побочных продуктов. Для повышения активности и термической устойчивости к алюмооксидному катализатору добавляют различные модифицирующие добавки. Целью данной работы является изучение влияния добавки марганца к γ - Al_2O_3 на его физико-химические и каталитические свойства в процессе дегидрирования пропана.

Модифицирование γ - Al_2O_3 проводили методом его пропитки водным раствором соли марганца ($\text{Mn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$). Концентрацию марганца (в пересчете на металл) варьировали от 2 до 12 % мас.

Активность исследуемых катализаторов изучали на установке проточного типа с неподвижным слоем катализатора ($V = 3 \text{ см}^3$) при температуре реакции от 550 до 650 °С.

Результаты исследований каталитических свойств образцов показали, что модифицирование γ - Al_2O_3 марганцем способствует повышению его активности в процессе дегидрирования пропана. При этом модифицированные катализаторы проявляют более высокую дегидрирующую способность в исследуемом процессе при более низкой температуре ($T=600 \text{ °C}$). Установлено, что для Mn-содержащих катализаторов оптимальной концентрацией является 4,0 %-е содержание марганца в каталитической системе. Дальнейшее повышение концентрации марганца в катализаторе до 8 % не приводит к существенному изменению его активности и селективности в процессе превращения пропана в олефины.

Таким образом, на основании полученных результатов установлено, что каталитическую систему Mn- Al_2O_3 можно использовать в качестве активного и доступного катализатора для получения олефиновых углеводородов из пропана.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-23-00386.

ВЫСОКОДИСПЕРСНЫЕ СУЛЬФИДНЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ ОБЛАГОРАЖИВАНИЯ НЕФТЯНОГО СЫРЬЯ В УСЛОВИЯХ РЕАКЦИИ ВОДЯНОГО ГАЗА

Вутолкина А.В.,^а Максимов А.Л.,^б Караханов Э.А.^а

^аМосковский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет,
119991, Ленинские горы, д.1, стр. 3
e-mail: annavutolkina@mail.ru

^бИнститут нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 29

Одним из подходов к переработке и облагораживанию обводненного сырья может стать активация воды путем ее вовлечения в реакцию водяного газа (РВГ) с монооксидом углерода и образованием водорода *in situ*, который расходуется на превращение ароматических и гетероатомных соединений. Перспективными катализаторами такого совмещенного процесса удаления воды-гидрооблагораживания являются дисперсные системы¹⁻³.

В рамках данной работы проведено исследование ненанесенных каталитических свойств систем на основе сульфидов переходных металлов, активный компонент которых формируется *in situ* из нефтерастворимых предшественников в присутствии сульфидирующего агента и распределен в объеме реакционной среды в гидропревращении ароматических и сероорганических соединений – модельных компонентов тяжелых фракций и нефти – в условиях РВГ. Изучены закономерности облагораживания многокомпонентного модельного сырья в условиях конкурентной сорбции индивидуальных соединений, учитывающие влияние состава катализатора и реакционной среды, температуры, давления на конверсию, распределение продуктов и маршруты превращения. Для модельного сырья и реальных нефтяных фракций проведена оценка эффективности процесса облагораживания в зависимости от содержания воды, источника водорода и состава синтез-газа с точки зрения удаления сероорганических соединений и гидрирования ароматических углеводородов.

Литература

1. Vutolkina A.V., Baygildin I.G., Glotov A.P., Cherednichenko K.A., Maksimov A.L., Karakhanov E.A. *Applied Catalysis B: Environmental*, 2021, **282**, № 119616.
2. Vutolkina A.V., Glotov A.P., Baygildin I.G., Akopyan A.V., Talanova M. Yu., Terenina M.V., Maximov A.L., Karakhanov E.A. *Pure and Applied Chemistry*, 2020, **92** (6), 949.
3. Vutolkina A.V., Baigildin I.G., Glotov A.P., Pimerzin A.I., Akopyan A.V., Maximov A.L., Karakhanov E.A. *Applied Catalysis B: Environmental*, 2022, **312**, № 121403.

«Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-79-10022, <https://rscf.ru/project/24-79-10022/>

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНАЯ КОНВЕРСИЯ CO₂ В ЦЕННЫЕ ПРОДУКТЫ МЕТОДОМ КАТАЛИЗА В ПЛАЗМЕ

Голубев О.В.,^а Максимов А.Л.^а

*^аИнститут нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 29,
e-mail: golubev@ips.ac.ru*

В настоящее время количество диоксида углерода, поступающего в атмосферу, составляет десятки миллиардов тонн в год. Этому способствуют развитая мировая промышленность, увеличение количества транспорта с двигателями внутреннего сгорания и прочие антропогенные факторы. Для превращения молекул CO₂ в ценное химическое сырье требуется подвод значительного количества тепловой энергии для разрыва связей в исходных молекулах и смещения термодинамического равновесия¹. Альтернативным способом активации молекул CO₂ является плазмохимическая конверсия – при таком подходе высокоэнергетические электроны плазмы способствуют разрыву связей C–O в молекуле, при этом температура газа остается относительно невысокой. Перспективным также является совмещение плазмохимического и каталитического подхода для переработки CO₂. При помещении катализатора в область разряда происходит как изменение физических характеристик плазмы, обусловленное возникновением микрозарядов в местах контакта гранул, так и каталитические эффекты, обусловленные адсорбцией CO₂ на поверхности катализатора. Так, например, использование оксидов Mg и Ce позволяет повышать конверсию CO₂ до CO в барьерном разряде с 10 до 30%². Помимо прямого разложения CO₂ до CO и O₂, методом катализа в плазме возможно проведение реакций углекислотного риформинга метана³, гидрирования CO₂⁴ и других процессов, при этом отличительной особенностью проведения реакции в плазме является получение в одну стадию жидких оксигенатов⁵. Разработка новых катализаторов для плазменно-каталитического превращения CO₂ в ценные продукты – актуальная задача в областях газо- и нефтехимии.

Литература

1. Голубев О.В., Максимов А.Л. Журнал прикладной химии, 2022, **95**, 547–561.
2. Голубев О.В., Ильчук П.С., Садовников А.А., Максимов А.Л. Нефтехимия, 2023, **63**, № 5, 720–734.
3. Golubev O.V., Tsaplin D.E., Maximov A.L. *Gases*, 2023, **3**, № 4, 165–180.
4. Dębek R., Azzolina-Jury F., Travert A., Mauge F. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2019, **116**, 109427.
5. Голубев О.В., Ильчук П.С., Максимов А.Л., Наногетерогенный катализ, 2024, в печати.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ИИХС РАН.

КАТАЛИЗАТОРЫ НА ОСНОВЕ СОЕДИНЕНИЙ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ В РЕАКЦИЯХ ГИДРОДЕОКСИГЕНАЦИИ

Голубева М.А.,^а Мухтарова М.,^а Больных Ю.С.,^а Максимов А.Л.^а

^аИнститут нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 29,
e-mail: vinnikova@ips.ac.ru

Вовлечение в переработку возобновляемого углеродного сырья для получения топлив и ценных химических веществ способствует устойчивому развитию топливно-энергетического комплекса. Основным источником данного сырья является растительная биомасса, содержащая в своей структуре различные кислородсодержащие группы. Одним из наиболее эффективных способов переработки биомассы является переработка в среде водорода, в результате которой протекают реакции гидрирования и гидродеоксигенации. В качестве катализаторов данных гидропроцессов значительный интерес представляют соединения переходных металлов. В то время как сульфиды и оксиды можно отнести к традиционным катализаторам, фосфиды, карбиды и нитриды рассматриваются в качестве альтернативы.

В рамках настоящей работы были проведены исследования гидропревращений различных кислородсодержащих субстратов^{1,2,3,4} (фенолы, ароматические простые эфиры, лигнин) с использованием дисперсных катализаторов, содержащих синтезируемые *in situ* в реакционной среде оксиды и фосфиды молибдена, вольфрама и никеля. Установлено, что деоксигенация субстратов протекает частично или полностью в зависимости от типа используемого катализатора и условий реакции. Показано, что кислородсодержащие соединения с ароматической структурой в составе предоставляют возможности для получения различных классов веществ, которые могут использоваться в качестве компонентов топлив, растворителей, промежуточных соединений для органического, нефтехимического синтеза и синтеза полимеров.

Литература

1. Golubeva M.A., Maximov A.L. *Mendeleev Communications*, 2019, **29**, 550.
2. Голубева М.А., Мухтарова М., Бугаев А.Л., Наранов Е.Р. *Наногетерогенный катализ*, 2022, **7**, 19.
3. Mukhtarova M., Golubeva M., Sadovnikov A., Maximov A. *Catalysts*, 2023, **13**, 263.
4. Mukhtarova M., Golubeva M.A., Sadovnikov A.A., Maximov A.L. *Applied Catalysis B: Environment and Energy*, 2024, **351**, 123999.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИНХС РАН.

ИЗМЕНЕНИЯ СОСТАВА НЕФТИ В ПРОЦЕССАХ МОДЕЛЬНОГО БИООКИСЛЕНИЯ ШТАММАМИ АЭРОБНОЙ МИКРОФЛОРЫ

Гузняяева М.Ю., Туров Ю.П., Ямпольская Т.Д.

*Сургутский государственный университет,
628412, Сургут, проспект Ленина, 1
e-mail: guznyaeva_myu@surgu.ru*

В работе приведены результаты исследования процессов разрушения нефтяной системы и изменений состава образцов нефти в процессах модельной биodeградации в водной среде под воздействием различных штаммов аэробной микрофлоры. Установлено, что при одинаковых условиях эксперимента скорость снижения массы загрязняющей нефти в водном субстрате при концентрациях ее от 2 до 5 мас% практически не зависит от видового состава изученной микрофлоры (*Kocccoria sp. G⁺*, *Pseudomonas sp. G⁻* и консорциум аборигенных видов микрофлоры, выделенный из образцов нефтезагрязненной почвы на территории ХМАО).

Показано, что в процессе биоокисления нефти разрушаются не только нефтяные углеводороды, но и ее полярные высокомолекулярные компоненты – фракции нефтяных смол и асфальтенов. В одном из экспериментов (длительность 30 суток) при суммарном снижении массы загрязняющей нефти 84,7% уменьшение содержания фракции насыщенных веществ составило 87,2%, ароматических 79,1%, смол 91,0% и асфальтенов 74,1%. Вероятно, при биоокислении нефтяной системы происходит частичное разрушение ее надмолекулярных структур – смол и асфальтенов, а получающиеся низкомолекулярные продукты разрушения утилизируются микрофлорой по обычному механизму ферментативной атаки.

Детальный анализ изменений компонентного состава фракции насыщенных углеводородов методами хроматомасс-спектрометрии показал, что после 7-дневной экспозиции в составе парафинов остаются только изопреноиды, которые позднее полностью исчезают, и в результате фракция насыщенных соединений к концу эксперимента представлена исключительно нафтенами. Во фракции ароматических веществ уже на первых этапах биоокисления практически полностью исчезают все алкилбензолы. Конденсированные ароматические соединения более устойчивы к ферментативной атаке микрофлоры, и к концу 30-суточного эксперимента полностью утилизируется только нафталин. Для всех классов полициклоароматики наблюдается повышение устойчивости с увеличением молекулярных масс.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Правительства Ханты-Мансийского автономного округа – Югры (приказ от 20.06.2023 № 10-П-1534).

СРАВНЕНИЕ АКТИВНОСТИ СУЛЬФИДНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ В РЕАКЦИЯХ ГИДРООБЛАГОРАЖИВАНИЯ ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ

Джабаров Э. Г.¹, Петрухина Н. Н.¹, Калдышева А.А.²

¹*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН Российской Академии наук
Ленинский проспект, 29, Москва, Российская Федерация, 119991*

²*Российский государственный университет нефти и газа
(национальный исследовательский университет) имени И. М. Губкина
119991, Москва, Ленинский пр-т., д.65
dzhabarov@ips.ac.ru*

Процессы переработки отходов поливинилхлорида технологически сложны и экологически небезопасны. Термическая переработка (пиролиз) считается основным из путей переработки поливинилхлорида, в результате образуется жидкий продукт (пиролизное масло) с высоким содержанием хлорароматических ненасыщенных циклических и нециклических соединений разнообразного строения^{1,2}. Присутствие даже небольшого количества хлорсодержащих соединений в пиролизном масле/восках не даёт возможность использовать продукты переработки в качестве топлива или нефтехимического сырья.

Целью работы являлось сравнение активности нанесённых сульфидных биметаллических катализаторов в реакциях гидрооблагораживания двухкомпонентных модельных смесей.

Максимальная степень гидродехлорирования и гидродеоксигенации достигается в присутствии NiWS катализатора. FeWS и FeMoS малоактивны в реакции гидродехлорирования, однако в реакции гидродеоксигенации демонстрируют высокую активность. Полученные результаты требуют более тщательного изучения конкуренции за активные центры катализатора при совместном протекании нескольких гидрооблагораживающих процессов.

Литература:

1. Zakharyan E.M., Petrukhina N.N., Maksimov A.L. //Pathways of chemical recycling of polyvinyl chloride. Part 1 // Russ. J. Appl. Chem. 2020. V. 93. P. 1271—1313.
2. Murena F., Gioia F. //Catalytic hydrodechlorination of decachlorobiphenyl // Appl. Catal. B: Environm. 2002. V. 38. P. 39—50

Работа выполнена в рамках Государственного задания Федеральное государственное бюджетное учреждение науки ордена Трудового Красного знамени институт нефтехимического синтеза им. А. В. Топчиева российской академии наук.

ВНЕДРЕНИЕ И ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЦИФРОВЫХ ИНСТРУМЕНТОВ В ПРАКТИКУ ИНЖЕНЕРНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ НА НЕФТЕПЕРЕРАБАТЫВАЮЩИХ ПРЕДПРИЯТИЯХ

Ивашкина Е.Н., Боев А.С., Чузлов В.А., Назарова Г.Ю., Долганов И.М.

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
634050, Томск, проспект Ленина, 30,
e-mail: ivashkinaen@tpu.ru*

Внедрение и активное использование цифровых инструментов в практику инженерной деятельности является основной тенденцией развития промышленных предприятий как в России, так и за рубежом. Нефтеперерабатывающая отрасль не является исключением, т.к. использование строгих инженерных моделей и цифровых двойников процессов получения моторных топлив на НПЗ позволяет существенно повысить эффективность операционной деятельности предприятий. Это позволяет проводить оценку качества и выхода продукции на НПЗ, рассчитывать сценарии работы установок, оптимизировать параметры технологического режима объектов. С помощью инженерных моделей установок формируются данные для планирования производства.

В рамках выполнения федерального проекта «Передовые инженерные школы» на базе ТПУ разрабатывается программный комплекс PROGRESS для научно-инженерного моделирования процессов переработки нефти и газа.

Разработанные модели данного комплекса уже сейчас используются для решения наукоемких задач научно-инжиниринга сложных химических процессов. Это задачи по тестированию и подбору катализаторов, инжинирингу химических реакторов и вспомогательного оборудования, прогнозированию межремонтных пробегов промышленных установок, планированию производства моторных топлив. В частности, на основании результатов выполненных комплексных экспериментальных и численных исследований разработаны математические модели важнейших технологий углубленной переработки нефтяного сырья – процессов гидроочистки, каталитического крекинга и гидрокрекинга вакуумных газойлей, а также процесса замедленного коксования гудрона.

Использование ПК PROGRESS обеспечит прогнозирование работы катализаторов и даст возможность создания строгих инженерных моделей установок нефтепереработки.

Исследование выполнено в рамках проекта Национального исследовательского Томского политехнического университета «Передовые инженерные школы», соглашение Минобрнауки России № 075-15-2022-1146 от 07.07.2022 (ПИШ-НИР-2024-002, Номер Госрегистрации (ЕГИСУ НИОКТР ЦИТус): 123011700003-8).

ХИМИЧЕСКАЯ ПЕРЕРАБОТКА ПОЛИМЕРНЫХ ОТХОДОВ

Кадиев Х.М., Максимов А.Л.

*Институт нефтехимического синтеза им. А.В.Топчиева РАН
119991, ГПС-1, Москва, Ленинский проспект, дом 29
e-mail: kadiev@ips.ac.ru*

Быстрый рост производства и широкое потребление пластиковых товаров в современном обществе обусловило образование возрастающего потока пластиковых отходов (ПО), загрязнение которыми представляет серьезную угрозу для экологии. Химическая переработка полимерных отходов является перспективным способом повышения эффективности использования углеводородного сырья.

В докладе приведены результаты исследования по деполимеризации отдельно полиолефинов и смесей ПО с тяжелым вакуумным остатком (ВО) методом гидроконверсии с применением суспензий дисперсного катализатора. Изучено влияние технологических параметров на выходы и свойства продуктов гидроконверсии смеси ВО+ПО.

При увеличении давления в реакторе до 7,0 МПа наблюдается рост конверсии фр. > 500 °С, снижение содержания олефинов и серы в дистиллятных фракциях, повышение давления до 10,0 МПа не способствует существенному улучшению показателей гидроконверсии. Повышение температуры выше 400 °С и времени реакции более 2 ч сопровождается снижением выхода дистиллятных фракций и увеличением содержания в них олефинов, при этом резко возрастает выход кокса.

Увеличение содержания полиолефинов в сырьевой смеси способствует росту конверсии, повышению содержания парафиновых и нафтеновых углеводородов и снижению ароматических углеводородов в легких и средних дистиллятных фракциях. Вовлечение в сырье в смеси с гудроном полимеров нерегулярного строения - резины или компонента резины бутадиен-стирольного каучука, приводит к увеличению выхода олефинов, нафтенов и ароматических углеводородов.

При концентрации зоне реакции Мо 0,05-0,1 % мас. достигаются лучшие результаты по конверсии фр. > 500 °С и структуре продуктов реакции при гидроконверсии гудрона и смеси гудрона с полимерами.

Литература

A.U. Dandaev, M. Ya. Visaliev, N. A. Kubrin, A. M. Gyul'maliev, and Kh. M. Kadiev. Petroleum Chemistry, 2023, Vol. 63, No. 6, pp. 683–692.
DOI: 10.1134/S0965544123040084

Работа выполнена в рамках Государственного задания ИНХС РАН.

ГОМОЛОГИЗАЦИЯ ЭТИЛЕНА НА ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ Ni-Mo-СОДЕРЖАЩИХ КАТАЛИЗАТОРАХ

Карпова Т.Р., Лавренов А.В., Моисеенко М.А.

*Центр новых химических технологий ИК СО РАН, Институт катализа СО РАН,
644040, г. Омск, ул. Нефтезаводская, 54,
ktr@ihcp.ru*

Этилен является важнейшим базовым сырьём нефтехимии, ежегодный прирост производства которого достигает 4%. Большая часть производимого этилена (около 65%) используется для получения полиэтилена. На сегодняшний день перспективным направлением переработки этилена является производство не только его полимеров, но и пропилена, бутенов, а также более высокомолекулярных углеводородов.

В качестве наиболее эффективных катализаторов гомологизации этилена в алкены C_3 - C_{18} рассматриваются полифункциональные гетерогенные системы, на поверхности которых присутствуют активные центры ди- и олигомеризации этилена, кислотные центры, а также могут находиться центры реакций метатезиса алкенов.

В рамках данной работы проведено комплексное изучение Ni-Mo-содержащих катализаторов с целью их применения для превращения этилена в пропилен, бутены и алкены C_{5+} . Показано, что олигомеризация этилена в бутены, гексены и т.д. протекает на Ni-содержащих центрах по механизму металлокомплексного катализа. На кислотных центрах протекают реакции изомеризации и олигомеризации алкенов C_4 - C_6 . Получение пропилена из этилена осуществляется путем последовательного протекания реакций димеризации этилена, изомеризации бутена-1 в бутены-2 и метатезиса этилена и бутенов-2 на Mo-содержащих центрах. Показано, что использование оксида алюминия в качестве носителя Ni-Mo-содержащих катализаторов обеспечивает максимальное содержание пропилена в продуктах реакции. Катализаторы на основе носителей с более высоким уровнем кислотных свойств (B_2O_3/Al_2O_3 , SO_4^{2-}/Al_2O_3) характеризуются высоким содержанием углеводородов C_{5+} в составе продуктов. Повышение температуры и массовой скорости подачи этилена также приводит к увеличению вклада реакций олигомеризации с образованием бутенов и более высокомолекулярных алкенов.

Таким образом, варьирование природы носителя Ni-Mo-содержащих катализаторов и условий проведения процесса позволяет регулировать их активность и состав продуктов превращения этилена.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН, проект FWUR-2024-0039.

ХИМИЯ АДАМАНТАНА: ДОСТИЖЕНИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ

Ковалев В.В.

*МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет
Ленинские горы 1, 119991 Москва.
E-mail: kovalev1952@mail.ru*

Лекция посвящена 90-летию развития химии адамантана после его открытия в нефти в 1933 году.

Содержание:

1. Введение
2. Методы селективной модификации адамантана
3. Пористые материалы на основе адамантана
4. Адамантан в катализе
5. Использование производных адамантана в медицине
6. Использование производных адамантана в нанотехнологии
7. Развитие химии адамантана в России
8. Заключение

Работа выполнена в рамках государственного задания «Нефтехимия и катализ. Рациональное использование углеродсодержащего сырья», № 121031300092-6.

КОМПОЗИЦИИ НА ПРИНЦИПАХ «ЗЕЛеной ХИМИИ» ДЛЯ УВЕЛИЧЕНИЯ НЕФТЕОТДАЧИ ТРУДНОИЗВЛЕКАЕМЫХ ЗАПАСОВ НЕФТИ

**Алтунина Л.К., Кувшинов В.А., Стасьева Л.А., Кувшинов И.В.,
Козлов В.В., Шолитодов М.Р.**

*Институт химии нефти Сибирского отделения Российской Академии Наук,
634055, Томск, Академический проспект 4,
alk@ipc.tsc.ru*

Доля трудноизвлекаемых запасов (ТРИЗ) нефти в России постоянно растет и в настоящее время превышает 65 %. В последние годы для решения проблемы увеличения нефтеотдачи месторождений с ТРИЗ в ИХН СО РАН на принципах «зеленой химии», с применением глубоких эвтектических растворителей (ГЭР), создаются фундаментальные основы новых физико-химических методов увеличения нефтеотдачи, позволяющие получать в мягких, экологически безопасных условиях перспективные химические реагенты для увеличения добычи нефти. Для разработки месторождений с ТРИЗ созданы кислотные и щелочные нефтевытесняющие композиции с регулируемыми физико-химическими, поверхностно-активными и реологическими свойствами, их твердые и жидкие низко застывающие (минус 20–минус 60 °С) товарные формы, обеспечивающие хорошую логистику и технологичность использования на месторождениях в северных регионах и Арктике. Высокую эффективность для карбонатных и терригенных коллекторов показали многофункциональные композиции нового типа на основе ПАВ, трех- и многокомпонентных ГЭР, содержащих кислоты Льюиса, полиолы, карбамид, соли аммония и алюминия, фторсодержащие реагенты. Практически важной является высокая эффективность воздействия кислотных композиций на основе ПАВ, неорганической многоосновной кислоты Льюиса, координирующих растворителей и комплексных соединений с тепловыми методами – существенный прирост добычи вязкой нефти, коэффициент вытеснения нефти составил 91-96%. Эффективность композиций и технологий ИХН СО РАН подтверждается успешными опытно-промышленными испытаниями и промышленным использованием технологий на месторождениях Западной Сибири и республик Коми, в том числе в сочетании с тепловыми методами.

Литература

1. Altunina L. K., Kuvshinov V. A., Kuvshinov I. V., Stasyeva L. A. *Petroleum Chemistry*, 2022, **62** (2), 169.
2. Алтунина Л. К., Стасьева Л. А., Кувшинов В. А., Шолитодов М. Р., Козлов В. В., Кувшинов И. В. *Химия в интересах устойчивого развития*, 2023, **31** (2), 140.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-73-01045.

СТАБИЛИЗАЦИЯ БИОНЕФТИ ДЛЯ ЕЕ ПОСЛЕДУЮЩЕЙ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ ПЕРЕРАБОТКИ

Кузнецов П.С., Арапова О.В., Самойлов В.О.

*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева
Российской Академии Наук, 119991, Москва, Ленинский проспект 29
e-mail: pkuznetsov@ips.ac.ru*

Использование бионефти в качестве сырья для производства химических продуктов является актуальной задачей. Однако каталитическая переработка бионефти на установках в чистом виде невозможна из-за протекания при ее нагреве реакций олигомеризации, в результате чего происходит закупоривание систем подачи сырья. Решением данной проблемы может стать проведение дополнительной стадии стабилизации бионефти¹.

В работе проводили частичное гидрирование и защелачивание бионефти, затем оценивали ее термическую стабильность по оригинальной методике, где сырье подавали в разогретый до 530°C реактор насосом до момента его заклинивания (инертная среда). Продукты до и после стабилизации подвергали групповому анализу.

Исследования показали (рис. 1), что оба подхода способны повысить термическую устойчивость бионефти в несколько раз (исходная ~350 с). В случае гидрирования – за счет снижения количества кислорода, содержащегося в соединениях бионефти, склонных к олигомеризации. В случае обработки аммиаком – за счет снижения рН системы до щелочной, где процессы олигомеризации протекают менее интенсивно. Достигнутые результаты позволят провести дальнейшее вовлечение стабилизированной бионефти в промышленные процессы, например каталитический крекинг.

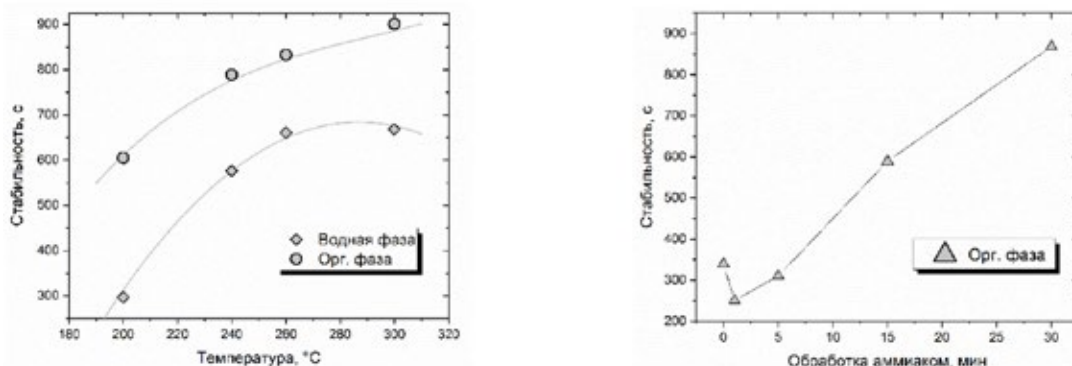


Рисунок 1. Стабильность бионефти после частичного гидрирования 7.5 МПа Н₂, Ni катализатор (слева) и защелачивания аммиаком (справа)

Литература

I. Pinheiro Pires A.P., Arauzo J., Fonts I. Energy & fuels, 2019, **33**, 4683.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ, договор № 075-15-2023-583.

ЦЕОЛИТНЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ГИБРИДНОЙ СТРУКТУРЫ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ РАЗЛИЧНОГО СОСТАВА

Магомедова М.В., Галанова Е.Г., Старожицкая А.В.,
Давыдов И.А., Матевосян Д.В.

*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 29,
e-mail: podlesnaya@ips.ac.ru*

В настоящее время активно развивается направление переработки CO_2 в жидкие углеводороды через метанол и диметилвый эфир. При этом рассматриваются как варианты получения фракции $\text{C}_5\text{-C}_{11}$ с высоким содержанием ароматических соединений, так и получения фракции $\text{C}_8\text{-C}_{14}$, близкой по составу к авиационному топливу. Наиболее известными для проведения реакции являются катализаторы на основе цеолита структуры MFI. Для увеличения выхода жидкого продукта и варьирования его состава активно развивается направление синтеза цеолитов с гибридной структурой, которая сочетает в себе структуры различных цеолитов, например, MFI и MEL, MFI и MTW, MFI и BEA, MFI и AEL, MFI и FER¹⁻⁶. Гибридный материал получают как при сокристаллизации цеолитов различных структур, так и в синтезе структур типа «ядро-оболочка». В ряде работ показано, что такие цеолиты характеризуются дополнительным количеством мезопор, что благоприятно отражается на образовании цикло- и ароматических соединений.

В работе проведен обобщение и анализ результатов экспериментальных исследований получения жидких углеводородов различного состава на цеолитных катализаторах гибридной структуры в реакциях конверсии оксигенатов и низших олефинов. Исследовано влияние кислотных и текстурных характеристик цеолитных гибридных катализаторов на выход жидких углеводородов и их групповой состав. Наблюдаемые закономерности объяснены с точки зрения двухциклового механизма реакции.

Литература

1. M. Conte, B. Xu, T.E. Davies, et al. // *Microporous Mesoporous Mater.*, 2012, **164**, 207
2. Wang X., Meng F., Chen H., et al. // *Comptes Rendus. Chimie*, 2017, **20 (11-12)**, 1083
3. M.S. Aghdam, S. Askari, R. Halladj, A.F. Tajar // *Adv. Powder Technol.*, 2022, **33**, 103502
4. F. Mirshafiee, R. Khoshbin, R. Karimzadeh // *Renewable Energy*, 2022, **197**, 1061
5. X. Wang, S. Guo, Z. Niu. // *RSC Advances*, 2023, **3**, 2081
6. J.J. Kim, D.J. Jeong, H.S. Jung, et al. // *Microporous Mesoporous Mater.*, 2022, **340**, 112034

Работа выполнена за счет средств гранта РНФ №24-13-00242.

ОДНОСТАДИЙНЫЙ СИНТЕЗ ОБОГАЩЕННЫХ ТРИПТАНОМ ЖИДКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ ИЗ CO_2 И H_2

Матиева З.М., Снатенкова Ю.М., Колесниченко Н.В.

*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской Академии Наук,
119991, Москва, Ленинский проспект 29,
e-mail: mzm@ips.ac.ru*

Преобразование CO_2 в ценные органические соединения – один из эффективных способов сократить растущий объем его выбросов. Реакции с участием стабильной молекулы CO_2 оказываются термодинамически разрешенными при использовании в качестве сорреагента восстановителей, например, H_2 . В связи с этим, гидрирование CO_2 в углеводороды (УВ) может стать одной из наиболее важных реакций с учетом того, что H_2 может быть потенциально получен с использованием возобновляемой энергии. Особый интерес представляет получение продукта с высоким содержанием изоалканов, наиболее ценным среди которых является триптан (2,2,3-триметилбутан), благодаря высокому октановому числу (112).

Ранее нами из CO и H_2 в интегрированной установке через стадию синтеза MeOH/DMЭ была получена смесь C_{5+} -УВ с содержанием триптана 2,2 мас. % [1]. В настоящей работе на комбинированных катализаторах $\text{CuZnAl-Al}_2\text{O}_3/\text{Pd-LaHY}$ осуществлен одностадийный синтез C_{5+} -УВ из CO_2 и H_2 в довольно жестких для синтеза триптана условиях (340°C, 10 МПа и $V_{\text{ск}}=20000 \text{ ч}^{-1}$). Изучено влияние способа введения La в состав цеолита, соотношения количества оксидного и цеолитного катализаторов и схемы их размещения в реакторе. Наиболее оптимальной является смесь $\text{CuZnAl-Al}_2\text{O}_3$ и Pd-LaHY в соотношении 3:1. В присутствии катализатора, в состав которого La введен методом ионного обмена при 90°C и 0,1 МПа, с селективностью 30 мас. % (52 мас. % в расчете на общее количество УВ) получен продукт с содержанием триптана 5 мас. %. Введение La в HY методом однократного ионного обмена в автоклаве при повышенных температуре и давлении (185°C и 2 МПа) обеспечивает более равномерное распределение катионов La в объеме кристалла цеолита, что приводит к повышению селективности по бензину до 36 мас.% и содержания изоалканов в нем от 70 до 80 мас.% (в т.ч. триптана до 10 мас. %) с конверсией CO_2 27%.

Литература

Zareta M. Matieva, Natalia V. Kolesnichenko, Yulia M. Snatenkova, Anton L. Maksimov. Conversion of syngas to triptane-rich liquid hydrocarbons via oxygenates. *Fuel*. 2021. 304 (11):121407.

Работа выполнена в рамках Госзадания ИИХС РАН.

СОЗДАНИЕ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ МЕМБРАННЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ РЕАКТОРОВ ПАРОВОГО РИФОРМИНГА

**Петриев И.С.^{а,б}, Пушанкина П.Д.^а, Андреев Г.А.^а, Иванин С.Н.^а, Папезжук М.В.^а,
Симонов А.И.^а, Прохоров Н.А.^а**

^аКубанский государственный университет, 350040, Краснодар, ул. Ставропольская, 149

^бЮжный научный центр РАН, 344006, Ростов-на-Дону, пр. Чехова, 41

e-mail: petriev_iliya@mail.ru

Мембраны на основе палладия применяют для сепарации газов и получения высокочистого водорода¹. Легирование таких мембран другими неблагородными металлами позволит повысить их прочность в атмосфере водорода и снизить стоимость конечного продукта.

В ходе работы были получены образцы фольг сплава Pd-Cu_{40%}, изготовленные тремя методами: плавки и проката с промежуточными отжигами (а), магнетронного распыления с применением сплошной мишени (б) и составной мишени (с). Образцы полученных Pd-Cu_{40%} пленок исследовались в качестве мембран в процессах транспорта водорода.

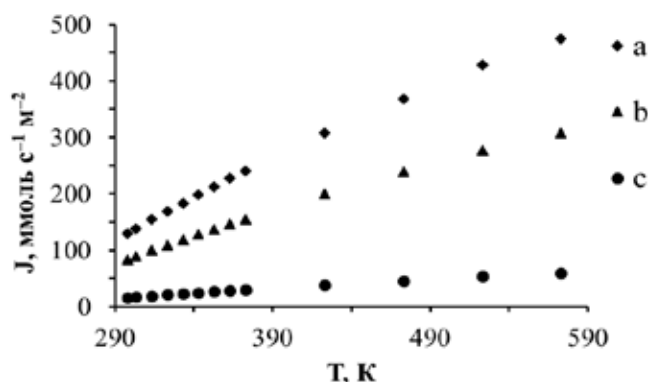


Рисунок 1. Температурная зависимость плотности проникающего потока водорода при избыточном давлении 0,1 МПа на входной стороне мембран сплава Pd-Cu_{40%}.

Зафиксировано значительное увеличение плотности потока мембран, полученных методом магнетронного распыления. Это, вероятно, обусловлено уменьшением толщины пленки и упорядочением твердого раствора с образованием β -фазы с менее плотной кристаллической решеткой. Такой метод позволяет получать бездефектные тонкопленочные материалы с высокой проницаемостью и низкой стоимостью.

Литература

1. Filippov S.P., Yaroslavtsev A.B. *Russian Chemical Reviews*, 2021, **90**, 627.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда и при финансовой поддержке Кубанского научного фонда в рамках проекта № 24-19-20070.

ТРАНСФОРМАЦИЯ НЕФТЯНОЙ ДИСПЕРСНОЙ СИСТЕМЫ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ КАВИТАЦИИ

Пешнев Б.В., Никишин Д.В., Николаев А.И.

*Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова
РТУ МИРЭА, 119435, Москва, улица Малая Пироговская, д.1, стр.5,
e-mail: peshnev@mirea.ru*

Представлены результаты исследования кавитационной обработки тёмных нефтепродуктов на изменение их физико-химических характеристик. Обработку проводили в гидродинамическом режиме, варьируя градиент давлений от 20 до 50 МПа и количество актов воздействия от 1 до 5. В качестве объектов исследования использовались образцы прямогонных и товарных мазутов, газойли каталитического крекинга и прямогонные, гидроочищенные газойли.

Показано, что кавитационная обработка приводит к увеличению выхода фракций, выкипающих до 400 °С, снижению плотности этих фракций и коэффициента рефракции. При этом изменения возрастают с увеличением давления и количества циклов обработки. Отмечена корреляция между групповым углеводородным составом сырья и увеличением выхода фракций, выкипающих до 400 °С. Чем выше была концентрация смол в сырье, тем больше было увеличение выхода, при этом содержание в образце смол и асфальтенов снижалось, а в масляной фракции увеличивалась доля аренов.

Локализация пузырьков кавитации возможна на границах раздела фаз¹. Для нефтяных дисперсных систем это граница контакта сложных структурных единиц, сформированных смолами и асфальтенами и дисперсной среды углеводородов меньшей молекулярной массы. Поэтому именно смолы и асфальтены в большей степени должны подвергаться деструкции под воздействием тепла, выделяющегося при схлопывании кавитационных пузырьков. Методами рентгенографии и рамановской спектроскопии зафиксировано изменение структурных параметров асфальтенов: увеличение диаметра слоя, снижение высоты пачки ароматических слоев, возрастание степени их ароматичности. Данные о деструкции асфальтенов под воздействием кавитации согласуются с результатами элементного анализа образцов. После их кавитационной обработки, во фракциях с температурами кипения выше 480 °С содержание серы снижалось, но при этом возрастала её концентрация во фракциях с меньшими температурами кипения.

Литература

1. Витенько Т.Н., Гумницкий Я.М. Химия и технология воды, 2007, 5, 422

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП РТУ МИРЭА при поддержке Минобрнауки России в рамках Соглашения № 075-15-2021-689 от 01.09.2021 г.

РЕОЛОГИЯ ПРОМЫСЛОВЫХ ВОДОНЕФТЯНЫХ ЭМУЛЬСИЙ: ОСОБЕННОСТИ ТЕЧЕНИЯ/ПОВЕДЕНИЯ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ СОСТАВА И ТЕМПЕРАТУРЫ

Романова Ю.Н., Мусина Н.С., Марютина Т.А.

*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского Российской Академии Наук,
119991, Москва, улица Косыгина, 19
e-mail: romanova-u@mail.ru*

Добываемая в виде эмульсии нефть, представляет собой нефтяную дисперсную систему с дисперсной фазой двух типов – водной и твердой (из-за присутствия в нефти асфальтенов и парафинов, а также различных механических примесей). Большое разнообразие нефтей и образующихся из них эмульсий существенно усложняет выявление взаимосвязи факторов, влияющих на их стабильность и реологические свойства.

Стационарное исследование с использованием сдвиговых реологических измерений показало, что характер течения промышленных эмульсий варьируется от ньютоновской до неньютоновской жидкостей в зависимости от содержания воды, состава (количество природных эмульгаторов, «геля» и твердых частиц) и температуры образцов.

Таблица 1. Реологические типы промышленных водонефтяных эмульсий при аппроксимации кривых течения моделями Ньютона, Оствальда-Вейля и Бингама (n – константа, характеризующая степень отклонения свойств неньютоновских жидкостей от свойств ньютоновских жидкостей; τ_y – предел текучести, Па)

Образцы	Кол-во воды/«геля», мас. %	Температура, °С			
		10	20	30	60
Эмульсия 1	9,7 / 0	Ньютон	Ньютон	Ньютон	-
Эмульсия 2	15,0 / 0	Оствальд-Вейль, $n=0,79$	Ньютон	Ньютон	-
Эмульсия 3	37,5 / 0	Оствальд-Вейль, $n=0,76$	Оствальд-Вейль, $n=0,79$	Оствальд-Вейль, $n=0,91$	-
Эмульсия 4	62,0 / 8,0	-	Бингам $\tau_y=3,4$	-	Бингам $\tau_y=3,0$
Эмульсия 5	53,0 / 25,0	-	Бингам $\tau_y=16,7$	-	Бингам $\tau_y=23,7$

Полученные данные о реологическом поведении эмульсий могут быть использованы для понимания стабильности в процессах транспортировки, хранения и переработки, а также для прогнозирования процесса деэмульгирования таких эмульсий.

Работа выполнена в рамках государственного задания ГЕОХИ РАН.

НОВАЯ НЕФТЕВЫТЕСНЯЮЩАЯ КОМПОЗИЦИЯ ДЛЯ ДОБЫЧИ НЕФТИ НА ПРИНЦИПЕ ЗЕЛЕННОЙ ХИМИИ С ПРИМЕНЕНИЕМ ГЛУБОКИХ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ И ПАВ

Шолидодов М.Р.,^а Алтунина Л.К.,^а Козлов В.В.,^а Сайденцаль А.Р.^а

*^аИнститут химии нефти Сибирского отделения Российской Академии Наук,
634055, Томск, Академический проспект 4,
e-mail: sholidodov93@inbox.ru*

В современной химии и химической технологии наблюдается тенденция к использованию принципов «зеленой химии», которые позволяют получать новые материалы и продукты в более мягких и экологически безопасных условиях. Одним из таких подходов к созданию новых продуктов является использование глубоких эвтектических растворителей (ГЭР)¹.

В Институте химии нефти СО РАН с применением трехкомпонентной системы ГЭР и ПАВ разработана новая нефтевытесняющая композиция комплексного действия для месторождений высоковязких нефтей северных регионов и Арктической зоны². Композиция сочетает в себе свойства нефтевытесняющей и кислотной, способной взаимодействовать с породой коллектора и пластовыми флюидами. Замедленная реакция кислотных компонентов с породой коллектора обуславливает ее пролонгированное действие. Регулируемая вязкость разработанной композиции позволяет влиять на фильтрационные потоки внутри пласта, приводя к увеличению охвата пласта, выравниванию профиля приемистости и притока жидкости скважин. Кроме того, кислотная композиция способна эволюционировать под действием пластовых условий с образованием щелочной буферной системы высокой емкостью, приводящей к формированию условий, оптимальных для работы ПАВ в области значений водородного показателя 9-10 ед. рН.

Проведенные комплексные лабораторные исследования разработанной композиции показали высокую способность к восстановлению проницаемости породы коллектора, выравниванию фильтрационных потоков и дополнительному вытеснению из обводненных моделей пласта 15,3 до 50,1 % нефти.

Литература

1. A.P. Abbott, G. Capper, D.L. Davies, R.K. Rasheed, V. Tambyrajah. *Chem. Commun*, 2003, 70–71.

2. Л. К. Алтунина, Л. А. Стасьева, В. А. Кувшинов, М. Р. Шолидодов, В. В. Козлов, И. В. Кувшинов. *Химия в интересах устойчивого развития*, 2023, 31, 140–152.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-73-01045.

ПРЕДУПРЕЖДЕНИЕ ОСЛОЖНЕНИЙ ПРИ ДОБЫЧЕ НЕФТИ И ГАЗА И ХРАНЕНИЕ ЭНЕРГИИ: КАК УПРАВЛЯТЬ ПРОЦЕССОМ ОБРАЗОВАНИЯ ГАЗОВЫХ ГИДРАТОВ?

Стопорев А.С.,^а Семенов А.П.,^а Сергеева Д.В.,^а Воронин Д.В.^а

^а РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина,
119991, Москва, Ленинский проспект, 65 к. 1
e-mail: stopor89@bk.ru

^б Сколковский институт науки и технологий, Сколтех,
121205, Москва, Большой бульвар, 30 стр. 1

Газовые гидраты являются соединениями включения и состоят из каркаса, выстроенного из молекул воды, и одного или несколько типов гостевых молекул (обычно низкомолекулярных газов). Высокое давление и низкая температура ограничивают зону термодинамической стабильности этих соединений. Хотя газовые гидраты обычно считаются серьезным осложнением в добыче нефти и газа, их все чаще предлагают использовать для решения различных технологических задач, таких как утилизация попутного нефтяного и углекислого газов, хранение и транспортировка газа, разделение газовых смесей, опреснение воды и даже хранение холода.¹

Одной из актуальных задач является поиск более эффективных реагентов для управления процессом гидратообразования. По механизму действия такие реагенты можно разделить на два класса: термодинамические и кинетические. Первые изменяют активность воды в растворе или внедряются в полости гидратного каркаса, смещая равновесные условия гидратообразования (например, спирты, солевые растворы, тетрагидрофуран и др.). Второй тип реагентов не влияет на равновесие, но замедляет (ингибиторы) или ускоряет (промоторы) их зарождение и рост.

В данной работе изучено влияние спектра реагентов на равновесные условия образования гидратов (метанол, диметилсульфоксид, мочеви́на, ацетонитрил, этиленкарбонат и диэтиламин), а также их нуклеацию и рост (димерные ПАВ и экстракты гуминовых кислот). В последнем случае варьировали смачиваемость стенок ячейки и pH среды. Полученные данные показали, что правильный подбор модификаторов газовых гидратов позволяет варьировать условия их получения в зависимости от задачи, что может стать путем к ресурсосберегающему хранению энергии.

Литература

1. Манаков А.Ю., Стопорев А.С. Успехи химии, 2021, **90**, 566.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания № FSZE-2022-0001.

КОМПЕТЕНЦИИ ООО «ЕОР-СОФТ» В ХИМИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЯХ ПОВЫШЕНИЯ НЕФТЕОТДАЧИ ПЛАСТОВ

Фахретдинов Р. Н., Якушин В. Б.

ООО «ЕОР-Софт», 119607, Москва, Мичуринский проспект, д.29, кВ.72, frival46@mail.ru

Научно-производственное предприятие, ООО «ЕОР-Софт», длительное время осуществляет свою деятельность в сфере информационных технологий нефтегазовой отрасли РФ.

Разработанное прикладное программное обеспечение используется в процессе разработки и эксплуатации нефтяных месторождений, рекомендовано для использования в нефтяных компаниях «Газпромнефть», «ЛУКОЙЛ» и включены в стандарты этих компаний, а также было внедрено в НК «РОСНЕФТЬ», «Татнефть», «Славнефть», «Казмунайгаз», различных НИИ нефти и газа и в сервисных компаниях нефтегазовой отрасли.

Использование аппроксимационных моделей и нейронных сетей в программном комплексе EOR Effect+ позволяет сотрудникам нефтяных компаний ежемесячно более двадцати лет выполнять:

- анализ технологической и экономической эффективности от проведенных и планируемых геолого-технологических физико-химических, гидродинамических и термотропных мероприятий на нефтедобывающих скважинах по утвержденным методикам,
- прогноз добычи нефти,
- определять остаточные извлекаемые запасы нефти,
- выбор оптимального состава химических реагентов и технологии для проведения планируемого геолого-технологического мероприятия на скважине нефтяного месторождения
- анализ и планирование разработки нефтяных месторождений на основе комплексного Блочно-факторного анализа, оценки потенциала скважин, анализа приростов и потерь нефти и анализа управления заводнением.



РАЗРАБОТКА И РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМА ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ И ОЦЕНКИ ЭФФЕКТИВНОСТИ РАСТВОРИТЕЛЯ АСПО

Бабинцева М.В., Занозин И.Ю., Нечаева С.А., Репина А.С., Занозина И.И.

*Средневолжский научно-исследовательский институт по нефтепереработке,
446200, Новокуйбышевск, ул. Научная, 1
e-mail: babintsevamv@sni.rosneft.ru*

На сегодняшний день проблема образования асфальтосмоло-парафиновых отложений (АСПО) особо актуальна для большинства нефтяных месторождений, находящихся на поздней стадии разработки. Поэтому важным является подбор эффективного и безопасного углеводородного растворителя для удаления отложений с внутрискважинного оборудования в процессе добычи нефти. Причем для каждого АСПО подбирается индивидуальный растворитель в зависимости от состава отложения. Данный процесс длителен и сложен.

В ходе проведения исследований скважинных АСПО с различных месторождений Башкирии авторами был разработан оптимальный алгоритм.

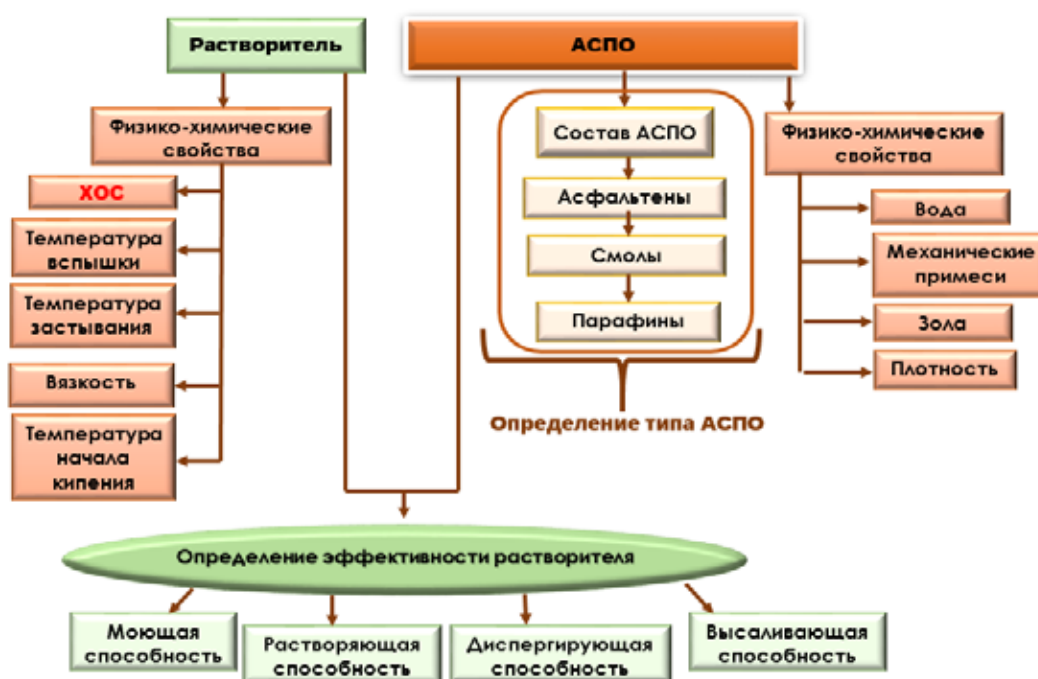


Рисунок 1. Алгоритм определения эффективности растворителя

В результате реализации алгоритма получена исчерпывающая информация о составе АСПО, выполнена комплексная оценка эффективности растворителей, выданы рекомендации к проведению опытно-промышленных испытаний на реальных месторождениях.

КОМБИНИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ГИДРОБЛАГОРАЖИВАНИЯ КАК СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ МОТОРНЫХ ТОПЛИВ ИЗ ВОЗОБНОВЛЯЕМОГО УГЛЕВОДОРОДНОГО СЫРЬЯ

Богданов И.А., Алтынов А.А., Соснина Д.В.

*Томский политехнический университет, 634050, Томск, пр. Ленина 30,
e-mail: bogdanov_ilya@tpu.ru*

В работе оценена целесообразность получения экологически чистых компонентов моторных топлив из возобновляемого углеводородного сырья (растительных масел) при последовательной каталитической гидропереработке на двух типах катализатора: катализаторе гидроочистки и цеолитном (структурного типа ZSM-5). Процесс осуществлялся на лабораторной проточной каталитической установке при следующих технологических параметрах: температура 375 °С, давление 70 бар, расход сырья 1 ч⁻¹, расход водорода 0,0021 м³/час.

Для полученного продукта были определены основные физико-химические характеристики, и углеводородный состав.

Таблица 1. Свойства полученных продуктов

Свойства	Ед. изм.	Продукт из рапсового масла	Продукт из кукурузного масла	Продукт из подсолнечного масла
Плотность при 15°С	г/см ³	0,794	0,779	0,776
Вязкость динамическая при 15°С	мПа/с	1,248	0,797	0,757
Содержание н-алканов	% масс.	3,47	7,58	5,95
Содержание изо-алканов		3,14	17,63	18,75
Содержание циклоалканов		1,81	6,86	6,37
Содержание ароматических углеводородов		68,31	48,26	48,58

В результате исследования также было установлено, что полученные продукты характеризуется широким фракционным составом (средняя температура выкипания 10 % об. составила 61 °С, 50 % об. составила 154 °С, 90 % об. составила 322 °С), что позволяет выделить из них бензиновую и дизельную топливные фракции.

Для выделенных фракций также были определены основные характеристики и состав, показана возможность применения полученных фракций в производстве моторных топлив.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 23-23-00101, <https://rscf.ru/project/23-23-00101/>.

КРИТЕРИИ СКЛОННОСТИ УГЛЕЙ К САМОВОЗГОРАНИЮ, УСТАНОВЛЕННЫЕ В ЗОНЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ

Малинникова О.Н., Докучаева А.И.

*Институт проблем комплексного освоения недр им. академика Н.В. Мельникова Российской академии наук,
111020, Москва, Крюковский тупик, д.4,
e-mail: ana-anastasia2015@yandex.ru*

Выявление склонных к самовозгоранию углей позволяет заранее принимать меры, предупреждающие возникновение возгорания¹. Одним из методов изучения процессов и параметров, способных характеризовать склонные к самовозгоранию угли, является метод ТГА².

В работе представлена апробация на углях Кузнецкого каменноугольного бассейна критериев самовозгораемости³, полученных для каменных углей Печорского месторождения. На рис.1 представлены скорости изменения массы исследуемых углей при термическом разложении в низкотемпературной области: №№ 1-2 – пл. Четвертый (ш. Комсомольская), №№ 3-4 – пл. Мощный (ш. Воргашорская), № 5-6 – пл. 69 (ш. Талдинская-Западная), № 7-8 – пл. Полысаевский-II (ш. А.Д. Рубана).

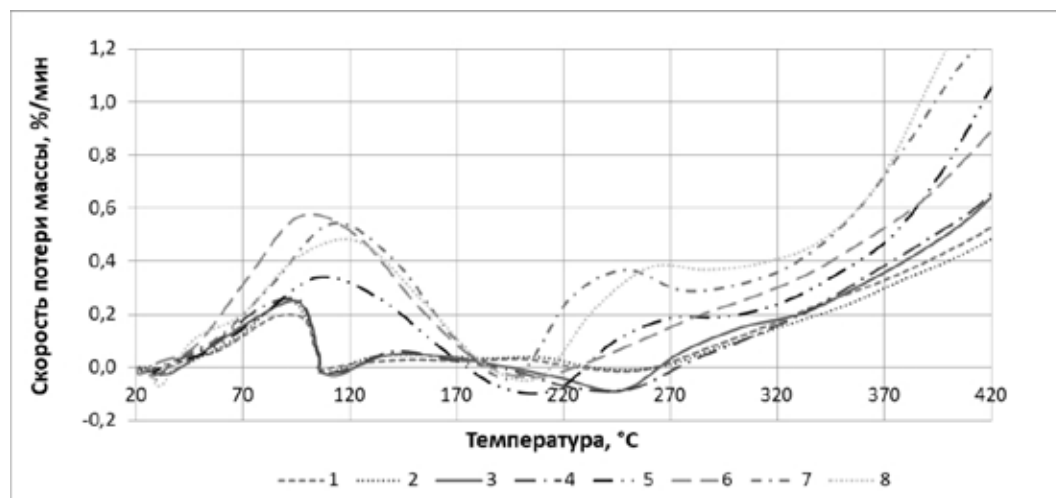


Рисунок 1. ДТГ-кривые не склонных (№№ 1-2) и склонных (№№ 3-8) к самовозгоранию углей

Получено, что скорость и величину термического эффекта окисления углей можно косвенно определить по ТГ-зависимостям.

Литература

1. Веселовский В. С. Физические основы самовозгорания угля и руд. – М.: Наука, 1972. – 148 с.
2. Zhang Y., Li Y., Huang Y., Li S., Wang W. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 2018, **131**, 2963.
3. Захаров В.Н., Докучаева А.И., Малинникова О.Н. ГИАБ, 2023, **6**, 5.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕЗОПОРИСТЫХ ПОЛИМЕРНЫХ СОРБЕНТОВ НА ОСНОВЕ ДИВИНИЛБЕНЗОЛА И 4-ВИНИЛБЕЗИЛХЛОРИДА ДЛЯ РАЗДЕЛЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ

Зарубин Д.М., Абарбанель Н.В., Марков А.Н., Петухов А.Н., Воротынцев А.В.

*Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
603022, Нижний Новгород, проспект Гагарина 23,
e-mail: dimazarubin493@gmail.com*

Физические и химические свойства низших алканов определяют их широкое применение во многих отраслях промышленности. Эти алканы входят в состав природного, сланцевого и попутного нефтяного газов и являются ценным сырьем. Однако процесс их разделения требует больших энергозатрат, т.к. осуществляется низкотемпературной перегонкой. Энергоэффективной альтернативой для разделения углеводородов выступают адсорбционные методы очистки¹. В этом плане интерес представляют пористые полимерные сорбенты, возможность управления структурой которых позволяет получить набор сорбентов со свойствами, отвечающими различным задачам разделения².

Полимерные микросферы были синтезированы методом суспензионной радикальной полимеризации на основе мономеров дивинилбензола и 4-винилбензилхлорида.

Определение удельной поверхности и распределение пор по размерам определяли по изотермам сорбции/десорбции азота на приборе Sorbi MS META (Россия). Установлено, что удельная поверхность полимерных микросфер составляет 83.9 м²/г, диаметр пор 3.96 нм.

Термодинамические характеристики: удельный удерживаемый объем (V_g), константы адсорбционно равновесия (K) и селективность (α) были получены методом обращенной газовой хроматографии (ОГХ) на приборе Хромос ГХ-1000 в температурном диапазоне от 303.15 до 333.15 К.

Были определены параметры разделения углеводородов на основании полученных данных с помощью теории идеального адсорбированного раствора.

Литература

1. Sholl D.S., Lively R.P. Nature, 2016, **532**, 435-437.
2. Сакодынский К.И., Панина Л.И. М.:Наука, 1977, 168

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 22-79-10222.

ПОЛУЧЕНИЕ БАЗОВЫХ ПОЛИАЛЬФАОЛЕФИНОВЫХ МАСЕЛ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОЛЕФИНОВ, ПОЛУЧЕННЫХ СИНТЕЗОМ ФИШЕРА-ТРОПША ПУТЕМ ОКИСЛИТЕЛЬНОЙ ОЛИГОМЕРИЗАЦИИ

Зубков И.Н., Катария Я.В., Пономарев Д.В., Яковенко Р.Е.

*Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова,
346428, Новочеркасск, ул. Просвещения 132,
e-mail: 71650021.qwe@mail.ru*

В связи с ростом мирового спроса на полиальфаолефиновые (ПАО) масла, которые получают путем олигомеризации α -олефинов C_{10} - C_{12} , активно проводятся исследования по расширению базы исходных материалов, а именно мономеров, для их производства. В последнее время синтез Фишера-Тропша рассматривается в качестве альтернативного метода получения ненасыщенных углеводородов с различной длиной цепи. Однако непредельные углеводороды, полученные синтезом Фишера-Тропша, представляют собой смесь углеводородов, содержащую наряду с α -олефинами β - и γ -олефины, которые в значительных количествах образуются в процессе синтеза, что затрудняет применение используемых в промышленности катализаторов полимеризации.

В настоящей работе будут представлены результаты исследования олигомеризации синтетической дизельной фракции, обогащенной непредельными углеводородами, синтезированной на бифункциональном кобальтовом катализаторе [1] методом окислительной олигомеризации с использованием в качестве катализатора октаноата циркония. Для понимания влияния структуры олефина (изменение положения двойной связи, наличие боковых ответвлений) на свойства конечного продукта была проведена серия экспериментов в аналогичных условиях с использованием в качестве исходного сырья децена-1. Установлено, что наличие разветвленной углеводородной цепи в исходном сырье при увеличивающейся вязкости (соответственно молекулярной массе продукта олигомеризации) снижает температуру застывания продуктов. Продукт олигомеризации синтетической дизельной фракции по своим свойствам (кинематическая вязкость и температура застывания) аналогичен коммерчески доступным ПАО.

Литература

1. Yakovenko R.E., Narochnyi G.B., Zubkov I.N., Bozhenko E.A., Kataria Y.V., Svetogorov R.D., Savost'yanov A.P. *Catalysts*, 2023, **13**(9), 1314.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 23-23-00466 с использованием оборудования ЦКП «Нанотехнологии» ЮРГПУ (НПИ) им. М.И. Платова.

ЭКСТРАКЦИОННОЕ ОБЕССЕРИВАНИЕ ЛЕГКОГО ВАКУУМНОГО ГАЗОЙЛЯ ГЛУБОКИМИ ЭВТЕКТИЧЕСКИМИ РАСТВОРИТЕЛЯМИ В МИНИКАНАЛЕ

Катасонова О.Н., Шнайдер М.Э., Яковлев Д.А., Марютина Т.А.

*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского Российской академии наук,
119991, Москва, ул. Косыгина 19,
e-mail: katasonova_ol@mai.ru*

В состав нефти и нефтепродуктов входят соединения серы различной природы, контроль содержания которых важен для решения ряда технологических, аналитических и исследовательских задач. Соединения серы оказывают негативное влияние на экологию, эксплуатационные, транспортные свойства нефтяного сырья, их стоимость. Для выделения соединений серы из нефтепродуктов применяются различные методы. В настоящее время одним из новых направлений решения вышеуказанной задачи является экстракционное обессеривание в микро- и минирекаторах с использованием нового класса экстрагентов – глубоких эвтектических растворителей. Миниканалы являются простыми проточными устройствами, позволяющими интенсифицировать процесс экстракции благодаря увеличению соотношения площади к объему фаз, сокращению пути диффузии молекул и времени контакта фаз. Глубокие эвтектические растворители в отличие от классических органических растворителей признаны безопасным, экологичным, биоразлагаемым классом реагентов.

В настоящей работе обессеривание вакуумного газойля проводили в миниканалах с использованием глубоких эвтектических растворителей на основе солей четвертичных аммониевых оснований и карбоновых кислот. В ходе исследования было выявлено влияние конструкционных и рабочих параметров миниканалов (диаметра, длины, материала капилляра, скорости потока, объемного соотношения подачи фаз) на эффективность извлечения соединений серы из нефтепродукта, для каждого случая были построены карты режимов потока. Показано, что наиболее эффективной моделью потока в миниканале является снарядный (поток Тейлора), при котором степень извлечения соединений серы из вакуумного газойля с помощью глубоких эвтектических растворителей достигает 36% за 50 секунд, время контакта фаз необходимое для установления экстракционного равновесия при проведении процесса в традиционном режиме (шейкер, магнитная мешалка) составляет 30 минут. Проведение многостадийной экстракции в миниканале позволило извлечь до 70% ароматических соединений серы из вакуумного газойля в течение нескольких минут.

Работа выполнена в рамках государственного задания ГЕОХИ РАН.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДОБАВОК ДЛЯ УЛУЧШЕНИЯ СВОЙСТВ БУРОВЫХ РАСТВОРОВ НА ВОДНОЙ ОСНОВЕ

Коробкин А.В.^а, Петрова Ю.Ю.^а, Магадова Л.А.^{а,б}

^аСургутский государственный университет, 628412, Сургут, пр. Ленина, д. 1, korobkin_av@surgu.ru

^бРоссийский государственный университет нефти и газа НИУ имени И.М. Губкина, 119991, г. Москва, проспект Ленинский, дом 65, корпус 1

Нефтегазодобывающие компании все чаще сталкиваются с необходимостью осваивать новые месторождения, которые характеризуются малой проницаемостью пород и сложными условиями бурения. Ввиду этого всё больше требований предъявляют к буровым растворам (БР) с целью решения актуальных задач в нефтегазовой отрасли, в т.ч. увеличение нефтеизвлечения.

При бурении скважин могут возникать аварийные ситуации, связанные с коррозией оборудования, набуханием ствола скважин, перегревом оборудования, стачиванием бурильного долота и т.д. Для предупреждения подобных аварий, в буровые растворы вносят различные добавки.

Многие компании используют буровые растворы на водной основе ввиду их меньшего влияния на окружающую среду и стабильности при воздействии больших температур. Для улучшения реологических и фильтрационных свойств в БР вносят добавки¹. Такими добавками могут выступать поверхностно-активные вещества (ПАВ), наночастицы, полимеры или другие вещества.

Влияние ПАВ заключается в их адсорбции на поверхности стенок скважины, долоте и всех остальных поверхностях. Тем самым, замедляя коррозию оборудования, набухание стенок скважин и уменьшая коэффициент трения долота об поверхность.

Полимеры используют для увеличения вязкости БР. Полимеры довольно хорошо растворяются в воде, а их использование также приводит к уменьшению потери жидкости.

Наночастицы используют для сохранения проницаемости пластов и повышения продуктивности скважин. Помогают в решении ряда острых проблем: борьба с прилипанием труб к стенкам скважины, борьба с коррозией, снижение потерь бурового раствора и т.д.

Литература

1. Emmanuel Udofia Akpan. Water-based drilling fluids for high-temperature applications and watersensitive and dispersible shale formations / Emmanuel Udofia Akpan, Godpower C. Enyi, Ghasem Nasr, [et al] // Journal of Petroleum Science and Engineering. – 2019. – №175. – С. 1028-1038.

ТРОПИКОСТОЙКОСТЬ УРЕАТНЫХ ПЛАСТИЧНЫХ СМАЗОК

Кочубеев А.А.,^а Костина Ю.В.,^а Во Куен,^б Лядов А.С.^а

^аИнститут нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук,
119991, Москва, Ленинский проспект, 29

^бСовместный Российско-Вьетнамский Тропический научно-исследовательский и технологический центр, Социалистическая Республика Вьетнам, г. Ханой
e-mail: a.kochubeev@ips.ac.ru@ips.ac.ru

Комплексное воздействие факторов окружающей среды, таких как температура, влажность, УФ-излучение и др. может приводить к ухудшению физико-химических свойств смазочных материалов в процессе хранения и эксплуатации. В рамках проведения совместных исследований ИНХС РАН и Российско-вьетнамского тропического центра впервые были изучены особенности изменения свойств (температура каплепадения, коллоидная стабильность, предел прочности, противоизносные свойства) уреатных пластичных смазок различного назначения при длительном натурном экспонировании в течение 6, 14, 19, 24 и 30 месяцев. Показано, что уреатные смазки обладают значительным потенциалом тропикостойкости, который обусловлен природой органического загустителя, представляющий собой устойчивый структурный каркас, состоящий из молекул димочевин, удерживающий компоненты базового масла за счет прочных водородных связей, также и за счет того, что уреатный загуститель обладает антиокислительными и биоцидными свойствами, что подтверждается отсутствием признаков биологической коррозии. Установлено, что термическое воздействие в сочетании с УФ-излучением являются причинами деструкции смазок за счет постепенного изменения коллоидной стабильности в процессе потери части базового масла. Методом ИК-спектроскопии изучены химические изменения, происходящие с уреатными пластичными смазками при экспонировании.



Рисунок. Изменение внешнего вида уреатной пластичной смазки при экспонировании в условиях тропического климата

Работа выполнена в рамках государственного задания Института нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН.

ОПТИМИЗАЦИЯ УСЛОВИЙ И СОСТАВА СЫРЬЯ КАТАЛИТИЧЕСКОГО КРЕКИНА ПРИ ВОВЛЕЧЕНИИ В ПЕРЕРАБОТКУ РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ

Мальцев В.В., Назарова Г.Ю., Ивашкина Е.Н.

*Томский политехнический университет,
634050, г. Томск, Россия, проспект Ленина 43а,
e-mail: vvm63@tpu.ru*

Одним из перспективных направлений исследования сегодня является вовлечение возобновляемого сырья в процессы переработки нефтяных фракций, включая процесс каталитического крекинга, а также оптимизация условий ведения процесса [1].

Работа направлена на оптимизацию состава композиционного сырья процесса каталитического крекинга, содержащего до 50 % мас. растительного сырья (рапсовое, талловое и рыжиковое масло) и условий его переработки на лабораторной установке МАК-10 (ASTM D 3907) с анализом отработанного катализатора и фракционного состава жидких продуктов каталитической конверсии (ASTM D 2887). Результаты исследования (таблица 1) показали, что фракционный состав продуктов каталитической конверсии существенно различается для разных катализаторов.

Таблица 1. Экспериментальное исследование процесса каталитического крекинга при вовлечении в качестве сырья смеси вакуумного газойля (ВГ) и рапсового масла (РМ)

Сырье	Катализатор 1				Катализатор 2	
	ВГ	ВГ + РМ 10%(мас.)			ВГ	
Температура процесса, °С	502	482	492	502	502	502
Объем газов, мл	74,9	99,9	111	117	184,9	174,9
Выход жидких продуктов, % мас.	89,09	82,52	78,5	78,73	63,55	78,14
Конверсия, % мас.	15,11	23,71	27,05	30	78,44	71,66

Вовлечение 10% рапсового масла в переработку вакуумного газойля повышает конверсию сырья при температуре 502°С на 14,89 и 6,78% мас. для двух различных катализаторов соответственно (условия термодаровой обработки 788°С в среде 100% водяного пара), что связано с интенсификацией реакций каталитического крекинга за счёт термической деструкции жирных кислот, при этом по результатам ТГ-ДСК возрастает содержание кокса на поверхности катализатора.

Литература:

Доронин В.П., Липин П.В., Потапенко О.В., Журавлев Я.Е., Сорокина Т.П. Совместное превращение растительных масел с вакуумными газойлями в условиях каталитического крекинга // Химия в интересах устойчивого развития. – 2017. - №25. – С. – 385-392.

Исследование выполнено в рамках проекта Национального исследовательского Томского политехнического университета «Передовые инженерные школы», соглашение Минобрнауки России № 075-15-2022-1146 от 07.07.2022 (ПИШ-НИР-2024-009, Номер Госрегистрации (ЕГИСУ НИОКТР ЦИТиС): 123071800022-2).

ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫЕ ПОРИСТЫЕ АРОМАТИЧЕСКИЕ ПОЛИМЕРЫ – НОСИТЕЛИ КАТАЛИЗАТОРОВ ГИДРИРОВАНИЯ ЛЕВУЛИНОВОЙ КИСЛОТЫ

**Матвеева В.Г.,^а Никошвили Л.Ж.,^а Манаенков О.В.,^а
Бахвалова Е.С.,^а Быков А.В.,^а Лисичкин Д.Р.,^а Григорьев М.Е.,^а
Сараев А.А.,^б Герасимов Е.Ю.,^б Каичев В.В.^б**

*^аТверской государственной технической университет,
170026, Тверь, наб. А. Никитина 22,
e-mail: matveeva@science.tver.ru*

*^бИнститут катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской Академии Наук,
630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева 5*

Левулиновая кислота (ЛК), получаемая переработкой растительной биомассы, используется для синтеза множества важных соединений, таких как гамма-валеролактон (ГВЛ), метилтетрагидрофуран и сложные эфиры ЛК. ГВЛ синтезируют путем селективного каталитического гидрирования ЛК. В настоящее время бифункциональные гетерогенные катализаторы на основе неорганических носителей, содержащих кислотные центры Льюиса и Бренстеда, являются наиболее распространенными катализаторами гидрирования ЛК. В качестве альтернативы неорганическим носителям могут служить полимеры.

В рамках данной работы была синтезирована аморфная ароматическая полимерная сетка с использованием фенантрена в качестве мономера. Полученный полимер обладал высокой удельной площадью поверхности (660 м²/г) с преобладающей микропористостью. Более того, полимер на основе фенантрена был сульфирован. Как исходный, так и сульфированный полимеры использовались как носители для создания катализаторов, содержащих одиночные атомы Ru, а также небольшие субнанометровые кластеры рутения, состоящие как из металлического Ru, так и из смешанной фазы оксида рутения. Синтезированные полимерные катализаторы были протестированы в реакции гидрирования ЛК до ГВЛ в водной среде при варьировании парциального давления водорода (1-4 МПа) и температуры (80-140°C). Было обнаружено, что присутствие сульфогрупп позволяет обеспечить более высокую каталитическую активность. Кроме того, было показано, что после второго использования состав катализатора и морфология, ответственные за наблюдаемую каталитическую активность, стабилизируются.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-79-00009.

ОЦЕНКА ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА КЛУБНЕЙ АНТОЦИАНСОДЕРЖАЩИХ СОРТОВ КАРТОФЕЛЯ В ЦРНЗ РФ

Павлов М.Н.,^а Хомякова К.Н.,^{а,б} Никольский В.М.,^б Смирнова Т.И.^а

^а Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверская государственная сельскохозяйственная академия»,
170904, Тверская область, г. Тверь, ул. Маршала Василевского (Сахарово), 7
e-mail: тахп1рав@gmail.com

^б Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет», 170100, г. Тверь, ул. Желябова, 33

В настоящее время представляют интерес для потребителя сорта картофеля с темноокрашенной мякотью, поскольку они содержат антоцианы, являющиеся в организме человека сильными антиоксидантами¹. В связи с этим, вопросы химического состава клубней таких сортов картофеля требуют изучения. В 2023 году проведена оценка химического состава клубней трех сортов картофеля с различной окраской мякоти, отобранных при учете урожая на опытном поле Тверской ГСХА на дерново-среднеподзолистой почве. Содержание азота определяли по методу Кьельдаля, фосфора – по методу Кирсанова. Результаты исследований представлены в таблице 1.

Таблица 1. Урожайность и химический состав клубней сортов картофеля

Сорт	Окраска мякоти	Содержание сухого вещества, %	Содержание сырой золы, %	Содержание азота (по Кьельдалю), %	Содержание фосфора (по Кирсанову), %
Гала	желтая	15,9	0,97	0,27	0,049
Сюрприз	красно-пестрая	21,8	1,29	0,30	0,052
Северное сияние	сине-пестрая	24,1	1,11	0,29	0,039

В результате выявлено, что антоциансодержащие сорта Сюрприз и Северное сияние характеризовались более высоким содержанием сухого вещества, сырой золы и общего азота, а также умеренным содержанием крахмала (10,1 - 12,4%), что делает их более подходящими для диетического питания.

Литература

1. Усанова З.И., Прядеин С.Е. Влияние гуминовых препаратов на продуктивность и качество урожая сортов картофеля с фиолетовой мякотью. Картофель и овощи. 2020. 6. 27-31.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-76- 01058.

СТАБИЛЬНОСТЬ И СОСТАВ ГАЗОВЫХ ГИДРАТОВ, ПОЛУЧЕННЫХ В РАСТВОРАХ СПИРТОВ

**Сергеева Д.В.,^а Ярахмедов М.Б.,^{а,б} Семенов А.П.,^б
Истомин В.А.,^а Стопорев А.С.^б**

^а Сколковский институт науки и технологий, Сколтех, 121205, Москва, Большой бульвар, 30 стр. 1
e-mail: d.sergeeva@skoltech.ru

^б РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, 119991, Москва, Ленинский проспект, 65 к. 1

Актуальность гидратных технологий хранения и использования газов в низкотемпературных пластах возрастает по мере смещения добычи нефти и газа в северные и арктические регионы. Однако возможность использования этих технологий зависит от устойчивости гидратосодержащих отложений при контакте с используемыми реагентами. Для оценки возможности внедрения таких технологий нами были проведены исследования гидратов метана, полученных из водных растворов низших (в том числе ненасыщенных) спиртов. В ходе исследования изучены равновесные условия сосуществования гидрата метана с газом и раствором спирта в воде, в том числе в условиях кристаллизации льда. Также, при их наличии двойных гидратов метана и спирта, был проанализирован их состав. Полученные данные об устойчивости гидратов будут полезны для определения диапазона термобарических условий в пластах, в которых можно реализовать способ хранения газа в гидратной форме.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-79-01312.

