

• ISSN 2072-8158 •



# ХИМИЯ И ЭКОЛОГИЯ

НАУЧНО – ПРАКТИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

№11, 2023



г. Москва



Всероссийский научно–практический журнал «Вода: Химия и Экология» публикует оригинальные научные статьи и обзоры теоретического и практического характера, посвященные:

- ✓ органической химии;
- ✓ биоорганической химии;
- ✓ неорганической химии;
- ✓ процессов химической, мембранной технологии
- ✓ экологии;
- ✓ гидробиологии;
- ✓ исследованию новых перспективных материалов для химической и микробиологической очистки воды;
- ✓ технологическим инновациям в сфере промышленной и бытовой очистки вод;
- ✓ исследованиям в области гидробиологии;
- ✓ мониторингу водных объектов, экономике водной отрасли;
- ✓ обзору передовых российских и зарубежных разработок, существующих патентов и нормативной документации;
- ✓ чрезвычайным экологическим ситуациям;
- ✓ совершенствованию и разработке аналитических приборов;
- ✓ методическому и математическому обеспечению образования в области химии и экологии воды;

Миссия журнала: развитие фундаментальных и прикладных исследований в области химических, биологических наук и экологии, а также распространение оригинальных исследований в этих областях наук.

К публикации принимаются оригинальные исследования российских и зарубежных ученых, преподавателей, научных работников, аспирантов высших учебных заведений и научных организаций Российской Федерации, стран СНГ и дальнего зарубежья, ранее не опубликованные.

Настоящее издание включено в Перечень ведущих научных изданий, реферируемых Высшей аттестационной комиссией при Министерстве науки и высшего образования Российской Федерации.

Согласно паспорту Высшей аттестационной комиссии (ВАК) при Министерстве науки и высшего образования Российской Федерации, журнал рекомендован для публикации результатов научных исследований, выполняющихся в рамках подготовки диссертационных работ по следующим специальностям:

- |                                                    |                                                                         |
|----------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------|
| ✓ 1.4.3. Органическая химия (химические науки),    | ✓ 2.6.13. Процессы и аппараты химических технологий (химические науки), |
| ✓ 1.4.9. Биоорганическая химия (химические науки), | ✓ 2.6.15. Мембраны и мембранная технология (химические науки)           |

Редакция журнала ВОДА: ХИМИЯ И ЭКОЛОГИЯ в том числе принимает оригинальные научные труды, касающиеся сферы биологических наук и экологии.

**Язык:** Русский, английский **Количество статей в журнале:** до 15.

**Количество выпусков в год:** 12, Журналу присвоен ISSN, 2072–8158

**Регистрация СМИ:** серия ПИ № ФС 77 – 31640 10.04.2008

**Ссылка РИНЦ –** [https://www.elibrary.ru/title\\_about.asp?id=28251](https://www.elibrary.ru/title_about.asp?id=28251)

Журнал печатается в г. Москве

**Учредитель журнала:** Мельников Игорь Олегович, кандидат химических наук

**Адрес:** 127473, Москва г., 3–й Самотечный пер., д. 23, кв. 48, **E-mail:** VAK-info@yandex.ru

**Типография и издательство:** Общество с ограниченной ответственностью "Издательство "Манускрипт" (ОГРН 1226100004679)

## ГЛАВНЫЙ РЕДАКТОР:

**Каленский Александр Васильевич:** Доктор физико–математических наук, профессор, заведующий кафедрой химии твердого тела и химического материаловедения, чл корр РАН, один из ведущих преподавателей КемГУ, За многолетний плодотворный труд был награжден: почетными грамотами АКО, благодарностями ГОУ ВПО КемГУ, медалью «За веру и добро»

## РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ:

**Будко Елена Вячеславовна:** Доктор фармацевтических наук, профессор, ФГБОУ ВО «Курский государственный медицинский университет»

**Гасаналиев Абдулла Магомедович:** Доктор химических наук, профессор кафедры, директор НИИ Общей и неорганической химии, заслуженный деятель науки РД и РФ, Дагестанский Государственный Педагогический Университет (Махачкала)

**Данилов–Данильян Виктор Иванович:** Доктор экономических наук, Российский учёный, экономист, эколог, гидролог, член–корреспондент РАН. Специалист в области экономики природопользования, экономико–математического моделирования, теории устойчивого развития, Институт водных проблем РАН (Москва)

**Евжанов Ходжанепес:** Доктор технических наук, профессор, профессор кафедры общей химии, Международный университет нефти и газа имени Ягшыгелди Какаева. Лауреат государственной премии Туркменистана в области науки и техники

**Еременко Игорь Леонидович:** Советский и Российский химик, доктор химических наук член–корреспондент РАН с 1997 года, академик РАН с 2006 года, лауреат Государственной премии Российской Федерации, институт общей и неорганической химии им. н.с. курнакова РАН (Москва)

**Койфман Оскар Иосифович,** Доктор химических наук, Российский химик, специалист в области синтеза, изучения физико–химических свойств и практического использования порфиринов, металлопорфиринов, их структурных аналогов и жидкокристаллических соединений, ректор Ивановского государственного химико–технологического университета, Ивановский государственный химико–технологический университет (Иваново)

**Колесников Владимир Александрович:** Доктор технических наук, Российский учёный в области промышленной электрохимии, безопасности и ресурсосбережения применительно к процессам обработки современных материалов, создания экологически безопасных, ресурсосберегающих процессов в гальванотехнике, переработке жидких техногенных отходов и водообработке, Российский химико–технологический университет им. Д.И. Менделеева (Москва)

**Кузнецов Максим Валерьевич:** Доктор химических наук, главный научный сотрудник Федеральное государственное бюджетное учреждение "Всероссийский научно-исследовательский институт по проблемам гражданской обороны и чрезвычайных ситуаций МЧС России"

**Кузьмина Лариса Владимировна:** Доктор физико-математических наук, Профессор кафедры химии твердого тела и химического материаловедения Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Кемеровский государственный университет»

**Леонов Валерий Евгеньевич:** Доктор технических наук, профессор, действительный член международной академии «Экоэнергетика», Херсонская государственная морская академия

**Мурадов Шухрат Одилович:** Доктор технических наук, профессор, член межвузовского координационного совета при МГУ им. Ломоносова, Каршинский инженерно-экономический институт (Узбекистан), профессор

**Мухамбетжанов Салтанбек Талапеденович:** доктор физико - математических наук, член - корр. Международной Инженерной Академии, Казахский национальный университет имени аль - Фараби, профессор кафедры вычислительной науки и статистики

**Мухин Виктор Михайлович:** Доктор технических наук, профессор по специальности «Экология», лауреат премии Правительства Российской Федерации в области науки и техники, заслуженный изобретатель РФ, Почетный эколог (МЕЖДУНАРОДНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК ЭКОЛОГИИ, БЕЗОПАСНОСТИ ЧЕЛОВЕКА И ПРИРОДЫ), Почетный профессор Санкт–Петербургского государственного технологического института (технического университета), начальник лаборатории активных углей, эластичных сорбентов и катализаторов АО «Электростальское НПО «Неорганика» Ростеха (Москва)

**Пчелинцева Нина Васильевна:** Доктор химических наук, доцент, ФГБОУ ВО Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г.Чернышевского, профессор кафедры органической и биоорганической химии Института химии СГУ (Саратов)

**Фролкова Алла Константиновна:** Советский и российский химик, доктор технических наук, МИРЭА–Российский технологический университет (Москва)

**Федосов Сергей Викторович:** Доктор технических наук, Заслуженный деятель науки РФ, Лауреат премии Правительства РФ в области науки и техники, Национальный Исследовательский Московский Государственный Строительный Университет, профессор, академик РААСН (Москва)

**Хацаева Раиса Мусаевна:** Доктор биологических наук, ведущий научный сотрудник Института проблем экологии и эволюции им. А.Н. Северцова РАН, зав. кабинетом электронной микроскопии (Москва)

## EDITOR-IN-CHIEF:

*Kalensky Alexander Vasilyevich, Doctor of Physico–Mathematical Sciences, Professor, Head of the Department of Solid State Chemistry and Chemical Materials Science, Corresponding Member of the Russian Academy of Sciences, one of the leading teachers of KemSU, for many years of fruitful work was awarded: honorary diplomas of the AKO, commendations of the State Educational Institution of KemSU, the medal «For Faith and Kindness»*

## EDITORIAL BOARD:

*Budko Elena Vyacheslavovna: Kursk State Medical University, Doctor of Pharmaceutical Sciences, Professor*

*Abdulla Magomedovich Hasanaliyev: Doctor of Chemical Sciences, Professor of the Department, Director of the Research Institute of General and Inorganic Chemistry, Honored Scientist of the Republic of Dagestan and the Russian Federation, Dagestan State Pedagogical University (Makhachkala)*

*Danilov–Danilyan Viktor Ivanovich: Doctor of Economics, Russian scientist, economist, ecologist, hydrologist, corresponding Member of the Russian Academy of Sciences. Specialist in the field of environmental economics, economic and mathematical modeling, theory of Sustainable Development, Institute of Water Problems of the Russian Academy of Sciences (Moscow)*

*Evzhanov Khojanepes: Doctor of Technical Sciences, Professor, Professor of the Department of General Chemistry, Yagshygeldi Kakaev International University of Oil and Gas. Laureate of the State Prize of Turkmenistan in the field of science and technology*

*Eremenko Igor Leonidovich: Soviet and Russian chemist, Doctor of Chemical Sciences Corresponding Member of the Russian Academy of Sciences since 1997, Academician of the Russian Academy of Sciences since 2006, laureate of the State Prize of the Russian Federation, N.S. Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry of the Russian Academy of Sciences (Moscow)*

*Koifman Oskar Iosifovich, Doctor of Chemical Sciences, Russian chemist, specialist in the field of synthesis, study of physico–chemical properties and practical use of porphyrins, metalloporphyrins, their structural analogues and liquid crystal compounds, Rector of Ivanovo State University of Chemical Technology, Ivanovo State University of Chemical Technology (Ivanovo)*

*Kolesnikov Vladimir Aleksandrovich: Doctor of Technical Sciences, Russian scientist in the field of industrial electrochemistry, safety and resource conservation in relation to the processes of processing modern materials, creating environmentally safe, resource–saving processes in electroplating, processing of liquid technogenic waste and water treatment, D.I. Mendeleev Russian University of Chemical Technology (Moscow)*

**Kuznetsov Maxim Valerievich:** Doctor of Chemical Sciences, Chief Researcher, Federal State Budgetary Institution "All-Russian Research Institute for Civil Defense and Emergency Situations of the Ministry of Emergency Situations of Russia"

**Kuzmina Larisa Vladimirovna:** Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Department of Solid State Chemistry and Chemical Materials Science Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education "Kemerovo State University"

**Leonov Valery Evgenievich:** Doctor of Technical Sciences, Professor, full member of the International Academy "Ecoenergetics", Kherson State Maritime Academy

**Muradov Shukhrat Odilovich:** Doctor of Technical Sciences, Professor, member of the Interuniversity Coordinating Council at Lomonosov Moscow State University, Karshi Institute of Engineering and Economics (Uzbekistan), Professor

**Mukhambetzhanov Saltanbek Talapedenovich:** Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Corresponding member. International Engineering Academy, Al-Farabi Kazakh National University, Professor of the Department of Computational Science and Statistics

**Mukhin Viktor Mikhailovich:** Doctor of Technical Sciences, Professor in the specialty "Ecology", laureate of the prize of the Government of the Russian Federation in the field of science and technology, Honored Inventor of the Russian Federation, Honorary Ecologist (INTERNATIONAL ACADEMY of Sciences of Ecology, Human Safety AND NATURE), Honorary Professor of the St. Petersburg State Technological Institute (Technical University), Head of the Laboratory of Active coals, elastic sorbents and catalysts of Neorganika Rostec Moscow)

**Pchelintseva Nina Vasilyevna:** Doctor of Chemical Sciences, Professor of the Department of Organic and Bioorganic Chemistry, Associate Professor, Saratov National Research State University named after N.G.Chernyshevsky (Saratov)

**Frolkova Alla Konstantinovna:** Soviet and Russian chemist, Doctor of Technical Sciences, MIREA–Russian Technological University (Moscow)

**Fedosov Sergey Viktorovich:** Doctor of Technical Sciences, Honored Scientist of the Russian Federation, Laureate of the Russian Government Prize in Science and Technology, National Research Moscow State University of Civil Engineering, Professor, Academician of the Russian Academy of Sciences (Moscow)

**Khatsaeva Raisa Musaevna:** Doctor of Biological Sciences, Leading Researcher at the Severtsov Institute of Ecology and Evolution of the Russian Academy of Sciences, Head. the electron microscopy room (Moscow)

# СОДЕРЖАНИЕ НОМЕРА

## ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ (ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ)

**Ибрагимов Юсуп Муслимович, Валеев Сергей Ильдусович, Тарамов Юсуп Хатабович.**

ВИРТУАЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР В ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ 12

**Латышова Снежана Евгеньевна, Панов Александр Олегович, Танкабеян Назели Арсеновна, Дзюин Никита Ильич.**

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДИОКСИДА УГЛЕРОДА НА СТАДИИ НЕЙТРАЛИЗАЦИИ МЕТИОНАТА ЩЕЛОЧНОГО МЕТАЛЛА В ПРОИЗВОДСТВЕ D, L - МЕТИОНИНА 20

## ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ (ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ)

**Зубрилов Сергей Павлович, Растрыгин Николай Васильевич, Витязева Ольга Владимировна.**

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ЛАЗЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ОЧИСТКИ СТОЧНЫХ ВОД ОТ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ 28

## БИООРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ (ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ)

**Власова Алена Юрьевна, Чупаев Андрей Викторович, Савдур Светлана Николаевна.**

ГИБРИДНАЯ ВОДОПОДГОТОВИТЕЛЬНАЯ УСТАНОВКА ТЕПЛОВОЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СТАНЦИИ С МИНИМАЛЬНЫМ СБРОСОМ СТОЧНЫХ ВОД 36

## БИОТЕХНОЛОГИЯ

**Белоусова Татьяна Сергеевна.**

ВЛИЯНИЕ НЕГАТИВНЫХ ФАКТОРОВ НА РАБОТУ БИОСЕНСОРОВ, ОСНОВАННЫХ НА МИКРООРГАНИЗМАХ АКТИВНОГО ИЛА 42

**Белоусова Юлия Олеговна, Ларин Сергей Иванович, Шуплецова Полина Алексеевна, Ларина Наталья Сергеевна.**

ДИНАМИКА ИЗМЕНЕНИЯ ГИДРОХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ВОД РЕКИ БАРСУК ПОД ВЛИЯНИЕМ ПРИРОДНЫХ И АНТРОПОГЕННЫХ ФАКТОРОВ 48

## ПРОЦЕССЫ И АППАРАТЫ ХИМИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ (ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ)

**Вершинина Анна Игоревна, Звиденцова Надежда Семеновна, Гордая Олеся Руслановна, Шандаков Сергей Дмитриевич.**

СЕТЧАТЫЕ СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК КАК МАТЕРИАЛ ДЛЯ ФИЛЬТРАЦИИ 56

<p><b>Зайтов Руслан Ильдарович, Дукаев Магомед Ширваниевич, Умархаджиев Магомед-Хабиб Русланович.</b>                  РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ И ОПТИМИЗАЦИИ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА</p>	63
<p><b>Иванов Захар Александрович, Байдунов Богдан Андреевич, Васюк Александра Евгеньевна.</b>                  РАССЛОЕНИЕ TETRA-PAK ХИМИЧЕСКИМ МЕТОДОМ</p>	71
<b>ЭКОЛОГИЯ</b>	
<p><b>Газетдинов Ришат Ринатович, Абдулгафарова Гульназ Халиловна.</b>                  ОЦЕНКА ЭКОЛОГИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ВОДЫ РЕКИ ЗИЛЬДЯР РЕСПУБЛИКИ БАШКОРТОСТАН</p>	81
<p><b>Валеев Сергей Ильдусович, Старовойтова Евгения Валерьевна, Сулумханова Хава Леидовна.</b>                  НОВЫЕ МЕТОДЫ АНАЛИЗА ЗАГРЯЗНЕНИЙ В ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЕ: СОВРЕМЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ И ОБОРУДОВАНИЕ</p>	84



# CONTENTS

## ORGANIC CHEMISTRY (CHEMICAL SCIENCES)

Ibragimov Yusup Muslimovich, Valeev Sergey Ildusovich, Taramov Yusup Khatabovich.

VIRTUAL MODELING OF MOLECULAR STRUCTURES IN ORGANIC CHEMISTRY 12

Latyshova Snezhana Evgenyevna, Panov Alexander Olegovich, Tankabekyan Nazeli Arsenovna, Dzuin Nikita Ilyich.

THE USE OF CARBON DIOXIDE AT THE METHIONINE METAL NEUTRALIZATION STATION IN THE PRODUCTION OF D, L - METHIONINE 20

## PHYSICAL CHEMISTRY (CHEMICAL SCIENCES)

Zubrilov Sergey Pavlovich, Rastrygin Nikolai Vasilyevich, Vityazeva Olga Vladimirovna.

PHYSICO-CHEMICAL ASPECTS OF LASER TECHNOLOGIES FOR WASTEWATER TREATMENT FROM HEAVY METALS 28

## BIOORGANIC CHEMISTRY (CHEMICAL SCIENCES)

Vlasova Alyona Yuryevna, Chupaev Andrey Viktorovich, Savdur Svetlana Nikolaevna. HYBRID WATER TREATMENT PLANT OF A THERMAL POWER PLANT WITH MINIMAL WASTEWATER DISCHARGE 36

## BIOTECHNOLOGY

Belousova Tatyana Sergeevna.

THE INFLUENCE OF NEGATIVE FACTORS ON THE WORK OF BIOSENSORS BASED ON MICROORGANISMS OF ACTIVATED SLUDGE 42

Belousova Yulia Olegovna, Larin Sergey Ivanovich, Shupletsova Polina Alekseevna, Larina Natalia Sergeevna.

DYNAMICS OF CHANGES IN THE HYDROCHEMICAL COMPOSITION OF THE WATERS OF THE BADGER RIVER UNDER THE INFLUENCE OF NATURAL AND ANTHROPOGENIC FACTORS 48

## PROCESSES AND DEVICES OF CHEMICAL TECHNOLOGIES (CHEMICAL SCIENCES)

Vershinina Anna Igorevna, Zvidentsova Nadezhda Semyonovna, Proud Olesya Ruslanovna, Shandakov Sergey Dmitrievich.

MESH STRUCTURES BASED ON CARBON NANOTUBES AS A FILTRATION MATERIAL 56

Zaitov Ruslan Ildarovich, Dukaev Magomed Shirvanievich, Umarchadzhiev Magomed-Khabib Ruslanovich.

DEVELOPMENT OF MACHINE LEARNING METHODS FOR PREDICTING CHEMICAL REACTIONS AND OPTIMIZING SYNTHESIS CONDITIONS 63

Ivanov Zakhar Alexandrovich, Baidurov Bogdan Andreevich, Vasyuk Alexandra Evgenyevna.  
STRATIFICATION BY TETRA-PAKCHEMICAL METHOD 71

ECOLOGY

Gazetdinov Rishat Rinatovich, Abdulgafarova Gulnaz Khalilovna.  
ASSESSMENT OF ENVIRONMENTAL INDICATORS OF THE WATER OF THE ZILDYAR RIVER OF THE REPUBLIC OF BASHKORTOSTAN 81

Valeev Sergey Ildusovich, Starovoitova Evgeniya Valeryevna, Sulumkhanova Khava Leidovna.  
NEW METHODS OF ENVIRONMENTAL POLLUTION ANALYSIS: MODERN TECHNOLOGIES AND EQUIPMENT 84

# ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ (ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ)

---

УДК 544.04

## ВИРТУАЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР В ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Ибрагимов Юсуп Муслимович,  
Валеев Сергей Ильдусович,  
Тарамов Юсуп Хатабович,

*В данной статье представлен обзор современных методов виртуального моделирования, таких как квантово-химические методы, молекулярная динамика и докинг, и их приложение в различных аспектах органической химии. Рассмотрены применение виртуального моделирования для дизайна новых молекул, изучения реакционных механизмов и прогнозирования свойств материалов. Освещены перспективы использования методов машинного обучения и системной интеграции для улучшения точности прогнозов. В заключении подчеркнута важность виртуального моделирования как инструмента, способствующего инновациям в органической химии и обеспечивающего основу для будущего развития науки и технологии.*

**Ключевые слова:** виртуальное моделирование, молекулярные структуры, органическая химия, квантово-химические методы, молекулярная динамика.

**Введение.** С внедрением современных технологий в органическую химию, виртуальное моделирование молекулярных структур стало ключевым инструментом для исследования и понимания многочисленных аспектов химических процессов. Этот метод предоставляет исследователям уникальную возможность виртуально исследовать свойства и поведение органических соединений без необходимости проведения физических экспериментов, что также связано с сокращением финансовых издержек и отсутствием необходимости содержать огромное количество ученых для экспериментальных изысканий. В данной работе, поэтому, представлен обзор современных методов виртуального моделирования молекулярных структур в органической химии, а также проанализируем их важность и перспективы для дальнейших научных исследований [2, с. 164].

Сложность молекулярных систем и их воздействие на различные аспекты нашей жизни, начиная от разработки новых материалов до создания эффективных лекарств, делают виртуальное моделирование неотъемлемой частью современной химической науки. Этот метод не только сэкономил время и ресурсы, но также предоставил ученым уникальные инсайты в мир молекулярной структуры и взаимодействия.

Мы рассмотрим основные методы виртуального моделирования, их применение в органической химии, а также перспективы, которые они открывают для наших возможностей в понимании и управлении химическими процессами на молекулярном уровне.

Итак, в сфере органической химии виртуальное моделирование молекулярных структур обеспечивает множество подходов, позволяющих более глубоко понять и предсказать химические свойства соединений без необходимости проведения физических экспериментов.

### *Квантово-химические методы.*

1. Методы Хартри-Фока (Hartree-Fock) представляют собой фундаментальный класс квантово-химических методов, применяемых в виртуальном моделировании молекулярных структур. Развитие этого метода началось в середине 20 века и оставалось одним из столпов теоретической химии. Назван по именам Дугласа Хартри и Владимира Фока, эти методы базируются на принципах квантовой механики и предоставляют ценные инсайты в энергетические и электронные свойства молекул.

Основные принципы работы данного метода фокусируются вокруг следующих функций:

➤ **Электронный метод приближения:** Метод Хартри—Фока основан на приближенном подходе к решению уравнения Шрёдингера для системы электронов в молекуле. Этот метод применяет электронный метод приближения, предполагая, что волновая функция молекулы может быть представлена как антисимметричная комбинация одноэлектронных волновых функций (орбиталей).

Этот подход позволяет учесть принцип Паули, запрещающий нахождение двух электронов в одном и том же квантовом состоянии [1, с. 29].

**Молекулярные орбитали:**

Молекулярные орбитали (МО) представляют собой математические функции, описывающие распределение вероятности нахождения электронов в молекуле. Приближенная волновая функция  $\Psi$  молекулы может быть выражена через МО:

$$\Psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2 + \dots + c_n\phi_n$$

Где  $\phi_i$  - молекулярные орбитали, а  $c_i$  - коэффициенты, определяющие вклад каждой орбитали.

**Уравнение Хартри—Фока для электронов:**

Уравнение Хартри—Фока для одного электрона имеет вид:

$$\hat{H}\phi_i = \epsilon_i\phi_i$$

Где  $\hat{H}$  - оператор Гамильтона, а  $\epsilon_i$  - энергия молекулярной орбитали  $\phi_i$ .

**Коэффициенты Хартри—Фока:**

Коэффициенты  $c_i$  определяются путем минимизации энергии системы. Для этого используется итерационный процесс, в ходе которого пересчитываются молекулярные орбитали до достижения сходимости.

$$E = \sum c_i = \sum_j C_{ij}$$

Где  $C_{ij}$  - элементы матрицы коэффициентов, которые также подлежат итерационной оптимизации.

Эти математические выражения позволяют численно решать уравнения Хартри—Фока, предоставляя информацию о структуре электронных оболочек молекулы и её энергетических уровнях. Однако, в связи с приближениями, метод Хартри—Фока может давать ограниченную точность в описании корреляций между электронами, что обуславливает необходимость дополнительных усовершенствованных методов в современных теоретических подходах.

➤ **Продуктовая форма волновой функции:** В методе Хартри—Фока, волновая функция системы представляется как произведение волновых функций электронов, каждая из которых зависит только от координат соответствующего электрона. Это упрощение делает решение уравнения Шрёдингера для многоэлектронных систем более податливым к численному решению [6, с. 94].

В методе Хартри—Фока, волновая функция  $\Psi$  для системы состоит из произведения нормированных одноэлектронных волновых функций (орбиталей) для каждого электрона в молекуле. Представим  $N$  электронов в молекуле с  $N$  орбиталей, где каждая орбиталь обозначается как  $\phi_i$ , и  $i$  индекс, относящийся к конкретному электрону. Тогда, продуктовая форма волновой функции может быть записана следующим образом:

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \phi_1(r_1) \cdot \phi_2(r_2) \cdot \dots \cdot \phi_N(r_N)$$

где:

- $\Psi$  - волновая функция молекулы,
- $r_i$  - координаты  $i$ -го электрона в трехмерном пространстве,
- $\phi_i$  - одноэлектронная волновая функция (орбиталь) для  $i$ -го электрона.