НОВЫЕ АСПЕКТЫ ГАЗОВОГО РАЗДЕЛЕНИЯ С ПОМОЩЬЮ ГИБРИДНОЙ ТЕХНОЛОГИИ НА ОСНОВЕ ГАЗОГИДРАТНОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ И МЕМБРАННОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Степанова Е.А., Кудрявцева М.С., Шаблыкин Д.Н., Петухов А.Н.

*ННГУ им. Н.И. Лобачевского,
603022, г.Нижний Новгород, пр.Гагарина, 23
stepanova.k1999@mail.ru*

Одним из перспективно развивающихся методов переработки газа является метод газогидратной кристаллизации. С одной стороны, газовые гидраты – это отрицательное явление в газовой промышленности, так как они образуются в трубопроводах, останавливая поток, и создавая риск выхода трубопровода из строя. Но использование газогидратных структур нашло и положительное применение, в том числе, и для переработки природного газа. Газовые молекулы при определенных термобарических условиях сорбируются в кристаллические полости, состоящие из молекул воды.

Для повышения эффективности процесса было выбрано мембранное газоразделение, основанное на механизме сорбции-диффузии компонентов. Оба процесса осуществлялись в едином массообменном аппарате, поэтому количество стадий процесса не изменялось, что, безусловно, является плюсом гибридной технологии.

Были проведены эксперименты по разделению газовой смеси с помощью метода газогидратно-мембранной кристаллизации.

Использовались два мембранных модуля: из 20 и 40 полых волокон на основе полиэфиримида+полиимида (PEI+PI). Для исследования эффективности разделения поддерживались доли отбора (отношение потока, идущего на образование газовых гидратов, ко входящему потоку), а также разные соотношения потоков пермеата к потоку ретентата: 1/1, 1/2, 1/5, 1/10 (каждое из этих чисел соответствовало одной из долей отбора).

Условия эксперимента: давление в модуле 4,25 МПа при температуре 280,15 К. Разница давлений в области высокого и низкого давления 2 МПа.

По результатам эксперимента гибридный метод показал значительную эффективность разделения газовой смеси по сравнению с газогидратной кристаллизацией. В газогидратной фазе концентрируются такие компоненты, как ксенон, пропан; в послемембранном пространстве – диоксид углерода и сероводород (поэтому газогидратная фаза значительно обеднена, по сравнению с газогидратной кристаллизацией), а газовая фаза обогащается этаном и метаном.

Выполнено при поддержке Российского научного фонда, грант № 22-79-10222.

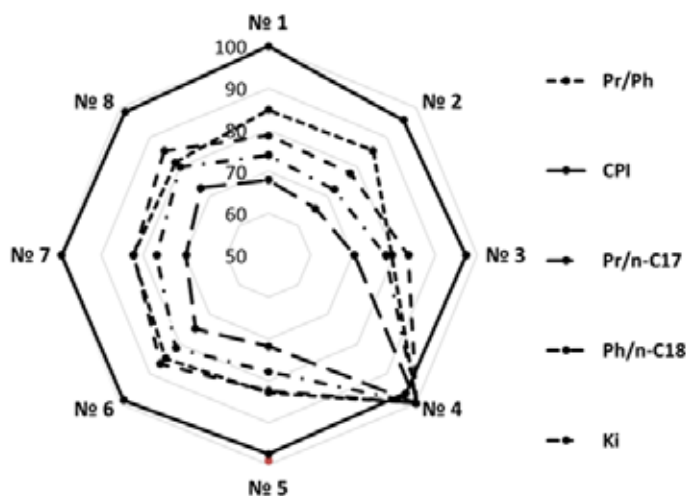
ВАРИАЦИИ МАТЕРИАЛЬНОГО СОСТАВА ИЗВЛЕКАЕМОЙ НЕФТИ И ПРОГНОЗ ПРОДУКТИВНОСТИ СКВАЖИН

Туров Ю.П., Гузньева М.Ю., Муравская Ю.А.

*Сургутский государственный университет,
628412, Сургут, проспект Ленина, 1
e-mail: turov_iup@surgu.ru*

Исследование вариаций состава нефти из разных скважин одного месторождения представляет интерес для оптимизации режимов нефтеизвлечения и давно используется в нефтедобыче. В работе методами хромато-масс-спектрометрии исследован изомерный и гомологический состав насыщенных и ароматических соединений в образцах нефти одного из месторождений Ханты-Мансийского округа. Для сопоставления состава образцов нефти использованы значения геохимических параметров, которые рассчитывают по абсолютным и относительным содержаниям изомеров разных классов веществ и широко используют в геохимии нефти.

На диаграмме сопоставлен ряд геохимических параметров, рассчитанных по изомерному составу парафинов в нескольких скважинах (№1 - №8). Для большей наглядности значения параметров нормированы – максимальное значение любого параметра в наборе образцов принято за 100%.



Как следует из диаграммы, состав нефти одной из скважин (№4) резко отличается от всех остальных. В литературе имеется информация о том, что скважины, в которых состав нефти значительно отличается от среднестатистического по месторождению, подпитываются глубинными нефтяными флюидами. Поэтому скважину №4 следует рассматривать как наиболее вероятного кандидата на глубинную подпитку, и более детально исследовать другие геологические и эксплуатационные характеристики этой скважины.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Правительства Ханты-Мансийского автономного округа – Югры (приказ от 20.06.2023 № 10-П-1534).

ГИДРОХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ КАК ОДИН ИЗ КЛЮЧЕВЫХ ИНСТРУМЕНТОВ РАЗВЕДКИ И РАЗРАБОТКИ НЕФТЯНЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ

Польская Н.Н., Петрухина Е.В., Потемкин И.П., Щербакова К.В.

*ООО «ЛУКОЙЛ-Инжиниринг», 400078, Волгоград, проспект им. В.И. Ленина, 96,
e-mail: Ksenia.Scherbakova@lukoil.com*

Природный газ и нефть тесно связаны с подземной гидросферой. Это объясняется тем, что подземная гидросфера является средой, в которой генерируются и формируются скопления углеводородов и которая предопределяет закономерности размещения их в недрах. Все аквиферы несут на себе отпечаток длительной геологической цепочки онтогенеза нефти и газа.

При разработке месторождений совместно с углеводородной продукцией добываются большие объемы вод, образующихся в результате смешения и химического взаимодействия вод различного генезиса – пластовых, закачиваемых, технических. В связи с этим, информация о составе, свойствах и природе попутных вод является необходимой как на стадии поисков и разведки, так и при разработке.

Гидрохимические методы исследования позволили решить комплекс задач, возникших при разведке и разработке ряда месторождений Северного Каспия, Волгоградской области, Западной Сибири. Была проведена диагностика характера проб воды, полученных при испытании пластов в рамках проведения геолого-разведочных работ, выявлены региональные гидрохимические коррелятивы на основании регулярного мониторинга состава попутно добываемых вод, определен характер насыщенности пластов-коллекторов по результатам исследования шлама бурения, спрогнозирована совместимость вод и риски солеотложения, выявлено влияние растворов и реагентов используемых при опытно-промышленных работах на состав попутно добываемых вод.

Столь широкий спектр применения гидрохимических исследований характеризует их как неотъемлемую часть комплекса исследований, играющих важную роль для построения геологических моделей и контроля разработки месторождения.



СЕКЦИЯ 6

**АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ
НОВЫЕ МЕТОДЫ
И ПРИБОРЫ ДЛЯ ХИМИЧЕСКИХ
ИССЛЕДОВАНИЙ И АНАЛИЗА**

ВНЕЛАБОРАТОРНЫЙ АНАЛИЗ С ПОМОЩЬЮ ОПТИЧЕСКИХ МУЛЬТИСЕНСОРНЫХ СИСТЕМ

Богомолов А.Ю.

*Самарский государственный технический университет,
443100, Самара, ул. Молодогвардейская 244,
e-mail: a.bogomolov@mail.ru*

В современном высокотехнологичном обществе стремительно растет потребность в химическом анализе. Пропускная способность инструментальных методов, в том числе широко используемой оптической спектроскопии, уже не достаточна для обеспечения требуемого уровня аналитического контроля растущего числа объектов и сред. Традиционный подход, связанный с отбором проб и их централизованным лабораторным исследованием, не подходит для решения новых задач, таких как онлайн-мониторинг различных процессов или полевой анализ.

Одним из ответов аналитической химии на сегодняшние вызовы является разработка оптических мультисенсорных систем (ОМС) – анализаторов низкой селективности, создаваемых для решения определенной задачи количественного или качественного анализа. ОМС могут быть основаны на светодиодах, оптических фильтрах, массиве детекторов различной чувствительности и сходных элементах¹. Тщательная оптимизация отдельных оптических сенсоров системы позволяет добиваться высокой точности анализа с использованием небольшого числа каналов². Это позволяет существенно снизить размеры и цену анализатора, повысить скорость измерения, а также сделать устройство портативным и автономным. Недостаток селективности при этом компенсируется математически – использованием алгоритмов хемометрики, которые становятся ключевым звеном в конструкции ОМС.

Представленный доклад посвящен обсуждению научных и технических вопросов создания и внедрения оптических мультисенсорных систем. Приведены примеры их разработки и применения в решении реальных практических задач³.

Литература

1. Богомолов А.Ю. *Журнал аналитической химии*, 2022, **77**, 227.
2. Bogomolov A., Evseeva A., Ignatiev E, Korneev V. *Trends in Analytical Chemistry*, 2023, 160, 116950.
3. Bogomolov A. *Sensors*, 2021, **21**, 3541.

ОБНАРУЖИТЕЛИ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ: СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ

Буряков И.А., Буряков Т.И.

*Научно-исследовательский технологический институт им. А.П. Александрова,
188540, Ленинградская обл., г. Сосновый Бор, Копорское ш. 72,
e-mail: buryakovia@gmail.com*

Обсуждаются типичные объекты обнаружения инструментальными методами анализа – следы подлежащих контролю веществ на различных поверхностях или их пары в воздухе как признаки присутствия взрывных устройств или зарядов взрывчатых веществ (ВВ). Количественное содержание следов или паров ВВ может варьироваться в широких пределах. Масса ВВ в первом латентном отпечатке пальца, оставленном на поверхности какого-либо предмета сразу после касания заряда ВВ, примерно равна $\sim 10^{-6}$ г, в 10-м $\sim 10^{-7}$ г, а в 100-м $\sim 10^{-9}$ г. Для летучих ВВ концентрация пара ВВ в воздухе вблизи реальных объектов может достигать значения ≤ 1 нг/см³.

Проведен анализ и сопоставление основных аналитических, эксплуатационных и стоимостных характеристик транспортабельных масс-спектрометров (тМС), спектрометров ионной подвижности (СИП), газохроматографических обнаружителей (ГХО), дистанционных лазерных спектроскопических обнаружителей (ДЛСО), а также оптических, электрических, электрохимических, термометрических и масс-чувствительных сенсоров при обнаружении следов и паров ВВ (см. табл.).

Таблица

Обнаружители	¹ ПО следов, $\times 10^{-12}$ г	¹ ПО паров, $\times 10^{-15}$ г/см ³	² t_a , с	³ Селективность	³ Стоимость
тМС	10	10	1	В	В
СИП	10	10	1	С	С
ВГХО	0.01	10^{-1}	10^2	В	С
⁴ ДЛСО	10^4	10^3	10^2	С	В
Сенсоры	10^2	10^2	1	Н	Н

¹ ПО – предел обнаружения; ² t_a – время установления показаний; ³
В – высокая, С – средняя, Н – низкая; ⁴ при дальности ~ 10 м.

НОВЫЕ ПОДХОДЫ В ПРОБОПОДГОТОВКЕ И АНАЛИЗЕ ГОРНЫХ ПОРОД, РУД И БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ МЕТОДАМИ МС/АЭС-ИСП

Колотов В.П.

*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, Москва,
e-mail: kolotov@geokhi.ru*

Достижение прорывных результатов при проведении исследований в области геохимии, космохимии, биологии, медицины и др. дисциплинах сегодня трудно представить без выполнения исследований нового, высочайшего качества, включая элементный химический анализ. Под новым качеством аналитических результатов понимается проведение определений с использованием уникальных решений (технических, вычислительных и т.п.) с максимально низким пределом обнаружения и с корректно оцененной неопределенностью результатов. Именно такие результаты могут входить в пул повторно используемых данных (FAIR). Современные исследования в геохимии, космохимии в последние десятилетия во многом связаны с развитием локального анализа как элементного, так и изотопного. Задачи валового анализа в основном направлены на определение экстремально низких концентраций элементов прежде всего редких, редкоземельных, тугоплавких, благородных, проведение анализа «трудных» образцов (пород, включающих трудно вскрываемые минералы, или разложение которых сопровождается потерями элементов по разным причинам).

МС-ИСП является сегодня ведущим методом определения ультранизких концентраций элементов и/или изотопов как в варианте валового, так и локального анализа.

Валовый анализ предусматривает разложение пробы. Качество разложения определяет успех анализа в целом, внося основной вклад в общую неопределенность результатов анализа. Это трудоемкий и длительный этап, определяющий общую производительность. Представлено критическое рассмотрение различных способов вскрытия проб, включая черные сланцы, граниты, некоторые руды, медико-биологические образцы и др. Это кислотное разложение, как в автоклавах, так и при атмосферном давлении, вскрытие с бифторидом аммония, спекание/сплавление с флюсами и др.

Для определения сверхнизких концентраций редкоземельных элементов и благородных металлов рассмотрены различные способы концентрирования, включая модифицированные углеродные наноматериалы. Для обеспечения контроля данных при проведении их интерпретации в предметной области предложена многомерная модель результатов анализа методами МС/АЭС-ИСП на основе СУБД, которая гармонично интегрируется с системой FAIR.

«МИКРОПЛАСТИК» И «НАНОПЛАСТИК»: НОВАЯ ПРОБЛЕМА И ВЫЗОВ В АНАЛИТИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Пирогов А.В

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, 1
19234, Москва, Ленинские горы, д.1.
e-mail: Pirogov@analyt.chem.msu.ru*

Микропластик и нанопластик (МП и НП) — невидимая проблема мирового масштаба. Почти 80% когда-либо созданного пластика никак не перерабатывается и продолжает загрязнять окружающую среду, где распадается на более мелкие частицы. Проблема микропластика — одна из главных экологических проблем мира. В Мировой океан ежегодно попадает до 8 млн тонн пластика, основная его часть — микроскопические частицы, плавающие на поверхности воды или захороненные в донных отложениях. Туда он попадает в результате использования средств личной гигиены, декоративной косметики, красок, стирки синтетической одежды. Он с легкостью проходит через фильтры и водоочистные сооружения, попадая в реки, моря и другие водоемы.

Основной источник распространения пластика в воздухе — автомобильные шины, с которых во время движения стирается пластиковая пыль. Пластиковые частицы настолько распространены, что выпадают с дождем и снегом на землю и даже присутствуют в пище и питьевой воде.

Химики всего мира только начинают осознавать проблему и искать пути ее решения (в том числе - и анализа, идентификации такого рода материалов).

В докладе будут обсуждены основные типы источников, проведено сравнение свойств МП и НП, приведен химический состав наиболее часто встречающихся в природе частиц. Рассмотрены основные виды пробоподготовки объектов для выделения МП и НП, представлены различные современные подходы к анализу такого рода частиц и соответствующие методы анализа (с их достоинствами и недостатками).

СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ СПОРТИВНОЙ МЕТАБОЛОМИКИ

Дикунец М.А., Дудко Г.А., Федотова Е.В., Вирюс Э.Д.

*ФГБУ ФНЦ ВНИИФК, 105005, Москва, Елизаветинский пер., д.10, стр.1
e-mail: edwardvirus@yandex.ru*

Использование высокоинтенсивных, часто предельных, физических нагрузок является одним из необходимых условий достижения высших спортивных результатов у спортсменов высокой квалификации. До настоящего времени при исследовании процессов адаптации спортсменов к физическим нагрузкам изучают реакцию одного или нескольких ключевых метаболитов¹. Очевидно, что, опираясь на данный подход, удастся детектировать только ограниченные изменения в ведущих системах организма человека, что может препятствовать пониманию фундаментальных связей между физическими упражнениями и метаболизмом. Поэтому актуальным представляется внедрение в практику биохимического мониторинга квалифицированного спортсмена метаболомных подходов, позволяющих системно выявлять ответ метаболических путей на физический стресс за счет обнаружения, идентификации и количественного определения широкого спектра эндогенных метаболитов в сложных по составу смесях методами хроматомасс-спектрометрии. Несмотря на широкие возможности, открываемые метаболомными подходами, в науках о спорте их начали использовать несколько лет назад².

В докладе приводится детальное описание современных метаболомных подходов количественного определения эндогенных биоиндикаторов с применением хроматомасс-спектрометрических методов. Приводится сравнительный анализ описываемых подходов. Анализируются их достоинства и недостатки. Описаны метаболомные подходы, направленные на валидацию биомаркеров, ассоциированных с негативными последствиями чрезмерных тренировочных нагрузок и продемонстрированы их высокий прогностический потенциал.

Литература

1. Purnomo E., Arovah N.I., Sumaryanto S. *Hum Mov.*, 2023, **24**, 131.
2. Khoramipour K., Sandbakk Ø., Keshteli A.H., Gaeini A.A., Wishart D.S., Chamari K. *Sports Medicine*, 2022, **52**,547.

*Работа выполнена в рамках государственного задания ФГБУ ФНЦ ВНИИФК
№ 777-00001-24-00 (тема № 001-22/3).*

МОДИФИКАЦИЯ ПОВЕРХНОСТИ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ ДЛЯ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В АНАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

**Горячева О.А., Соболев А.М., Мещерякова С.А., Корнилов Д.А.,
Цюпка Д.В., Худина Е.А., Дрозд Д.Д., Горячева И.Ю.**

*Институт химии Саратовского государственного университета имени Н.Г. Чернышевского,
410012, Саратов, Астраханская 83,
e-mail: olga.goryacheva.93@mail.ru*

Полупроводниковые наночастицы с флуоресцентными свойствами квантовые точки (КТ) широко используются в электронике. Их высокая интенсивность флуоресценции при широких спектрах поглощения позволяет использовать несколько квантовых точек с одним источником возбуждения. Узкие пики флуоресценции КТ и высокая стабильность подталкивает исследователей к замене классических для биоанализа меток на КТ.

Одним из основных ограничивающих параметров для использования КТ является гидрофобность их поверхности или простота отсоединения координационных лигандов при прямом получении гидрофильных частиц. Это ограничивает возможность к биоконъюгации и дальнейшему использованию КТ как метки. Большинство подходов синтеза КТ используют олеиновую кислоту в качестве координационных лигандов. Два основных подхода к гидрофилизации КТ это замена этих самых лигандов на гидрофильные или инкапсуляция. Методы гидрофилизации влияют на размер, заряд, интенсивность флуоресценции и возможность к конъюгации КТ с биомолекулами¹. Столь большое значение варьируемых параметров позволяет подобрать оптимальную оболочку для конкретного аналитического подхода^{2,3}.

Литература

1. Goryacheva, O.A., Wegner, K D., Sobolev, A.M., Häusler, I., Gaponik, N., Goryacheva, I. Y., Resch-Genger, U. Influence of particle architecture on the photoluminescence properties of silica-coated CdSe core/shell quantum dots //Analytical and Bioanalytical Chemistry. – 2022. – Т. 414. – №. 15. – 4427-4439с.
2. Goryacheva, O.A., Beloglazova, N.V., Goryacheva, I.Y., De Saeger, S. Homogenous FRET-based fluorescent immunoassay for deoxynivalenol detection by controlling the distance of donor-acceptor couple //Talanta. – 2021. – Т. 225. –121973с.
3. Goryacheva, O.A., Pidenko, P.S., Markin, A.V., Markina, N.E., Tsupka, D. V., Mordovina, E.A., Ponomaryova T.D., Meshcheryakova S.A., Kornilov D.A., Strokin P.D., Drozd D.D., Podkolodnaya Y.A., Kovyryshina A.A., Morozova I.V., Shelekhova T.V., Goryacheva, I. Y. Current trends and challenges in the mitoxantrone measuring in biofluids and new pharmaceutical systems //TrAC Trends in Analytical Chemistry. – 2023. –117373с.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-13-00380

ОБОНЯНИЕ ЖИВОТНЫХ И НАСЕКОМЫХ КАК ОРИЕНТИР РАЗВИТИЯ ТЕХНОЛОГИЙ ОБОНЯНИЯ

Грузнов В.М.^{а,б}, Засыпкина И.И.^а

*^аИнститут нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука
Сибирского отделения Российской академии наук,
630090, Новосибирск, пр-т Академика Коптюга, 3*

*^бНовосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 1
e-mail: Gruznovvm@ipgg.sbras.ru*

Высокая обонятельная способность животных и насекомых привлекает внимание исследователей с целью использования их для контроля по запаху наличия взрывчатых веществ (ВВ), других вредных веществ, для раннего выявления заболеваний. Биообъекты привлекают возможностью разработки новых подходов киборгового химического восприятия, в которых сигналы мозга биообъектов напрямую используются для обнаружения и распознавания паров различных веществ. Если в первом случае необходимо обучать животных и насекомых реагировать на обнаруживаемые запахи, то во втором случае необходимо разрабатывать методы расшифровки сигналов мозга. В докладе приведен краткий обзор по проблеме использования обоняния животных и насекомых, в том числе и по реализации киборгового обоняния.

Успешные работы по созданию систем контроля человека на наличие ВВ с использованием обученных крыс были начаты в США в 1970-х годах.¹

С 1990-х годов наблюдаются многочисленные работы в разных странах по обучению мышей и ос определять по запаху ВВ, муравьев определять раковые клетки и ВВ, пчел выявлять коронавирус. Успехи в выявлении высокой чувствительности «биологических» детекторов инициировали работы в области технологий киборгового обоняния. В этом случае в мозг животного (крысы, мыши) или насекомого (кузнечика, саранчи) вживляются электроды и путем обработки электрических сигналов определяются вещества, обнаруживаемые «живым» детектором.² По тринитротолуолу достигнуты высокие пороговые чувствительности на уровне пг.

Литература

1. Грузнов В.М., Филоненко В.Г., Вотенцев В.Н. Оперативное детектирование взрывчатых веществ. Сборник переводов / Под ред. В.М. Грузнова. – Новосибирск: Изд-во НГУ, 1998. – 224 с.
2. Кирой В.Н., Косенко П.О., Шепелев И.Е. и др. Журнал аналитической химии, 2023, **78(8)**, 736.

Работа выполнена в рамках ПФНИ РФ, проект FWZZ-2022-0027 (ИНГГ СО РАН).

ЭКСПРЕССНЫЕ ТЕСТ-СИСТЕМЫ: НОВЫЕ ПОДХОДЫ ДЛЯ ВЫЯВЛЕНИЯ НИЗКО- И ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Дзантиев Б.Б.

*Институт биохимии им. А.Н. Баха, ФИЦ Биотехнологии РАН,
119071, Москва, Россия, Ленинский проспект 33,
e-mail: dzantiev@inbi.ras.ru*

Сочетание пористых планарных носителей, рецепторных молекул и окрашенных высокодиспергированных частиц-маркеров позволяет быстро выявлять разнообразные аналиты. Иммунохроматографические тесты (ИХТ) наиболее известны в ряду таких аналитических систем, являясь эффективными средствами внелабораторной диагностики. Однако востребованы новые виды тестов, обеспечивающие снижение пределов обнаружения, рост экспрессности и производительности. В сообщении будут представлены исследования лаборатории иммунобиохимии ФИЦ Биотехнологии РАН в этой области и дана оценка разработанных подходов.

Определен состав и антиген-связывающая способность комплексов антител с наночастицами золота разных размеров и формы – наиболее распространенными маркерами в ИХТ. Изучено влияние поверхностной плотности иммобилизуемых антител на параметры ИХТ с использованием получаемых конъюгатов. Разработаны математические модели, описывающие формирование детектируемых иммунных комплексов в ИХТ, определены факторы, лимитирующие снижение предела обнаружения. Для систем одновременного выявления до четырех микотоксинов и антибиотиков обоснован выбор расположения зон связывания, исходя из аффинности иммунореагентов. Сопоставлены варианты иммунохроматографии с одно- и многостадийным включением маркеров в иммунные комплексы. Реализованы ИХТ с использованием различных окрашенных и флуоресцирующих наночастиц-маркеров, в том числе с варьированием формы – наносферы, наноцветы, нанозвезды, наностержни. Разработаны тест-системы с разными видами усиления сигнала – *in situ* наращивание наночастиц, нанозимный катализ, агрегация функционализированных наночастиц и др. Для повышения информативности разработаны мультипороговые и мультизонные тест-системы. Достигнутые характеристики тест-систем сопоставлены с теоретическими расчетами. Установлены критерии для априорной оценки возможностей новых кандидатных маркеров и схем анализа. Предложенный инструментарий успешно применен и апробирован для разных видов аналитов – низкомолекулярных (антибиотики, пестициды, мико- и фикотоксины), белковых (специфические антитела, маркеры воспаления и сердечных дисфункций), вирусов и бактерий, обеспечивая 10-20-минутное определение со снижением пределов обнаружения от 10 до 500 раз.

ВКЛАД ХЕМОМЕТРИКИ В «ОЗЕЛЕНЕНИЕ» ХИМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

Савельев М.Ю., Панчук В.В., Кирсанов Д.О.

*Институт химии, СПбГУ,
198034, Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский пр. 26
e-mail: d.kirsanov@gmail.com*

Загрязнение окружающей среды, вызванное деятельностью человека, является одной из главных проблем современного общества. Химия в основе своей не очень экологична, включая и аналитическую химию, поэтому попытки избавиться от применения экологически опасных веществ, методик и процедур в анализе являются важным направлением современных исследований. Хеометрическая обработка данных в настоящее время является очень важной частью аналитической химии. Применение хеометрики дает ряд ценных преимуществ, таких как надежный качественный и количественный анализ в случае неидеальных, перекрывающихся и плохо селективных сигналов. Это помогает отказаться от сложных физических манипуляций с образцами и приборами, что обеспечивает значительное упрощение анализа и, в свою очередь, приводит к значительному экологическому эффекту. Лозунг о том, что хеометрика сама по себе является «зеленой», достаточно популярен, различные авторы уже подчеркивали это в недавней литературе [1, 2]. В то же время конкретное «зеленое» влияние хеометрики не было охарактеризовано численно. Весьма популярной метрикой для этого является метод Analytical Eco-Scale [3]. В данной работе мы оценили по шкале Eco-Scale ряд репрезентативных исследований из современной литературы и сравнили хеометрические аналитические процедуры с их традиционными аналогами с точки зрения экологичности. Показано, что экологичность при решении конкретных аналитических задач может быть существенно повышена за счет использования хеометрических методов [4].

Литература

1. Gu H.-W., Zhang S.-H., et al, *Spectrochim. Acta A* 200 (2018) 93–101.
2. Rebellato A. P., dos S. Caramês E. T., et al, *LWT*, 128 (2020) 109438.
3. Gałuszka A., Migaszewski Z. M., et al, *TrAC, Trends Anal. Chem.* 37 (2012) 61–72.
4. Saveliev M., Panchuk V., Kirsanov D., *TrAC, Trends Anal. Chem.* 172 (2024) 117556.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-23-00114.

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ (БИО)СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ МАЛЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НЕКОТОРЫХ АКТУАЛЬНЫХ ЗАДАЧ ЭКО-, БИО- И ФАРММОНИТОРИНГА

Козицина А.Н., Свалова Т.С., Охохонин А.В.

*ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»
620002 г. Екатеринбург, ул. Мира, 19,
e-mail: a.n.kozitsina@urfu.ru*

Разработка методов экспресс-анализа во внелабораторных условиях и портативных устройств на их основе остается одной из наиболее важных задач современной аналитической химии. Электрохимические (био)сенсоры успешно дополняют лабораторные методы анализа в качестве средств первичного экспресс-скрининга в области медицинской диагностики, экологического мониторинга и пищевой безопасности. Структурирование рецепторного слоя таких устройств с применением малых органических молекул позволяет существенно расширить аналитические возможности и перспективы их применения. В качестве функциональных элементов электрохимических биосенсоров могут выступать оригинальные малые молекулы - перспективные кандидаты в лекарственные средства и направленно-функционализированные с выраженным эффектом внутримолекулярного переноса заряда. Нами предложены оригинальные подходы и электрохимические (био)сенсоры на основе азотистых гетероциклов – производных азолазинов, диазинов, карбазолов в качестве кросс-линкеров, электрокатализаторов, меток и элементов самостоятельного биомолекулярного распознавания для экспресс-определения некоторых клинически-значимых параметров крови, инфекционных агентов, нитроароматических соединений в пробах с различной матрицей. Молекулярное распознавание в ряде случаев тесно связано с типом биологической активности, а широкие синтетические возможности позволяют обеспечить эффективную иммобилизацию молекул на поверхности электрода и наноматериалов. Применение комплексного подхода, включающего расчетные и физико-химические методы исследований, позволяет осуществить наиболее эффективный поиск комплементарных пар «аналит-рецептор», а также предсказать характер изменения отклика в результате супрамолекулярного взаимодействия и/или иммобилизации. Предложенные подходы и сенсоры универсальны и могут быть интегрированы как в конструкции коммерчески-доступных портативных электрохимических анализаторов, так и разработанных нами оригинальных лабораторных прототипов электрохимических тест-платформ.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РНФ (проект № 20-13-00142-П, проект № 20-73-10077-П).

ПЛАСТИФИЦИРОВАННЫЕ, ПАСТОВЫЕ И ПЛЕНОЧНЫЕ МЕТАЛЛОКСИДНЫЕ ЭЛЕКТРОДЫ В ИОНОМЕТРИИ, ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИИ И ЭКОЛОГИИ

Коковкин В.В.

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
пр-т Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090;
basil@niic.nsc.ru*

В докладе обсуждаются результаты комплексного исследования, включающего три взаимосвязанных направления:

- потенциометрическое изучение электродного поведения обычных и твердоконтактных ИСЭ на основе ПВХ-мембран, пластифицированных ДОФ/ДФФ, а также угольных пастовых электродов по отношению к гидрофобным органическим катионам, которое включает характеристику электродных функций и оценку их коэффициентов селективности ($K_{ij}^{пот}$), неизмененных составом растворов и мембран;

- вольтамперометрическое изучение пастовых электродов, в состав пасты которых в качестве электроактивных веществ (ЭАВ) включены редоксактивные комплексные соединения, синтезированные в ИНХ СО РАН;

- электролиз растворов азотной кислоты с добавками редокс-системы Ce(IV)/Ce(III) в электролизере с разделенными мембраной Нафийон катодным и анодным пространствами при обычных условиях ($t < 100$ °С, $p = 1$ бар) с металлоксидным анодом, в котором на титановую основу электролитически нанесена пленка IrO_2 для придания устойчивости к коррозии. Процесс окисления органического вещества (ОВ) проводится методом непрямого электрохимического окисления (НЭО) в реакторе, соединенном с электролизером, при периодическом или непрерывном дозировании ОВ в течение заданного времени.

Основные результаты проведенных исследований:

- термодинамические характеристики межфазного распределения катионов в ряду R_4N^+ ; методики определения органических катионов в технологических растворах и сточных водах, косвенного определения спиртов, определения неионогенных ПАВ по функциональным фрагментам и др.

- данные по $E_{1/2}$ комплексов, результаты изучения электрокаталитических свойств применительно к реакциям выделения водорода и кислорода из воды, электрокаталитического восстановления CO_2 и т.д.

- данные по кинетике минерализации ЭДТА в условиях непрерывного дозирования и математическая модель процесса. Представлены расчеты стационарного тока для непрерывного разложения ЭДТА при одновременной электрохимической регенерации церия (IV) в гальваностатическом режиме на основе модели диффузионного тока.

НОВЫЕ ЭКСПРЕСС МЕТОДЫ АНАЛИЗА НЕМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ВКЛЮЧЕНИЙ В СТАЛЯХ И СПЛАВАХ

**Григорович К.В., Комолова О.А., Морозов А.О., Ем А.Ю.,
Жемков А.А., Демин К.Ю., Румянцева С.Б., Фельдман Ю.К.**

*ИМЕТ РАН, 119334, Москва, Ленинский просп., 49
e-mail: konstantin.grigorovich@gmail.com*

Определение содержания неметаллических включений (НВ) в сталях и сплавах является актуальной задачей контроля качества продукции. Определение НВ проводят с помощью количественного металлографического анализа методами оптической и электронной микроскопии с рентгеновским микроанализом, которые не являются экспрессными. Методы контроля НВ с помощью фракционного газового анализа (ФГА) и оптико-эмиссионного спектрального PDA анализа, позволяют в течение 5-15 минут предоставить результат о количестве НВ в пробе металла, однако отсутствие стандартных образцов и аттестованных методик препятствует их применению в промышленности.

Фракционный газовый анализ (ФГА) представляет собой модификацию метода высокотемпературной экстракции кислорода и азота из образца в несущем газе при заданном режиме нагрева. Метод основан на различиях в термодинамической стабильности оксидов и нитридов и возможности их фракционного разделения при монотонном нагреве в печи анализатора. Из-за априорной неопределенности в числе и параметрах пиков экстракции задача анализа и интерпретации кривых газовой выделенности (эвалограмм) относится к классу некорректно поставленных нелинейных обратных задач. В докладе представлены результаты применения метода анализа на основе нейронных сетей, учитывающих физическую информацию об оксидных включениях, потенциально содержащихся в образце. Разработанный алгоритм был протестирован на результатах анализа стандартных образцов.

Проведено сравнение результатов определения НВ в образцах, вырезанных из слитков стали методами оптической металлографии по стандарту ASTM E1245-03, фракционного газового анализа (ФГА) и оптико-эмиссионного спектрального PDA анализа. Разработана математическая модель интерпретации результатов спектрального анализа методом PDA, получено корреляционное уравнение и рассчитаны объемные доли НВ в исследованных образцах. Продемонстрированы возможности метода для контроля чистоты стали по НВ. Сравнение результатов определения НВ в образцах различными методами показало хорошую сходимость.

ПЛАСТИФИЦИРОВАННЫЕ, ПАСТОВЫЕ И ПЛЕНОЧНЫЕ МЕТАЛЛОКСИДНЫЕ ЭЛЕКТРОДЫ В ИОНОМЕТРИИ, ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИИ И ЭКОЛОГИИ

Коковкин В.В.

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
пр-т Акад. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090;
e-mail: basil@niic.nsc.ru*

В докладе обсуждаются результаты комплексного исследования, включающего три взаимосвязанных направления:

- потенциометрическое изучение электродного поведения обычных и твердоконтактных ИСЭ на основе ПВХ-мембран, пластифицированных ДОФ/ДБФ, а также угольных пастовых электродов по отношению к гидрофобным органическим катионам, которое включает характеристику электродных функций и оценку их коэффициентов селективности ($K_{ij}^{пот}$), неизмененных составом растворов и мембран;

- вольтамперометрическое изучение пастовых электродов, в состав пасты которых в качестве электроактивных веществ (ЭАВ) включены редоксактивные комплексные соединения, синтезированные в ИНХ СО РАН;

- электролиз растворов азотной кислоты с добавками редокс-системы Ce(IV)/Ce(III) в электролизере с разделенными мембраной Нафион катодным и анодным пространствами при обычных условиях ($t < 100$ °С, $p = 1$ бар) с металлоксидным анодом, в котором на титановую основу электролитически нанесена пленка IrO_2 для придания устойчивости к коррозии. Процесс окисления органического вещества (ОВ) проводится методом непрямого электрохимического окисления (НЭО) в реакторе, соединенном с электролизером, при периодическом или непрерывном дозировании ОВ в течение заданного времени.

Основные результаты проведенных исследований:

- термодинамические характеристики межфазного распределения катионов в ряду R_4N^+ ; методики определения органических катионов в технологических растворах и сточных водах, косвенного определения спиртов, определения неионогенных ПАВ по функциональным фрагментам и др.

- данные по $E_{1/2}$ комплексов, результаты изучения электрокаталитических свойств применительно к реакциям выделения водорода и кислорода из воды, электрокаталитического восстановления CO_2 и т.д.

- данные по кинетике минерализации ЭДТА в условиях непрерывного дозирования и математическая модель процесса. Представлены расчеты стационарного тока для непрерывного разложения ЭДТА при одновременной электрохимической регенерации церия (IV) в гальваностатическом режиме на основе модели диффузионного тока.

НОВАЯ СЕНСОРИКА ДЛЯ ПЕРСОНАЛЬНОЙ ДИАГНОСТИКИ ЗДОРОВЬЯ

Кучменко Т.А.^{1,2}, Менжулина Д.А.³, Умарханов Р.У.^{1,2}

¹*Воронежский государственный университет инженерных технологий*

²*МИП ООО «Сенсорика – новые технологии»*

394036 Россия, Воронеж, пр-кт Революции, 19

³*Воронежский государственный медицинский университет им. Н.Н. Бурденко,*

394036 Россия, Воронеж, ул. Станкевича, 19

Люди хотят больше знать о своём здоровье и предупреждать заболевания. Разработан персональный прибор диагностики состояния по запаху кожи, точнее – по летучим продуктам выделения через кожу, с применением одного наноструктурированного газового пьезосенсора. В отличие от типичных газовых анализаторов, датчик биосканера здоровья «BioScan» настроен не на какой-то конкретный газ, а относится к детекторам универсального назначения благодаря сорбенту, проявляющему сродство к многим летучим органическим соединениям – маркерам физиологических процессов в организме. Сканер предназначен для личного пользования и по своему функционалу занимает промежуточное место между гаджетами и диагностическим оборудованием. Газовый сенсор многократно тестировался в разных условиях, на разных партиях и массе фаз сорбента с разными промежутками мониторинга выдоха кожи: в течение длительного времени и кратковременно в конкретных ненормальных ситуациях (стресс, болезнь). Достоянием разработки является персональная программа с интуитивно дружественным интерфейсом, в котором не только проводится измерение, сохранение и обработка результатов. Результаты измерения переводятся в трехуровневую интерпретацию для необученного пользователя: итоговое численное значение индекса здоровья, вербальная характеристика наиболее вероятных причин отклонения от нормы и генерация искусственным интеллектом изображения по итоговым выводам. Установлены новые особенности выдоха кожи в разных точках – проекциях органов (зоны Захарьина-Геда), позволяющие оценить скрытые процессы спазма сосудов, протоков; стабильность работы важнейших органов и систем, например, печень/сердце; степень симметрии работы органов слева и справа и др. В 2024 г. на прибор получена декларация соответствия требованиям производства малой партии. Аналогов в России и за ее пределами не установлено.

ОПТИЧЕСКИЕ СПЕКТРОМЕТРЫ «ГРАНД» – НОВОЕ СРЕДСТВО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ

Лабусов В.А., Гаранин В.Г.

*Институт автоматики и электрометрии СО РАН, ООО «ВМК-Оптоэлектроника»,
630090, Новосибирск, просп. Академика Коптюга, 1,
e-mail: labusov@vmk.ru*

В настоящее время разработаны и освоены в производстве оптические спектрометры «Гранд»¹⁻³. Спектрометры включены в Госреестр средств измерений РФ под № 89108-23 и выпускаются в десяти модификациях:

1. Атомно-эмиссионные спектрометры:

- с азотной микроволновой плазмой **Гранд-СВЧ** и с аргоновой индуктивно связанной плазмой **Гранд-ИСП** для анализа жидкостей;
- с дуговым и искровым разрядом на воздухе **Гранд-Глобула**, **Гранд-Кристалл** и **Гранд-Экспресс** для прямого анализа порошковых проб методом испарения из канала графитового электрода, а также металлов;
- с дуговым разрядом **Гранд-Поток** для экспресс-анализа геологических порошковых проб способом просыпки-вдувания, в том числе методом сцинтилляционного атомно-эмиссионного анализа для снижения пределов определения благородных металлов;
- вакуумные спектрометры с искровым разрядом в атмосфере аргона **Гранд-Эксперт** и **Гранд-Фаворит** для экспресс-анализа металлов и сплавов с одновременным определением неметаллических включений;
- с фотометрией пламени **Гранд-Павлин** для определения щелочных и щелочноземельных элементов в растворах.

2. Атомно-абсорбционные спектрометры **Гранд-ААС** высокого спектрального разрешения с источником непрерывного спектра и электротермическим атомизатором для одновременного определения элементов в жидкости.

Спектрометры на основе сборок новых линеек фотодетекторов проводят высокочувствительную одновременную регистрацию спектров во всём рабочем спектральном диапазоне со скоростью до 1000 спектров/с, что позволяет существенно улучшить результаты химического анализа.

Литература

1. Аналитика и контроль, 2021, Т. 25, № 4.
2. Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2022. Т. 88, № 1. ч. II.
3. Сайт предприятия «ВМК-Оптоэлектроника»: <http://www.vmk.ru/>.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРЕДВАРИТЕЛЬНОГО КОНЦЕНТРИРОВАНИЯ ПРИМЕСЕЙ И АЛЬТЕРНАТИВНЫХ СПОСОБОВ ВВОДА ПРОБ В ИСТОЧНИКИ ВОЗБУЖДЕНИЯ И ИОНИЗАЦИИ ПРИ АНАЛИЗЕ ВЕЩЕСТВ ВЫСОКОЙ ЧИСТОТЫ

Медведев Н.С., Сапрыкин А.И.

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева
Сибирского отделения Российской академии наук, 630090, Новосибирск,
проспект Академика Лаврентьева, 3
e-mail: medvedev@niic.nsc.ru*

Масс-спектрометрия и атомно-эмиссионная спектрометрия с индуктивно связанной плазмой (ИСП-МС и ИСП-АЭС) это одни из наиболее информативных методов количественного химического анализа (КХА) как по количеству определяемых элементов, так и по их пределам обнаружения (ПО). Наряду с этими распространенными методами весьма перспективным является метод атомно-эмиссионной спектрометрии с двухструйной дуговой плазмой (ДДП-АЭС), использующий источник возбуждения мощностью на порядок выше, чем ИСП. При этом возможности методов КХА при анализе веществ высокой чистоты ограничены необходимостью растворения проб для ИСП-МС и ИСП-АЭС и разбавления графитовым порошком для ДДП-АЭС анализа, что приводит к увеличению вклада контрольного опыта, снижению сигнала аналитов и ухудшению их пределов обнаружения. Значительно снизить ПО аналитов позволяют такие приемы, как:

- использование предварительного концентрирования примесей,
- использование альтернативных высокоэффективных способов ввода проб и концентратов примесей в источники возбуждения и ионизации.

В докладе будут представлены результаты использования предварительного концентрирования примесей (реакционная отгонка основы пробы, вакуумная отгонка основы пробы, сорбционное концентрирование) и альтернативных способов ввода проб и концентратов примесей в ИСП и ДДП (электротермическое испарение, лазерная абляция) для анализа высокочистых кислот, германия, кадмия, теллура, цинка высокой чистоты. Будут рассмотрены преимущества и ограничения указанных приемов, показано, что их применение позволяет снизить ПО аналитов на 1-2 порядка и существенно расширить аналитические возможности методов КХА применительно к анализу веществ высокой чистоты и прекурсоров для получения функциональных материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект № 121031700315-2.

БИОМОНИТОРИНГ ВОЗДЕЙСТВИЯ ЛЕТУЧИХ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ НА ЧЕЛОВЕКА МЕТОДАМИ ХРОМАТОМАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

**Савельева Е.И., Беляков М.В., Шачнева М.Д., Каракашев Г.В., Трушин А.С.,
Алюшина Т.И.**

*Научно-исследовательский институт, гигиены, профпатологии и экологии человека,
188663, Ленинградская область, м.р-н Всеволожский, г.п. Кузьмолоское, ул. Заводская, зд. 6/2,
e-mail: saveleva@rihophe.site*

Бензол, толуол, этилбензол и изомерные ксилолы (ВТЕХ) являются приоритетными токсикантами, оказывающими вредное воздействие на здоровье человека. Экспозицию к этим соединениям можно оценивать путем измерения их концентраций в цельной крови, золотым стандартом для которого является газовая хромато-масс-спектрометрия в сочетании с твердофазной микроэкстракцией из равновесного пара. Ограничениями метода являются трудности хранения и транспортировки охлажденной цельной крови и эмиссия целевых веществ из вакуумных пробирок для отбора крови. Пределы обнаружения аналитов были ограничены максимальным уровнем их эмиссии из крышек вакуумных пробирок и составили 20 мкМ для толуола и 2 мкМ для остальных веществ.

При определении мочевых метаболитов ВТЕХ методом ВЭЖХ-МС/МС с электрораспылительной ионизацией в режиме регистрации отрицательных ионов бланковые образцы не содержали посторонних сигналов. Для гиппуровой кислоты, изомерных метилгиппуровых кислот, N-ацетил-S-бензил-L-цистеина и N-ацетил-S-фенил-L-цистеина были достигнуты пределы обнаружения 0,003 мкМ. При анализе образцов мочи аппаратчиков химического синтеза (n = 36) содержание биомаркеров экспозиции к толуолу (гиппуровой кислоты), о-ксилолу (2-метилгиппуровой кислоты) и м-ксилолу (3-метилгиппуровой кислоты) составило 3,2±1,1 мМ; 4,0±2,1 мкМ и 1,9±0,9 мкМ соответственно. Для группы сравнения (лиц без профессиональной вредности, n = 22) эти показатели составили: 2,2±0,7 мМ; 0,4±0,2 мкМ и 0,6±0,3 мкМ.

Методом ВЭЖХ-МС/МС высокого разрешения в рамках целевого метаболомного анализа в плазме крови аппаратчиков химического синтеза и группы сравнения определяли содержание аминокислот и их метаболитов. Для группы аппаратчиков установлена сильная корреляционная связь ($r > 0,8$) между содержанием метаболитов ВТЕХ в моче и содержанием в плазме крови индолуксусной кислоты, которая, как было недавно установлено, является активатором арилуглеводородных рецепторов (AhR) и может рассматриваться как биомаркер-кандидат токсического действия ароматических углеводородов.

НОВЫЕ ДЕРИВАТИРУЮЩИЕ РЕАГЕНТЫ ДЛЯ ВЭЖХ-МС - ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ

**Темердашев А.З.¹, Зорина М.О.¹, Доценко В.В.¹, Азарян А.А.¹,
Коншина Д.Н.¹, Коншин В.В.¹, Ю.Ц. Фэн²**

¹Кубанский государственный университет,
350040, Краснодар, ул. Ставропольская, 149

²Уханьский текстильный университет, Ухань, Китай
e-mail: TemerdashevAZ@gmail.com

Развитие современного аналитического приборостроения уже сейчас обеспечивает аналитикам зачастую избыточные возможности в отношении идентификации и количественного анализа, вопрос анализа многих биогенных соединений, присутствующих на уровне единиц нанogramмов по-прежнему остается открытым ввиду необходимости предварительной очистки и концентрирования проб для избавления от матричных компонентов и повышения чувствительности, эффективности и селективности при определении биогенных компонентов с использованием ВЭЖХ-МС.

В настоящем докладе рассмотрены основные подходы к дериватизации биогенных аминов и стероидных гормонов для их дальнейшего ВЭЖХ-МС определения. Показаны основные сложности, перспективы и предполагаемые векторы развития аналитической дериватизации как в целях целевого анализа, так и при проведении нецелевого скрининга.

На рассмотренных примерах новых дериватирующих агентов показано, что несмотря на выросшую чувствительность, зачастую может существенно усложниться процедура пробоподготовки, что будет являться негативным фактором, повышающим риск получения недостоверных данных. Кроме того, показано, что даже для ряда перспективных дериватирующих реагентов возникают большие сложности со стабильностью как производных, так и исходных соединений.

В представленной работе отмечается неоднозначное влияние дериватирующего реагента на параметры удерживания аналитов.

Особую сложность вызывают потенциально перспективные реагенты, способные образовывать не только несколько вариантов производных (моно-, ди- и три), но и формировать изомеры (например, син- и анти- формы), что наглядно демонстрируют описанные ранее оксимы стероидных гормонов и производные гидрозинов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 24-43-00003) и NSFC (22361132526).

РАЗВИТИЕ РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОГО МЕТОДА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВАЛЕНТНОГО СОСТОЯНИЯ И ФОРМ ВХОЖДЕНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ

Чубаров В.М., Финкельштейн А.Л.

*Институт геохимии им. А.П. Виноградова Сибирского отделения Российской академии наук,
664033, Иркутск, ул. Фаворского 1А,
e-mail: chubarov@igc.irk.ru*

Исследование влияния химической связи на параметры рентгеновских эмиссионных спектров позволило существенно расширить область применения рентгенофлуоресцентного метода при анализе объектов природного и техногенного происхождения. Был разработан ряд методических рекомендаций, позволивших оценивать:

- формы вхождения серы в сульфидных рудах, золах и концентратах углей^{1,2}, марганца в марганцевых рудах, железомарганцевых конкрециях и кобальтомарганцевых корках³, меди в медных рудах по соотношению интенсивностей сателлита $K\beta'$ и линии $K\beta_{1,3}$;
- валентное состояние железа в горных породах, железных рудах, золах и концентратах углей², марганца в марганцевых рудах, железомарганцевых конкрециях и кобальтомарганцевых корках³ по соотношению интенсивностей линий $K\beta_5$ и $K\beta_{1,3}$;
- формы вхождения платины в катализаторах на основе оксида алюминия⁴ по соотношению интенсивностей линия $L\alpha_2$ и $L\alpha_1$, а также уширению линия $M\alpha_{1,2}$.

Разработанные методики могут быть использованы как при фундаментальных исследованиях окислительно-восстановительных условий формирования руд и пород, так и в различных областях промышленности, в том числе при оптимизации процессов добычи руд, переработке и утилизации отходов технологических процессов.

Литература

1. Chubarov V.M., Amosova A.A., Finkelshtein A.L. *X-Ray Spectrometry*, 2016, **45**, 352.
2. Chubarov V.M., Amosova A.A., Finkelshtein A.L. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 2020, **163**, 105745.
3. Chubarov V. *Minerals*, 2023, **13**, 1329.
4. Chubarov V.M., Finkelshtein A.L., Skornikova S.A. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 2023, **209**, 106803.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-23-00449, <https://rscf.ru/project/23-23-00449/>) с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Изотопно-геохимических исследований» Института геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН.

ДВА ТИПА СЕНСОРНЫХ ПРИБОРОВ, ПОЗВОЛЯЮЩИХ ПРОВОДИТЬ СЕЛЕКТИВНЫЙ АНАЛИЗ

Шапошник А.В.^а, Звягин А.А.^а, Арефьева О.А.^а, Васильев А.А.^б

^а*Воронежский государственный аграрный университет,
394087, Воронеж, ул. Мичурина, 1,
e-mail: a.v.shaposhnik@gmail.com*

^б*Государственный университет «Дубна»,
141908, Дубна, ул. Университетская, 19*

Компактные недорогие автоматизированные сенсорные анализаторы газов или жидкостей могут обеспечить проведение непрерывного мониторинга в труднодоступных местах. Условно можно разделить эти устройства на два типа. Первый из них использует высокоселективные сенсоры. В этом случае каждый из возможных аналитов определяется своим сенсором. Преимуществом такого типа прибора является легкость калибровки, возможность простой замены одного из сенсоров в случае неисправности без необходимости перекалибровки всей системы. Недостатком данного подхода является весьма ограниченный выбор высокоселективных сенсоров. Наша группа разработала высокоселективные газовые сенсоры сероводорода¹ и водорода².

Второй тип приборов («электронный нос», «электронный язык») основан на использовании малоселективных сенсоров. В этом случае анализаторы должны включать несколько сенсоров, объединенных в единую систему (sensor array) или даже один малоселективный сенсор, работающий в нестационарном режиме и за счет этого получающий дополнительную информацию об анализируемой среде. Преимуществом данного типа приборов является возможность селективного анализа среды за счет единственного сенсора, что снижает энергопотребление и увеличивает продолжительность автономной работы прибора. Однако для реализации данного подхода необходимо решить ряд научных и технических проблем. В частности, необходимо создать специальные алгоритмы обработки многомерных данных. В работах нашей группы был проведен анализ газовых смесей с помощью единичного малоселективного полупроводникового сенсора³, усовершенствованы имеющиеся алгоритмы обработки данных и разработаны принципиально новые.

Литература

1. Shaposhnik A.V. et al. *Chemosensors*, 2021, **9**, 203.
2. Рябцев С.В., Шапошник А.В. *Патент 2096775 РФ*, 1995.
3. Shaposhnik A.V. et al. *Sensors&ActuatorsB*, 2020, **334**, 129376.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-23-00329.

АВТОМАТИЗАЦИЯ И МИНИАТЮРИЗАЦИЯ ХИМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА С ПРИМЕНЕНИЕМ ГЛУБОКИХ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ

Шишов А.Ю.

*Санкт-Петербургский государственный университет,
198504, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7/9
e-mail: andrey.shishov.rus@gmail.com*

Глубокие эвтектические растворители (ГЭР) представляют собой новый тип перспективных, экологически безопасных растворителей, которые изготавливаются из двух или более веществ, которые в совокупности образуют жидкость с более низкой температурой плавления, чем у каждого из отдельных компонентов. Эти растворители обладают уникальными физико-химическими свойствами и привлекают внимание исследователей в различных областях. ГЭР широко используются в химии, биологии, фармацевтике и других областях благодаря своей способности заменять традиционные органические растворители. Экологическая безопасность, простота приготовления в лаборатории и дешевизна ГЭР привели к тому, что в последнее время они находят все более широкое применение в аналитической химии. Наиболее широко ГЭР находят применение в аналитической химии в микроэкстракционных методах выделения аналитов различной природы из разнообразных и сложных объектов анализа.

В докладе будут обсуждаться как аналитические возможности и ограничения ГЭР в таких подходах к микроэкстракции, как классическая жидкостная микроэкстракция, капельная, дисперсионная, гомогенная, мембранная и другие виды микроэкстракции, так и вопросы образования, разрушения и устойчивости ГЭР. В докладе также будут представлены последние тенденции в области автоматизации химического анализа с использованием глубоких эвтектических растворителей, а также проблемы и ограничения, связанные с использованием ГЭР в химическом анализе и основные перспективы развития этого направления.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского Научного Фонда (проект № 22-73-10039). Научные исследования выполнялись в ресурсных центрах научного парка СПбГУ «Методы анализа состава вещества, Термогравиметрические и калориметрические методы исследования, Центр диагностики функциональных материалов для медицины, фармакологии и нанoeлектроники, Отдел прототипирования»

ПОЛУЧЕНИЕ МЕТАБОЛИЧЕСКИХ ПРОФИЛЕЙ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ В ПРИРОДНЫХ ОБЪЕКТАХ МЕТОДАМИ ХРОМАТОГРАФИИ И КАПИЛЛЯРНОГО ЭЛЕКТРОФОРЕЗА С УЧАСТИЕМ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ

Бессонова Е.А., Арасланова А.Т., Москвичев Д.А., Карцова Л.А.

*СПбГУ Институт химии,
СПб, Университетская наб.7/9, Россия
e-mail: Lena_pol@inbox.ru*

Важной задачей современной аналитической химии является получение и хемотрическая обработка хроматографических и/или электрофоретических профилей биологически активных веществ (БАВ) и выявление потенциальных доминирующих биомаркеров в объектах природного происхождения, представляющих собой сложные матрицы. В связи с этим актуальна разработка как эффективных способов извлечения и концентрирования их следовых количеств, так и поиск условий селективного и высокочувствительного определения аналитов. Интересные перспективы открываются с применением материалов с регулируемыми свойствами, т.н. «*smart materials*». К ним относят и ионные жидкости (ИЖ). Целью данного исследования явилось выявление аналитических возможностей ИЖ на основе имидазола для селективного извлечения, концентрирования и разделения БАВ в объектах природного происхождения. Уникальной особенностью ИЖ на основе имидазола является способность к различным видам взаимодействий с аналитами, что обуславливает их большой потенциал в качестве многофункциональных модификаторов хроматографических и электрофоретических систем. Применение гидрофильных ИЖ в качестве динамического модификатора неподвижной фазы C18 позволяет реализовать режим гидрофильной хроматографии для определения высокополярных аналитов в биологических объектах. Интересные перспективы использования имидазолиевых ИЖ в качестве компонентов мицелл и микроэмульсий выявлены в условиях МЭКХ и МЭЭКХ для разделения аналитов гидрофильной (*катехины*) и гидрофобной природы (*стероидные гормоны, полифенолы*). Введение ИЖ в состав псевдостационарных фаз способствовало значительному увеличению эффективности и селективности разделения аналитов, обеспечив возможность *on-line* концентрирования для снижения ПО. С другой стороны, ИЖ являются в ряде случаев прекрасной альтернативой летучим органическим растворителям в методах экстракции БАВ. Нами выявлены возможности ИЖ в качестве эффективных экстрагентов БАВ (*стероидные гормоны, пестициды, полифенолы*) в дисперсионной жидкостно-жидкостной и магнитной твердофазной микроэкстракции (степени извлечения – 64-99%).

Работа выполнена при поддержке РФФ, проект № 24-13-00378. Исследователи выражают благодарность РЦ МАСВ, «Нанотехнологии» и центру ИТКН Научного парка СПбГУ за технологическую поддержку исследований.

ПРИМЕНЕНИЕ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ С ДЕСОРБЦИОННЫМИ МЕТОДАМИ ИОНИЗАЦИИ ДЛЯ МОНИТОРИНГА КАТАЛИТИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

**Белоглазкин А.А.,^а Ржевский С.А.,^а Асаченко А.Ф.,^а
Бермешева Е.В.,^а Борисов Р.С.^{а,б}**

*^аИнститут нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН,
119991, Москва, Ленинский проспект 29,
e-mail: borisov@ips.ac.ru*

*^бРоссийский университет дружбы народов им. П. Лумумбы,
ул. Миклухо-Маклая, д. 6, г. Москва, Россия, 117198*

Онлайн мониторинг реакций с использованием масс-спектрометрии – быстро развивающееся направление органической химии, позволяющее изучать пути протекания химических процессов за счет детектирования их интермедиатов. Основным инструментом такого мониторинга обычно является масс-спектрометрия с ионизацией электрораспылением (ИЭР). Конструкция источника ИЭР позволяет обеспечить непосредственную подачу в него реакционной среды и прямое детектирование промежуточных продуктов реакций. Вместе с тем, применение этого подхода может сопровождаться и протеканием окислительно-восстановительных процессов при распылении растворов аналитов, что может значительно исказить наблюдаемую картину. Альтернативой этого способа мониторинга может быть масс-спектрометрия с десорбционными методами ионизации - матрично-активированной лазерной десорбцией/ионизацией (МАЛДИ) «прямым анализом в реальном времени» (DART). В настоящей работе эти методы ионизации применены для детектирования интермедиатов двух реакций – катализируемых комплексами палладия теломеризации изопрена с метанолом и аддитивной полимеризации производных норборнена. Полученные результаты сопоставлены с данными мониторинга методом ИЭР.

Сравнительный анализ полученных массивов масс-спектральных данных показал их заметное различие. Масс-спектры МАЛДИ и DART реакционных сред обоих процессов содержали пики ионов, соответствующие координации катализатором различного числа молекул субстрата. Относительная интенсивность этих сигналов изменялась со временем, что свидетельствовало о протекании реакции и формировании ее конечных продуктов. В случае ИЭР вид масс-спектров от времени не зависел, детектировались только ионы являющиеся основными интермедиатами реакций, что, видимо, является следствием их образования непосредственно в источнике ионов при распылении реакционной среды.

РАЗВИТИЕ МЕТОДОЛОГИИ ВЫДЕЛЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ ВУЛКАНИЧЕСКИХ ПЕПЛОВ

Бржезинский А.С., Ермолин М.С., Шилобреева С.Н., Федотов П.С.

*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского (ГЕОХИ РАН),
11999, Москва, ул. Косыгина 19
e-mail: a.brzhezinskiy@gmail.com*

Наночастицы вулканического пепла – это мельчайшие частицы с размерами от 1 до 100 нм, способные перемещаться на большие расстояния и проникать в биологические системы, что подчеркивает важность их изучения. Одна из самых важных особенностей наночастиц вулканического пепла – высокая удельная поверхность, позволяющая сорбировать различные вещества, включая токсичные. Исследование показали, что концентрации ряда элементов (Ni, Zn, Cd, Ag, Sn, Se, Te, Hg, Tl, Pb, Bi) в частицах вулканического пепла в 10-500 раз превышают общее содержание этих элементов в исходных образцах.

Исследование наночастиц вулканического пепла – междисциплинарная задача, требующая применения комплекса методов пробоподготовки и анализа. Основной проблемой в изучении наночастиц вулканического пепла является низкая эффективность извлечения наночастиц из образцов. В данной работе получил развитие предложенный в ГЕОХИ РАН метод проточного фракционирования во вращающейся спиральной колонке (далее ВСК) для выделения наночастиц из полидисперсных образцов.

Оценена эффективность шести различных методик и двух элюентов: деионизированной воды и пирофосфата натрия для извлечения наночастиц из образца пепла Карымского вулкана (извержение 2013 года) с использованием ВСК.

Выделение пирофосфатом проводили в трех различных вариантах: с выдерживанием в 2мМ $\text{Na}_4\text{P}_2\text{O}_7$ в течение 24 часов и предварительным вымачиванием в 0,1М NaCl, без вымачивания в NaCl и без предварительного выдерживания в пирофосфате. Для сравнения эффективности методик также проведено выделение наночастиц вулканического пепла в деионизированной воде. В результате предварительное выдерживание в пирофосфате натрия и его использование в качестве элюента оказались оптимальными и обеспечивающими наибольшую эффективность выделения.

С использованием данной методики удалось увеличить массу получаемой нано фракции в 10 раз (с 0,1 мг до 1 мг) по сравнению с процессом выделения в деионизированной воде. Показано, что при элементе анализе наночастиц стало возможно определение ряда элементов, находящихся ниже предела обнаружения (Ag, Cs, Tu и др.). Расширение возможностей изучения элементного состава наночастиц вулканического пепла перспективно для решения фундаментальных задач геохимии.

СОРБЕНТЫ СПЕЦИФИЧНЫЕ К ЗЕАРАЛЕНОНУ, НА ОСНОВЕ КРЕМНЕЗЕМА, МОДИФИЦИРОВАННОГО ПОЛИМЕРАМИ С МОЛЕКУЛЯРНЫМИ ОТПЕЧАТКАМИ

Бурмистрова Н.А., Пиденко С.А., Меняйло И.Е., Пожаров М.В.

*Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского,
410012, Саратов, ул. Астраханская 83,
e-mail: naburmistrova@mail.ru*

Сорбционные материалы на основе кремнийорганических соединений широко используются для решения различных задач в науке и технологии^{1,2}. Высокие эксплуатационные качества, экологическая безопасность, уникальные структурные характеристики (стабильная структура, высокая удельная поверхность, регулируемая пористая структура) и возможность направленной модификации, в следствие наличия силанольных групп на поверхности, являются преимуществами материалов на основе диоксида кремния. Эффективным решением при создании высокоселективных сорбционных материалов является модификация поверхности частиц на основе оксида кремния (IV) полимерами с «молекулярными отпечатками» (молекулярно импринтированными полимерами, МИП).

В работе рассмотрены условия получения сорбционного материала для селективного извлечения микотоксина зеараленона (ЗЕА), являющегося загрязнителем зерновых культур. Изучено влияние различных факторов и выбраны оптимальные условия синтеза МИП, селективных к ЗЕА, на поверхности коммерчески доступных микрочастиц Aerosil® 200 методом ядро-оболочка с использованием (3-аминопропил)триэтоксисилана.

Изучены возможности синтеза и сорбционные свойства МИП, селективных к ЗЕА, полученных при использовании в качестве молекул шаблонов ЗЕА и его структурных аналогов.

Проведено квантовохимическое изучение возможности формирования ассоциатов между функционализированными мономерами органосиланов и исследуемыми молекулами шаблонами. Показано, что образование ассоциатов между молекулами шаблонами и органосиланами может быть обусловлено водородными связями между карбонильными и гидроксильными группами молекул шаблонов с атомами водорода в молекулах органосиланов.

Литература

1. Li H., Chen X. *Nanoscale*, 2021, **13**, 15998.
2. Лебедева О.В., Сипкина Е.И., *Известия вузов. Прикладная химия и биотехнология*, 2022, **13**, 192.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 22-16-00102.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРИМЕСЕЙ В КОБАЛЬТЕ И НИКЕЛЕ МЕТОДОМ АЭС-ИСП ПОСЛЕ СООСАЖДЕНИЯ НА ГИДРОКСИДЕ СКАНДИЯ

Бухбиндер Г.Л.^а, Пославская Е.С.^б, Коротков В.А.^б, Лисаков Ю.Н.^б

^а ООО «Группа Ай-Эм-Си»,
117638, Москва, Криворожская, 23, к3, офис 23;
e-mail: icp@imc-systems.ru

^бООО «Институт Гипроникель»,
195220, Санкт-Петербург, Гражданский проспект, 11

Существующие стандартизованные методы атомной спектromетрии для анализа кобальта и никеля: ГОСТ 13047, ГОСТ 6012, ГОСТ 8776, ГОСТ Р ИСО 7523 не соответствуют современным и перспективным нормам содержания примесей в этих металлах.

С целью улучшения нижних границ определяемых содержаний примесей, присутствующих в кобальте и никеле, исследовано их соосаждение на гидроксиде скандия.

Навески кобальта и никеля массой по 2,5 г растворяли в растворах азотной кислоты, разбавленной 1:1. Вводили 4 мл азотнокислого раствора скандия (500 мг/л) и добавляли раствор аммиака таким образом, чтобы в растворе образовались аммиачные комплексы кобальта и никеля, с одной стороны и осадок гидроксида скандия, с другой. Выделившийся осадок фильтровали, несколько раз промывали 1%-ным раствором аммиака и затем растворяли в соляной кислоте.

Соосаждение на гидроксиде скандия позволило отделить от кобальта и никеля следующие примеси: Fe, Cr, Mn, P, As, Bi, Sb, Sn, Te.

Анализ полученных растворов выполняли методом атомно-эмиссионной спектromетрии с индуктивно связанной плазмой (АЭС-ИСП) на спектрометрах iCAP 6500 Duo и iCAP PRO XP Duo производства Thermo Fisher Scientific (США).

Нижние границы определяемых содержаний примесей в кобальте и никеле методом АЭС-ИСП с применением соосаждения на гидроксиде скандия находятся на уровне 0,01-0,1 ppm.

Разработанный способ концентрирования примесей использован для разработки метода определения примесей в кобальте и никеле. Он может дополнить существующие ГОСТ 6012 и ГОСТ 8776, а также заменить ГОСТ Р ИСО 7523, использующий метод атомно-абсорбционной спектromетрии с электротермической атомизацией, который характеризуется недостаточной чувствительностью, низкой производительностью, применением и быстрым выходом из строя дорогостоящих расходных частей.

СЕНСОРНЫЕ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ ПЛАЗМОННЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ С УПРАВЛЯЕМЫМИ СПЕКТРАЛЬНЫМИ И РАСПОЗНАЮЩИМИ СВОЙСТВАМИ В АНАЛИЗЕ БИООБЪЕКТОВ И ОБЪЕКТОВ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА

**Веселова И.А., Яренков Н.Р., Самоделова М.В.,
Афонюшкина Е.Ю., Вершинина Ю.С., Капитанова О.О.**

*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы д.1 стр. 3,
e-mail: irina.veselova@mail.ru*

Спектроскопия гигантского, или поверхностно-усиленного, комбинационного рассеяния (ГКР) на сегодняшний день является высокочувствительным и селективным методом определения (в том числе многокомпонентным) широкого круга биологически активных веществ и экотоксикантов.

При этом широко известные ГКР-сенсоры на основе благородных металлов серебра и золота, несмотря на их порой уникальные аналитические характеристики обладают рядом недостатков, а именно 1) ограниченный круг определяемых соединений из-за несовпадения спектральных характеристик поверхности и аналита, 2) отсутствие сродства аналитов к поверхности наноструктур металла, 3) низкая воспроизводимость аналитического сигнала, которая в ряде случаев приводит к невозможности осуществления количественного анализа, 4) нестабильность при хранении сенсорных элементов на воздухе и в процессе эксплуатации, 5) фотокаталитическая способность к деградации компонентов индикаторных систем и самих определяемых аналитов, 6) токсичность поверхностей ГКР-активных поверхностей на основе наночастиц металлов по отношению к ряду биологических объектов при необходимости выполнения анализа *ex vivo* или *in vivo*.

По мнению авторов доклада, перспективным подходом, позволяющим решить вышеописанные проблемы и в значительной степени расширить аналитические возможности метода ГКР, является разработка фундаментальных подходов к созданию индикаторных систем и структурированных на наноуровне поверхностей, обладающих заданными (требуемыми для актуальных аналитов) оптическими характеристиками.

В рамках настоящего доклада будут прежде всего обсуждены перспективы ГКР-сенсорных систем в анализе биологических объектов и объектов экологического мониторинга.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ 23-13-00276.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОРБЦИОННОЙ ЁМКОСТИ ПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДОМ ОКСИТЕРМОГРАФИИ

Воробьёва М.Ю.,^{а,б} Зуев Б.К.,^а Философов Д.В.^б

^а*Институт геохимии и аналитической химии
им. В.И. Вернадского Российской академии наук (ГЕОХИ РАН), 119991,
г. Москва, ул. Косыгина 19, Россия
e-mail: vmi.chemist@mail.ru*

^б*Объединенный институт ядерных исследований (ОИЯИ),
141980, Московская область, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6, Россия*

В настоящее время классические методы определения характеристик пористых материалов ставят перед исследователями множество ограничений, в частности, время и стоимость анализа единичного образца. Нами предлагается новый подход к оценке сорбционной ёмкости пористых материалов (сорбентов) на основе метода окситермографии¹. Сущность которого основана на циклических процессах сорбции кислорода из воздуха при остывании образца и дальнейшей десорбции кислорода при программируемом нагреве в потоке инертного газа. Аналитическим сигналом является кинетическая кривая высокотемпературной десорбции кислорода (рис.1). Для апробации предлагаемого подхода в качестве пористых материалов использованы природные сорбенты (цеолиты) двух различных месторождений - Хонгуруу и Холинское.

В результате исследований рассчитана масса кислорода, приходящаяся на 1 грамм исследуемых пористых материалов, то есть их сорбционная емкость. Для цеолита из месторождения Хонгуруу составило $(7.70 \pm 0.3) \cdot 10^{-7}$ грамм, а для Холинского $(31.3 \pm 1.1) \cdot 10^{-7}$ грамм, соответственно.

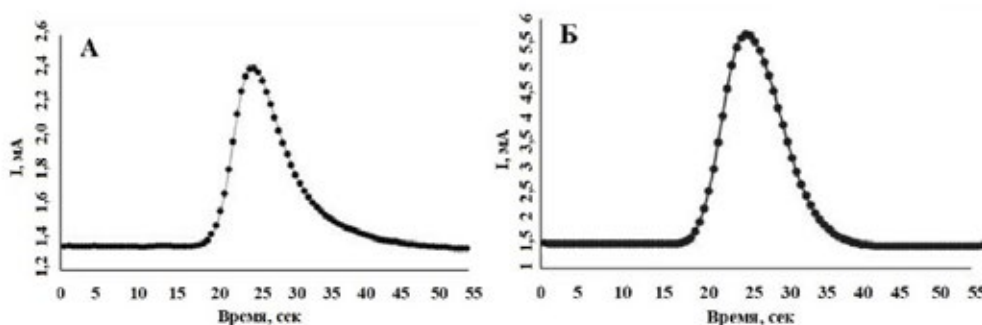


Рисунок 1. Кривые выделения десорбированного кислорода с поверхности цеолита из месторождения Хонгуруу (А), Холинское (Б).

Литература

1. Зуев Б.К. Патент РФ, № 2411509, 2010.

ПОДХОДЫ К СОЗДАНИЮ МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НЕПОДВИЖНЫХ ФАЗ ДЛЯ ЖИДКОСТНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕРНЫХ МАТРИЦ

Горбовская А.В., Талипова И.И., Тимичев А.А., Ужель А.С., Шпигун О.А.

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Химический факультет,
Россия 119991, Москва, Ленинские горы, 1, стр. 3
e-mail: gorbovskaya_av@mail.ru*

Относительно новым направлением в области создания неподвижных фаз для ВЭЖХ является разработка многофункциональных сорбентов, которые обеспечивают удерживания аналитов сразу по нескольким механизмам. Они позволяют решать более широкий круг задач по сравнению с классическими фазами, подходящими для работы лишь в одном режиме. Однако, недостатком подавляющего большинства многофункциональных сорбентов является ограниченный диапазон стабильности рН, что связано с использованием в качестве матрицы — силикагеля. Использование при синтезе таких сорбентов матриц, стабильных во всём диапазоне рН, приведёт к возможности их использования с сильноокислыми и сильнощелочными элюентами. Кроме того, сорбенты с сильными ионообменными группами возможно будет использовать в ионной хроматографии с подавлением фоновой электропроводности — чувствительном методе определения ионов.

В работе оценена перспективность подходов к ковалентному закреплению различных функциональных слоёв для создания многофункциональных сорбентов на основе полистирол-дивинилбензола. Среди изученных подходов — гиперразветвление, а также прививка полиэтиленimina с последующей кватернизацией его аминогрупп глицидом или закрепление полиэлектролитных цепей, формируемых *in situ* из вторичного амина и диэпоксида. Разработанные многофункциональные сорбенты позволяют работать в обращенно-фазовом и гидрофильном режимах, а также в режиме ионообменной хроматографии, в том числе ионной хроматографии с подавлением.

Показана возможность разделения многокомпонентных смесей анионов в режиме ионной хроматографии с подавлением, включая неорганические, в том числе сильнополярные анионы, и анионы органических кислот; в гидрофильном режиме — смесей азотистых оснований и нуклеозидов, водорастворимых витаминов, аминокислот, сахаров и сахарозаменителей, а в обращенно-фазовом — алкилбензолов, фенолов и жирорастворимых витаминов. Продемонстрирована применимость сорбентов для анализа широкого круга объектов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 20-13-00140.