Эта продуктовая форма предполагает, что волновая функция молекулы может быть представлена как произведение одноэлектронных функций. Это приближение обусловлено принципами антисимметрии Паули, которые гарантируют уникальность квантового состояния системы с несколькими электронами.

Однако, важно отметить, что при использовании метода Хартри—Фока происходит итерационная оптимизация этих орбиталей для достижения минимальной энергии системы, что обеспечивает более точное приближение реального состояния молекулы.

➤ **Итерационный процесс:** Основной характеристикой метода Хартри—Фока является итерационный процесс, в ходе которого волновая функция системы исследуется и обновляется до достижения минимума энергии. Этот подход позволяет приближенно учесть взаимодействие электронов в системе. Итерационный процесс в методе Хартри—Фока позволяет уточнять представление о волновой функции, приближая её к истинному электронному состоянию системы. Этот метод является эффективным приближенным решением уравнения Шрёдингера для системы многих взаимодействующих электронов, хотя требует некоторой вычислительной мощности для обеспечения точности результатов [9, с. 103].

Метод Хартри—Фока осуществляет итерационный процесс для нахождения приближенной волновой функции молекулы, которая минимизирует энергию системы. Этот процесс включает в себя следующие шаги:

Исходная волновая функция ( $WF_0$ ): Начальное приближение волновой функции задается на основе известных или предварительно рассчитанных значений орбиталей.

Расчет электронной энергии ( $E$ ): Используя текущую волновую функцию, производится расчет электронной энергии системы с учетом кулоновского взаимодействия между электронами и ядрами, а также кинетической энергии электронов.

$$E = T + V_{\text{нуклеус}} + V_{\text{электроны}} + J + K$$

где:

- $T$  - кинетическая энергия электронов,
- $V_{\text{нуклеус}}$  - потенциальная энергия взаимодействия электронов с ядрами,
- $V_{\text{электроны}}$  - потенциальная энергия взаимодействия электронов между собой,
- $J$  - обменная энергия, исходящая из кулоновского взаимодействия,
- $K$  - корреляционная энергия, описывающая корреляции между двумя электронами.

Решение уравнения Хартри—Фока: На основе электронной энергии проводится решение уравнения Хартри—Фока для получения новой волновой функции.

$$F^{\wedge} \psi_i = \epsilon_i \psi_i$$

где  $F^{\wedge}$  - оператор Фока,  $\psi_i$  - молекулярная орбиталь,  $\epsilon_i$  - энергия молекулярной орбитали.

Обновление волновой функции ( $WF_i$ ): Новая волновая функция получается из решения уравнения Хартри—Фока.

Повторение: Шаги 2-4 повторяются до сходимости, когда изменение энергии между итерациями становится достаточно малым.

Этот итерационный процесс позволяет системе приближенно прийти к состоянию минимальной энергии, что соответствует основному состоянию молекулы. Важной частью этого метода является взаимодействие между электронами, которое учитывается в потенциалах обмена и корреляции, делая метод Хартри—Фока пригодным для описания электронной структуры молекул [3, с. 70].

#### *Методы молекулярной динамики*

Методы молекулярной динамики (ММД) представляют собой мощный инструмент в области виртуального моделирования молекулярных систем, позволяя исследовать их динамическое поведение в течение времени. Эти методы позволяют не только анализировать структуры молекул, но и исследовать их движение и взаимодействие в реальном времени. Основные характеристики методов молекулярной динамики:

Уравнения движения – методы молекулярной динамики (ММД) основаны на численном решении уравнений движения, которые описывают поведение атомов и молекул в системе. Центральным элементом методов молекулярной динамики (ММД) является решение уравнений движения для каждого атома в системе. Эти уравнения формализуют взаимодействие атомов между собой и с окружающей средой. Представим уравнения движения для  $i$ -го атома в трехмерном пространстве:

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i$$

Где:

- $m_i$  - масса  $i$ -го атома,
- $\mathbf{r}_i$  - вектор положения  $i$ -го атома,
- $t$  - время,
- $\mathbf{F}_i$  - сила, действующая на  $i$ -й атом.

Потенциальная энергия ( $U$ ) и сила ( $\mathbf{F}_i$ ) вычисляются на основе выбранного потенциального поля. Для примера, потенциал Леннарда-Джонса часто используется для описания взаимодействия между атомами:

$$U(\mathbf{r}_{ij}) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$

Где:

- $r_{ij}$  - вектор между  $i$ -м и  $j$ -м атомами,
- $\epsilon$  и  $\sigma$  - параметры потенциала Леннарда-Джонса.

Сила вычисляется как отрицательный градиент потенциальной энергии:

$$\mathbf{F}_i = -\nabla_i U$$

Где:

- $\nabla_i$  - градиент по отношению к координатам  $i$ -го атома.

#### Интеграция во времени:

Решение уравнений движения происходит численными методами, такими как метод Верле. Интеграция координат ( $\mathbf{r}_i$ ) и скоростей ( $\mathbf{v}_i$ ) происходит с использованием следующих формул:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_i(t+\Delta t) &= \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t + \frac{1}{2} \mathbf{a}_i(t)\Delta t^2 \\ \mathbf{v}_i(t+\Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \mathbf{a}_i(t)\Delta t \end{aligned}$$

Где:

- $\Delta t$  - временной шаг.

Эти уравнения обеспечивают численное решение движения атомов в системе в течение заданного времени, позволяя исследовать динамику молекулярных систем в различных условиях и средах [10, с. 273].

Далее идет термостатирование и баростатирование. В методах молекулярной динамики (ММД), для поддержания устойчивых условий в системе, широко применяются термостаты и баростаты. Они обеспечивают контроль над температурой и давлением в системе, что особенно важно для симуляции различных физических и химических условий.

*Термостатирование.* Термостат управляет температурой системы, взаимодействуя с частицами и обменивая с ними энергию. Одним из распространенных методов является термостат Беренсена-Терцагни, который вводит стохастическую силу в уравнение движения. Уравнение для термостата в простейшей форме записывается как:

$$m \frac{dv_i}{dt} = F_i - \zeta m v_i + 2k_B T \zeta R_i(t)$$

где:

- $m_i$  - масса частицы,
- $v_i$  - её скорость,
- $F_i$  - сила, действующая на частицу,
- $\zeta$  - параметр термостата,
- $k_B$  - постоянная Больцмана,
- $T$  - температура,
- $R_i(t)$  - случайная сила.

*Баростатирование.* Баростат позволяет поддерживать заданное давление в системе. Один из часто используемых методов - баростат Беренсена-Терцагни-Альдера, который вводит стохастическую силу и сжимает или расширяет систему. Уравнение для баростата может быть выражено как:

$$V(t) = V(0) + 3Nk_B \int_0^t \sum_i v_i \cdot F_i dt'$$

где:

- $V(t)$  - объем системы,
- $N$  - число частиц,
- $v_i$  и  $F_i$  - скорость и сила на частицу  $i$ .

Эти методы термостатирования и баростатирования обеспечивают стабильные условия в ММД-симуляциях, позволяя исследователям варьировать температуру и давление для более реалистичного моделирования химических и физических процессов. Вместе с численными методами интеграции уравнений движения, они составляют важную часть современных методов виртуального моделирования молекулярных систем.

Методы молекулярной динамики являются неоценимым инструментом для исследования конформационных изменений в биологических молекулах. В белковой химии, например, ММД позволяет виртуально отслеживать изменения структуры белков в ответ на изменения окружающей среды или взаимодействие с другими молекулами. Это особенно важно для понимания механизмов действия белков, их активности и специфичности в различных физиологических условиях [2, с. 134].

Методы ММД также активно используются для расчета термодинамических параметров, таких как энтальпия, энтропия и свободная энергия реакции. Это позволяет ученым более глубоко понимать термодинамические особенности химических процессов и предсказывать их термодинамические свойства при различных условиях.

Наконец, моделирование молекулярной динамики используется для дизайна новых материалов с определенными физическими и химическими свойствами. Это применяется в областях материаловедения, нанотехнологий и катализа для создания материалов с оптимальными характеристиками.

Компьютерное моделирование реакций – мощный инструмент в органической химии, позволяющий виртуально исследовать химические превращения, оптимизировать условия реакции и предсказывать продукты взаимодействия молекул. Этот подход играет ключевую роль в проектировании новых химических процессов и синтезе соединений с желаемыми свойствами. В рамках компьютерного моделирования реакций применяются различные методы, направленные на понимание молекулярных механизмов и оптимизацию процессов [8, с. 13].

Оптимизация условий реакции через компьютерное моделирование представляет собой ключевой аспект современных исследований в области органической химии. В этом контексте, виртуальные эксперименты позволяют ученым систематически изменять параметры реакции и оценивать их влияние на ход процесса. Оптимизация условий реакции с использованием компьютерного моделирования обеспечивает не только повышение эффективности синтеза, но также способствует экономии ресурсов и снижению воздействия на окружающую среду. Этот аспект компьютерного моделирования становится неперемлемым инструментом для современных органических химиков, стремящихся к устойчивому и интеллектуальному дизайну



химических процессов. Для компьютерного моделирования реакций и оптимизации условий реакций в органической химии используются различные программные пакеты и программы. Например, Gaussian.

Gaussian - это программный пакет для квантово-химических расчетов, который широко применяется в исследованиях органической химии, физической химии и молекулярной биологии. Эта программа предоставляет ученым возможность проводить разнообразные расчеты, такие как оптимизация геометрии молекул, расчет энергии, спектроскопические и термодинамические свойства, а также изучение реакционных механизмов. Основные этапы работы Gaussian могут быть кратко описаны следующим образом:

- пользователь определяет структуру молекулы, включая координаты атомов и начальные значения для расчетов;
- программа решает уравнение Шрёдингера для электронов в молекуле, используя различные методы квантово-химических расчетов, такие как методы Хартри—Фока или методы функционала плотности (DFT);
- Gaussian проводит оптимизацию геометрии молекулы, находя такие координаты атомов, при которых энергия молекулы минимальна;
- программа выполняет расчеты различных свойств молекулы, таких как энергии возбуждения, инфракрасные и ультрафиолетовые спектры, химические сдвиги и другие;
- результаты расчетов могут быть проанализированы для понимания электронной структуры молекулы, ее химических свойств и поведения в различных условиях.

Принципы, лежащие в основе Gaussian, включают в себя решение уравнения Шрёдингера, которое можно представить в следующей форме:

$$H^{\wedge}\Psi = E\Psi$$

где  $H^{\wedge}$  - оператор Гамильтона (оператор энергии),  $\Psi$  - волновая функция молекулы,  $E$  - энергия системы. Решение этого уравнения дает информацию об электронной структуре молекулы.

Для оптимизации геометрии, методы оптимизации, такие как градиентный спуск, используются для нахождения минимума потенциальной энергии молекулы. Это можно выразить следующим образом:

$$\nabla E = 0$$

где  $\nabla E$  - градиент энергии, равный нулю в точке минимума энергии.

Математические детали методов, используемых в Gaussian, включают различные приближения и численные методы, такие как метод конечных разностей и метод конечных элементов, которые применяются для решения уравнения Шрёдингера.

**Заключение.** Виртуальное моделирование молекулярных структур в органической химии представляет собой неотъемлемую и важную область современной науки. В ходе нашего обзора мы рассмотрели разнообразные методы, используемые для виртуального изучения молекул, и их разностороннее применение в органической химии. Одним из ключевых преимуществ виртуального моделирования является возможность более эффективного дизайна новых молекул и материалов. Ученые могут проводить виртуальные эксперименты, оптимизировать структуры и предсказывать свойства без необходимости физического синтеза. Этот подход играет важную роль в ускорении процесса разработки новых материалов с желаемыми характеристиками.

Таким образом, виртуальное моделирование молекулярных структур не только ускоряет химические исследования, но и позволяет нам лучше понять и контролировать мир вокруг нас на уровне молекул. Современные методы виртуального моделирования открывают новые перспективы для инновационных открытий в органической химии и создают прочную основу для будущего развития науки и технологии.

## БИБЛИОГРАФИЯ

1. Абрамов, П. А., & Иванов, В. В. (2018). "Виртуальное моделирование молекулярных структур в органической химии: современные подходы и применение". Журнал органической химии, 38(4), 512-525.
2. Васнецов, А. В., & Петрова, Е. Ю. (2017). "Развитие методов молекулярного моделирования в органической химии". Журнал физической химии, 47(2), 245-257.
3. Григорьев, А. М., & Смирнова, Н. Н. (2019). "Использование квантово-химических методов в органическом синтезе: перспективы и вызовы". Журнал современной химии, 29(7), 879-892.
4. Дмитриев, В. А., & Кузнецов, С. В. (2016). "Методы молекулярной динамики в органической химии: от базовых принципов к приложениям". Российский химический журнал, 66(3), 142-157.
5. Захарова, Е. Н., & Новиков, Н. В. (2017). "Интеграция методов виртуального моделирования и экспериментальных исследований в органической химии". Журнал химической теории и компьютерного моделирования, 57(9), 1853-1865.
6. Исаев, А. Б., & Попов, А. В. (2020). "Перспективы применения методов докинга в проектировании биологически активных молекул". Журнал биоорганической химии, 40(8), 1025-1037.
7. Ковалев, И. С., & Устинов, Н. А. (2018). "Моделирование электронных свойств органических соединений с использованием методов функционала плотности". Журнал физической химии, 48(5), 623-637.
8. Лебедев, А. В., & Трофимов, Б. А. (2019). "Применение методов машинного обучения в органической химии". Журнал компьютерных наук и химии, 39(6), 845-859.
9. Макаров, В. В., & Жуков, Д. А. (2017). "Влияние виртуального моделирования на современные тенденции в синтезе органических соединений". Журнал органической синтеза, 37(1), 91-105.
10. Соколов, И. В., & Козлов, Д. С. (2016). "Применение методов докинга в поиске новых лекарственных препаратов". Журнал фармацевтической химии, 46(4), 512-527.

\*\*\*\*\*

## VIRTUAL SIMULATION OF MOLECULAR STRUCTURES IN ORGANIC CHEMISTRY

Ibragimov Yu.M., Valeev S.I., Taramov Yu.Kh.

*This article provides an overview of modern virtual simulation techniques, such as quantum chemical methods, molecular dynamics and docking, and their applications in various aspects of organic chemistry. The use of virtual modeling for the design of new molecules, studying reaction mechanisms and predicting the properties of materials is considered. The prospects for using machine learning methods and system integration to improve forecast accuracy are highlighted. The conclusion highlights the importance of virtual simulation as a tool to promote innovation in organic chemistry and provide a foundation for future developments in science and technology.*

**Keywords:** *virtual modeling, molecular structures, organic chemistry, quantum chemical methods, molecular dynamics.*

## Сведения об авторах:

**Ибрагимов Юсуп Муслимович,**

к.п.н., доцент кафедры теории и технологии социальной работы,

ФГБОУ ВО «Чеченский государственный университет имени А.А. Кадырова»

г. Грозный, Российская Федерация

E-mail: [yusuf\\_ibr@mail.ru](mailto:yusuf_ibr@mail.ru)

**Валеев Сергей Ильдусович**

доцент, к.т.н.,

Казанский национальный исследовательский технологический университет

E-mail: [vsi73@mail.ru](mailto:vsi73@mail.ru)

**Тарамов Юсуп Хатабович**

Грозненский государственный нефтяной технический университет им. академика

М.Д. Миллионщикова, ассистент

E-mail: [yusup\\_taramov95@mail.ru](mailto:yusup_taramov95@mail.ru)

УДК 547.466+577.122.3

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДИОКСИДА УГЛЕРОДА НА СТАДИИ НЕЙТРАЛИЗАЦИИ МЕТИОНАТА ЩЕЛОЧНОГО МЕТАЛЛА В ПРОИЗВОДСТВЕ D, L - МЕТИОНИНА

Латышова Снежана Евгеньевна,  
Панов Александр Олегович,  
Танкабекян Назели Арсеновна,  
Дзюин Никита Ильич

В данной статье рассматривается использование и методы синтеза метионина, который является одной из незаменимых и лимитирующих аминокислот. Данная аминокислота проявляет различную биологическую активность, что приводит к широкому кругу ее использования в различных медицинских препаратах, а также как добавки при производстве современных комбикормов, поэтому основным потребителем метионина является производство премиксов и готовых кормов для животноводства и птицеводства. Анализ химических способов производства показал, что в России метионин получают через несколько стадий, последней из которых является нейтрализация соли метионина серной кислотой, что приводит к образованию большого количества сульфата щелочного металла. значительные затраты на его выделение наряду с его невысокой стоимостью, приводят к удорожанию самого метионина. Известны методы проведения нейтрализации метионата с помощью диоксида углерода, в результате чего весь процесс организуется непрерывно без образования побочных продуктов. В качестве аппарата для данной стадии предлагается использовать реактор с мешалкой импеллерного типа. Для данного аппарата были рассчитаны основные параметры: объем, поверхность теплообмена, диаметр и высота.

**Ключевые слова:** метионин, метионат, гидантоин, реактор синтеза, импеллерная мешалка, объем, диаметр, поверхность теплообмена.

Метионин - это  $\alpha$ -аминокислота, присутствующая во многих белках, и вместе с цистеином является одной из двух серосодержащих протеиногенных аминокислот, а также источником серы для многих соединений, включая цистеин. Производное S-аденозилметионина является важным донором метила, участвующим в различных биохимических процессах и в синтезе адреналина, холина и других веществ.

Метионин - одна из всего лишь двух аминокислот, кодируемых одним кодоном в стандартном генетическом коде. Как следствие, метионин включается в N-концевую позицию всех белков у эукариота и архей во время трансляции, хотя обычно он удаляется путем посттрансляционной модификации. Эта роль метионина раскрывает замечательное единство живых организмов; кроме того, точность, требуемая для функционального белка, включающая особое расположение аминокислот и специфическую трехмерную укладку белка, отражает сложную координацию в природе.

L-изомер метионина, который является единственной формой, участвующей в синтезе белка, является одной из 20 стандартных аминокислот, распространенных в белках животного происхождения и необходимых для нормального функционирования организма человека. Метионин также классифицируется как "незаменимая аминокислота", поскольку он не может быть синтезирован организмом человека из других соединений в результате химических реакций и, следовательно, должен приниматься с пищей [3].

Метионин проявляет различную биологическую активность. Так, например, это липотропное вещество, помогающее предотвратить накопление жира в печени и, как правило,

способствующее детоксикации метаболитических отходов и токсинов. Метионин используется при лечении отравления ацетаминофеном для предотвращения повреждения печени и облегчения артрита. При этом он проявляет меньше побочных эффектов, чем обычные противовоспалительные препараты, такие как ибупрофен и аспирин.

Метионин назначается чаще, чем любой другой антидепрессант, и считается эффективным, быстродействующим и с меньшим количеством побочных эффектов. Он может повышать активность ключевых химических веществ мозга, отвечающих за настроение, таких как норадреналин, дофамин и серотонин, а также улучшать связывание нейротрансмиттеров с рецепторами в головном мозге и регенерацию аксонов нейронов после травмы.

Поиск способа получения большого количества очищенного метионина для дополнения рациона возник в связи с осознанием его статуса незаменимой и лимитирующей аминокислоты. Ограничение потребления отдельных аминокислот, таких как метионин, привело к осознанию их важности в рационе человека и животных. Таким образом, первоначальная цель синтетического процесса состояла в том, чтобы обеспечить достаточное количество лимитирующей аминокислоты для медицинского лечения голодания человека.

Метильная группа метионина может быть получена из серина (или глицина) с помощью 5,10-метилентетрагидрофолата. Перенос метила из конъюгированного 5-метилтетрагидрофолата в гомоцистеин катализируется трансметилазой, для которой требуется только  $Mg^{2+}$  ионы и ортофосфат в качестве кофакторов.

В растениях и микроорганизмах метионин синтезируется путем, в котором используются обе аминокислоты - аспарагиновая кислота и цистеин. Сначала аспарагиновая кислота преобразуется с помощью  $\beta$ -аспартил-полуальдегида в гомосерин, вводя пару смежных метиленовых групп. Гомосерин превращается в О-сукцинилгомосерин, который затем вступает в реакцию с цистеином с образованием цистатионина, который расщепляется с образованием гомоцистеина. Последующее метилирование тиоловой группы фолатами приводит к образованию метионина.

Как и любая аминокислота, метионин является дорогостоящим продуктом, который в основном используется при производстве современных комбикормов для сельского хозяйства, а также в фармацевтической промышленности, поэтому основным потребителем метионина является производство премиксов и готовых кормов для животноводства, птицеводства и, совсем недавно, рыбоводства. Это связано с тем, что основой белковой части современных кормов является соевый белок, в котором не хватает серы, и для получения стабильного прироста массы необходимо добавлять в белковый концентрат метионин. Следует отметить, что метионин добавляется в состав спортивного питания, что также расширяет рынок сбыта.

Метионин получают методом химического синтеза (метод акролеина) и методом микробной ферментации.

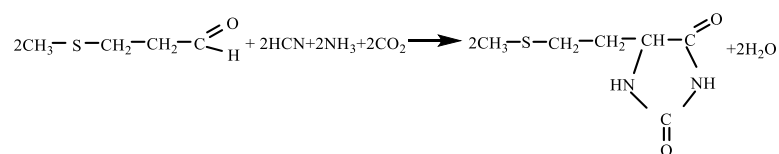
Метод микробиологической ферментации относится к получению природного метионина посредством сложных метаболитических процессов с использованием процесса жизнедеятельности микроорганизмов для получения простого источника углерода и азота. Метод микробиологической ферментации обладает преимуществами мягких условий реакции и экологичности, но его выход низок, а стоимость относительно высока.

Метод химического производства состоит из нескольких стадий, и требует больших энергетических и капитальных затрат. Однако при больших мощностях, химический синтез более выгоден, так как сырье для его получения является доступным и недорогим. Одним из таких веществ является сера, которая является основным продуктом переработки сероводорода на газоперерабатывающих заводах. Стоимость ее невелика, а предложение на рынке превышает спрос. Переработка серы, получаемой в больших количествах на нефтеперерабатывающих производствах, в метилмеркаптан – одного из исходных веществ синтеза метионина, позволяет решать проблему сбыта этого продукта.

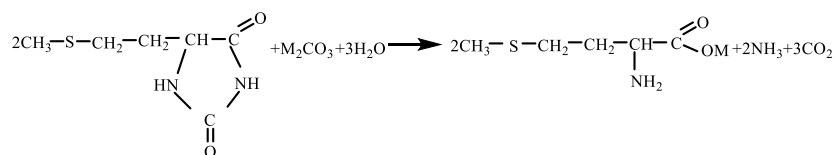
Организация процесса синтеза метионина из пропилена и метилмеркаптана дает высокий выход продукта, а также отличается развитой технологией и высокой степенью автоматизации. Промышленный синтез метионина открыл способ обойти давно сложившиеся экологические взаимозависимости путем изменения способа использования серы.

Синтез метионина из его солей щелочных металлов известен и используется в промышленности. Суть его заключается в использовании принципа вытеснения слабых кислот из их солей сильными кислотами. В качестве примера авторы патентов обрабатывают соли метионата соляной, серной, фосфорной кислотами или сильным катионообменником, получая при этом D,L-метионин. Но данные методы имеют недостатки: необходимость удаления выпадающих в процессе реакции в осадок солей щелочных металлов и невозможность регенерации используемых кислот. В связи с этим данный способ нельзя считать экономически выгодным и экологически безопасным [5, 9, 10, 12, 13,]. Компанией Evonik Degussa GmbH (Германия) был запатентован способ получения кормового метионина из водного раствора метионата калия и газообразной двуокиси углерода. Способ основывается в превращении следующих компонентов: 3- метилмеркаптопропионового альдегида, цианистого водорода, аммиака, газообразной двуокиси углерода или таких соединений, из которых можно получить указанные компоненты, в присутствии воды, в 5-(2-метилмеркаптоэтил)- гидантоин с последующим его гидролизом до целевого продукта [11]. Ниже приведены уравнения реакции для получения:

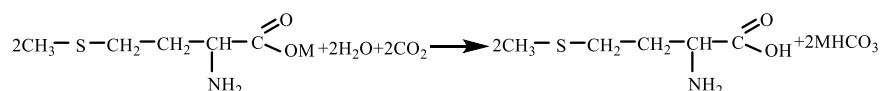
1) 5-(2- метилмеркаптоэтил)-гидантоина:



2) соли D,L-метионина:



3) D,L-метионина:

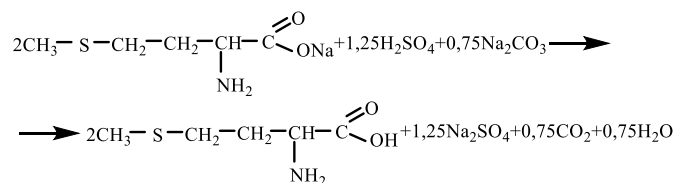


где М – ион щелочного, щелочноземельного металла или аммония. Данный процесс рекомендуется проводить непрерывно, что позволяет аммиак и двуокись углерода рециркулировать, а соединения калия (натрия) возвращать в цикл [6, 7].

Метионин местного производства российским потребителям поставляет единственный российский производитель АО «Волжский оргсинтез». Однако предприятие не обеспечивает потребности российского рынка полностью, что делает рынок метионина подверженным влиянию уровня мировых цен на метионин и мирового глобального роста спроса, по разным оценкам составляющего 5-7% в год.