ЭКСТРАКЦИОННО-ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ АЛКИЛИРОВАННЫХ ДИФЕНИЛАМИНОВ В МОТОРНЫХ МАСЛАХ

Громыко С.Н., Заяц М.Ф.

*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4,
Минск, 220030, Республика Беларусь,
e-mail: siarheihramyka@gmail.com*

Алкилированные дифениламины (далее – АДФА) являются важными антиоксидантными присадками в моторных маслах, которые подвержены деградации в результате воздействия факторов окружающей среды. ГХ-МС хроматограммы моторных нефтяных масел характеризуются присутствием гребенки неразрешенных пиков, соответствующих сотням веществ, в том числе АДФА, которые не могут быть разделены методами классической хроматографии^{1,2}. Таким образом, идентификация АДФА и последующие судебные исследования на предмет определения источника происхождения видоизмененного моторного масла, дифференциации масел и мониторинга степени видоизменения масел представляют собой довольно сложные аналитические задачи.

В настоящем исследовании было установлено, что предварительная селективная жидкостная экстракция АДФА из масел подкисленным раствором ацетонитрила позволяет получить чистые экстракты аминов, ГХ-МС хроматограммы которых (Рис. 1) легко интерпретируемы в результате визуального сравнения полученного профиля распределения АДФА с ранее опубликованными данными^{3,4}. Тем самым, определение отличительных признаков компонентов присадки и их ГХ-МС распределение дает важную информацию для судебных исследований.

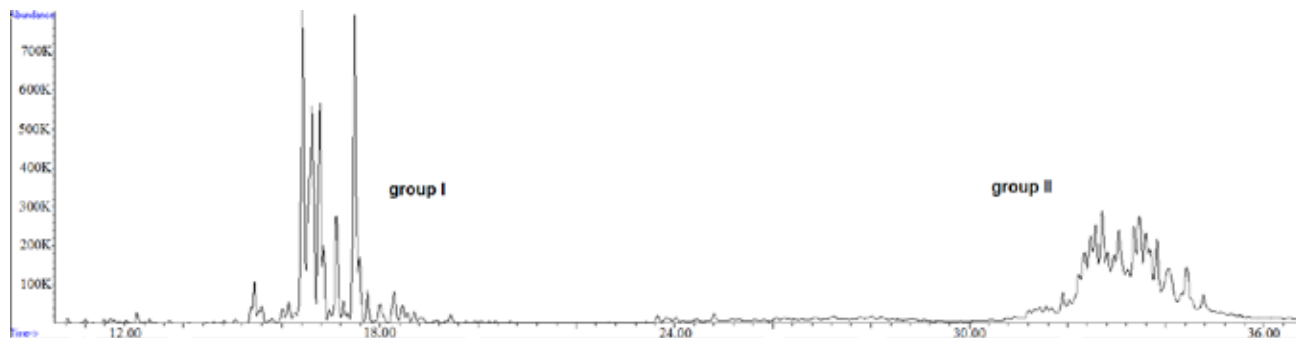


Рис. 1 ГХ-МС распределение АДФА.

Литература

1. Rudnick L.R. Lubricant additives: chemistry and applications, 2nd edn. Chemical Industries, 2009.
2. Kaplan I.R. Fingerprinting of high boiling hydrocarbon fuels, asphalts and lubricants. Environmental Forensics. 2001; 2: 231-248.
3. Gatto V.J., Elnagar H.Y. Redesigning alkylated diphenylamine antioxidants for modern lubricants. Lubrication Science. 2007; 19: 25-40.
4. Zhang Z., Sverko E. Determination of substituted diphenylamines in environmental samples. Anal Bioanal Chem. 2016; 408: 7945-7954.

РАЗРАБОТКА КОЛОРИМЕТРИЧЕСКОЙ ШКАЛЫ ДЛЯ БЕЗГРАДУИРОВОЧНОГО АНАЛИЗА БИОЛОГИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЕЙ ПРИ ПОМОЩИ ОПТИЧЕСКИХ СЕНСОРОВ

Грязев И.П., Пешкова М.А.

Санкт-Петербургский государственный университет, 198504,
Санкт-Петербург, Университетский проспект, 26
e-mail: iv.gryazev@gmail.com

Одним из направлений развития аналитической химии является миниатюризация устройств измерения. Развитие этой тенденции в области анализа содержания отдельных ионов нашло отражение в активной разработке и применении объемных ионоселективных колориметрических сенсоров (оптодов), не превосходящих по своим размерам нескольких миллиметров. Одним из достоинств оптодов является возможность проведения неинвазивного анализа с использованием методов дистанционного регистрирования аналитического сигнала.

Существенным недостатком данных сенсоров является необходимость в относительно частом проведении переградуировки. Это вызвано протекающей фотодеградацией компонентов в сенсорной фазе и их вымыванием в водный раствор.

В данной работе предлагается решение данной проблемы – создание колориметрической шкалы, состоящей из оптодов с фиксированным значением аналитического сигнала и включенной в сенсорный массив (Рис. 1А). Были исследованы массивы полимерных оптодов, селективных к Na^+ и Cl^- и применимых для анализа потовой жидкости. По результатам первичной разовой градуировки устанавливалось внутреннее соответствие аналитический сигнал – содержание аналита, на основании которого далее проводился безградуировочный анализ (Рис. 1Б).

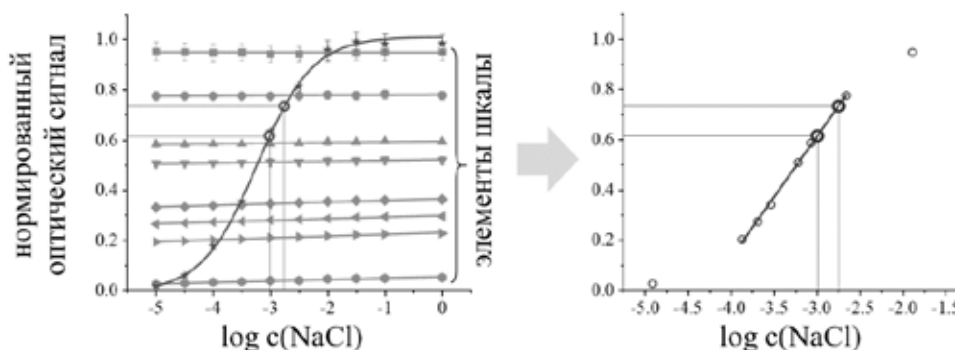


Рисунок 1. Получение колориметрической шкалы для проведения анализа.

Была продемонстрирована применимость колориметрической шкалы для проведения анализа неизвестных образцов и использования в составе сенсорного устройства.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект №20-73-10033П.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА МИНЕРАЛОВ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДОМ ЛА ИСП МС

Дрогобужская С.В., Новиков А.И.

*Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им И.В. Тананаева ФИЦ КНЦ РАН,
184209, г. Апатиты, Академгородок, 26а,
e-mail: drogosv@yandex.ru*

Масс-спектрометрия с лазерным пробоотбором (ЛА ИСП МС) – псевдонеразрушающий метод, позволяющий проводить анализ *in situ* минеральных зерен. Однако отечественная практика применения ЛА ИСП МС для решения данных задач не столь широка. В геохимии интересны акцессорные минералы циркон и бадделеит для изучения распределений редких и редкоземельных элементов (РЗЭ), а так же рудные минералы - сульфиды для определения элементов платиновой группы (ЭПГ), РЗЭ и др. Нами предложен способ спектрометрического анализа твердого материала [1], основанный на использовании одного стандарта для построения градуировочной зависимости, например NIST SRM 612 (с контролем параметров полученных кратеров), позволяющий расширить диапазон концентраций определяемых элементов. Этот подход позволил разработать методики определения редких и РЗЭ в цирконе, бадделеите, а также ЭПГ, РЗЭ, Cu, Co, Ni, As, Sb, Se, Te, Bi, Sn и др. в рудных минералах - пирите, пентландите, пирротине и других сульфидах и минералах ЭПГ. Для измерений использовали квадрупольный масс-спектрометр ELAN 9000 DRC-e, абляцию проводили с помощью установки UP-266 MACRO. Информация о концентрациях и распределении элементов в минералах важна для изучения источников происхождения металлов и понимания условий формирования комплексных месторождений.

Разработана методика определения изотопных соотношений $^{231}\text{Pa}/^{235}\text{U}$ в образцах бадделеита методом ЛА ИСП МС. В качестве стандартного образца использовали международный образец BCR-2.

ЛА ИСП МС применен для исследования функциональных материалов – германиевых стекол с градиентным изменением состава, нерастворимых титановых анодов, порошка тантала, легированных ниобатов и танталатов лития и др.

Литература:

1. Способ спектрометрического анализа твердого материала. Патент № 2811410. Дата регистрации 11.01.2024 г.

ЭКСТРАКЦИЯ ИОНОВ МЕТАЛЛОВ ИОННЫМИ ЖИДКОСТЯМИ НА ОСНОВЕ ИОННЫХ ПАВ

Елохов А.М.^а, Заболотных С.А.^{а,б}, Кочнева И.К.^а, Лыскова Ю.В.^а

^аПермский государственный национальный исследовательский университет,
e-mail: 614068, Пермь, ул. Букирева, 15. e-mail: elhalex@yandex.ru

^бПермский федеральный исследовательский центр УрО РАН,
614990, Пермь, ул. Ленина, 13

Ионные поверхностно-активные вещества широко используются для концентрирования ионов металлов, однако традиционные способы получения расслаивающихся систем (нагревание водных растворов, высаливание неорганическими солями и кислотами) для них применимо ограничено, поэтому целесообразным является получение ионных ассоциатов ионных ПАВ с противоионами, имеющими низкую энергию гидратации.

Исследована возможность получения расслаивающихся систем при высаливании хлорида алкилбензилдиметиламмония (катамин АБ, $[C_n H_{2n+1} N^+(CH_3)_2 CH_2 C_6 H_5] Cl^-$, $n=10-18$) действием бромидов, иодидов, перхлоратов и тиоцианатов щелочных металлов. Показана возможность количественного извлечения таллия (III) в системе с иодидом натрия, а также цинка, меди и кобальта в системе с тиоцианатом калия по анионообменному механизму.

В качестве аниона при образовании ионных жидкостей могут использоваться и салицилат- или сульфосалицилат-ионы. Максимальная степень извлечения железа (III), цинка, кобальта и меди (II) в системе с сульфосалициловой кислотой наблюдается при pH более 10, для системы с салицилатом натрия оптимальный pH находится в интервале 3–9. Экстракция ионов металлов сопровождается образованием салицилатных и сульфосалицилатных комплексов ионов металлов.

Изучена возможность разработки экстракционных систем на основе додецилсульфата натрия или сульфанола ($C_n H_{2n+1} C_6 H_4 SO_3 Na$, $n = 12-18$) и антипирина (1,2-дигидро-1,5-диметил-2-фенил-3Н-пиразол-3-он) в присутствии неорганических кислот. Исследование распределения ионов таллия (III), индия, галлия, железа (III) и лантана показало, что при низкой кислотности изученные ионы металлов экстрагируются в виде комплексных соединений с антипирином по координационному механизму, а при кислотности более 2 моль/л по анионообменному механизму в виде галогенидных ацидокомплексов с катионом антипирина.

ПРОТОЧНОЕ ВЫДЕЛЕНИЕ И КОНЦЕНТРИРОВАНИЕ МИКРОПЛАСТИКА ИЗ ПРЕСНЫХ И МОРСКИХ ВОД С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИСТЕМ «ВОДА-МАСЛО»

Ермолин М.С., Савонина Е.Ю., Марютина Т.А., Федотов П.С.

*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского Российской академии наук,
119991, Москва, улица Косыгина, 19,
e-mail: ermolin@geokhi.ru*

Водные экосистемы являются основным резервуаром для микропластика, поступающего в окружающую среду. Оценка содержания микропластика в природных водах необходима при оценке степени загрязнения водных объектов и потенциальных рисков для обитателей водоемов. Как правило, содержание микропластика в природных водах невелико, поэтому разработка новых эффективных методов разделения частиц, позволяющих селективно выделять и концентрировать микропластик из природных вод, является актуальной задачей. Настоящее исследование посвящено разработке нового метода выделения и концентрирования микропластика из природных вод во вращающейся спиральной колонке (ВСК) в режиме противоточной хроматографии с использованием двухфазных жидкостных систем «вода-масло». Определены параметры удерживания систем на основе растительных (касторового, тунгового, льняного, соевого, подсолнечного, кунжутного, рапсового, оливкового, терпентинного, лимонена) и синтетических (вазелинового и моторного) масел в ВСК и оценена возможность применения данных систем для выделения микропластика из проб воды. Изучено влияние скорости вращения ВСК и скорости потока подвижной фазы на удерживание масляной фазы в колонке. На примере микрочастиц полиэтилена различного размера (40–63, 63–100 и 100–250 мкм) показана высокая эффективность выделения микропластика (порядка 100%) в ВСК с использованием систем «вода-масло». Установлено, что эффективность выделения не зависит от солености проб воды, поэтому предложенный метод может быть использован для выделения микропластика как из пресных, так и морских вод. Разработанный метод выделения и концентрирования микропластика перспективен для очистки сточных вод от микропластика.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-13-00263.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА И ВЫЯВЛЕНИЕ ИСТОЧНИКОВ ОТЛОЖЕНИЙ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ В ХОДЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ НА ПРЕДПРИЯТИЯХ НЕФТЕПЕРЕРАБОТКИ

Жмаева Е.В., Рудяк К.Б., Шнейдер Б.В., Орлов С.В.

*Общество с ограниченной ответственностью
«Объединенный центр исследований и разработок», г. Москва,
e-mail: ZhmaevaEV@rdc.rosneft.ru*

В технологических процессах нефтепереработки практически всегда требуются жесткие условия – высокие температуры и давление. Они, в сочетании с агрессивными средами, такими, как хлористый водород, серосодержащие соединения, свободная сера и др., приводят к коррозии материалов оборудования и образованию отложений различного состава. Образование отложений создает угрозу внеплановых остановок оборудования и требует принятия превентивных мер для борьбы с ними.

Для разработки эффективных мероприятий, направленных на поиск источников происхождения отложений, необходима информация об их элементном составе. Выбор подхода для определения элементного состава, прежде всего, будет зависеть от их компонентного состава - соотношения органической и неорганической составляющих, а также состава органической фазы. Опыт работы с отложениями, отобранными из различных технологических узлов установок, показал целесообразность их разделения на следующие группы:

- отложения с органической составляющей не более 10 % масс.,
- отложения с органической составляющей 90 % масс. и более,
- отложения с органической составляющей 10- 90 % масс.

В данной работе изучено сочетание различных способов пробоподготовки образцов отложений для определения их элементного состава методами атомной спектроскопии (ААС, МС-ИСП, АЭС-ИСП): кислотное растворение в открытых системах, в автоклавах с резистивным и микроволновым нагревом, сплавление с последующим переводом плава в раствор. В зависимости от соотношения органической и неорганической составляющих отложений выбраны оптимальные варианты, позволяющие количественно переводить пробы отложений в раствор

Предложенныеходы апробированы и отработаны на образцах отложений, отобранных с различных узлов и агрегатов технологического оборудования нефтеперерабатывающих предприятий: теплообменники, холодильники, насосы, фильтры и пр. На основании выполненной работы предложен методический подход к определению элементного состава отложений, который позволил оптимизировать анализ и повысить результативность определения. Сформулирован подход к выявлению источников отложений на основе их состава.

УГЛЕРОДНЫЕ НАНОМАТЕРИАЛЫ: ВОЗМОЖНОСТИ И ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ДЛЯ КОНЦЕНТРИРОВАНИЯ РЗЭ И БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

**Захарченко Е.А., Казин В.И., Хлуднева А.О., Жилкина А.В.,
Догадкин Д.Н., Тюрин Д.А., Громяк И.Н., Колотов В.П.**

*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН,
119991, Москва, Косыгина, 19,
e-mail: e-zakharchenko@yandex.ru*

Включение стадии сорбционного концентрирования в процедуру анализа сложных геохимических объектов на сегодняшний день является, вероятно, наиболее действенным способом определения ультранизких концентраций редкоземельных и благородных элементов. К основным недостаткам известных сорбентов можно отнести низкую селективность извлечения и трудности десорбции элементов. Это существенно снижает эффективность их использования при анализе.

Углеродные наноструктурные материалы (УНМ) являются одними из наиболее перспективных сорбентов для концентрирования элементов, что обусловлено их сорбционной активностью, развитой поверхностью, возможностью обеспечения высокой степени чистоты, а также постоянно расширяющимся спектром доступных наноматериалов. Получение композитных материалов, ковалентная и нековалентная иммобилизация различных функциональных групп позволяет получать широкий спектр сорбентов, эффективных в том числе в кислых растворах. Это увеличивает селективность и полноту выделения аналитов. Кислотное разложение УНМ в микроволновой системе позволяет исключить стадию десорбции, упростить последующий МС/АЭС-ИСП анализ, обеспечив относительно высокий коэффициент концентрирования аналитов.

В сообщении представлены результаты исследования сорбционных свойств УНМ разных типов: нанотрубок, мезопористого углерода, нанокompозитов (ТГТУ, Тамбов), а также модифицированных форм УНМ, синтезированных непосредственно в ГЕОХИ РАН путем окисления минеральными кислотами, нековалентной и ковалентной модификации N- и N,S-содержащими реагентами. Рассмотрены особенности использования УНМ при проведении концентрирования, условия извлечения широкого спектра элементов, включая РЗЭ и благородные металлы, влияние макрокомпонентов и другие аспекты. Приведены примеры использования УНМ для концентрирования редкоземельных и благородных элементов из растворов разного состава, в том числе после разложения различного типа геологических образцов.

УЛЬТРАБЫСТРАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ МИКРОСКОПИЯ И ДИФРАКЦИЯ: ПРОГРЕСС ОТ СУБНАНОСЕКУНДНОЙ ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННОЙ СТРУКТУРНОЙ ДИНАМИКИ К ФЕМТОСЕКУНДНОЙ КВАНТОВОЙ ТОМОГРАФИИ

**Асеев С.А.^а, Миронов Б.Н.^а, Пойдашев Д.Г.^а, Рябов Е.А.^а,
Тарасов Ю.И.^б, Ищенко А.А.^б**

*^аИнститут спектроскопии РАН,
ул. Физическая, 5, Троицк, 108840 Москва,
^бРТУ-МИРЭА — Российский технологический университет,
Институт тонких химических технологий им. М. В. Ломоносова,
проспект Вернадского, 86, 119571, Москва, Россия
e-mail: aischenko@yasenevo.ru*

Просвечивающая электронная микроскопия на протяжении своей многовековой истории являлась мощным инструментом исследования веществ, находящихся преимущественно в равновесии или в близких к нему состояниях. Однако для получения полного представления об изучаемом предмете важно также изучить его динамические свойства. Лазерная спектроскопия с временным разрешением открыла возможность наблюдения широкого спектра быстрых процессов, относящихся к «сверхбыстрой науке», однако дифракционный предел в оптике серьезно ограничивает возможности чисто оптического эксперимента. Под воздействием мощных лазерных импульсов происходит «перестройка» вещества. Чтобы напрямую наблюдать структурные изменения, вызванные лазером, сначала необходимо обеспечить высокое пространственно-временное разрешение. Ключом к решению этой проблемы является использование очень коротких электронных (или рентгеновских) импульсов, синхронизированных с «оптическим запуском» быстрых процессов в образце. Сочетание нано-пико-фемтосекундных лазеров с электронными технологиями стало чрезвычайно плодотворным для наблюдения за поведением атомов и молекул в их естественных масштабах. В режиме визуализации эта концепция вскоре привела к созданию 4D-просвечивающей электронной микроскопии. В режиме дифракции электронов появилась уникальная возможность снимать атомно-молекулярные фильмы. Метод обладает высокой чувствительностью в сочетании с низким радиационным повреждением материала. Квантовая томография открыла новую страницу в изучении вещества с помощью ультракоротких электронных пучков. Здесь мы рассматриваем развитие сверхбыстрой просвечивающей электронной микроскопии и методов дифракции, которые позволяют изучать структурную динамику в сверхкоротких временных масштабах.

АДАПТАЦИЯ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОГО ИСТОЧНИКА ИОНОВ С НИЗКОЙ ГАЗОВОЙ НАГРУЗКОЙ ДЛЯ СОЕДИНЕНИЯ С ПОЛИКАПИЛЛЯРНЫМИ КОЛОНКАМИ

Кудрявцев А.С., Макась А.Л.

*Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука СО РАН,
Новосибирск, пр. Ак. Контюга, 3,
e-mail: KudryavcevAS@ipgg.sbras.ru*

В Лаборатории полевых аналитических и измерительных технологий ИНГГ СО РАН развивается малогабаритная аналитическая платформа на базе миниатюрного фильтра масс и источника ионов с химической ионизацией при атмосферном давлении (ХИАД) с низкой газовой нагрузкой для применения во внелабораторных условиях¹.

Ранее, при определении серосодержащих соединений в воздухе на уровне ПДК, было реализовано сопряжение детектора с термодесорбционной системой ввода и газохроматографической (ГХ) системой разделения с короткими капиллярными колонками². Из-за высокого газодинамического сопротивления использование капиллярных колонок имеет ряд ограничений в технической реализации. Представляется перспективным использовать поликапиллярные колонки (ПКК) в данной схеме для ГХ разделения. Предложены технические решения и произведена адаптация масс-спектрометрического источника ионов с ХИАД с низкой газовой нагрузкой для соединения с ПКК, обеспечивающая работу с входными потоками в широком диапазоне. Теоретически и экспериментально показано влияния потока анализируемого газа на эффективность ионизации аналитов. Показано улучшение характеристик адаптированной аналитической платформы с ПКК таких, как быстрдействие, чувствительность, последствие и предел обнаружения.

Литература

1. Makas A.L., Troshkov M.L., Kudryavtsev A.S., Lunin V.M. Miniaturized mass-selective detector with atmospheric pressure chemical ionization // Journal of Chromatography B. – 2004. – Т. 800. – № 1-2. – С. 63-67
2. Kudryavtsev A.S., Makas A.L., Troshkov M.L., Grachev M.L., Podyachev S.P. The method for on-site determination of trace concentrations of methyl mercaptan and dimethyl sulfide in air using a mobile mass spectrometer with atmospheric pressure chemical ionization, combined with a fast enrichment/separation system // Talanta. – 2014. – Т. 123. – С. 140-145

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований РФ: проект «Новые технологии внелабораторного химического анализа и контроля, прецизионных измерений физических полей природных и техногенных объектов» FWZZ-2022-0027.

ФИЗИЧЕСКИЕ ПОЛЯ В МЕТОДАХ ПРОБОПОДГОТОВКИ

Марютина Т.А., Шкинев В.М.

*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского Российской академии наук,
119991, Москва, ул. Косыгина 19,
e-mail: vshkinev@mail.ru*

Физические поля (гравитационное, магнитное, ультразвуковое, электрическое и другие) находят применение для интенсификации процессов пробоподготовки образцов перед определением целевых компонентов.

В докладе отмечены современные тенденции применения физических полей в методах пробоподготовки для увеличения эффективности традиционных экстракционных и сорбционных методов концентрирования и разделения элементов при анализе различных объектов. Перспективность применения физических полей в методах пробоподготовки подтверждается значительным числом современных публикаций в различных областях науки. В докладе наряду с литературным обзором будут представлены результаты работы последних лет сотрудников лаборатории концентрирования ГЕОХИ РАН.

Предложено использование ультразвуковых полей в режиме стоячих волн (суспензионные колонки) для анализа объектов окружающей среды (почвы, растворы и другие) и медицинских проб. Комбинированное использование ультразвукового и магнитного полей дает возможность выделять ДНК из почв с высоким содержанием органических веществ.

На многих примерах тестирования реальных промысловых образцов (нефти, нефтепродукты, промысловые слои) продемонстрировано, что применение волновых полей (магнитного и ультразвукового) на стадии пробоподготовки позволяет изменять физико-химические свойства анализируемых объектов: разделять водонефтяные эмульсии на отдельные фракции и изменять вязкость нефтяных образцов.

Отдельное внимание уделено применению волновых воздействий для интенсификации экстракционных (в том числе с использованием микроканалов) и сорбционных процессов. Для интенсификации процесса сорбции используются магнитные частицы (в том числе модифицированные ионными жидкостями и глубокими эвтектическими растворителями) в постоянном и переменном поле. Управление поведением частиц осуществляется в проточных ячейках особой конструкции.

Представленные результаты могут быть основой для развития новых высокоэффективных промышленных процессов.

Работа выполнена в рамках государственного задания ГЕОХИ РАН.

УЛЬТРАЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ ЭКСПРЕССНЫЕ МЕТОДЫ РЕГИСТРАЦИИ ТОКСИНОВ В ПРОДУКТАХ ПИТАНИЯ И МАРКЕРОВ КАРДИОЗАБОЛЕВАНИЙ В СЛЮНЕ

Малкеров Ю.А., Скирда А.М., Орлов А.В., Никитин П.И.

*Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук
119991, г. Москва, ул. Вавилова, д. 38
e-mail: gpiru@mail.ru*

За счет применения магнитных наночастиц (МЧ) в качестве меток биохимических реакций в сочетании с электронными методами регистрации таких агентов по нелинейному перемагничиванию^{1,2} разработаны экспрессные иммунохроматографические способы измерений ультрамалых концентраций микотоксинов в продуктах питания. В частности, достигнуты пределы обнаружения 2,3 пг/мл зеараленона (ЗЕА) и 11 пг/мл охратоксина А (ОТА) при 20-минутном времени анализа. Эксперименты подтвердили высокую специфичность и воспроизводимость анализов, а также высокую точность в областях как низких, так и высоких концентраций токсинов в образцах зерновой муки. Это связано с чрезвычайно высоким значением наклона калибровочных графиков: в пределах диапазона концентраций в 5 порядков сигнал электронного детектирования МЧ меняется в 1000 раз.

Для дальнейшего увеличения чувствительности и уменьшения времени анализа разработаны оригинальные биосенсорные системы на основе полевых транзисторов с графеновым покрытием и аптамерами, селективно взаимодействующими с микотоксинами или маркерами ряда заболеваний. Такой подход позволил измерять сверхнизкие концентрации охратоксина А в вине с рекордными³ пределом детекции - 1.4 пМ и временем отклика 10 с. На этой основе разработаны миниатюрные погружные аптасенсоры для неинвазивного анализа выделяемых жидкостей человеком, например слюны, где концентрация маркеров в 1000 раз меньше, чем в крови. Разработанные аптасенсоры обладают высокими селективностью и чувствительностью быстрого обнаружения маркеров заболеваний, в частности, кардиомаркеров для диагностики сердечной недостаточности на рекордном уровне концентраций 41 фг/мл (~4,6 фМ)⁴. Такие аптасенсоры с соответствующими аптамерами⁵ могут служить эффективным инструментом для мониторинга разнообразных химических соединений и широкого круга заболеваний.

Литература

1. Orlov A.V., et al. *Toxins*, 2024, **16**, 5.
2. Orlov A.V., et al. *Food Chemistry*, 2022, **383**, 132427.
3. Nekrasov N., et al. *Biosensors and Bioelectronics*, 2022, **200**, 113890.
4. Jaric S., et al., *Microchemical Journal*, 2024, **196**, 109611.
5. Kudriavtseva A. et al., *Biosensors*, 2024, **14**, 215.

ДВА В ОДНОМ: ЭЛЕМЕНТНЫЙ АНАЛИЗ НА МЕССБАУЭРОВСКОМ СПЕКТРОМЕТРЕ

Панчук В.В.,^{а,б} Семенов В.Г.,^{а,б} Григорьев М.В.,^а Кирсанов Д.О.^а

^аСанкт-Петербургский государственный университет, Институт химии,
198504, Санкт-Петербург, Университетский пр. 26

^бИнститут аналитического приборостроения РАН,
198095, Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, 31-33, лит. А.
e-mail: vitpan@mail.ru

Мессбауэровская спектроскопия является популярным методом анализа химических состояний резонансных атомов в твердых телах. Этот метод нашел широкое применение в материаловедении, медицинской химии, геологии, биологии, минералогии. Как правило, информация, полученная с помощью мессбауэровской спектроскопии, дополняется данными об элементном составе образцов. Для решения этой задачи привлекаются дополнительные методы такие как, например, рентгенофлуоресцентный анализ (РФА), который позволяет проводить прямое количественное определение элементов в твердых телах. Примечательно, что и в мессбауэровских, и в РФА спектрометрах применяются близкие схемы эксперимента, включающие схожие узлы для генерации и регистрации электромагнитного излучения. Однако в коммерческих мессбауэровских спектрометрах в качестве детекторов обычно используются сцинтилляционные или пропорциональные счетчики, которые имеют более высокую эффективность регистрации, чем полупроводниковые детекторы, а в РФА-спектрометрах - полупроводниковые детекторы с более высоким разрешением. Такая схожесть узлов спектрометров позволила сделать предположение, что мессбауэровский спектрометр может быть использован для прямой регистрации РФА-спектров, но с худшим разрешением по сравнению со спектрами, получаемыми на коммерческих РФА спектрометрах. Эта проблема может быть решена привлечением хемометрических алгоритмов обработки данных. В настоящем исследовании была апробирована возможность элементного анализа с помощью мессбауэровского спектрометра на примере определения содержания Ti, Cr, Mn, Ni, Nb и Mo в реальных образцах стали. Полученные результаты сравнивались с результатами количественного анализа, полученными на традиционном РФА спектрометре.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-23-00108.

Авторы выражают благодарность Научному парку Санкт-Петербургского университета «Методы анализа состава вещества» за проведение РФА измерений.

ИОНОСЕЛЕКТИВНЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ СЕНСОРЫ: ПРИНЦИПЫ ФОРМИРОВАНИЯ ОТКЛИКА И УПРАВЛЕНИЯ АНАЛИТИЧЕСКИМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ

Похвищева Н.В., Четверикова Д.А., Носов В.Г., Пешкова М.А.

*Институт химии СПбГУ, 198504, Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский пр-т, д. 26
e-mail: n.pokhvishcheva@spbu.ru; n.v.pokhvishcheva@gmail.com*

Благодаря высокой селективности, чувствительности и простоте миниатюризации, ионоселективные оптические сенсоры (ИСО, оптоды) являются перспективными инструментами во многих отраслях науки и технологии. Их сигнал является результатом ионного транспорта между фазой оптода и раствором, но при этом зависит либо от отношения, либо от произведения активностей двух ионов — аналита и парного иона. Возможное решение этой проблемы впервые предложили авторы работы [1]: было показано, что для создания оптода, чувствительного к индивидуальной ионной активности, необходимо стабилизировать межфазный потенциал на границе фаз оптода и раствора. Это было достигнуто добавлением в мембрану умеренно липофильного органического электролита (УЛОЭ), распределение которого между фазами стабилизирует межфазный потенциал. Однако для описания и прогнозирования отклика таких оптодов оказалось невозможным применение классической теории [2].

В данной работе описывается предложенная нами обобщенная теоретическая модель, которая применима как для предсказания и описания отклика сенсоров, содержащих УЛОЭ, так и для классических оптодов [3]. С использованием этой модели было успешно спрогнозировано и экспериментально подтверждено влияние природы активных компонентов оптода (ион-селективного лиганда, липофильного рН-индикатора и УЛОЭ) и их содержания на диапазон сенсорного отклика. Работоспособность предложенной модели открывает перспективы создания оптических сенсоров с заранее заданными свойствами. Кроме того, с ее помощью удалось оценить ионные коэффициенты распределения ионов УЛОЭ между водной фазой и фазой мембраны.

Литература

1. Stashkova A.E., Peshkova M.A., Mikhelson K.N. *Sensors Actuators, B Chem.*, 2015, **207**, 346.
2. Morf W.E. et al. *Pure Appl. Chem*, 1989, **61(9)**, 1613.
3. Pokhvishcheva N. V. et al. *ACS Sensors*, 2023, **8(8)**, 3086.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 20-73-10033П.

ЖИДКОСТНАЯ ЭКСТРАКЦИЯ В СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ РАСТВОРИТЕЛИ

Почивалов А.С., Булатов А.В.

*Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии,
198504, Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский проспект, д. 26,
e-mail: a.pochivalov@spbu.ru*

Супрамолекулярные растворители представляют собой наноструктурированные жидкости, образованные из молекул или ионов амфифильных поверхностно-активных веществ в результате двух последовательных процессов: агрегации амфифилов при превышении критической концентрации мицеллообразования и коацервации. Данные экстрагенты позволяют извлекать как полярные, так и неполярные вещества за счет электростатических, ван-дер-ваальсовых и π - π взаимодействий, образования водородных связей, что обуславливает их активное применение в аналитической химии. Такое разнообразие обеспечивается за счет множества функциональных групп и различных по полярности областей в составе супрамолекулярных агрегатов. Кроме того, растворители данного класса можно отнести к дизайнерским экстрагентам, так как их свойства контролируются в широких пределах путем варьирования природы амфифила, дисперсионной среды, агента коацервации, а также концентраций реагентов, вводимых в экстракционную систему.

Жидкостную экстракцию в супрамолекулярные растворители также называют мицеллярной. Первый ее этап, как правило, состоит во введении амфифила в пробу, в результате чего образуется изотропный раствор, содержащий мицеллы или везикулы. Вторым этапом предполагается введение определенного вещества (агента коацервации) или изменение температуры системы, что вызывает образование фазы экстрагента с выделением в нее аналитов. Стоит отметить, что полученная фаза может применяться и в экстрагировании целевых веществ из твердых проб, что расширяет область применения таких растворителей. Широкое распространение рассматриваемый метод разделения и концентрирования получил также в миниатюризованном и автоматизированном вариантах. В докладе будут представлены основные аспекты образования супрамолекулярных растворителей, особенности проведения экстракционных процессов с их участием и последние тенденции в данной области исследований.

Авторы выражают благодарность Российскому научному фонду, грант № 23-73-01266, (<https://rscf.ru/project/23-73-01266/>).

ЛЕТУЧИЕ ОРГАНИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ И БЕЛКИ КАК МАРКЕРЫ РАДИАЦИОННОЙ ОБРАБОТКИ БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

**Родин И.А.,^{а,б} Болотник Т.А.,^а Браун А.В.,^а Близнюк У.А.,^{в,г}
Борщеговская П.Ю.,^{в,г} Ипатова В.С.,^г Опруненко А.Ю.,^а
Черняев А.П.,^{в,г} Ихалайнен Ю.А.^а**

^аМосковский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет,
119991, ГСП-1, Москва, Ленинские горы, 1, стр.2,
e-mail: igorrodin@yandex.ru

^бФГАОУ ВО Первый МГМУ имени И.М. Сеченова Минздрава России (Сеченовский Университет),
кафедра эпидемиологии и доказательной медицины,
119435, Москва, Большая Пироговская, 2, стр.4

^вМосковский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет,
119991, ГСП-1, Москва, Ленинские горы, 1, стр.2

^гНаучно-исследовательский институт ядерной физики им. Д.В. Скобельцына МГУ,
119991, ГСП-1, Москва, Ленинские горы, 1, стр.2

Обработка ионизирующим излучением позволяет решать широкий круг задач, начиная от ингибирования прорастания корнеплодов при хранении до подавления патогенной микрофлоры пищевой продукции. Воздействие в дозах, соответствующих оптимальному диапазону доз, позволяет инактивировать патогенные микроорганизмы, сохранив при этом окружающие молекулярные структуры. Исследования, проводимые учеными с химического и физического факультета МГУ, направлены на установление маркеров радиационной обработки биологических объектов, концентрации которых могут быть положены в основу выбора критериев оптимального диапазона доз радиационной обработки биологических объектов. По результатам комплекса исследований установлено, что левая граница диапазона радиационной обработки мясной и рыбной продукции определяется содержанием спирта этанола, являющегося показателем развития бактериальных процессов в биообъектах после обработки. Правая граница диапазона определяется уровнем альдегидов, являющихся маркерами окисления липидов и белков. Спектрофотометрический метод расчета концентрации метмиоглобина в биообъектах, содержащих миоглобин, и метод ферментативного гидролиза трипсином нативной структуры белка (бычьего сывороточного альбумина) позволяют количественно оценить степень воздействия излучения в дозах до 10000 Гр на белки в зависимости от физических параметров излучения (доза, мощность дозы, вид излучения).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 22-63-00075.

ХЕМОМЕТРИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОМ АНАЛИЗЕ

Русанова Т.Ю., Мурсалов Р.К., Юрова Е.В.

*Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского,
410012, Саратов, ул. Астраханская, 83,
e-mail: tatyanyars@yandex.ru*

Широко распространенным фармакопейным методом является спектрофотометрия, применение которой, как правило, ограничено однокомпонентным анализом. Поэтому развитие новых подходов к многокомпонентному анализу сложных смесей спектрофотометрическим методом является одной из актуальных задач современной аналитической химии. В докладе будут рассмотрены предложенные авторами подходы к совмещению спектрофотометрии с хемометрическими методами.

Предложены способы отдельного спектрофотометрического определения синтетических пищевых красителей (СПК) в напитках и лекарственных препаратах, а также активных фармацевтических ингредиентов (АФИ) в глазных каплях, с использованием направленно выбранных хемометрических алгоритмов многомерной обработки данных (регрессии на главные компоненты и проекции на латентные структуры). Проведено моделирование спектральных данных на примере спектров поглощения СПК и АФИ методами регрессии на главные компоненты (РГК) и проекции на латентные структуры (ПЛС). Показано, что на параметры моделирования влияет выбор хемометрического метода, степень перекрывания спектров поглощения аналитов, условия фотометрирования, соотношение концентраций компонентов в смеси. На примере системы СПК E110 и E124 проведено сравнение методов Фирордта, первой производной при «нулевом пересечении», РГК и ПЛС; показано, что хемометрические алгоритмы характеризуются наименьшей погрешностью определения.

Разработаны методики спектрофотометрического определения СПК E110 и E122 в препарате «Трависил»; красителей E110 и E124 – в препарате «Стрепсилс»; E110, E122 и E102 – в напитке «YUPI»; E102 и E110 в – непрозрачных напитках в сочетании с магнитной твердофазной экстракцией; нафтизина и дифенгидрамина в глазных каплях различных производителей.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-23-00519.

РАСПОЗНАВАНИЕ ОБРАЗЦОВ ВОД С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КИНЕТИЧЕСКОГО МЕТОДА «ОТПЕЧАТКОВ ПАЛЬЦЕВ»

Скоробогатов Е.В., Степанова И.А., Устюжанин А.О., Беклемишев М.К.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы 1,
e-mail: skoregy@gmail.com*

Более миллиарда человек в мире не имеют доступа к чистой воде, что делает актуальным поиск простых и дешевых методов оценки качества вод питьевого назначения. Для скринингового исследования вод целесообразно использовать методы «отпечатков пальцев», дающие интегральную характеристику образца без идентификации его отдельных компонентов. Нами предложен¹ вариант оптического метода «отпечатков пальцев», основанный на проведении индикаторных реакций в присутствии объекта. Для распознавания вод мы использовали реакции замещения атома хлора в карбоцианиновых красителях (пример структуры см. на рисунке), что сопровождалось постепенным изменением светопоглощения и флуоресценции в видимой и ближней ИК областях спектра. Протекание реакций контролировали, периодически фотографируя 96-луночный планшет с реакционной смесью; результаты обрабатывали методом линейного дискриминатного анализа (ЛДА).

Показали, что предложенный подход позволяет различить, по меньшей мере, 11 образцов природной воды из различных источников. Кроме того, продемонстрировали возможность установить факт загрязнения воды моторными маслами, при этом удалось различить образцы, содержащие масла, отличающиеся по характеристикам и производителям. В обоих случаях правильность различения после обработки результатов методом ЛДА составила 100%.

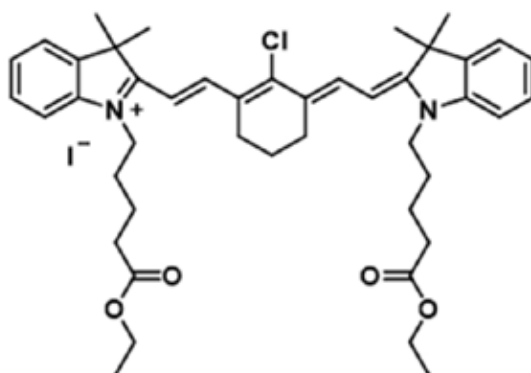


Рисунок 1. Структура карбоцианинового красителя

Литература

1. I. Stepanova, I. A., Lebedeva, A. N., Shik A. V. et al. J. Analyt. Chem., 2021, 76(12), 1397.

Работа выполнена при поддержке РФФ (проект № 20-13-00330-П).

КОБАЛЬТСОДЕРЖАЩИЕ ПИГМЕНТЫ В ЖИВОПИСИ К. МОНЕ

Соловьева Д.А.^{а,б}

^аВсероссийский художественный научно-реставрационный центр имени академика И.Э. Грабаря,
105005, Москва, улица Радио 17кб,

^бГосударственный музей изобразительных искусств имени А.С. Пушкина,
119019, Москва, улица Волхонка, 12,
e-mail: solovyeva.darya.a@gmail.com

Исследование химического состава материалов художественных произведений является важной задачей прикладной химии, которая помогает в вопросах экспертизы, реставрационных и консервационных мероприятий. Данная задача сопровождается двумя основными проблемами: размер образцов и их многокомпонентность.

Исследователями Национальной Лондонской галереи¹ выдвинута гипотеза о том, что Клод Моне в ранние периоды творчества в качестве фиолетовой краски использовал смесь из кобальта синего и красного органического пигмента, а в более поздний – готовые фиолетовые пигменты: кобальт фиолетовый $\text{Co}_3(\text{PO}_4)_2$ и кобальт фиолетовый светлый $\text{Co}_3(\text{AsO}_4)_2$. Исследованные коммерческие пигменты и готовые масляные краски различных фирм начала XX в. с торговым названием «кобальт фиолетовый светлый» в некоторых случаях помимо $\text{Co}_3(\text{AsO}_4)_2$ содержат соединение $\text{Mg}_x\text{Co}_{3-x}(\text{AsO}_4)_2$, точное происхождение которого в составе пигмента неизвестно^{2,3}.

Цель данного исследования – проверить гипотезу на художественных произведениях из собрания ГМИИ им. А.С. Пушкина авторства К. Моне из серии «Руанские соборы». Комплекс исследований проведен методами рентгенофлуоресцентного спектрального анализа (РФА), ИК-Фурье μ -спектроскопии, КР- μ -спектроскопии, сканирующей электронной микроскопии с энергодисперсионной рентгеновской спектроскопией (СЭМ-ЭДС), порошковой рентгеновской дифракции (РД).

По результатам настоящей работы внесены новые данные в общие представления о палитре и технике живописи К. Моне, а также разработана методика определения редкого магнийсодержащего пигмента «кобальт фиолетовый светлый» в многокомпонентной смеси.

Литература

1. Roy A. Monet's palette in the twentieth century: Water-lilies and irises. – National Gallery Technical Bulletin, 2007, **28**, 58.
2. Casadio F. Pablo Picasso to Jasper Johns: a Raman study of cobalt-based synthetic inorganic pigments. – Journal of Raman Spectroscopy. 2012, **43**(11), 1761-1771.
3. Corbeil M. C., Charland J. P., Moffatt E. A. The characterization of cobalt violet pigments. – Studies in Conservation, 2002, **47**(4), 237-249.

СТРУКТУРНО-АНАЛИТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ С ПОМОЩЬЮ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ РЕЗОНАНСНОГО ЗАХВАТА ЭЛЕКТРОНОВ

Терентьев А.Г., Хатымов Р.В., Дьячков А.В., Дудкин А.В., Юдин Н.В.

*Российски химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
125047 г. Москва, Миусская площадь, д. 9, стр. 1,
e-mail: terentev.a.g@muctr.ru*

Одним из наиболее информативных методов идентификации веществ и определения молекулярной структуры является масс-спектрометрия (МС), особенно в сочетании с газовой хроматографией (ГХ). В силу высокой чувствительности, хорошей воспроизводимости и простоте приборной реализации в подавляющем большинстве исследований МС применяется в (классическом) режиме электронной ионизации (ЭИ) с образованием положительных ионов (ПИ), а к отрицательным ионам (ОИ) обращаются редко и только для решения нетривиальных задач, не поддающихся МС ПИ. Процессы образования ОИ, ассоциирующиеся с присоединением избыточного электрона к вакантным орбиталям молекул, и пути распада ОИ, определяемые электронным средством образующихся фрагментов, фундаментально отличаются от процессов положительного ионообразования при удалении электрона из занятых орбиталей, зависящего от энергии ионизации молекул и их фрагментов. Это отличие предоставляет дополнительную возможность распознавать соединения по неповторимому ионному составу масс-спектров ОИ и уникальную информацию о пространственном и электронном строении молекул и ионов, в то же время требуя особых теоретических знаний, методических подходов и технических усовершенствований в приборном оборудовании для работы с ОИ.

В докладе обсуждается малозатратный способ дополнить стандартные возможности оборудования ГХ/МС ПИ в базовой комплектации режимом резонансного захвата электронов (РЗЭ) для записи масс-спектров ОИ¹. На ярких примерах демонстрируется, что уникальная для каждого соединения резонансная зависимость интенсивности выхода ОИ от энергии захватываемых электронов позволяет различать изомерные молекулы, наличие строгих правил фрагментации ОИ приводит к относительной малолинейчатости и предсказуемости масс-спектров ОИ РЗЭ, высокая чувствительность к электрофильным молекулам обуславливают целый ряд преимуществ метода МС ОИ РЗЭ, причем зачастую именно в тех случаях, когда МС ПИ ЭИ оказывается неэффективным.

Литература

1. Хатымов Р.В., Терентьев А.Г. *Известия АН. Сер. Хим.*, 2021. - № 4. – С. 605

МИКРОЭКСТРАКЦИОННЫЕ МЕТОДЫ В КОНТРОЛЕ КАЧЕСТВА ПИЩЕВЫХ ПРОДУКТОВ

Тимофеева И.И.

*Институт химии, Санкт-Петербургский государственный университет,
198504, Санкт-Петербург, Университетский пр. 26,
e-mail: i.i.timofeeva@spbu.ru*

Продовольственная безопасность, включающая контроль качества пищевых продуктов, является одним из направлений научно-технологического развития РФ. Во многом это обусловлено увеличением объема производства продуктов питания и применением большого количества химических веществ (антибиотиков, пестицидов, удобрений, гормонов, консервантов и др.) в процессе их производства. Потребность в таком контроле вызывает необходимость разработки высокоэффективных и доступных методов химического анализа пищевых продуктов. Учитывая сложный состав их матриц, предварительная стадия пробоподготовки является важным и неотъемлемым этапом химического анализа. Используя различные методы разделения и концентрирования, удастся устранить мешающее влияние сопутствующих компонентов и добиться концентрирования целевых аналитов, а их сочетание с чувствительными инструментальными методами позволяет проводить селективное определение различных веществ на уровне ПДК и ниже. Новые возможности для анализа пищевых продуктов открывают методы микроэкстракции, обеспечивающие быстрый массоперенос и высокую скорость установления межфазного равновесия при минимальных расходах экстрагентов. Среди экстрагентов последнего поколения можно выделить ионные жидкости, глубокие эвтектические растворители, поверхностно-активные вещества, природные экстрагенты, растворители с «переключаемой» гидрофильностью. В последние годы большое внимание уделяется индексу экологичности способа, расчет которого проводится при помощи различных метрик. В докладе будут представлены механизмы разработанных на базе СПбГУ микроэкстракционных методов, их характеристики и применение для решения конкретных задач.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда (проект № 24-23-00052, <https://rscf.ru/project/24-23-00052/>).

СЛОЖНОСТИ ИНТЕРПРЕТАЦИИ РЕЗУЛЬТАТОВ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЫСОКОГЛИКОЗИЛИРОВАННЫХ БЕЛКОВ

Чувашов А.А., Афонин М.Б., Удалов А.В.

*АНОО ВО «Университет Сириус»,
354340, Краснодарский край, ф.т. Сириус, ул. Таврическая, д.5, а/я 8
e-mail: chuvashov.aa@talantiuspeh.ru*

Исследования биотерапевтических белков усложняются с каждым годом, так же, как и увеличивается их роль в качестве лекарственных средств для лечения онкологических, орфанных и аутоиммунных заболеваний. Возрастающая сложность таких исследований связана как с усилением регуляторных требований^{1,2}, так и с усложнением структур молекул, применяемых для терапии. Многие из современных препаратов представляют собой уже не классические белки, как иммуноглобулины или инсулин, а гибридные структуры. Зачастую у подобного рода белковых конструкций основной вклад в их гетерогенность вносят олигосахариды (N- и O-гликаны). Учитывая возможность присоединения сотен разных гликанов на 1 участок белка, общую гетерогенность, например, эритропоэтина можно оценить четырёхзначным числом вариантов.

Совокупность современных методов изучения профиля гликозилирования белков (ВЭЖХ-МС с различными видами хроматографии, КЭ-МС, ВЭЖХ с флуоресцентным детектированием и т.д.) позволяет получить разнообразные результаты, что зачастую приводит к серьёзным трудностям в их интерпретации. Например, при изучении мест гликозилирования белка и оценке популяции олигосахаридов на пептидном уровне, может быть получена информация, не коррелирующая с получаемыми спектрами нативного белка, а также результатами исследования его субъединиц. Таким образом, интерпретация совокупности данных даже для одного препарата зачастую требует недели работы нескольких аналитических химиков высокой квалификации.

Научный коллектив Лабораторного комплекса НТУ «Сириус» за последние годы разработал несколько десятков методик контроля качества биотерапевтических белков, а также проводит экспериментальные и теоретические исследования по преодолению обозначенных сложностей.

Литература

1. Рекомендация Коллегии ЕЭК от 27.12.2022 № 49 «О Руководстве по составлению документации по химическому и фармацевтическому качеству для исследуемых лекарственных средств, применяемых в клинических исследованиях», 2022. - 61 с.
2. Решение Совета ЕЭК от 03.11.2016 № 89 «Об утверждении Правил проведения исследований биологических лекарственных средств Евразийского экономического союза», 2023. – 788 с.

ПРИМЕНЕНИЕ ПЬЕЗОСЕНСОРОВ С ПОЛИКОМПЗИТНЫМИ ПОКРЫТИЯМИ ДЛЯ ОЦЕНКИ МИКРОБИОЛОГИЧЕСКОЙ БЕЗОПАСНОСТИ МОЛОКА

**Шуба А.А.,^а Анохина Е.П.,^а Богданова Е.В.,^а Умарханов Р.У.,^а
Буракова И.Ю.,^а Михайлов Е.В.,^б Кучменко Т.А.^а**

*^аВоронежский государственный университет инженерных технологий,
394000, Воронеж, Проспект Революции 19,
e-mail: shuba@vsuet.ru*

*^бВсероссийский научно-исследовательский ветеринарный институт патологии, фармакологии и терапии,
394087, Воронеж, ул. Ломоносова, 114б*

Оценка микробиологической безопасности сырого молока осуществляется с помощью бактериологического исследования по графику, что не позволяет быстро выявлять изменения микрофлоры молока. Кроме того, исследования длительны, требуют квалифицированного персонала, большого количества реактивов и в связи с этим дорогостоящи. Поэтому разработка новых быстрых и простых способов оценки показателей микробиологической безопасности молока является актуальной и значимой задачей.

Цель работы заключалась в разработке способа оценки микробиологических показателей сырого молока по составу его газовой фазы с помощью пьезосенсоров с поликомпозиционными покрытиями.

Исследование газовой фазы проводили с помощью двадцати композитных покрытий пьезосенсоров на основе хроматографических фаз, хитозана, глубоких эвтектических растворителей, концентрата мицеллярного казеина. Параллельно для проб молока оценивали физико-химические и микробиологические показатели по ГОСТ (КМАФАнМ, содержание дрожжей и плесени, наличие патогенных микроорганизмов с помощью молекулярно-генетических методов).

По результатам корреляционного анализа выбраны сенсоры, параметры которых статистически значимо взаимосвязаны с микробиологическими показателями и не коррелируют с физико-химическими показателями проб молока. С помощью методов хемометрики предложены многомерные паттерны параметров сенсоров для определения КМАФАнМ, наличия патогенных микроорганизмов. Предложенный подход апробирован на пробах маститного молока, выводы подтверждены анализами по ГОСТ.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 22-76-10048.

БЕСКОНТАКТНЫЙ ХИМИЧЕСКИЙ СЕНСОР ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ НЕОРГАНИЧЕСКИХ КАТИОНОВ И АНИОНОВ

Юськина Е.А., Бойченко Е.С., Панчук В.В., Кирсанов Д.О.

*Институт химии, СПбГУ,
198034, Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский пр. 26
e-mail: yuskina.k@yandex.ru*

Перспективным направлением аналитической химии является разработка сенсорных устройств, работающих в бесконтактном режиме. Это связано с потребностью ряда отраслей в быстром, простом и недорогом определении химического состава различных сред. Одним из наиболее доступных технических способов, позволяющих получать информацию о составе анализируемых сред без физического контакта элементов сенсора с образцом, являются бесконтактные измерения проводимости, которые широко изучались в 1940-1950-х годах. В то время устройства использовали преимущественно для кондуктометрического титрования, но они не нашли широкого применения из-за трудностей с математической обработкой сигнала, который сложным образом зависит от диэлектрической проницаемости, проводимости, емкости и магнитных свойств образца. В дальнейшем технология развилась в несколько независимых методов и устройств: высокочастотную бесконтактную кондуктометрию, микроволновую спектроскопию, диэлектрическую спектроскопию, С4D детекторы (емкостно-связанное бесконтактное определение проводимости), микроволновые сенсоры. Недавно нами был предложен новый тип высокочастотных бесконтактных сенсоров. В отличие от описанных ранее методов, мы регистрируем спектр отклика сенсора в диапазоне частот переменного электрического тока для каждого конкретного образца и, используя методы обработки многомерных данных, получаем качественную и количественную информацию об образцах. К настоящему времени получены отклики такого сенсора в индивидуальных водных растворах 16 неорганических катионов (Li^+ , K^+ , Na^+ , Cs^+ , Rb^+ , Ca^{2+} , Mg^{2+} , Sr^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Zn^{2+} , Cd^{2+} , Cu^{2+} , Pb^{2+} , Nd^{3+} , Gd^{3+}) и 10 анионов (F^- , Cl^- , Br^- , I^- , OH^- , NO_3^- , OAc^- , SO_4^{2-} , H_2PO_4^- , HCO_3^-) в диапазоне концентраций 10^{-5} - 10^{-1} М. Изучена чувствительность и пределы обнаружения сенсора. Подробная информация об этих исследованиях будет представлена в презентации наряду с обсуждением возможных перспектив применения сенсора для анализа реальных объектов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-23-00114.

НОВЫЙ КАТИОННЫЙ МОДИФИКАТОР ЭЛЕКТРОФОРЕТИЧЕСКИХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕРА С ХИРАЛЬНОЙ МЕТКОЙ

Адамова А.А., Карцова Л.А., Фетин П.А.

*Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии,
198504, Санкт Петербург, Университетский пр., 26
e-mail: st117588@student.spbu.ru*

В настоящее время капиллярный электрофорез (КЭ) – активно развивающийся и широко востребованный аналитический метод. Развитие КЭ обусловлено, в существенной степени, созданием и применением новых модификаторов внутренней поверхности кварцевого капилляра.

Цель данного исследования – синтез новых многофункциональных катионных модификаторов – поли-11-а-крилоилоксиундецил-N-метилпиперидиния бромида (pAUMP-Br) и сополимера с хиральной меткой – ацилированным хинином (pAUMP-AQin·HCl) и выявление их аналитических возможностей при разделении биологически активных веществ с различными функциональными группами, включая энантиомеры.

Синтез мицеллярного полимера выполняли по схеме¹, изучены поверхностно-активные свойства pAUMP-Br – солюбилизационная емкость и критическая концентрация мицеллообразования (0.001 М), позволяющие сделать прогноз относительно возможности применения нового мицеллярного полимера в качестве модификатора в КЭ. Проведена сополимеризация AUMP и AQin для получения модификатора с хиральной меткой. Модификация стенок кварцевого капилляра после травления и промывки 0.001 М раствором полимера подтвердилась генерацией анодного электроосмотического потока при использовании обоих полимеров. Обнаружено, что новые мицеллярные полимеры позволяют реализовать различные режимы капиллярного электрофореза (*мицеллярная электрокинетическая хроматография и капиллярная электрокинетическая хроматография*), повышать селективность и эффективность разделения аминокислот, катехоламинов, стероидных гормонов, а также они способны участвовать в онлайн-концентрировании биологически активных аналитов.

Обсуждаются результаты энантиомерного разделения аминокислот и нестероидных противовоспалительных средств с применением нового полимера с хиральной меткой.

Литература

1. Fetin, P. A., et al. *Journal of Molecular Liquids*. 2022, **357**, 119085.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-13-00378.

РАЗДЕЛЕНИЕ И КОНЦЕНТРИРОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ МЕТОДОМ КАПИЛЛЯРНОГО ЭЛЕКТРОФОРЕЗА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОДИФИКАТОРОВ НА ОСНОВЕ ИМИДАЗОЛИЕВОГО КАТИОНА

Андросова А.В., Колобова Е.А., Карцова Л.А.

*Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии,
Россия, 198504, Санкт-Петербург, Университетский проспект, 26
e-mail: kravchenko161216@gmail.com*

Модификаторы на основе имидазолиевого катиона являются одними из универсальных в области капиллярного электрофореза (КЭ) и подходят для разделения большого количества биологически активных соединений, поскольку имеют в структуре положительный заряд, ароматическую систему, характеризуются легкостью введения различных заместителей в имидазолиевый фрагмент, а также могут участвовать в процессах внутрикапиллярного концентрирования.

Алкилимидазолиевые ионные жидкости зарекомендовали себя при формировании ковалентных покрытий стенок кварцевого капилляра, способствуя внутрикапиллярному концентрированию биогенных аминов. Комбинация свипинга и электростэкинга позволяет снижать пределы обнаружения (ПО) нейротрансмиттеров до 0.3-1 нг/мл. Дополнительно изучено влияние структуры покрытия на эффективность концентрирования.

Предложен вариант синтеза ковалентных покрытий на основе имидазолиевого катиона и β -ЦД. Введение β -ЦД в структуру покрытия позволяет осуществить совместное определение гидрофобных кортикостероидных гормонов и гидрофильных биогенных аминов, а также выполнить роль хиральной стационарной фазы при разделении энантиомеров кетопрофена.

Синтезированы модификаторы на основе алкилимидазола и β -ЦД (аналогично сформированному на стенках ковалентному покрытию) и выявлены их аналитические возможности в качестве псевдостационарной фазы при разделении кортикостероидных гормонов и в качестве хирального селектора при разделении энантиомеров лекарственных средств. Наличие положительно заряженного имидазолиевого кольца в структуре селектора обеспечивает дополнительный вклад в эффективность и селективность разделения энантиомеров кетопрофена и кеторолака. В найденных условиях предложен новый вариант гибридного on-line концентрирования энантиомеров кетопрофена и кеторолака (динамический рН скачок+свипинг), что позволило достичь факторов концентрирования 325-390 и снизить таким образом пределы обнаружения до 11-12 нг/мл для кетопрофена и 51-57 нг/мл для кеторолака.

ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ И МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ ДЛЯ ИЗВЛЕЧЕНИЯ И КОНЦЕНТРИРОВАНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ В УСЛОВИЯХ ТВЕРДОФАЗНОЙ МИКРОЭКСТРАКЦИИ

Арасланова А.Т., Василенко М., Бессонова Е.А., Карцова Л.А.

*СПбГУ Институт химии,
г. Санкт-Петербург, Университетский пр., 26, 198504
e-mail: araslanova1903@gmail.com*

Определение биологически активных веществ в природных объектах позволяет решать важные медико-диагностические, биохимические и экологические задачи. Однако сложность матрицы пробы, низкие уровни концентраций определяемых аналитов (нг/мл) требуют разработки высокоэффективных и селективных подходов к извлечению и концентрированию аналитов. Перспективным направлением является создание новых сорбентов на основе магнитных наночастиц (МНЧ) и их применение в методе магнитной твердофазной микроэкстракции (МТФМЭ). В качестве модификаторов особый интерес представляют ионные жидкости (ИЖ). ИЖ – это ионные немалекулярные растворители с регулируемыми свойствами, которые зависят от природы катиона и аниона в их составе. Сочетание ИЖ с МНЧ открывает возможности создания экспрессных методов извлечения за счет высокой сорбционной ёмкости НЧ и различных типов взаимодействий между ИЖ и аналитами.

Цель исследования – синтез сорбентов на основе НЧ магнетита, модифицированных имидазолиевыми ИЖ, и изучение возможностей их применения для концентрирования и извлечения различных по полярности биологически активных веществ. В качестве модельных систем выбраны полифенольные антиоксиданты и стероидные гормоны. Найдены условия их разделения методом ОФ ВЭЖХ с ДМД. Синтезированы МНЧ методом соосаждения солей Fe(II) и Fe(III) и стабилизированы покрытием олеиновой кислотой и SiO₂. Выявлены возможности гидрофобных ИЖ на основе имидазола в качестве модификаторов поверхности МНЧ в условиях ТФМЭ для извлечения аналитов. Оптимизированы факторы, влияющие на степени извлечения, с применением дизайна эксперимента. Установлено, что применение ИЖ [C₈MIM][BF₄] в качестве модификатора МНЧ в условиях МТФМЭ обеспечивает высокие степени извлечения исследуемых аналитов (64-98%).

Авторы работы выражают благодарность РЦ МАСВ, «Нанотехнологии» и «Инновационные технологии композитных наноматериалов» Научного парка СПбГУ. Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (гранта РНФ №24-13-00378)

РАЗРАБОТКА И КВАЛИФИКАЦИЯ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОЙ МЕТОДИКИ ВЕРИФИКАЦИИ АМИНОКИСЛОТНОЙ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ БЕЛКОВЫХ ПРЕПАРАТОВ

Афонин М.Б., Чувашов А.А., Удалов А.В.

АНОО ВО «Университет Сириус», 354340, Краснодарский край,
ф.т. Сириус, ул. Таврическая, д.5, а/я 8,
e-mail: afonin.mb@talantiuspeh.ru

Верификация (подтверждение) аминокислотной последовательности белковых препаратов является одним из ключевых методов структурной биологии, позволяющий подтвердить подлинность продукта¹. Только этот метод, с применением ВЭЖХ-МС-МС, способен подтвердить (а в случае подхода *de novo* – и установить) аминокислотную последовательность белковых препаратов. Для надёжной верификации приходится применять несколько ферментов и их комбинаций, нестандартные методики разделения, очистки, детекции. Большую роль при верификации играет программное обеспечение, особенно его подход к сборке сигналов пептидов и их фрагментов в аминокислотную последовательность, а также статистическая обработка получаемых результатов.

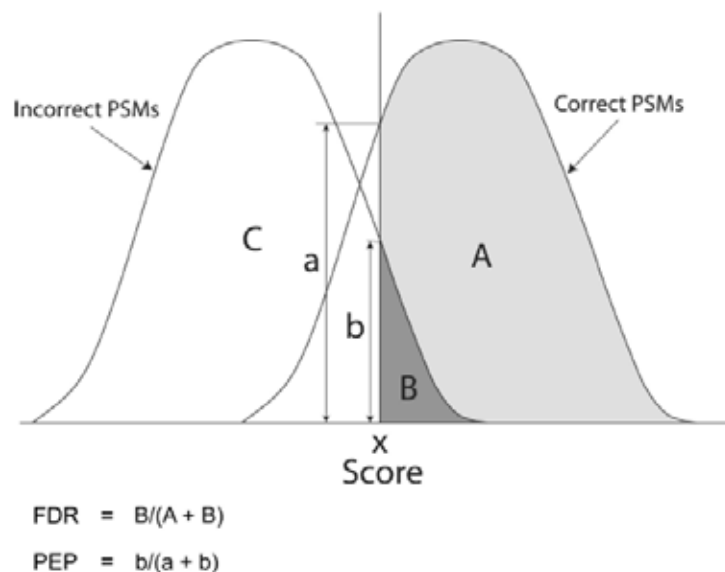


Рисунок 1. Расчёт основных статистических параметров – количество ложноположительных и ложноотрицательных результатов

Научный коллектив Лабораторного комплекса НТУ «Сириус» за последние годы разработал универсальную процессную и экономичную аналитическую платформу. Она позволяет путем применения нескольких ферментов за один анализ подтвердить аминокислотную последовательность большинства терапевтических белков (в т.ч. сильно модифицированных).

Литература

1. Решение Совета ЕЭК от 03.11.2016 № 89 «Об утверждении Правил проведения исследований биологических лекарственных средств Евразийского экономического союза», 2023. – 788 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ ГРАФЕНОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК В РАСТВОРАХ ДМСО И ДМФА МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Надиров М.Э.,^а Ахмедов М.А.,^{а,б} Рабаданов К.Ш.^б

^а Дагестанский государственный университет, Махачкала,
367000, ул. М. Гаджиева, 43а,
e-mail: ama.mag@mail.ru

^б Институт Физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН,
367025, Махачкала, ул. М. Гаджиева, 45^б.

В последние годы графеновые квантовые точки (ГКТ) выделяются среди других флуоресцентных наночастиц, благодаря своей биосовместимости, фотостабильности и низкой токсичности¹. Оптимальный способ получения ГКТ основан на синтезе оксида графена из глюкозы². В данной работе методами молекулярной спектроскопии (УФ и ближней ИК) исследованы оптические свойства ГКТ в растворах ДМСО и ДМФА. На рис.1 показаны различия в УФ и ближней ИК спектрах для исследуемых растворов в диапазоне 1100-300 нм.

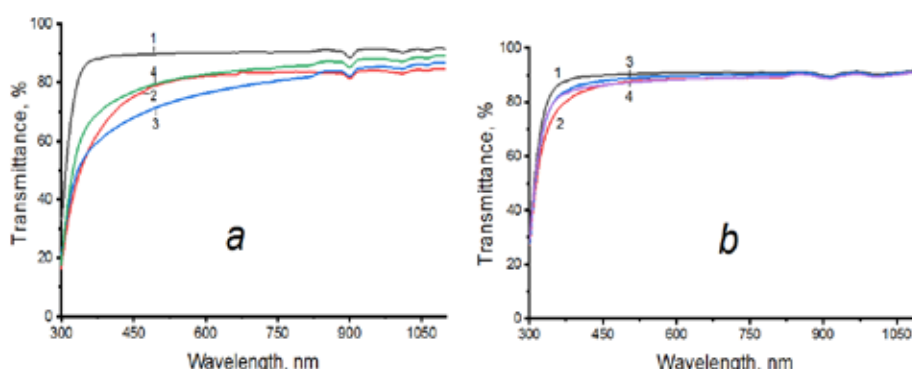


Рисунок 1. УФ и ближней ИК спектры в растворах а – ДМСО-ГКТ и б – ДМФА-ГКТ, снятые в чистом растворителе (1), в присутствии ГКТ, при обработке: механической (2), ультразвуковой в течении 5 мин (3) и 10 мин. (4).

Как видно, при добавлении ГКТ в ДМСО пропускание (рис.1.а) снижается до 40%, а в случае растворов ДМФА с ГКТ (рис.1.б) уменьшение на 10%. По-видимому, это связано с наиболее эффективным взаимодействием ГКТ с молекулами ДМСО, в сравнении с молекулами ДМФА. Данные различия могут быть вызваны химическим составом или свойствами растворителей, а также особенностями их взаимодействия с ГКТ. Дальнейшие исследования позволят лучше понять эти процессы и оптимизировать использование ГКТ в оптических материалах.

Литература

1. Cho H., Bae G., Hong V.H. *Nanoscale*, 2024, **16**, 3347.
2. Ахмедов М.А., Гафуров М.М., Рабаданов К.Ш., Атаев М.Б., Ахмедова А.Д. Патент 2796672, РФ, 2023.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-23-00247.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КАТЕХИНОВ В КОМБУЧЕ МЕТОДОМ ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

Бабаскина М.М.

*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», факультет химии,
Москва, Россия,
e-mail: m_babaskina@mail.ru*

Количественное определение многих компонентов, из которых состоит наша пища, независимо от того, являются ли они желательными (витамины, антиоксиданты, питательные вещества) или нежелательными (пестициды др., является одним из наиболее практических применений аналитической химии. В особенности это касается изучения новых природных биоактивных соединений, полученных путем ферментации растений, чье производство за последние годы сильно увеличилось.

В настоящее время объектом активных научных исследований является комбуча – чайный напиток, производимый путем ферментации подслащенного черного/зеленого чая с симбиотической культурой бактерий и дрожжей (SCOBY)¹. Чайный настой не только придает специфический вкус и аромат, но и содержит много важных для здоровья человека пищевых соединений, таких как полифенолы, кофеин, аминокислоты, витамины, углеводы и микроэлементы². Полифенольные катехины, входящие в состав чайных и других травяных напитков, являются хорошо известными природными мощными антиоксидантами, обладающими разнообразными фармакологическими эффектами³. В связи с благотворным влиянием природных антиоксидантов на организм человека при производстве ферментированных напитков на основе травяных экстрактов важно подобрать условия, позволяющие сохранить или увеличить содержание катехинов в конечном продукте.

В данной работе была отработана методика исследования ферментированных напитков с помощью высокоэффективной жидкостной хроматографии/масс-спектрометрии (ВЭЖХ/МС) для одновременной идентификации и количественного определения шести катехинов в их составе⁴. С использованием этой методики было изучено содержание катехинов в комбуче в зависимости от исходного субстрата и продолжительности ферментации.

Литература

1. Abaci N., Senol Deniz F.S., Orhan I.E., Food Chem. X. 2022. Vol. 14. P. 100302
2. Higdon J.V., Frei B., Crit. Rev. Food Sci. Nutr. 2003. Vol. 43, № 1. P. 89–143.
3. Yong Feng W., Curr. Drug Metab. 2006. Vol. 7, № 7. P. 755–809.
4. Bronner W.E., Beecher G.R., J. Chromatogr. A. 1998. Vol. 805, № 1–2. P. 137–142.

НОВЫЕ РЕШЕНИЯ В АНАЛИЗЕ ХИМИЧЕСКИХ РЕАГЕНТОВ, ПРИМЕНЯЕМЫХ ПРИ НЕФТЕДОБЫЧЕ

**Занозина И.И., Бабинцева М.В., Волкова Н.Е., Прокофьева О.В.,
Табачная Д.Г., Занозин И.Ю.**

*Средневолжский научно-исследовательский институт по нефтепереработке,
446200, г. Новокуйбышевск, ул. Научная, 1
e-mail: babintsevamv@sni.rosneft.ru*

Химические реагенты (ХР) различного агрегатного состояния, активно применяемые в процессе добычи, транспортировки и хранения нефтяного сырья, содержащие хлорорганические соединения (ХОС), хорошо очищают от отложений сопутствующее оборудование, нефти и т.п. Однако ХОС являются сильнейшими ядами, вызывающие коррозию оборудования в процессе переработки нефти. Поэтому необходимость контроля ХОС в химических реагентах, используемых на разных этапах нефтедобычи, является актуальной задачей.

Стандартные методы совершенно не предназначены для исследования проб химических реагентов, применяемых в нефтедобыче. Используемые ХР радикально отличаются по физико-химическим свойствам от типовой нефти НК-204⁰С, выделенной из традиционных нефтей, не только по фракционному составу, но и имеют другую фазовую форму, вплоть до твердых конгломератов или рассыпчатых состояний. Без предварительной пробоподготовки определить ХОС в ХР невозможно.

Для подготовки ХР к определению ХОС проведены исследования по применению в качестве экстрагента углеводородных растворителей, в которых предварительно определяли наличие ХОС. В результате подобран эффективный растворитель – нефрас – С-50/170, так как он менее токсичный, доступный, дешевый, не содержит ХОС и по фракционному составу близок к нефти. Для регулирования взаимной растворимости компонентов фаз, а также улучшения эффективности и селективности процесса экстракции ХОС в неполярный растворитель добавляли спирт. Эксперимент с бинарным растворителем проводили на модельных смесях с различной концентрацией индивидуальных ХОС, которые чаще всего применяются в ХР. В качестве основы модельной смеси применяли ХР, не содержащий ХОС (по паспорту на данный реагент). В процессе экстрагирования легкокипящие ХОС переходят в нефрас. Экстрагирование проводили в несколько этапов до полного отсутствия ХОС.

Разработанный способ пробоподготовки прошел апробацию на различных ХР, как жидких, так и твердых, сыпучих, с получением достоверных результатов по содержанию ХОС. Получен патент РФ.

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ИММУНОФЕРМЕНТНОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ГЕНТАМИЦИНА В МЯСЕ

**Бакай К.А., Сафронова В.А., Прийма А.Д.,
Нестеренко И.С., Емельянов И.А.**

*ФГБУ «Всероссийский государственный центр качества
и стандартизации лекарственных средств для животных и кормов» (ФГБУ «ВГНКИ»),
123022, Москва, Звенигородское ш., д.5.
e-mail: k.bakay@vgnki.ru*

Гентамицин – антибиотик широкого спектра действия из группы аминогликозидов. Избыточное и неконтролируемое применение этого препарата в животноводстве может в дальнейшем приводить к возникновению резистентности у патогенных микроорганизмов и тем самым наносить потенциальный вред здоровью человека и животных.

Для быстрой количественной оценки остаточного содержания терапевтических препаратов в продукции животноводства активно применяют метод иммуноферментного анализа.^{1,2} Он обладает высокой чувствительностью, быстротой проведения и позволяет анализировать одновременно несколько образцов.

Целью данной работы являлась разработка методики определения гентамицина в образцах говядины и мяса птицы.

В основе разработанной методики лежит метод прямого конкурентного иммуноферментного анализа. Были получены поликлональные сыворотки путем иммунизации кроликов синтезированными конъюгатами гентамицина с гемоцианином лимфы улитки и бычьим сывороточным альбумином. Для работы были отобраны наиболее специфичные сыворотки. Также были подобраны оптимальные концентрации реагентов и выбраны наиболее подходящие условия для проведения иммунохимической реакции. При оценке специфичности методики перекрестное реагирование с другими антибиотиками аминогликозидного ряда составило менее 1%.

Предел обнаружения составил 0,3 мкг/кг, а коэффициент вариации не превышал 8%. Время проведения анализа составило 15 минут при комнатной температуре. Процент извлечения находился в диапазоне 70-90%.

Литература

1. Development of an enzyme-linked immunoassay for the detection of gentamicin in swine tissues / Chen Y., Shang Y., Li X. et al. // Food Chemistry. – 2008. – V.108. – P. 304–309
2. Development of an enzyme-linked immunosorbent assay for the detection of gentamycin residues in animal-derived foods / Sheng W., Yang L., Wang J. et al. // Food Science and Technology. – 2013. – V. 50. – P. 204-209

ТЕСТ-ИНДИКАЦИЯ РАКЕТНЫХ ГИДРАЗИННЫХ ГОРЮЧИХ В УСЛОВИЯХ ЭКСПЛУАТАЦИИ

Островская В.М., Маркин В.А., Хвостов Д.Н., Балак Г.М.

ФГУ «25 Государственный научно-исследовательский институт химмотологии
 Министерства обороны Российской Федерации»
 121467, Москва, Молодогвардейская ул., д.10,
 e-mail: gmft@yandex.ru

Ракетные гидразинные горючие (РГГ), к которым относятся гидразин и 1,1-диметилгидразин (гептил), широко применяются в ракетно-космической технике¹, отнесены к 1-му классу опасности как суперэкоотоксиканты по воздействию на организм человека². При работе с РГГ в условиях производства, транспортировки, хранения и применения актуален экологический тест-контроль рабочих зон, помещений постоянного пребывания персонала и поверхностей оборудования на наличие утечек с помощью экспресс-тестов. Предельно-допустимая концентрация гептила в воздухе рабочей зоны составляет 0.1 мг/м³, в воде – 0.02 мг/дм³. Разработан набор индикаторных экспресс-тестов для обеспечения безопасности труда и предотвращения аварийных ситуаций на объектах инфраструктуры, эксплуатирующих РГГ (таблица 1).

Таблица 1. Характеристики тест-средств набора

Объект анализа	Тест-средство	Реагенты*	Диапазон определений
Воздух рабочей зоны	Индикаторная трубка ³	ТГМС	0.05–5 мг/м ³
Воздух помещения персонала	Пассивный химический индикатор ⁴	ТФТ	0.05–0.25 мг/м ³
Утечка РГГ	Индикаторный элемент	ТГМС ⁵	1 мкл/1 см ² и более
Водная среда	Индикаторная полоса	НТФТ-Ц	0.005–5 мг/дм ³
Промывочные воды	Индикаторные полосы	ТГМС-Ц ⁶	0.01–10; 10–500 мг/дм ³

* ТГМС – калия тетрагидро-12-молибдосиликат октагидрат $K_4H_4[Si(Mo_2O_7)_6] \cdot 8H_2O$;

ТФТ – 2,3,5-трифенил-2H-тетразолий хлорид; НТФТ-Ц – 3-(4-нитрофенил)-2,5-дифенил-2H-тетразолий хлорид, привитый на альдегидцеллюлозу; ТГМС-Ц – ТГМС, привитый на эпоксицеллюлозу.

Литература

1. Schirmann, J.-P., Bourdauducq, P. Hydrazine. In Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. Weinheim. Wiley-VCH, 2007, P. 615.
2. Sittig's Handbook of toxic and hazardous chemicals and carcinogens. Eds. Richard P. San Francisco, Singapore, Sydney, Tokyo. Sixth edition, 2012, P. 1057.
3. Островская В.М., Щепилов Д.О., Прокопенко О.А. и др. Патент 2677329 РФ, 2019.
4. Minin V.V., Ostrovskaya V.M., Avdeeva V.V. et al., *Talanta*, 2019, **195**, 599.
5. Островская В.М., Прокопенко О.А., Щепилов Д.О. и др. Патент 2622026 РФ, 2019.
6. Виноградов В.Ю., Островская В.М., Королев Ю.С. Патент 2088917 РФ, 1997.

ОПЕРАТИВНОЕ ГАЗОХРОМАТОГРАФИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ВСПЫШКИ ТОПЛИВ ДЛЯ РЕАКТИВНЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ

Балак Г.М., Меленцов К.Н., Волгин С.Н.

*ФАУ «25 ГосНИИ химмотологии Минобороны России»
121467, Москва, Молодогвардейская ул., д.10,
e-mail: gmfth@yandex.ru*

Одним из показателей воспламеняемости топлив для реактивных двигателей (ТРД) является температура вспышки (Твсп). Невысокая прецизионность экспериментальных методов определения Твсп (например, по ГОСТ 6356–75), необходимость наличия при их использовании достаточно значительного объёма анализируемой пробы, ограничения на значения истинной температуры начала кипения и выкипания (ИТК) 5 %- и 10 %-ных фракций ТРД, накладываемые расчётным методом по ASTM D7215–22, а также установленное авторами наличие существенных отличий от них соответствующих значений для ТРД, выпускаемых отечественной промышленностью, актуализируют создание альтернативного метода определения Твсп.

Разработан метод оперативного газохроматографического (ГХ-) определения значений Твсп ТРД, основанный на обработке всего массива ГХ-данных, получаемых в условиях имитированной дистилляции, оптимизированных по отношению к указанным в соответствующих стандартизованных методах, с использованием нового алгоритма, свободного от использования специализированного зарубежного программного обеспечения¹. Установлен вид зависимости значений ИТК от содержания в диапазоне 0,5–10 % масс. фракций ТРД, рассчитаны значения соответствующих коэффициентов и предложено общее для ТРД различного компонентного состава уравнение, позволяющее рассчитывать значения Твсп.

Среднее значение абсолютного отклонения расчётных и экспериментальных значений Твсп составляет 1,5 °С, что соответствует значению предела повторяемости определений по ГОСТ 6356 (2 °С) и является более низким по сравнению с указанным в методе по ASTM D7215 (4 °С). Значение предела повторяемости результатов определения Твсп разработанным методом составляет 0,03 °С. Продолжительность определений не превышает 10 мин. Применение метода перспективно при расследованиях прецедентов отказов авиационной техники.

Литература

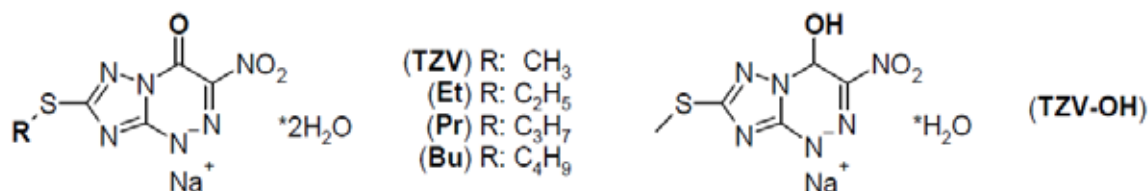
1. Балак Г.М., Меленцов К.Н., Волгин С.Н. Нефтепереработка и нефтехимия. Научно-технические достижения и передовой опыт, 2023, № 10, 3.

ЦИФРОВЫЕ МЕТОДЫ В ИССЛЕДОВАНИИ ВЕРОЯТНЫХ ПУТЕЙ ПРЕВРАЩЕНИЙ СТРУКТУРНЫХ АНАЛОГОВ ТРИАЗАВИРИНА®

Балин И.А., Можаровская П.Н., Цмокалюк А. Н., Дрокин Р. А., Иванова А.В., Русинов В.Л., Козицина А.Н.

*Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина,
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19
e-mail: ivan.balin@urfu.ru*

Процесс разработки оригинального лекарственного средства достаточно сложен. Поэтому сегодня с целью ускорения данного процесса активно применяют не только известные инструментальные методы анализа, но и цифровые технологии, основное внимание в которых уделяется методам моделирования, например, квантово-химическим расчетам. Данная работа может являться базисом для дальнейшей разработки подхода к исследованию потенциальных лекарственных средств с целью выявления соединения-лидера при помощи комбинации методов электрохимического анализа, ЭПР-спектроскопии и квантово-химических расчетов. Цель работы – разработать подход к комплексному изучению превращений противовирусного препарата Триазавирин® (TZV) и его структурных аналогов на примере ряда **TZV, TZV-OH, Et, Pr, Bu**.



Методом квантово-химических расчетов рассчитаны вероятные аддукты спиновой ловушки DMPO с продуктами электрохимического восстановления всех соединений, проведено моделирование вероятного пути электропревращений. Показано, что процесс электрохимического восстановления исследуемых веществ в аprotонной среде идет через образование дианион-радикала, а отсутствие дополнительной стадии протонирования дианион-радикала **TZV-OH**, вероятно, приводит к образованию большего количества интермедиатов радикальной природы. Как следствие, это может являться одной из причин, обуславливающей большую биологическую активность. Таким образом, данные, полученные совокупностью цифровых и инструментальных методов, вероятно, могут быть весьма полезными для выявления соединений с биологической активностью.

Работа выполнена в рамках соглашения с Министерством науки и высшего образования № 075-03-2023-006 от 16.01.2023 (номер темы FEUZ-2023-0021)

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТАУРИНА МЕТОДОМ ВЫСОКОЭФФЕКТИВНОЙ ЖИДКОСТНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

Бачинская Н.А., Мысина Ю.С., Нестеренко И.С.

*Всероссийский государственный Центр качества
и стандартизации лекарственных средств для животных и кормов,
123022, Москва, Звенигородское шоссе д.5,
e-mail: n.bachinskaya@vgnki.ru*

Таурин – свободная, полунезаменимая, серосодержащая β-аминокислота, образующаяся в малой доле из метионина, а также при декарбоксилировании аминокислоты цистеина.

Работа проводилась на высокоэффективном жидкостном хроматографе Agilent 1260 с флуориметрическим и диодно-матричным детекторами, на последнем регистрировался более высокий сигнал, низкий уровень шумов базовой линии и более низкий предел количественного обнаружения (рис. 1).

При подборе хроматографических параметров была выбрана колонка Kromasil 100 C18 250*4.6 мм, 5 мкм, изократический режим подачи элюента (А – 0,02 моль/дм³ натрия уксуснокислый трехводный с рН 6,6, Б – ацетонитрил), скорость потока – 1 см³/мин.

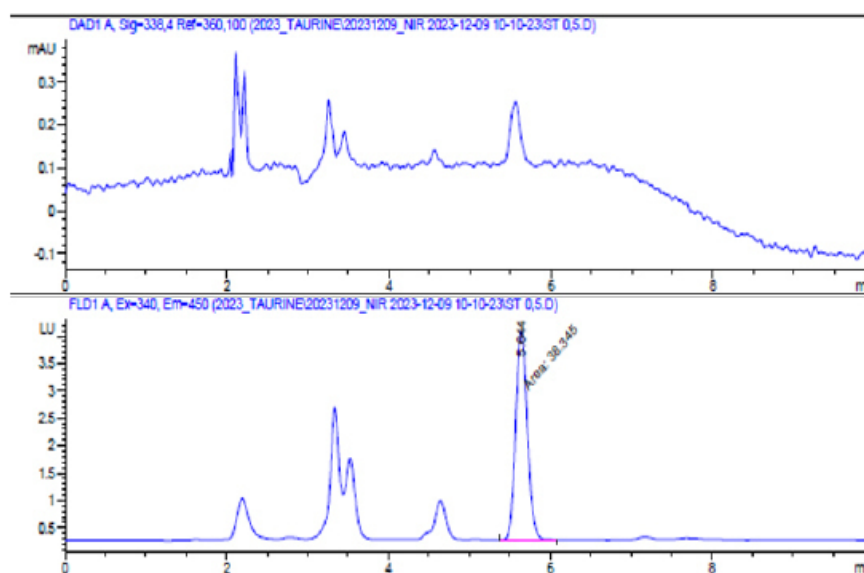


Рисунок 1. Пример хроматограммы стандартного раствора таурина с концентрацией 0,5 мг/дм³ на диодно-матричном детекторе и на флуориметрическом детекторе

Пробоподготовка заключалась в экстракции аналита 0,1 Н раствором соляной кислоты в течение 10 минут с последующей дериватизацией. Этап дериватизации заключался в получении комплекса исследуемого образца с о-фталевым альдегидом в присутствии 3-меркаптопропионовой кислоты. Данный комплекс разрушается в течение 7-10 минут, что требует незамедлительного проведения анализа.

РАЗРАБОТКА ИСП-АЭС МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ГАЛЛИЯ В МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ

Белозерова А.А.,^{а,б} Майорова А.В.,^{а,б} Бардина М.Н.^{а,б}

^а*Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук,
620016, Екатеринбург, Амундсена, 101,
e-mail: aa_belozerova@mail.ru*

^б*Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
620002, Екатеринбург, Мира, 19*

Атомно-эмиссионная спектрометрия с индуктивно связанной плазмой (ИСП-АЭС) широко используется для решения разнообразных задач при анализе металлургической продукции и исходного сырья, в том числе и для определения галлия¹. Тем не менее ИСП-АЭС определение галлия в исходном сырье и готовой металлургической продукции является непростой задачей, вследствие его низкого содержания и влияния на аналитический сигнал со стороны компонентов матрицы².

Цель данной работы – исследовать возможность ИСП-АЭС определения галлия в металлургических материалах с предварительным отделением аналита от компонентов матрицы. Проведены исследования по разделению галлия и макрокомпонентов (Fe, Cr, Mo, W, Ni, Co) с использованием фторида натрия в качестве осадителя. Установлены аналитические линии Ga I 294.364, Ga I 403.298, Ga I 417.206 нм, обладающие наименьшим спектральным наложением от макрокомпонентов. Установлено, что использование фторида натрия обеспечивает практически полное отделение галлия от макрокомпонентов. При этом галлий полностью соосаждается на осадке состава $\text{Na}_3\text{FeF}_6\text{-NaF-NaHF}_2$. Установлены оптимальные условия для соосаждения галлия на осадке, растворения осадка и перехода галлия в анализируемый раствор для его дальнейшего ИСП-АЭС определения.

Литература

1. Santana F.A., Barbosa J.T.P., Matos G.D., Korn M.G.A., Ferreira S.L.C. *Microchemical Journal*, 2013, **110**, 198.
2. Белозерова А.А., Майорова А.В., Бардина М.Н. *Известия высших учебных заведений. Серия «Химия и Химическая технология»*, 2024, **67**, 1, 36.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 23-23-00138.

ЭКСТРАКЦИОННОЕ ИЗВЛЕЧЕНИЕ КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ ИЗ СОДЕРЖИМОГО АМФОР ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЖИРНОКИСЛОТНОГО ПРОФИЛЯ СИСТЕМОЙ ГХ-МС

Белоносова В.А.^а, Данилов Д.А.^а, Киселева Д.В.^б, Малышев А.Н.^а

^аУральский федеральный университет,
620002, Екатеринбург, улица Мира 19,
e-mail: bielonosova@gmail.com

^бИнститут геологии и геохимии им. академика А.Н. Заварицкого,
620110, Екатеринбург, улица Академика Вонсовского 15

В ходе археологических раскопок находят сохранившиеся керамические изделия или их осколки, которые использовали для перевозки и хранения продуктов питания. Анализ жирнокислотного профиля липидосодержащих включений содержимого амфор позволяет провести идентификацию их видовой принадлежности. Для выделения и последующего определения жирнокислотного состава, как правило, используют метод экстракции. Высокое содержание карбонатов препятствует эффективному извлечению аналитов классическими экстрагентами.

В данной работе проводились исследования по оптимизации метода экстракции с целью получения неискаженного жирнокислотного профиля, обеспечивающего достоверные индикаторные отношения, например, пальмитиновой и стеариновой кислот. Инструментально, в качестве эталона, выбрана зарекомендовавшая себя экстракция по Сокслету.

Основными параметрами для оптимизации был выбран вид экстрагента (рассматривали смесь хлороформ:метанол (2:1) и кислый метанол), продолжительность экстракции, температура, отношение объемов твердой и жидкой фаз.

Объект анализа – это керамический кувшин из элитного комплекса саргатской культуры в Среднем Прииртышье (могильник Исаковка I, курган 3, погребение 6). Измерения проводили в системе ГХ-МС Clarus 600 (Perkin Elmer), на колонке Elite-5MS (L:30 м; ID 0,25; DF 0,25). Скорость потока гелия 1 мл/мин.

Работа поддержана грантом РФФ № 22-18-00593

ФОРМЫ НАХОЖДЕНИЯ НИКЕЛЯ В ДОННЫХ ОТЛОЖЕНИЯХ МАЛЫХ РЕК

Белюсова Ю.О., Ларина Н.С.

*Тюменский государственный университет,
625003, Тюмень, Володарского б,
e-mail: belousova1485@gmail.com*

Загрязнение речных систем тяжелыми металлами представляет несомненный интерес в связи с их способностью к биоаккумуляции и высокой токсичностью, при этом степень токсичности напрямую зависит от формы нахождения элемента¹⁻². Объектом исследования стали донные отложения малой реки Барсук, которые были разделены на фракции по размеру частиц набором сит. Формы нахождения никеля в полученных фракциях определяли пятиступенчатой экстракцией³.

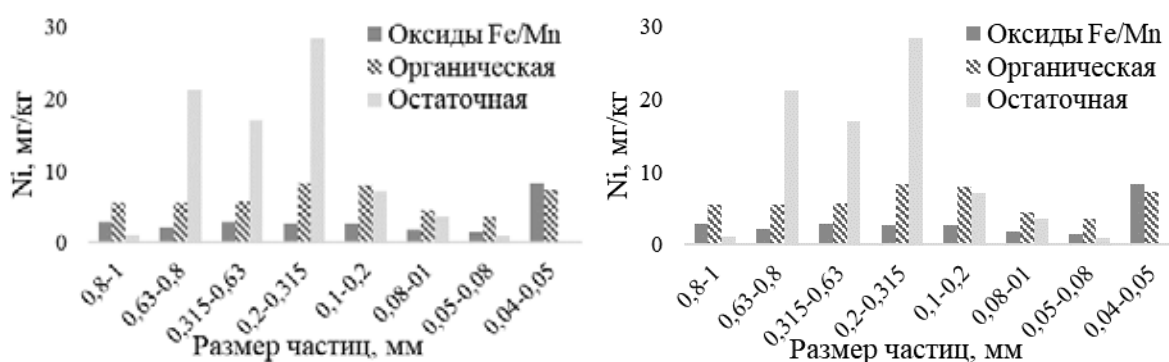


Рисунок 1. Распределение форм нахождения Ni (в экстрагированных фракциях) в зависимости от размеров частиц в донных отложениях р. Барсук

Содержание Ni в обменной и карбонатной фракции незначительно (рис. 1) и составляет 0,3 и 2,4 % от общего содержания соответственно. Несмотря на высокую подвижность этих форм, они не могут оказать значительное влияние на экосистему реки. Фракция, связанная с оксидами Fe и Mn, составила 15,9% от общего содержания и преимущественно представлена в мелкой фракции 0,05-0,04 мм. Доля Ni, связанного с органическим веществом, представлена во всех размерных фракциях и в среднем составила 30,9%. Подвижность этих форм металла может значительно возрасти при смене внешних условий. Доля остаточной формы Ni от общего содержания составила 50,6%, при этом миграция данной формы в водную толщу мало вероятна. Максимальное содержание остаточной и обменной форм Ni наблюдалось во фракции 0,2-0,315 мм, органической – во фракциях 0,2-0,315, 0,1-0,2 и 0,04-0,05 мм.

Литература

1. Иванов Д.В., Валиев В.С., Зиганшин И.И. [и др.]. Российский журнал прикладной экологии, 2020, №2, 23-30.
2. Maslennikova, S. S. Lakes, Reservoirs and Ponds, 2012, Т. 6, № 1-2, 43-54.
3. Tessier A., Campbell P. G. C., Bisson M. Analytical chemistry, 1979, Т. 51, №. 7, 844-851.

ПОЛИВИНИЛФОРМАЛЬНЫЕ СОРБЕНТЫ С ГРУППАМИ ТИОМОЧЕВИНЫ ДЛЯ КОНЦЕНТРИРОВАНИЯ БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Белякович Д.И., Дидух-Шадрин С.Л., Елсуфьев Е.В., Лосев В.Н.

*Сибирский федеральный университет, Институт цветных металлов,
660041, Красноярск, Свободный проспект, 79
e-mail: semdid@mail.ru*

Из широкого перечня сорбентов различной природы, предложенных для концентрирования благородных металлов, сорбенты с серосодержащими функциональными группами отличаются наибольшей селективностью. Отдельный интерес представляют полимерные сорбенты, синтезируемые в результате реакций конденсации или полимеризации с участием серосодержащих реагентов.

В настоящей работе исследованы свойства сорбента на основе сополимера поливинилового спирта, формалина и тиомочевина (ПВФ-ТМ) по отношению к благородным металлам.

Сорбент ПВФ-ТМ охарактеризован методами термогравиметрии и дифференциально сканирующей калориметрии, ИК-спектроскопии и электронной микроскопии с микроанализом. Определена гидролитическая устойчивость сорбентов в растворах хлороводородной кислоты различной концентрации и при различных температурах. Показано, что сорбент ПВФ-ТМ при комнатной температуре устойчив к воздействию 1-4 М HCl.

Сорбент ПВФ-ТМ количественно ($\geq 95\%$) извлекает Pt(IV), Pd(II), Au(III), Ag(I) при комнатной температуре в диапазоне кислотности 2 М HCl – pH 3. Степень извлечения Rh(IV), Ru(IV) и Ir(IV) в данных условиях не превышает 30 %. Время установления сорбционного равновесия составляет 5 мин для Ag(I), Au(III), Pd(II) и 10 мин для Pt(IV). Повышение температуры до 95°C приводит к увеличению степени извлечения Rh(IV), Ru(IV) и Ir(III) до 60%. Однако при увеличении времени контакта фаз при повышенной температуре при извлечении Rh(IV), Ru(IV) и Ir(III) наблюдается частичное растворение сорбента. Сорбционная емкость, определенная из горизонтальных участков изотерм сорбции, составила 4,5 ммоль/г для Ag(I), 1,5 ммоль/г для Pd(II), 0,74 ммоль/г для Pt(IV). При взаимодействии Pt(IV) и Au(III) с функциональными группами сорбента происходит их восстановление с образованием поверхностных комплексов Pt(II) и Au(I) с тиомочевинными группами, обладающими интенсивной низкотемпературной люминесценцией. В дальнейшем в результате реакции диспропорционирования Au(I) наблюдается образование наноразмерных частиц золота.

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ ГАПТЕНА НА СПЕЦИФИЧНОСТЬ ИММУНООПРЕДЕЛЕНИЯ ГЕРБИЦИДОВ АЦЕТОХЛОРА И БУТАХЛОРА

Берлина А.Н., Смирнова Н.И., Жердев А.В., Дзантиев Б.Б.

*Институт биохимии им. А. Н. Баха, Федеральный исследовательский центр
«Фундаментальные основы биотехнологии» РАН,
119071, Москва, Ленинский проспект, д.33;
e-mail: anberlina@yandex.ru*

Ацетохлор (АХ, Рис. 1А) и бутахлор (БХ, Рис. 1Б) – хлорацетанилидные гербициды, широко применяемые для защиты посевов риса, кукурузы, сои и подсолнечника. Эффективный контроль загрязнения гербицидами сельскохозяйственной продукции обеспечивают иммуноаналитические методы, однако их характеристики в значительной степени зависят от свойств конъюгатов гаптен-белок, используемых для иммунизации и конкурентных взаимодействий в ходе анализа.

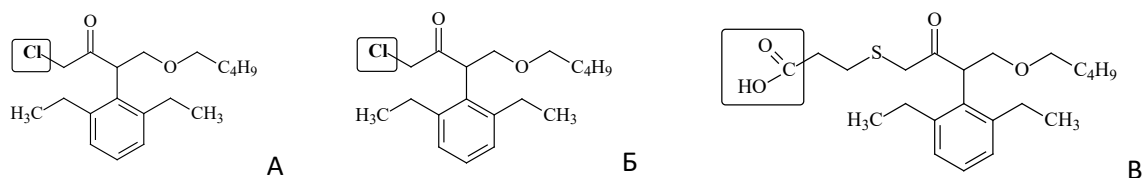


Рисунок 1. Структуры ацетохлора (А), бутахлора (Б) и продукта его модификации меркаптопропионовой кислотой (В). В рамках – используемые функциональные группы

В молекулах гербицидов атом хлора был замещен на остаток меркаптопропионовой (МПК) (Рис. 1В) либо меркаптоянтарной (МЯК) кислоты. Синтезированные таким образом карбоксильные производные были конъюгированы карбодиимидным методом с соевым ингибитором трипсина (СИТ) и бычьим сывороточным альбумином (БСА).

Тестирование полученных при иммунизации поликлональных кроличьих антител показало существенное влияние свойств гаптенов (в частности, отличий в длине боковых радикалов) на характеристики иммуноферментного анализа. Например, выбор иммобилизуемого в микропланшете конъюгата, конкурирующего с контролируемым соединением, изменял предел обнаружения более чем на порядок. Для конъюгатов СИТ-АХ-МПА, СИТ-АХ-МЯК и БСА-БХ-МПК в сочетании с антителами против БХ пределы обнаружения БХ равнялись 22,3, 3,4 и 1,3 нг/мл, соответственно.

Показана пригодность разработанных аналитических систем для контроля разных видов сельскохозяйственной продукции.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект 23-46-00018 (<https://www.rscf.ru/project/23-46-00018/>).

О ВОПРОСАХ СООТВЕТСТВИЯ И НАДЛЕЖАЩЕЙ ПРАКТИКИ ВОДНОГО КОНТРОЛЯ С ПРИМЕНЕНИЕМ ГОТОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ОТ ГРУППЫ КОМПАНИЙ «КРИСМАС»

Муравьев А.Г., Богачева А.Г.

*Группа компаний «Крисмас»,
191119, Санкт-Петербург, ул. Константина Заслонова, д.6,
e-mail: agbogacheva@yandex.ru*

Вопрос организации и обеспечения контроля воды актуален в разных секторах экономики. Опыт 30-летней работы ГК «Крисмас» в области разработки оборудования для химического контроля позволяет представить широкий спектр серийно производимого комплектного оборудования, соответствующего федеральным и отраслевым нормативным документам.

При рассмотрении степени соответствия технологий, положенных в основу производимого оборудования, мы выделили 4 уровня соответствия. Полного соответствия в разработке измерительной техники достичь сложно, для этого требуется создание полноценной лаборатории. Экономичной альтернативой этому может служить разработка методик в основе аналогичных, но позволяющих выполнить поставленную измерительную задачу (в предельном случае - разработка новых оригинальных методик).

Технологии анализа в оборудовании ЗАО «Крисмас+» представлены: визуально-колориметрическим, титриметрическим, фотометрическим, а также визуальным, приборными (кондуктометрическим, потенциометрическим, электрометрическим) и расчётно-графическим методами¹. При этом в основе наших технологий используются разные методы и методики, что согласуется с подходами ФГИС подсистемы «АРШИН» («Аттестованные методики (методы) измерений»²).

Для получения достоверных результатов контроля воды с применением портативного оборудования необходимо обеспечить корректное выполнение аналитических операций. При этом следует руководствоваться стандартами государственной системы обеспечения единства измерений (в частности, ГОСТ Р ИСО 5725-2-2002), и принципами надлежащей лабораторной практики (ГОСТ 31886-2012), признанными на международном уровне и применимыми в том числе к химическому анализу проб воды.

Литература

1. Руководство по аналитическому химическому контролю при водоподготовке и эксплуатации котельного оборудования / А. Г. Муравьев, И. В. Субботина, Е. Б. Кравцова, Н. А. Осадчая, Н. Е. Сергеева ; под ред. канд. хим. наук А. Г. Муравьева. — 2-е изд., испр. и доп. — Санкт-Петербург : Крисмас+, 2024. — 344 с. ; ил.
2. ФГИС подсистемы «АРШИН» («Аттестованные методики (методы) измерений»). Дата актуализации — 05.02.2024. <http://195.96.167.253:5002/fundmetrology/registry/16>.

СПЕКТРАЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОМАТИЧЕСКИХ КЛЕТОК В МОЛОКЕ В ОБЛАСТИ 400-1000 НМ

Костюченко Ю.¹, Богомолов А.Ю.²

*^{1,2} Кафедра Аналитической и физической химии,
Самарский государственный технический университет, Самара, Россия;
e-mail: 1kostychenko_ya@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0008-2476-5151>
e-mail: 2 c11b0f5057f5@mail.ru, <http://orcid.org/0000-0002-4832-638X>*

Одним из важнейших микробиологических параметров качества молока является содержание соматических клеток. Соматические клетки представляют собой клетки различных тканей и органов. Данные клетки всегда присутствуют в молоке, однако повышенное содержание соматических клеток может свидетельствовать о наличии мастита и других воспалительных процессах. Поэтому важно своевременно определять превышение соматических клеток. В настоящее время соматические клетки определяют различными методами, требующими дорогостоящее оборудование, реактивы и высокую квалификацию сотрудников.

В молочной промышленности широко используются оптическая спектроскопия в средней ИК области. Данный метод хоть и позволяет определять соматические клетки, но является дорогостоящим и не все фермы могут широко его использовать, доступной альтернативой может быть видимая и БИК спектроскопия. Это гибкий метод, не требует дополнительной подготовки образца и дорогостоящего оборудования. Подходит для осуществления экспресс анализа молока.

В настоящей работе исследованы аналитические возможности ближней ИК-спектроскопии. В области 400-1000 нм для нахождения различий между молоком с низким содержанием соматических клеток и с высоким содержанием соматических клеток.

Анализ проведенных спектральных данных показывает наличие в видимой области спектра полос поглощения, которые предположительно относятся к поглощению соматических клеток. Анализ данных методами МГК и ПЛС-ДА показал, что спектроскопия видимой и ближней ИК области до 1100 нм могут быть использованы для обнаружения соматических клеток в практически важной концентрации. Метод может быть использован для экспресс-анализа и положен в основу оптической мультисенсорной системы.

ПРИМЕНЕНИЕ БИК СПЕКТРОСКОПИИ И ХЕМОМЕТРИКИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОСТАВА МОЧЕВЫХ КОНКРЕМЕНТОВ В РЕЖИМЕ РЕАЛЬНОГО ВРЕМЕНИ

Бойченко Е.С., Резниченко А.А., Деев В.А., Кирсанов Д.О.

*Кафедра аналитической химии Института химии Санкт-Петербургского государственного университета,
198504, Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский проспект, дом 26,
e-mail: ekaterina.boichenko@inbox.ru*

Согласно клиническим рекомендациям Европейской ассоциации урологов и Минздрава РФ, выбор тактики хирургического лечения мочекаменной болезни – одной из самых распространенных урологических патологий – во многом зависит от химического состава камня. При этом интраоперационные методы определения состава камня не разработаны до сих пор, что является актуальной задачей современной урологии.

Спектроскопия в ближней инфракрасной области (БИК) является перспективным и неразрушающим методом определения состава конкрементов мочеполовой системы благодаря скорости получения спектра, отсутствию пробоподготовки, доступности выносных зондов, совместимых с инструментами для катетеризации. Поскольку в этой области излучения спектр не обладает тонкой структурой, общепринято использовать методы математической обработки БИК спектров, в том числе методы хемометрики. Качественный анализ мочевого камня представляет собой задачу классификации, а именно соотнесения спектра конкретного образца и его класса: «оксалатный», «уратный», «фосфатный» [1].

В данной работе представлены результаты анализа фрагментов 172 реальных мочевого камней, удаленных с помощью дистанционной литотрипсии. Измерения проводились с помощью портативного БИК-спектрометра (Avantes, Нидерланды) в диапазоне 939-1799 нм и волоконно-оптического зонда диаметром 1,8 мм (Endoprobe 7NIR + 1NIR, «Оптоволокно», Россия). Каждый камень измерялся в трех разных точках с последующим усреднением спектров как на воздухе, так и в условиях имитации потока физиологического раствора. В докладе представлено сравнение нескольких комбинаций предварительной обработки данных и многомерного анализа (линейный дискриминантный анализ, машины опорных векторов с различными функциями ядра), а также результаты интраоперационной апробации предложенного метода.

Литература

1. E. Boichenko, M. Paronnikov, D. Kirsanov. Engineering Proceedings, 2023, 48(1) 64.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-73-01139.

МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФУНГИЦИДА БЕНЗОВИНДИФЛУПИРА В ОВОЩНЫХ, ПЛОДОВЫХ И ЗЕРНОВЫХ КУЛЬТУРАХ И ПРОДУКТАХ ИХ ПЕРЕРАБОТКИ

Бондарева Л.Г., Федорова Н.Е.

*ФНЦГ им. Ф.Ф. Эрисмана Роспотребнадзора
141014, Мытищи, Московская область,
e-mail: lydiabondareva@gmail.com*

Пирозолкарбоксамиды – высокоактивные действующие вещества, благотворно влияющие на физиологическое состояние растений и оказывающие длительный подавляющий эффект на фитопатогенные грибы. Один из представителей этой группы пестицидов является бензовиндифлупир - действующее вещество ряда препаратов, зарегистрированных в Российской Федерации.

Целью настоящих исследований явилось разработка метода определения бензовиндифлупира в овощных и зерновых культурах и продуктах их переработки (масла, соки) методом высокоэффективной жидкостной хроматографии.

Предлагаемый метод состоит из выделения действующего вещества смесью ацетонитрила и воды, очистки его твердофазной экстракцией и детектирования ВЭЖХ с ультрафиолетовым детектором на диодной матрице. При определении остаточных количеств бензовиндифлупира в масле масленичных культур и соке плодов и овощей предварительно использовали стандартные процедуры получения продуктов переработки. Установлен линейный диапазон определения бензовиндифлупира – 0,01-1,00 мг/кг, что не противоречит установленным российским и международным требованиям по безопасности продуктов питания.

Предлагаемый метод апробирован на большом перечне культур: овощных (капуста, картофель, огурцы, лук и т.д.), плодовых (яблоки, виноград, персики и т.д.) и зерновых культур (пшеница, овес, рис и т.д.). Исследуемые образцы приобретались в коммерческих торговых сетях.

Выявлено, что во всей исследуемой продукции содержание бензовиндифлупира находилось на уровне менее минимального предела количественного определения, менее 0,01 мг/кг.

ЭКСТРАКЦИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ ИЗ КОРНЯ МАРЕНЫ *Rubia tinctorium* L.

Бочко Т.Н., Шишов А.Ю.

Санкт-Петербургский государственный университет,
198504, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7/9, Россия
e-mail: tatiana-susliako@mail.ru

Растения являются бесценным источником ценных биологически активных соединений для разработки лекарственных препаратов. Известно, что корень марены *Rubia tinctorium* L. содержит более 100 соединений: антрахиноны, иридоиды, пектиновые вещества, белки, органические кислоты и красители¹. *Rubia tinctorium* L. известна в медицине благодаря своим спазмолитическим, мочегонным и лилолитическим свойствам. *Rubia tinctorium* используется как мочегонное средство и ингибитор образования камней в почках. Кроме того, в работе² была выявлена ее противогрибковая активность.

Проведена серия экспериментов по изучению влияния различных параметров на степень извлечение БАВ. Биологически активные вещества (БАВ) из корня марены *Rubia tinctorium* L. экстрагировали с использованием дистиллированной воды, метанола, этанола, ацетонитрила и глубоких эвтектических растворителей (ТБА с этиленгликолем и хлорид холина с молочной кислотой, мочевиной, яблочной кислотой, пропиленгликолем, этиленгликолем, малоновой кислотой, фруктозой и с глицерином). В экстрактах обнаружены алкалоиды, антрахиноны, ализарин и гликозиды методами фитохимического скрининга³. Для количественного определения БАВ в экстрактах были использованы ВЭЖХ и ГХ-МС.

Установлено, что оптимальными условиями экстракции БАВ из корней *R. tinctorum* являются 60°C в течение 60 мин с метанолом и глубокими эвтектическими растворителями на основе ТБА с мочевиной, хлорид холина с молочной и малоновой кислотой.

Литература

1. E. Eltamany *RSC Adv.*, 2020, **10**, 24159.
2. Min Wen *Front Pharmacol* 2022, **13**, 965390.
3. S. Sasidharan *Afr. J. Tradit. Complement Altern. Med.* 2011, **8**, 1.

Работа выполнена при поддержке СПбГУ, шифр проекта 115679504.

РАЗВИТИЕ МЕТОДОЛОГИИ ВЫДЕЛЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ ВУЛКАНИЧЕСКИХ ПЕПЛОВ

Бржезинский А.С., Ермолин М.С., Шилобреева С.Н., Федотов П.С.

*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского
11999, Москва, ул. Косыгина 19,
e-mail: a.brzhezinskiy@gmail.com*

Наночастицы вулканического пепла – это мельчайшие частицы с размерами от 1 до 100 нм, способные перемещаться на большие расстояния и проникать в биологические системы, что подчеркивает важность их изучения. Одна из самых важных особенностей наночастиц вулканического пепла – высокая удельная поверхность, позволяющая сорбировать различные вещества, включая токсичные. Исследование показали, что концентрации ряда элементов (Ni, Zn, Cd, Ag, Sn, Se, Te, Hg, Tl, Pb, Bi) в частицах вулканического пепла в 10-500 раз превышают общее содержание этих элементов в исходных образцах.

Исследование наночастиц вулканического пепла – междисциплинарная задача, требующая применения комплекса методов пробоподготовки и анализа. Основной проблемой в их изучении является низкая эффективность извлечения наночастиц из образцов. В работе получил развитие предложенный в ГЕОХИ РАН метод проточного фракционирования во вращающейся спиральной колонке (далее ВСК) для выделения наночастиц из полидисперсных образцов.

Оценена эффективность шести различных методик и двух элюентов: деионизированной воды и пирофосфата натрия для извлечения наночастиц из образца пепла Карымского вулкана (извержение 2013 года) с использованием ВСК.

Выделение пирофосфатом проводили в трех вариантах: с выдерживанием в 2мМ $\text{Na}_4\text{P}_2\text{O}_7$ в течение 24 часов и предварительным вымачиванием в 0,1М NaCl, без вымачивания в NaCl и без предварительного выдерживания в пирофосфате. Для сравнения эффективности методик проведено выделение наночастиц в деионизированной воде. В результате предварительное выдерживание в пирофосфате натрия и его использование в качестве элюента оказались оптимальными и обеспечивающими наибольшую эффективность выделения. С использованием данной методики удалось увеличить массу получаемой нано фракции в 10 раз (с 0,1 мг до 1 мг) по сравнению с процессом выделения в деионизированной воде. Показано, что при элементном анализе наночастиц стало возможно определение ряда элементов, находящихся ниже предела обнаружения (Ag, Cs, Tl и др.). Расширение возможностей изучения элементного состава наночастиц вулканического пепла перспективно для решения фундаментальных задач геохимии.

ИЗУЧЕНИЕ АНТИГЕНСВЯЗЫВАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ АНТИТЕЛ, ИММОБИЛИЗОВАННЫХ НА НАНОЧАСТИЦАХ ЗОЛОТА

Бызова Н.А., Сотников Д.В., Жердев А.В., Дзантиев Б.Б.

*Институт биохимии им. А.Н. Баха, ФИЦ «Фундаментальные основы биотехнологии» Российской Академии Наук, 119071, Москва, Россия, Ленинский проспект 33,
e-mail: nbyzova@inbi.ras.ru*

Конъюгаты наночастиц золота (НЧЗ) и иммобилизуемых на их поверхности антител широко используются в разнообразных биоаналитических системах. Поэтому чрезвычайно важна информация о составе этих конъюгатов и степени сохранения антиген-связывающей активности антител после иммобилизации. В настоящей работе для оценки этих характеристик предложены оригинальные подходы, основанные на регистрации флуоресценции антител (обеспечиваемой прежде всего триптофановыми остатками) и антигена. Использовали модельный антиген флуоресцеин в виде карбокси- и аминопроизводного и моноклональные антитела (МАт) к нему. Изучены конъюгаты сферических НЧЗ со средними диаметрами 14.0; 18.5; 21.0; 31.5 и 35.5 нм, получаемые при разной степени покрытия поверхности адсорбированными антителами – монослой, половина и четверть монослоя. При монослойной иммобилизации доля антител, способных связывать карбоксифлуоресцеин, варьировала от 6% до 17%. Заряд, локализованный вне антигенной детерминанты, существенно влиял на этот параметр: для НЧЗ со средним диаметром 21.0 нм процент сайтов иммобилизованных антител, связывающих аминифлуоресцеин, достигал 27% по сравнению с 13% в случае карбоксифлуоресцеина. Снижение степени покрытия поверхности НЧЗ антителами не приводило к достоверным изменениям доли активных сайтов связывания по сравнению с монослоем. Полученные результаты отражают значительную инактивацию антител при адсорбционной иммобилизации на НЧЗ и должны учитываться при выборе условий взаимодействия в аналитических системах.

На основании полученных данных были синтезированы конъюгаты НЧЗ с МАт к приоритетным пищевым патогенам – *Salmonella typhimurium*, *Escherichia coli* O157:H7 и *Listeria monocytogenes*, и с их использованием разработаны иммунохроматографические тест-системы для выявления патогенов в молоке. На примере выявления *S. typhimurium* сопоставлены режимы взаимодействия иммунореагентов. Тест-системы позволяют выявлять до 3×10^4 КОЕ/мл микроорганизмов за 10–20 мин.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-46-10011.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА СИНХРОННОГО СКАНИРОВАНИЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ В АНАЛИЗЕ ПРЕМИАЛЬНЫХ РАСТИТЕЛЬНЫХ МАСЕЛ

Васильев В.А.^а Реснянская А.С.^б

*^аМинистерство промышленности, торговли и энергетики Астраханской области
414000, Астрахань, ул. Советская, 12,
e-mail: osmiy.7272@mail.ru*

*^бФГБОУ ВО Астраханский государственный университет имени В.Н. Татищева,
414056, Астрахань, ул. Татищева, 20а*

Флуоресцентная спектроскопия являются одним из наиболее динамично развивающихся направлений в анализе пищевых продуктов и сырья для их производства. Востребованность метода обусловлена неразрушающим типом контроля, минимальными требованиями к прободготовке, низкой себестоимостью, высокой чувствительностью и другими.

Однако основной проблемой флуоресцентной спектроскопии при исследовании растительных масел прямого отжима является присутствие в них большого числа природных флуорофоров с близкими спектральными характеристиками: токоферолов, фенолокислот, хлорофиллов, витаминов и др. Метод синхронного сканирования спектров эмиссии и возбуждения (SF synchronous fluorescence) заключается в проведении одновременного сканирования возбуждения и излучения с сохранением фиксированного интервала длин волн ($\Delta\lambda$) между ними. Метод SF не только упрощает спектр излучения, но также в меньшей степени подвержен влиянию рассеивающего эффекта Рэлея и комбинационного рассеяния света по сравнению с обычной эмиссионной флуоресценцией с возбуждением (EEF).

Отличительной особенностью метода является, что в отличие от классического метода исследования спектра эмиссии λ_{em} или возбуждения λ_{ex} монохроматоры одновременно сканируют оба типа спектра в исследуемом диапазоне с определённой величиной сдвига. Таким образом, фиксируя разность длин волн во всем диапазоне по формуле

$$\lambda_{em} = \lambda_{ex} + \Delta\lambda,$$

задаётся параметр деградации энергии – Стоксов сдвиг. Близкие по своим характеристикам флуорофоры будут давать группы пиков в спектре.

SF сканирование дает более узкий и простой спектр, что позволяет использовать его в мультифлуороформном анализе. Проведённый SF анализ масла виноградной косточки прямого отжима позволил разделить характеристические пики флуоресценции тококоотриенолов и токоферолов с максимумами интенсивности при 302 и 282 нм соответственно, а также хлорофилл α ($\lambda_{max} = 620\text{нм}$) и хлорофилл β ($\lambda_{max} = 663\text{нм}$).

РАЗРАБОТКА ПОДХОДОВ К ОПРЕДЕЛЕНИЮ ОБЩЕГО КОЛИЧЕСТВА БЕЛКА В РАСТИТЕЛЬНЫХ ОБЪЕКТАХ

Вершинина Ю.С., Митин И.В., Веселова И.А.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы, д.1
e-mail: yu.vrshn@gmail.com*

Эталонным методом определения белка в пищевой промышленности является метод Кьельдаля, который косвенно определяет общее содержание протеина путем измерения в образце азота и последующего умножения на соответствующий коэффициент пересчета. Недостаток этого метода заключается в том, что он определяет общий азот независимо от того, является ли он органическим и входит в состав молекул белка или привнесен в продукт с посторонним азотсодержащим веществом.

Альтернативой определению общего азота являются прямой спектрофотометрический анализ и биохимические методы (Брэдфорда, Лоури, микробиуретовый). Эти методы широко применимы для определения индивидуальной формы белка, однако при переходе к растительным объектам, которые содержат разные белки как по природе, так и молекулярной массе, а также характеризуются сложным составом матрицы возникают сложности определения.

Целью работы является разработка подходов к определению общего количества белка в растительном сырье на примере шрота (жмыха) и белковых изолятов подсолнечника.

Методом гель-электрофореза определили фракционный состав трех коммерческих образцов подсолнечного протеина, который включает белки двух типов – водорастворимые альбумины (SFA) и солерастворимые глобулины (helianthinin) с разной молекулярной массой.

Определение общего азота проводили с помощью автоматизированного метода Дюма, который, в отличие от метода Кьельдаля, прост в использовании и не требует применения токсичных реактивов.

Было установлено, что для определения общего количества белка в растительных объектах наиболее подходящим является использование азотометрического метода Дюма в тандеме со спектрофотометрическим методом Лоури, в основе которого лежит реакция на пептидные связи. При этом достаточно высокая чувствительность метода (диапазон определяемых концентраций 10-100 мкг/мл) позволяет исключить мешающие влияние компонентов матрицы (полисахаридов и фенольных соединений).

Работа выполнена при финансовой поддержке инновационного центра ООО «Бирюч-НТ», договор №16112020-1, РНФ 23-13-00276.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ α-ТОКОФЕРОЛА АЦЕТАТА МЕТОДАМИ ОКСИТЕРМОГРАФИИ И УФ-СПЕКТРОФОТОМЕТРИИ

Волошина Е.С., Зуев Б.К.

*ГЕОХИ РАН, 119991,
г. Москва, ул. Косыгина, д.19,
e-mail: peunkova.el@yandex.ru*

Витамин Е входит в большинство косметических препаратов для кожи человека. Эффективность и безопасность использования средств, содержащих α-токоферол, связаны с их трансдермальными свойствами, что делает актуальным разработку методов количественного определения витамина Е на поверхности кожи.

Определение токоферолов на поверхности относится к задачам определения концентрации на границе раздела двух фаз, которые малоизучены и не имеют стандартного решения. В рассмотренных литературных источниках практически отсутствует информация о методах определения витамина Е на поверхности кожи. Наиболее полный обзор О.В. Тринеевой [1] по методам определения витамина Е также не содержит методов для определения α-токоферола на поверхности.

Предлагается метод УФ-спектрофотометрии, применяемый для качественного определения (растворитель этанол 96 %) [2]. Для изучения поверхностной концентрации его необходимо дополнить пробоотбором с последующей экстракцией и разбавлением (растворитель изопропанол) для получения достоверных данных в диапазоне рабочих концентраций метода. По результатам экспериментов наибольший диапазон измерений поддерживает метод УФ-спектрофотометрии, который является специфичным, точным, экспрессным и простым.

Также был апробирован метод окситермографии, но возникли трудности с тем, что температура кипения масла 247°C, а витамина – 254 °С. Поэтому предлагается сначала экстрагировать α-токоферол спиртом ($t_{\text{кип}}$ около 100°C) с дальнейшей его отгонкой в процессе анализа. По градуировочным графикам было определено оптимальное количество витамина Е в анализируемой пробе: 0,010 – 0,015 мг.

Литература

- 1.Тринеева О. В. Методы анализа витамина Е (обзор) //Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Химия. Биология. Фармация. – 2013. – №. 1. – С. 212-224.
- 2.ФС.2.1.0050.18 «α-Токоферола ацетат» //Государственная Фармакопея РФ. Электронное издание. – 2018. URL: <https://pharmacopeia.regmed.ru> (дата обращения: 18.01.2024).

ЭЛЕМЕНТНЫЙ АНАЛИЗ ПАЛЛАДИЕВЫХ СПЛАВОВ – МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ВОДОРОДНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

**Волчёнкова В.А.^{а,б}, Пенкина Т.Н.^а, Казенас Е.К.^а, Фомина А.А.^а, Рошан Н.Р.^а,
Горбунов С.В.^а, Касьянов В.С.^а, Солнцев К.А.^а, Тарнопольская М.В.^б**

*^аИнститут металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук,
119334, Москва, Ленинский проспект, 49,
e-mail: volch.v.a@mail.ru*

*^бИнститут геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии
Российской академии наук, 119017, Москва, Старомонетный пер., 35*

При проведении исследований по созданию новых материалов для водородной энергетики - сплавов палладия заданного химического состава систем: Pd – Cu, Pd – Ag необходимо определять содержания как примесных элементов, так и макрокомпонентов (Cu, Ag).

Использование атомно-эмиссионной спектроскопии с индуктивно-связанной плазмой (АЭС с ИСП) и атомно-абсорбционной спектроскопии (ААС) - методов анализа с взаимодополняющими аналитическими возможностями, обеспечило высокоточное определение содержаний макрокомпонентов (Cu, Ag) и функциональных элементов (Ru, In, Y, Sc, Pb, Co) в широком диапазоне концентраций ($n \cdot 10^{-3}$ – $n \cdot 10\%$) из ограниченного количества материала (от 5 мг) без использования сертифицированных твердых стандартных образцов состава. В зависимости от генезиса исследуемых соединений найдены оптимальные схемы пробоподготовки и подбор состав кислот для получения устойчивых во времени растворов легко гидролизующихся матричных и примесных элементов. Растворение образцов проводили в открытых или закрытых системах (микроволновая печь Mars 5 - фирмы SEM Corporation, США). В случае трудно вскрываемых сплавов (с содержанием рутения более 2%) применяли метод сплавления с пероксидом натрия. Установлены оптимальные аналитические параметры для АЭС-ИСП и ААС определения элементов.

Методики аналитического контроля обеспечили исследования по разработке новых сплавов, обладающих повышенными физико-механическими свойствами, а также высокой удельной проницаемостью водорода, для водородной энергетики.

Работа выполнялась по государственному заданию № 075-00320-24-00.

МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ КОНТРОЛЯ ВЫПУСКАЕМЫХ РАДИОФАРМПРЕПАРАТОВ НА ОСНОВЕ РАДИОНУКЛИДА РАДИЙ-223 НА ФГУП «ПО «МАЯК»

Посохова Н.В., Ворошилов А.Ю., Джавелло К.А., Ромадова С.И., Сотник Н.В.

*Федеральное государственное унитарное предприятие «Производственное объединение «Маяк»,
 456784, Челябинская область г. Озерск, пр. Ленина, 31,
 e-mail: cpl@po-mayak.ru*

Важнейшей задачей отечественной промышленности в области ядерной медицины является создание и производство высококачественных и конкурентоспособных радиофармпрепаратов (РФП), в том числе альфа-излучающего радионуклида радий-223 для лечения кастрационно-резистентного рака предстательной железы с костными метастазами.

Одной из значимых составляющих обеспечения качества выпускаемых РФП является метрологическое обеспечение оценки их соответствия как в процессе производства, так и при передаче потенциальному заказчику.

Для контроля качества производства РФП на основе радионуклида радий-223 был разработан комплекс методик измерений (МИ), сочетающий гамма-спектрометрический метод измерений объемной активности радионуклида радий-223, метод тонкослойной хроматографии с последующим определением фактора удерживания свободного радия для определения радиохимической чистоты РФП, также масс-спектрометрический метод измерений массовой концентрации примесей с индуктивно связанной плазмой в РФП. Основные метрологические характеристики комплекса МИ приведены в таблице 1.

Таблица 1.

Наименование радионуклида/ элемента	Диапазон измерений	Доверительные границы относительной суммарной погрешности δ
Радий-223	От $1,0 \cdot 10^4$ до $1,0 \cdot 10^8$ Бк/см ³	$\pm 0,21$
Торий-227	От $4,0 \cdot 10^1$ до $4,0 \cdot 10^5$ Бк/см ³	$\pm 0,72$
Li, Ca, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, As, Cd, Sb, Ba, Hg, Pb, U	От 0,1 до $1 \cdot 10^4$ мкг/дм ³	$\pm 0,11$

Разработанный и аттестованный комплекс МИ был внедрен и успешно используется при производстве и контроле характеристик РФП радий-223 на ФГУП «ПО «Маяк», предоставляя надежные данные потенциальным заказчикам, позволяющие эффективно использовать данный РФП в клинических целях.

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ СУЛЬФАНИЛАМИДОВ НА ЭЛЕКТРОДЕ, МОДИФИЦИРОВАННОМ КОМПОЗИТОМ НА ОСНОВЕ ЧАСТИЦ ЗОЛОТА, УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК И ИОННОЙ ЖИДКОСТИ

Гафиатова И.А., Ильина М.А., Челнокова И.А., Шайдарова Л.Г., Будников Г.К.

*Казанский (Приволжский) Федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова,
420008, Казань, ул. Кремлевская, д. 18,
e-mail: marina_ilina16@mail.ru*

Сульфаниламиды широко используются ветеринарной практикой для борьбы с инфекционными заболеваниями, а также в качестве кормовых добавок с целью стимуляции роста и повышения продуктивности домашнего скота и птицы. Употребление пищевых продуктов животного происхождения с остаточными количествами антибактериальных лекарственных средств сопряжено с риском для здоровья человека. Используемые на сегодняшний день методы иммуноферментного анализа и ВЭЖХ для определения сульфаниламидов характеризуются дороговизной, сложностью проведения анализа и потребностью в специфических реагентах. Поэтому разработка альтернативных высокочувствительных способов определения сульфаниламидов является актуальной задачей.

В настоящей работе изучена возможность вольтамперометрического определения сульфаметазина, сульфацидамида и сульфатиазола на стеклоуглеродном электроде (СУЭ), модифицированном частицами золота и композитом на основе углеродных нанотрубок и ионной жидкости гексафторфосфата 1-бутил-3-метилимидазолия (Au-MУНТ-ИЖ-СУ). Для оценки условий электронного обмена на границе раздела фаз использовали спектроскопию электрохимического импеданса.

При электроокислении рассматриваемых сульфаниламидов на СУЭ наблюдаются плохо выраженные пики при достаточно высоких анодных потенциалах ($E_s > 1.20$ В). При сканировании потенциала в растворе сульфаниламидов на Au-MУНТ-ИЖ-СУЭ регистрируется пик при потенциалах Au, ток которого линейно зависит от концентрации субстратов и контролируется кинетикой химической реакции.

Разработаны способы вольтамперометрического определения сульфаметазина, сульфацидамида и сульфатиазола на Au-MУНТ-ИЖ-СУЭ. Линейная зависимость аналитического сигнала от концентрации аналитов наблюдается в интервале от 1×10^{-7} до 5×10^{-3} М. Предложенный способ определения сульфаниламидов апробирован при анализе лекарственных средств и молока.

СЕЛЕКТИВНОЕ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ АСКОРБИНОВОЙ КИСЛОТЫ, ПАРАЦЕТАМОЛА И ФЕНИЛЭФРИНА НА ЭЛЕКТРОДЕ, МОДИФИЦИРОВАННОМ РОДИЕМ И ОКСИДАМИ ИРИДИЯ, В ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТАХ

**Гафиатова И.А., Кириленко Д.А., Коряковцева Д.А.,
Челнокова И.А., Шайдарова Л.Г.**

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова,
420008, г. Казань, ул. Кремлевская, д.18, корп.1;
e-mail: dasha.kirilenko.370633@mail.ru*

Комплексные лекарственные препараты, облегчающие течение болезни и снижающие вероятность развития осложнений простудных заболеваний, на сегодняшний день широко распространены в аптечной сети. Основными действующими веществами в них являются аскорбиновая кислота (АК), парацетамол (ПЦ) и фенилэфрин (ФЭ).

При несоблюдении рекомендованной дозировки комплексных препаратов могут развиваться серьёзные осложнения, поэтому необходим контроль содержания АК, ПЦ и ФЭ в этих препаратах. Одним из наиболее простых и эффективных методов для решения этой задачи является метод вольтамперометрии с химически модифицированными электродами (ХМЭ).

В настоящей работе сопоставлена электрокаталитическая активность электроосажденных на стеклоуглеродный электрод (СУ) частиц родия (Rh), смешанновалентных оксидов иридия (IrO_x), а также бинарной системы на их основе при окислении АК, ПЦ и ФЭ.

Использование ХМЭ в условиях циклической вольтамперометрии приводит к регистрации четко выраженных сигналов окисления этих соединений при потенциалах окисления модификатора. Максимальные по величине токи наблюдаются на ХМЭ с бинарной системой Rh- IrO_x . Высота регистрируемых сигналов линейно связана с концентрацией АК, ПЦ и ФЭ в растворе. Использование композитного электрода по сравнению с немодифицированным СУ позволяет повысить чувствительность определения и снизить нижнюю границу определяемых содержаний до 1×10^{-6} моль/л.

Полученные результаты использованы для разработки селективного вольтамперометрического способа определения АК, ПЦ и ФЭ в лекарственных препаратах. Правильность методик оценена методом введено-найдено. Относительное стандартное отклонение (S_r) не превышает 5.0 % во всем диапазоне исследуемых концентраций.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

ПРОТОЧНО-ИНЖЕКЦИОННОЕ АМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЛАКТУЛОЗЫ НА ЭЛЕКТРОДЕ, МОДИФИЦИРОВАННОМ ЧАСТИЦАМИ ЗОЛОТА

**Гафиатова И.А., Челнокова И.А., Шайдарова Л.Г.,
Гедмина А.В., Будников Г.К.**

*Казанский (Приволжский) Федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова, 420008,
Казань, ул. Кремлевская, д. 18,
e-mail: ilvina1603@mail.ru*

Лактулоза – синтетический дисахарид, состоящий из фруктозы и галактозы. Благодаря метаболизму в толстом кишечнике лактулоза обладает пребиотическим эффектом. Именно поэтому лактулоза широко используется в пищевой промышленности. Для количественного обнаружения лактулозы используют хроматографические и спектрофотометрические методы. Но эти методы являются дорогостоящими, длительными в исполнении. Поэтому создание ферментных сенсоров со стабильным, чувствительным и селективным откликом на лактулозу представляет несомненный интерес.

В настоящей работе изучена возможность вольтамперометрического и проточно-инжекционного (ПИ) амперометрического определения лактулозы на планарном углеродном электроде (ПЭ), модифицированном частицами золота (Au-ПЭ).

Лактулоза на ПЭ окисляется необратимо при E 1.20 В. Установлено, что при окислении лактулозы в щелочной среде на электроде Au-ПЭ на анодной ветви вольтамперограммы наблюдается один пик при E 0.25 В, высота которого линейно зависит от концентрации исследуемого соединения. Наблюдается уменьшение перенапряжения окисления лактулозы и многократное увеличение тока ее окисления по отношению к току окисления модификатора.

Предложен способ амперометрического определения лактулозы на электроде Au-ПЭ в ПИ-системе. Линейная зависимость аналитического сигнала от концентрации лактулозы наблюдается в интервале от $5 \cdot 10^{-6}$ до $5 \cdot 10^{-3}$ М. Следует отметить высокую сходимость результатов анализа в проточной системе ($S_r < 2.0\%$). Разработанный способ определения лактулозы отличается высокой чувствительностью, повторяемостью, а также экспрессностью и производительностью метода анализа (до 180 определений/час).

Предлагаемый способ использован для определения лактулозы в коммерчески доступных образцах молока. Присутствие матричных компонентов не мешает определению лактулозы.

СЕЛЕКТИВНОЕ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПУРИНОВЫХ НУКЛЕОЗИДОВ НА ЭЛЕКТРОДАХ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ КОМПОЗИТАМИ НА ОСНОВЕ ПОЛИ(3,4-ЭТИЛЕНДИОКСИТИОФЕНА)

Гедмина А.В., Шайдарова Л.Г., Будников Г.К.

*Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова,
420008, Казань, ул. Кремлевская, 18
e-mail: anna.gedmina@mail.ru*

Пуриновые нуклеозиды (гуанозин и аденозин), как структурные фрагменты ДНК, играют важнейшую роль в биохимических процессах организма человека. Изменения концентраций гуанозина и аденозина в биологических жидкостях используют для мониторинга и диагностики различных патологических изменений.

В настоящей работе изучено электроокисление пуриновых нуклеозидов на электроде из стеклоуглерода (СУ), модифицированном пленкой из гексацианокобальтата рутения (ГЦКР) и композитом на основе поли-3,4-этилендиоксотиофена (ПЭДОТ) с включенным ГЦРР (ГЦКР-ПЭДОТ) с целью разработки селективного и высокочувствительного способа вольтамперометрического определения аденозина и гуанозина.

Иммобилизацию пленки из ГЦКР и композита ГЦКР-ПЭДОТ проводили способом электрохимического осаждения. Методом атомно-силовой микроскопии доказано образование наноструктурированных и равномерно распределенных частиц ГЦКР с диаметром от 20 до 40 нм на поверхности электрода. Установлено, что пленка из ГЦКР проявляет каталитические свойства при окислении гуанозина и аденозина, разность потенциалов окисления гуанозина и аденозина составляет 300 мВ. Электрокаталитический эффект для обоих нуклеозидов увеличивается при переходе от электрода ГЦРР-СУ к композитному электроду ГЦКР-ПЭДОТ-СУ. Величина этого эффекта хорошо коррелирует с рассчитанными значениями констант скорости электрохимической реакции. Определены условия иммобилизации модификаторов для регистрации наибольшего электрокаталитического эффекта.

Установлена возможность одновременного вольтамперометрического определения гуанозина и аденозина на электроде ГЦКР-ПЭДОТ-СУ. Нижняя граница определяемых содержаний составляет 5×10^{-7} М для обоих соединений. Разработанный вольтамперометрический способ определения апробирован при анализе глазных капель, содержащих аденозин.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета

ВЛИЯНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ НА СЕЛЕКТИВНОСТЬ РАЗДЕЛЕНИЯ ЭНАНТИОМЕРОВ В ХИРАЛЬНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

Гончаров А.Ю., Нестеренко П.Н., Лузанова В.Д.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет,
кафедра аналитической химии,
г. Москва, Россия,
e-mail: diamante.clairo@mail.ru*

Одним из наиболее известных методов разделения энантиомеров является хиральная ВЭЖХ с использованием хиральных неподвижных фаз. Популярны в этом качестве макроциклические антибиотики за счёт возможности создания на поверхности сорбента высокоселективных хиральных селекторов, реализующих хиральное распознавание аналита посредством полярных, гидрофобных и других взаимодействий, что позволяет проводить препаративное разделение для широкого спектра органических веществ.

Обычно при исследовании селективности разделения рассматриваются термодинамические факторы, таких как природа сорбата и сорбента и температура, влияние которых хорошо изучено. Однако наличие в структуре сорбента нанополостей обуславливает влияние также кинетических эффектов, которые исследованы в данной работе на примере разделения энантиомеров фенилаланина (Phe) на сорбенте с привитым эремомицином.

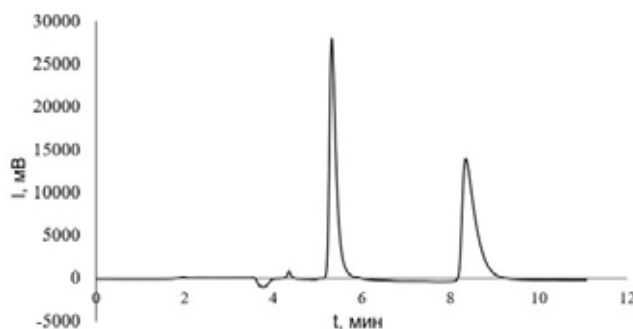


Рисунок 1. Разделение энантиомеров Phe. Скорость потока 1,0 мл/мин

Для рацемата и чистых изомеров получены неклассические для ВЭЖХ кривые Ван-Деемтера гиперболического вида с минимумом при высокой скорости потока элюента u (мм/с). Построены зависимости V'_R от u , демонстрирующие уменьшение V'_R по линейному закону по мере роста u . Получена зависимость селективности разделения α от u , имеющая максимум и свидетельствующая о наличии явного эффекта кинетической селективности.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 20-03-00584.

МОДИФИКАЦИЯ ПОВЕРХНОСТИ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ ДЛЯ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В АНАЛИТИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

**Горячева О.А., Соболев А.М., Мещерякова С.А., Корнилов Д.А.,
Цюпка Д.В., Худина Е.А., Дрозд Д.Д., Горячева И.Ю.**

*Институт химии Саратовского государственного университета
им. Н.Г. Чернышевского, 410012, Саратов, Астраханская 83,
e-mail: olga.goryacheva.93@mail.ru*

Полупроводниковые наночастицы с флуоресцентными свойствами - квантовые точки (КТ) - широко используются в электронике. Высокая интенсивность их флуоресценции при широких спектрах поглощения позволяет использовать несколько квантовых точек с одним источником возбуждения. Узкие пики флуоресценции КТ и высокая стабильность подталкивает исследователей к замене классических для биоанализа меток на КТ.

Одним из основных ограничивающих параметров для использования КТ является гидрофобность их поверхности или простота отсоединения лигандов при прямом получении гидрофильных частиц. Это ограничивает возможность к биоконъюгации и дальнейшему использованию КТ как метки. Большинство подходов к синтезу КТ используют олеиновую кислоту в качестве лиганда. Два основных подхода к гидрофилизации КТ это замена этих самых лигандов на гидрофильные или инкапсуляция. Методы гидрофилизации влияют на размер, заряд, интенсивность флуоресценции и возможность к конъюгации КТ с биомолекулами¹. Столь большое значение варьируемых параметров позволяет подобрать оптимальную оболочку для конкретного аналитического подхода^{2,3}.

Литература

1. Goryacheva, O.A., Wegner, K D., Sobolev, A.M., Häusler, I., Gaponik, N., Goryacheva, I. Y., Resch-Genger, U. Influence of particle architecture on the photoluminescence properties of silica-coated CdSe core/shell quantum dots //Analytical and Bioanalytical Chemistry. – 2022. – Т. 414. – №. 15. – 4427-4439с.
2. Goryacheva, O.A., Beloglazova, N.V., Goryacheva, I.Y., De Saeger, S. Homogenous FRET-based fluorescent immunoassay for deoxynivalenol detection by controlling the distance of donor-acceptor couple //Talanta. – 2021. – Т. 225. –121973с.
3. Goryacheva, O.A., Pidenko, P.S., Markin, A.V., Markina, N.E., Tsupka, D. V., Mordovina, E.A., Ponomaryova T.D., Meshcheryakova S.A., Kornilov D.A., Strokin P.D., Drozd D.D., Podkolodnaya Y.A., Kovyrshina A.A., Morozova I.V., Shelekhova T.V., Goryacheva, I. Y. Current trends and challenges in the mitoxantrone measuring in biofluids and new pharmaceutical systems //TrAC Trends in Analytical Chemistry. – 2023. –117373с.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 21-73-10046

СРАВНЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ СОРБЕНТОВ РАЗЛИЧНОЙ АЛЛОТРОПНОЙ ФОРМЫ УГЛЕРОДА, В ТОМ ЧИСЛЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Гражулене С.С., Золотарева Н.И., Ходос И.И.

*Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН,
142432, г. Черноголовка, Московской обл., РФ, ул. Академика Осипьяна, д. 6.*

Изучена сравнительная сорбция ионов токсичных: Be (II), Bi (III), Cd (II), Cr (III), Pb (II) и благородных металлов Ag(I), Au(III) и Pd(II) из водных сред на углеродных нанотрубках (УНТ), магнитном наносорбенте, состоящем из УНТ и наночастиц магнетита (УНТ@МНЧ), и активированном угле (АУ). Продемонстрировано значительное преимущество сорбентов с УНТ над АУ.

Предложен механизм сорбции наночастиц магнетита (МНЧ), на УНТ различной морфологии в процессе дополнительной модификации последнего и найдена зависимость сорбционной емкости синтезированного магнитного композита от морфологии УНТ, полученных на катализаторах группы железа: Ni [УНТ (Ni)]; Co [УНТ (Co)] и Fe [УНТ (Fe)]. Продемонстрировано преимущество композитов УНТ@МНЧ перед индивидуальными УНТ по отношению ко всем изученным сорбатам не только для разделения твердой и жидкой фаз в магнитной твёрдофазной экстракции (МТФЭ), но и в проявлении дополнительных возможностей использования УНТ любой морфологии независимо от условий их синтеза. Показано, что оптимальное соотношение УНТ:МНЧ в композите, равное 10:1 для всех сорбатов, обеспечивает максимальную сорбционную ёмкость и намагниченность, достаточную для эффективного разделения фаз после сорбции всех исследованных элементов. С использованием синтезированных сорбентов разработаны методики и представлены сравнительные метрологические характеристики определения изученных элементов в водных растворах с использованием их предварительного концентрирования на углеродных сорбентах методом дугового атомно-эмиссионного анализа (АЕА).

СОРБЦИЯ ВЕЩЕСТВ РАЗЛИЧНОЙ ПРИРОДЫ АЛЮМОСИЛИКАТОМ И ЕЁ ПРИМЕНЕНИЕ В ХИМИЧЕСКОМ АНАЛИЗЕ

Грибанов Е.Н., Варнавская И.В., Макарова С.Н.

*Орловский государственный университет имени И.С. Тургенева,
302028, Орёл, Комсомольская 95,
e-mail: gribanovEN@gmail.com*

Сорбционные материалы находят широкое применение в химическом анализе на стадии предварительного концентрирования веществ и нивелирования мешающего действия матрицы. Хорошо зарекомендовали себя в качестве сорбентов алюмосиликаты, отличающиеся высокой сорбционной способностью, экономической доступностью, возможностью модифицирования их поверхности для придания требуемых свойств.

В работе систематически изучены сорбционные свойства природного алюмосиликата Хотынецкого месторождения по отношению к Pb(II), Zn(II), Hg(II), Cd(II), Ni(II), As(III), Fe(III), U(VI) и Sr(II), а также соединениям органической природы: 23 пестицидам различных классов (фосфор- и хлорорганические, синтетические пиретроиды, триазолы), ПАУ (бенз(а)пирен), антибиотикам тетрациклинового ряда (тетрациклин, хлортетрациклин, окситетрациклин, доксициклин, демеклоциклин).

Для пестицидов сорбция изучена из следующих растворителей: ацетон, ацетон-вода (1:1), вода, гексан, ацетонитрил. Для остальных соединений сорбцию изучали из водных систем. Определено влияние кислотности среды и время контакта фаз на степень извлечения аналитов. Установлена сорбционная емкость минерала по каждому из аналитов. Найдены коэффициенты распределения. По данным ИК-спектроскопии сделано предположение о вероятном химизме протекающих процессов.

На основе полученных данных разработаны и апробированы методики, включающие стадию предварительного концентрирования или очистки проб: определения пестицидов методом ГХ-МС в зерновых культурах и природных водах; определения антибиотиков тетрациклинового ряда в природных водах методом ВЭЖХ-МС/МС и в молочных продуктах методом ВЭЖХ-УФ; цветометрического и тест определения тетрацилина и доксицилина в молоке и молочных продуктах; атомно-абсорбционного определения Hg(II), Cd(II), и As(III) в природных и сточных водах; определения бенз(а)пирена в некоторых объектах легкой промышленности методом ВЭЖХ с флуориметрическим детектированием.

Достоинствами предлагаемых способов являются высокая чувствительность и воспроизводимость результатов, экономическая доступность и возможность замены импортных сорбционных материалов.

ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОСЕТЕЙ, УЧИТЫВАЮЩИХ ФИЗИЧЕСКУЮ ИНФОРМАЦИЮ, ДЛЯ ОБРАБОТКИ РЕЗУЛЬТАТОВ ФРАКЦИОННОГО ГАЗОВОГО АНАЛИЗА

Кнорре Д.Д.,^а Крылов А.С.,^а Григорович К.В.,^б Фельдман Ю. К.^б

^аМГУ имени М.В.Ломоносова Факультет вычислительной математики и кибернетики,
119991, Москва, Ленинские горы, 2-й учебный корпус

^бИМЕТ РАН, 119334, Москва, Ленинский просп., 49
e-mail: konstantin.grigorovich@gmail.com

Фракционный газовый анализ (ФГА) представляет собой модификацию метода высокотемпературной экстракции кислорода и азота из образца в несущем газе при заданном режиме нагрева. Метод основан на различиях в термодинамической стабильности оксидов и нитридов и возможности их фракционного разделения при монотонном нагреве в печи анализатора. При этом неметаллические включения (НВ) восстанавливаются углеродом с образованием СО. После этого СО доокисляется до углекислого газа СО₂, который регистрируется ИК-ячейкой аппарата LECO TC600. Таким образом на выходе прибор выдает информацию о зависимости скорости выделения СО₂ из образца от температуры. Одной из трудностей ФГА является сложность интерпретации результатов анализа, что связано с априорной неопределенностью математической обработки данных. В рамках данной работы для интерпретации результатов ФГА был разработан метод на основе нейронных сетей, учитывающих физическую информацию. Предложенный алгоритм позволяет оценить кривую выделения СО₂ при карботермическом восстановлении каждого типа оксидных включений, потенциально содержащихся в образце. Для этого нейронная сеть обучается предсказывать зависимость скорости выделения СО₂ для каждого типа оксидных включений от температуры. Обучение происходит через минимизацию функции потерь при помощи градиентного метода Adam. Функция потерь включает в себя слагаемые, отвечающие за соответствие полученных функций дифференциальному уравнению, моделирующему процесс выделения СО₂ из образца при неизотермическом восстановлении НВ углеродом. Разработанный алгоритм был протестирован на стандартном образце ГСО 9110-2008 состава стали ШХ15 с аттестованным содержанием общего кислорода 9±1 ppm. Результаты тестирования предложенного алгоритма показали, что СКО определения кислорода в оксиде алюминия составляет 0.8 ppm, что соответствует результатам, полученным обработкой в ПО OXSEP PRO (0.7 ppm).