АО «Волжский оргсинтез» производит порядка 25-26 тысяч тонн метионина в год, что заметно меньше потребности российского рынка в этой аминокислоте (37-40 тыс. тонн в год). Недостающее количество метионана в РФ ввозили из других стран, основными производителями которого являются Adisseo (Франция) и Evonik (Германия, Бельгия). При этом французский метионин в 2014 году завозили не только подразделение Adisseo в Москве, но и завод «ДСМ Нутришнл» (Татарстан), «Райффайзен Агро» (Ставропольский край). Из других производителей, импортировавших в РФ, можно отметить единичные поставки японского метионина производства «Сумитомо Кемикл», который пару раз через Германию завез премиксный завод «Виломикс» (Оренбург), и метионин торговой марки Merpon производства General Inc (Хорватия), ввезенный «Эвоник Химия».

Получения кормового метионина на АО «Волжский Оргсинтез» представляет собой непрерывный процесс, состоящий из нескольких производств: получение акролеина окислением пропилена, синтез метилмеркаптана и цианистого натрия; процесс образования метилтиопропионового альдегида и его дальнейшее превращение в натриевую соль метионина и ее дальнейшая нейтрализация. Гидролизные растворы нейтрализуются концентрированной серной кислотой:



Реакция проводится при температуре  $135 \pm 2$  °С и давлении 0,3-0,35 МПа. Время стадии синтеза 3-5 минут. Выход составляет 99 %. Но использование серной кислоты для выделения метионина из его соли сопровождается образованием значительного количества сульфата натрия.

Мольное соотношение метионина к сульфату натрия в получаемом растворе метионина составляет 1:1,3-1,4. Таким образом, побочного продукта образуется больше, чем основного. А значительные затраты на его выделение наряду с его невысокой стоимостью, приводят к удорожанию самого метионина. В то же время побочные продукты, такие как сульфат натрия, диоксид углерода и аммиак, могут быть переработаны. В основном сульфат натрия используют при производстве сульфатной целлюлозы, моющих средств и стекла, а также в текстильной и гальванической промышленности. Но спрос на сульфат натрия в промышленно развитых странах за последнее десятилетие снизился. В связи с этим некоторые исследователи изучают возможность использования сульфата натрия новыми способами. Например, его потенциально можно использовать в системах хранения тепла из-за его способности эффективно сохранять тепло, или его можно использовать новыми способами в строительной отрасли.

Сульфат натрия хорошо растворим в воде и вносит значительный вклад в скорость коррозии. Воздействие сульфата натрия на здоровье включает раздражение кожи и глаз, а также может оказывать долгосрочное воздействие на водную жизнь. Таким образом, удаление сульфатов из сточных вод имеет важное значение, а возможность получения коммерчески полезных продуктов будет дополнительным преимуществом.

Утилизация сточных вод, содержащих сульфат натрия, является проблемой для всей отрасли. Благодаря новым разработкам, возможно повышение цикличности использования сульфата натрия в отраслях, борющихся с выбросами.

С помощью электродиализа сточные воды, содержащие сульфат натрия, можно разделить и регенерировать гидроксид натрия и серную кислоту. В работе авторов рассматривается использование биполярного мембранного электродиализа. Однако эффективность и экологичность всего процесса зависят от нескольких факторов, включая свойства используемых ионообменных мембран, тип выходящего потока и температуру, которая влияет на вязкость и проводимость исходного сырья, а также перенапряжения.

Немаловажную роль играет осаждение сульфат-иона из сточных вод с использованием хлорида бария. Получаемый сульфат бария является коммерчески ценным продуктом, используемым в буровых растворах для нефтяных скважин, в качестве радиоконтрастного вещества, в качестве белого пигмента в лакокрасочной промышленности, в качестве наполнителя пластмасс, в качестве отбеливателя бумаги, в качестве носителя катализатора.

Однако большинство предлагаемых решений еще находятся на ранних стадиях разработки и требуют дополнительных исследований [1, 3].

Решить проблему отделения образующегося сульфата натрия позволяет способ нейтрализации соли метионина с помощью  $\text{CO}_2$ . Так, например, известен способ получения D,L-метионина из метионата щелочного металла в водном растворе путем выделения с помощью двуокси углерода в реакторе с мешалкой импеллерного типа, обеспечивающей интенсивное

перемешивание системы газ-жидкость-твердое вещество (осаждающийся метионин) [13]. Схема аппарата представлена на рисунке 1.

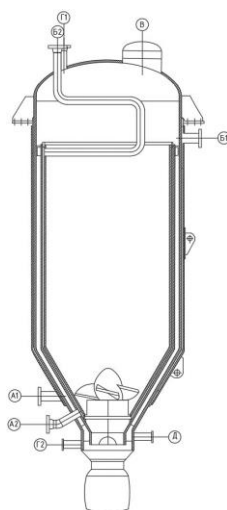


Рисунок 1. Схема реактора нейтрализации метионата щелочного металла

Обозначение элементов реактора: 1 – обечайка, 2 – днище коническое, 3 – днище эллиптическое, 4 – рубашка, 5 – днище коническое рубашка, 6 – рубашка наружная стенка, 7 – рубашка внутр. стенка, 8 – днище кон. рубашки наруж. стенка.

Штуцеры: А1,2; В1,2 – ввод теплоносителя, В – люк, Г1,2 – ввод сырья; Д – вывод продуктов;

Для выбранного аппарата были проведен расчет реакционного объема с учетом времени пребывания гидролизного раствора 10 минут и производительности 23 тысячи тонн/год по метионину. Расчет необходимой поверхности теплопередачи был произведен на основе данных по теплоте диссоциации аминокислот [2] и растворения углекислого газа [4]. В результате были определены основные характеристики аппарата, представленные в таблице 1.

Таблица 1

**Основные характеристики аппарата получения метионина**

Объем реактора, м <sup>3</sup>	Поверхность теплообмена, м <sup>2</sup>	Диаметр, м	Высота, м
5,7	45,5	1,6	4,25

Таким образом, проведенные расчеты показали, что использование импеллерного аппарата на стадии нейтрализации соли метионина возможно. При этом такая организация процесса позволяет существенно повысить эффективность последней стадии производства метионина за счет исключения образования сульфата щелочного металла.

**БИБЛИОГРАФИЯ**

1. Electrodialysis concentration of sulfuric acid / S.A. Loza, N.A. Smyshlyayev, A.N. Korzhov, N.A. Romanyuk. – Текст : электронный // *Chimica Techno Acta*. – 2021.- Vol. 8(1). - URL: <https://journals.urfu.ru/index.php/chimtech/article/view/4914> (дата обращения: 15.11.2023).
2. Hamborg, E. S., Niederer, J. P. M., & Versteeg, G. F. (2007). Dissociation constants and thermodynamic properties of amino acids used in CO<sub>2</sub> absorption from (293 to 353) K. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 52(6), 2491-2502. <https://doi.org/10.1021/je700275v>
3. High-value conversion of waste Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> by a bipolar membrane electrodialysis metathesis system / Ming Zhu, Binghui Tian, Sheng Luo [et al.]. – Текст : электронный // *Resources, Conservation & Recycling*. – 2022. – 29 July. – P. 1-11. - URL: <https://www.sciencedirect.com/search?qs=High->



value%20conversion%20of%20waste%20Na2SO4%20by%20a%20bipolar%20membrane%20electrodialysis%20metathesis%20system&pub=Resources%2C%20Conservation%20and%20Recycling&cid=271808 (дата обращения: 15.11.2023).

4. John J. Carroll; John D. Slupsky; Alan E. Mather The Solubility of Carbon Dioxide in Water at Low Pressure *J. Phys. Chem. Ref. Data* 20, 1201–1209 (1991) <https://doi.org/10.1063/1.555900>

5. Патент 105646304 Германия, МПК C07C323/58. Способ получения метионина : № 20120320 : опубл. 08.06.2016 / заявитель и патентообладатель Evonik Degussa GmbH. – Текст : непосредственный.

6. Патент 2016003134 Германия, МПК C07C319/20. Способ получения метионина и его соли : № 20140910 : опубл. 2016-06-24 / заявитель и патентообладатель Evonik Degussa GmbH. – Текст : непосредственный.

7. Патент 2015111118 Китай, МПК C07C319/20. Чистый способ получения метионина : № 20130106 : опубл. 27.10.2016 / заявитель и патентообладатель Evonik Degussa GmbH. – Текст : непосредственный.

8. Патент 2016127707 Китай, МПК C07C323/58. Способ получения D,Lметионина : № 20150212 : опубл. 18.08.2016 / заявитель и патентообладатель Shandong Nhu Amino Acid Co Ltd. – Текст : непосредственный.

9. Патент 156282 Франция, МПК C07C319/20. Чистый способ получения метионина : № 20081120 : опубл. 29.01.2016 / заявитель и патентообладатель Arkema France. – Текст : непосредственный.

10. Патент 200720228 Франция, МПК C07C319/20. Способ получения D,Lметионина : № 20060920 : опубл. 01.06.2007 / заявитель и патентообладатель Adisseo France SAS. – Текст : непосредственный.

11. Патент 200720229 Франция, МПК C07C319/20. Способ получения D,Lметионина : № 20060920 : опубл. 01.06.2007 / заявитель и патентообладатель Adisseo France SAS. – Текст : непосредственный.

12. Патент 07280207 Япония, МПК C07C323/58. Способ получения D,Lметионина : № 20070424 : опубл. 29.11.2011 / заявитель и патентообладатель Sumitomo Chemical Co. – Текст : непосредственный.

13. Патент 13085071 Япония, МПК C07C323/58. Способ получения метионина : № 20131118 : опубл. 30.07.2014 / заявитель и патентообладатель Matsumura Kana. – Текст : непосредственный.

14. Патент 2016047516 Япония, МПК C07C323/58. Способ получения метионина : № 20150916 : опубл. 31.03.2016 / заявитель и патентообладатель Matsumura Kana. – Текст : непосредственный.

\*\*\*\*\*

#### USE OF CARBON DIOXIDE AT THE NEUTRALIZATION STAGE OF ALKALI METAL METHIONATE IN THE PRODUCTION OF D, L – METHIONINE

Latyshova S.E., Panov A.O., Tankabekyan N.A., Dzyuin N.I.

*This article is devoted to the use and methods of methionine synthesis, one of the essential and limiting amino acids. This amino acid exhibits various biological activities, which leads to a wide range of its use in various medical preparations, as well as an additive in the modern compound feeds production, therefore the main consumer of methionine is the production of premixes and finished feeds for livestock and poultry farming. The analysis of chemical production methods has shown that in Russia methionine is produced through several stages, the last of which is the methionine salt neutralization with sulfuric acid, which leads to the formation of a large amount of alkali metal sulfate. Significant costs for its isolation, along with its low cost, lead to an increase in the price of methionine itself. There are known methods for neutralizing methionate using carbon dioxide, as a result of which the entire process is organized continuously without the by-products formation. It is proposed to use a reactor with an*

*impeller-type stirrer as an apparatus for this stage. The main parameters were calculated for this device: volume, heat transfer surface, diameter and height.*

**Keywords:** *methionine, methionate, hydantoin, synthesis reactor, impeller mixer, volume, diameter, heat exchange surface.*

---

#### Сведения об авторах:

**Латышова Снежана Евгеньевна**

доцент, кандидат химических наук, доцент,  
ФГБОУ ВО Волгоградский государственный технический университет,  
г. Волгоград, Россия  
E-mail: [snezhana5@rambler.ru](mailto:snezhana5@rambler.ru)

**Панов Александр Олегович**

старший преподаватель,  
ФГБОУ ВО Волгоградский государственный технический университет,  
г. Волгоград, Россия  
E-mail: [alexandropanov@gmail.com](mailto:alexandropanov@gmail.com)

**Танкабекян Назели Арсеновна,**

доцент кафедры химии, кандидат химических наук,  
ФГБОУ ВО Волгоградский государственный медицинский университет Минздрава  
России, г. Волгоград, Россия,  
E-mail: [nazeli.tankabekyan@yandex.ru](mailto:nazeli.tankabekyan@yandex.ru)

**Дзюин Никита Ильич**

Студент магистратуры,  
ФГБОУ ВО Волгоградский государственный технический университет,  
г. Волгоград, Россия

# ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ (ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ)

---

УДК 502.656.628

## ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ЛАЗЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ОЧИСТКИ СТОЧНЫХ ВОД ОТ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ

---

Зубрилов Сергей Павлович,  
Растрыгин Николай Васильевич,  
Витязева Ольга Владимировна

*Рассмотрены теоретические основы очистки сточных вод от тяжелых металлов под воздействием лазерного излучения. Показана возможность осаждения ионов тяжелых металлов путем перевода их в гидроксиды и гидрокарбонаты в результате химических преобразований веществ под действием кавитации. Объектом исследований является причина химических преобразований веществ в процессе кавитации. Предмет исследований – природа эффекта люминесценции, сопровождающего процесс развитой кавитации. При проведении исследований использован экспериментальный метод совместной синхронизированной фиксации импульсов давления и светоэмиссии при разрыве и коллапсе кавитационных каверн объемной жидкости с помощью двухканального запоминающего осциллографа. Экспериментально доказано возникновение соновспышек при расширении каверн в жидкости, что не подтверждает гипотезу о тепловой природе сонолюминесценции.*

**Ключевые слова:** лазер, плазма, вода, кавитация, каверна, давление, люминесценция, металлы, очистка.

---

Вторичное загрязнение водоемов реагентами, используемыми в процессах очистки сточных вод, привело к полной дискредитации традиционных технологий обработки воды. Поэтому в настоящее время большое внимание уделяется безреагентным технологиям водоочистки. В одной из последних работ [5] приведена оценка современного состояния безреагентных методов очистки вод, где отмечается, что очистка воды от металлов является одной из самых актуальных проблем, требующих новых неординарных идей и подходов, которые немногочисленны, разрозненны и плохо систематизированы. Нередко наблюдается ситуация, когда за новейшие достижения выдаются давно установленные и хорошо известные специалистам факты.