ИССЛЕДОВАНИЕ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА ОКСИД ГРАФЕНА/ КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗА/НАНОЧАСТИЦЫ ЖЕЛЕЗА ПО ОТНОШЕНИЮ К ИОНАМ Pb(II) И Zn(II) МЕТОДОМ АЭС-ИСП

Громьяк И.Н.^а, Бабкин А.В.^б, Нескоромная Е.А.^в.

^аИнститут геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН,
Москва, 119991, г. Москва, ул. Косыгина, д.19.

e-mail: gnom.motl@bk.ru

^бХимический факультет МГУ имени М. В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3.

^вЧУ «Наука и инновации», 119017, г. Москва, ул. Б/Ордынка, д. 24.

В последнее время проблемы загрязнения водных ресурсов становятся особенно актуальными в связи со значительным увеличением темпов развития урбанизации, объемов промышленного производства и сельского хозяйства¹. Одним из наиболее перспективных методов повышения качества водоподготовки является разработка новых типов сорбционных материалов с улучшенными характеристиками².

Работа посвящена исследованию сорбционных свойств композиционного сорбционного материала на основе оксида графена, карбоксиметилцеллюлозы и наночастиц оксидов железа.

Содержание ионов Pb(II) и Zn(II) определяли методами атомно-эмиссионной спектроскопии с индуктивно связанной плазмой (АЭС-ИСП), с использованием спектрометра iCAP-6500 Duo (Thermo Scientific).

Установлено, что максимальные значения сорбционной емкости материалов с различным массовым содержанием оксидов железа, при извлечении ионов Pb(II) и Zn(II) из водных растворов, составляют 680 и 387 мг/г соответственно. Полученные кинетические кривые сорбционного извлечения могут быть представлены моделью псевдо-второго порядка (с наибольшим коэффициентом детерминации). Показано, что синтезированный композиционный материал эффективен для селективного извлечения тяжелых металлов из загрязненных водных сред³.

Литература

1. С. Zamora-Ledezma, D. Negrete-Bolagay et al. *Environmental Technology & Innovation*, 2021, **22**, 101504.
2. Бабкин А.В., Захарченко Е.А. и др. *Сорбционные и хроматографические процессы*. 2022, **22**, 650.
3. Neskornnaya E.A., Melezhyk A.V., Mkrchan E.S. et al. *Inorganic Materials: Applied Research*, 2023, **14**, 358.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект №21-79-00152. (<https://rscf.ru/project/21-79-00152/>)

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СКОРОСТИ ВЫЩЕЛАЧИВАНИЯ КОМПОНЕНТОВ НАТРИЙАЛЮМОЖЕЛЕЗОФОСФАТНОГО СТЕКЛА МЕТОДОМ АЭС-ИСП

Громьяк И.Н., Фими́на С.А., Белова К.Ю., Винокуров С.Е., Колотов В.П.

*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН,
119991, г. Москва, ул. Косыгина, д.19,
e-mail: gnom.motl@bk.ru*

В настоящее время в России реализуется принцип необходимости повышения уровня безопасности обращения с образующимися и накопленными радиоактивными отходами (РАО), состоящий в переводе всех видов отходов в твердые химически- и радиационно-стойкие матрицы для последующего временного контролируемого хранения и/или окончательного захоронения. Ранее для иммобилизации высокожелезистых РАО было предложено натрийалюможелезофосфатное (НАЖФ) стекло оптимального состава, мол. %: $40\text{Na}_2\text{O}-10\text{Al}_2\text{O}_3-10\text{Fe}_2\text{O}_3-40\text{P}_2\text{O}_5$.¹ При этом состав получаемого стекла может отличаться от оптимального при отверждении отходов сложного химического состава, содержащих металлы в значительном количестве. Таким образом, в данной работе получены образцы НАЖФ стекла при варьировании состава структурообразующих компонентов и исследована их гидrolитическая устойчивость.

Гидролитическая устойчивость НАЖФ стекла является главным критерием применимости матриц для отверждения РАО, которую оценивали по дифференциальной скорости выщелачивания компонентов. Устойчивость к выщелачиванию образцов определяли в динамическом режиме в аппарате Сокслета по стандартной методике «Powder», а также в статических условиях в соответствии с тестом РСТ. Условия исследований: измельченный образец стекла – размер частиц 0,01-0,02 мм; выщелачиватель – бидистиллированная вода; температура среды – 95°C («Powder») и 90°C (РСТ), общее время выщелачивания – 10 суток («Powder») и 7 суток (РСТ). Отбирали раствор после выщелачивания образцов и подкисляли концентрированной азотной кислотой до pH~1. Содержание элементов в растворах после выщелачивания определяли методом атомно-эмиссионной спектроскопии с индуктивно связанной плазмой (АЭС-ИСП) с использованием спектрометра iCAP-6500 Duo (ThermoScientific). Установлена высокая устойчивость НАЖФ стекла к выщелачиванию матрицеобразующих компонентов в различных условиях, имитирующих размещение отходов в хранилищах.

Литература

1. Стефановский С.В. и др. *Радиохимия*, 2015, 57, 295.

Исследование выполнено за счет гранта РФФИ № 22-73-10202, <https://rscf.ru/project/22-73-10202/>.

АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ ОН-ЛАЙН МАГНИТНАЯ ТВЕРДОФАЗНАЯ МИКРОЭКСТРАКЦИЯ ФЕНОЛЬНЫХ ТОКСИКАНТОВ

**Губин А.С.,^а Сыпко К.С.,^б Суханов П.Т.,^а Кушнир А.А.,^а
Евдокимов А.А.,^б Болдырев Д.В.^б**

*^аФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет инженерных технологий»,
394036, Воронеж, пр. Революции, 19*

*^бФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»,
355017, Ставрополь, ул. Пушкина, 1
e-mail: goubinne@mail.ru*

Применение магнитных сорбентов для концентрирования – эффективный инструмент для извлечения веществ из сложных и загрязненных матриц различного состава. Магнитные свойства также позволяют управлять сорбентом и создать автоматизированные системы для он-лайн магнитной твердофазной микроэкстракции, включая все стадии процесса (сорбция аналита, десорбция и регенерация сорбента).

Для автоматизированных систем предложены различные конструкции патронов для концентрирования. Сорбционное концентрирование можно проводить в колонке, в которой сорбент иммобилизован с помощью двух неодимовых магнитов. Другим вариантом является патрон с микромешалкой, в котором сорбент иммобилизован на стенках сосуда и удерживается за счет магнитов, находящихся с внешней стороны. Магниты отводятся и подводятся с применением манипулятора, управляемого сервомотором.

В качестве цифрового регулятора автоматизированной установки использовалось компактное программируемое реле. Персональный компьютер с предустановленным специализированным программным обеспечением применялся как источник задающих воздействий цифрового регулятора. Для вывода и редактирования текстовых и цифровых параметров системы применялась компактная символьная панель с управляемой логикой совместно с контроллерами или модулями ввода и вывода, подключенными по сети RS-485.

Разработаны методики динамического он-лайн концентрирования для фенольных токсикантов и производных фенола (нонилфенола, октилфенола, бисфенола А, хлорфенолов и дихлорфеноксиуксусных кислот) с использованием магнитных сорбентов на основе гуматов, сверхсшитого полистирола и углей.

RB-SR МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВОЗРАСТА ГЕОЛОГИЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГАММА-АКТИВАЦИОННОГО АНАЛИЗА

Густова М.В., Каплина С.П., Бубликова Н.С., Бодров А.Ю., Аксенов Н.В.

*Объединенный институт ядерных исследований,
141980, Московская обл., г. Дубна, Жолио Кюри д.6,
e-mail: gust@jinr.ru*

Гамма-активационный анализ (ГАА) применялся для определения содержания химических элементов и оценки возраста геологических образцов методом рубидий-стронциевого датирования¹.

Преимущество усовершенствованного Rb-Sr метода заключается в расчете содержания изотопа ⁸⁷Sr без предварительной масс-сепарации. Изотоп ^{87m}Sr ($E_{\gamma} = 388$ кэВ, $T_{1/2} = 2.81$ ч) может быть получен двумя способами: ⁸⁷Sr(γ, γ')^{87m}Sr и ⁸⁸Sr(γ, n)^{87m}Sr. Для минимизации второго побочного пути образования изотопа ^{87m}Sr энергия пучка была выбрана около 10 МэВ². В качестве эталона в данной работе использовался стандартный образец Сибирского траппа (СТ-1А) с известным возрастом³. Образцы и стандарт одновременно активировались тормозным излучением ускорителя электронов (микротрона) МТ-25 ЛЯР ОИЯИ. Для определения элементного состава и оценки возраста использовались энергии пучков 24 и 10 МэВ, соответственно. Данные о содержании Rb и Sr в образцах в дополнение к ГАА также были получены с помощью РФА. Для расчетов использовались основное уравнение распада и данные, рекомендованные Подкомиссией по хронологии Международного союза геологических наук¹. На основе полученных результатов, проведена классификация геологических образцов и оценка их возраста. Данный метод оценки возраста геологических образцов с помощью ГАА был апробирован на образцах, отобранных в западной части Тибетского нагорья в районе горы Кайлас⁴ и на образцах из пустыни Гоби.

Литература

1. Фор Г. Основы изотопной геологии. – М.: Мир, 1989. – 589с.
2. Гангрский Ю.П., Мазур В.М., ЭЧАЯ, 2002, 33, 158.
3. Ivanov A.V., Rasskazov S.V., Feoktistov G.D., He H., Boven A. *Terra Nova*, 2005, 17, 203.
4. Gustova M.V., Maslov O.D., Norov N., Trinh T. T. M. *ISINN-23*, 2015, Dubna, JINR, E3-2016-12, 394.

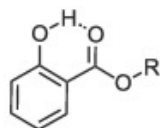
Авторы выражают благодарность профессору Н. Норову (Центр ядерных исследований Национального университета Монголии, г. Улан-Батор) за предоставленные образцы.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИК И КР СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ И КОНТРОЛЯ ЭКСТРАКЦИИ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ ЭФИРАМИ САЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ

Демина Л.И., Аверин А.А., Бездомников А.А., Цивадзе А.Ю.

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н.Фрумкина Российской академии наук,
119071, Москва, Ленинский проспект 31, корп.4
e-mail: liudmilademina@rambler.ru*

В качестве объектов исследования были использованы сложные эфиры салициловой кислоты следующего состава:



R = CH(CH₃)₂ (I), C₅H₁₁ (II), C₈H₁₇ (III).

Проведено исследование ИК и КР спектров эфиров салициловой кислоты и комплексов лития, натрия и калия с ними. В результате проведенного анализа были предложены спектроскопические критерии, на основе которых определено, что в экстрактах сложные эфиры салициловой кислоты образуют комплексы с щелочными металлами. Исследования проводили для кристаллических образцов и для растворов в хлороформе.

Поскольку изученное ранее соединение I показало себя перспективным в качестве экстрагента¹, были исследованы II и III с точки зрения трансляции этих возможностей по гомологическому ряду.

Анализ спектров органической и водных фаз дает информацию о том, в какой форме (свободной или в составе комплексов) находится экстрагент. На основе спектральных данных предложены рекомендации о снижении потерь экстрагента. Так, для системы с I был зафиксирован гидролиз сложного эфира с образованием салицилатов щелочных металлов, хорошо растворимых в воде. Для предотвращения потерь экстрагента было предложено использование более липофильных экстрагентов II и III. Проверка экстракционных характеристик систем с II и III позволила предложить эти экстрагенты в качестве перспективных для выделения ЩМ из рассолов².

Литература

1. Tsivadze A.Yu, Bezdornnikov A.A., Baulin V.E., Demina L.I, Birin K.P., Baulin D.V., Rogacheva Yu. I. *Molecules* 2022, 27(10), 3051.
2. Bezdornnikov A.A., Kostikova G.V., Baulin D.V., Tsivadze A.Yu. *Separation and Purification Technology*. 2023, 124137.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (соглашение о предоставлении гранта №075-15-2024-534)

АМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПИРОВИНОГРАДНОЙ КИСЛОТЫ НА ЭЛЕКТРОДЕ, МОДИФИЦИРОВАННОМ БИНАРНОЙ СИСТЕМОЙ КОБАЛЬТ-ПАЛЛАДИЙ В УСЛОВИЯХ ПОРЦИОННО- ИНЖЕКЦИОННОГО АНАЛИЗА

Добрынина Ю.П., Челнокова И.А., Шайдарова Л.Г., Будников Г.К.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
420008, Казань, ул. Кремлевская, д. 18,
e-mail: juliad99@mail.ru*

Пировиноградная кислота (ПК) – важная органическая биомолекула, играющая фундаментальную роль в метаболизме жиров, белков и углеводов. ПК может выступать важным биомаркером различных заболеваний в клиническом анализе. Определение уровня ПК в биологических жидкостях человека может помочь в раннем выявлении некоторых видов рака, в диагностике и лечении дефицита витамина В₁, диабета II типа и сердечно-сосудистых заболеваний.

В настоящей работе была изучена каталитическая активность бинарной системы кобальт-палладий (Co-Pd), иммобилизованной на поверхности углеродных электродов (стеклоуглеродного электрода (СУ) и планарного электрода (ПЭ)), при окислении ПК в условиях циклической вольтамперометрии и порционно-инжекционного анализа (ПриА).

На немодифицированном углеродных электродах в рабочей области потенциалов ПК не окисляется. На анодной ветви циклической вольтамперограммы окисления ПК, полученной на электроде Co-Pd-СУ, наблюдается один пик при E 1.25 В, в области окисления модификатора, высота которого зависит от концентрации органического соединения. При этом регистрируется многократный прирост тока по сравнению с током окисления модификатора.

Разработан способ амперометрического детектирования ПК на электроде Co-Pd-ПЭ в условиях ПриА. Были выбраны рабочие условия регистрации аналитического сигнала в условиях потока. Линейная зависимость тока пика от концентрации аналита наблюдается в интервале от 5×10^{-6} до $5 \cdot 10^{-2}$ М. Проведение анализа в При-системе по сравнению со статическими условиями позволяет снизить нижнюю границу определяемых содержаний ПК на два порядка.

Разработанный способ отличается простотой и высокой чувствительностью, воспроизводимостью, а также производительностью и экспрессностью.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета.

ПОДГОТОВКА К ЭЛЕМЕНТНОМУ АНАЛИЗУ МЕТОДАМИ АЭС/МС-ИСП ОБРАЗЦОВ РАСТЕНИЙ С ПОВЫШЕННЫМ СОДЕРЖАНИЕМ КРЕМНИЯ

Догадкин Д.Н., Громьяк И.Н., Голубев Ф.В., Тюрин Д.А., Колотов В.П.

*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского
Российской академии наук,
119991, г. Москва, ул. Косыгина, д.19,
e-mail: denisnd@mail.ru*

Изучение элементного состава растений широко применяется в качестве инструмента для изучения специфических особенностей условий их роста, а также состояния окружающей среды, особенно в местах техногенных загрязнений. Наиболее удобными методами для многоэлементного анализа являются масс-спектрометрия и атомно-эмиссионная спектроскопия с индуктивно-связанной плазмой (МС-ИСП и АЭС-ИСП), использование которых требует перевод проб в раствор. Растворение образцов может осуществляться в открытой системе, например смесью азотной и хлорной кислот. Также успешно применяется кислотная минерализация в микроволновых системах, для чего используется азотная кислота либо ее смесь с перекисью водорода. Однако в случаях, когда в растениях присутствует более 0,1% кремния, нередко происходит образование осадка кремниевой кислоты, который может содержать и другие определяемые элементы. Кроме того, знание содержания кремния в растительных образцах дает важную информацию об устойчивости растений к внешним воздействиям. Одним из вариантов устранения данной проблемы является добавление в реакционную смесь небольшого количества фтористоводородной кислоты, которого, тем не менее, достаточно для удержания кремния в растворе¹.

В настоящей работе для перевода в раствор путем кислотной минерализации в микроволновой системе MARS-5 высушенных образцов растений (250-300 мг), собранных вблизи Садоно-Унальской котловины Северной Осетии, мы использовали смесь перекиси водорода (1.5 мл) с азотной (4 мл), соляной (0.5 мл) и фтористоводородной (0.03-0.05 мл) кислотами. Сравнение результатов анализа для ряда стандартных образцов, таких как TP-1 (травосмесь луговая), INCT-MPH-2 (смесь трав) и др., показало хорошее согласие с аттестованными значениями содержания элементов.

Литература

1. Зак А.А., Шабанова Е.В., Васильева И.Е. Всероссийская конференция «Современные направления развития геохимии», 2022, Иркутск, 1, 198.

НОСИМАЯ ГАЗОВАЯ БИСЕНСОРНАЯ СИСТЕМА ДЛЯ ОЦЕНКИ СОСТОЯНИЯ ЗДОРОВЬЯ ПО ЗАПАХУ КОЖИ

Доровская Е.С., Кучменко Т. А.

*Воронежский государственный университет инженерных технологий 394036,
г. Воронеж, проспект Революции, 19,
e-mail: dorowskaia.evg@yandex.ru*

Газовые сенсоры активно внедряются во многие области человеческой жизнедеятельности, в том числе в медицинскую диагностику. Кожа, выделяя летучие соединения, продукты реакций метаболизма, позволяет сделать способ диагностики при помощи сенсоров полностью неинвазивным и безболезненным. Эпоха всемирной цифровизации диктует правила разработки «умных» устройств, способных оценить важные параметры организма человека, передавая информацию на персональное мобильное устройство.

Работа направлена на разработку бисенсорного смарт-браслета с программным обеспечением, обрабатывающим многомерный аналитический сигнал системы, для оценки состояния организма по запаху кожи. В ходе исследования разработано и изготовлено мобильное устройство, представляющее собой браслет с ячейкой детектирования, в которой располагаются два пьезосенсора с наноструктурированным твердотельным сорбентом. Принцип работы устройства заключается в попеременной нагрузке летучими соединениями каждого чувствительного элемента бисенсорной системы в течении 30 с. Регенерация чувствительного слоя происходит самопроизвольно при отсутствии нагрузки летучими соединениями. Наличие двух пьезосенсоров позволяет увеличить надежность получаемой информации. Фиксирование изменения частоты колебания сенсоров происходит в виде двойных непрерывных хроночастотограмм, формирующих пятимерный аналитический сигнал. Нормирование выходных кривых сенсоров позволяет убрать шум и сгладить не идентичность сенсоров, повысив при этом достоверность результатов. Проведено обучение системы по набору летучих соединений – маркеров патологических и естественных процессов организма. Установлен набор высоконадежных кинетических параметров сорбции, которые определяются природой и концентрацией летучих веществ. Разработан алгоритм оценки состояния организма по запаху кожи при помощи бисенсорной системы. Удалось идентифицировать следующие состояния: голод, стресс, нарушения в работе ЖКТ и сердечно-сосудистой системы, наличие в организме воспалительных процессов, вируса, что согласуется с литературными данными и установленными летучими соединениями в биопробах добровольцев.

Работа выполнена в рамках гранта «Старт-1 2022» г/к 4838ГС1/80291 от 13.12.2022

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА КАПИЛЛЯРНОГО ЭЛЕКТРОФОРЕЗА ДЛЯ КОЛИЧЕСТВЕННОГО АНАЛИЗА МИЦЕЛЛЯРНЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ НА ОСНОВЕ ГИДРОФОБИЗИРОВАННОЙ ГИАЛУРОНОВОЙ КИСЛОТЫ

**Антонова М.М., Поливанова А.Г., Семенова И.Н.,
Соловьева И.Н., Ермоленко Ю.В.**

*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
Москва, Миусская пл., д.9,
e-mail: ermolenko.iu.v@muctr.ru*

Метод капиллярного электрофореза часто используется для анализа биополимеров, в том числе гиалуроновой кислоты. Целью исследования является разработка простых и надежных методик капиллярного электрофореза для количественного анализа мицеллярных лекарственных форм на основе низкомолекулярного олеилгиалуронана и его нафталеимидных производных. Такие формы представляют собой полимерные мицеллы, образованные гидрофобизированным низкомолекулярным гиалуронаном. Их загружают гидрофобными лекарственными веществами (ЛВ). При анализе таких форм важно предусмотреть пробоподготовку, обеспечивающую полное высвобождения ЛВ из мицеллярной среды, что часто представляет сложность. Эта проблема отсутствует при использовании капиллярного зонного электрофореза.

Для количественного определения гиалуронана применили капиллярный зонный электрофорез («Капель-105М», ООО «Люмэкс»). Условия анализа: капилляр внутр. диаметр 50 мкм, $L_{эф}/L_{общ} = 40/50$ см, $\lambda = 190$ нм, 35°C , $U = -20$ кВ. Состав ведущего электролита 0,2М Трис-буфер (рН 3). Время миграции пика гиалуронана в зависимости от молекулярной массы и природы гидрофобной молекулы в конъюгате составляло от 12 и до 14 минут. Для олеилгиалуронана (15 кДа) уравнение градуировочной функции: $y = 0.7314 \cdot x$, коэффициент корреляции 0,9994. Эффективность определения полимера составила 14072 теоретических тарелок. Предел обнаружения 0,44 мкг/мл. Таким образом, с учетом полимерной природы анализируемого объекта, аналитические и метрологические характеристики представляемой методики удовлетворительны. Показано, что разработанные методики позволяют правильно и воспроизводимо определять как различные конъюгаты низкомолекулярной ГК, так и нативную ГК с различными молекулярными массами. Одновременно показана возможность количественного определения и ЛВ, загруженных в мицеллы (рифабутин и др.), для ряда разрабатываемых мицеллярных лекарственных форм.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-25-00194.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОСТАТОЧНОГО СОДЕРЖАНИЯ ЦЕФУРОКСИМА В ПРОДУКЦИИ ЖИВОТНОВОДСТВА

Жедулов А.Е., Некрасов Д.Ю., Батов И.В., Сорокин А.В.

*Всероссийский государственный центр качества
и стандартизации лекарственных средств для животных и кормов (ФГБУ «ВГНКИ»),
123022, Россия, г. Москва, Звенигородское ш., 5,
e-mail: a.zhedulov@vgnki.ru*

Разработана методика определения остаточного содержания цефуроксима в пищевой продукции. Работа относится к области количественного химического анализа в приложении к определению остатков лекарственных препаратов (подтверждающим) методом ВЭЖХ МС/МС.

Цефуроксим относится к группе цефалоспориновых антибиотиков 2-го поколения, входящих в семейство бета-лактамов лекарственных препаратов. На территории РФ зарегистрировано несколько препаратов с данным действующим веществом: цефурокс, зиннат, комбинированный препарат прималакт. На сегодняшний день в РФ реализуется действующий стандарт количественного определения цефалоспоринов¹, не включающий цефуроксим в спектр определяемых соединений. В техническом регламенте² установлен контроль за остаточным содержанием антибиотиков цефалоспориновой группы, в некоторых странах тихоокеанского региона установлен МДУ на содержания цефуроксима.

В работе был использован жидкостной хроматограф 1290 (Agilent, США) и масс-спектрометрический детектор 6500 QTRAP (Sciex, Канада). Исходные и рабочие растворы цефуроксима и цефапирина-d4 готовили растворением в метаноле. Значения параметров настройки квадрупольного анализатора были получены непосредственным вводом растворов концентрацией 200 нг/мл в масс-спектрометр: цефуроксим в отрицательном режиме MRM (ESI) m/z иона-прекурсора 423,2, ионы-продуктов 206,9/318,2, DP -15, CE -18 SXP -12. Подготовка проб, условия хроматографии, а также параметры цефапирина-d4 были заимствованы из действующего метода¹. Количественную обработку хроматограмм проводили методом внутреннего стандарта. Проведена оценка метрологических характеристик разработанной методики. Диапазон определяемых содержаний цефуроксима – 5–1000 мкг/кг, показатель точности (границы относительной погрешности при вероятности $p=0,95$), $\pm \delta$, % не превышает 30.

Литература:

- 1 ГОСТ 34137-2017 Метод определения остаточного содержания цефалоспоринов с помощью высокоэффективной жидкостной хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием
- 2 Технический регламент Таможенного союза ТР ТС 034/2013 О безопасности мяса и мясной продукции.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА ПОЛЕВОШПАТОВОЙ БРЕКЧИИ (NWA 11828) МЕТОДАМИ МС/АЭС-ИСП

**Жилкина А.В.^а, Сибрина М.А.^{а,б}, Тюрин Д.А.^а, Лахманова Л.А.^{а,в}
Громяк И.Н.^а, Колотов В.П.^а**

^а *Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН,
119991 Москва, ул. Косыгина 19,
e-mail: avzhilkina@gmail.com*

^б *Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова
(РТУ МИРЭА), 119454 Москва, пр-т Вернадского 78 стр. 4*

^в *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Ленинские горы, д. 1*

Сложность исследования метеоритов, включая лунные метеориты, представителями которых являются полевошпатные брекчии, заключается в их уникальности и, часто, в ограниченном количестве материала. Для создания и отработки методики пробоподготовки и анализа различными инструментальными методами необходимы земные аналоги. Например, стандартных образцов (СО), схожих по петрогенетическим признакам с анализируемыми объектами.

Для полевошпатовой брекчии (лунного вещества) NWA-11828 такими материалами являются стандартные образцы состава анортозит МО-6 (ГСО 2120-81, Россия) и гранит GS-N (ANRT, Франция).

Качество анализа методами МС/АЭС-ИСП определяется полнотой вскрытия минеральных компонентов пробы, в число которых могут входить труднорастворимые минералы. Неполное их растворение может существенно исказить результаты анализа твердых образцов и влиять на интерпретацию геохимических данных.

Для пробоподготовки изучены минеральные фазы полевошпатовой брекчии NWA-11828 и разработана методика кислотного разложения при атмосферном давлении, состоящая из двух основных операций: реакция с бифторидом аммония (230 С, 2 часа) и с хлорной кислотой (200 С, 5 час.) после твердофазного фторирования (бифторидом аммония).

Апробацию методики проводили на примере СО анортозита (МО-6) и гранита (GSN). Полученные результаты сравнивали с другими способами пробоподготовки: кислотной минерализацией проб при атмосферном давлении и в автоклавах. Оценку правильности способов пробоподготовки и анализа проводили с помощью сравнения результатов анализа с аттестованными значениями СО.

Показано, что использование разработанной методики обеспечивает получение метрологически надежных результатов для большого числа элементов.

МНОГОСЛОЙНЫЕ ПОКРЫТИЯ СТенок КВАРЦЕВОГО КАПИЛЛЯРА ДЛЯ ЭЛЕКТРОФОРЕТИЧЕСКОГО РАЗДЕЛЕНИЯ ЭНАНТИОМЕРОВ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ

Зиангирова Э.Р., Колобова Е.А., Макеева Д.В., Соловьева Е.В., Карцова Л.А.

*Санкт-Петербургский государственный университет,
Институт химии, 198504, Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский проспект, 26
e-mail: st097674@student.spbu.ru*

Определение энантиомеров лекарственных веществ - актуальная задача биоаналитической химии, поскольку один из изомеров может оказывать негативное воздействие на организм человека. Метод капиллярного электрофореза (КЭ) имеет принципиальные резервы в решении подобных задач благодаря возможности реализации различных режимов разделения аналитов с участием модификаторов электрофоретических систем.

В данном исследовании объединены уникальные свойства наночастиц и положительно заряженных полиэлектролитов при создании физически адсорбированных многослойных покрытий путем чередования противоположно заряженных слоев модификаторов. Такой способ формирования покрытий позволяет повысить энантиоселективность разделения аналитов за счет увеличения концентрации активных центров хирального селектора на стенках капилляра.

Цель работы – создание хиральных многослойных покрытий с использованием хитозана и альбумина в качестве хиральных селекторов в сочетании с цитрат-стабилизированными наночастицами золота (цНЧЗ) для разделения энантиомеров лекарственных веществ.

Создание покрытий на основе хитозана является малоизученной областью. Его свойства сильно зависят от степени деацелирования, что в первую очередь сказывается на его растворимости. Хитозан может выполнять как функцию связующего слоя при формировании плотных покрытий, так и выступать в качестве хирального селектора. Авторами сформированы одно- и трехслойные покрытия с использованием хитозана, которые в сочетании с (2-гидроксипропил)- β -циклодекстрином (двойная хиральная система) обеспечили разделение энантиомеров β -блокаторов с высокой энантиоселективностью.

Получены также многослойные покрытия на основе другого хирального селектора - альбумина за счет лигандного обмена в координационной сфере цНЧЗ. Методом СЭМ показано, что пятислойные покрытия демонстрируют высокую плотность модификатора на стенках капилляра, позволяя осуществлять хиральное разделение в режиме капиллярной электрокинетической хроматографии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-13-00378.

ВОЛОКНА ИЗ СЕТОК ОДНОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК – НОВЫЙ ЭЛЕКТРОДНЫЙ МАТЕРИАЛ ДЛЯ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

**Иванова Н.В., Карягина М.Ю., Затолокина О.А., Вершинина А.И.,
Ломакин М.В., Гордая О.Р., Шандаков С.Д.**

*ФГБОУ ВО «Кемеровский государственный университет»,
Россия, 650000 Кемерово, Красная, 6,
e-mail: sayganta@mail.ru*

В настоящее время актуальным направлением развития аналитической химии является создание сенсорных устройств для экспрессного определения различных веществ, в том числе в режиме реального времени. При этом к наиболее перспективному варианту следует отнести регистрацию электрохимического отклика, что объясняется возможностью варьирования аналитических характеристик сенсоров за счет применения различных электродных материалов и способов их модификации.

Разработана технология создания волоконных сенсоров из сеток однослойных углеродных нанотрубок (ОУНТ) на основе метода «мокрого вытягивания» [1] для определения ряда аналитов неорганической (ртуть, свинец, кадмий, мышьяк) и органической (фенол, дофамин и аскорбиновая кислота) природы методами вольтамперометрии (ВА). Сетки ОУНТ получали аэрозольным CVD методом. Оптимизированы способы подготовки поверхности и модификации (наночастицами Au, Fe₂O₃/Pd) электродного материала, специфичные для выбранного аналита. Для характеристики сеток и затем, волокон из ОУНТ использовали методы ТЭМ, СЭМ и ряд электрохимических методов исследования, включая импедансную спектроскопию. Проведен выбор условий регистрации аналитических сигналов на модельных объектах и исследована возможность применения сенсоров при анализе реальных проб, и сравнение результатов со стандартными методиками. Достигнутые пределы обнаружения позволяют уверенно определять указанные металлы и мышьяк в режиме инверсионной ВА на уровне ПДК для питьевых вод; в случае фенола, дофамина и аскорбиновой кислоты в режиме адсорбционной и дифференциальной импульсной ВА на немодифицированных сенсорах возможно определение на уровне содержаний 2–10 мкг/л.

Литература

1. Zhilyaeva M.A., Shulga E.V., Shandakov S.D. et al. Carbon, 2019, 150, 69-75.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект № FZSR-2024-0005)

О МЕТОДИЧЕСКИХ ВОПРОСАХ ИЗМЕРЕНИЙ ТЕМПЕРАТУРЫ ПЛАВЛЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

Мишина К.А., Казарцев Я.В., Корчагина Е.Н., Соловьев И.В.

*ФГУП «ВНИИМ им. Д.И. Менделеева», 190005,
Санкт-Петербург, Московский проспект 19,
e-mail: Y.V.Kazartsev@vniim.ru*

Большинство эксплуатируемых средств измерений (СИ) обеспечивает возможность измерения температуры плавления органических веществ в диапазоне от комнатной температуры до 350 °С – 400 °С, причем наибольшей практической значимостью для фармацевтической и медицинской отрасли обладает диапазон до 250 °С, в котором неопределенность измерений используемых СИ составляет 0,3 °С – 1,5 °С.

Анализ метрологического обеспечения СИ, а также результатов межлабораторных сличений¹, показал, что существующее метрологическое обеспечение имеет ряд недостатков, которые негативно сказываются на единстве измерений в данной области. Анализ показал наличие существенных расхождений между аттестованными значениями стандартных образцов (СО) различных производителей, превышающие заявленные неопределенности; отсутствие единого подхода при интерпретации расхождений между результатами измерений, полученных при различных скоростях нагрева.

В лаборатории калориметрии ВНИИМ были начаты исследования в области измерений температуры плавления органических веществ. Утвержден рабочий эталон температуры, предназначенный для воспроизведения и передачи единицы температуры плавления чистым органическим веществам в диапазоне от 40 до 250 °С. Проведены экспериментальные исследования веществ – аналогов СО различных категорий, сформулированы новые подходы к поверке и калибровке СИ, а также аттестации СО температуры плавления.

Результаты проведенных исследований применены для разработки ряда СО температуры плавления высокочистых органических веществ российского производства для импортозамещения зарубежных СО и обеспечения единства и прослеживаемости измерений в данной области.

Литература

1. M. Whetton, *Accred Qual Assur*, 2012, **17**. 413.

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА СОРБЦИИ И КОНЦЕНТРИРОВАНИЯ ПИЩЕВЫХ АЗОКРАСИТЕЛЕЙ НА НАНОЧАСТИЦАХ МАГНЕТИТА И НАНОВОЛОКНЕ

Казимилова К.О., Русанова Т.Ю., Штыков С.Н.

*Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г.Чернышевского,
Саратов, Астраханская 83
e-mail: kazimirova-ks@mail.ru*

С появлением нанообъектов и нанотехнологий для сорбции и концентрирования аналитов, в том числе синтетических пищевых красителей (СПК), начали широко использовать наноразмерные сорбенты, площадь поверхности которых и сорбционная емкость значительно больше, чем у традиционных сорбентов. Среди наносорбентов большое распространение получили магнитные наночастицы (МНЧ), в частности магнетит. Его преимуществом является возможность быстро отделять осадок от раствора действием постоянного магнита. Недостатком исследований в этой области является отсутствие сравнения сорбционных свойств разных видов наносорбентов, не позволяющее выбрать наиболее удобный способ извлечения и концентрирования, сочетающийся со стадией определения красителя в объекте. В связи с этим цель нашей работы состояла в сравнении сорбции и концентрирования ряда анионных пищевых азокрасителей (тартразин, желтый закат, азорубин, очаровательный красный и понсо 4R) на МНЧ магнетита (Fe_3O_4) и новом типе нановолоконных сорбентов - полиамиде 6, полученном методом электроформования. МНЧ модифицировали хитозаном (ХТЗ) и полиэтиленгликолем (ПЭГ), придающими МНЧ катионный заряд.

Найдены оптимальные условия и параметры сорбции и концентрирования, построены кинетические модели, проанализированы закономерности процессов, показана возможность сорбционно-спектрофотометрического определения азокрасителей после десорбции с МНЧ и без десорбции на нановолокнах. Оценена возможность регенерации сорбентов и их повторного использования. На основе полученных данных разработана методика экстракционно-спектрофотометрического определения смеси азокрасителей понсо 4R, азорубина и очаровательного красного в сиропе и в БАД с применением метода проекций на латентные структуры. Достоинство разработанной методики состоит в экспрессности пробоподготовки, снижении предела фотометрического обнаружения красителей в 75 раз на МНЧ, а также возможности определения азокрасителей в смеси без их разделения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-23-00519.

КИСЛОТНАЯ МИНЕРАЛИЗАЦИЯ ПРОБ ЧЕРНЫХ СЛАНЦЕВ ДЛЯ АНАЛИЗА МЕТОДАМИ МС/АЭС-ИСП

Казин В.И., Захарченко Е.А., Громьяк И.Н., Тюрин Д.А., Колотов В.П.

*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского Российской академии наук,
119991, Москва, Косыгина, 19, Россия
e-mail: kazin98@list.ru*

Одной из наиболее сложных задач аналитической химии является определение ультранизких (нг/г) концентраций химических элементов, включая благородные металлы (БМ), в геологических образцах со сложным минеральным составом, таких как черные сланцы. Породы такого типа составляют основу сырьевой базы золотодобывающей промышленности России. Получение корректных результатов определения элементов методами МС/АЭС-ИСП во многом зависит от качества пробоподготовки, которая подразумевает минерализацию пробы и, при необходимости, концентрирование аналитов. Однако до сих пор нет надежной методики их полного разложения, учитывая, что представительная проба обычно имеет массу не менее 0,5 г.

В докладе представлена методика кислотного вскрытия проб черных сланцев. Вскрытие включает в себя два этапа: твердофазную реакцию с бифторидом аммония (2 ч, $t = 235^{\circ}\text{C}$) и поэтапное растворение плава в кислотах (HCl , HNO_3 , HClO_4). Оба этапа проводятся в одной и той же системе для кислотного разложения при атмосферном давлении [1]. Для сравнения, наряду с твердофазным фторированием были использованы кислотная минерализация в открытой системе [1] и в автоклавах [2], сплавление с пероксидом натрия.

Нами впервые показано, что твердофазное фторирование обеспечивает полную минерализацию породы. Процедура разложения весьма производительна и позволяет за два дня разложить десятки проб массой до 1 г. Приведены результаты определения 62 элементов в стандартном образце черных сланцев СЛг-1 [3] методами АЭС-ИСП и МС-ИСП.

Литература

1. Колотов В. П. и др. *Журнал аналитической химии*. 2020. Т. 75. №. 5. С. 394-407.
2. Карандашев В. К. и др. *Заводская лаборатория. Диагностика материалов*. 2016. Т. 82. №. 7. С. 6-15.
3. Васильева И.Е. Каталог стандартных образцов состава природных и техногенных сред. Иркутск. 2013

ОЦЕНКА СЛЕДОВЫХ СОДЕРЖАНИЙ ОСМИЯ ПРИ ОПРЕДЕЛЕНИИ БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ МЕТОДОМ МС-ИСП

Казин В.И., Захарченко Е.А., Тюрин Д.А., Колотов В.П.

*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И.Вернадского Российской академии наук,
119991, Москва, Косыгина, 19, Россия
e-mail: kazin98@list.ru*

При анализе геологических образцов определение осмия по сравнению с другими благородными металлами (БМ) представляет собой наиболее сложную задачу. Трудности связаны как с минерализацией образцов, так и с последующей обработкой проб кислотами при высокой температуре, в результате которой возможны потери осмия из-за образования летучего соединений OsO_4 . Существующие в настоящее время методики пробоподготовки для определения Os достаточно сложны, используют автоклавное вскрытие с последующим диффузионным концентрированием [1], минерализацию образцов в стальных автоклавах в трубках Кариуса [2] и др.

Предлагаемый нами способ оценки содержания осмия основан на минералогической близости осмия и некоторых БМ. Способ заключается в проведении определения ряда БМ (кроме осмия) после полного кислотного вскрытия проб. На следующем этапе проводится определения БМ (включая осмий) уже в вытяжках на основе царской водки. Для ряда БМ можно найти степень их экстрагирования из образца. А вот далее значение степени экстрагирования используется для введения требуемой коррекции для концентрации осмия. Ключевой вопрос это выбор опорного элемента(ов) для проведения коррекции. Обычно минералогия осмия тесно связана с иридием, иногда с платиной и золотом.

Так, для образцов сульфидной медно-никелевой руды получены следующие результаты (табл.), что соответствует предполагаемому диапазону содержания осмия (0,020÷0,099 г/т).

Результаты определения осмия с коррекцией по различным опорным элементам

Опорные эл-ты	Осмий, г/т	%, Стд.
Au, Ir, Pt	0,056	34
Au	0,051	17

Кислотную минерализацию проб (200-300 мг) проводили в открытой системе с использованием твердофазного фторирования бифторидом аммония и последовательной обработкой кислотами (HNO_3 , HClO_4 , HCl). Вытяжки из образцов (500-1000 мг) получали путем их обработки 20-40 мл царской водки при комнатной температуре в течение часа. Элементный состав растворов после кислотной минерализации руды и в «вытяжках» определяли методом МС-ИСП.

Литература

1. Тютюнник О. А. и др. *Журнал аналитической химии*. 2004. Т. 59. №. 9. С. 985-986.
2. Козьменко О. А. и др. *Аналитика и контроль*. 2011. № 4. 2011.

СПЕКТРОМЕТРИЯ ИОННОЙ ПОДВИЖНОСТИ ГАЛОГЕНПРОИЗВОДНЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ

Каплин А.А., Меламед Т.Б., Баберкина Е.П., Якушин Р.В.

*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,
125047, г. Москва, Миусская площадь, д.9
e-mail: kaplin.artem@yandex.ru*

Галогеноалканы представляют определенную опасность для здоровья человека. Задача экспресс-детектирования веществ этого класса может быть успешно решена применением метода спектрометрии ионной подвижности (ИП).

Исследования проводились на газосигнализаторе автоматическом стационарном (ГАС) «Сегмент» производства ГК «Южполиметалл-Холдинг». В результате анализа спектров ИП были определены характеристические сигналы (значения величины коэффициента приведенной ИП (КПИП)) для всех исследованных соединений как в области положительной, так и в области отрицательной ионизации.

Для математической обработки данных прибора применена программа на языке программирования Python версии 3.3., позволяющая исследовать и анализировать спектры ИП.

В спектрах ИП в области отрицательной ионизации у исследованных алкилбромидов регистрируется характеристический сигнал бромид-иона¹ (таблица 1).

Таблица 1. Значения величины КПИП в области отрицательной ионизации

Образец	MeBr	EtBr	i-PrBr	n-PrBr	n-BuBr
КПИП см ² / (В·с)	2,4753	2,4552	2,4711	2,4622	2,4523

Индивидуальная регистрация каждого из галогенопроизводных возможна вследствие существования различных значений КПИП в области положительной ионизации, что позволяет селективно детектировать их в воздушной среде (таблица 2).

Таблица 2. Значения величины КПИП в области положительной ионизации

Образец	MeBr	EtBr	i-PrBr	n-PrBr	n-BuBr
КПИП см ² / (В·с)	2,4768	1,6424	1,7932	1,7932	2,2987 1,6424

Литература

1. Karpas, Z., Pollevo, Y., & Melloul, S. (1991). Determination of bromine in air by ion mobility spectrometry. *Analytica Chimica Acta*, 249(2), P 503–507.

СПЕКТРОМЕТРИЯ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СИСТЕМЫ ИЗОБУТАНОЛ-ВОДА

Каплин А.А., Меламед Т.Б., Баберкина Е.П., Якушин Р.В.

*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,
 125047, г. Москва, Миусская площадь, д.9
 e-mail: kaplin.artem@yandex.ru*

В последнее время большое распространение приобретает экспресс-детектирование аналитов методом комбинационного рассеяния света (КР)¹. Несомненным достоинством используемого метода является его неразрушающий и бесконтактный характер. Исследование образца проводится без пробоподготовки и нарушения целостности упаковки объекта. В данном исследовании был применён отечественный портативный Раман-спектрометр (ПРС) «ХимЭксперт-Т».

Для расширения регистрационных возможностей ПРС были исследованы модельные смеси изобутанол-вода различных концентраций. Для анализа серии спектров КР и наложения полученных результатов была разработана компьютерная программа на языке программирования Python версии 3.11.8. В серию включены спектры дистиллированной воды и изобутилового спирта для сравнения характеристических сигналов. Результаты, полученные при постоянном времени экспозиции, представлены в таблице.

Таблица 1. Значения величины Рамановского сдвига (РС)

Рамановский сдвиг Концентрация, мг/мл	Интенсивность, отн. ед.		
	819.343 см ⁻¹	1463.284 см ⁻¹	2700.918 см ⁻¹
38,181	9489,599	5866,848	2312,987
15,722	5108,946	3132,011	1509,888
7,939	5108,946	1845,008	919,417
3,989	3383,354	1363,809	798,761
1,999	2533,591	1210,533	678,571

Для изобутилового спирта проведено сравнение с сигналами спектра КР дистиллированной воды. По изменению значений характеристических сигналов можно судить об изменении концентрации изобутанола в смеси и её порогового значения в системе, доступного для обнаружения изобутанола с помощью ПРС «ХимЭксперт-Т».

Литература

1. Smith, Ewen & Dent, Geoffrey. (2005). Modern Raman Spectroscopy: A Practical Approach.

АНАЛИЗ ГЕОЛОГИЧЕСКИХ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АВТОКЛАВНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ С НИЖНИМ РЕЗИСТИВНЫМ НАГРЕВОМ

Каримова Т.А.^а, Бухбиндер Г.Л.^б

^аАО «Полюс-Красноярск», 660118, Красноярск, Полигонная, 15

e-mail: KarimovaTA@polyus.com

^бООО «Группа Ай-Эм-Си»,

117638, Москва, Криворожская, 23к3, офис 23

Современные системы автоклавного разложения с нижним резистивным нагревом позволяют существенно расширить возможности подготовки образцов для массового анализа методами атомной спектроскопии.

В настоящей работе исследовано растворение геологических и технических материалов в смеси кислот HNO_3 , HCl , HF при температуре 250°C . По сравнению с растворением при температурах $180\text{--}200^\circ\text{C}$ в открытых или закрытых системах такой подход обеспечивает полное растворение минералов титана и хрома, присутствующих в геологических образцах. Растворение осуществляли в 2 стадии: на первой стадии добавляли HCl , HNO_3 и HF , на второй – раствор H_3BO_3 , чтобы связать избыток плавиковой кислоты. В случае сульфидных, сульфатных, фосфатных проб на первой стадии использовали HNO_3 и HF , и на второй HCl и раствор H_3BO_3 . По сравнению со стандартизованными методиками, использующими растворение в 4 кислотах (HCl , HNO_3 , HF , HClO_4) значительно сокращен расход кислот, обеспечивается более полное растворение проб, увеличивается производительность. Общее время на подготовку партии из 54 навесок составляет 7 часов. При использовании нескольких систем с нижним резистивным нагревом можно увеличить это количество навесок в 2-4 раза.

Исследована возможность подготовки проб угля и полимерных смол, используемых для сорбции золота из технологических растворов кучного выщелачивания золота. Для растворения навески массой 0,1-0,2 г на открытой плите требуется примерно 7 часов рабочего времени, 10 см^3 концентрированной H_2SO_4 , $25\text{--}50\text{ см}^3$ концентрированной HNO_3 , непрерывное присутствие персонала. Наши исследования показали, что при температуре 250°C для автоклавного растворения навески угля массой 0,1-0,125 г и полимерных смол массой 0,1-0,2 г достаточно иметь смесь серной, азотной и плавиковой кислот общим объемом не более 5 см^3 . Наряду с 5-10 кратным сокращением объема используемых кислот и соответствующих выбросов, существенно, в 3-4 раза уменьшается время разложения.

СОРБЦИОННАЯ АКТИВНОСТЬ СОЛЕВЫХ ВОЗГОНОВ В МЕТОДЕ ВОССТАНОВИТЕЛЬНОГО ПЛАВЛЕНИЯ

Карташова Е.С., Данилов Д.А.

*Физико-технологический институт Уральского федерального университета
имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, 620002, Екатеринбург, ул. Мира 21,
e-mail: e.s.kartashova@urfu.ru*

Определение газообразующих (ГО) примесей в твердых образцах – трудная задача для большинства современных методов аналитической химии. В настоящее время всё чаще стали использовать метод восстановительного плавления, так как он позволяет быстро и достаточно точно определить ГО примеси в монолитных образцах¹. Сейчас активно идет адаптация данного метода под определение ГО в солевых системах.

Восстановительное плавление в токе газа-носителя – метод, основанный на выделении ГО примесей, их взаимодействии с графитом при повышенной температуре с образованием аналитически активной формы (СО или СО₂), транспортируемой газом-носителем к детектору. Есть исследования по определению кислорода в сплавах, но практически нет исследований, посвященных изучению факторов, влияющих на результаты анализа солей². Одним из факторов, требующих изучения, является сорбция образующихся газов на возгонах матричных компонентов. Из-за низких значений температур кипения соли легко возгоняются и осаждаются на стенках системы, создавая возгоны, способные сорбировать монооксид углерода.

Эксперименты по исследованию влияния сорбции на солевых возгонах были проведены с использованием системы определения газообразующих примесей Horiba EMGA 620 W/C.

Исследования проводились с солями и их смесями, которые активно используются или являются перспективными для промышленности (LiF, NaF, KF, LiCl, AlCl₃). В качестве образца с известным содержанием кислорода использовался предварительно прокаленный и запрессованный оксид иттрия.

По результатам исследования был оценен вклад эффекта сорбции на солевых возгонах при определении кислорода в реальных условиях анализа.

Литература

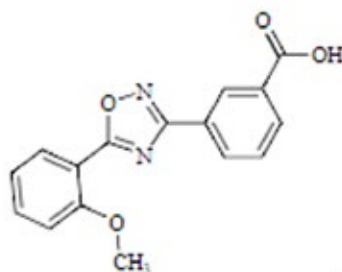
1. Григорович К.В. Новые возможности современных методов определения газообразующих примесей в металлах // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. - 2007. - №1 (73). - С. 23-34
2. Вассерман А.М. Определение газов в металлах. / А. М. Вассерман, Л. Л. Кунин, Ю. Н. Суровой. – Москва: Наука, 1976 – 344 с.

ВЫДЕЛЕНИЕ И ИДЕНТИФИКАЦИЯ ПРОДУКТА ЩЕЛОЧНОГО ГИДРОЛИЗА АКТИВНОЙ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКОЙ СУБСТАНЦИИ АТАЛУРЕН

Коробкина М.П., Попова Ю.С., Пушкин С. В., Иванов Р.А.

*АНОО ВО «Университет Сириус»,
354340, Краснодарский край, п.г.т. Сириус, Олимпийский пр-кт, д. 1,
e-mail: korobkina.mp@talantiuspeh.ru*

Актуальной задачей современной фармацевтической разработки является исследование стабильности фармацевтических субстанций. ICH Q10 и ГФ РФ предъявляют высокие требования к разрешающей способности методов выделения и определения структуры примесей. В стресс-эксперименте в условиях щелочного гидролиза аталурена образуются ограниченный набор примесей, которые удастся разделить при помощи жидкостной хроматографии. Для оценки разрешающей способности хроматографической системы был выбран пик примеси с относительным пику аталурена временем удерживания 0.84. Разрешение с основным пиком ($R_s=5.5$), количество теоретических тарелок (15 523), фактор асимметрии (1.109), отношение сигнал/шум и воспроизводимость сигнала позволило принять данную примесь в качестве маркера разрешающей системы хроматографического метода. Примесь удалось изолировать при помощи препаративной жидкостной хроматографии. Методом ЯМР вещество идентифицировано как 2-Метокси-аталурен. Молекулярная масса примеси была подтверждена методом масс-спектрометрии.



Примесь 2-Метокси-аталурен

Преимуществом всех проделанных работ является аналитическая доступность для самостоятельного приготовления раствора пригодности хроматографической системы и минимизация затрат ресурсов предприятия при закупки стороннего стандарта идентификации примесей.

Литература

1. ГФ РФ ОФС.1.2.1.2.0001.15 Хроматография;
2. ГФ РФ XV ОФС.1.1.0009 Стабильность и сроки годности лекарственных средств;
3. Испытание новых лекарственных веществ и препаратов на стабильность (ICH Q1A).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-90-04000

КОЛОРИМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОЛИДАДМАХ В ОЧИЩЕННЫХ СТОЧНЫХ ВОДАХ

Кочеткова М.А., Антонова А.Н., Тимофеева И.И., Шишов А.Ю.

*Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии,
198504, Санкт-Петербург, Университетский проспект 26,
e-mail: st068389@student.spbu.ru*

Для очистки сточных вод часто используют процессы коагуляции и флокуляции, которые заключаются в объединении взвешенных примесей в более крупные частицы и их осаждении под действием специальных реагентов – коагулянтов и флокулянтов. На практике для этих целей широкое применение получил катионный полиэлектролит полидиаллилдиметиламмоний хлорид (полиДАДМАХ), который может использоваться и как флокулянт, и как коагулянт¹. ПолиДАДМАХ не является токсичным веществом, однако при его наличии в воде, которая подвергается дезинфекции хлорорганическими соединениями, могут образовываться канцерогенные нитрозамины². Таким образом, контроль содержания полиДАДМАХ в воде является важной аналитической задачей.

Большинство способов определения полиДАДМАХ в воде характеризуются высокими пределами обнаружения, что не позволяет определять данное вещество на уровне предельно допустимой концентрации (ПДК). Кроме того, такие способы характеризуются трудоемкой пробоподготовкой с использованием дорогого оборудования. В связи с этим актуальной задачей является разработка простого и экспрессного способа для определения следовых концентраций полиДАДМАХ в очищенных сточных водах.

В данной работе предложена колориметрическая тест-система для определения полиДАДМАХ в очищенной сточной воде, основанная на его взаимодействии с анионным красителем с образованием неокрашенного ионного ассоциата и последующей экстракцией непрореагировавшего красителя в глубокий эвтектический растворитель. Концентрацию полиДАДМАХ определяют по интенсивности окраски экстракта визуальным или с помощью камеры смартфона. Способ позволяет проводить определение концентрации полиДАДМАХ во внелабораторных условиях на уровне ПДК. Разработанный способ проиллюстрирован на примере определения полиДАДМАХ в очищенной сточной воде.

Литература

1. Bolto B., Gregory J. *Water Research*, 2007, **41**, 2301.
2. Levakov I., Maor I., Barak C., Kirshenbaum Y., Rytwo G. *Water*, 2023, **15**, 3352.

Работа выполнена при финансовой поддержке СПбГУ, шифр проекта 115679504.

ГЛУБОКИЕ ЭВТЕКТИЧЕСКИЕ РАСТВОРИТЕЛИ КАК СРЕДА ДЛЯ ДЕРИВАТИЗАЦИИ АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ В АНАЛИЗЕ БИОЛОГИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЕЙ

Крехова Ф.М., Шишов А.Ю., Булатов А.В.

*Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии
198504, Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский проспект, дом 26
e-mail: f.krekhova@spbu.ru*

В современной аналитической химии особое внимание уделяют разработке новых методов, обеспечивающих возможность эффективного, селективного и чувствительного определения лекарственных веществ в пробах биологических жидкостей. При этом анализ биологических жидкостей является сложной аналитической задачей, так как матрица пробы биологических жидкостей является сложной по составу многокомпонентной системой. Новые возможности для разработки эффективных методов анализа биологических жидкостей открывает жидкостная микроэкстракция с применением избирательных и «зеленых» экстракционных систем, что позволяет обеспечить высокую скорость установления межфазного равновесия, возможность миниатюризации, автоматизации и экологическую безопасность пробоподготовки.

В настоящее время в качестве эффективных экстрагентов широкое применение в аналитической химии нашли глубокие эвтектические растворители (ГЭР). При этом ГЭР, выступая в качестве эффективных экстрагентов, могут также служить средой для дериватизации целевых аналитов.

В данной работе был реализован подход, основанный на непосредственном участии компонентов ГЭР в качестве реагентов в дериватизации полярных аналитов, плохо извлекающихся в традиционные неполярные органические растворители. Была показана возможность образования окрашенных неполярных производных (оснований Шиффа) при взаимодействии компонентов ГЭР (ароматических альдегидов) и полярных целевых аналитов. Было подтверждено, что ароматический альдегид, выступая в качестве предшественника ГЭР, способствует извлечению полярных аналитов из водной фазы за счет образования гидрофобных оснований Шиффа. Разработанный способ лег в основу схемы определения сульфаниламидов и изониазида в пробах плазмы крови и мочи.

Работа выполнена при поддержке гранта СПбГУ ID 115679504. Научные исследования частично выполнялись в ресурсном центре «Методы анализа состава вещества» СПбГУ.

РАЗРАБОТКА МЕТОДА ПРОБОПОДГОТОВКИ В АУТОПСИЙНОМ МАТЕРИАЛЕ КРАСНОГО КОСТНОГО МОЗГА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МИКРОЭЛЕМЕНТОВ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ У БОЛЬНЫХ ГЕМОБЛАСТОЗАМИ

Войтко М.С.¹, Трунова В.А.², Крупович Е.С.², Кузьмин Р.О.¹,
Мекш П.А.¹, Цигулёв К.С.¹

¹ Новосибирский государственный медицинский университет,

² Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск;
e-mail: elena.krup42@gmail.com

Пробоподготовка аутопсийных и биопсийных образцов для рентгенофлуоресцентного анализа с синхротронным излучением (РФА-СИ) не имеет четких протоколов для каждого типа биологической ткани. В работе изложен метод пробоподготовки красного костного мозга (КМ) пациентов с гемобластозами, применяемый нами для РФА-СИ. Преимуществом метода является неdestructивность – не применяются высокие температуры и кислоты, что снижает риск потери элементов или их внесения в образец. Материал КМ размещали в виде капель по 2 мкл на фторопластовую пленку и высушивали при комнатной температуре до постоянной массы. Сухой материал перетирали в ступке и формировали из него таблетки массой 14-15 мг и диаметром 8 мм. Таблетки с образцом помещали между двумя майларовыми пленками и проводили экспозицию на пучке СИ.

В проспективное исследование включено 17 человек (женщин – 8 (47%), мужчин – 9 (53%)), из них 7 (41%) больных лимфомой Ходжкина (ЛХ) с лабораторными критериями лейкемизации и 10 (59%) пациентов с острыми лейкозами (ОЛ). Медиана возраста больных – 45 (27; 56) лет. Пациенты обследованы до начала лечения и после завершения курса полихимиотерапии (ПХТ). Анализ микроэлементов осуществлялся методом РФА-СИ на базе Сибирского центра синхротронного и терагерцового излучения в ИЯФ СО РАН на накопителе ВЭПП-3. В КМ определяли химические элементы: К, Са, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, As, Se, Br, Rb, Sr, Mo, La, Th. Статистический анализ результатов проведен с использованием программы Statistica 12 (Dell, США). Полученные отклонения среднего входят в доверительный диапазон значений для международного стандартного образца А-13 (цельная кровь).

Полученные данные позволяют выделить ранние предикторы рефрактерно-рецидивирующего течения гемобластозов. Дальнейшая работа будет направлена на сравнение результатов с группой контроля, выявление прогностических взаимосвязей между выявленными нарушениями металлолигандного гомеостаза и клинико-терапевтическими особенностями у больных онкогематологическими заболеваниями.

РАЗДЕЛЕНИЕ И КОНЦЕНТРИРОВАНИЕ ИОНОВ БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ СОРБЕНТАМИ НА ОСНОВЕ КВАТЕРНИЗОВАННЫХ ПОЛИВИНИЛИМИДАЗОЛОВ

**Кузнецова К.Я.,^а Петрова Ю.С.,^а Якурнова О.Д.,^а Фролова Е.А.,^а
Цапова П.А.,^а Тележкина А.С.,^а Пестов А.В.,^{а,б} Неудачина Л.К.^а**

^аУральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19,
e-mail: lopunova.97@mail.ru

^бИнститут органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН,
620137, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, дом 22/20

Одним из важнейших требований, предъявляемых к сорбционным материалам, является их селективность, которая в свою очередь может зависеть не только от природы полимерной матрицы, но и от природы сшивающего агента и степени сшивки. В процессе сшивки поливинилимидазола путем кватернизации снижается донорная способность имидазольных групп, которые обеспечивают возможность комплексообразования с ионами благородных металлов, однако при этом возникает сетка анионообменных центров, которая позволяет изменять механизм сорбции и извлекать ионы металлов за счет ионного обмена.

Объектами исследования являлись сорбенты на основе поливинилимидазола (ПВИ), сшитого 1,4-бис(бромметил)бензолом и эпихлоргидрином, со степенями кватернизации 92 и 71 %, соответственно. Сорбенты получены в ИОС УрО РАН под руководством к.х.н. А.В. Пестова.

Исследование селективных свойств сорбентов по отношению к ионам серебра (I), золота (III), палладия (II) и платины (IV) проводили из солянокислых растворов различного состава методом ограниченного объема.

Установлено, что исследуемые сорбенты селективно извлекают ионы благородных металлов из солянокислых растворов различного состава. Стоит отметить, что при сорбции золота (III) и палладия (II) в присутствии ряда переходных металлов сорбентами также в определенной степени извлекаются ионы кадмия (II) и цинка (II) в сильноокислых средах, вследствие устойчивости их хлоридных комплексов. Показано, что ПВИ, сшитым эпихлоргидрином, также извлекаются ионы меди (II) при pH > 2.0, что может быть связано с небольшой степенью кватернизации и как следствие извлечением ионов меди (II) за счет комплексообразования. Установлено, что природа сшивающего агента влияет на селективность ПВИ незначительно. Проведена апробация исследуемых сорбентов для извлечения ионов благородных из стандартных образцов руд.

«COLORISTIC» - НОВЫЙ СПОСОБ КЛАССИФИКАЦИИ ДЛЯ ИСКУССТВЕННОГО ОБОНЯНИЯ

Кучменко Т.А.^{1,2}

¹Воронежский государственный университет инженерных технологий
394036 Россия, Воронеж, пр-кт Революции, 19

²Институт геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского
Российской академии наук, 119334, Москва, ул. Косыгина, 19

Главное назначение методов обработки многомерных данных, относящихся к объекту – уменьшение аналитического пространства данных с сохранением отличительных признаков, позволяющих найти родство или отличия образцов. С точки зрения бионики «электронные носы», как имитационные системы, должны регистрировать как можно большее число соединений в смеси или селективно реагировать на изменение концентрации тех компонентов, которые определяют ее идентичность.

Предлагается новый способ многомерной обработки данных “Coloristic” для сопоставления набора различных данных, полученных по результатам пьезокварцевого микровзвешивания равновесной газовой фазы над любым образцом. Сущность способа заключается в том, что внутри выборки сравниваемых образцов и для определенного набора сенсоров расчетным параметрам селективности A_{ij} , $a(i/j)$, нормированным количественным характеристикам смеси летучих соединений, которые регистрирует набор сенсоров, в зависимости от их численных значений присваивается определенный цвет со стандартными координатами в системе RGB или других (например, HEX). Предложен подход по обоснованию границ значений параметров для каждого цветового кода, которые зависят от метрологических характеристик параметров парной чувствительности, определяемых природой модификатора на сенсорах, величиной параметра. Предложены способы повышения надежности и распознающих свойств таких наборов данных, унифицирования границ для разных массивов. Далее цветовые метки выбранного набора параметров, максимально отличающихся для идентичных по природе проб, суммируют в любом открытом ресурсе визуальной колеровки и получают суммарный цвет для всего набора данных. Color mixer (цветовой блендер) смешивает неограниченное число цветов и оттенков, а нанесение координат смешанного (суммарного) цвета на поле позволяет однозначно определить близость или удаленность суммарной метки для конкретного образца по результатам детектирования набором сенсоров. Чем больше параметров включается в выборку, тем точнее дифференциация проб и надежнее их классификация. Готовые блоки колористики также хорошо встраиваются в персональные программы для «электронных носов».

ЭКСТРАКЦИЯ ИОНОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ В ДВУХФАЗНЫХ ВОДНЫХ СИСТЕМАХ НА ОСНОВЕ СОЛЕЙ ЧЕТВЕРТИЧНОГО АММОНИЯ С ПОСЛЕДУЮЩИМ ОПРЕДЕЛЕНИЕМ МЕТОДОМ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ С ИНДУКТИВНО СВЯЗАННОЙ ПЛАЗМОЙ

Лебедева Л.М.,^а Емельянов А.Е.,^а Смирнова С.В.^а

^аМосковский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы 1, e-mail: lebedevaliliiiia@gmail.com

Растущий спрос на безопасную и экологически безвредную “зеленую” химию является ключевой тенденцией развития современных методов аналитической химии. В частности, развитие методов жидкостной экстракции предполагает переход к новым экстракционным системам, не содержащим традиционных органических растворителей. Альтернативой традиционным гетерогенным системам жидкость-жидкость являются водные двухфазные системы (ДФВС), обе фазы которых состоят в основном из воды, более 50 мол. %¹. Образуются ДФВС при совместном присутствии водорастворимых веществ, например, органических и неорганических солей, при определенном соотношении концентраций. Выбор фазообразующих компонентов определяет доступность и свойства образующейся ДФВС, например, способность к ионному обмену и к безреагентной экстракции.

В работе описаны закономерности групповой экстракции редкоземельных элементов (РЗЭ) в новых ДФВС на основе галогенидов четвертичного аммония (бромид тетрабутиламмония, ТБАБ, и хлорид бензетония, БХ) и тиоцианата калия. Установлены границы области фазового расслоения и оптимальные условия получения новых ДФВС для количественного извлечения и концентрирования РЗЭ (10–5000 мкг/л): суммарная концентрация ($c_{\text{ТБАБ} + \text{KSCN}} = 0,016\text{--}0,4 \text{ М}$ и $c_{\text{БХ} + \text{KSCN}} = 0,6\text{--}0,8 \text{ М}$) и соотношение молярных концентраций компонентов ТБАБ : KSCN и БХ: KSCN (от 3:1 до 1:3), pH (5–8), соотношение объемов фаз, время контакта фаз (не более 10 мин). Продемонстрирована возможность определения РЗЭ методом масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой в пробах поверхностных и морских вод после групповой реэкстракции растворами азотной кислоты. Экстракционное концентрирование РЗЭ в новых ДФВС с последующей реэкстракцией обеспечивает устранение матричных эффектов и повышает чувствительность определения РЗЭ в сложных по составу образцах.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования РФ, проект № 23-075-67362-1-0409-000195.

Литература

1. Pletnev I.V., Smirnova S.V., Sharov A.V., Zolotov Yu A. *Russ. Chem. Rev.*, 2021, **90**(9), 1109.

МЕТАБОЛОМНЫЕ ПРОФИЛИ МУСКУСА MOSCHUS MOSCHIFERUS КАК ПЛАТФОРМА ОЦЕНКИ ТЕРАПЕВТИЧЕСКОГО И АДАПТОГЕННОГО ПОТЕНЦИАЛА МУСКУС-СОДЕРЖАЩИХ ПРЕПАРАТОВ

Левашова А.И., Хвостов Д.В., Нестеров М.С., Каркищенко В.Н.

*Научный центр биомедицинских технологий Федерального медико-биологического агентства,
143442, Московская область, Красногорский район, пос. Светлые Горы, 1
e-mail: annalevashova3@gmail.com*

В традиционной китайской медицине препараты на основе мускуса кабарги применяются на протяжении почти двух тысячелетий. Ряд препаратов зарегистрирован в современной Китайской фармакопее¹. В России же данное направление находится в стадии развития.

При химическом анализе определяют, как правило, липидные компоненты, в частности мускон и стероиды андростановой группы². Однако, в мускусе присутствуют и другие биологически-активные соединения (БАС) с терапевтическим и адаптогенным потенциалом.

Ранее нами был проведен анализ липидно-стероидного состава мускуса кабарги сибирской³ (*Moschus moschiferus*), показаны значимые отличия состава по сравнению с видами, обитающими в Китае (*Moschus berezovskii*).

В данной работе проведен анализ метаболомных профилей (1) мускуса кабарги сибирской (*Moschus moschiferus*), (2) гидролизных образцов мускуса и (3) препарата Мускулив методами ВЭЖХ-МС и ГХ-МС с силилированием. Показано, что гидролиз приводит к обогащению метаболомных профилей: увеличивается число и количество органических кислот, азот-содержащих соединений, включая аминокислоты и дипептиды. Обогащение этими соединениями позволит разработать препараты с более высоким терапевтическим и адаптогенным потенциалом.

Также примененные методы метаболомного профилирования на основе ВЭЖХ-МС и ГХ-МС показали эффективность для сравнения образцов, состоящих из гидрофильных и гидрофобных БАС и могут быть удобной аналитической платформой для последующего изучения и мониторинга органопрепаратов с таким комплексным составом БАС.

Литература

1. Commission NP. Pharmacopoeia of the People's Republic of China. *China Pharmaceutical Science and Technology Press*, 2020. 336.
2. Ding, M., Fan, J.L., Huang, D.F. et al. *Chin Med.*, 2022, **17**, 41.
3. Каркищенко В.Н., Дуля М.С., Хвостов Д.В., Агельдинов Р.А., Люблинский С.Л.. *Биомедицина*. 2018, **1**, 19.

ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА ПРОКАТА ЭЛЕКТРОТЕХНИЧЕСКОЙ СТАЛИ МЕТОДОМ АТОМНО-ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ ТЛЕЮЩЕГО РАЗРЯДА

Лепилина М.Ю.,^а Якубенко Е.В.,^а Ермолаева Т.Н.^б

*^аПАО «Новолипецкий металлургический комбинат»,
398040, Липецк, пл. Металлургов, 2а,
e-mail: lepilina_my@nlmk.com*

*^бЛипецкий государственный технический университет,
398600, Липецк, ул. Московская, 30*

Электротехническая сталь (ЭТС) широко применяется в промышленности для изготовления трансформаторов и электродвигателей. Высокая магнитная проводимость обеспечивается химическим составом в сочетании с технологической обработкой стального проката. Исследование и контроль распределения концентрации элементов по глубине проката ЭТС наиболее перспективно проводить методом атомно-эмиссионной спектроскопии тлеющего разряда (АЭС ТР).

В работе использовали спектрометр GD Profiler-2 («HORIBA Jobin Yvon», Франция), оснащенный радиочастотным генератором, позволяющим анализировать низкотемпературные слои. Установлена равномерность распыления образцов ЭТС при мощности 850 Па, давлении 50 Вт, частоте импульсов 400 Гц генератора.

Построение градуировочных графиков для определения концентраций Al, Si, C, Nb, Cu, Ni, Co, P, S, Ti, Mo, Mn, V, Cr, W, В проводили с применением 47 монолитных стандартных образцов (СО) кремнистых, углеродистых и легированных сталей, близких по химическому составу к анализируемым пробам. Установлено, что повысить правильность анализа возможно при учете межэлементного влияния Pb, Fe, H, Ca, коррекции по напряжению для Fe или использовании полиномиальной градуировочной зависимости для Si. Показано, что величина относительной погрешности определения концентрации элементов, например, S, Si, P снижена в 2-6 раз.

Отсутствие систематической погрешности определения элементов в пробах ЭТС подтверждено оценкой результатов количественного определения элементов в СО по критерию Стьюдента и сравнением с результатами анализа проката ЭТС методом атомно-эмиссионной спектроскопии с искровым типом атомизации (ГОСТ Р 54153).

Исследована возможность проведения полуколичественного анализа распределения концентрации элементов в зоне внутреннего окисления (в том числе оценка содержания оксида кремния IV), грунтовым слое и электроизоляционном покрытии проката ЭТС. Получена удовлетворительная согласованность результатов АЭС ТР и сканирующей электронной микроскопии.

КОНЦЕНТРИРОВАНИЕ ПЛАТИНЫ И ПАЛЛАДИЯ МАГНИТНЫМИ СОРБЕНТАМИ В АНАЛИЗЕ ПРИРОДНЫХ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

Максимова В.В., Лапина В.А., Моходоева О.Б.

*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН,
119991, Москва, ул. Косыгина 19,
e-mail: valeriyamaksimova6@gmail.com*

Сложность инструментального определения платины и палладия заключается в многообразии их форм и часто крайне низких содержаниях (10^{-7} – 10^{-4} %), неоднородности проб и влиянии матричных компонентов. Снижение предела обнаружения и устранение матричных эффектов достигают на этапе подготовки проб.

Сорбция магнитными наночастицами исключает стадии фильтрации и центрифугирования, сокращая время пробоподготовки¹. Автоматизация процесса позволяет пропускать большие объемы анализируемых растворов и повторно использовать сорбенты. В исследовании предложены оригинальные проточные сорбционные ячейки разной геометрии, которые могут быть размещены в области действия постоянного или переменного магнитных полей различной конфигурации.

В настоящем исследовании для определения платиновых металлов в образцах руды, дорожной пыли и отработанных катализаторов предложены способы сорбционного концентрирования в статических и динамических условиях. В качестве сорбентов использовали наночастицы на основе магнетита в оболочке полиэтиленгликоля, синтезируемые межфазным методом на границе раздела двухфазной системы полимер – соль². Для обеспечения необходимой селективности и устойчивости в растворах поверхность наночастиц функционализировали фосфониевыми, пиридиниевыми, имидазолиевыми ионными жидкостями и глубокими эвтектическими растворителями на основе четвертичных аммонийных солей и карбоновых кислот, фосфорорганических веществ и одноатомных спиртов, терпеноидов, в том числе природного происхождения. Установлены оптимальные условия и разработаны способы концентрирования ультранизких количеств платины и палладия предложенными сорбентами. Найденные содержания в пределах доверительных интервалов согласуются с аттестованными значениями.

Литература

1. Моходоева О.Б., Максимова В.В., Дженлода Р.Х., Шкинев В.М. *Журнал аналитической химии*, 2021, 76, 483.
2. Mokhodoeva O., Shkinev V., Maksimova V., Dzhenloda R., Spivakov B. *Separation and Purification Technology*, 2020, 248, 117049.

НЕОБХОДИМОСТЬ УЧЕТА КАРБОКСИЛАТОВ МЕТАЛЛОВ ПРИ ПРОВЕДЕНИИ ЖИРОКИСЛОТНОГО АНАЛИЗА ОБЪЕКТОВ КУЛЬТУРНОГО НАСЛЕДИЯ

Малышев А.Н.^а, Данилов Д.А.^а, Киселева Д.В.^б

*^аУральский федеральный университет имени Первого Президента России Б.Н. Ельцина,
620078, г. Екатеринбург, ул. Мира, 21*

*^бИнститут геологии и геохимии имени ак. А.Н. Заварицкого УрО РАН,
620110, г. Екатеринбург, ул. Академика Вонсовского, 15
e-mail: Malyshev.k1b@gmail.com*

Во многих случаях при анализе объектов культурного наследия используются общие подходы к определению жирных кислот, которые применимы для простых матриц. Если же речь заходит про сложные неорганические матрицы, то аналитики могут столкнуться с возможным влиянием образованных с течением времени солей карбоновых кислот. Это может повлиять на жирокислотный профиль. Дополнительно особенностью объектов культурного наследия, предоставляемых на анализ, является крайне широкий весовой диапазон (от мг до десятков г). Также на проведение анализа косвенно влияет ценность самого объекта, что может препятствовать отбору необходимой навески.

В связи с этим в данной работе было рассмотрено влияние неорганической матрицы на образование карбоксилатов металлов. В качестве неорганических матриц выбраны сажа, силикат алюминия и цинковые белила. Задачами для выполнения поставленной цели являлись а) анализ кукурузного и льняного масел до состаривания; б) создание модельных неорганических матриц с различным соотношением вносимых масел; в) проведение состаривания образцов при заданных параметрах влажности и температуры, включая масло без матрицы; г) проведение анализа образцов спустя 5 месяцев. Соотношение масла и неорганической матрицы составляет 1:1 и 1:50. После аналиты экстрагировали методом Фолча с дальнейшим метилированием. Анализ проводился на ГХ-МС Perkin Elmer Clarus 600T.

По результатам работы отмечается образование карбоксилатов. Заметное влияние прослеживается в случае преобладания неорганической матрицы над маслом. Это можно решить путем использования в методике пробоподготовки этапов, позволяющих перевести соли в кислоты.

Работа поддержана грантом РНФ № 22-18-00593.

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ОЦЕНКА РАЗЛИЧНЫХ ПОДХОДОВ К ОПРЕДЕЛЕНИЮ САХАРОВ МЕТОДОМ КАПИЛЛЯРНОГО ЭЛЕКТРОФОРЕЗА

Малюшевская А., Карцова Л.А.

*Санкт-Петербургский государственный университет,
Университетский пр. 26, Петродворец, Санкт-Петербург, Россия
e-mail: malushevskaa@gmail.com*

Углеводы – значимые компоненты метаболизма, что обуславливает актуальность их определения в биологических матрицах. Капиллярный электрофорез (КЭ) позволяет решить эту задачу с достижением высокой эффективности и селективности разделения, снижения пределов обнаружения (ПО) за счет внутрикапиллярного концентрирования. При определении сахаров выявлены возможности косвенного детектирования с применением в качестве поглощающей добавки в фоновый электролит (ФЭ) 2.5 мМ акридонуксусной кислоты, 75 мМ КОН, 0.5 мМ цетилтриметиламмония бромид и 5% (об.) метанола, а также восстановительного аминирования с этил-*n*-аминобензоатом (АВЕЕ) и конденсации с 1-фенил-3-метил-5-пиразолоном (РМР). Косвенное детектирование обеспечило возможность определения как восстанавливающих, так и не-восстанавливающих моно- и дисахаридов. Однако достигнутые ПО (4 – 10 мкг/мл) оказались выше, чем при дериватизации аналитов. Для восстановительного аминирования разделение проводили в зонном (КЗЭ) и мицеллярном (МЭКХ) режимах с введением додецилсульфата натрия в качестве мицеллообразующего агента. В последнем случае достигнута более высокая эффективность, а ПО снижены в 2 раза относительно КЗЭ. Внутрикапиллярное концентрирование в условиях свипинга позволило снизить ПО до 0.12 – 0.27 мкг/мл. При конденсации сахаров с РМР разделение осуществляли в режиме КЗЭ; применение стэкинга с усилением поля обеспечило снижение ПО до 0.10 – 0.16 мкг/мл. Оба способа дериватизации и режим косвенного детектирования при определении сахаров адаптированы к анализу детского питания.

Выявлены аналитические возможности и внутрикапиллярной дериватизации сахаров с введением в кварцевый капилляр реагента, ФЭ и анализируемой пробы с оптимизацией этого режима. При дериватизации с РМР электрофоретическая подвижность производных обусловлена значением рН реакционной среды; для восстановительного аминирования в раствор вводили мицеллы ПАВ.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-13-00378.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОСТАВА КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ СПЕКТРАЛЬНЫМИ МЕТОДАМИ

Манчич А.Н.

ПАО «Новолипецкий металлургический комбинат»,
398040, Липецк, пл. Металлургов, 2а,
e-mail: manchich_an@nlmk.com

Кремний кристаллический предназначен для изготовления кремний содержащих сплавов, кремнийорганической продукции, полупроводникового кремния, а также для специальных целей. Марки и химический состав кремния должны соответствовать указанному в таблице.

Марка кремния	Код	Массовая доля, %				
		Кремний, не менее	Примеси, не более			
			Железо	Алюминий	Кальций	Сумма определяемых примесей
Кр00	17 1131 001	99,0	0,4	0,3	0,4	1,0
Кр0	17 1131 002	98,8	0,5	0,4	0,4	1,2
Кр1	17 1131 003	98,0	0,7	0,7	0,6	2,0
Кр2	17 1131 004	97,0	1,0	1,2	0,8	3,0
Кр3	17 1131 005	96,0	1,5	1,5	1,5	4,0

Массовая доля кремния устанавливается как разность между 100 % и суммой определяемых примесей в процентах. Массовую долю компонентов в кремнии (железа, алюминия, кальция и титана) определяют по ГОСТ 19014.0 — ГОСТ 19014.4.

Определение химического состава кремния кристаллического титриметрическим и фотоколориметрическими методами в соответствии с действующими НД весьма трудоемкий процесс, не отвечающий современным требованиям по экспрессности и экономичности анализа. В связи с этим исследована возможность определения содержания нормируемых примесей (железа, алюминия, кальция и титана) и других (фосфор, хром, марганец, углерод и сера) в кремнии кристаллическом с применением альтернативных методов на спектрометрах атомно-эмиссионных с индуктивно-связанной плазмой и рентгенофлуоресцентных (АЭС ИСП и РФА).

Проведен полуколичественный анализ рентгенофлуоресцентным методом и количественный анализ методом атомно-эмиссионным спектральным с индуктивно-связанной плазмой.

По итогам испытаний проводится набор статистических данных для аттестации методик с применением АЭС ИСП и РФА.

Литература

1. ГОСТ 2169-69 Кремний технический. Технические условия.
2. ГОСТ 19014.0 Кремний кристаллический. Общие требования к методам химического анализа.
3. ГОСТ 19014.1 Кремний кристаллический. Методы определения алюминия.
4. ГОСТ 19014.2 Кремний кристаллический. Методы определения железа.
5. ГОСТ 19014.3 Кремний кристаллический. Методы определения кальция.
6. ГОСТ 19014.4 Кремний кристаллический. Методы определения титана.

РАСШИРЕНИЕ АНАЛИТИЧЕСКИХ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ЭНЕРГОДИСПЕРСИОННОГО РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА ТУГОПЛАВКИХ МЕТАЛЛОВ

Межевая Л.Ю.

*АО Гиредмет,
Москва, ул. Электродная д.2 с 1,
e-mail: karpukhina.lilya@mail.ru*

Производство электронной компонентной базы в России, которое было безнадежно утрачено в 1970-х годах, вновь становится актуальной задачей. Так называемые пассивные электронные компоненты (ниобиевые и танталовые конденсаторы и резисторы) имеют большой спрос в различных промышленных сферах.

Было показано, что удельные характеристики электрофизических величин (номинальная емкость, напряжение, тангенс угла потерь, ток утечки, коэффициент абсорбции, импеданс и т.д.) зависят от свойств материалов диэлектриков¹.

Аналитический контроль сырьевых материалов для изготовления конденсаторов является неотъемлемой частью технологических процессов их производства. Применение рентгенофлуоресцентного анализа (РФА), отличающегося от атомно-эмиссионных методов своей экспрессностью, является перспективным в аналитическом контроле тугоплавких металлов. Применение вторичных мишеней и фильтров позволяет «монохроматизировать» облучение анализируемого образца, значительно улучшить соотношение сигнал/фон².

Целью данной работы является расширение аналитических возможностей РФА применительно к анализу ТМ. Работа выполнена на энергодисперсионном рентгенофлуоресцентном спектрометре Genius IF Xenometrix с использованием вторичных мишеней и фильтров. В работе представлены результаты исследования по разработке методики анализа промышленно получаемых ниобиевого и танталового порошков. Показана возможность определения примесных элементов (Cr, Fe, Ni, Ta, Nb, W, Mn) на уровне 0,001–0,1% масс.

Литература

1. Ханин С.Д., Адер А.И., Воронцов В.Н., Денисова О.В., Холкин В.Ю. Пассивные радиокомпоненты. Часть 1. Электрические конденсаторы: Учеб. пособие. - СПб., СЗПИ, 1998.-86.
2. Каменщиков, А. Е. Использование вторичных мишеней в энергодисперсионных рентгено-флуоресцентных спектрометрах Genius IF / А. Е. Каменщиков, И. В. Лавренов, В. Е. Фомин // Аналитика. – 2019. – Т. 9, № 5. – С. 380-387. – EDN PXTOPH.

СПЕКТРОМЕТРИЯ ИОННОЙ ПОДВИЖНОСТИ СПИРТОВ

Меламед Т.Б., Александрова Д.А., Баберкина Е.П., Якушин Р.В.

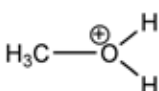
*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,
125047, г. Москва, Миусская площадь, д. 9,
e-mail: melamed.tanya@gmail.com*

Спектрометрия ионной подвижности (ИП) – экспрессный метод обнаружения веществ различной химической природы. Ограничивает применение данного метода анализа отсутствие достоверных данных о процессах ионизации. В литературе указаны исключительно общие схемы образования ионов, которые не отражают сути процессов, происходящих в приборах¹.

Для исследования был выбран ряд предельных одноатомных спиртов исходя из того что характер связей С-О, С-С, О-Н в них одинаков, а значит предположительно процессы, протекающие при ионизации в спектрометре, будут одинаковы.

Согласно литературным данным основным фактором, влияющим на подвижность образовавшегося иона, является его масса¹. В ходе изучения выбранных объектов было отмечено совпадение значений коэффициентов приведенной ионной подвижности (КПИП) для спиртов с существенно различающейся исходной молекулярной массой (Табл. 1). Это свидетельствует о том, что при ионизации коронным разрядом соединений этого класса происходит распад молекулярного иона на более мелкие по массе фрагменты.

Таблица 1. Сравнение метанола и бутанола

Образец	Молекулярная масса, а.е.м.	КПИП, см ² /(В·с)	Предполагаемая структура иона	Расхождение между значениями КПИП, %	Энтальпия реакции, кДж/моль
MeOH	32,04	2,1800		0,015	-58,45
BuOH	74,12	2,1803			-24,48

Энтальпия предполагаемых реакций рассчитана с применением квантово-химического пакета ORCA версии 5.0.4. Согласно литературным данным применение метода B3LYP в сочетании с базисом def2-TZVPD и приближением RIJCOSX позволяет рассчитать достаточно точные значения энтальпий реакций и оптимальную геометрию частиц^{2,3}.

Литература

- Eiceman, G.; Karpas, Z. Ion. Mobility Spectrometry, 2nd ed.; Raton, B., Ed.; Taylor & Francis: Boca Raton, FL, USA, 2013; ISBN 0824758536.
- Boca, R. & Imrich, Richard & Stofko, Juraj & Vranovičová, Beáta & Rajnák, Cyril. (2024). Molecular properties of linear amino acids in water. Amino Acids. 56. 10.1007/s00726-023-03365-3.
- Neese, F. "The ORCA program system" Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science, 2012, Vol. 2, Issue 1, Pages 73-78.

ОБЕСПЕЧЕНИЕ ПРОСЛЕЖИВАЕМОСТИ И ЕДИНСТВА ИЗМЕРЕНИЙ В ОБЛАСТИ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ КАЛОРИМЕТРИИ ТИТРОВАНИЯ

Мишина К.А., Корчагина Е.Н.

ФГУП «ВНИИМ им. Д.И. Менделеева»,
190005, Санкт-Петербург, Московский проспект 19,
e-mail: k.a.mishina@vniim.ru

В связи с расширением сферы применения изотермической калориметрии титрования (ИКТ) в химических, фармацевтических и биологических исследованиях, вопросы точности и достоверности результатов измерений в данной области, а также методов и средств для их обеспечения, привлекают все большее внимание. Применяемый до текущего момента подход с использованием электрической калибровки и стандартных реакций приводил к несогласованности результатов, полученных на различных моделях микрокалориметров титрования, поскольку процедуры калибровки и применяемые материалы не были стандартизованы^{1,2}.

Для решения этой проблемы лабораторией калориметрии ВНИИМ был предложен новый подход с применением эталонного микрокалориметра и сертифицированных стандартных образцов, предназначенных для калибровки микрокалориметров титрования с целью установления метрологической прослеживаемости.

Для реализации этого подхода был разработан и изготовлен эталонный микрокалориметр МКТ, исследованы его метрологические и технические характеристики³.

Была предложена и опробована на микрокалориметре NanoITC SV (TA Instruments, США) процедура калибровки путем измерения интегральной теплоты разведения 2 % масс., 5 % масс. и 10 % масс. растворов пропанола-1 в бидистиллированной воде. Полученные результаты были подтверждены путем сравнительного анализа с литературными данными.

В результате проведенной работы была заложена основа для внедрения предложенного подхода и создания новых метрологических средств для обеспечения прослеживаемости и единства измерений в области изотермической калориметрии титрования.

Литература

1. Baranauskiene L., et al. *International Journal of Molecular Sciences*, 2009, **10** (6), 2752.
2. Myszka D.G., et al. *Journal of Biomolecular Techniques*, 2003, **14** (4), 247.
3. Мишина К.А., Корчагина Е.Н., Казарцев Я.В. *Измерительная техника*, 2023, **9**, 11.

НОВЫЕ СПОСОБЫ ПРОБОПОДГОТОВКИ ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ УГЛЕВОДОРОДНОГО СОСТАВА ЗАГРЯЗНЕННЫХ ПОЧВ

Мусина Н.С., Романова Ю.Н., Марютина Т.А.

*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского Российской академии наук,
119991, Москва, улица Косыгина 19,
e-mail: musinanatalya@gmail.com*

Разработка комплексного подхода к определению углеводородного состава нефтезагрязненных почв является актуальной задачей, решение которой позволяет выбрать оптимальную технологию восстановления почв.

Существующие стандартные методики определения концентрации нефтепродуктов в нефтезагрязненных почвах не позволяют оценить долю летучих (легких) углеводородов, теряющихся на стадии пробоподготовки образца почвы при его высушивании при комнатной температуре до воздушно-сухого состояния. Потеря существенного количества легких углеводородов может приводить к ошибкам интерпретации полученных результатов анализа. Особенно если речь идет о мониторинге состояния загрязненной территории или о выборе технологий рекультивации почв, загрязненных легкими углеводородами. Также при определении многих индивидуальных веществ, например бенз(а)пирена требуется длительная процедура пробоподготовки и ее идентификации. Следует отметить, что на данный момент отсутствуют способы определения состава нефтяного загрязнения в полевых условиях.

В настоящей работе авторами разработаны и апробированы новые способы пробоподготовки почв, загрязненных различными нефтепродуктами, позволяющие за короткий промежуток времени определить содержание углеводородов (включая легкие) в анализируемом образце, а также индивидуальные соединения (бенз(а)пирен, толуол, хлороформ, четыреххлористый углерод и т.п.).

Особое внимание уделено разработке комбинированных методов анализа нефтезагрязненных проб (соединение предлагаемого способа пробоподготовки с различными детекторами), позволяющего в полевых условиях определять состав углеводородного загрязнения.

Работа выполнена в рамках государственного задания ГЕОХИ РАН.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ КАРОТИНОИДОВ В КОРМАХ И КОРМОВЫХ ДОБАВКАХ МЕТОДОМ ВЫСОКОЭФФЕКТИВНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ СО СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКИМ ДЕТЕКТИРОВАНИЕМ

Мысина Ю.С., Испирян А.З., Нестеренко И.С.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение
«Всероссийский государственный центр качества и стандартизации лекарственных средств
для животных и кормов» (ФГБУ «ВГНКИ»),
Москва, Россия 123022 Москва, Звенигородское шоссе, 5
e-mail: y.mysina@vgnki.ru*

Разработана методика одновременного определения содержания 12 каротиноидов (астаксантин, β-апо-8-каротеналь, капсорубин, лютеин, кантаксантин, капсантин, этиловый эфир β-апо-8-каротеновой кислоты, зеаксантин, цитранаксантин, α-криптоксантин, β-криптоксантин, β-каротин) в кормах и кормовых добавках методом жидкостной хроматографии со спектрофотометрическим детектированием в видимом диапазоне (450 и 475 нм).

Хроматографическое разделение проводили на колонке YMC Carotenoid S-5 (250*4.6 мм) с изократическим элюированием подвижной фазы (смесь ацетонитрила и этилового спирта (75/25)) при скорости потока 0,8 см³/мин и температуре термостата колонки 30 °С. Каротиноиды экстрагировали из кормов смесью ацетонитрила и этилового эфира уксусной кислоты (50/50) с последующей очисткой экстракта на картриджах со сбалансированным гидрофильно-липофильным обращенно-фазным сорбентом, из кормовых добавок – смесью дихлорметана и этилового спирта (50/50).

Диапазон измерения массовых долей каротиноидов 4-5000 мг/кг в кормах и 0,05-20 % в кормовых добавках.

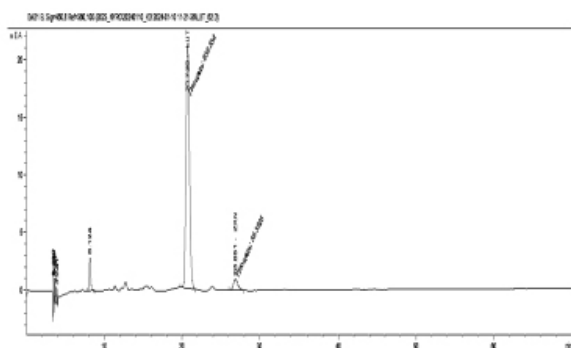


Рисунок 1. Хроматограмма кормовой добавки Биофон желтый 40, содержащей лютеин и зеаксантин

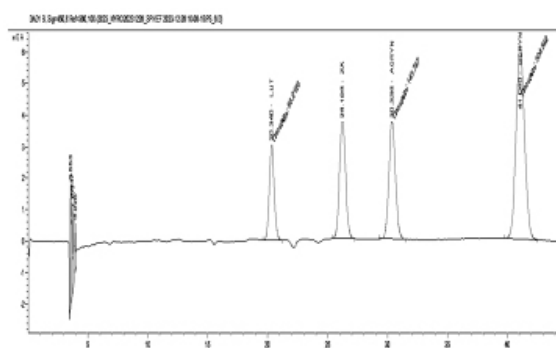


Рисунок 2. Хроматограмма корма для кур-несушек, содержащий лютеин, зеаксантин, α-криптоксантин, β-криптоксантин

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНАНТИОМЕРОВ ТРИПТОФАНА С ПОМОЩЬЮ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОГО СЕНСОРА НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНО ИМПРИНТИРОВАННОГО ПОЛИ-3,4-ЭТИЛЕНДИОКСИТИОФЕНА

Назыров М.И., Абдуллин Я.Р., Умутбаев Н.С., Перфилова Ю.А.

*Уфимский университет науки и технологий, 450076, Уфа, Заки Валиди 32,
e-mail: mnazyrov@list.ru*

Определение биологически активных веществ является актуальным вопросом в области аналитической химии и медицины. Одним из эффективных методов для этой цели является применение вольтамперометрических сенсоров, базирующихся на молекулярно импринтированных полимерах (МИП)¹. Например, поли-3,4-этилендиокситиофен (PEDOT) - это проводящий полимер с уникальными электрохимическими свойствами, такими как высокая удельная емкость, механическая гибкость, химическая стабильность и высокая проводимость. Эти особенности делают его превосходным материалом для создания МИПов. Процесс формирования «шаблонов» молекул в МИП-сенсорах включает в себя взаимодействие молекулы-шаблона с мономерами, последующую полимеризацию и удаление молекулы-шаблона, оставляя уникальные пустоты, специфичные для целевой молекулы.

В данной работе мы разработали вольтамперометрический сенсор на основе молекулярно импринтированного поли-3,4-этилендиокситиофена для определения энантиомеров триптофана. Мы осуществили электроосаждение пленки PEDOT на стеклоуглеродном электроде с использованием циклической вольтамперометрии в ацетонитрильном растворе с добавлением LiClO_4 , мономера 3,4-этилендиокситиофена и триптофана в качестве молекулы-шаблона. Были изучены морфология, электрохимические и аналитические характеристики сенсора. Полученный сенсор продемонстрировал высокую селективность к энантиомерам триптофана ($I_D/I_L=1.5$) с ошибкой определения не более 7%. Кроме того, было осуществлено определение энантиомеров триптофана в их смеси и в присутствии мешающих компонентов, таких как плазма крови и моча.

Литература

1. Yarkaeva Yu.A., Dymova D.A., Nazyrov M.I., Zagitova L.R. Voltammetric sensor based on molecular imprinted polymer for lincomycin detection. – *Chim. Techn. Acta*, 2023. – V.10. – No. 202310210. DOI: 10.15826/chimtech.2023.10.2.10.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-73-00119.

КОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ ТРИМЕЗИНАТА КОБАЛЬТА И ОКСИДА ГРАФЕНА КАК ЭФФЕКТИВНЫЕ СОРБЕНТЫ ДЛЯ ТВЕРДОФАЗНОЙ ЭКСТРАКЦИИ БРИЛЛИАНТОВОГО ЗЕЛЕНОГО

Наумкина В.Н., Жинжило В.А., Уфлянд И.Е.

*Южный федеральный университет,
Зорге 7, Ростов-на-Дону, 344090, Россия,
e-mail: v.puzhkina@mail.ru*

Твердофазная экстракция – эффективный метод для извлечения, разделения и концентрирования красителей из окружающей среды, при этом металлоорганические каркасы (МОК) являются популярными сорбентами. Однако они имеют ряд недостатков, например, низкую влагостойкость, которые можно исключить, введя в систему композиты МОК с оксидом графена (ОГ).

Цель работы - синтез композитов тримезинат кобальта/оксид графена (Со-БТК/ОГ) с 5, 10 и 20% содержанием ОГ, и использование их в качестве сорбента для твердофазной экстракции широкого ряда красителей. Композит был синтезирован *in situ* в два этапа: получение ОГ с последующим введением в процедуру синтеза тримезиновой кислоты, гидроксида натрия и соли кобальта. Полученные композиты были исследованы методами элементного анализа, СЭМ, ПЭМ, ЭДА, ИК-спектроскопии, результаты которых согласуются с данными, полученными ранее. Изучена способность синтезированных композитов адсорбировать краситель бриллиантовый зеленый (БЗ) из водных растворов. Исследована зависимость твердофазной экстракции от массы сорбента, массовой доли ОГ, начальной концентрации БЗ, температуры и времени контакта. Образец Со-БТК/ОГ-10% демонстрирует наилучшую сорбцию БЗ по сравнению с композитами с 5% и 20% ОГ, которые обладают аналогичной сорбционной активностью. Наибольшая степень адсорбции наблюдается при самой высокой начальной концентрации БЗ, при этом сорбент эффективен даже при введении его минимальных количеств. Максимальное время для установления равновесия заняло не более 180 мин, в то время как основная масса БЗ была сорбирована в течение первых 60 мин. При снижении температуры с 308 до 278 К требуемое время контакта уменьшается. Значения термодинамических параметров (ΔG^0 , ΔH^0 , ΔS^0) свидетельствуют о возможном, самопроизвольном и экзотермическом процессе. С помощью хроматографического анализа было определено наличие красителя в элюенте и рассчитана адсорбционная емкость, равная $385,2 \text{ мгг}^{-1}$. Определены основные метрологические характеристики твердофазной экстракции.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 22-13-00260.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОСТАТОЧНОГО СОДЕРЖАНИЯ ДИЭТИЛКАРБАМАЗИНА И БИТИОНОЛА В ПРОДУКЦИИ ЖИВОТНОВОДСТВА

Некрасов Д.Ю., Жедулов А.Е., Батов И.В., Еремина М.А., Киш Л.К.

*Всероссийский государственный центр качества и стандартизации лекарственных средств для животных и кормов (ФГБУ «ВГНКИ»), 123022, Россия, г. Москва, Звенигородское ш., 5,
e-mail: rusndu@yandex.ru*

В связи с развитием экспорта, в том числе со странами Азиатско-Тихоокеанского региона, и по результатам оценки риска для здоровья остаточных содержаний антигельминтных препаратов в продуктах питания, существует потребность расширения спектра контролируемых соединений данной группы. Необходима методика, позволяющая проводить определение диэтилкарбамазина и битионола в продукции животноводства. Цель данной работы – разработка методики определения остаточных содержаний диэтилкарбамазина и битионола в мясе и мясной продукции, субпродуктах, рыбе, молоке и молочной продукции методом высокоэффективной жидкостной хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием.

В работе был использован жидкостной хроматограф 1290 (Agilent, США) и масс-спектрометрический детектор 5500 QTRAP (Sciex, Канада). Разделение проводили на колонке Agilent Pursuit 5 C18 150 × 2.0 мм. Исходные растворы антгельминтиков и внутренних стандартов готовили растворением стандартов в метаноле.

Подобраны оптимальные параметры масс-спектрометрического детектирования битионола и диэтилкарбамазина (потенциал декластеризации, энергия соударений, потенциал на выходе из ячейки). Для битионола в отрицательном режиме MRM (ESI) m/z иона-предшественника 352,8, дочерние ионы: 161,0 и 191,6; для диэтилкарбамазина в положительном режиме m/z иона-предшественника 200,0, дочерние ионы: 100,0 и 127,0.

При подготовке проб пищевой продукции (1,0 г гомогенизированного образца) в качестве экстрагента использован ацетонитрил (3 мл), экстракты очищали дисперсионной ТФЭ (150 мг безводного $MgSO_4$ и 50 мг сорбента C18). Проведена оценка метрологических характеристик разработанной методики. Диапазон определяемых содержаний битионола – 1–1000 мкг/кг, диэтилкарбамазина – 10–1000 мкг/кг. Относительное стандартное отклонение результатов анализа (%) не превышает 16,8 и 14,2 (рыба, мясо и молоко) и 14,7 и 14,1 (субпродукты, яйца и кишечное сырьё). Разработанная в ходе работы и аттестованная методика, может быть использована при проведении лабораторных исследований пищевой продукции в рамках мониторинга их качества и безопасности.

ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ КОМПЛЕКСА EU(III) С АВОБЕНЗОНОМ

Нестерович Д.С., Ягов В.В., Королева М.В., Быков Д.А.

*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского
Российской академии наук, 119991 ГСП-1, Москва, Косыгина, 19
e-mail: nesterovich@geokhi.ru*

Авобензон – органическое вещество, которое применяется в косметических изделиях в качестве солнцезащитного компонента. В последнее время проводятся исследования фотостабильности авобензона и его негативного влияния на морские экосистемы, в частности, на кораллы¹. В связи с этим актуальна задача определения следовых количеств авобензона в водах, песке, кораллах и других объектах окружающей среды. В настоящей работе с целью развития нового метода определения авобензона изучена люминесценция его комплексов с Eu(III) в мицеллярных средах.

Как и другие ароматические β-дикетоны, авобензон может образовывать люминесцирующие комплексы с ионами лантанидов(III). «Эффект антенны» наблюдали для комплекса Eu^{3+} с авобензоном², однако вне связи с химическим анализом. Мы изучали возможность определения авобензона в водных растворах в присутствии различных ПАВ.

Установлено, что слабощелочные растворы, содержащие авобензон и Eu(III), интенсивно люминесцируют в присутствие катионных ПАВ и наноанионитов. По интенсивности свечения комплексов с европием авобензон не уступает наиболее эффективным «антеннам», таким как теноилтрифторацетон и дибензоилметан. Для определения авобензона использовали светодиод с максимумом излучения 370 нм. Пик наиболее интенсивного перехода ${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_2$ соответствует длине волны 613 нм. Наилучшие условия определения реализуются при использовании наноанионита, полученного из смолы АВ-17-8³. Показана возможность люминесцентного определения авобензона в воде в диапазоне 10-10000 нМ с пределом обнаружения 3 нМ.

Литература

1. J. Frank Nash, Paul R. Tanner. Relevance of UV filter/sunscreen product photostability to human safety. *Photodermatol Photoimmunol Photomed* 2014; 30: 88-95.
2. X.Z. Wei, S.S. Gao, P.S. Tang. Preparation of $\text{Eu}(\text{Avobenzon})_3\text{TPPO}$ by precipitation method and its luminescence performance. *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering* 758 (2020) 012095.
3. Долгоносов А.М. и др. Получение, свойства и применение коллоидных растворов наноразмерных ионитов. Сорбционные и хроматографические процессы. 2016. Т. 16. № 4. С. 400 - 414

Работа выполнена по теме госзадания ГЕОХИ РАН.

МЕМБРАННЫЕ ИОНСЕЛЕКТИВНЫЕ ЭЛЕКТРОДЫ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ АНТИБИОТИКОВ

Крюков Т.В., Феофанова М.А., Никольский В.М., Скобин М.И.

Тверской государственный университет,
170100, Тверь, ул. Желябова, 33

Синтезированы металлокомплексы редкоземельных элементов (РЗЭ) с цефазолином, имеющие низкую растворимость в воде¹. Это свойство позволяет использовать такие комплексы в качестве электродактивных веществ (ЭАВ) при создании потенциометрических сенсоров с пластифицированными полимерными мембранами на основе органических ионообменников с ампициллином, оксациллином, цефазолином для определения антибиотиков².

Металлокомплексы получали смешением водных растворов хлорида неодима или лютетия с натриевой солью цефазолина, при мольном соотношении 1:4. Для получения мембраны использовали поливинилхлорид (ПВХ) марки С-70, диоктилфталат (ДОФ) и циклогексанон.

В состав созданных ионселективных мембран входили (% по массе):

1% ЭАВ, 1% ДОФ и 98% ПВХ.

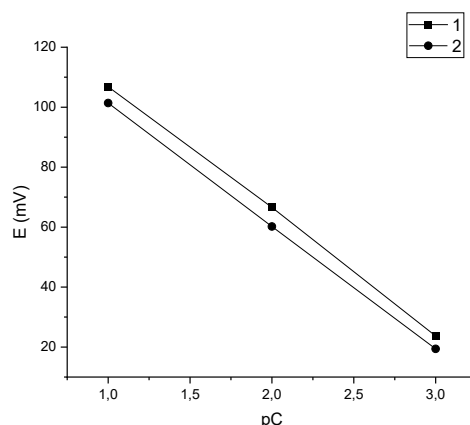


Рисунок 1. Зависимость потенциалов ИСЭ от концентрации цефазолина.
1-металлокомплекс церия, 2-металлокомплекс лютетия

В интервале pC=1–3 экспериментальные точки описываются уравнением прямой. Линейный участок электродной функции свидетельствует о возможности практического использования ИСЭ для определения цефазолина.

Литература

1. Крюков Т.В., Феофанова М.А., Никольский В.М. // Журнал физической химии, 2022, 96, 871, DOI: 10.31857/S0044453722060139
2. Кулапина Е. Г., Снесарев С. В. // Журнал аналитической химии, 2012, 67,198, DOI: 10.1134/S1061934811120069

РАЗРАБОТКА И АТТЕСТАЦИЯ КОМПЛЕКТА СТАНДАРТНЫХ ОБРАЗЦОВ СОСТАВА ЭЛЕКТРОТЕХНИЧЕСКОЙ АНИЗОТРОПНОЙ СТАЛИ

Носикова Е.В.,^а Якубенко Е.В.,^а Ермолаева Т.Н..^б

*^аПАО «Новолипецкий металлургический комбинат»,
398040, Липецк, площадь Металлургов, 2,
e-mail: nosikova_ev@nlmk.com*

*^бЛипецкий государственный технический университет,
398600, Липецк, ул. Московская, стр. 30*

Электротехническая анизотропная сталь (ЭАС) широко используется для изготовления электромагнитов, трансформаторов, и т.д. Необходимые электромагнитные показатели (коэрцитивная сила, магнитная проницаемость, удельное электрическое сопротивление) зависят от химического состава стали. В настоящее время отсутствуют монолитные стандартные образцы (СО) для оценки правильности определения нормируемых элементов и построения градуировочных графиков для спектрального анализа, что значительно повышает стоимость и затрудняет процесс контроля качества выпускаемой продукции.

Разработан и аттестован комплект монолитных СО предприятия (СОП) ЭАС, состоящий из 10 образцов, с содержанием элементов (% масс) в диапазонах: С (0,01-0,07), Si (2,5-4,5), Mn (0,07- 0,22), S (0,003-0,013), P (0,005-0,04), Al (0,006-0,04), Al к.р. (0,004-0,03), Cr (0,01-0,13), Ni (0,004-0,05), Cu (0,004-0,10), Ti (0,004-0,013), V (0,001-0,008), Nb (0,002-0,01), Mo (0,002-0,009), N (0,003-0,009), Sn (0,01-0,08), В (0,0003-0,025), Ca (0,0008-0,003). Концентрацию компонентов в пробах СОП определяли на искровом атомно-эмиссионном спектрометре (ИАЭС) ARL iSpark 8860 («Thermo Fisher Scientific», Швейцария) в соответствии с требованиями ГОСТ Р 54153-2010. Статистически обоснована целесообразность установления однородности распределения концентрации С, Si, Mn, S, P, Al, Al к.р., Cr, Ni, Cu, Ti, V, Nb, Mo, N, Sn, В, Ca в пределах одной выплавки образцов СОП. Применение теста Стьюдента для обработки результатов, полученных при реализации «метода ускоренного старения» (РМГ 93), показало отсутствие тренда изменения концентрации С и серы, склонных к диффузии и стабильность образцов в течение срока хранения 10 лет. Методом ИАЭС измерены концентрации элементов СОП, рассчитаны границы абсолютных погрешностей компонентов. Комплект монолитных СОП ЭАС применяется в лабораториях ПАО НЛМК для спектрального анализа при контроле технологических процессов и может быть полезен для других предприятий, выпускающих ЭАС.

ФЛУОРИМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ В ОПРЕДЕЛЕНИИ ОСТАТОЧНЫХ КОНЦЕНТРАЦИЙ ОКСИТЕТРАЦИКЛИНА В ПИЩЕВЫХ ПРОДУКТАХ

Окина Е.В., Танкова А.В., Бабылунгэ В.Б., Долганов А.В.

*Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева,
430005, Саранск, ул. Большевикская, д. 68а
e-mail: aka22@yandex.ru*

Масштабное использование антибиотиков тетрациклинового ряда в ветеринарной практике приводит к их накоплению в продуктах питания животного происхождения и объектах окружающей среды, что оказывает негативное воздействие на здоровье человека. Метод иммуноферментного анализа и высокоэффективной жидкостной хроматографии позволяют качественно выявить остаточное количество антибиотиков в продуктах, но обладают рядом недостатков, таких как сложность и длительность проведения анализа, использование дорогостоящего оборудования.

Известно, что антибиотики тетрациклинового ряда обладают химической структурой, способной к люминесценции при возбуждении различными источниками света. При этом использование флуориметрического анализа тетрациклинов ограничено ввиду их низкой интенсивности люминесценции.

В настоящей работе изучена возможность флуориметрического определения окситетрациклина после обработки горячим раствором концентрированной щелочи, что вызывает появление новой высокоэффективной полосы эмиссии ($\lambda_{\text{возб}} = 339$ нм, $\lambda_{\text{люм}} = 432$ нм,) и повышение интенсивности аналитического сигнала более, чем в 3 раза. Изучена зависимость интенсивности люминесценции от времени контакта реагента с антибиотиком при оптимальных параметрах снятия спектров, установлено, что максимальная интенсивность и стабильность эмиссии наблюдается после 15 мин взаимодействия.

Получены градуировочные зависимости интенсивности люминесценции от концентрации окситетрациклина в широком концентрационном диапазоне (10^{-7} - 10^{-9} моль/л), что соответствует уровню ПДК антибиотиков в мясных продуктах. Градуировочная зависимость линейна, $R^2 \geq 0,97$. Разработанная методика была проверена методом «введено-найдено» и апробирована на мясной вытяжке, пробоподготовку которой проводили с использованием хлоруксусной кислоты в качестве осадителя белков.

Работа выполнена при финансовой поддержке университетской стартап-студии в рамках федерального проекта «Платформа университетского технологического предпринимательства».

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ИОНИЗАЦИИ НИТРОПРОИЗВОДНЫХ АНИЛИНА

**Осинова Е.С.^а, Лузенина Л.А.^а, Баберкина Е.П.^а,
Шалтаева Ю.Р.^б, Беляков В.В.^б**

^а *Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,
125047 г. Москва, Миусская пл., д. 9
e-mail: E-mail: osinova_kat@mail.ru*

^б *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,
115409, г. Москва, Каширское ш., д. 31, Россия.*

Метод спектрометрии ионной подвижности (IMS) основан на ионизации вещества при атмосферном давлении. В разрядной камере образуются ионы реагентов, концентрация которых значительно превышает концентрацию определяемых веществ¹.

Спектры подвижности ионов были получены на ИДД «Кербер-Т» при атмосферном давлении. В качестве дрейфующего газа использовался очищенный окружающий воздух. Для математической обработки данных была разработана программа на языке программирования Python версия 3.3.

В ходе исследования было установлено, что 4-нитроанилин детектируется только в положительной ионизации.

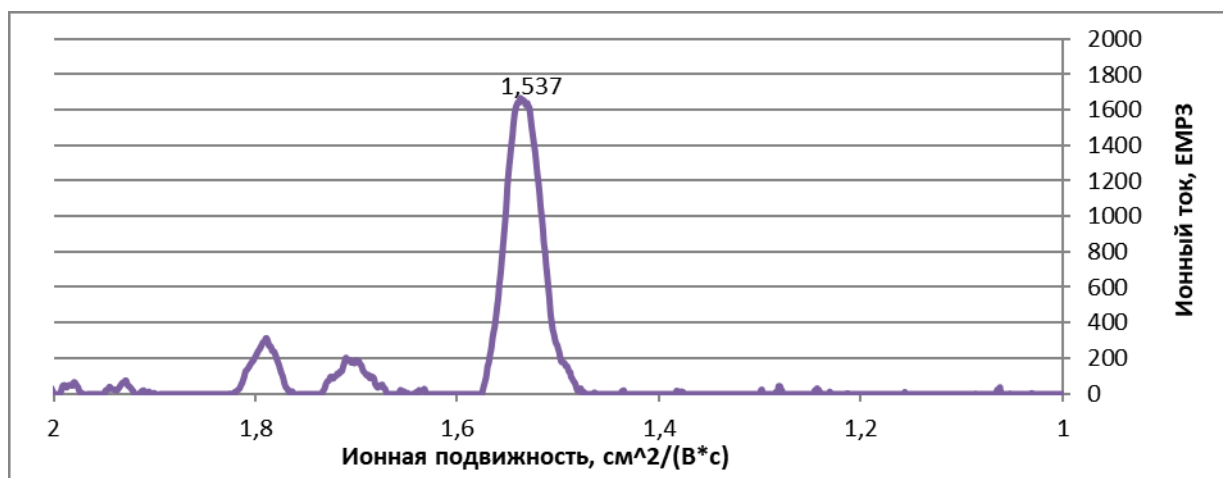


Рисунок.1. Ионная подвижность 4-нитроанилина в положительной ионизации

Литература

1. Eiceman G.; Karpas Z. Ion mobility spectrometry, 2nd ed.; Raton, B., Ed.; Taylor & Francis: Boca Raton, FL, USA, 2013, ISBN 0824758536.

УПОРЯДОЧЕННЫЕ ПЛЕНКИ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В УСИЛЕННОЙ РАМАНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Павлова А.А., Малеева К.А., Москаленко И.В., Беляев В.Е., Смирнов Е.А.

*Университет ИТМО, 191002, Санкт-Петербург, ул. Ломоносова 9,
e-mail: arinapavlova29@mail.ru*

Рамановская спектроскопия является эффективным методом идентификации молекул. С 1974 года¹ проведено множество исследований, связанных с усилением рамановского сигнала с помощью наночастиц (НЧ) золота из-за их способности к локализованному поверхностному плазмонному резонансу.

В данной работе задача усиления интенсивности сигнала рамановской спектроскопии решается простым подходом к самосборке НЧ золота без функционализации НЧ и использования ковалентных линкеров. При этом синтез золей НЧ осуществляли классическим методами Френса² и Парка³.

Коллоидные растворы наночастиц охарактеризованы с помощью спектроскопии в УФ-видимой области и динамического светорассеяния. Оба метода показали, что НЧ имеют средний диаметр от 14 до 99 нм, при этом стабильны, так как дзета-потенциал находился в диапазоне $-25 - 30$ мВ.

Самосборку НЧ золота на интерфейсе проводили по методике⁴, затем плёнку переносили методом «аква-принт» на твердые подложки (кремний, ИТО и др.), которые потом применяли для усиления слабого сигнала рамановского рассеяния. Используя атомно-силовую и сканирующую электронную микроскопии, исследовали морфологию подложек.

Усиливающие свойства подложек исследовали с помощью стандартной молекулы красителя родамин 6Ж, добавление которого вызывает появление характерных пиков усиленного рамановского рассеяния. Расчёт коэффициентов усиления (КУ) по линиям 1508 см^{-1} и 1360 см^{-1} даёт $\sim 1,4 \cdot 10^3$ для наночастиц диаметром 15 нм и $\sim 1,2 \cdot 10^4$ для НЧ 75 нм.

Подложки с лучшим КУ, покрытые НЧ золота диаметром 75 нм, были выбраны для детектирования полифенола – хлорогеновой кислоты. Они позволили определять ее в диапазоне концентраций от $1 \cdot 10^{-5}$ до $3,5 \cdot 10^{-4}$ М.

Литература

1. Fleischmann M., Hendra P. J., McQuillan A. J. Chemical physics letters, 1974, **26**, 163-166.
2. Frens G. Nature physical science, 1973, **241**, 20-22.
3. Park Y. K., Park S. Chemistry of Materials, 2008, **20**, 2388-2393.
4. Smirnov E., Scanlon M. D., Momotenko D., Vrubel H., Méndez M. A., Brevet P. F., Girault H. H. ACS nano, 2014, **8**, 9471-9481.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 22-73-00206.

ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОЕ РАЗДЕЛЕНИЕ ДИАСТЕРЕОМЕРОВ ДИГИДРОКВЕРЦЕТИНА

Панков Д.И., Терехов Р.П., Селиванова И.А.

Первый МГМУ им. И.М. Сеченова Минздрава России (Сеченовский университет),
119048, г. Москва, ул. Трубецкая, д. 8, стр. 2
e-mail: pankov_d_i@staff.sechenov.ru

Цель работы: оптимизировать условия хроматографического разделения диастереомеров дигидрокверцетина (ДКВ).

Материалы и методы: объект исследования – ДКВ (Лавитол[®], АО «Аметис»). Хроматографическая система LicArt 62 (ООО «Лабконцепт») состояла из насоса QP-62d, термостата T-85, спектрофотометрического детектора UV-62, инжектора 7725i и колонки Zorbax 3,5 мкм SB-Phenyl 4,6 мм × 150 мм (Agilent Technologies, Inc.). Подвижная фаза: А – раствор уксусной кислоты (96%, «для анализа», Merck KGaA) в воде с pH = 2,7, и Б – метанол («для ВЭЖХ», НПП «Акваметрия»). Режим элюирования: градиентный, от 71% (0 мин) до 55% (30 мин) компонента А. Температура колонки от 30 до 60 °С, длина волны 288 нм. Испытуемый раствор 0,05 мг/мл ДКВ в смеси вода-метанол 1:1.

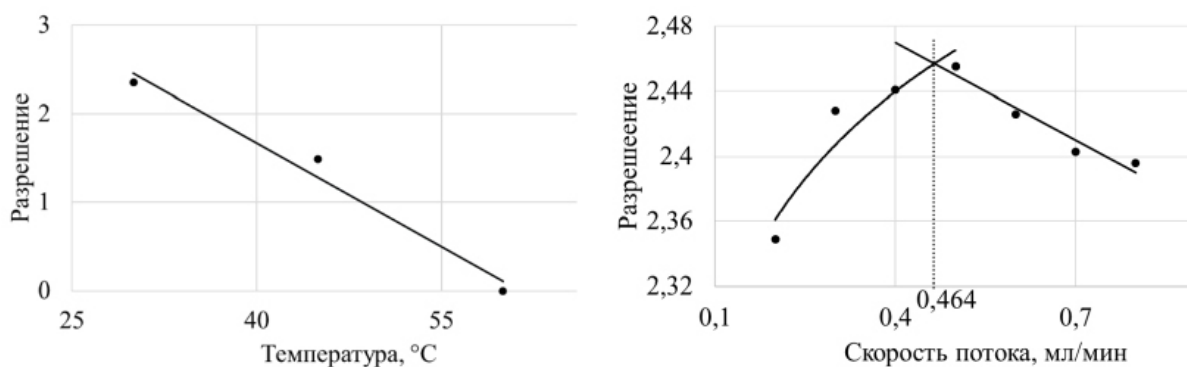


Рисунок. Зависимость разрешения между пиками *транс*-ДКВ и *цис*-ДКВ от температуры (а) и скорости потока (б)

Результаты: при прочих равных условиях (скорость потока 0,2 мл/мин) нагревание колонки ухудшает разрешение между пиками *транс*- и *цис*-ДКВ. При увеличении скорости потока с 0,2 до 0,5 мл/мин (30 °С) разрешение растет, а затем наблюдается постепенное падение разрешающей способности. Полученные данные могут быть объяснены изменением размывания хроматографических зон и согласуются с уравнением Ван-Деемтера.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 23-75-01130.

РАЗРАБОТКА ПНЕВМАТИЧЕСКОГО РАСПЫЛИТЕЛЯ С ТЕХНОЛОГИЕЙ «FLOW BLURRING» ДЛЯ АНАЛИТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ

**Бурумов И.Д.^{а,б}, Путьмаков А.Н.^{а,б}, Трунова В.А.^а,
Комин О.В.^{а,б}, Пелипасов О.В.^{а,б}**

*^аООО «ВМК-Оптоэлектроника»,
630090, Новосибирск, проспект Академика Коптюга, 1
e-mail: pelipasov@vmk.ru*

*^бИнститут автоматики и электрометрии СО РАН,
630090, Новосибирск, проспект Академика Коптюга, 1*

Тип распылителя, используемого в ИСП-АЭС, ИСП-МС, МП-АЭС и пламенной спектрофотометрии существенно влияет на основные параметры плазмы и, следовательно, на аналитические характеристики, такие как точность, чувствительность и воспроизводимость.

Для решения исследовательских задач и задач импортозамещения зарубежных распылителей разработан и налажен серийный выпуск пневматических распылителей с технологией «flow blurring»¹. Внешний вид разработанного распылителя показан на рисунке 1(б). В работе проводится сравнение аналитических характеристик созданного распылителя с распылителями Burgener MiraMist, OneNeb2, Glass Expansion и Mainhard A-type и C-Tуре, полученных на спектрометре Гранд-ИСП².

Самая высокая температура плазмы и электронная концентрация были получены при использовании созданного распылителя и OneNeb2. Распылитель MiraMist показал самую низкую эффективность транспортировки аэрозоля в плазму. Получены сравнимые пределы обнаружения, воспроизводимость и точность с распылителем OneNeb2 и превосходящие в несколько раз Glass Expansion и MiraMist.

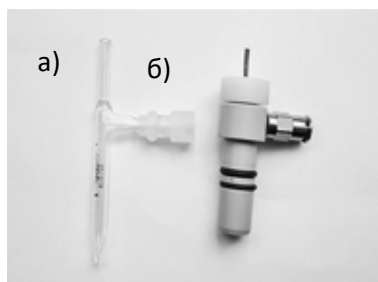


Рисунок 1. Фотографии распылителей: а – Mainhard, б – разработанный авторами

Литература

1. Kourmatzis A., Jaber O. J., Singh G., Masri A.R. *Energy Fuels*, 2022, **36**, 8, 4224–4233
2. Пелипасов О.В., Лохтин Р.А., Лабусов В.А., Пелевина Н.Г. *Заводская лаборатория. Диагностика материалов*. 2019, **85** (1(II)), 82-85.

СОРБЦИЯ ИОНОВ БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ ИЗ СОЛЯНОКИСЛЫХ РАСТВОРОВ ПРОИЗВОДНЫМИ ПОЛИВИНИЛИМИДАЗОЛА

**Петрова Ю.С.,^а Кузнецова К.Я.,^а Родионов К.А.,^а Ефимова В.Я.,^а
Пестов А.В.,^{а,б} Неудачина Л.К.^а**

^аУральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19,
e-mail: j.s.petrova@urfu.ru

^бИнститут органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, 620137,
г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, дом 22/20

Поливинилимидазолы являются перспективными материалами для получения сорбентов за счет наличия в своем составе большого количества донорных центров. Кватернизирующая сшивка таких полимеров позволяет формировать на их основе анионнообменные материалы, в том числе для разделения и концентрирования ионов благородных металлов.

В качестве объектов исследования выступали материалы на основе поливинилимидазолов, сшитых ди-, три-, тетра- и пентаметилендибромидом. Степень кватернизации полученных сорбентов составляла 97, 95, 52 и 45 %, соответственно. Методом ограниченного объема изучена сорбция золота (III), палладия(II) и платины(IV) сшитыми поливинилимидазолами из солянокислых растворов различного состава.

Все исследуемые сшитые поливинилимидазолы характеризуются схожими закономерностями сорбции ионов благородных металлов. Так, извлечение золота(III) и палладия(II) является максимальным в диапазоне pH 2-4 и составляет более 90 %. Проведение сорбции из 1-2 моль/л соляной кислоты позволяет осуществлять селективное выделение палладия(II) в присутствии золота(III). При переходе от одно- к двухкомпонентным системам характер зависимости сорбции золота(III) и палладия(II) от pH не изменяется, в отличие от платины(IV), сорбция которой в присутствии последних в значительной мере подавляется. Присутствие 100-кратного избытка ионов неблагородных металлов в системе не влияет на сорбцию золота(III) и палладия(II) сшитыми поливинилимидазолами. В совокупности с высокой скоростью установления сорбции это обстоятельство определяет перспективность использования исследуемых сорбентов в процессах разделения и концентрирования.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Программы развития Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в соответствии с программой стратегического академического лидерства «Приоритет-2030».

ОЦЕНКА ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ОБРАЗЦОВ СРАВНЕНИЯ ЛИТИЙ-БОРАТНЫХ ПЛАВОВ ПРИ РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОМ АНАЛИЗЕ ПРИРОДНЫХ И ТЕХНИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

Печищев И.В., Абрамов А.В., Попова А.А., Шихалеева М.А.

*Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина
620002, Свердловская область, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19
e-mail: pechishchevilya@gmail.com*

Большим преимуществом рентгенофлуоресцентной спектрометрии (РСФА) является получение точных и воспроизводимых результатов при анализе твёрдых монокристаллических и прессованных мелкодисперсных материалов при относительно простой и быстрой пробоподготовке.¹

Это достигается путём использования специализированных стандартных образцов и выбором способа пробоподготовки, обеспечивающих однородность распределения компонентов стандартной и анализируемой проб, малый размер частиц и малую шероховатость их поверхности.

Уменьшить вклад данных факторов в погрешность анализа и повысить универсальность используемых стандартных образцов можно при использовании метода высокотемпературного растворения проб во флюсе (ВТР). Данный способ обеспечивает равномерное распределение компонентов по флюсу, а также позволяет существенно уменьшить влияния матричных эффектов на регистрируемый аналитический сигнал.³

Целью данной работы является разработка проекта методики определения 31 элемента Периодической таблицы элементов методом РСФА для природных и технических объектов, подготовленных к анализу методом ВТР. Для выполнения данной работы был произведён синтез набора из 49 градуировочных образцов с выбором необходимых условий высокотемпературного растворения, подобраны условия для возбуждения и регистрации аналитического сигнала с учётом фона и построены градуировочные зависимости для каждого определяемого элемента.

Также была проведена оценка метрологических характеристик согласно РМГ 61–2010, для чего были синтезированы 3 комплекта из 10 образцов одинакового состава методом ВТР.

Литература

1. Лосев Н.Ф., Смагунова А.Н. Основы рентгеноспектрального флуоресцентного анализа. М.: Химия, 1982. 208 с.
2. Claisse F., Blanchette D.S. Physics and Chemistry of Borate Fusion for X-Ray Fluorescence Spectroscopists. Fernand Claisse Inc., 2008. 134 p.

ИЗУЧЕНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ТЕХНИЧЕСКИХ ЛИГНИНОВ МЕТОДОМ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

Пиковской И.И., Косяков Д.С.

*Северный (Арктический) федеральный университет имени
М.В. Ломоносова, Центр коллективного пользования научным оборудованием “Арктика”,
163002, Архангельск, Северодвинская 14
e-mail: i.pikovskoj@narfu.ru*

Технические лигнины являются альтернативным ископаемым углеводородам сырьевым ресурсом для получения ценных ароматических соединений. Однако, их широкое и рациональное применение ограничено крайне сложным в понимании химическим составом, представляющим собой смесь из нескольких тысяч индивидуальных соединений и структур.

Масс-спектрометрия высокого разрешения представляет собой мощный аналитический инструмент для изучения химического состава сложных смесей на молекулярном уровне. Развитие данного направления в области изучения технических лигнинов позволит получить новые знания как о структуре полимера, так и его химическом составе.

Имеющийся опыт в данной области позволяет нам получать высокоинформативные масс-спектры лигнинов, охватывающие структуры с массами до 2 кДа и содержащие порядка нескольких тысяч индивидуальных компонентов. Применение тандемной масс-спектрометрии позволяет проводить секвенирование высокомолекулярных олигомеров лигнина с последующим моделированием их структур, что в совокупности с методами двумерной ЯМР-спектроскопии представляет собой передовой метод изучения биополимеров. При этом получаемые данные - это огромный массив информации, требующий применения современных математических подходов к их обработке. Совместное использование методов масс-спектрометрии и хемометрических методов анализа открывает совершенно новые перспективы в характеристике лигнина и лигносодержащего сырья за счет возможности наглядной интерпретации молекулярного состава или процессов трансформации лигнина в технологических процессах. Результаты внедрения таких технологий в масс-спектрометрию лигнина могут иметь важное практическое значение: разработка научных основ новых процессов глубокой химической переработки возобновляемого растительного сырья, в том числе биотехнологий, создание новых материалов и продуктов на основе технических лигнинов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-73-01019.

СТАБИЛИЗАЦИЯ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ЛАКТАТНЫХ БИОСЕНСОРОВ НА ОСНОВЕ ХИТОЗАНОВЫХ МЕМБРАН

Плешаков В.М., Никитина В.Н., Карякин А.А.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет,
119991, Москва, Ленинские горы 1, строение 3,
e-mail: vladislav.pleshakov@chemistry.msu.ru*

Определение лактата — важная аналитическая задача в областях биохимии и медицинской диагностики, так как это вещество является маркером различных заболеваний. Принцип работы электрохимических биосенсоров первого поколения, к которым относятся предлагаемые сенсоры, заключается в ферментативном окислении лактата с образованием пероксида водорода, который далее восстанавливается на электроде¹. Для обеспечения селективности применяются электрокатализаторы восстановления пероксида водорода, например, берлинская лазурь.

Иммобилизация лактатоксидазы проводилась с помощью нанесения фермента в водном растворе хитозана на поверхность модифицированного берлинской лазурью электрода. В режиме проточно-инжекционной амперометрии максимум чувствительности биосенсора лежит в диапазоне от 0.05 до 0.1% хитозана в смеси, её значение равно $346 \pm 71 \text{ mA} \cdot \text{M}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$. Линейный диапазон отклика биосенсора составляет от $1 \cdot 10^{-6}$ до $1 \cdot 10^{-4}$ М, но в 1 мМ растворе лактата отклик стабилен на 90% в течение 30 минут, что недостаточно для длительного мониторинга в биологических жидкостях. Таким образом, требуется искать способы стабилизации таких биосенсоров.

Предложенный способ основан на покрытии хитозановой мембраны дополнительной полимерной плёнкой. Так, использование 0.2% раствора перфторсульфонируемого полимера приводит к уменьшению чувствительности в 3 раза, но стабильность увеличивается: 90% отклика сохраняется 90 минут. Дальнейшее увеличение концентрации полимера уменьшает чувствительность и повышает стабильность. При использовании 5% раствора полимера смещается и линейный диапазон определения лактата в область больших концентраций: $1 \cdot 10^{-3}$ – $1 \cdot 10^{-1}$ М, что является дополнительным преимуществом для анализа неразбавленных биологических жидкостей в условиях длительного мониторинга.

Литература

1. Daboss E. V. et al. *Analytical Chemistry*, 2022, **94** (25), 9201-9207.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 24-13-00049.

ПОЛИ-N-ВИНИЛИМИДАЗОЛ КАК ЭКСТРАГЕНТ АМИНОКИСЛОТ

Полтева А.В.,^а Иванчура П.В.,^а Мокшина Н.Я.,^{а,б} Пахомова О.А.^а

^аЕлецкий государственный университет им. И.А. Бунина
399770, Елец Липецкой обл., ул. Коммунаров, 28

^бВУНЦ ВВС «Военно-воздушная академия им. проф. Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина»,
394064, Воронеж, ул. Старых Большевиков, 54а
e-mail: moksnad@mail.ru

Экстракционные системы на основе экологически безопасных водорастворимых полимеров в настоящее время применяются для извлечения аминокислот из водных сред с целью их последующего определения¹. Поли-N-винилимидазол получен методом радикальной полимеризации в течение 6 ч (растворитель этиловый спирт, инициатор – динитрил азобис-изомасляной кислоты концентрации 10^{-2} моль/дм³)². Структура поли-N-винилимидазола обуславливает его электронодонорные свойства, в частности, способность к экстракции биологически активных веществ.

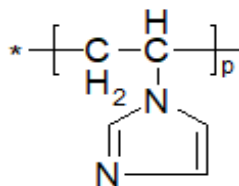


Рисунок 1. Структура элементарного звена поли-N-винилимидазола

Установлены оптимальные условия экстракции гистидина, пролина и метионина раствором поли-N-винилимидазола: высаливатель сульфат аммония, соотношение водной и органической фаз 10:4, температура 20 ± 2 °С, УФ-спектрофотометрическое определение аминокислот. Рассчитаны коэффициенты распределения (D) и степень извлечения (R,%) аминокислот при экстракции поли-N-винилимидазолом, лучшие экстракционные характеристики характерны для гистидина.

Таблица 1. Экстракционные характеристики аминокислот

Аминокислота	$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$		NaSO_3	
	D	R, %	D	R, %
Гистидин	107,9	96,3	91,0	89,6
Пролин	92,3	91,2	80,4	84,2
Метионин	85,9	88,1	69,5	75,1

Литература

1. Мокшина Н.Я., Шкинев В.М., Пахомова О.А., Шаталов Г.В., Спиваков Б.Я. Доклады Российской академии наук. Химия, науки о материалах. 2020, **492-493**, 13.
2. Мочалова О.В., Кузнецов В.А., Соцкая Н.В., Долгих О.В., Вережников В.Н. Конденсированные среды и межфазные границы, 2011, **13**, 471.

ЭКСТРАКЦИОННО-ЭЛЕКТРОФОРЕТИЧЕСКОЕ РАЗДЕЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОРБИНОВОЙ И БЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТ

Полтева А.В.^а, Мокшина Н.Я.^{а,б}, Пахомова О.А.^а, Бакланов И.О.^б

^аЕлецкий государственный университет им. И.А. Бунина

399770, Елец Липецкой обл., ул. Коммунаров, 28

^бВУНЦ ВВС «Военно-воздушная академия им. проф. Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина»,

394064, Воронеж, ул. Старых Большевиков, 54а

e-mail: moksnad@mail.ru

Разработка процессов выделения, разделения и определения сорбиновой и бензойной кислот в водных средах, пищевых продуктах и напитках является актуальной аналитической задачей, которая может быть решена с применением жидкостной экстракции и капиллярного электрофореза. Нами предлагается способ отдельного определения сорбиновой и бензойной кислот, включающий экстракцию их смеси раствором поли-*N*-винил-формамида, электрофоретический анализ водной фазы и селективное определение каждого компонента смеси¹. На скорость образования двухфазной системы водорастворимый полимер-водно-солевой раствор аминокислоты влияют молекулярная масса и характеристическая вязкость экстрагента².

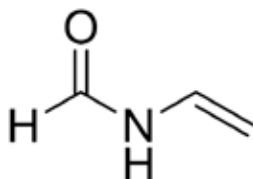


Рисунок 1. Структура элементарного звена поли-*N*-винилформамида

Методика заключается в том, что водно-солевой раствор сорбиновой и бензойной кислот с концентрациями 0,045 г/см³ и 0,01 г/см³ соответственно экстрагируют раствором поли-*N*-винилформамида концентрации 0,3 г/см³, при соотношении объемов фаз 10:3. Электрофоретический анализ водной фазы проводят в следующих условиях: напряжение +20 кВ, температура 24±1°C, ввод пробы гидродинамический под давлением 30 мбар в течение 15 с. Определение сорбиновой и бензойной кислот осуществляют при длине волны 254 нм, ведущий электролит – тетраборат натрия, pH 9,2.

В органическую фазу переходит 98,2% сорбиновой и 97,3 % бензойной кислот от их исходного содержания в анализируемом водном растворе. Методика может быть использована при определении сорбиновой и бензойной кислот в пищевых объектах.

Литература

1. Мокшина Н.Я., Пахомова О.А., Бакланов И.О., Полтева А.В. Патент 2811552 РФ, 2024.

2. Мокшина Н.Я., Пахомова О.А., Шаталов Г.В., Тарасов Д.П. Конденсированные среды и межфазные границы, 2019, 21, 99.

МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ КОНТРОЛЯ РАДИОИЗОТОПНОГО И РАДИОХИМИЧЕСКОГО ПРОИЗВОДСТВА ИСТОЧНИКОВ НА ОСНОВЕ РАДИОНУКЛИДА КРИПТОН-85 НА ФГУП «ПО «МАЯК»

**Посохова Н.В., Ворошилов А.Ю., Мурашова Е.Л.,
Афанасенко Д.В., Ромадова С.И.**

*Федеральное государственное унитарное предприятие «Производственное объединение «Маяк»,
456784, Челябинская область,
г. Озерск, пр. Ленина, 31,
email: cpl@po-mayak.ru*

Метрологическое обеспечение оценки соответствия закрытых источников на основе криптона-85 направлено на обеспечение единства измерений и контроля качества данных источников, выпускаемых на радиоизотопном и радиохимическом производстве.

Для контроля качества производства закрытых источников на основе радионуклида криптон-85 были разработаны и аттестованы методики измерений (МИ) по алгоритмам нормативных документов в области использования атомной энергии.

Метрологические характеристики МИ активности радионуклида криптон-85 на радиометре «Curiementor 4», а также на радиометрической установке РХБ-01М приведены в таблице.

Таблица

Диапазон активности, Бк (мКи)	Характеристика сходимости $\sigma_{сх}$	Характеристика неисключенной систематической погрешности Θ_A	Характеристика правильности $\Theta_{с'}$	Доверительные границы относительной суммарной погрешности δ_A
От $3,33 \cdot 10^9$	0,075 %	$\pm 8,9$ %	$\pm 7,3$ %	$\pm 8,9$ %
до $7,40 \cdot 10^{10}$ (от 90 до 2000)	2,4 %	$\pm 8,9$ %	$\pm 3,8$ %	± 10 %

ФГУП «ПО «Маяк» производит закрытые источники с радионуклидом криптон-85 разных конструкций, позволяющих применять их для непрерывного контроля качества продукции в целлюлозно-бумажной промышленности, контроля толщины лакокрасочных покрытий, качества конденсаторов и др. Номенклатура выпускаемых источников расширяется с учетом потребности отечественной промышленности, занимая нишу ушедших импортных производителей.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОСТАТОЧНОГО СОДЕРЖАНИЯ ТИЛОЗИНА В МЯСНОЙ ПРОДУКЦИИ МЕТОДОМ ИММУНОФЕРМЕНТНОГО АНАЛИЗА

Прийма А.Д., Сафронова В.А., Бакай К.А., Нестеренко И.С.

*Всероссийский государственный центр качества и стандартизации
лекарственных средств для животных и кормов,
123022, Москва, Звенигородское шоссе, 5,
e-mail: a.priima@vgnki.ru*

Антибиотики играют важную роль в современной ветеринарии и медицине. Их применяют для лечения разнообразных бактериальных инфекций как у животных, так и у людей. Несоблюдение сроков выведения препаратов перед удоем или убоем животных может приводить к попаданию остатков антибиотика в организм человека и возникновению резистентности к данному препарату. Тилозин – антибиотик, относящийся к классу макролидов, и применяющийся для лечения пневмонии, мастита, ринита и других заболеваний у птицы, свиней, мелкого и крупного рогатого скота. Для контроля остаточного содержания тилозина в продукции животноводства рядом нормативных документов были установлены максимально допустимые уровни.

В современной лабораторной практике для анализа образцов на содержание тилозина применяется два метода: высокоэффективная жидкостная хроматография с масс-спектрометрическим детектированием и иммуноферментный анализ (ИФА). Первый метод предполагает использование дорогостоящего оборудования, большого количества реактивов, а также длительное время анализа, в то время как ИФА позволяет за два часа проанализировать 40 образцов с минимальным набором реагентов.

Ранее была разработана и внедрена методика ИФА для определения остаточного содержания тилозина в молоке, сливках, сметане, яйцах и меде, поэтому целью данной работы было подобрать условия пробоподготовки образцов мяса. В качестве экстрагентов были опробованы растворы с разным значением pH: 5% раствор трихлоруксусной кислоты, ацетатный буфер, 1 М раствор сульфата аммония, фосфатный буфер, вода, боратный буфер. Для обезжиривания использовался гексан, а также варьировалось время экстракции и центрифугирования.

В результате было показано, что оптимальное извлечение (90-110%) тилозина из образцов мяса достигается при экстракции фосфатным буфером в течении 15 минут с последующим центрифугированием при 4000 оборотах в минуту. Использование гексана не влияет на результат, поэтому стадию обезжиривания можно пропустить. В дальнейшем планируется апробировать эту методику на образцах субпродуктов.

МЕМБРАННОЕ ФРАКЦИОНИРОВАНИЕ КАК ОСНОВА МУЛЬТИСПЕКТРАЛЬНОГО АНАЛИЗА ПОЧВЕННОГО ОРГАНИЧЕСКОГО ВЕЩЕСТВА

Волков Д.С., Рогова О.Б., Овсеенко С.Т., Проскурнин М.А.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет,
Москва, Ленинские горы, д. 1 стр. 3
e-mail: proskurnin@gmail.com*

Химический анализ почвенного органического вещества (ПОВ) как сложной гетерогенной гетерофазной системы, включающей высоко- и низкомолекулярные соединения, а также коллоидные частицы, является сложной задачей. Одним из подходов к ее решению является выделение характеристических компонентов при помощи мембранной фильтрации, что позволяет получать размерные фракции от единиц нанометров (массы, 10 Да) до нескольких сотен микрометров и последующий анализ спектроскопическими методами.

Предложен метод разделения водорастворимого ПОВ на узкие фракции каскадной мембранной фильтрацией на полиэтилентерефталатных и поликарбонатных аналитических трековых мембранах. Показана возможность фракционирования ПОВ в диапазоне размеров частиц 0.01–10 мкм, дающего образцы с воспроизводимыми характеристиками (общий элементный, фазовый, качественный и количественный функционально-групповой состав, средний размер частиц) для анализа методами молекулярной и атомной спектроскопии. Показана возможность микроэлементного анализа узких фракций при помощи ИСП–АЭС с прямым распылением без разложения. Распределение концентраций элементов по фракциям в целом не зависит от материала мембраны.

Предложена методология ИК-спектроскопического анализа тонких фракций ПОВ с высушиванием на поверхности НПВО-кристалла и фракций растворенного и взвешенного ПОВ с помощью флуоресцентных матриц возбуждения–эмиссии. Соотношения количеств групп гумино- и тирозиноподобных соединений, полученные с помощью объемного интегрирования интенсивностей флуоресцентных матриц, воспроизводимы и различаются от фракции к фракции. Получены результаты использования двумерной корреляционной (2D-COS) ИК-спектроскопии для определения структурного и группового состава ПОВ, флуоресцентной 2D-COS, а также гетероспектральной 2D-COS (флуоресценция–ИК, ИК–АЭС и АЭС–флуоресценция) для более точной идентификации и оценки структурного и группового состава ПОВ в широком диапазоне размерных фракций.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-13-00117-П.

НОВЫЕ ПОДХОДЫ К ИК-СПЕКТРОСКОПИИ ПОЧВЕННОГО ОРГАНИЧЕСКОГО ВЕЩЕСТВА

Волков Д.С., Рогова О.Б., Михеев И.В., Проскурнин М.А.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет,
Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3
e-mail: proskurnin@gmail.com*

Изучение и анализ почвенного органического вещества (ПОВ), его химической структуры и состава, а также трансформации при землепользовании — актуальная проблема химии. Эта задача требует разработки методов химического анализа ПОВ на основе инструментальных методов анализа, прежде всего спектроскопии. В рамках работы предложена система анализа ПОВ на основе (1) препаративного разделения почв на узкие по размеру частиц фракции в широком диапазоне размеров и (2) ИК-спектроскопического анализа выделенных фракций без их разрушения при помощи дополняющих друг друга методов и приемов регистрации сигнала, а также специально разработанной обработки мультиспектральных данных.

Применение для ИК-спектров почвенных фракций микрометрового размера двумерной корреляционной спектроскопии (2D-COS) в различных вариантах обеспечивает точную идентификацию практически всех полос, а также устанавливает наличие корреляционных связей между полосами структур в органоминеральных комплексах почв. При помощи 2D-COS для образцов близкого состава можно получить информацию о различиях в структурно-групповом составе ПОВ без дополнительной пробоподготовки. В частности, проявляются полосы, относящиеся к функциональным группам на поверхности почвенных частиц, ароматическим компонентам, большому числу полос алифатических компонентов ПОВ, а также адсорбированным формам воды, в том числе в длинноволновой области (1000 см^{-1} и ниже), где доминирование минеральной составляющей не позволяет использовать ни выделение ПОВ, ни разрушающую пробоподготовку (отжиг, хемолиз).

Показано, что температурные зависимости положений максимумов и интенсивностей полос в ИК-спектре почв в диапазоне малоразрушающих температур ($20\text{--}200^\circ\text{C}$) являются аналитическими сигналами, более устойчивыми к изменениям условий эксперимента, чем параметры этих полос при одной температуре. Показаны возможности температурных изменений ИК-спектров фракций почв как в средней, так и дальней ИК-областях как нового параметра, характеризующего ПОВ.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 19-13-00117-П.

ОСОБЕННОСТИ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ РОДИЯ ВО ВТОРИЧНОМ СЫРЬЕ, СОДЕРЖАЩЕМ МЕТАЛЛЫ ПЛАТИНОВОЙ ГРУППЫ

Пухова О.Е.^{а,б}, Васекина Т.Ф.^а, Борягина И.В.^а, Зайцев Д.Д.^{а,в}

^аАО «НПК «Суперметалл» имени Е. И. Рывина, Москва, Россия

^бНИУ МИЭТ, г. Зеленоград,

^вРоссийский технологический университет – МИРЭА, Москва, Россия

e-mail: pukhova.o@yandex.ru

Платиновые металлы, их сплавы и соединения, обладая уникальными свойствами, широко применяются в различных областях науки и техники. Определение содержания драгоценных металлов (ДМ) в разнообразных продуктах производства выполняют классическими инструментальными методами. Исследование условий проведения анализа каждого объекта - важный этап при разработке методик анализа. От выбора условий проведения анализа и параметров прибора, влияющих на процессы, в значительной степени зависят основные метрологические показатели разрабатываемых методик.

Метод спектрофотометрического определения родия по ГОСТ 12556.1-82 весьма трудоемкий, длительный, с большим расходом реактивов и проб. При этом данный ГОСТ можно использовать только при содержании палладия до 5,0 масс.%, что делает невозможным его применение в сплавах с высоким содержанием палладия.

Спектрофотометрическое изучение комплексов платиновых металлов с гидроксиламином, как в индивидуальных растворах, так и при их совместном присутствии, позволило установить оптимальные условия определения содержания родия: концентрацию родия в аликвоте, длину волны и время установления равновесия при нагревании.

Метод спектрофотометрического определения основан на сравнении оптических плотностей окрашенного комплексного хлорида родия в солянокислом растворе в присутствии солянокислого гидроксилamina. Раствор сравнения готовится из растворов хлоридов родия, платины и палладия с учетом предварительно установленного другим методом содержания палладия в образце.

Разработанная методика определения массовой доли родия в диапазоне от 10,00 до 40,00 масс. % в материалах, содержащих Pt, Pd и Rh, позволяет быстро и с необходимой точностью определять содержание родия в многокомпонентных сплавах. Испытания по этой методике можно проводить с навесками пробы от 0,10 г, что позволяет сократить безвозвратные потери драгоценных металлов по сравнению с требованиями ГОСТ. Так же по разрабатываемой методике возможно определение родия в объектах, содержащих до 20 масс.% палладия.

РАЗРАБОТКА ИНСТРУМЕНТАЛЬНОЙ ПЛАТФОРМЫ ДЛЯ СОВОКУПНОЙ ОЦЕНКИ ПАРАМЕТРОВ ОКСИДА ГРАФЕНА

Ратова Д.-М.В., Смирнова С.В., Коробов М.В., Михеев И.В., Проскурнин М.А.

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
119234, Москва, Ленинские Горы 1, стр.3, Химический факультет
e-mail: darmarrat@gmail.com*

Оксид графена (ОГ) — уникальный двумерный материал на основе графена, состоящий из sp^2 кластеров, окруженных sp^3 атомами углерода, соединенных с кислородосодержащими группами. Он растворим в воде, что делает его основой создания нанофармпрепаратов. Однако такое применение ОГ невозможно без надежных методов и методик оценки полного состава ОГ и его контроля. Для этого перспективны инструментальные платформы на основе методов молекулярной и атомной спектроскопии для совокупной качественной и количественной оценки продуктов синтеза ОГ, полученных с помощью различных химических и электрохимических методов, и самих водных дисперсий ОГ. До сих пор такие разработки не проводились.

При этом для каждого метода, включаемого в такую платформу, требуется методологическая работа. Так, понимание химии поверхности, особенно распределения и природы кислотных центров имеет решающее значение для выявления химических свойств и реакционной способности ОГ, в частности, в свободнорадикальных процессах. Существует потребность в методиках количественной оценки распределения функциональных групп ОГ, аналогично классификации реакционных центров, например, цеолитов. Основные типы центров, неоднородных по своей силе, которые необходимо охарактеризовать в ОГ: (1) брэнстедовские кислотные центры, доноры H^+ , (2) льюисовские кислотные центры, чаще всего акцепторы электронных пар (ионы металлов, поверхностные дефекты структуры материала и др.) и (3) основные центры.

Инструментом для исследования кислотных центров выбран метод ИК-НПВО спектроскопии с преобразованием Фурье. Исходные спектры ОГ часто представлены широкими неразрешенными полосами, что затрудняет как качественную, так и количественную оценку кислотных центров, поэтому для работы выбран метод молекулярных зондов.