Несомненно, что безреагентным технологиям принадлежит будущее. При этом следует сразу отметить, что нерешенным продолжает оставаться вопрос о последствиях воздействий на воду высоких энергий, в том числе лазерной. В результате облучения воды лазером изменяются ее структура и основные свойства, в ней остаются продукты распада органических соединений и микроорганизмов (бактерий, вирусов, микроводорослей и т.д.), также возможны различные мутации представителей микрофлоры и микрофауны, влияние которых на здоровье человека на сегодня не исследовано. Известно, что растворяющая способность воды обусловлена снижением (а не повышением) диэлектрической проницаемости в зонах контакта молекул воды с ионом металла (например, с кальцием), что является результатом увеличения степени электролитической диссоциации воды. Кроме того, данный процесс может сопровождаться увеличением свободных радикалов, для нейтрализации которых потребуется введение в воду антиоксидантов, ухудшающих физиологическую полноценность воды.

Отечественный и зарубежный опыт на сегодняшний день позволяют предложить лазерные технологии для очистки сточных вод от ионов тяжелых металлов. Например, в работе [3] на ООО НПФ «Биолазер» совместно с Краснодарским НИИ рыбного хозяйства приведены результаты лабораторных испытаний лазерной установки для очистки сточных вод Темрюкского

рыбозавода на основе серийного гелий-неонового лазера ЛГН-111. Результаты опытов показали, что трехкратная обработка воды лазерным активатором снизила содержание тяжелых металлов на один или два порядка, при этом наблюдалось подавление жизнедеятельности анаэробных бактерий и вирусов без применения хлора и других окислителей.

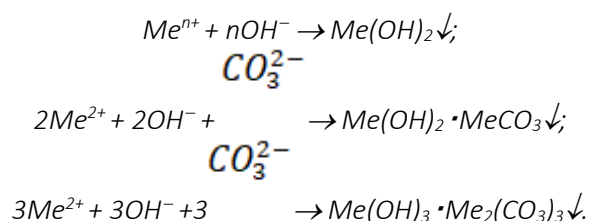
В работе [17] представлены результаты исследования воздействия лазерного излучения на ионы тяжелых металлов ( $Cu^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$ ) в водной среде. Установлено, что интенсивное осаждение ионов металлов вызвано процессом фотохимического восстановления, двухфотонным фотолизом воды и синтезом наночастиц в жидких средах, в частности, образованием активных частиц под действием лазерного излучения и формированием коллоидных кластеров металлов.

Лазерная очистка воды широко распространена в США в связи с поставкой лазеров промышленного назначения фирмой «U.S. - Lasers, Inc.» и изготовлением установок для очистки воды, например представленных на сайте «Alibaba.com». Многие модели изготовлены из прочных и безопасных материалов, включая ПВХ и нержавеющую сталь. Элементы управления – встроенные индикаторы лазерной очистки воды просты и надежны в эксплуатации. Установки наиболее широко представлены в определенных отраслях пищевой промышленности и производства напитков. Есть предложения по очистке питьевых вод небольших городов. Применение лазерных технологий в современных системах очистки промышленных сточных вод, основанных на использовании физико-химических методов, позволит повысить эффективность очистки сточных вод и тяжелых металлов [10,14,15,16].

Близкой к нашей теме является обработка сточных вод методом лавиностремительного разряда (ЛСР) [16]. Важным условием инициации процессов деструкции вредных включений является применение коротких импульсных воздействий.

Последние экспериментальные исследования, основанные на современных методиках, позволяющих осуществлять съемку лазерного пробоя у поверхности раздела «газ – жидкость» и пробоя объемной жидкости [6, 8, 9, 13], подтвердили данные теоретических расчетов о сверхвысоких температурах в полостях разрыва объемной жидкости, измеряемых в тысячах градусах по шкале Кельвина. По мнению авторов [6] они возникают при сжатии (коллапсе) каверн. В наших работах, обобщенных в [4], достаточно много внимания уделено плазмохимии при сжатии-расширении каверн в процессе ультразвуковой и гидродинамической кавитации. Состояние вещества в этих условиях мы назвали высокотемпературной нейтральной парогазовой плазмой. Лазерная обработка воды также приводит к возникновению процесса кавитации, следовательно, можно предположить, что вода, обработанная лазером, насыщается кислородом до концентрации, выше равновесной при данной температуре. В этих условиях соли тяжелых металлов переходят в гидроксиды и выпадают в осадок.

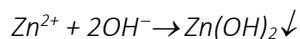
Рассмотрим подробнее этот вопрос. Очистка сточных вод от ионов наиболее распространенных тяжелых металлов ( $Ca^{2+}$ ;  $Mg^{2+}$ ;  $Sr^{2+}$ ;  $Al^{3+}$ ;  $Cr^{3+}$ ;  $Fe^{2+}$ ;  $Fe^{3+}$ ;  $Ni^{2+}$ ;  $Co^{2+}$ ;  $Mn^{2+}$ ;  $Zn^{2+}$ ;  $Pb^{2+}$ ;  $Sn^{2+}$ ;  $Cu^{2+}$ ), как правило, связана с осаждением их в виде гидроксида или гидроксид-карбоната:



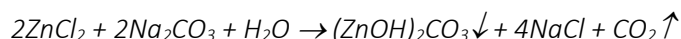
С целью осуществления названных процессов в очищаемую воду вводят реагенты, содержащие гидроксиды натрия и кальция или карбонат кальция. Наиболее распространенными из них являются сода, гашеная известь, мел, известняк и другие.

При использовании известкового молока  $Ca(OH)_2$  осаждение ионов происходит в виде гидроксидов металлов. При обработке кислых сточных вод негашеной известью  $CaO$  или гидроксидом натрия ионы цинка, кадмия, никеля, свинца, кобальта, меди переходят в малорастворимые соединения.

Например, осаждение ионов  $Zn^{2+}$  действием щелочей основано на переводе их в гидроксид  $Zn(OH)_2$ :



При действии соды ионы цинка переходят в гидроксид-карбонат:



Аналогичные процессы используют при осаждении ионов  $\text{Cu}^{2+}$ . Ионы  $\text{Ni}^{2+}$  и  $\text{Pb}^{2+}$  осаждают в виде гидроксидов и карбонатов.

Следует отметить, что при использовании щелочей необходим строгий контроль pH обрабатываемой воды во избежание растворения амфотерных гидроксидов. Так, осаждение ионов  $\text{Zn}^{2+}$  происходит при значении pH от 6,4 до 8,0, а для ионов  $\text{Cr}^{3+}$  pH осаждения составляет 4,9 – 6,8. Состав основных карбонатов зависит от условий проведения реакций (температуры, pH, концентрации реагентов и др). Например, при pH = 7 ионы цинка осаждаются с образованием гидрокосульфата  $\text{ZnSO}_4 \cdot 3\text{Zn}(\text{OH})_2$ , при pH = 8,8 состав осадка соответствует формуле  $\text{ZnSO}_4 \cdot 5\text{Zn}(\text{OH})_2$ , а в сильнощелочной среде твердая фаза существует преимущественно в виде гидроксида цинка.

Известно, что совместное осаждение нескольких металлов при постоянном значении pH дает лучшие результаты, поскольку образуются смешанные кристаллы и на поверхности этой твердой фазы ионы металлов адсорбируются более эффективно.

При обработке содой осадки уплотняются хуже, чем при использовании извести, так как коагулирующие свойства соды слабее. Кроме того, другим недостатком является высокая стоимость соды и едкого натра.

Более глубокая очистка воды от ионов тяжелых металлов достигается при использовании сульфида натрия. Осаждаемые при этом сульфиды металлов имеют значительно более низкую растворимость, чем гидроксиды и карбонаты.

Химические методы осаждения просты в использовании, однако имеют и заметные недостатки. Внесение реагентов, нередко дорогостоящих, значительно повышает содержание различных солей в стоках, что требует их дальнейшей доочистки и дополнительного разбавления перед сбросом в канализацию. Концентрация ионов тяжелых металлов в очищенной воде не всегда отвечает нормам ПДК. Использование химических реактивов требует соответствующего коррозионностойкого оборудования и специальных дозирующих устройств. Образующийся шлам трудно отстаивается, плохо обезвоживается и фильтруется, проблема его утилизации не везде решена.

Особенность лазерной обработки воды заключается в возникновении эффекта кавитации в результате пробоя объемной жидкости лазерным лучом. Многочисленные исследования поведения одиночной кавитационной полости (пузырька) показывают, что независимо от природы ее возникновения, поведение такой полости носит аналогичный характер. Соответственно, можно допустить, что схема химических превращений в дистиллированной воде под действием лазера будет подобной схеме таких превращений при ультразвуковой кавитации, приведенной нами ранее в работе [4] и включает в себя четыре основных этапа, на протяжении которых исходные вещества проходят несколько стадий химических преобразований с числом промежуточных и устойчивых соединений от десятков до нескольких десятков тысяч (рис.1).

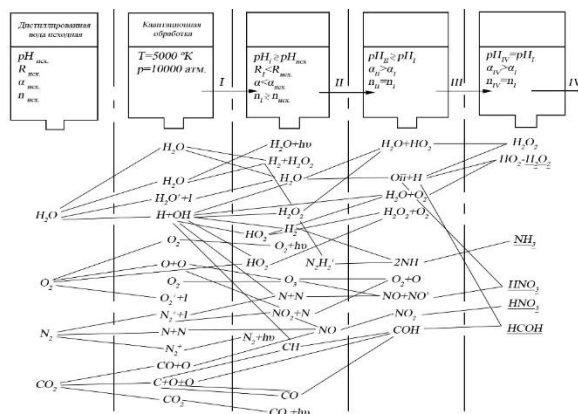


Рисунок 1. Схема химических превращений в воде под действием ультразвуковой кавитации

Как видно из представленной схемы (рис.1), на первом этапе, на участке плазменного сгустка при лазерном облучении, вполне вероятно, протекают реакции диссоциации молекул  $O_2 \rightarrow 2O$  и ионизации атомов плазмообразующего газа  $O \rightarrow O^+$  и  $O \rightarrow O^{++}$ , а также возникновение гидроксидов  $OH$ . На этом же участке любые вещества, включающие металлы, распадаются и возникают оксиды, диоксиды и гидроксиды этих металлов. Кроме того, при наличии в воде растворенного углекислого газа вероятно образование карбонат-ионов и гидрокарбонат-ионов и, следовательно, карбонатов и гидрокарбонатов металлов.

До настоящего времени причина химических превращений в воде под действием кавитации и сопровождающего их эффекта люминесценции (тепловая, электрическая и т.д.) дискуссионна и подробно рассмотрена в работе [4]. В связи с этим были предприняты исследования взаимосвязи интегральной сонолюминесценции с пульсацией кавитационной области.

При проведении экспериментов методом осциллографии были использованы следующие материалы: пьезокерамические датчики для фиксации импульсов давления при разрыве и коллапсе каверн объемной жидкости; ультразвуковая установка марки УЗДН-2Т; фотоэлектронный умножитель ФЭУ-79; цифровой милливольтметр В7-22А; выпрямитель ВС-22; двухканальный запоминающий осциллограф СВ-17.

В ходе эксперимента использовались дистиллированная вода однократной и двукратной дистилляции и ионообменные фильтры.

Известно, что гипотезы тепловой природы свечения предполагают соновспышки на стадии сжатия пузырьков [6], о чем свидетельствуют многочисленные исследования поведения одиночной кавитационной полости. При проверке этого положения для группы кавитационных пузырьков (области развитой ультразвуковой кавитации) был собран специальный экспериментальный стенд.

Схема этого стенда приведена на рис. 2. В объем жидкости 1 введен излучатель 2 магнитоотриктора для разрыва и коллапса каверн объемной жидкости 3. На магнитоотриктор подается непрерывный электрический сигнал синусоидальной формы с генератора УЗДН-2Т 4. Частота сигнала составляет 22 кГц, мощность, потребляемая магнитоотриктором, составляет 180 Вт. Интенсивность ультразвука в объеме жидкости плавно регулируется в диапазоне 0–5 Вт/см<sup>2</sup>. Непосредственно в объем кавитирующей жидкости введены пьезодатчики для регистрации импульса давления 5, термопара хромель-алюмель для измерения температуры 6, светодиод 7 для контроля работы ФЭУ. Сверху объем жидкости ограничен кварцевым стеклом 8. В измерительной ячейке 9 имеется отвод к расширительной емкости 10. Сверху к измерительной ячейке подводится фотоэлектронный умножитель ФЭУ-79 11. На ФЭУ с выпрямителя ВС-22 12 подается постоянное напряжение 2400 В. Преобразующий блок 13 собран по схеме, указанной в паспорте ФЭУ-79. Сигналы с ФЭУ и пьезодатчика подаются на входы двухканального запоминающего осциллографа СВ-17 14.

Дополнительно для оценки интенсивности интегрального свечения предусмотрена возможность подачи сигнала с ФЭУ на цифровой милливольтметр В7-22А 15. Сигнал с горячего 6 и холодного 16 слоев термопары подается на потенциометр 17. Дополнительно в измерительную

ячейку введен электронагреватель 18. Для поддержания стабильной температуры при работающем магнитостриктере вокруг измерительной ячейки 9 имеется охлаждающий кожух 19. Расход воды через него регулируется. В стенде предусмотрена возможность обеспечивать свободную поверхность жидкости в исследуемом объеме путем изменения положения расширительной емкости 10.

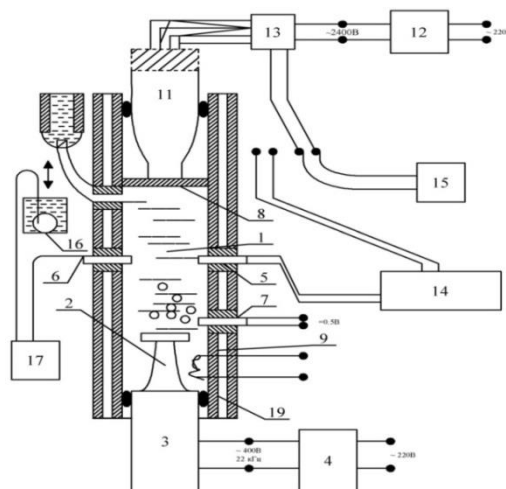


Рисунок 2. Схема экспериментального стенда

Результатами исследования были совмещенные осциллограммы сигналов с пьезодатчиков и ФЭУ (рис. 3). Синхронность сигналов обеспечивалась их мгновенной фиксацией с каналов осциллографа при работе в запоминающем режиме. Как видно из рис. 3, световые вспышки появляются на стадии разрежения в момент образования каверн, что противоречит гипотезе о тепловой природе сонолюминесценции.

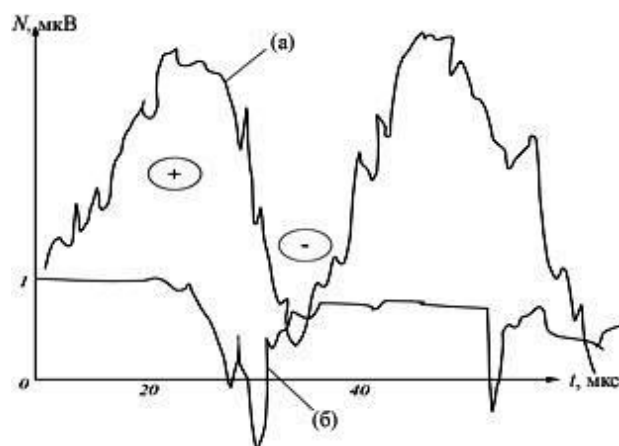


Рисунок 3. Совмещенные осциллограммы сигналов с пьезодатчика (а) и ФЭУ (б)

Таким образом, выполненное исследование не подтверждает тепловую природу сонолюминесценции. Его результаты можно расценивать в качестве еще одного довода в пользу гипотезы об электрической природе этого явления. Установлено, что эффект светоэмиссии наблюдается при появлении каверн в объеме жидкости, возникающих при тех или иных воздействиях. Другими словами, люминесценция связана с процессом перехода жидкости в состояние пара, в момент отрыва молекул от поверхности раздела сред (как на открытой поверхности, так и в объеме жидкости на поверхности каверн), что косвенно подтверждается результатами исследования процесса теплового линзирования при прохождении лазерного луча через воду [12]. Пока природа соновспышек продолжает оставаться неясной и требует новых идей и подходов [1, 11].

Проведено обобщение материалов и экспериментальных работ по лазерной очистке сточных вод от ионов тяжелых металлов. Рассмотрены теоретические предпосылки очистки воды



лазерной обработкой. Экспериментально установленный эффект длительного последствия лазерной обработки при очистке воды [3] подтверждает хорошие перспективы его внедрения в практику. Кроме того, исследования воздействия лазерного излучения на интенсивное осаждение ионов тяжелых металлов в водной среде подтверждают приведенную в статье схему химических превращений в воде под действием кавитации (рис. 1) в связи с обнаруженным авторами двухфотонным фотолизом воды и синтезом наночастиц в жидких средах [16, 17].

На основании выполненного эксперимента электрическая природа светоэмиссии при разрыве объемной жидкости под действием лазера принята в качестве предпочтительной. В настоящее время для установления первоосновы соновспышек необходимы дальнейшие исследования [1, 11].

Лазерная очистка сточных вод от тяжелых металлов, а в будущем и от других загрязняющих веществ (в частности, диоксинов) перспективна и в ближайшие годы займет свое место в народном хозяйстве [2].

## БИБЛИОГРАФИЯ

1. *Афанасьев А.В.* К вопросу о природе свечения кавитирующей жидкости / А. В. Афанасьев, С. П. Зубрилов // Сборник научных трудов «Охрана окружающей среды». – СПб.: СПГУВК, 1993. – С. 79–84.
2. *Вейко В.П.* Введение в лазерные технологии. Конспект лекций / В.П. Вейко, А.А. Петров, А.А. Самохвалов. – СПб.: Университет ЛИТМО, 2018. – 161 с.
3. *Журба Т.П.* Использование лазера при очистке сточных вод / Т.П. Журба // Лазер-Информ № 5-6 (476-477), март 2012.
4. *Зубрилов С.П.* Кавитация: эрозия, управление. Монография / С.П. Зубрилов, Н.В. Растрьгин. – СПб.: ГУМРФ имени адмирала С. О. Макарова, 2020. – 120 с.
5. *Зубрилов С.П.* Микрозагрязнители в питьевой воде городов. Безреагентная очистка воды: монография / С.П. Зубрилов. – СПб.: ГУМРФ имени адмирала С. О. Макарова, 2018. – 168 с.
6. *Flannigan D.J., Suslick K.S.* Inertially confined plasma in an imploding bubble // *Nat. Phys.* – 2010. – V. 6. – P. 598-601.
7. *Garen W.* Experimental Investigation of Shock-Bubble Properties at the Liquid-Air Phase Boundary / W. Garen [et al.] // 30th International Symposium on Shock Waves 2. – Springer, Cham, 2017. – Pp. 1153–1157. DOI: 10.1007/978-3-319-44866-4\_63.
8. *Liang Lv.* Experimental investigations of the particle motions induced by a laser-generated cavitation bubble / Liang Lv. [et al]. – Vol. 56. – Pp. 63-76. Author links open overlay <https://doi.org/10.1016/j.ultsonch.2019.03.019>
9. *Mettin R.* Acoustic cavitation structures and simulations by a particle model / R. Mettin [et al.] // *Ultrasonics Sonochemistry.* – 1999. – Vol. 6. – Pp. 25-29.
10. *Ol'shanskaya L.N., Sobgaida N.A., Tarushkina Yu.A., Stoyanov A.V.* Vliyanie magnitnogo polya na protsessy izvlecheniya tyazhelykh metallov iz stochnykh vod ryaskoi. *Khimicheskoe i neftegazovoe mashinostroenie.* 2008. № 8. С. 41–43.
11. *Pil'gunov V.N., Efremova, K.D.* Light emission and electrical process in the cavitating flow of mineral oil. Bauman Moscow State Technical University 105005, Moscow, Russian Federatio SCIENTIFIC PERIODICAL OF THE RAIJMAN MS TUSCIENCE and EDUCATION EL № FS77 - 48211. №0421200025. ISSN 1994-040S# 03, March 2013. DOI: 10.7463/0313.05355
12. *Reich, S., Schäffer, S., Lueck, M. et al.* Continuous wave high-power laser propagation in water is affected by strong thermal lensing and thermal blooming already at short distances. *Sci Rep* **11**, 22619 (2021). <https://doi.org/10.1038/s41598-021-02112-6>
13. *Reuter F.* Bubble size measurements in different acoustic cavitation structures: filaments, clusters, and the acoustically cavitated jet / F. Reuter, S. Lesnik, K. Ayaz-Bustami, G. Brenner, R. Mettin // *Ultrasonics sonochemistry.* – 2019. – Vol. 55. – Pp. 383–394. DOI: 10.1016/j.ultsonch.2018.05.003.
14. *Stoyanov A.V., Sobgaida N.A., Ol'shanskaya L.N.* Vliyanie lazernogo izlucheniya na protsessy fitoremediatsii medi iz stochnykh vod eikhorniei. *Khimicheskoe i neftegazovoe mashinostroenie.* 2010. № 6. С. 38–41.

15. Кульчин Ю.Н. Очистка поверхностей акваторий от нефтяной пленки с помощью волоконных лазеров большой мощности / Ю.Н. Кульчин, Е.П. Субботин, А.С. Кондрашина, П.Е. Субботин // Сборник итоговых материалов Девятого международного экологического форума «Природа без границ», 29–30 октября 2015 г. [http://prioda.primorsky.ru/page/2634](http://priroda.primorsky.ru/page/2634)

16. Макальский Л.М. Обработка воды горных выработок для уменьшения солесодержания электроразрядными методами / Л.М. Макальский, А.В. Кухно, О.М. Цеханович // Горный информационно-аналитический бюллетень. – 2018. – № 7. – С. 23–32. SSN 0236-1493.

17. Шейнкман Л. Очистка промышленных сточных вод от тяжелых металлов с использованием лазерного излучения / Л. Шейнкман, Д. Дергунов, В. Тимофеева // Экология и промышленность России. – 2015. – №19(5). – С. 26-30. <https://doi.org/10.18412/1816-0395-2015-5-26-30>

\*\*\*\*\*

## PHYSICO-CHEMICAL ASPECTS OF LASER TECHNOLOGIES FOR WASTEWATER TREATMENT FROM HEAVY METALS

Zubrilov S. P., Rastrygin N. V., Vitjazeva O.V.

*The theoretical foundations of wastewater treatment from heavy metals under the influence of laser radiation are considered. The possibility of precipitation of heavy metal ions by converting them into hydroxides and bicarbonates as a result of chemical transformations of substances under the action of cavitation is shown. The object of research is the cause of chemical transformations of substances in the process of cavitation. The subject of research is the nature of the luminescence effect accompanying the process of advanced cavitation. During the research, an experimental method of joint synchronized fixation of pressure pulses and light emission during rupture and collapse of cavitation cavities of a volumetric liquid using a two-channel storage oscilloscope was used. The occurrence of sonoflares during the expansion of cavities in a liquid has been experimentally proved, which does not confirm the hypothesis about the thermal nature of sonoluminescence.*

**Keywords:** laser, plasma, water, cavitation, cavity, pressure, luminescence, metals, purification.

### Сведения об авторах:

#### **Зубрилов Сергей Павлович**

Профессор, д.т.н., профессор, ФГБОУ ВО «Государственный университет морского и речного флота имени адмирала С. О. Макарова», Санкт-Петербург, Российская Федерация

E-mail: [zubrilovsergei@yandex.ru](mailto:zubrilovsergei@yandex.ru)

#### **Растрыгин Николай Васильевич**

Профессор, к.т.н., доцент, ФГБОУ ВО «Государственный университет морского и речного флота имени адмирала С. О. Макарова», Санкт-Петербург, Российская Федерация

E-mail: [rastryginnv@gumrf.ru](mailto:rastryginnv@gumrf.ru)

#### **Витязева Ольга Владимировна**

Доцент, к.п.н., доцент, ФГБОУ ВО «Государственный университет морского и речного флота имени адмирала С. О. Макарова», Санкт-Петербург, Российская Федерация

E-mail: [vitjazeva\\_olga@mail.ru](mailto:vitjazeva_olga@mail.ru)

# БИООРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ (ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ)

---

УДК 628.165

## ГИБРИДНАЯ ВОДОПОДГОТОВИТЕЛЬНАЯ УСТАНОВКА ТЕПЛОВОЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СТАНЦИИ С МИНИМАЛЬНЫМ СБРОСОМ СТОЧНЫХ ВОД

---

Власова Алена Юрьевна,  
Чупаев Андрей Викторович,  
Савдур Светлана Николаевна

*Ежегодно растет интерес к развитию и внедрению малосточных и бессточных технологий на тепловых электрических станциях. Причина заключается в том, что увеличивается стоимость как на природную воду, так и на административные штрафы за сброс сточных вод. В статье представлен литературный анализ применяемых технологий очистки на сегодняшний день, описаны достоинства и недостатки. На примере электростанции Республики Башкортостан приведены варианты модернизации установки водоподготовки для снижения количества сточных вод. Разработана и подробно описана технологическая схема бессточной установки подготовки воды с применением мембранных модулей очистки.*

**Ключевые слова:** водоподготовительная установка, гибридная технология, очистка стоков.

---

Промышленные предприятия в том числе и тепловые электрические станции создают группу основных источников загрязнений как воздушного пространства, так и водного бассейна. Многие предприятия заинтересованы в повышении экологического фактора производства и в повторном использовании отработанных ресурсов. Внедрение принципов циркулярной экономики при обращении с отходами производства может принести значительные дивиденды в виде экономии природного сырья, снижения негативного воздействия на окружающую среду. Так создание на ТЭС малоотходных и бессточных схем водопотребления и водоотведения требует повышения коэффициента водооборота с минимизацией сбросов сточных вод. Для реализации данного подхода требуется комплексное решение поставленных задач, которое достигается с помощью анализа расхода ресурсов, технико-экономического обоснования методов оптимизации, расчета срока окупаемости предложенного метода.