В рамках доклада будут представлены результаты количественной оценки реакционных центров методами ИК-НПВО и спектроскопии ЯМР с вращением под магическим углом. Кроме того, будет показано влияние предварительной очистки ОГ на количество кислотных центров.

Благодарности. Работа выполнена в рамках проекта РНФ 24-73-10012.

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ КООРДИНАЦИОННЫХ ПОЛИМЕРОВ ДЛЯ КОНЦЕНТРИРОВАНИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФОРМ РТУТИ

Романова Т.Е.,^{а,б} Волынкин С.С.,^в Шуваева О.В.^{а,б}

^а*Институт неорганической химии имени А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук,
630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 3,
e-mail: romanova@niic.nsc.ru*

^б*Новосибирский государственный университет,
630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2*

^в*Институт нефтегазовой геологии и минералогии имени В.С. Соболева
Сибирского отделения Российской академии наук,
630090, Новосибирск, пр. ак. Коптюга, 3*

Металлоорганические координационные полимеры (МОКП) являются новым перспективным классом соединений, обладающим высоким потенциалом в таких областях, как катализ, хранение и разделение газов. Благодаря своим ключевым свойствам - высокой пористости, высокой площади поверхности, наличию однородных упорядоченных полостей и однородному размеру пор, широким возможностям направленного структурного дизайна полимеров, МОКП привлекают внимание для использования при решении ряда задач в аналитической химии. Так, МОКП являются перспективным материалом для применения в качестве неподвижной фазы в газовой хроматографии, высокоэффективной жидкостной хроматографии и твердофазной экстракции.

Несмотря на то, что некоторые МОКП, например, такие, как UiO-66, можно синтезировать методом, обеспечивающим низкую себестоимость продукта при выходе более 90%, перспективным представляется возможность получения регенерируемых сорбентов.

Перспективным соединением с этой точки зрения представляется Zr-ttdc, МОКП на основе циркония и тиентиофендикарбоновой кислоты. Теоретически данный координационный полимер можно использовать для селективной сорбции или разделения химических форм ртути и ряда халькофильных элементов. Важным отличием данного МОКП от UiO-66 является реализация хемосорбции за счет образования координационных связей между активными сорбционными центрами и атомами ртути. При этом, в отличие от МОКП с сульфгидрильными группами, данный МОКП позволяет не только селективно концентрировать ртуть, но и обеспечить регенерацию сорбента, за счет более слабых взаимодействий с этим элементом.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-73-01154.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОРОТКОЦЕПОЧЕЧНЫХ ЖИРНЫХ КИСЛОТ В СЫВОРОТКЕ КРОВИ МЕТОДОМ ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ – ТАНДЕМНОЙ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

Шачнева М.Д., Савельева Е.И

*Научно-исследовательский институт, гигиены, профпатологии и экологии человека,
188663, Ленинградская область, м.р-н Всеволожский,
г.п. Кузьмолоское, ул. Заводская, зд. 6/2,
e-mail: saveleva@rihophe.site*

Содержание короткоцепочечные жирных кислот (КЖК) в сыворотке крови является важным показателем для диагностики и терапии ряда заболеваний, ассоциированных с нарушением иммунного статуса человека. При использовании моноквадрупольного масс-спектрометра требуемая клинической практикой чувствительность анализа не достигается. При использовании тандемной масс-спектрометрии (ГХ-МС/МС) для в режиме мониторинга множественных реакций (ММР) для 7 КЖК достигалась удовлетворительная точность определений в физиологически обусловленных диапазонах концентраций, таблица 1.

Таблица 1. Условия определения КЖК в сыворотке крови методом ГХ-МС/МС

Кислота	ММР-переход (энергия коллизии, эВ)	RT, мин	Диапазон измерений, мкг/мл	Коэффициент вариации (n=5), %
Уксусная D4	63 → 46 (6) 63 → 45 (6)	9,2	Внутренний стандарт	
Уксусная	60 → 43 (6) 60 → 45 (9)	9,3	0,5-30	7
Пропионовая	73 → 55 (9) 74 → 73 (6) 74 → 56 (6)	10,4	0,01-2	9
Изомасляная	73 → 55 (9) 88 → 73 (6)	10,8	0,01-5	7
Масляная	60 → 42 (9) 73 → 55 (9)	11,6	0,005-1	7
Изовалериановая	60 → 42 (9) 60 → 45 (9)	12,1	0,005-7	7
Валериановая	60 → 42 (9) 73 → 55 (9)	12,9	0,005-0,05	10
Капроновая	60 → 42 (9) 73 → 55 (9)	14,2	0,005-1	8

Сыворотку (200 мкл) с внесенным внутренним стандартом подкисляли HCl и экстрагировали метил-третбутиловым эфиром. Хроматографическое разделение проводили на колонке Stabilwax, 30 м × 0,25 мм × 0,25 мкм в режиме программирования температуры от 40 до 230 °C со скоростью 10 °C/мин. Методика успешно апробирована при анализе клинических образцов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 23-15-00510).

АЭС-ИСП ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ В ТАБАКЕ ДЛЯ КАЛЬЯНА С ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЙ МИНЕРАЛИЗАЦИЕЙ ОБРАЗЦОВ

Савинов С.С., Булатова Т.С.

*Санкт-Петербургский государственный университет, 199034,
Санкт-Петербург, Университетская набережная, 7-9
e-mail: s.s.savinov@spbu.ru*

Курение табака представляет опасность для организма человека. Помимо никотина в нем содержатся токсичные металлы, такие как Cd, Cr, Ni, Pb и др. Для количественного многоэлементного анализа перспективен метод атомно-эмиссионной спектроскопии с индуктивно связанной плазмой (АЭС-ИСП). Однако из-за сложной матрицы кальянного табака анализ включает этап пробоподготовки. Целью данной работы был экспериментальный выпор оптимальной схемы минерализации.

Процесс разложения был проведен для следующих марок табака для кальяна: Darside, Overdose, Spectrum и Black Burn. Выбор оптимальной схемы пробоподготовки заключался в проведении кислотной минерализации предварительно измельченной пробы табака по схемам (табл. 1), предложенным в ГОСТе и научной литературе. Последующий анализ проводился на приборе ICPE-9000 Shimadzu.

Схемы 1 и 2 позволяли извлечь из матрицы пробы максимальное количество элементов, давали результаты с наименьшей погрешностью, характеризовались минимальным значением сигнала холостого опыта, а также были наиболее экспрессными и наименее трудоемкими. Впоследствии схемы были дополнительно оптимизированы, варьируя соотношение проба:реагенты, порядок внесения реагентов, возможность хранения минерализатов, разложение в микроволновой печи. Правильность получаемых результатов была подтверждена на реальных образцах способом «введено-найдено».

Таблица 1. Схемы кислотного разложения (масса навески 0.5 г)

№ схемы	Смесь реагентов
1	3.6 мл HNO ₃ + 0.8 мл HClO ₄
2	3.6 мл HNO ₃ + 0.8 мл HClO ₄ + 0.8 мл H ₂ O ₂
3	4 мл HNO ₃ + 2 мл H ₂ SO ₄ + 1.6 мл HClO ₄
4	4 мл HNO ₃ + 2 мл H ₂ SO ₄ + 1.6 мл H ₂ O ₂
5	3.6 мл HNO ₃ + 0.8 мл H ₂ O ₂

Авторы выражают благодарность ресурсному центру Научного парка СПбГУ «Методы анализа состава веществ», чье оборудование было использовано при выполнении исследования.

СЕНСОРНЫЕ ПЛАТФОРМЫ НА ОСНОВЕ ПЛАЗМОННЫХ НАНОКОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ДИФФЕРЕНЦИАЦИИ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭКОТОКСИКАНТОВ И БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ МЕТОДОМ ПОВЕРХНОСТНО-УСИЛЕННОГО КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЙНИЯ

**Самоделова М.В., Лемеш И.А., Капитанова О.О., Мещерякова Н.Ф.,
Завьялова Е.Г., Зверева М.Э., Веселова И.А.**

*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы д.1 стр. 3,
e-mail: mariya.basowa@yandex.ru*

Спектроскопия поверхностно-усиленного комбинационного рассеяния в настоящее время является высокочувствительным и селективным методом определения широкого круга веществ без предварительного выделения и с минимальной пробоподготовкой.

Однако известные на сегодняшний день сенсорные поверхности на основе благородных металлов не могут быть использованы для определения актуальных аналитов из-за мешающих эффектов сложной матрицы реальных объектов, плохого сродства анализируемых соединений к поверхности металла; несовпадения спектральных характеристик сенсорной поверхности и аналита. Решением вышеописанной проблемы может стать создание наноструктурированных плазмонных композитов с управляемыми спектральными и распознающими свойствами и компонентами, позволяющими снизить/исключить мешающее влияние матрицы реальных объектов.

Предложена сенсорная система для определения экотоксикантов (фенолов, полиароматических углеводородов, серосодержащих соединений) в сточных водах и топливе, основой которой служит полимер хитозан, способствующий равномерному распределению наночастиц серебра, извлечению и рассредоточению аналита по поверхности сенсора; добавка оксида графена позволяет увеличить сорбцию анализируемых соединений и снизить матричный флуоресцентный фон. Для дополнительного увеличения чувствительности анализируемые вещества связываются в комплексы с переносом заряда, это открывает возможность для реализации эффекта резонансного комбинационного рассеяния.

Также предложена сенсорная система для определения вирусоподобных частиц типа SARS-Cov-2, состоящая из высокостабильной плазмонной поверхности на основе наночастиц серебра, и аптасенсора, селективно распознающего вирусоподобные частицы и позволяющего им прочно закрепляться на сенсорной поверхности.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ 23-13-00276.

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНО-СКАНИРУЮЩАЯ КАЛОРИМЕТРИЯ МОЛОЧНОГО ЖИРА КОРОВ С РАЗЛИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ СОДЕРЖАНИЯ

Саранов И.А.

*Воронежский государственный университет инженерных технологий,
394000, Воронеж, проспект Революции 19,
e-mail: mr.saranov@mail.ru*

Термический анализ нашел применение в изучении жиров, его потенциал находит все большее применение в отечественной лабораторной практике контроля качества масложировой продукции. Установлено, что тепловые эффекты фазовых переходов зависят от химического состава жира^{1,2}. Задачей данного исследования явилось установление методом ДСК различия образцов молочного жира, полученного от коров одной породы, условия содержания которых различно. В результате термического анализа получены профили кривых плавления (рис.1), подтверждающие отличие в триглицеридном составе молока при разных условиях содержания коров.

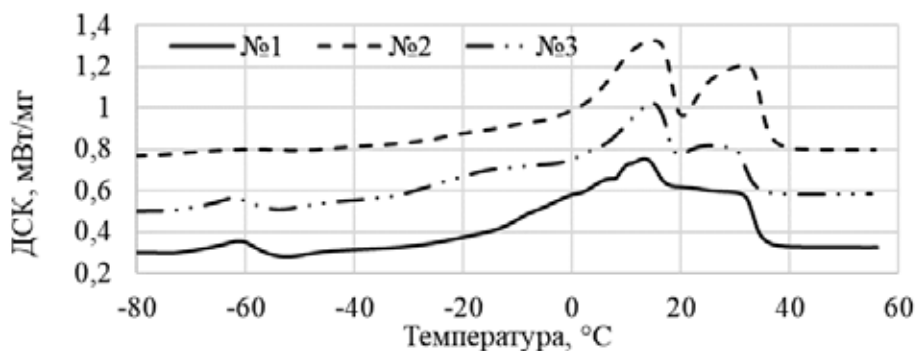


Рисунок 1. Дифференциально-сканирующая калориметрия при изучении плавления молочного жира красно-пестрой породы коров с различными условиями содержания:
1 - выпас на лугах; 2- пастбищное; 3 - стойловое

Кривые 1 и 2 на термограммах (рис. 1) имеют экстремум в области -60°C, характерный для триненасыщенных триглицеридов, кривая 2 имеет впадину при 20°C, которая на кривой 3 выражена сильнее. Данные ДСК говорят о том, что полиморфизм жира при луговом и пастбищном содержании выражен сильнее, а значит, коровы в этих условиях получают более ценное питание.

Литература

1. Рудаков О. Б., Саранов И. А., Ань Н. В. [и др.] *Журн. аналит. химии*. 2021. 2. 183.
2. Рамазанов А. Ш., Балаева Ш. А., Рудаков О. Б., Саранов И. А. *Химия растительного сырья*. 2021. 4. 207.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ. Проект № 23-73-01166

ПРИМЕНЕНИЕ ТВЕРДОФАЗНОЙ ЭКСТРАКЦИИ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ЛЕТУЧИХ И ВЫМЫВАЕМЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ РАЗЛАГАЮЩЕГОСЯ ЛИСТВЕННОГО ОПАДА

Сарапульцева П.Ю.^а Исидоров В.А.^б

^а*Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614068, Пермь, ул. Букирева, 15,
e-mail: polyustrik@mail.ru*

^б*Белостокский технический университет, 15-351,
Польша, г. Белосток, ул. Wiejska 45A*

Разложение листового опада – один из важнейших элементов круговорота углерода и питательных веществ в биосфере. Под воздействием различных биотических и абиотических факторов из опада выделяются как летучие органические соединения (ЛОС), так и растворенный органический углерод (РОУ) в составе вымываемых соединений. Биогенные ЛОС участвуют в процессах, происходящих в пограничном слое атмосферы, а РОУ, являясь наиболее активной и подвижной формой почвенного углерода, обеспечивает транспорт металлов и питательных веществ в почве, а также участвует в формировании и деятельности микробных сообществ.

Изучен состав органических соединений, выделяющихся в газовую фазу и вымываемых дождевой водой из опада четырех видов листовых деревьев: березы повислой (*Betula pendula*), граба европейского (*Carpinus betulus*), ольхи черной (*Alnus Glutinosa*) и осины обыкновенной (*Populus tremula*).

Для выделения ЛОС из свежего и разлагающегося опада применяли метод парофазной твердофазной микроэкстракции (ПФ ТФМЭ) с использованием DVB/CAR/PDMS-волокна. Выделение вымываемых органических соединений из дождевых экстрактов листового опада проводили методом твердофазной экстракции (ТФЭ) с применением картриджей ВАКР7020-06. Качественный состав выделенных органических соединений устанавливали методом газовой хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием (ГХ-МС).

В составе ЛОС всех четырех видов как свежего, так и разлагающегося опада, идентифицировано 213 соединений состава С1-С16 различных классов, в том числе 83 фотохимически активных терпена. ЛОС, выделяющиеся из листового опада, представляют собой смесь вторичных метаболитов растений и соединений микробиологического происхождения. В составе вымываемого дождевой водой РОУ зарегистрировано 231 органическое соединение, из которых 154 идентифицированы. Большую часть из них составляли углеводы, алифатические кислоты и спирты. Полученные результаты могут использоваться при исследовании глобальных экологических процессов.

АЗОТИСТЫЕ ГЕТЕРОЦИКЛЫ В КАЧЕСТВЕ СТРУКТУРНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ РЕЦЕПТОРНОГО СЛОЯ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ (БИО)СЕНСОРОВ ДЛЯ ЭКО-, БИО- И ФАРММОНИТОРИНГА

**Свалова Т.С.¹, Медведева М.В.¹, Мосеев Т.Д.¹, Квашнин Ю.А.²,
Вараксин М.В.^{1,2}, Вербицкий Е.В.^{1,2}, Русинов В.Л.^{1,2}, Козицина А.Н.¹**

¹ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»
620002 г. Екатеринбург, ул. Мира, 19,

²Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, 620137
г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, 22
e-mail: t.s.svalova@urfu.ru

Электрохимические (био)сенсоры сегодня являются одними из наиболее перспективных устройств, успешно дополняющих лабораторные методы для решения многих актуальных задач экспресс-анализа в области медицинской диагностики, экологического мониторинга и пищевой безопасности. Ключевую роль в обеспечении требуемых аналитических характеристик играет природа и структура рецепторного слоя сенсора. Применение малых органических молекул в качестве функциональных элементов и разработка оригинальных подходов к структурированию рецепторного слоя электрохимических сенсоров позволяет расширить их аналитические возможности и области практического применения. Нами предложены оригинальные подходы к структурированию рецепторного слоя электрохимических биосенсоров с использованием в качестве функциональных элементов азотистых гетероциклов – производных азолазинов, диазинов, карбазолов для экспресс-определения бактерий *E. Coli*, *St. Aureus*, антигена/антител к вирусу кори, гемагглютиниана, нитроароматических соединений в пробах с различной матрицей. На основании результатов комплексного исследования природы взаимодействия оригинальных молекул с аналитами, электрохимического поведения и характера его изменения в результате образования супрамолекулярного комплекса с аналитом и/или иммобилизации на поверхности электрода, показано, что малые органические молекулы способны выступать в роли кросс-линкеров, меток и элементов самостоятельного биомолекулярного распознавания. Электрохимические способы структурирования позволили осуществлять «тонкую настройку» аналитических характеристик разработанных сенсорных устройств за счет контроля толщины и электропроводности (био)рецепторного слоя. Предложенные подходы и сенсоры интегрированы как в коммерчески-доступные устройства, так и реализованы в конструкциях разработанных лабораторных прототипов оригинальных электрохимических тест-платформ.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РНФ (проект № 20-13-00142-П, проект № 20-73-10077-П).

ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ФРАКЦИОННОГО СОСТАВА ОРГАНИЧЕСКОГО ВЕЩЕСТВА В ДОННЫХ ОТЛОЖЕНИЯХ С ПОМОЩЬЮ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ ИЗОТОПНЫХ ОТНОШЕНИЙ (IRMS)

**Севастьянов В.С., Федулова В.Ю., Кузнецова О.В.,
Душенко Н.В., Федулов В.С.**

*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН,
119991, Москва, ул. Косыгина 19,
e-mail: sev@geokhi.ru*

Изучение органического вещества (ОВ) донных отложений и осадочных пород Мирового океана дает представление о глобальном цикле углерода и климатических изменениях. Биологическая подпись ОВ значительно трансформируется в течение диагенеза в зависимости от источника ОВ и окружающей среды. Мощным аналитическим методом, позволяющим регистрировать небольшие изменения структурного и молекулярного состава ОВ на основании измерения изотопного углерода и азота, является масс-спектрометрия изотопных отношений. Цель данной работы заключалась в исследовании методом IRMS закономерностей изменения фракционного состава ОВ морских осадков при биodeградации ОВ.

ОВ, экстрагированное из морского осадка, разделяли на 5 фракций (гексановую, гексан-бензольную, бензольную, бензол-метанольную и асфальтеновую) при использовании растворителей возрастающей полярности. Показано, что для области газовых сипов по значениям $\delta^{13}\text{C}$ бензольных фракций ОВ морских осадков можно выделить два кластера. Центр первого кластера находился в поверхностном слое (около 10 см) морских осадков. Центр второго кластера находился в более глубоком слое осадков. Разница между центрами кластеров составляла 2-3‰. Значительно более низкие значения $\delta^{13}\text{C}$ бензол-метанольных фракций ОВ по сравнению со значениями $\delta^{13}\text{C}$ асфальтенов связаны с накоплением бактериальной биомассы в осадках. Трансформация ОВ в осадке приводит к быстрой утрате лабильных молекул типа каротиноидов, декарбоксилированию жирных кислот с образованием углеводов, и, в последствие, полимеризации жирных кислот и синтезу геополимеров¹.

Литература

1. Galimov E.M. Organic Geochemistry, 2006, **37**, 1200.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-27-00296.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИКИ СОРБЦИИ ИОНОВ МЕДИ (II) СОРБЕНТОМ РАСТИТЕЛЬНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ

Силаева В.А.

ФГБОУ ВО «Астраханский государственный университет им. В.Н.Татищева»,
414056, Южный федеральный округ, Астраханская область, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а
e-mail: belsi2001@mail.ru

Существует много методов очистки воды от ионов тяжелых токсичных металлов. Одним из перспективных методов очистки является сорбционный метод, эффективность которого определяется качеством сорбента [1].

Проведено экспериментальное исследование термодинамики процесса сорбции ионов Cu (II) из водных растворов на сорбенте, полученным путем термической обработки рисовой шелухи.

Полученные изотермы адсорбции были проанализированы в соответствующих координатах линеаризации классических уравнений адсорбции Ленгмюра, Темкина и Фрейндлиха. Установлено, что наиболее предпочтительной моделью процесса является модель Фрейндлиха [2]. Проведение эксперимента при трех температурах позволило рассчитать основные термодинамические характеристики процесса (табл.)

Таблица. Параметры термодинамических функций для процесса адсорбции катионов меди (II) при разных температурах

T, K	ΔH , кДж/моль	$-\Delta G$, кДж/моль	ΔS , Дж/(моль·K)
284	-12,15	6,2	21,7
297		3,9	13,4
313		5,6	17,7

В заключении можно отметить, что полученные результаты эксперимента в дальнейшем станут основой для разработки способов очистки водных объектов от тяжелых токсичных металлов.

Литература

1. Шакирова В. В. Садомцева О. С. Получение угольного сорбента из биомассы отходов хлопчатника Астраханской области и изучение его свойств, 2023, 3(12), 20-27.
2. Беломойкина В.А., Шакирова В.В. Модели адсорбции для системы ионы меди (II) – сорбент растительного происхождения.– Астрахань: 2022. – С. 144-147.

НОВЫЕ ДВУХФАЗНЫЕ ВОДНЫЕ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ ХЛОРИДА БЕНЗЕТОНИЯ И АНИОННЫХ ПАВ ДЛЯ ЭКСТРАКЦИИ И КОНЦЕНТРИРОВАНИЯ

Смирнова С.В., Апяри В.В.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы 1,
e-mail: sv_v_smirnova@mail.ru*

Основная тенденция развития методов разделения и концентрирования состоит в соответствии концепции “зеленой” аналитической химии. Особое внимание уделяется экстракционным системам, не содержащим органических растворителей. Двухфазные водные системы (ДФВС) на основе двух и более водорастворимых компонентов - полимеров, спиртов, солей, поверхностно-активных веществ (ПАВ), ионных жидкостей – могут быть получены из доступных и дешевых компонентов и содержат не менее 0,5 м.д. воды в каждой фазе. Водные растворы некоторых катионных ПАВ (КПАВ) и анионных ПАВ (АПАВ) при смешении могут самопроизвольно разделяться на две несмешивающиеся насыщенные водой жидкие фазы: одна – обогащена, вторая – обеднена ПАВ. Фазовое поведение смесей КПАВ и АПАВ определяется природой полярных групп ПАВ, длиной углеводородной цепи, ее разветвленностью.

Новые ДФВС на основе КПАВ хлорида бензетония (BztCl) и АПАВ дигексилсульфосукцината (NaDHSS) и лауроилсаркозината натрия (NaLS) образуются при общей концентрации ПАВ $c_{\text{BztCl}+\text{NaLS}/\text{NaDHSS}} = 0,01-0,20$ М и молярном соотношении, близком к эквимолярному: $0,36 \leq \chi_{\text{BztCl}} \leq 0,71$ (BztCl/NaLS) и $0,45 \leq \chi_{\text{BztCl}} \leq 0,55$ (BztCl/NaDHSS). Для обеих систем построены фазовые диаграммы, установлены границы области существования двухфазной системы, определены плотность, вязкость, полярность и содержание воды в фазах, богатых ПАВ.

Новые ДФВС BztCl–NaDHSS–H₂O и BztCl–NaLS–H₂O исследованы и применены для микроэкстракционного концентрирования ионов тяжелых металлов в природных водах с последующим определением методом ИСП-АЭС; пределы обнаружения для Cd, Co, Cu, Mn, Ni и Pb составили 0,04–1,0 мкг/л, коэффициент концентрирования - 120.

Предложены методики для спектрофотометрического и цветометрического определения (в экстракте, без отделения водной фазы) пищевых красителей после концентрирования в ДФВС; пределы обнаружения составили от 0,004 до 0,05 мг/л. Метод применен для определения красителей в пищевых продуктах и сточных водах пищевой промышленности.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования РФ, проект № 23-075-67362-1-0409-000195.

РАСШИРЕНИЕ БИБЛИОТЕКИ МОДЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ РАДИОНУКЛИДОВ ДЛЯ ИХ ИДЕНТИФИКАЦИИ И ИЗМЕРЕНИЙ АКТИВНОСТИ В ПРОБАХ СЛОЖНОГО СОСТАВА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЖИДКОСЦИНТИЛЛЯЦИОННОГО СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОГО РАДИОМЕТРА АЛЬФА- И БЕТА-ИЗЛУЧЕНИЯ

Смирнова Е.В., Кутузова О.А., Джевелло К.А.

*ФГУП «ПО «Маяк», Россия, 456780, г. Озерск, пр. Ленина, д. 31,
e-mail: cpl@po-mayak.ru*

Анализ проб сложного состава методом жидкосцинтилляционной спектрометрии позволяет избежать длительных процедур радиохимического выделения радионуклидов. Метод является уникальным для детектирования чистых бета-излучателей с низкой энергией. При анализе используют программные методы, моделирующие спектр пробы библиотечными спектрами отдельных радионуклидов. Для внесения радионуклида в библиотеку необходимо выделить его радиохимически чистую фракцию, измерить модельный спектр и затем, последовательно добавляя раствор гасителя, установить вид кривой гашения.

В процессе работы в библиотеку спектров были внесены радионуклиды ^{147}Pm , ^{241}Pu , ^{234}Th с дочерним ^{234}Pa , ^{231}Th , ^{233}Pa . Они имеют малые периоды полураспада и являются бета-излучающими. Измерение их активности в пробах сложного состава другими методами затруднено или требует сложной пробоподготовки. Для получения модельного спектра ^{147}Pm использовали образцовый раствор радионуклида. Очистку раствора радионуклидов плутония, полученного из диоксида ^{239}Pu , проводили ионообменным методом на ионите ВП-1АП. Раствор содержал радионуклиды ^{241}Pu , ^{239}Pu и ^{238}Pu . Выделение радионуклидов тория проводили на ионите АВ-17 с дополнительной очисткой осаждением на гидроокисях лантана. При этом ^{234}Th с дочерним ^{234}Pa выделяли из обедненного ^{238}U , ^{231}Th - из обогащенного ^{235}U . Также была предложена методика выделения ^{233}Pa из раствора радионуклида ^{237}Np последовательно на ионообменных смолах КУ-2 и АВ-17.

Расширение библиотеки модельных спектров позволит получать более точные результаты при анализе проб по методикам, разработанным для реализации СБЯЦ и анализа проб окружающей среды.

Процедуру расширения библиотеки модельных спектров проводили сотрудники ООО «Предприятие «ГРИН СТАР ТЕХНОЛОДЖИЗ»».

Литература:

1. «Методика измерений активности и идентификации альфа- и бета-излучающих радионуклидов в водных и твердых пробах сложного состава, отобранных из природных и технологических систем, с использованием ЖСС» И.ЦЗЛ.МИ.346-2018. МИ разработана и аттестована ООО «Предприятие «ГРИН СТАР ТЕХНОЛОДЖИЗ»», свидетельство о метрологической аттестации № 512-RA.RU.311243-2018/450.014-678

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРИМЕСЕЙ В ИЗОТОПНО ОБОГАЩЕННОМ ТЕТРАФТОРИДЕ КРЕМНИЯ МЕТОДОМ ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

Сорочкина Т.Г., Буланов А.Д., Созин А.Ю., Чернова О.Ю.

*Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девярых Российской академии наук,
603951, Нижний Новгород, БОКС-75, ул. Тропинина, 49,
e-mail: sorochkina@ihps-nnov.ru*

Применение изотопно обогащенного тетрафторида кремния $^{28}\text{SiF}_4$, как исходного вещества для получения монокристаллического кремния-28, ограничивает содержание молекулярных примесей в нем на уровне до 10^{-5} мол.%. Молекулярный состав примесей в $^{28}\text{SiF}_4$ исследован методами ИК-Фурье-спектроскопии и газовой хроматографии¹. Для расширения сведений о его примесном составе целесообразно использовать метод хромато-масс-спектрометрии, позволяющий надежно идентифицировать и с высокой чувствительностью проводить определение различных групп примесей в одной пробе.

Для повышения эффективности хроматографического разделения и надежности определения примесей нами предложено:

- удаление основного вещества из анализируемой пробы;
- последующее криогенное концентрирование примесных компонентов.

Для разделения примесей использовали кварцевые газодсорбционные капиллярные колонки. Примеси с невысокими молекулярными массами и температурами кипения (атмосферные газы; оксиды углерода, азота; углеводороды $\text{C}_1\text{--C}_4$; фреоны; силан; гексафторид серы; сульфурилфторид) разделяли на колонке GS-GasPro 60 м × 0.32 мм с модифицированным силикагелем. Время хроматографирования данных веществ не превышало 18 мин. Для определения менее летучих веществ использовали колонку 25 м × 0.26 мм × 0.25 мкм с сорбентом политриметилсилилпропином (ПТМСП). Ее применение позволило эффективно разделить углеводороды $\text{C}_3\text{--C}_8$ линейного и разветвленного строения, фреоны, ароматические углеводороды.

Использование метода хромато-масс-спектрометрии позволило идентифицировать в образцах $^{28}\text{SiF}_4$ 35 примесных веществ, 28 из которых обнаружены впервые.

Содержание примесей в образцах $^{28}\text{SiF}_4$ в интервале $2 \cdot 10^{-3}$ - $6 \cdot 10^{-7}$ об.%. Достигнуты пределы обнаружения примесей на уровне 10^{-5} - 10^{-7} об.%.

Литература

1. Крылов В.А., Сенников П.Г., Чернова О.Ю., Сорочкина Т.Г., Созин А.Ю. *Неорганические материалы*, 2008, **44**, 7.

ИДЕНТИФИКАЦИЯ ЛЕТУЧИХ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ РАСТЕНИЙ ТРАВЯНО-КУСТАРНИЧКОВОГО ЯРУСА ЛЕСОВ ПЕРМСКОГО КРАЯ

Спирина В.Л.^а, Исидоров В.А.^б, Новоселова Л.В.^а

*^аПермский государственный национальный исследовательский университет,
614068, Пермь, Букирева 15,
e-mail: victoria45winter@mail.ru*

^бБелостокский технический университет, Белосток, Польша

Во всем мире растениями выделяется около 0,76 Пг/год биогенных летучих органических соединений (БЛОС), большинство из которых обладает высокой реакционной способностью, и попадая в нижний слой атмосферы, вступает в реакции с различными радикалами. Результатом этих реакций является образование газообразных загрязнителей, вторичных фотооксидантов и атмосферных аэрозолей¹. Они оказывают негативное влияние на тропосферу. Состав выделений растений остается не до конца изученным. При вычислении концентраций ЛОС в мире не учитывают выделения растений почвенного покрова, к которым относят травянистые растения, кустарнички и др².

Исследованы более двадцати видов растений травяно-кустарничкового яруса лесов Пермского края. Для извлечения и концентрирования соединений использовали метод твердофазной микроэкстракции (ТФМЭ), а их дальнейшую идентификацию проводили при помощи газовой хромато-масс-спектрометрии.

В газовой фазе над исследуемыми видами растений обнаружено около 250 соединений, относящихся к десяти классам. Наиболее многочисленной является группа терпенов, представленная 152 соединениями, к которой относятся моно- и сесквитерпены, и их кислородсодержащие производные. Они проявляют высокую реакционную способность и могут вовлекаться в процессы газофазного радикального окисления^{1,2}.

Таким образом, установлено, что растения травяно-кустарничкового яруса выбрасывают значительное количество БЛОС, следовательно, они могут влиять на общее содержание ЛОС, влияющих на атмосферу.

Литература

1. Glasius M., Goldstein A. H. Recent discoveries and future challenges in atmospheric organic chemistry // Environ. Sci. Technol. 2016. 50. №6. 2754–2764.
2. Isidorov, V. A., Zaitsev, A. A.: Reviews and syntheses: VOC emissions from soil cover in boreal and temperate natural ecosystems of the Northern Hemisphere. Biogeosciences. 2022.

ФЕРМЕНТАТИВНЫЙ ИНГИБИТОРНЫЙ АНАЛИЗ СТЕПЕНИ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ПОЧВ ТОКСИКАНТАМИ

Сутормин О.С., Колосова Е.М., Лонашкова-Мукина В.И., Кратасюк В.А.

*Сургутский государственный университет,
628412, Россия, Ханты-Мансийский автономный округ – Югра, г. Сургут, пр. Ленина, д. 1
e-mail: sutormin_os@surgu.ru*

Существует необходимость в разработке быстрых, простых и информативных методов оценки состояния окружающей среды.

Данное исследование направлено на изучение возможности применения сопряжённой ферментной системы светящихся бактерий НАД(Ф)Н:ФМН-оксидоредуктазы + люциферазы (Ред + Люц) для прогнозирования потенциальной токсичности промышленных урбостратоземов.

В ходе химического анализа было установлено, что отобранные почвы имеют превышение уровня ПДК по фтору (в 44 раз), мышьяку (в 7,7 раз) и свинцу (в 10,5 раз). Почвы, загрязнённые фтором, оказывают значительное ингибирующее воздействие на систему Ред + Люц. Однако корреляции между содержанием водорастворимого фтора и активностью ферментной системы не обнаружено. С учётом того факта, что накопление мышьяка в почвах и его переход в раствор сильно зависят от почвенных характеристик, все образцы были разделены на четыре группы по содержанию гумуса и гранулометрическому составу. Было показано, что в группе 1 (с низким и средним содержанием гумуса, средним суглинком) наблюдается достоверная сильная обратная корреляция между валовым содержанием мышьяка и активностью системы Ред + Люц ($r = -0,72$; $p < 0,01$). Это позволяет утверждать, что ингибирование системы было вызвано не столько воздействием почв, сколько чувствительностью ферментов к мышьяку. Несмотря на высокое общее содержание свинца в образцах почвы (от 47 до 297 мг/кг), изменения активности системы Ред + Люц не произошло из-за низкой растворимости свинца в воде. Концентрации свинца в водных вытяжках из почвы имели низкий коэффициент корреляции с величинами остаточного свечения ферментной системы ($r = 0,2$; $p < 0,05$), что делает некорректным утверждение о том, что ингибирование ферментной системы вызвано именно свинцом, хотя к нему и существует потенциальная чувствительность.

Полученные результаты подчёркивают важность учёта свойств исследуемых почвенных образцов и растворимости токсичных соединений, так как ферментативное биотестирование основывается на измерении токсичности водных экстрактов из почвы.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-14-20030, <https://rscf.ru/project/24-14-20030/>».

ВЭЖХ С ОДНОВРЕМЕННЫМ КОМБИНИРОВАННЫМ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИМ ДЕТЕКТИРОВАНИЕМ МЕТОДАМИ ИСП-МС И ХИАД-МС

Сыпалов С.А., Ульяновский Н.В., Косяков Д.С.

Северный Арктический Федеральный университет имени М.В. Ломоносова,
ЦКП НО «Арктика», 163002, Архангельск, Набережная Северной Двины, 17,
e-mail: s.sipalov@narfu.ru

Комбинирование методов масс-спектрометрического детектирования, индуктивно связанной плазмы (ИСП-МС) и масс-спектрометрии высокого разрешения (МСВР), показали большие возможности в поиске, идентификации и определении новых бромсодержащих органических соединений¹⁻². В данной работе продемонстрирована возможность одновременного определения бромсодержащих органических соединений сочетанием методов ВЭЖХ-ИСП-МС и ВЭЖХ-ХИАД-МС.

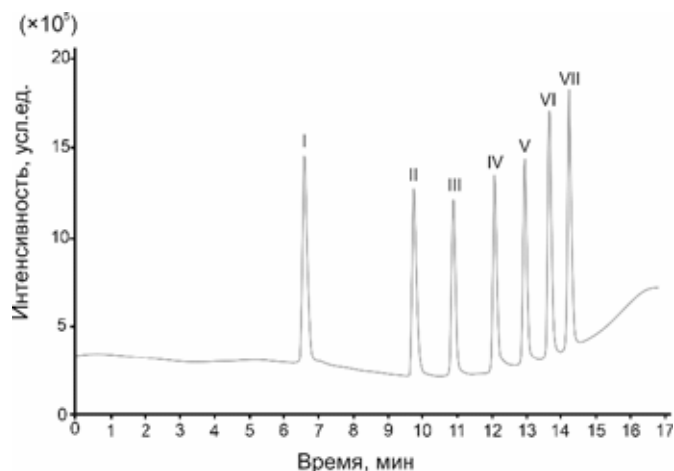


Рисунок 1. Хроматограмма смеси броморганических соединений, полученная методом ВЭЖХ-ИСП-МС (I – амброксол; II – бромгексин; III – 3-бромфенол; IV – 2,6-дибромфенол; V – 2,4-дибромфенол; VI – 3,5-дибромфенол; VII – 2,4,6-трибромфенол)

С помощью делителя потока, часть элюента после хроматографического разделения подавали в ХИАД-МС, где проводили подтверждение времени выхода и структуры. Другую часть подавали в ИСП-МС (рис. 1). Благодаря наличию атомов брома в структуре всех соединений, метод показал высокую селективность и чувствительность, а единый аналитический отклик предоставляет возможность проведения количественного анализа без индивидуальных стандартных образцов.

Литература

- Ul'yanovskii, N.V. et al *Science of the Total Environment*, 2022, **805**, 150380
- Sypalov, S.A. et al *Journal of Analytical Chemistry*, 2023, **78(9)**, 1191–1198

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП НО «Арктика» САФУ им. М.В. Ломоносова при финансовой поддержке РНФ, проект 24-43-00153.

ПРИМЕНЕНИЕ КОМБИНАЦИИ ЯМР- И КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ КОМПЛЕКСНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКИ СТРУКТУРНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ ЛИГНИНОВ

Сыпалова Ю.А., Белесов А.В., Кожевников А.Ю.

*Северный (Арктический) федеральный университет имени
М.В. Ломоносова, ЦКП НО «Арктика»
163002, г. Архангельск, набережная Северной Двины, 17;
e-mail: yuliya.popova01@mail.ru*

Применение 2D-COS в ИК-спектроскопии позволяет получать обширную информацию о структурно-групповом составе сложных веществ или их смесей, в т. ч. биополимеров. В данной работе впервые была успешно применена комбинация спектроскопии ^{31}P ЯМР с 2D-COS ИК-спектроскопией для комплексной характеристики структурных особенностей препаратов лигнина различного происхождения. Для построения 2D-COS ИК-спектров использовали данные спектроскопии ЯМР по содержанию ОН-групп (Рис. 1).

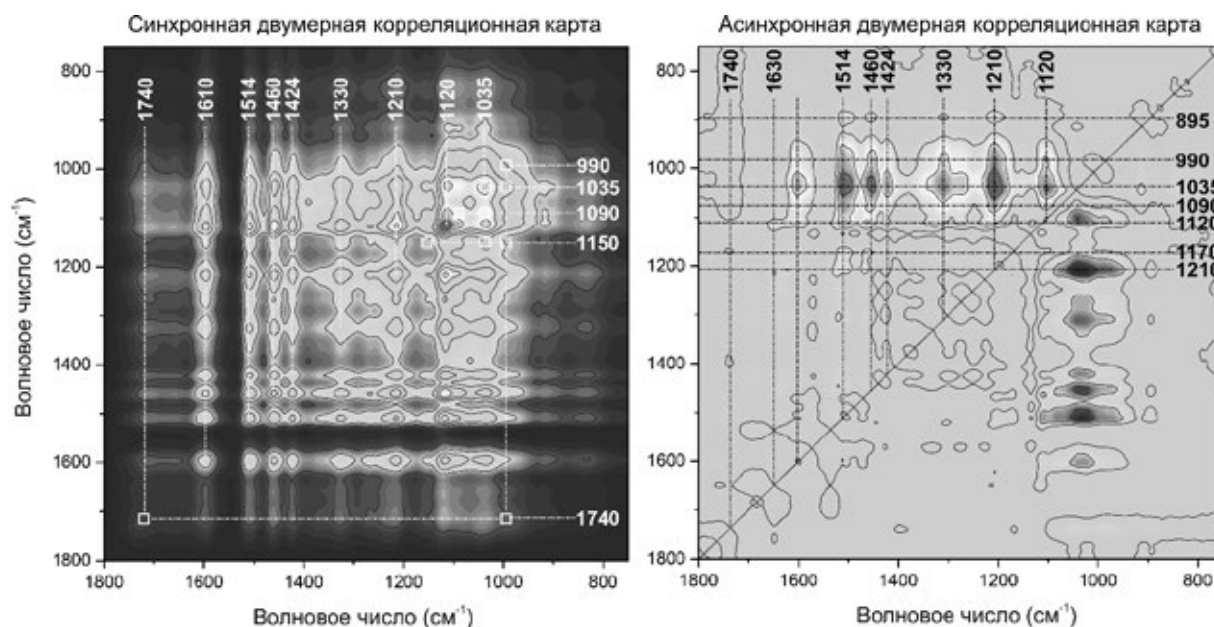


Рисунок 1. 2D-COS синхронные и асинхронные ИК-спектры.

Соответствующие авто-пики, кросс-пики и корреляционные квадраты свидетельствуют о значительном влиянии условий выделения на S-единицы лигнина, наличии в их составе полисахаридной составляющей. Изменение условий выделения прежде всего влияет на процессы деметоксирования, дегидратации, деполимеризации/конденсации лигнина, а затем на разрыв лигноуглеводных связей. Развитие предложенного подхода позволит получать дополнительную информацию о структурных особенностях препаратов лигнинов и влиянии на них варьируемых условий выделения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 22-13-20015, с использованием оборудования ЦКП НО «Арктика», САФУ

СПОСОБ КОЛИЧЕСТВЕННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ РАСТИТЕЛЬНЫХ МАСЕЛ В МОЛОЧНЫХ ПРОДУКТАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЦИФРОВОЙ ЦВЕТОМЕТРИИ

Танкова А.В., Окина Е.В., Долганов А.В.

*Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарёва,
430005, Республика Мордовия, Саранск, ул. Большевикская, д. 68а
e-mail: anastasant58@gmail.com*

Одна из самых востребованных разновидностей растительного жира – пальмовое масло. За счет низкой стоимости и длительного срока хранения оно является наиболее выгодным заменителем молочного жира¹.

Существующие на данный момент методы определения содержания пальмового масла в пищевых продуктах характеризуются длительным проведением анализа, использованием дорогостоящего оборудования и токсичных химических реактивов. Поэтому в настоящее время цифровая цветометрия в комбинации с люминесценцией является перспективным, доступным направлением в аналитической химии с хорошими метрологическими характеристиками, а разработка экспресс-метода определения содержания пальмового масла в пищевых продуктах является актуальной аналитической задачей^{2,3}.

В работе предложена методика люминесцентного определения содержания пальмового масла в молочных продуктах с использованием цифровой цветометрии по синей компоненте цветности. Были детально изучено влияние факторов на природу люминесценции, подобраны оптимальные условия проведения анализа и получены градуировочные зависимости содержания пальмового масла в сливочных маслах и творожных продуктах соответственно $y = 1,1676 \cdot x + 108,73$ ($r^2=0,99$) и $y = 1,1025 \cdot x + 100,6$ ($r^2=0,99$).

Литература

1. Симонова Е.С., Куренкова Л.А. *Наука и образование: проблемы и перспективы*, 2018, 59.
2. Моногарова О. В., Осолок К.В., Апяри В.В. *Журнал аналитической химии*, 2018, **73**, 857.
3. Лобанов А.Н., Коваленко К.В., Чайков Л.Л., Кривохижа С.В., Кириченко М.Н. *Патент 2645083 РФ*, 2017.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 124031100029-1) в рамках государственного задания Мордовского национального исследовательского университета им Н.П. Огарева (создание новых молодежных лабораторий).

ПОЛУКОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ КЕРОГЕНА В ПОРОДАХ МЕТОДОМ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ

Таныкова Н.Г., Чудова Е.С., Козлова Е.В., Спасенных М.Ю., Петрова Ю.Ю.

*Сургутский государственный университет,
628412, Россия, Ханты-Мансийский автономный округ – Югра, г. Сургут, пр. Ленина, д. 1
e-mail: tanykova_ng@surgu.ru*

Генерационный потенциал осадочных пород нетрадиционных коллекторов, таких как баженовская и тюменская свиты, зависит от происхождения керогена и степени зрелости органического вещества (ОВ). Традиционно ИК-спектроскопия с Фурье преобразованием используется для определения структурно-группового состава, однако практически отсутствуют методики количественного определения керогена в породе без его предварительного выделения.

Для разработки способа полуколичественного определения керогена в породах были исследованы образцы нефтяных сланцев баженовской свиты Западно-Сибирского нефтегазоносного бассейна методом ИК-спектроскопии на пропускание.

В ИК-спектрах нефтяных сланцев большинство полос характеризуют колебания функциональных групп глинистых, кремнистых и карбонатных минералов, а ОВ можно идентифицировать в областях 3000-2800 и 1700-1600 см⁻¹ как валентные колебания С–Н связей алифатических групп и С=C связей ароматических колец соответственно. Содержание керогена рассчитывали как сумму алифатических и ароматических фрагментов ОВ, используя значения оптической плотности и нормируя ИК-спектры по полосам кварца (797 см⁻¹), глинистых (1100-1000 см⁻¹) и карбонатных (1450-1400 см⁻¹) минералов, а также ароматических (1630 см⁻¹) и алифатических (2925 см⁻¹) структур ОВ. Найденные методом ИК-спектроскопии значения содержания керогена в пересчете на общий органический углерод (ТОС_{ИК}, масс. %) хорошо коррелируют с данными программируемого пиролиза Рок-Эвал (ТОС, масс. %) с относительной погрешностью до 50% для глинисто-карбонатно-кремнистых пород.

Для повышения точности определения керогена в формуле нормирования необходимо использовать поправочные коэффициенты. Методом градуировочного графика определили коэффициенты поглощения С–Н и С=C связей в монокомпонентных смесях модельных соединений: D-глюкоза (2944 см⁻¹, 0.67±0.04 мм⁻¹·мг⁻¹), нафталин (1593 см⁻¹, 0.43±0.04 мм⁻¹·мг⁻¹) и лауриновая кислота (2920 см⁻¹, 0.22±0.06 мм⁻¹·мг⁻¹).

Исследование выполнено при финансовой поддержке Правительства Ханты-Мансийского автономного округа – Югры (приказ от 20.06.2023 № 10-П-1534).

СТЕРЕОСЕЛЕКТИВНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДИАСТЕРЕОМЕРОВ ДИГИДРОКВЕЦЕТИНА

Терехов Р.П.,^а Тальдаев А.Х.,^б Панков Д.И.,^а Бочаров Э.В.,^{б,в} Селиванова И.А.^а

^аФГАОУ ВО Первый МГМУ им. И.М. Сеченова Минздрава России (Сеченовский университет),
119048, г. Москва, ул. Трубецкая, д. 8, стр. 2,
e-mail: terekhov_r_p@staff.sechenov.ru

^бМФТИ, 141701, Московская область, г. Долгопрудный,
Институтский переулок, д. 9

^вИБОХ РАН, 117997, Москва, улица Миклухо-Маклая, дом 16/10

Один из *транс*-изомеров дигидрокверцетина (ДКВ) – (2*R*,3*R*)-2-(3,4-дигидроксифенил)-3,5,7-тригидрокси-2,3-дигидро-4*H*-1-бензопиран-4-он – зарегистрирован в России в качестве фармацевтической субстанции (ФС). В зависимости от условий производства, в ФС возможны примеси *цис*-ДКВ, контроль которого в актуальной нормативной документации не осуществляют, что несет потенциальные риски для пациентов.

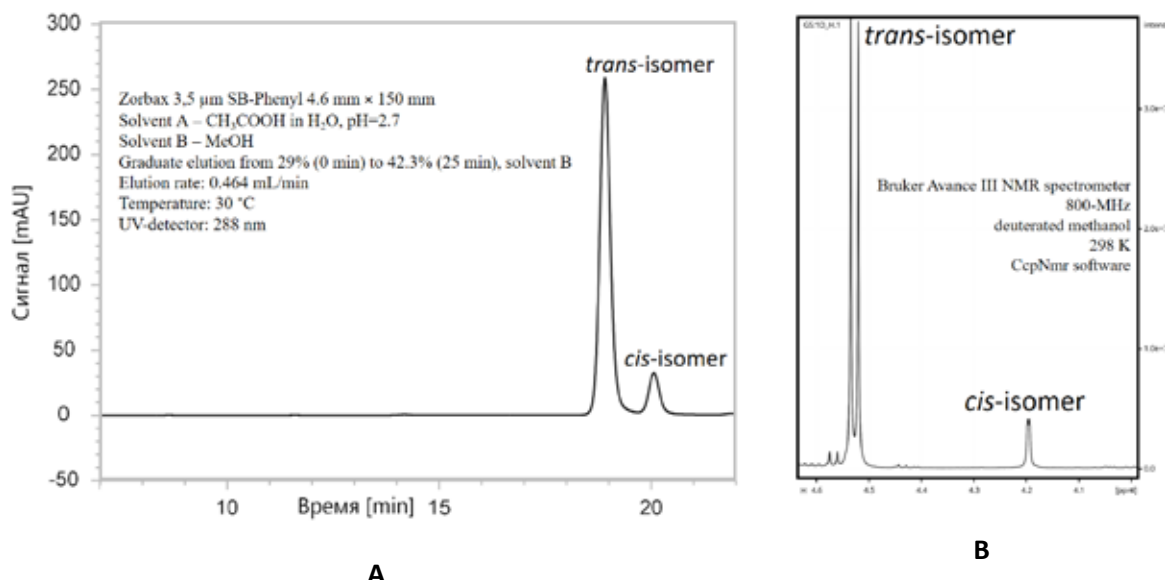


Рисунок 1. Результаты анализа *цис*-изомер-обогащённого ДКВ: А – ВЭЖХ, В – ЯМР ¹H.

Относительное содержание диастереомеров ДКВ в ФС определяли методом внутренней нормализации. Результаты количественного анализа примеси *цис*-изомера, полученные методами ВЭЖХ в ахиральных условиях и спектроскопии ЯМР ¹H, составили 9,5±1,3% и 12,5±2,0%, соответственно. Результаты хорошо согласуются ($r^2 = 0,9958$). По валидационным характеристикам «Специфичность», «Правильность» и «Прецизионность» оба метода являются приемлемы для фармацевтического анализа.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-75-01130.

АНАЛИЗ ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ МЕТОДОМ АЭС-МП

Титова А.Д.^{а,б}, Данилова М.М.^а, Савинов С.С.^б

^а НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей»
191015, г. Санкт-Петербург, ул. Шпалерная, д. 49, Россия
e-mail: atinet@mail.ru

^б Санкт-Петербургский государственный университет
199304, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7/9, Россия

Массово распространенные атомно-эмиссионные спектрометры с искровым или дуговым возбуждением спектра накладывают жесткие требования к анализируемым пробам: минимальный размер пробы должен перекрывать отверстие камеры обыскривания или быть не менее диаметра противоэлектрода. Применение специальных адаптеров в искровом разряде позволяет анализировать прутки и проволоки с диаметром не менее 3 мм. Однако тонкие сварочные проволоки диаметром меньше 3 мм, а также тонкостенные титановые трубы проанализировать не представляется возможным. В этих случаях приходится прибегать к использованию более подходящего оборудования, например, спектрометра с возбуждением спектра в плазме, а также проведения дополнительной процедуры – кислотной минерализации.

Атомно-эмиссионные спектрометры с микроволновой плазмой не потребляют горючие и дорогостоящие газы (по сравнению с пламенем в атомно-абсорбционной спектрометрии или индуктивно связанной плазмой), работают с использованием воздуха и позволяют достичь пределов обнаружения лучше, чем для пламенных атомно-эмиссионных и атомно-абсорбционных спектрометров.

Авторами предложена методика определения основных легирующих и примесных элементов (Al, V, Mo, Zr, Cr, Si, Fe) в титановых сплавах с использованием атомно-эмиссионного спектрометра с микроволновой плазмой Agilent 4120 MP-AES: выбраны свободные от существенных спектральных наложений аналитические линии элементов; установлено отсутствие матричного влияния при использовании водных стандартных растворов; оценены пределы определения элементов; проведена оценка метрологических характеристик методики с использованием модельных растворов. Проведена проверка правильности разработанной методики с использованием стандартных образцов титановых сплавов и метода «введено-найдено».

Разработанная методика успешно применяется в практике отдела Анализа состава веществ и материалов ЦНИИ КМ «Прометей» для определения элементного состава разрабатываемых титановых сплавов.

СОРБЦИОННО-ЦВЕТОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПИЩЕВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИММОБИЛИЗОВАННЫХ МИКРОЗОНДОВ

Ковалев С.В., Тихомирова Т.И., Апяри В.В.

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, химический факультет,
119991, Москва Ленинские горы д.1, с.3
e-mail: tikhomirova-tatyana@yandex.ru*

Сочетание сорбционного концентрирования с последующим определением аналита на поверхности сорбента является одним из эффективных приемов проведения химического анализа. В рамках развития этого направления внимание исследователей привлекает разработка миниатюрных устройств для проведения сорбционного извлечения аналитов, в некоторых случаях используется единичная частица сорбента.

В данной работе сорбционные микрозонды на основе кремнезема, химически модифицированного группами ЧАО (ХМК-ЧАО), и оксида алюминия использованы для определения анионных пищевых красителей Зеленый прочный (ЗП), Понсо-4R (П-4R) и Желтый солнечный закат (ЖСЗ) методом цветометрии с помощью лабораторного сканера.

Устройство для сорбционного извлечения красителей с помощью микрозондов изготовлено путем иммобилизации на полимерный держатель малого плотного массива частиц сорбента (размер зоны 1 мм). Оптимизированы условия регистрации аналитического сигнала с помощью сканера: оптимальные координаты цвета: для ЗП – «R» для П-4R и ЖСЗ – «G или B», разрешение не менее 1200 dpi, режим регистрации – отражение.

Время достижения сорбционного равновесия составляет 30 мин. На ХМК-ЧАО извлечение достигается в области pH 2-6, на оксиде алюминия – в 0,05-0,15 М HCl. Область экспоненциальной зависимости аналитического сигнала от концентрации красителей наблюдается в диапазоне 1 – 7 мг/л. Установлено, что на определение красителей не влияет ионная сила в диапазоне 0,1-0,5 М, а также 1000-кратные избытки лимонной кислоты, 500-кратные сахарозы и 100-кратные крахмала. Разработанный способ с использованием микрозондов на основе оксида алюминия применен для определения П-4R в напитке и ЗП в капсулах таблеток.

Разработано устройство, содержащее массив дистанцированных микрозондов, представляющих собой индивидуальные частицы сорбента (оксид алюминия, размер частиц 100-150 мкм). Установлено, что при регистрации сигнала отдельных микрозондов коэффициенты чувствительности градуировочных зависимостей координат цвета от концентрации аналита в два раза выше по сравнению с полученными для случая плотного массива.

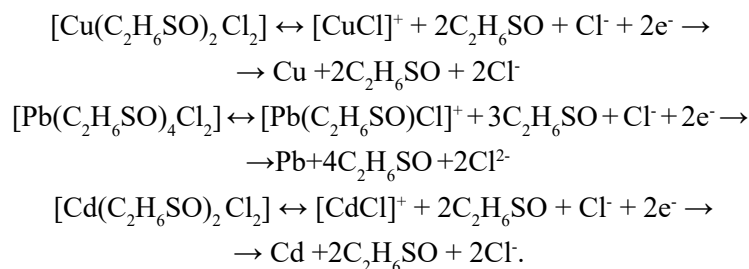
ОДНОВРЕМЕННОЕ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ Cu(II), Pb(II) И Cd(II) С ПРИМЕНЕНИЕМ ДМСО-СОДЕРЖАЩИХ ФОНОВЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ

Трубачев А.В., Трубачева Л.В.

*Удмуртский государственный университет,
426034, Ижевск, ул. Университетская, 1,
e-mail: trub_av@mail.ru*

Применение в вольтамперометрии минерально-органических фоновых электролитов, содержащих органические растворители с высокой сольватирующей способностью, позволяет повысить селективность и точность определения металлокаатионов благодаря образованию в растворе комплексов металлов, включающих в состав координационной сферы молекулы органических растворителей и различных по составу электрохимически активных частиц. В ряду органических растворителей с высокими значениями донорных чисел наибольший эффект достигается при использовании диметилформамида (ДМФА, DN=26,6) и диметилсульфоксида (ДМСО, DN=29,8).

Установлено, что в кислых хлоридных средах (pH=2; 0,1 М KCl + 0,1 М LiCl) в присутствии 4-6 М ДМСО Cu(II), Pb(II) и Cd(II) восстанавливаются на электроде с образованием четких катодных пиков тока, при этом наблюдается смещение их потенциалов в область более отрицательных значений с увеличением разности $\Delta E_{Cu/Pb}$ до 350 mV и $\Delta E_{Pb/Cd}$ до 250 mV (в отсутствие ДМСО их значения составляют 200 и 150 mV соответственно). Найдено, что в данных условиях протекают следующие электро-химические реакции:



Электровосстановление протекает необратимо в случае меди(II) и кадмия(II), в случае свинца(II) процесс обратим, при этом предельный ток во всех случаях контролируется диффузией. Линейная зависимость предельного тока от содержания деполяризаторов в растворе соблюдается в следующих концентрационных пределах: для меди(II) - $4 \cdot 10^{-5} \div 2 \cdot 10^{-3}$ М, для свинца(II) - $1 \cdot 10^{-5} \div 6 \cdot 10^{-4}$ М, для кадмия(II) - $5 \cdot 10^{-5} \div 1 \cdot 10^{-3}$ М. Предложена методика вольтамперометрического определения меди, свинца и кадмия при их одновременном присутствии в сложных по составу объектах на фоне ДМСО-содержащих хлоридных электролитов.

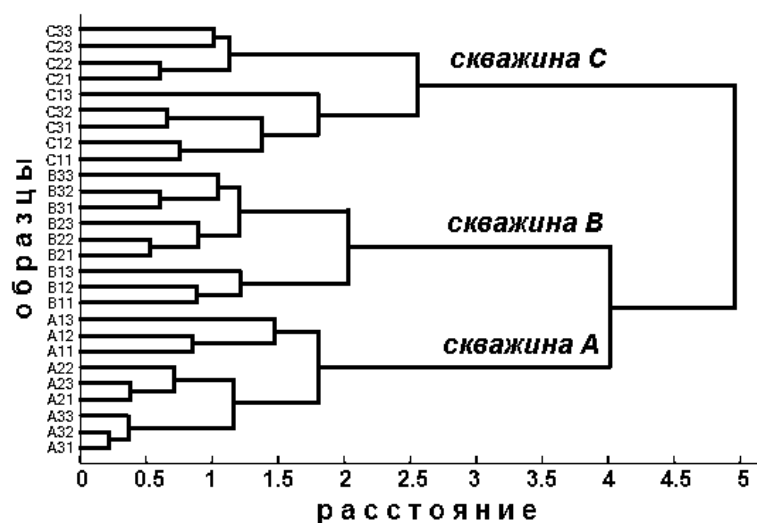
АЛГОРИТМЫ «DATA MINING» В ИНТЕРПРЕТАЦИИ РЕЗУЛЬТАТОВ АНАЛИЗА НЕФТИ ПРИ НЕКОНТРОЛИРУЕМОЙ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ В ДАННЫХ

Туров Ю.П., Гузняева М.Ю.

*Сургутский государственный университет,
628412, Сургут, проспект Ленина, 1
e-mail: turov_iup@surgu.ru*

Для характеристики фациально-генетических условий образования и происхождения нефти, классификации и идентификации образцов наиболее эффективным и информативным считается изомерный состав различных классов соединений. Однако стандартных образцов изомерного состава многокомпонентных нефтяных смесей для метрологической оценки результатов анализа не существует. Поэтому возникает вопрос: чем же и в какой степени обусловлены наблюдаемые различия в результатах анализа образцов из одного и того же источника в разное время – неконтролируемыми погрешностями анализа или реальным различием их состава?

В работе методами хроматомасс-спектрометрии был исследован изомерный состав парафинов и ароматических соединений в пробах нефти из трех скважин (*A*, *B* и *C*) в трех сериях образцов с интервалом отбора ~ 2 месяца. Массив данных обработан одним из алгоритмов «DATA MINING» – методом кластерного анализа по Уорду с применением евклидовой метрики между точками в пространстве нормированных относительных концентраций изомеров в составе образцов.



Результат в форме дендрограммы приведен на рисунке. Таким образом, несмотря на неизбежные погрешности в данных, удалось дифференцировать образцы по конкретным источникам (скважинам) и принадлежность скважин *A* и *B* к одному продуктивному горизонту.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Правительства Ханты-Мансийского автономного округа – Югры (приказ от 20.06.2023 № 10-П-1534).

КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ СУЛЬФИДА КАДМИЯ С ОБОЛОЧКОЙ ПЕРЕМЕННОГО СОСТАВА – НОВЫЕ ЭФФЕКТИВНЫЕ МОДИФИКАТОРЫ ПЬЕЗОСЕНСОРОВ

Кучменко Т.А.^{1,2}, Умарханов Р.У.¹, Хмелевская Т.Н.³, Узбекиев Э.С.¹

¹Воронежский государственный университет инженерных технологий
394036 Россия, Воронеж, пр-кт Революции, 19

²Институт геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского
Российской академии наук, 119334, Москва, ул. Косыгина, 19

³Воронежский государственный медицинский университет им. Н.Н. Бурденко

Новые наноразмерные многофункциональные материалы активно внедряются во все области человеческой жизни, в том числе обеспечивая предупреждение о потенциальной опасности, повышая уровень защиты здоровья и жизни при работе в неблагоприятных условиях.

Основным чувствительным слоем сенсора является микрофаза с квантовыми точками (КТ Quantum dots (QDs)) на основе сульфида кадмия с разной защитной оболочкой переменного состава. Чувствительность и сорбционное сродство регулируются различными макромолекулярными соединениями и легирующими добавками, позволяющими обнаруживать, накапливать и идентифицировать опасные вещества.

Цель исследования – оценить влияние на селективность массивов сенсоров с фазами квантовых точек сульфида кадмия природы стабилизирующих оболочек хитозана разного состава к парам летучих органических соединений (ЛОС).

По результатам детектирования паров ЛОС разных классов массивом сенсоров на основе КТ CdS/ хитозан с добавками высоко оцениваются разрешающие свойства «электронного носа» по отношению к парам воды, спиртов, морфолина, хлороформа, метилэтилкетона, метоксиэтанамин, аминов циклического строения.

Обобщение всех результатов позволяет сделать ряд важных практических выводов: квантовые точки на основе сульфида кадмия повышают надежность детектирования газов-маркеров патологических процессов; применение твердотельных и наноструктурированных сенсоров позволяет без пробоподготовки за 60 с высоко чувствительно и точно оценить направление процессов по ЛОС в биопробах; экспрессный анализ с применением газовых пьезосенсоров позволяет на более ранних стадиях установить начало воспаления; предлагаемый новый способ ранжирования набора данных показал хорошую классификацию для образцов сложного химического состава и может характеризоваться признаками универсальности в дополнение к известным методам хемометрики.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 23-23-00609.

ОТ «ЭЛЕКТРОННОГО НОСА» К ИСКУССТВЕННОМУ ОБОНЯНИЮ

Кучменко Т.А.^{1,2}, Мураховский И.А.¹, Умарханов Р.У.^{1,2}

¹Воронежский государственный университет инженерных технологий
394036 Россия, Воронеж, пр-кт Революции, 19
²ООО «Сенсорика – новые технологии»
394036 Россия, Воронеж, пр-кт Революции, 19 к.1

На кафедре аналитической, физической химии ВГУИТ уже 25 лет развивается направление по разработке аналитических систем типа «электронный нос» на пьезокварцевых резонаторах объемных акустических волн. До недавнего времени основной упор исследований делался на установление и описание фундаментальных свойств в сорбционных системах летучих органических соединений и микро-, нанофаз модификаторов пьезорезонаторов разной природы – от хроматографических фаз до наноматериалов, разработке новых способов анализа разных объектов с применением набора разноселективных сенсоров. Не отставило и направление по разработке новых приборов на основе 1–12 сенсоров, программного обеспечения к ним. К настоящему времени 3 уникальных прибора имеют декларацию о серийно выпускаемых в России. Это первые российские «носы» на пьезосенсорах.

Однако для широкого внедрения приборов и алгоритмов измерения запахов в практику разработчики, с одной стороны улучшают характеристики сенсоров (чувствительность, избирательность, линейность откликов, время надежной эксплуатации), с другой – ищут новые параметры и подходы для получения большей информации о сложных смесях летучих соединений. Для создания полной системы распознавания запаха градации проб в выборке по матрице откликов сенсоров широко применяются методы хемометрики без идентификации компонентов.

Нами предложены и обоснованы новые расчётные параметры, которые позволяют в сложных смесях идентифицировать отдельные компоненты или группы близких по природе и характеристикам сорбции. Особым успехом считаем идентификацию отдельных летучих соединений по сигналу всего одного сенсора с наноструктурированным покрытием, чувствительным к живым молекулам, распространённым в биопробах человека, животных, пищевых продуктах, микробиоте. Предложены уникальные подходы аутентификации комплексных смесей молекул с присвоением определенных меток запаха. Всё это в совокупности позволяет говорить именно не только об успехе в разработке «электронных носов», а именно об электронном обонянии как целостной системе, которую можно применять для анализа летучих соединений самой разной природы.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 23-23-00609.

НЕИОННЫЙ ОКСИЭТИЛИРОВАННЫЙ ПАВ НЕОНОЛ АФ 9-10 В ЭКСТРАКЦИИ ИОНОВ МЕТАЛЛОВ

Усманова Д.О.^{а,б}, Елохов А.М.^б

*^аИнститут технической химии Уральского отделения РАН,
614013, Пермь, Академика Королева 3,
e-mail: dasha_03_12@vk.com*

*^бПермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева 15*

Неионные ПАВ активно применяются в экстракционных методах благодаря их доступности и широким экстракционным возможностям. Неонол АФ 9-10 ($C_9H_{19}C_6H_4O(C_2H_4O)_{10}N$) является одним из перспективных ПАВ для концентрирования ионов металлов вследствие доступности, высокой степени биоразлагаемости и низкой температуры помутнения его водных растворов.

Установлено, что экстракция неонолом АФ 9-10 возможна при температурах более $80^{\circ}C$, а также при $25^{\circ}C$ с использованием высаливателей – сульфата натрия или аммония. Расслаивание в системах сохраняется при введении серной или хлороводородной кислот до 0,6 моль/л, аммиака и раствора гидроксида натрия – в концентрации более 3 моль/л.

Изучение экстракционной способности предложенных систем показало, что неонол АФ 9-10 в кислых средах концентрирует ионы металлов по гидратно-сольватному механизму, при этом увеличить экстрагируемость можно введением комплексообразователей – галогенид- и тиоцианат-ионов или нейтральных кислородсодержащих экстрагентов. Найдены условия количественного извлечения таллия (III) и железа (III) в виде тиоцианатных комплексов, а также условия отделения меди (II) и железа (III) от цинка и кобальта (II), а также меди (II) от цинка и кобальта (II) при экстракции с ацетилацетоном.

Исследование распределения органических комплексообразующих реагентов показало, что в системе с сульфатом аммония в качестве высаливателя с коэффициентами более 40 извлекаются: арсенazo I, арсенazo III, бериллон II, ксиленоловый оранжевый, а также хромазурол S. В отсутствие высаливателя коэффициенты распределения изученных реагентов не превышают 40. Полученные данные позволили разработать методику экстракционно-спектрофотометрического определения кобальта с 4-(2-пиридалазо) резорцином в системе неонол АФ 9-10 – вода (диапазон определяемых содержаний 1,2–2,4 мкг/мл, $\varepsilon = 19500$).

ИДЕНТИФИКАЦИЯ СТРУКТУРНЫХ ФРАГМЕНТОВ ЛИГНИНА ПО ДАННЫМ ДВУМЕРНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР: ОСНОВНЫЕ ПРОБЛЕМЫ И ПУТИ ИХ РЕШЕНИЯ

Фалёва А.В., Косяков Д.С.

*Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова,
163002, Архангельск, Набережная Северной Двины 17,
e-mail: a.bezumova@narfu.ru*

На сегодняшний день спектроскопия ЯМР – единственный аналитический метод, позволяющий однозначно определять фрагменты лигнина. Но не смотря на весь потенциал данного метода, методология исследования недостаточно разработана. В частности, большинство исследователей осуществляют идентификацию только по литературным данным, не принимая во внимание какие-либо критерии к оценке точности идентификации, что может привести к существенным ошибкам¹.

В рамках данной работы будет представлена аналитическая схема определения особенностей химической структуры препаратов лигнина по данным 2D ЯМР спектров, а также предложен ряд методологических подходов, позволяющих провести идентификацию как известных, так и новых фрагментов лигнина с высокой точностью.

Выполняемые нами систематические исследования лигнинов различного происхождения привели к выводу, что соблюдение двух простых правил позволяет избежать серьезных ошибок. Во-первых, это наличие всех целевых сигналов, характеризующих атомы в боковой цепи фрагментов лигнина; отсутствие хотя бы одного целевого сигнала должно ставить под сомнение правильность идентификации. Во-вторых, это совпадение значений химических сдвигов целевых кросс-пиков с опубликованными данными в пределах $\pm 0,05$ и $0,5$ м.д. для ^1H и ^{13}C измерений, соответственно.

На примере исследования лигнинов хвойных пород показано, как детальный анализ ЯМР спектра с помощью экспертной системы, имеющей в своем составе инструменты поиска структур с близким значением химических сдвигов, позволяет решить проблему идентификации минорных кросс-пиков.

Значительных успехов в идентификации фрагментов лигнина также удалось достичь с использованием хемометрических методов анализа.

Литература

1. Faleva A.V. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2022, **14**, 5458.

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП НО «Арктика» Северного (Арктического) федерального университета имени М. В. Ломоносова при финансовой поддержке РФФ, при финансовой поддержке РФФ, проект 21-73-20275.

ИДЕНТИФИКАЦИЯ ИРИДОИДОВ В СОСТАВЕ СЛОЖНОЙ СМЕСИ РАСТИТЕЛЬНЫХ ЭКСТРАКТОВ ПО ДАННЫМ 2D ЯМР И ВЭЖХ-МСВР

Фалёва А.В., Онучина А.А., Ульяновский Н.В.

*Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова,
163002, Архангельск, Набережная Северной Двины 17,
e-mail: a.bezumova@narfu.ru*

Иридоиды это вторичные растительные метаболиты по типу монотерпенов. Они имеют широкий спектр биологической активности и часто являются основой фармакологической активности многих лекарственных растений¹.

Цель данной работы – идентификация иридоидов в составе представителей семейства Вересковые (*лат. Ericaceae*), одного из основных источников данного класса соединений, произрастающих на территории Архангельской области. В качестве объектов исследования выступали водно-метанольные экстракты, полученные методом ультразвуковой экстракции из стеблей брусники (*Vaccinium vitis-idaea*), клюквы (*Vaccinium oxycoccos*), черники (*Vaccinium myrtillus*), голубики (*Vaccinium uliginosum*) и подбела (*Andromeda polifolia*). Для достижения поставленной цели предложен подход, основанный на сочетании методов 2D ЯМР и ВЭЖХ-МСВР, где анализ спектров ЯМР являются первым шагом для целевого поиска указанного типа соединений.

На первом этапе по данным комбинации ¹H-¹³C HSQC-¹H NMR спектров установлено, что все пять экстрактов характеризуются разным составом иридоидов. В частности, на спектре экстракта клюквы присутствуют сигналы характерные для структуры по типу деоксилоганина, тогда как в остальных экстрактах присутствуют только соединения по типу монотропеина. Основываясь на полученных методом ЯМР данных был проведен целевой поиск соединений, содержащих указанные фрагменты, с помощью ВЭЖХ-МСВР. В результате удалось обнаружить не только характерный для данного вида растений вакцинозид, но и ряд неописанных ранее структур.

Литература

1. Wang C., Gong X., Bo A., Zhang L., Zhang M., Zang E., Zhang C., Li M. *Molecules*, 2020, **25**, 287.

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП НО «Арктика» Северного (Арктического) федерального университета имени М. В. Ломоносова при финансовой поддержке РФФ, проект 23-73-01078.

КРАУНСОДЕРЖАЩИЕ ОРГАНИЧЕСКИЕ И ОРГАНО-НЕОРГАНИЧЕСКИЕ ГИБРИДНЫЕ СИСТЕМЫ В КАЧЕСТВЕ ХИМИЧЕСКИХ СЕНСОРОВ В ЖИДКОСТИ И ГАЗОВОЙ СРЕДЕ

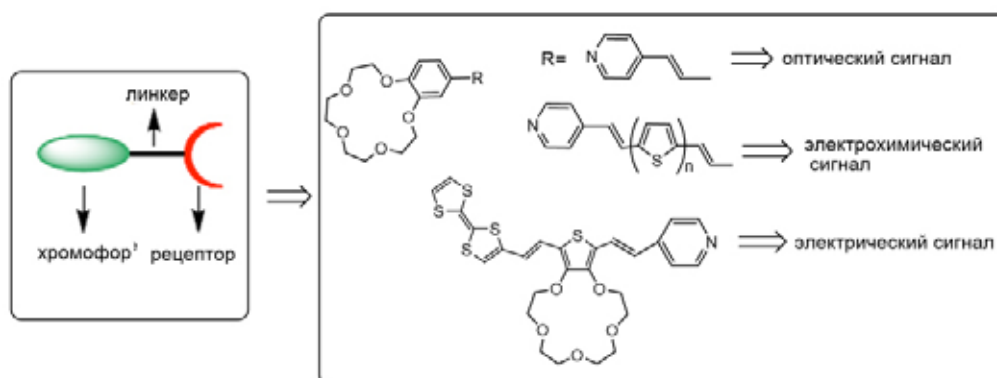
**Федоров Ю.В.,^а Токарев С.Д.,^а Гулакова Е.Н.,^а
Румянцева М.Н.,^б Федорова О.А.^а**

^а *Институт элементоорганической химии имени А. Н. Несмеянова РАН, г. Москва, Россия;
e-mail: fedorov@ineos.ac.ru*

^б *Химический факультет МГУ имени М. В. Ломоносова, г. Москва, Россия*

Сенсоры используются для постоянного контроля концентрации химических веществ в целях экологической безопасности, оптимизации технологических процессов на производстве, медицинской диагностики. Основным компонентом аналитических приборов является хемосенсорный элемент. Его рецепторная часть обеспечивает связывание с определенным типом аналита, в то время как хромофорная часть ответственна за тип возникающего аналитического сигнала (оптический, электрохимический, электрический).

В докладе представлены подходы к получению сенсоров, имеющих в качестве рецепторной части краун-эфир, а также показаны возможные пути модификации хромофорной части с целью получения сенсоров, демонстрирующих различные типы аналитических сигналов.



Молекулы красителей, представленные на схеме, построены таким образом, что связывание катиона металла по рецепторной части приводит к появлению аналитического сигнала. Система построена по модульному типу. Замена краун-эфирного фрагмента приводит к изменению селективности комплексообразования, замена хромофорной части приводит к изменению типа наблюдаемого аналитического сигнала. Таким образом были построены системы, демонстрирующие оптический, электрохимический и электрический отклик на аналит.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ №23-13-00424.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДИКИ PDA-OES НА ИСКРОВОМ АТОМНО-ЭМИССИОННОМ СПЕКТРОМЕТРЕ ГРАНД-ЭКСПЕРТ ДЛЯ ОПЕРАТИВНОГО КОНТРОЛЯ НЕМЕТАЛЛИЧЕСКИХ ВКЛЮЧЕНИЙ

**Фельдман Ю.К., Спрыгин Г.С., Морозов А.О., Демин К.Ю.,
Комолова О.А., Григорович К.В.**

*ИМЕТ РАН, Москва, Ленинский просп., 49, 119334
e-mail: yuri.feldman@yandex.ru*

Традиционными методами оценки неметаллических включений (НВ) является анализ шлифов на оптическом микроскопе, фракционный газовый анализ, а также сканирование поверхности с помощью растрового электронного микроскопа с функцией рентгеновского микроанализа. Основным преимуществом методики PDA-OES является высокая скорость анализа, позволяющая проводить оперативный контроль качества по составу и неметаллическим включениям непосредственно на производстве. Целью данной работы было сопоставление количества пиков интенсивности спектральных линий элементов соответствующих НВ при PDA-OES анализе с качественной и количественной оценкой этих НВ методами сканирующей электронной и оптической микроскопии. В качестве материала для исследований был использован стандартный образец железа чистого ГСО СОП 10525-93. Анализы PDA-OES проводились на атомно-эмиссионном спектрометре Гранд-Эксперт производства: ООО «ВМК-Оптоэлектроника» с последующей обработкой результатов в оригинальном ПО. Исследование на оптическом микроскопе проводили по методике ASTM E1245-03, была построена зависимость количества включений от их размеров и произведено сравнение с аналогичной зависимостью, построенной по результатам PDA анализа. Анализ поверхности с помощью растрового электронного микроскопа (РЭМ) с рентгеновским микроанализатором показал, что основными группами включений в образце являются нитриды. Результаты анализа образца по методикам РЭМ, ASTM и PDA-OES показали хорошую корреляцию по количеству и типам НВ в образце железа, что в свою очередь говорит о потенциальной эффективности методики как инструмента оперативного контроля.

ИЗУЧЕНИЕ МЕТАБОЛОМНЫХ ПРОФИЛЕЙ БОЛЬНЫХ С ОНКОПАТОЛОГИЯМИ МОЧЕПОЛОВОЙ СИСТЕМЫ С ПОМОЩЬЮ ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОГО НЕНАПРАВЛЕННОГО ПРОФИЛИРОВАНИЯ

Фролова А.В., Родин И.А.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет,
119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3,
e-mail: anastasiia.frolova@chemistry.msu.ru*

Злокачественные новообразования органов мочеполовой системы являются одними из самых распространенных онкопатологий, поражающих жизненно важные внутренние органы. Рак мочевого пузыря (РМП) характеризуется высокой онкоспецифической смертностью из-за схожих с другими заболеваниями мочевыделительной системы симптомов или их отсутствия на начальных этапах развития заболевания.

Традиционные методы диагностики позволяют определить диагноз, однако имеют определенные недостатки, среди которых в зависимости от типа исследования можно выделить болезненность и инициацию воспалительных процессов – для инвазивных методов, низкую чувствительность для некоторых типов опухолей – в случае неинвазивных.

Получение характеристических профилей биологических объектов, содержащих большое количество метаболитов с различными физико-химическими свойствами и широким диапазоном концентраций, представляет собой серьезную аналитическую задачу. Метод хромато-масс-спектрометрии, благодаря его высокой чувствительности, является ключевым подходом для осуществления метаболомных исследований, позволяя выявлять множество метаболитов из разных биохимических путей и на разных уровнях концентрации. Наиболее широкий метаболомный профиль для больных с РМП можно получить при ненаправленном профилировании мочи ввиду её нахождения в непосредственной близости от опухоли.

В работе рассматривается пробоподготовка, подбор условий для ВЭЖХ-МС анализа, а также проведение метаболомного профилирования образцов мочи методом жидкостной хромато-масс-спектрометрии высокого разрешения для получения максимально возможного числа метаболитов. В качестве объектов анализа выступали образцы мочи больных РМП, а также здоровых пациентов и пациентов с заболеваниями мочевыводящих путей.

Полученные результаты могут быть использованы для обнаружения комплексных нарушений метаболизма, связанных с РМП, и в дальнейшем служить дополнением к текущим методам диагностики данного заболевания на разных стадиях.

СОРБЦИОННОЕ КОНЦЕНТРИРОВАНИЕ АНАЛИТОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ РАСШИРЕННОГО ОКСИДА ГРАФИТА ДЛЯ ИСП-МС, ИСП-АЭС И ДДП-АЭС АНАЛИЗА РАСТВОРОВ

Фролова А.О.^{1,2}, Курбатова В.Д.^{1,2}, Медведев Н.С.¹

¹*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук (ИНХ СО РАН), Новосибирск, Россия*

²*Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
e-mail: a.frolova1@g.nsu.ru*

Известно, что контроль содержания тяжелых металлов (ТМ) в питьевых, природных, сточных водах и биологических жидкостях является важной задачей. При этом возможностей существующих методик количественного химического анализа (КХА) вод и биологических жидкостей не всегда достаточно для контроля концентраций ТМ на требуемом уровне. Предварительное сорбционное концентрирование примесей позволяет значительно снизить пределы обнаружения (ПО) аналитов. В настоящее время актуальным направлением исследований является развитие методик КХА с применением углеродных сорбентов, в частности оксида графита, расширенного микроволновым излучением, для предварительного концентрирования примесей. Дополнительное снижение ПО аналитов возможно реализовать использованием альтернативного высокоэффективного способа ввода проб в источники возбуждения и ионизации – электротермического испарения (ЭТИ).

Разработаны методики КХА природных, питьевых, сточных вод и биологических жидкостей методами масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой (ИСП-МС), атомно-эмиссионной спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой (ИСП-АЭС) и атомно-эмиссионной спектрометрии с двухструйной дуговой плазмой (ДДП-АЭС) с сорбционным концентрированием ТМ и других аналитов, в том числе с ЭТИ, с ПО аналитов на уровне от $n \cdot 10^{-11}$ до $n \cdot 10^{-8}$ % мас. Оптимизированы процедуры сорбционного концентрирования и инструментальные параметры КХА. Изучено влияние условий сорбции и присутствия мешающих компонентов пробы на степень сорбции аналитов. Показана возможность увеличения коэффициентов концентрирования и снижения ПО аналитов при ЭТИ-ИСП-АЭС и ЭТИ-ДДП-АЭС анализе суспензий концентратов примесей.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-23-00058, <https://rscf.ru/project/23-23-00058>

ВОЗМОЖНОСТИ ТЕРМОЛИНЗОВОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ В АНАЛИЗЕ И ИССЛЕДОВАНИИ ФИЗИКО- ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВОДНЫХ ДИСПЕРСИЙ ЛАТЕКСНЫХ НАНОЧАСТИЦ

Хабибуллин В.Р.^а, Шевченко Н.Н.^б, Ярославов А.А.^а, Проскурнин М.А.^а

*^аМГУ имени М.В. Ломоносова, Химический факультет,
Москва, 119991 ГСП-2, Ленинские горы, дом 1, строение 3;
e-mail: proskurnin@gmail.com*

*^бИнститут высокомолекулярных соединений РАН (ИВС РАН),
Санкт-Петербург, 199004, В.О. Большой пр. 31, Россия*

Морфология полимерных микро- и наночастиц, сложная динамика физико-химических превращений и низкие концентрации, которые могут быть характерны для нанопластика в реальных системах, требует чувствительных методов анализа, способных также и к измерению физико-химических параметров водных дисперсий. Для решения таких задач может быть использована термооптическая спектроскопия как группа методов молекулярной абсорбционной и одновременно тепловой спектроскопии. Двойственная природа регистрируемых данных дает информацию как о светопоглощении, так и о теплофизических свойствах исследуемых объектов. Это обеспечивает как определение поглощающих частиц на уровне содержаний, соответствующих оптическим плотностям до 10^{-7} , так и измерение характеристик, отвечающих за динамику установления теплового стационарного состояния в растворе, с погрешностью менее 1%.

Термолинзовая спектрометрия, самый распространённый термооптический метод, используется для определения содержания частиц полистирола размером 65 и 80 нм в широком диапазоне концентраций (0.0001–0.1% масс.). Показано, что в случае исследования нанопластика необходимо учитывать влияние светорассеяния и характеристики светопоглощения, но чувствительность в основном определяется теплофизическими параметрами раствора. Проведена оценка температуропроводности растворов наночастиц полистирола в зависимости от концентрации. С ростом концентрации от 0.0005 до 0.1% (масс.) температуропроводность уменьшается на 4% в сравнении с чистым растворителем, при этом наблюдается резкое снижение температуропроводности при 0.001%. Это может указывать на изменение механизма передачи тепла в растворе вследствие изменения скорости агрегации частиц полистирола, что требует дополнительных исследований.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ: ААА-А-А21-121011590089-1.

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МЕТОДОВ ПРОБОПОДГОТОВКИ ЖИДКОСТЕЙ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ ДОСТАВКИ НИКОТИНА В ГХ-МС АНАЛИЗЕ

Хайдарова Д.В., Данилов Д.А.

*Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,
620002, Екатеринбург, Мира, 21
e-mail: khaydarova.daniya@mail.ru*

В настоящее время существуют различные методы пробоподготовки жидкостей для электронных систем доставки никотина, в связи с чем их сравнение является актуальной задачей. Основными компонентами жидкостей для ЭСДН являются глицерин, пропиленгликоль, ароматизаторы и никотин в виде основания или соли. Целью данной работы является сравнение различных методов пробоподготовки с последующей обработкой результатов и их оценивании с точки зрения относительной степени извлечения компонентов смеси.

Анализ проводился на газовом хроматографе Perkin Elmer Clarus 600 с масс-спектрометром Perkin Elmer Clarus 600Т, капиллярная колонка Elite-5MS (30 м, 0,25 мм, 0,25 мкм). В качестве материала для исследования были использованы жидкости для ЭСДН четырех разных производителей.

Для оценки разных вариантов пробоподготовки, используемых при идентификации или количественного определения нескольких классов органических соединений, была проведена серия опытов по дериватизации, жидкостно-жидкостной экстракции с изменением рН водной фазы и применением таких растворителей как метанол, пиридин, этилацетат, гексан.

Таблица. Относительная степень извлечения в различных методах пробоподготовки, %

	Разбавление метанолом	Разбавление пиридином, силилирование	Жидкостно-жидкостная экстракция этилацетатом	Жидкостно-жидкостная экстракция гексаном, рН > 7	Жидкостно-жидкостная экстракция, рН < 7, силилирование
Никотин	38	87	0	До 100	0
Терпены	30	30	До 100	15	2
Сложные эфиры	4	74	До 100	5	1
Карбоновые кислоты	0	0	0	0	До 100

Таким образом, в зависимости от анализируемого компонента в соответствии с таблицей 1 может быть выбран релевантный метод.

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОРТИЗОЛА И ВИТАМИНА С НА ПЛАНАРНЫХ ЭЛЕКТРОДАХ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ ЧАСТИЦАМИ ЗОЛОТА

Хайруллина Д.Ю., Лексина Ю.А., Челнокова И.А., Шайдарова Л.Г.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова,
420008, г. Казань, ул. Кремлевская, д.18.
e-mail: khairullinadarina@gmail.com*

Стресс является одним из основных факторов, способствующих развитию патологий различных органов и систем. Кортизол (гидрокортизон, ГК) - глюкокортикостероид, который участвует в реакции организма на стресс и может использоваться в качестве биомаркера для раннего выявления стресса. Большое значение в нормализации уровня ГК имеет витамин С (аскорбиновая кислота), так как его антиоксидантные свойства способны устранять стресс и тревогу. Витамин С препятствует увеличению свободного кортизола, адреналина и противовоспалительных полипептидов.

Целью данной работы является разработка вольтамперометрического способа определения ГК и витамин С на планарных электродах (ПЭ), модифицированном частицами золота.

На немодифицированных углеродных электродах ГК не окисляется. На анодной ветви циклической вольтамперограммы окисления витамин С на немодифицированном СУ в кислой среде наблюдается один пик при E 0.75 В. Частицы золота, электроосажденные на поверхность ПЭ, проявляют каталитическую активность при окислении рассматриваемых соединений. При этом регистрируется многократный прирост тока по сравнению с током окисления модификатора и уменьшение перенапряжения окисления органических соединений. Пик электроокисления витамин С и ГК наблюдается при E 0.4 В и E 1.1 В.

Рассмотрена возможность селективного определения при совместном присутствии ГК и витамин С на электроде, модифицированном частицами золота. Разность потенциалов составляет 700 мВ, что позволяет проводить совместное определение двух соединений. При этом линейная зависимость тока пика от концентрации аналитов наблюдается в интервале от 5×10^{-6} до 5×10^{-3} М для ГК и от 5×10^{-7} до 5×10^{-3} М для витамина С.

Разработанный метод селективного вольтамперометрического определения ГК и АК был апробирован при анализе модельной системы сыворотки крови.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета

СТРУКТУРА ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ СПИРОПИРАНОВ ПРИ РЕЗОНАНСНОМ ЗАХВАТЕ ЭЛЕКТРОНОВ

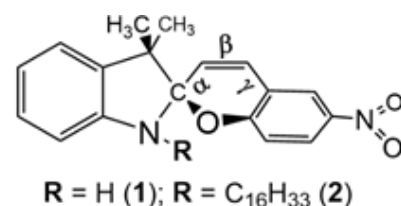
**Хатымов Р.В.^а, Муфтахов М.В.^б, Митянов В.С.^а,
Райтман О.А.^а, Терентьев А.Г.^а**

^аРоссийский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
e-mail: 125047 г. Москва, Миусская площадь, д. 9, стр. 1
e-mail: khatymov.r.v@mustr.ru

^бИнститут физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН

Спиропираны известны своим фотохромизмом, заключающимся в способности молекул к фотоиндуцируемой (т.е. при «захвате» фотона) трансформации циклической структуры в раскрытую мероцианиновую форму, сопровождающейся разрывом связи С–О и изменением спектров поглощения и других оптических характеристик. В настоящей работе масс-спектрометрическим методом изучены процессы, происходящие с молекулами спиропиранов (1) и (2) при резонансном захвате низкоэнергетических электронов (РЗЭ).

Установлено, что в нескольких областях энергии электронов (E_e) в диапазоне ~0–11 эВ образуются отрицательные ионы (ОИ), среди которых максимальный выход демонстрируют молекулярные (M^-) и фрагментные ОИ $[M-CH_3]^-$. Для (1) также обнаружен интенсивный пик ОИ $[M-OH]^-$, что, вероятно, обусловлено доступным для этого соединения Н-сдвигом атома R = H к ближайшему атому О. Долгоживущие M^- с временами жизни $t_a(M^-)$, достигающими нескольких сотен пс, наблюдаются при E_e от ~0 эВ до аномально высоких ≈ 1 эВ для (1) и ≈ 4 эВ для (2), свидетельствуя о большом адиабатическом электронном сродстве (EA_a) этих молекул. Оценка EA_a по $t_a(M^-)$ с помощью статистической модели РПКМ¹ для (1) показала величину 1.23 эВ, что нашло подтверждение в квантово-химических расчетах РВЕ/3 ζ , выполненных для циклических форм M и M^- ($EA_a^{расч} = 1.15$ эВ). Расчеты же всех 8 возможных конформаций мероцианина предсказали $EA_a^{расч}$ не менее 2 эВ. Тем не менее, структурные преобразования, подобные фототрансформации нейтральных молекул, для ОИ спиропирана (1) при РЗЭ все же происходят, что следует из анализа диссоциативных процессов в M^- с помощью упомянутой модели РПКМ.



Литература

1. Khatymov R.V., Shchukin P.V., Muftakhov M.V., Yakushchenko I.K., Yarmolenko O.V., Pankratyev E. Yu. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2020, **22**, P. 3073.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (проект FSSM-2023-0003, соглашение о предоставлении гранта № 075-03-2024-160).

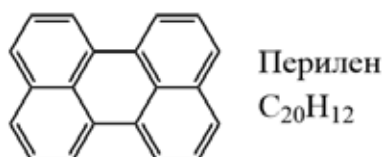
ДОЛГОЖИВУЩИЕ ОТРИЦАТЕЛЬНЫЕ МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ИОНЫ ПЕРИЛЕНА

Хатымова Л.З.,^а Хвостенко О.Г.,^а Лукин В.Г.,^а Хатымов Р.В.^б

^аИнститут физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,
e-mail: 450075, г. Уфа, пр. Октября, 151,
e-mail: lesya0706@ya.ru

^бРоссийский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева

Перилен, представитель семейства полициклических ароматических углеводородов, имеет широкое практическое применение благодаря специфическим физическим, оптическим и электронным свойствам. В частности, перилен и его производные используются в различных устройствах молекулярной электроники¹.



Методом масс-спектрометрии резонансного захвата электронов² зарегистрированы долгоживущие (со временем жизни относительно автонеутрализации $\tau_a > 10$ мкс) отрицательные молекулярные ионы (M⁻) перилена в пяти резонансных состояниях (РС), отвечающих энергиям электронов 0.05, 0.4, 0.7, 1.4 и 2.5 эВ. Для отнесения зарегистрированных РС, с помощью метода TD B3LYP/6-311G был рассчитан электронный спектр иона основного состояния (^{GS}M⁻), на основе которого были получены сведения о РС, включая их электронные конфигурации, энергии и симметрии состояний (Рисунок 1).

	B _{1g}	B _{3u}	B _{3u}	A _u	B _{1g}
70 a _u	—	—	—	—	↑
69 b _{3u}	—	—	↑	—	—
68 b _{3u}	—	↑	—	—	—
67 b _{1g}	↑	—	—	↑↓	↑
66 a _u	↑↓	↑↓	↑↓	↑⊕	⊕
65 b _{2g}	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
64 b _{3u}	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓
РС	^{GS} M ⁻				
E _{расч} (эВ)	0.0	0.5	0.8	1.6	2.5
E _{эксп} (эВ)	0.05	0.4	0.7	1.4	2.5

Рисунок 1. Расчетный электронный спектр иона основного состояния ^{GS}M⁻ перилена.

Соотнесение экспериментальных и расчетных РС показало, что ионы, образующиеся в РС при 2.5 эВ, имеют ту же симметрию (B_{1g}), что и ионы ^{GS}M⁻, которые заведомо обладают большим временем жизни из-за значительного положительного молекулярного электронного сродства. Выдвинута гипотеза о том, что основное состояние ^{GS}M⁻ привносит свой вклад в величину τ_a ионов, образующихся при 2,5 эВ, обеспечивая им измеряемое $\tau_a > 10^{-5}$ с. Рассматривается также вопрос о возможном влиянии радиационного охлаждения M⁻ на величину τ_a .

Литература

- Huang C., Barlow S., Marder S.R. *J. Org. Chem.*, 2011, 76, 2386.
- Хатымов Р.В., Терентьев А.Г. *Известия АН, Сер. хим.* 2021, 4, 605.

МОДИФИКАЦИЯ ПОВЕРХНОСТИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ ДЛЯ СЕЛЕКТИВНОЙ СОРБЦИИ БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ ПРИ ИХ ОПРЕДЕЛЕНИИ МЕТОДОМ МС-ИСП

**Хлуднева А.О., Захарченко Е.А., Казин В.И., Догадкин Д.Н.,
Тюрин Д.А., Колотов В.П.**

*Институт геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского РАН,
г. Москва, 119991, Москва, ул. Косыгина, д. 19,
e-mail: 717nasta34@gmail.com*

Одновременное определение Au, Pt, Pd, Rh, Ir, Ru в горных породах является актуальной аналитической задачей. Наиболее удобным методом определения является метод МС-ИСП, диапазон пределов обнаружения которого 10^{-9} – 10^{-12} г/мл. Однако для снижения матричного эффекта растворы после разложения образцов требуется разбавлять, при этом концентрация благородных металлов (БМ) часто находится вблизи или ниже пределов обнаружения. С другой стороны, определение БМ сопровождается и многочисленными спектральными интерференциями. Все это диктует необходимость проведения предварительного концентрирования для определения БМ в большинстве случаев.

Углеродные наноматериалы (УНМ) характеризуются большой удельной поверхностью и высокопористой структурой, это позволяет рассматривать их в качестве основы для модифицирования их поверхности для создания новых высокоэффективных и селективных сорбентов.

Рассмотрено два способа функционализации углеродных наноматериалов: импрегнирование (пропитка) N, S-содержащими гетероциклическими реагентами и химическое (ковалентное) закрепление селективных групп. Импрегнирование в органическом растворителе — простой и широко распространенный метод нанесения реагентов на твердые пористые материалы. Химическая модификация обеспечивает стабильность сорбента, отсутствие потерь функциональных групп за образования прочной ковалентной связи между молекулами реагента и поверхностью УНМ. Для химического присоединения реагентов использовали метод diazotирования аминов в уксусной кислоте с NaNO_2 .¹

Для полученных сорбентов провели оценку их селективности по отношению к благородным металлам по сравнению с широким кругом элементов. Определена сорбционная ёмкость сорбентов и условия группового извлечения благородных металлов из солянокислых растворов.

Литература

1. Leinonen, H., Lajunen, M. Direct functionalization of pristine single-walled carbon nanotubes by diazonium-based method with various five-membered S- or N- heteroaromatic amines. J Nanopart Res 14, 1064 (2012).

СИНТЕЗ И ЭКСТРАКЦИЯ КАРБОКСИЛАТОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ВОДНЫМИ И ОРГАНИЧЕСКИМИ СРЕДАМИ

Чайкин Д.Ю., Ермаков Р.А., Тупикова Е.Н., Платонов И.А.

*Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева,
443086, Самара, Московское ш. 34,
e-mail: dmchaykin@mail.ru*

Соли карбоновых кислот применяют в химической технологии РЗЭ благодаря высокой активности и растворимости как в полярных, так и в неполярных растворителях. Осаждение карбоксилатов РЗЭ и экстракцию водными растворами из органических фаз используют для их разделения и концентрирования¹.

Целью работы является изучение процессов экстракции пальмитата неодима и оксалатов лантана, иттрия, гадолиния водными растворами, а также нефтью, в том числе из полимерных матриц.

Пальмитат неодима синтезировали из оксида неодима и пальмитиновой кислоты в гептане. Затем экстрагировали из органического растворителя водными растворами соляной кислоты с рН 1, 2, 4 и 6. Содержание неодима в водных растворах определяли спектрофотометрическим методом при длине волны 522 нм. Экстракцию пальмитата неодима из сырой нефти осуществляли водными растворами с рН=1, 5, 7, 9, 11.

Оксалаты лантана, иттрия, гадолиния, синтезированные из водных растворов хлоридов РЗЭ осаждением щавелевой кислотой, помещали в полимерные матрицы. Экстракцию проводили сырой нефтью, смесью воды и сырой нефти (1:1) и дистиллированной водой при температуре 25 и 80 °С в течение 6 ч. Анализ полученных экстрактов проводили методом оптико-эмиссионной спектроскопии с индуктивно связанной плазмой.

Исследования показали, что Nd экстрагируется из раствора пальмитата в гептане в соответствии с мольным содержанием соляной кислоты в экстрагенте. Максимальная экстракция Nd из сырой нефти достигается при рН=1, с увеличением рН степень извлечения практически не меняется. Степень извлечения La, Y и Gd из оксалатов в полимерной матрице водными растворами в 30 раз превышает степень извлечения сырой нефтью. РЗЭ можно расположить в ряд по увеличению степени извлечения: Gd, Y, La. При нагревании экстракция как органической, так и водной средой усиливается.

Литература

1. Использование карбоновых кислот в процессах экстракционной конверсии хлоридов редкоземельных элементов в нитраты / Г. В. Костикова, В. И. Жилов, А. Ю. Цивадзе, Е. В. Сальникова // Журнал неорганической химии. – 2017. – Т. 62, № 7. – С. 997-1000.

ГХ-МС ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАУ И ПХБ ПРИ ИХ СОВМЕСТНОМ ПРИСУТСТВИИ В ВОДАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭВЦ

**Овсепян С.К.,^а Червонная Т.А.,^а Мусорина Т.Н.,^а
Темердашев З.А.,^а Бехтерев В.Н.^б**

^а *Кубанский Государственный Университет,
Россия, Краснодар, 350040, ул. Ставропольская 149
e-mail: arttat718@gmail.com*

^б *Бюро судебно-медицинской экспертизы №2 Министерства здравоохранения Краснодарского края,
354057, Россия, Сочи, ул. Туапсинская, 1*

16 приоритетных полиароматических углеводородов (ПАУ) и 7 индикаторных полихлорированных бифенилов (ПХБ) являются повсеместно распространенными загрязнителями объектов окружающей среды, регламентированными к определению в объектах окружающей среды программами мониторинга природоохранного агентства США (US EPA). ПАУ и ПХБ поступают в водоемы при переносе воздушными массами от источников, вторичном загрязнении, со сточными водами и т.д. Актуальным является поиск эффективных вариантов пробоподготовки вод, обеспечивающих высокие степени извлечения и концентрирования аналитов из многокомпонентных матриц. Интерес представляет изучение особенностей экстракционного вымораживания аналитов под действием центробежных сил (ЭВЦ), поскольку извлечение, концентрирование аналитов, очистка экстрактов от мажорных матричных компонентов протекают за один этап.

В данной работе представлены результаты исследований экстракционных смесей с различным содержанием экстрагента (ацетонитрила) для одновременного выделения из вод ПАУ и ПХБ. Оценено влияние хлорорганических пестицидов на степени извлечения аналитов в диапазоне концентраций, соответствующем содержанию мешающих компонентов в реальных объектах. Показано отсутствие влияния *n*-парафиновых углеводородов при анализе загрязненных нефтепродуктами образцов воды – в оптимизированных условиях углеводороды не извлекались в ацетонитрильные экстракты. Степени извлечения аналитов при этом превышали 90% в диапазоне 0,1 – 100 мкг/л для ПХБ и 0,2 – 100 мкг/л для ПАУ при их ГХ-МС определении.

Работа проводилась в рамках выполнения Государственного задания Минобрнауки РФ (проект № FZEN-2023-0006) с использованием научного оборудования ЦКП «Эколого-аналитический центр» Кубанского госуниверситета.

КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ РОДСТВЕННЫХ ПРИМЕСЕЙ В АМФОТЕРНЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВАХ С ПОМОЩЬЮ МУЛЬТИМОДАЛЬНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

Черепанова Н.Д., Удалов А.В.

*АНОО ВО «Университет Сириус»,
354340, Краснодарский край, ф.т. Сириус, ул. Таврическая, д.5, а/я 8,
e-mail: cherepanova.nd@talantiuspeh.ru*

Амфотерные органические вещества как полифункциональные соединения с полярностью, зависящей от растворителя, часто являются сложными анализатами в хроматографическом контроле качества лекарственных препаратов при помощи обращённо-фазных сорбентов. Особый интерес представляет изучение их хроматографического поведения и взаимного разделения. Для решения такого рода задач универсальным и удобным подходом является мультимодальная хроматография, благодаря сочетанию различных механизмов удерживания¹.

В представленной работе изучены механизмы удерживания основных интермедиатов синтеза золедроновой кислоты (ЗК) на различных неподвижных фазах смешанного типа, а также предложена принципиально новая методика для количественного определения основных примесей в целевой субстанции.

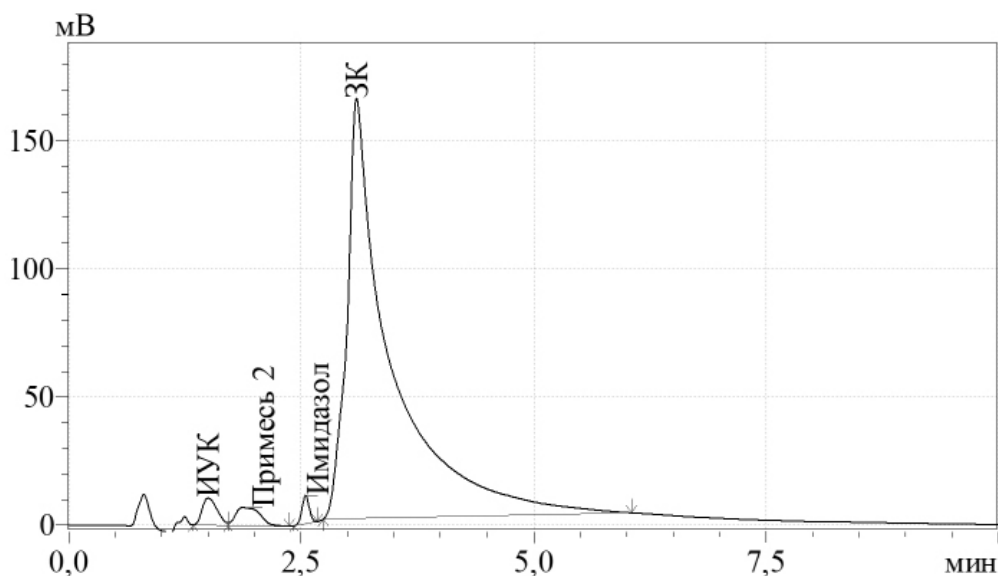


Рисунок 1. Пример хроматограммы ЗК на сорбенте с механизмами ННЛС/ионный обмен
ИУК – имидазол-1-ил уксусная кислота

Литература

1. Zhang K., Liu X. Mixed-mode chromatography in pharmaceutical and biopharmaceutical applications, Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, 2016, **128**, 73.

МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ ПАЛДИ С КАТИОНИРОВАНИЕМ ЛИТИЕМ – ЭФФЕКТИВНЫЙ ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ СКРИНИНГА ПОЛИФЕНОЛОВ В РАСТИТЕЛЬНЫХ ЭКСТРАКТАХ

Чернобельская С.А., Фалёва А.В., Анিকেенко Е.А., Ульяновский Н.В.

*Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова,
163002, г. Архангельск, Набережная Северной Двины, 17
e-mail: s.chernobelskaya@narfu.ru*

Фенольные соединения представляют собой наиболее обширный класс низкомолекулярных вторичных метаболитов растений, имеющих в своей структуре ароматическое кольцо и гидроксильную группу. Широкий спектр биологической активности данных компонентов имеет важное значение для фармацевтической, косметической и других областей промышленности, что обуславливает актуальность проблемы разработки новых подходов к поиску и идентификации фенолов, а также поиска новых растительных источников.

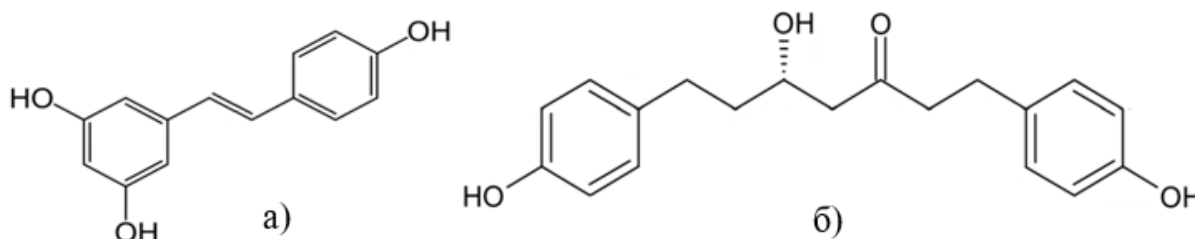


Рисунок 1. Фенольные соединения: а) стильбены; б) диарилгептаноиды

Перспективным методом для экспрессного скрининга полифенолов в растительных экстрактах выступает масс-спектрометрия с поверхностно-активированной лазерной десорбцией/ионизацией (ПАЛДИ) и катионированием литием. Такой подход исключает интерференции со стороны матрицы в области низких масс, позволяет получать высокоинтенсивные масс-спектры, в том числе тандемные, что открывает большие возможности для структурных исследований обнаруживаемых вторичных метаболитов.

На примере диарилгептаноидов и стильбенов, присутствующих в экстрактах флоэмы березы и ели, показана высокая эффективность предлагаемого подхода. Так, в экстракте флоэмы березы обнаружено и идентифицировано 6 диарилгептаноидов, 4 из которых связаны с пентозными и гексозными сахарами. Флоэма ели характеризуется наличием 6 стильбенов, среди которых половина является гликозилированными.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект № FSRU-2024-0004).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ И РАЗДЕЛЕНИЕ ПИЩЕВЫХ ДОБАВОК E110 И E102 В РЕАЛЬНЫХ ОБЪЕКТАХ (НАПИТКИ) МЕТОДОМ ТВЕРДОФАЗНОЙ ЭКСТРАКЦИИ СО СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОЙ ДЕТЕКЦИЕЙ

Черноморова М.А., Уфлянд И.Е., Жинжило В.А.

*Южный федеральный университет, 344006, Ростов-на-Дону, ул. Б. Садовая 105/42,
e-mail: chernomorova.m@mail.ru*

Одним из методов, наиболее подходящим для извлечения, разделения и концентрирования пищевых добавок, является метод твердофазной экстракции. Целью данной работы была разработка простого сорбционно-спектрофотометрического метода определения пищевых добавок E110 и E102 с использованием адсорбента на основе металлоорганической каркасной структуры (МОК) – терефталат меди.

Проведенные адсорбционные исследования на модельных соединениях (ряде красителей) показали удовлетворительные адсорбционные свойства сорбента, а процесс адсорбции лучше всего описывается моделью изотермы Ленгмюра. Рассчитаны термодинамические характеристики процесса адсорбции. Экспериментально установлено, что синтезированный сорбент в условиях лабораторных исследований может функционировать без ощутимой потери эффективности в течении четырех рабочих циклов.

Хроматографический анализ подтвердил присутствие пищевых добавок в газированных напитках, взятых для анализа в данном исследовании. При пропускании реального объекта через сорбент на выходе получали прозрачный раствор – сорбент поглотил оба красителя. В данной пробе не обнаружено пищевых добавок, в прозрачном растворе содержался только сахар. При пропускании элюента происходило последовательное вымывание пищевых добавок. Первым вымывался тартразин (E102), затем «Солнечный закат» (E110). Определена концентрация каждой пищевой добавки в отдельной пробе и установлено, что их содержание в исходной пробе составляет: E102 – 10,75 мг/л, а E110 – 12,34 мг/л.

Высокое извлечение красителя свидетельствует о том, что терефталат меди может быть использован в качестве адсорбента для удаления пищевых красителей в напитках из водных растворов и легкую его регенерацию с целью повторного использования. Проведенные исследования показали высокую эффективность данного сорбента, а при последующем элюировании удастся не только выделить пищевые добавки с хорошим выходом, но и разделить их на хроматографической колонке.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 22-13-00260.

АДАПТАЦИЯ SET (SEQUENTIAL ELUTION TECHNIQUE) ДЛЯ ЗАДАЧ МОНИТОРИНГА ГЕОХИМИЧЕСКОГО ФОНА

Чжан Я., Кропачева М.Ю.

*Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН,
630090, Новосибирск, пр-т Коптюга 3,
e-mail: chzanya@igm.nsc.ru*

Одной из задач аналитической химии является поддержка различных экологических и геохимических исследований, включая биогеохимический мониторинг. В таких исследованиях весьма важна скорость.

Мы применяли методы SET¹ (sequential elution technique) к мхам и лишайникам как биоиндикаторам геохимического фона. Результаты указывают на несколько недостатков: 1) большое стандартное отклонение для параллельных навесок исходных проб; 2) длительное фильтрование растворов для отделения твердой составляющей; 3) контрольный опыт с ГСО для стандартных методик разложения неудовлетворителен.

Для устранения этих недостатков были сделаны следующие адаптации в схеме пробоподготовки фракций биомассы: 1) использование большеобъемной пробы; 2) отказ от стадии фильтрования жидких фракций; 3) использовали новый метод разложения образцов твердых фракций; 4) использование стандартов ГСО для контроля.

После окончания адаптированного эксперимента результаты показывают, что 1) относительное стандартное отклонение не превышает 20% для всех элементов; 2) хорошее согласие для 14 элементов из 20 для стандарта ТР-1 и стандарта БИЛ-2; 3) время эксперимента сократилось вдвое.

Таким образом, можно представить следующие выводы: 1) использование большеобъемной пробы улучшает результаты; 2) стадия фильтрования жидких фракций может быть исключена; 3) упрощена схема пробоподготовки жидких фракций, сокращено количество стадий.

Литература

1. Pérez-Llamazares A., Fernández J.Á., Carballeira A., Aboal J.R. *Journal of Bryology*, 2011, **33**, 267–278.

Работы выполнены в ЦКП Многоэлементных и изотопных исследований СО РАН.

РАЗРАБОТКА, ИЗУЧЕНИЕ И КЛАССИФИКАЦИЯ НОВЫХ СОРБЕНТОВ ДЛЯ ГИДРОФИЛЬНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ С АМИДНЫМИ ГРУППАМИ И МАКРОМОЛЕКУЛАМИ В ФУНКЦИОНАЛЬНОМ СЛОЕ

Чикурова Н.Ю., Шемякина А.О., Чернобровкина А.В., Шпигун О.А.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет,
Россия 119991, г. Москва, ул. Ленинские горы, 1, стр. 3
e-mail: chikurova.nu@yandex.ru*

На сегодняшний день разработка новых и быстрых способов конструирования функциональных слоев сорбентов для гидрофильной хроматографии является актуальной задачей. Для увеличения гидрофильности и селективности фаз, а также степени экранирования матрицы перспективно использование клик-реакций, модифицирование готовыми полимерами и молекулами большого размера. В работе получена серия новых амидных сорбентов с помощью многокомпонентной и вариативной реакции Уги, в том числе с полимерными функциональными слоями. Предложен способ модифицирования матриц на основе силикагеля и полистирол-дивинилбензола эремомицином — молекулой большого размера с полярными группами.

Использование реакции Уги для создания новых слоев позволило получить высокоэффективные амидные сорбенты и управлять их селективностью. В свою очередь создание полимерного слоя с помощью данной реакции привело к существенному экранированию матрицы на основе силикагеля. Показана перспективность модифицирования эремомицином с целью гидрофилизации разных матриц.

Проведено сравнение эффективности, селективности, гидрофильности и стабильности разработанных неподвижных фаз между собой, а также с коммерчески доступными сорбентами. Продемонстрирована классификация свойств полученных сорбентов и показано, что они могут дополнить собой круг основных коммерчески доступных неподвижных фаз. Получены зависимости факторов удерживания витаминов кислотной природы от анионообменной селективности 32 синтезированных сорбентов, с помощью которых возможно прогнозировать удерживание данных веществ.

Приведены примеры применения разработанных неподвижных фаз в различных областях: фармакологии, энзимологии и пищевой промышленности.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 20-13-00140.

РЕНТЕГНОФЛУОРЕСЦЕНТНОЙ АНАЛИЗ МАЛЫХ НАВЕСОК В ГЕОХИМИИ, ГЕОЭКОЛОГИИ И АРХЕОЛОГИИ

Амосова А.А., Чубаров В.М., Финкельштейн А.Л.

*Институт геохимии им. А.П. Виноградова Сибирского отделения Российской академии наук,
664033, Иркутск, ул. Фаворского 1А,
e-mail: chubarov@igc.irk.ru*

Количественный элементный анализ сравнительно малых (менее 300 мг) навесок образцов требуется при решении ряда специфических задач. Разработанный методический подход, основанный на сплавлении 110 мг образца с метаборатом лития и дальнейшем рентгенофлуоресцентном определении Na, Mg, Al, Si, P, K, Ca, Ti, Mn, Fe и некоторых микроэлементов (Sr, Zr), позволил расширить область применения рентгенофлуоресцентного метода при:

- анализе кернов донных озерных и торфяных отложений с целью реконструкции условий природной среды и климата в прошлом¹;
- анализе археологических объектов с целью исследования их происхождения с возможностью сохранения уникальных артефактов²;
- анализе образцов твердого осадка снегового покрова³ и зол углей с целью экологического мониторинга потенциально загрязненных урбанизированных территорий.

Преимуществом данной методики является возможность дальнейшего анализа сплавленных образцов методом масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой⁴.

Литература

1. Amosova A.A., Chubarov V.M., Pashkova G.V., Finkelshtein A.L., Bezrukova E.V. *Applied Radiation and Isotopes*, 2019, **144**, 118.
2. Пашкова Г.В., Мухамедова М.М., Чубаров В.М., Мальцев А.С., Амосова А.А., Демонтерова Е.И., Михеева Е.А., Шергин Д.Л., Пеллинен В.А., Тетенькин А.В. *Аналитика и контроль*, 2021, **25**, 20.
3. Amosova A.A., Chubarov V.M., Prosekin S.N., Kaneva E.V. *Atomic Spectroscopy*, 2023, **44**, 169.
4. Amosova A.A., Panteeva S.V., Chubarov V.M., Finkelshtein A.L. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 2016, **122**, 68.

Исследование проведено в рамках выполнения государственного задания по проекту № 0284-2021-0005 «Развитие методов исследования химического состава и структурного состояния природных и техногенных сред в науках о Земле» с использованием оборудования Центров коллективного пользования «Изотопно-геохимических исследований» ИГХ СО РАН и «Геодинамика и геохронология» ИЗК СО РАН.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТРУКТУРНО-ГРУППОВОГО СОСТАВА И ХАРАКТЕРА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КЕРОГЕНА В ПОРОДЕ МЕТОДОМ ИК-МИКРОСКОПИИ

Чудова Е.С.^а, Костина Ю.В.^б, Гавриленко М.А.^в

^а*Сургутский государственный университет,
628403, Сургут, Ханты-Мансийский автономный округ, пр. Ленина, д. 1
e-mail: chudova_es@surgu.ru*

^б*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук,
119991, Москва, Ленинский просп., д. 29*

^в*Томский политехнический университет,
634050, Томск, пр. Ленина, д. 30*

Органическое вещество (ОВ) пород нетрадиционных коллекторов, таких как баженовская свита, находится преимущественно в рассеянном состоянии (в виде керогена). Изучение химического состава керогена и его распределения в низкопористых породах коллектора необходимо для успешной разработки месторождений и добычи углеводородов. Метод ИК-микроскопии в режиме нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) позволяет изучать локальное распределение минералов и керогена на поверхности пород. Метод является неразрушающим, что предоставляет возможность проводить анализ повторно или использовать образец в дальнейших исследованиях. Регистрируя ИК-НПВО-спектры в отдельных точках поверхности породы, можно определить структурно-групповой состав минералов и керогена, а метод картирования позволяет визуализировать их распределение на поверхности образца. Нормируя ИК-спектры по полосам, характеризующим валентные колебания связей в функциональных группах минералов (глинистые – 1100-1000 см⁻¹; карбонатные – 1450-1400 см⁻¹; кремнистые – 800-780 см⁻¹), алифатических (2930-2920 см⁻¹) и ароматических (1630-1600 см⁻¹) фрагментов ОВ, возможно полуколичественно оценить содержание керогена (как сумму алифатических и ароматических фрагментов) на поверхности породы.

Картирование поверхности образца кремнисто-глинистой породы баженовской свиты показало крайне неоднородное распределение алифатических и ароматических фрагментов керогена (содержание алифатических фрагментов не превышает 2 масс. %, а ароматических – не более 9 масс. %), что указывает на нахождение его в микропорах породы. Распределение минералов также имеет сильно неоднородный характер: содержание кварца варьирует от 3 до 79 масс. %, содержание глинистых минералов – от 21 до 95 масс. %.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Правительства Ханты-Мансийского автономного округа – Югры (приказ от 20.06.2023 № 10-П-1534).

ПОИСК И ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛЛЮТАНТОВ АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА АРКТИКИ МЕТОДОМ ТЕРМОДЕСОРБЦИОННОЙ ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ – МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ

Шаврина И.С., Косяков Д.С.

Северный (Арктический) университет имени М. В. Ломоносова, ЦКП НО «Арктика»

Изучение химического состава арктического воздуха является важной задачей. Ее решение способствует пониманию химических процессов в атмосфере полярных регионов, их влиянию на изменение климата и состояние озонового слоя, а также оценке рисков для арктических экосистем и здоровья человека. Тем не менее имеющиеся в настоящее время литературные данные по химическому составу и уровню загрязняющих веществ в атмосфере арктических регионов весьма неполны. Большинство исследований сосредоточены на определении основных газообразных загрязняющих веществ (оксидов азота и серы, оксида и диоксида углерода, озона, метана), твердых аэрозольных частиц, черного углерода. Однако список поллютантов Арктики постоянно пополняется во многом благодаря применению более совершенных методов анализа. Учитывая дальний перенос загрязняющих веществ и усиление антропогенного воздействия в Арктике, новые поллютанты могут стать серьезной угрозой для хрупких арктических экосистем.

Целью данного исследования является определение уровня концентраций широкого круга легколетучих и полуволетучих приоритетных загрязнителей, а также поиск новых поллютантов в образцах воздуха, собранных в ходе арктической экспедиции на научно-исследовательском судне «Академик Келдыш» осенью 2022 года в Баренцевом, Печорском, Карском морях. Для достижения этой цели был применен метод термодесорбционной газовой хроматографии – масс-спектрометрии высокого разрешения с масс-анализатором на основе орбитальной ионной ловушки (Orbitrap). Количество соединений, которые были обнаружены и определены количественно, варьируется от 20 до 38. Основным компонентом была бензойная кислота, за ней следовали ВТЕХ, фенол, хлороформ, бис (2-этилгексил) фталат. В результате нецелевого скрининга было идентифицировано более 150 соединения: галогенированные (Cl, F, I), азот и серосодержащие соединения, ароматические углеводороды, алкилфенолы, ПАУ и их производные, фталаты и др.

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП НО «Арктика» САФУ при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (проект госзадания № 0793-2020-0007)

НОВЫЕ ЭКСПРЕССНЫЕ МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФЕРМЕНТАТИВНОЙ АКТИВНОСТИ ЛАКТОБАКТЕРИАЛЬНЫХ ФЕРМЕНТОВ С ПОМОЩЬЮ ГИДРОФИЛЬНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

**Шапошников Л.А.^а, Чикурова Н.Ю.^{а,б}, Лесь Е.К.^б, Горбовская А.В.^{а,б},
Савин С.С.^{а,б}, Тишков В.И.^{а,б}, Пометун А.А.^{а,б,в}**

^аИнститут биохимии им. А.Н. Баха ФИЦ Биотехнологии РАН,
Ленинский проспект 33/2, Москва, 119071, Россия,
e-mail: shaposhnikovleo@gmail.com;

^бХимический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова,
Ленинские горы 1/3, Москва, 119991, Россия;

^вМедицинский институт РУДН имени Патриса Лумумбы,
ул. Миклухо-Маклая 8, Москва, 117198, Россия.

Изучение ферментативной кинетики является актуальной задачей, однако не для всех ферментов уже описанные в литературе способы бывают удобными для исследователя. Часто они имеют длительную пробоподготовку или не являются экспрессными. Одним из перспективных методов исследования свойств ферментов является метод гидрофильной хроматографии. Методик изучения ферментативной активности на основе этого метода на настоящий момент мало, но их разработка перспективна, поскольку этот метод позволяет быстро и эффективно разделять полярные вещества, которые часто являются субстратами или продуктами ферментативной реакции (например, нуклеозиды или аминокислоты), делая анализ более удобным для исследователя.

В данной работе были разработаны методики определения активности для рекомбинантных ферментов RihC и CysK из *L. reuteri* LR1 с помощью метода гидрофильной хроматографии. Показано, что использованные в работе неподвижные фазы эффективно разделяют нуклеозиды и азотистые основания, а также ряд аминокислот, представляющие собой субстраты и продукты ферментативных реакций, и демонстрируют лучшие хроматографические характеристики по сравнению с коммерчески доступными неподвижными фазами для ВЭЖХ, а благодаря быстрой пробоподготовке являются наиболее удобными и экспрессными для исследования ферментативной активности.

Работа поддержана грантом РФФ № 23-64-10029.

РАСПОЗНАВАНИЕ ПОВЫШЕННОГО СОДЕРЖАНИЯ Fe^{2+} В ПРИРОДНОЙ ВОДЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КИНЕТИЧЕСКОГО МЕТОДА «ОТПЕЧАТКОВ ПАЛЬЦЕВ»

Шик А.В., Степанова И.А., Беклемишев М.К.

*Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Химический факультет,
119991, Москва, Ленинские горы, 1, стр. 3
e-mail: shik.1966@mail.ru*

Ионы железа($2+$) – один из естественных компонентов подземной воды. В небольших количествах ионы железа необходимы для протекания биологических процессов. С другой стороны, избыточное содержание железа приводит к негативным последствиям для человека, ухудшает вкус и запах воды. В России ПДК железа в водах установлена на уровне 0.3 мг/л (СанПиН 1.2.3685-21). Необходимы простые и экспрессные методы мониторинга Fe^{2+} .

Для выявления образцов природных вод с повышенным содержанием Fe^{2+} мы использовали ранее предложенный нами¹ вариант оптического метода «отпечатков пальцев», основанный на проведении реакций окисления карбоцианиновых красителей в присутствии объекта. Образцы природной воды, содержащие дополнительно введенные ионы Fe^{2+} в виде соли Мора, вводили в реакционную смесь, состоящую из красителя, окислителя и буфера. Регистрировали изменение светопоглощения и флуоресценции в видимой и ближней ИК областях спектра с помощью визуализаторов каждые несколько минут. Интенсивности полученных сигналов обрабатывали методом линейного дискриминантного анализа (ЛДА). Показали, что метод может быть использован для распознавания чистых и искусственно загрязненных железом($2+$) природных вод (рис. 1). Возможно также оценивать содержание Fe^{2+} в незагрязненных водах в диапазоне 0.003 – 0.3 мг/л.

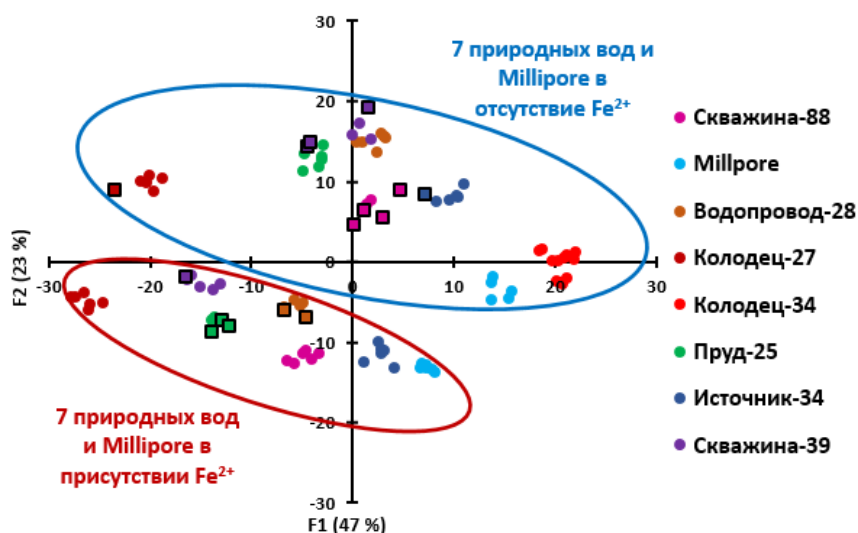


Рисунок 1. График счетов для 7 природных вод (чистых и загрязненных Fe^{2+}).

Литература

1. Stepanova, I. A., Lebedeva, A. N., Shik A. V. et al. *J. Analyt. Chem.*, 2021, 76(12), 1397.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 20-13-00330-П)

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ДИНАМИЧЕСКОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ГРАНУЛОМЕТРИЧЕСКОГО СОСТАВА ЧАСТИЦ В ПОЛИДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМАХ ПРИРОДНЫХ ВОД С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНТЕЗИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ ПММА РАЗЛИЧНОГО РАЗМЕРА

Шулькин В.М.^а, Шевченко Н.Н.^б

^а*Тихоокеанский институт географии ДВО РАН,
690041, Владивосток, ул. Радио, 7,
e-mail: shulkin@tigdvo.ru*

^б*Институт высокомолекулярных соединений РАН,
199004, Санкт-Петербург, Большой проспект В.О., 31*

Химический состав природных вод является ключевой характеристикой, определяющей их качество как важнейшего природного и технологического ресурса. При этом формы нахождения соединений химических элементов: растворенные (<1нм), коллоидные (1нм-1мкм) или в составе взвешенных частиц (>1мкм) не менее важны, чем общая концентрация. Определение методом динамического рассеяния света (ДРС) размеров коллоидных частиц в случае их полидисперсности, что характерно для природных вод, является нетривиальной аналитической проблемой¹. Была проверена возможность использования водных дисперсий, содержащих смесь частиц полиметилметакрилата (ПММА) размером 80-2000 нм, для корректной интерпретации спектров распределения по размерам интенсивности ДРС проб природных речных вод с различным содержанием коллоидных частиц и взвеси. Кроме интенсивности ДРС, определяли элементный состав речных вод и их фракций, полученных после фильтрации методом ИСП-МС.

Для анализа ДРС использовали отечественный прибор Photocor Compact и импортный анализатор Zetasizer Nano-ZS (Malvern, Великобритания).

Анализ функций распределения интенсивности ДРС показал, что диаметры частиц ПММА в диапазоне от 80 до 600 нм корректно определяются в смеси, только если масса крупных частиц в 8-10 раз превышает массу мелких. Добавление в смесь частиц ПММА 2000 нм не позволяет дифференцировать их от частиц 600 нм, хотя положение пика частиц 80 нм воспроизводится уверенно. Величина пиков функции распределения интенсивности ДРС по размерам не может быть использована для характеристики массовой концентрации коллоидных частиц в отличие от общей интенсивности ДРС растворов.

Литература

1. Xu R. *Particuology*, 2015, **18**, 11-21.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 23-27-00029.

СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ КОМПЛЕКСОВ МЕДИ (II) НА ОСНОВЕ БИС-ГЕТАРИЛГИДРАЗОНОВ 2,6-ДИАЦЕТИЛПИРИДИНА

**Щербатых А.А., Капустина А.А., Туполова Ю.П., Попов Л.Д.,
Щербаков И.Н., Уфлянд И.Е.**

*Южный Федеральный Университет,
344006, Ростов-на-Дону, ул. Б. Садовая 105/42,
e-mail: sherbatyh@srfedu.ru*

За последние годы опубликовано большое количество статей о комплексах меди (II) с гидразонами моно- и дикарбонильных соединений, проявляющих противоопухолевую активность^{1,2}. Нами синтезированы бис-гетарилгидразоны 2,6-диацетилпиридина, посредством взаимодействия которых с перхлоратом и нитратом меди (II), был получен ряд пентакоординированных комплексов общей формулы $[Cu(HL)C_2H_5OH]X$ и $[Cu_2(HL')_2]X_2$, где HL – бис-бензотиазолилгидразон и бис-фталазинилгидразон, HL' – бис-бензимидазолилгидразон, X = NO_3^- , ClO_4^- . Поскольку исследуемые комплексы продемонстрировали значительную цитотоксичность против линии раковых клеток HepG2, для их дальнейшего исследования представляет значительный интерес изучение параметров связывания с белком-переносчиком, а также разработка доступных и чувствительных методик определения, полезных как в медицинских исследованиях, так и при контроле качества препаратов. Исследование связывания медных бис-гетарилгидразоновых комплексов с бычьим сывороточным альбумином (БСА), структурным гомологом человеческого сывороточного альбумина (главного белка-носителя в кровеносной системе человека), методом флуоресцентной спектроскопии показало, что все изученные соединения имеют высокое сродство к БСА (порядок констант связывания находится в диапазоне 4.91–7.03), при этом в связывании задействовано не более двух сайтов молекулы белка. Исследуемые комплексы меди (II) характеризуются собственным интенсивным поглощением при 410–460 нм, что позволило разработать спектрофотометрические методики их определения, продемонстрировавшие высокую чувствительность (предел обнаружения достигает $1.1 \cdot 10^{-6}$ М). Правильность определения аналитов проверена методом «введено-найдено». Методики апробированы при определении исследуемых веществ в биологической жидкости здорового человека.

Литература

1. Jia P., Ouyang R., Cao P. et al. *Journal of Coordination Chemistry*, 2017, **70**, 2175.
2. Kapustina A.A., Tupolova Y.P., Popov L.D. et al. *Dalton Transactions*, 2024, **53**, 3330.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект 22-13-00260.

ЭКСПРЕССНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ СУЛЬФИДОВ В КОНСТРУКЦИОННОЙ СТАЛИ МЕТОДОМ ИСКРОВОЙ АТОМНО-ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ

Якубенко Е.В.,^а Орехова Ю.Н.,^а Ермолаева Т.Н.^б

*^аПАО «Новолипецкий металлургический комбинат»,
398040, Липецк, площадь Металлургов, 2,
e-mail: alyenka13@yandex.ru*

*^бЛипецкий государственный технический университет,
398600, Липецк, ул. Московская, стр. 30*

Сульфидные неметаллические включения (НМВ) отрицательно влияют на механические свойства и коррозионную стойкость стали, поэтому контроль содержания MnS и CaS в конструкционной стали, легированной Mn, особенно актуален. Количественную оценку уровня НМВ традиционно проводят методами оптической (ГОСТ 1778, ASTM E1245) или сканирующей электронной микроскопии (ASTM E2142) с приставкой для микроанализа, методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (СЭМ с ЭДС), характеризующимися высокой продолжительностью (до 18 часов) и трудоемкостью.

Для увеличения экспрессности определения НМВ предложен метод искровой атомно-эмиссионной спектроскопии (ИАЭС) с применением спектрометра ARL iSpark 8860 («Thermo Fisher Scientific», Швейцария), оснащенного программным обеспечением OXSAS и Spark-DAT, позволяющим обрабатывать спектры единичных искр.

Изучены условия определения сульфидов методом ИАЭС по схеме, основанной на программной опции Spark-DAT. Определение сульфидов осуществлялось в два этапа. Сначала экспериментально подбирали алгоритмы программной опции путем сопоставления искр высокой и низкой интенсивности. В результате обработки искровых диаграмм по заданному алгоритму устанавливали соотношение содержания элемента в составе НМВ к его общему содержанию. Затем для расчета массовых долей включений в пробе (с учетом результатов, полученных на первом этапе) были предложены псевдо-формулы. Поскольку вся сера присутствует в стали преимущественно в виде сульфидов, исследована возможность исключения из алгоритма и псевдо-формулы марганца, а также серы, входящей в состав оксисульфидов. Подтверждена правильность и высокая прецизионность определения MnS по предложенному алгоритму $S_{AlCa} iRatio$ (1) и псевдо-формуле (2): $S_{dat} QuIC3(500; 1900; S01_0; Al07_0; Ca03_0; a; b; c).d$, (1);

$S_{AlCa} iRatio \cdot S01_8 \cdot 2.77$, (2), где 2.77 - коэффициент пересчета серы на MnS.

Отсутствие систематической погрешности в результатах определения сульфидов подтверждено тестовой статистикой Стьюдента при анализе стандартного образца стали ИСО УГ124 (ЗАО «ИСО», г. Екатеринбург), предварительно проанализированного методом СЭМ с ЭДС. Показана согласованность результатов определения сульфидов в производственных образцах стали методом ИАЭС и СЭМ с ЭДС.

ГКР-СЕНСОРНЫЕ СИСТЕМЫ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ НИЗКО- И ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ МАРКЕРОВ НЕЙРОМЕДИАТОРНОГО ОБМЕНА

Яренков Н.Р., Стапран А.Р., Крылов М.О., Капитанова О.О., Веселова И.А.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы 1,
e-mail: kit-yar@mail.ru*

Общая численность больных, страдающих болезнью Альцгеймера (БА), в России составляет около 1,8 млн человек. Как правило, более 90% случаев заболевания не диагностируются, поскольку существующие психологические тесты не применимы для постановки достоверного диагноза на ранних стадиях, когда лечение наиболее результативно.

БА представляет собой сложный комплекс патогенных процессов, наиболее характерным признаком которого является образование в тканях мозга олигомерных форм пептида, β -амилоида. Кроме того, ключевыми маркерами нейромедиаторного обмена служат катехоламины (КА). Нейродегенеративные заболевания сопровождаются гибелью нервных клеток и уменьшением содержания КА в организме соответственно.

В настоящее время предложено достаточно большое число сенсорных систем для определения КА в различных биообъектах. Основными их ограничениями являются относительно низкие чувствительность, воспроизводимость, а также селективность как по отношению к родственным соединениям и/или матрице исследуемых образцов.

В связи с этим целью работы является разработка высокочувствительных сенсорных систем на основе метода гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) для определения β -амилоида, а также катехоламинов.

В ходе работы была предложена индикаторная система для определения КА на основе комплекса с ионами меди(II) и 4-аминоантипирином. Данный подход позволил достичь пределов обнаружения порядка единиц нМ. ГКР-сенсорная система была апробирована в анализе плазме крови человека, в которой удалось обнаружить КА на уровне наномолярных содержаний.

Также была разработана индикаторная система для селективного определения агрегатных форм β -амилоида на основе двух типов сенсорных поверхностей, которые были получены путем внедрения наночастиц серебра в полимерную хитозановую пленку и методом лазерно-индуцированного осаждения из бензоата серебра. Данные поверхности позволили достичь пределов обнаружения 1,5 нМ и 1,5 пМ соответственно. При проведении анализа агрегатных форм пептида в плазме крови человека точность определения составила 98%.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ 20-13-00330.

Рентгеновский дифрактометр

POWDIX 600

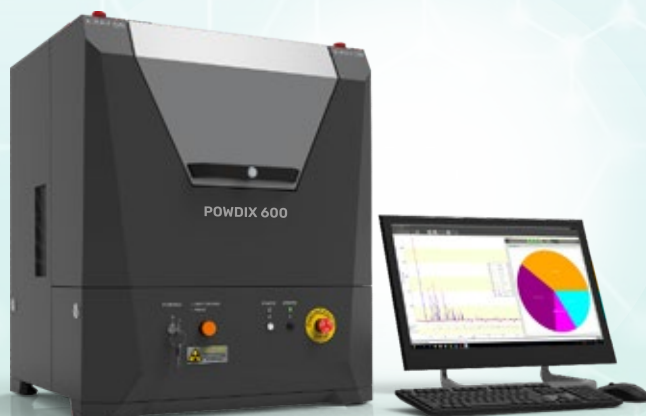


Спектрометр электронного парамагнитного резонанса

CMS8400 NEO

КЛЮЧЕВЫЕ ОСОБЕННОСТИ

- Вертикальный гониометр геометрии Theta-Theta
- Высокая точность и надежность
- Экспресс-измерения
- Автоматический качественный и количественный анализ
- Широкий ассортимент аксессуаров
- Внесен в Госреестр СИ РФ



КОМПЛЕКСНЫЕ РЕШЕНИЯ

- Температурные исследования в диапазоне -170°C - $+550^{\circ}\text{C}$
- Кинетика химических реакций - проточная система для жидких образцов
- Электрохимия
- Фотоиндуцированные реакции
- Анизотропные свойства кристаллов

ВОЗМОЖНЫЕ ПРИМЕНЕНИЯ

- Свободные радикалы
- Антиоксиданты
- Фотохимия радикалов
- Комплексы переходных металлов
- Наноматериалы
- Спиновые ловушки и пр.



- Поставка аналитического оборудования
- Разработка ПО
- Реализация кастомизированных решений
- Монтаж/инсталляция
- Обучение пользователей
- Сервисное обслуживание

ООО «АДАНИ РУС»
190005, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Набережная
Обводного канала 118А, литер Х, помещение 7-Н, офис 7
+7 (812) 389-23-88



АКСЕЛЬФАРМ

ООО «Аксельфарм» – динамично развивающаяся компания с полным спектром услуг по дистрибуции лекарственных препаратов, медицинских изделий, БАДов, а также продукции косметологического назначения.

Компания реализует свою деятельность в партнерстве с ведущими отечественными производителями, планомерно расширяя продуктовый портфель как в части различных терапевтических направлений, так и в части разнообразия лекарственных форм, а также дозировок выпускаемых продуктов.

- Логистическая сеть компании выстроена с помощью региональных субдистрибьюторов и охватывает всю территорию Российской Федерации.
- Для формирования устойчивого спроса и эффективного продвижения производимой партнерами продукции сформирована профессиональная команда продвижения.

www.axelpharm.ru

info@axelpharm.ru





ФОРМИРУЯ НОВУЮ ЭТИКУ ПРОГРЕССА

Экологические проблемы планеты становятся все более значимыми и тревожащими, поэтому инновации, которые помогли бы эти проблемы решить, не просто привлекают интерес, а приобретают поистине глобальную актуальность. Сохранение окружающей среды и природных ресурсов для будущих поколений – суть новой этики прогресса.

ПРОГРЕСС, БЕЗОПАСНЫЙ ДЛЯ ПРИРОДЫ

Компания «ФосАгро» – лидер российской химической промышленности выступила с инициативой создания фонда для финансовой и научной поддержки перспективных ученых-химиков, в сферу интересов которых попадают охрана окружающей среды, здравоохранение, продовольствие, повышение энергоэффективности и рациональное использование природных ресурсов.

В 2013 году между ЮНЕСКО, Международным союзом теоретической и прикладной химии (IUPAC) и компанией «ФосАгро» было подписано соглашение о партнерстве в создании программы грантов для ученых, занимающихся так называемой «зеленой химией». Предметом этого направления в науке является создание производственных технологий и материалов, безопасных для природы и человека.

Так родился проект «Зеленая химия для жизни», помогающий талантливой молодежи не только материальными средствами для

продолжения исследовательской работы и реализации проектов, но и плодотворным общением со старшими коллегами – видными современными химиками, и организацией информационного обмена в научной среде. Это первый проект в истории ЮНЕСКО и ООН, реализуемый за счет средств российского бизнеса. ФосАгро выделила более \$2,5 млн на развитие и реализацию проекта.

ТРИНАДЦАТЬ МУДРЕЦОВ

Отбор заявок на участие в проекте – обязанность компетентного жюри, в которое входят 13 ученых из 11 стран. Проект-победитель должен соответствовать нескольким критериям. Оцениваются его научная новизна, глобальная и локальная значимость, соответствие принципам «зеленой химии», компетентность молодого ученого и его команды, оснащенность института и лабораторий, в которых предполагается вести проект. Качество работ очень высокое, и членам жюри приходится порой вступать в длительные диспуты по той или иной кандидатуре.

НАУЧНЫЙ ПОИСК БЕЗ ГРАНИЦ

В 2016 году был учрежден специальный грант за исследования в области применения фосфогипса. В 2019 году в штаб-квартире ЮНЕСКО в Париже в рамках открытия Года Периодической таблицы химических элементов было принято решение продлить грантовую программу «Зеленая химия для жизни».

Проблемы экологического характера, к сожалению, есть во всем мире, и во всем мире есть ученые, которые предлагают решения для многих из этих проблем методами и технологиями «зеленой химии». Это наглядно демонстрирует география проекта «Зеленая химия для жизни». За время реализации программы на рассмотрение жюри поступило более 1000 заявок, 55 грантов было присуждено молодым ученым из 33 стран. Самый главный результат грантовой программы – практическое применение разработок молодых исследователей.



ЖИЗНЬ ПОСЛЕ ГРАНТА

Дважды за первые 10 лет существования проекта победителями конкурса становились ученые из России. Одна из них – Галина Калашникова, заведующая лабораторией синтеза и исследования минералоподобных функциональных материалов Центра наноматериаловедения ФИЦ КНЦ РАН. В 2019 году грант «Зеленая химия для жизни» был присужден проекту «Разработка универсального и экологичного метода гранулирования синтетических титаносиликатных материалов (сорбентов, катализаторов, регенерируемых матриц), полученных на основе отходов региональных горно-обогатительных и металлургических производств».

Галина Калашникова:

– В рамках проекта удалось опробовать 5 разных методов грануляции для новых материалов с широким функционалом свойств (сорбенты, катализаторы для органического синтеза, керамические матрицы), которые мы синтезируем именно в нашей лаборатории. Мы смогли выбрать наиболее подходящий метод получения гранул для каждого из них, а также приоритетные нетоксичные связующие. Полученные гранулы были опробованы в качестве сорбентов для очистки жидких радиоактивных отходов от радиоизотопов 137-цезия и 90-стронция совместно с лабораторией хроматографии радиоактивных элементов и станцией переработки радиоактивных отходов Института физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина РАН.

Работа по проекту продолжается, несмотря на окончание действия гранта. Все полученные средства были потрачены только на выполнение основной задачи, благодаря чему мы приобрели необходимое оборудование, получили хороший опыт в работе с зарубежными коллегами и выстроили приоритетные направления дальнейшей совместной работы со многими научно-исследовательскими организациями.

Хочется пожелать организаторам конкурса еще больше новых проектов, которые были бы направлены на самые острые вопросы взаимосвязи экологии и современной промышленности.





Поставка оборудования:

- Для исследования свойств порошков и пористых структур
- Для элементного и изотопного анализа
- Для исследований методами молекулярной спектроскопии
- Дополнительного оборудования для пробоподготовки, комплектующих и аксессуаров

Демо-лаборатория

Лаборатория в Москве, в которой на постоянной основе ведутся работы по решению различных аналитических задач.

Обслуживание

Специалисты оказывают техническую и методическую поддержку, выполняют инженеринговые работы.

Химическая промышленность



Атомная промышленность



Нефтехимия и нефтепереработка



Геология и геохимия



Металлургия



119071, Москва, Ленинский пр. 19, стр.1, +7 495 256-24-84, info@lab-test.ru, www.lab-test.ru

ООО «ФИЗЛАБПРИБОР»

ИНН 7726611884

117587, г. Москва

Варшавское ш., д. 125Ж, корп. 5 (а/я 108)

Тел. +7 495 9 888 725

Поставщик оборудования и расходных материалов

- Аналитика
- Очистка биомолекул
- Разделение полимеров
- Реактивы



ФЛП
ФизЛабПрибор





РУСАТОМ
МЕТАЛЛТЕХ
РОСАТОМ

ООО «Русатом МеталлТех»
Москва, Каширское ш. 3, корп. 2, стр. 9
+7 (499) 949-41-10
metaltech@rosatom.ru
www.rusmetaltech.tvel.ru

ООО «Русатом МеталлТех»

Электролитический кальций – лучший продукт для черной и цветной металлургии.

Продукт является эталоном качества не только на российском, но и на международных рынках.

Продуктовая линейка

- Металлический кальций и сплавы
- Кальциевая инъекционная проволока
- Порошковая проволока

> 9000

ТОНН

кальциевой продукции
реализуется ежегодно

Раскрываем потенциал друг друга, **чтобы делать мир лучше**

СИБУР — это крупнейшая интегрированная нефтегазохимическая компания России и одна из наиболее динамично развивающихся компаний глобальной нефтегазохимии



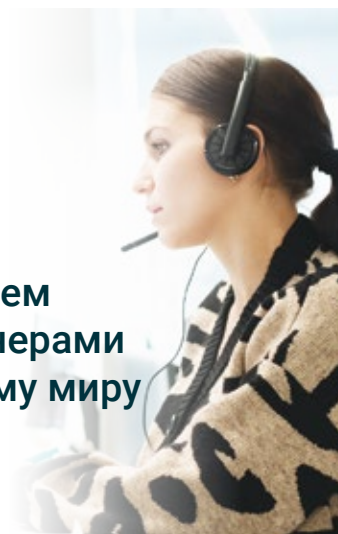
www.sibur.ru



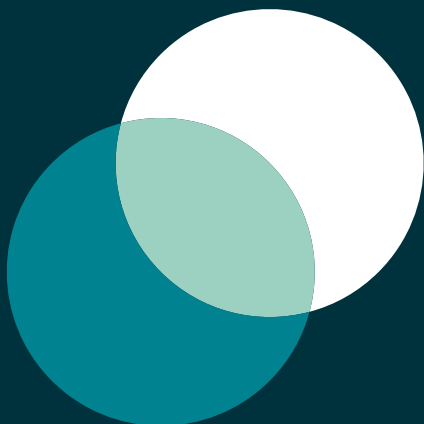
Производитель полимеров № 1 в России



Работаем с партнерами по всему миру



Держим курс на устойчивое развитие



НАДЕЖНАЯ МЕБЕЛЬ ДЛЯ ВАШЕЙ ЛАБОРАТОРИИ
ОТ ПРОИЗВОДИТЕЛЯ

manager@laboratoroff.ru
+7 (473) 229 37 73
www.laboratoroff.ru

В ассортименте
лабораторная мебель
из полипропилена



ПРОИЗВОДСТВО И ПОСТАВКА ПРИБОРОВ
ДЛЯ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

20 лет
НА РЫНКЕ НАУЧНОГО
ОБОРУДОВАНИЯ

Российская научно-производственная компания SmartStat специализируется на разработке, серийном производстве и поставке современного научного оборудования для электрохимии.

Собственное производство
в Московской области

Отлаженная поставка и
обслуживание продукции

Быстрая доставка из наличия
по всей России

Максимальная ориентированность
на клиента

Профессионализм и
собственные компетенции

Высочайший уровень продукции



Научное издание

XXII МЕНДЕЛЕЕВСКИЙ СЪЕЗД ПО ОБЩЕЙ И ПРИКЛАДНОЙ ХИМИИ

*посвящённый
190-летию Д.И. Менделеева
и 300-летию основания Российской академии наук*

СБОРНИК ТЕЗИСОВ ДОКЛАДОВ

Издано в авторской редакции и корректуре.

Формат 60x90/16. Бумага офсетная.
Тираж 16 экз. Заказ № 1742.
Подписано в печать 6.10.2024 г.

Отпечатано в ООО "Адмирал Принт"
121309, город Москва, улица Баркляя, 13, стр.1



7 — 12.10.2024

Федеральная территория «Сириус»