На тепловых станциях при реализации «традиционной» установки водоподготовки образуется большое количество сточных вод, в результате процесса регенерации ионообменных фильтров. Как правило, на станции не предусмотрены системы утилизации отработанных регенерационных стоков, и они сбрасываются на очистные сооружения. При превышении нормированных значений по показателям на сточные воды станции вынуждены платить штрафы. Поэтому предприятия заинтересованы в разработке технологий, которые позволят сократить количество сточных вод и повторно использовать ресурсы.

По мнению главного технолога ЗАО «СибКОТЭС» Богданова А. необходимо либо сократить, либо вообще отказаться от использования химических методов подготовки воды. Подпитка сети должна осуществляться с применением термических методов подготовки. А также на станции должны быть реализованы системы отдельного сбора использованной воды с делением на «соленые» и «условно чистые». Каждая линия оснащается измерительными приборами, которые фиксируют расход, концентрацию основных загрязняющих веществ. Для получения эффекта от отдельного сбора стоков необходимо предусмотреть технологию очистки.

[1] Организация данного подхода технологически возможна, но требует больших капитальных

затрат как на разделение потоков и строительство новых путепроводов, так и на монтаж установок очистки каждого потока.

Исследования, проведенные по комбинированию процессов очистки, доказали возможность внедрения способа утилизации отработанных регенерационных растворов с помощью умягчения на Na-катионитовых фильтрах. [2] Но для эффективного применения данного способа необходимо знать количественный и качественный состав воды, который поступает на очистку.

Доктор технических наук, профессор Джалилов М.Ф. писал, что отработанные регенерационные растворы с H-катионитовых фильтров прошедшие стадию подготовки могут быть использованы либо в цикле станции, либо как подпитка тепловой сети. Данные мероприятия позволят улучшить технико-экономические и экологические показатели. [3]

Авторами был описан способ использования лишь части сточных вод, которая представляла собой кислые отработанные растворы. Способ заключался в подмесе данных стоков к исходной воде и дальнейшей обработкой в осветлителе с применением содоизвестковых реагентов. Одна из предложенных схем представлена на рисунке 1. Схема включает H-катионитовый фильтр – 1, с загрузкой слабокислотным катионитом, декарбонизатор – 2, воздушный вентилятор – 3, бак – 4, насос – 5, механический фильтр – 6, с загрузкой сульфоуголь. [4]

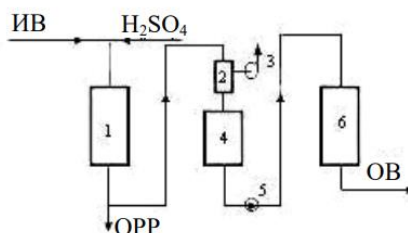


Рисунок 1. Технологическая схема очистки отработанных регенерационных растворов

Помимо химических методов утилизации сточных вод существуют физические методы без применения дополнительных реагентов – электродиализная обработка стоков. Данный способ позволяет очистить высокоминерализованные стоки с хорошей предварительной очисткой от взвешенных и коллоидных веществ. [5]

Для внедрения бессточных технологий необходимо соблюдать ряд условий, которые ориентированы на последовательную очистку и повторное использование стоков. Стоки могут быть использованы в энерготехнологических процессах переработки твёрдого топлива в рамках реализации проектов разработки энерготехнологических заводов [6]. Ученые, работающие в данном направлении описывают процессы повторного использования отработанных ресурсов для создания искусственного композиционного топлива. [7]

Разработка гибридной водоподготовительной установки была реализована на одной из станции Республики Башкортостан. Существующая установка эксплуатировалась с 1971 года и наблюдался существенный износ основных технологических узлов ввиду продолжительного срока работы, а также отсутствие автоматизации и большой расход химических реагентов. Данные проблемы привели к необходимости внедрения реконструкции действующей установки. Установка включала: осветлитель, механический фильтр, две ступени H-OH ионитных фильтров. Задачи реконструкции заключались в следующем:

- количественный состав сточных вод должен соответствовать нормативам;
- снижение затрат на водопотребление и водоотведение;
- снижение суммы административных штрафов.

Для реализации данных задач были рассмотрены несколько вариантов комбинирования установки очистки:

Вариант № 1. Очистка промышленных стоков химического цеха на выпарной установке. Для переработки промышленных стоков химического цеха с получением дистиллята, пригодного для технологических нужд (возвращается в цикл химического цеха на осветлитель) и солевых

отходов в виде смеси кристаллов солей влажностью 15-20%, предлагается вакуум-выпарная установка производительностью 10 м<sup>3</sup>/ч по исходной воде. Достоинством предлагаемого выпарного оборудования является его способность перерабатывать практически любые загрязнённые стоки, поэтому не требуется тщательной предварительной обработки.

Предусматривается следующая технология очистки:

1. Механическая фильтрация промышленных стоков от крупных взвесей.
2. Концентрирование стоков в выпарной установке с получением дистиллята и смеси солей.

3. Дистиллят после выпарной установки направляется на использование для технологических нужд (подпитка котловой воды и/или подпитка теплосети и т.п. после прохождения дополнительной очистки в осветлителях).

4. Смесь солей направляется для последующего хранения или утилизации. Класс опасности отхода – 4 (предварительная оценка).

Недостатком данного варианта является:

- высокая стоимость оборудования;
- проблема с утилизацией сухого остатка, класс опасности отхода – 4;
- высокая себестоимость обессоленной воды, в связи с большим расходом пара на выпарку.

Вариант № 2. Очистка исходной воды для химического цеха на установке обратного осмоса.

Исходную воду, прошедшую обработку на действующем узле предочистки подают на вход Na-катионитовых фильтров. В качестве Na-катионитовых фильтров использованы три действующих фильтра, диаметром 3400 мм, с предварительным проведенным капитальным ремонтом. После фильтров умягченная вода поступает на установку обратного осмоса. По расчетам в результате обратноосмотического обессоливания образуется концентрат в количестве 34 м<sup>3</sup>/ч, который собирается в баке накопителе и далее подается в качестве подпитки в тепловую сеть. После блока обратного осмоса образуется 100 м<sup>3</sup>/ч пермеата, который собирается в баках частично обессоленной воды. Расчетный карбонатный индекс концентрата не более 1,2 (мг-экв/дм<sup>3</sup>), что позволяет рассмотреть возможность использования его в качестве подпиточной воды для закрытой системы теплоснабжения.

Скопившийся пермеат насосами перекачивается на ступень –Н –ОН ионитных фильтров для более глубокого обессоливания. Возможна установка бака деаэрата между Н-катионитовым фильтром и ОН-анионитовым. Отработанные регенерационные растворы после –Н и –ОН фильтров собираются в отдельные баки. Раздельный сбор стоков позволит вернуть часть отходов обратно в цикл станции.

Недостатком данного варианта является:

- высокая стоимость мембранных модулей и комплектующих материалов;
- закупка щелочных и кислотных реагентов для промывки системы обратного осмоса;
- монтаж дополнительных баков накопителей для стоков. [8-10]

На основании выполненного анализа было принято решение по реконструкции по варианту № 2 (рисунок 2). Реконструкция затронула первую ступень ионитных фильтров. Было принято решение вместо ионитных фильтров установить блок обратного осмоса, что позволит увеличить экологические параметры станции.

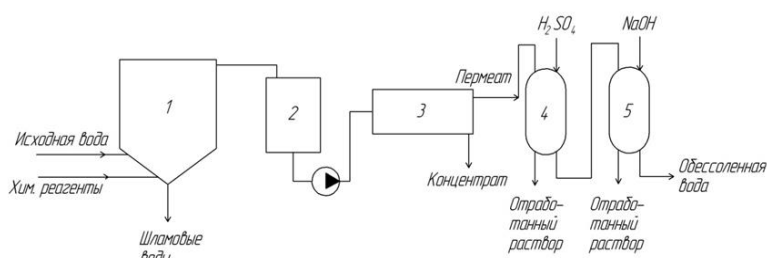


Рисунок 2. Технологическая схема водоподготовительной установки с блоком обратного осмоса

1 – осветлитель; 2 – механический фильтр; 3 – установка обратного осмоса; 4 - Н-катионитовый фильтр; 5 - ОН - анионитовый фильтр.

При внедрении блока обратного осмоса сократиться количество сточных вод с ненормативными показателями. Для реализации данного варианта была предложена технологическая схема с внедрением блока очистки стоков с возвратом в голову установки (рисунок 3).

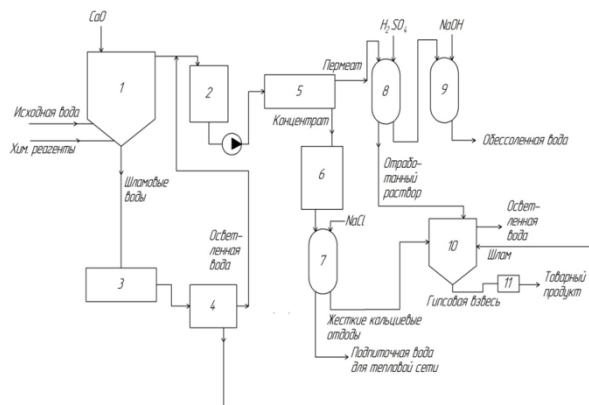


Рисунок 3. Технологическая схема бессточной водоподготовительной установки

Предварительная подготовка воды осуществляется в осветлителе 1 и механическом фильтре 2, подбор сопутствующих реагентов осуществляется экспериментально в лабораторных условиях. Шламная вода (щелочная среда) скапливается в баке накопителе 3 и затем отправляется для концентрирования на фильтр-пресс 4. Осветленная вода после фильтра прессы поступает на вход перед блоком обратного осмоса 5. Концентрат после блока обратного осмоса поступает в бак накопитель 6 и далее направляется порционно на Na-катионитовый фильтр, фильтрат далее направляется на подпитку тепловой сети. Перед отводом фильтрата в сеть рекомендуется проводить анализ по определению общей жесткости каждый час. При регенерации фильтра жесткие стоки отводятся в гипсовый реактор 10. Также в этот реактор отводится шлам и отработанный регенерационный раствор после Н-катионитового фильтра. В результате порционного смешивания стоков получаем твердый осадок в виде гипса и осветленной воды, которая может быть использована повторно вместо природной воды. Пермеат после блока обратного осмоса подвергается более глубокой очистке на ионитных фильтрах.

Данная технология является гибридной, так как сочетает несколько методов очистки. Создание бессточных технологий является важной научной и технологической задачей. Внедрение «чистых» технологий позволит снизить негативное воздействие на окружающую среду и позволит экономить не только природные ресурсы, но и материальные средства.

## БИБЛИОГРАФИЯ

1. Богданов А. О создании малосточных безреагентных ТЭЦ и котельных / Профессиональный журнал. 01 (73), 2010, С. 60-65.
2. Фейзиев Г.К. Высокоэффективные методы умягчения, опреснения и обессоливания воды. - М.: Энергоатомиздат, 1988. С. 192.
3. Джалилов М.Ф., Бадалов Б.Ш. О повышении экономической и экологической эффективности процесса водоприготовления / Азербайджанский архитектурно-строительный университет. Энергетика. Известия высших учебных заведений и энергетических объединений СНГ. 2006;(1), С. 66-71.
4. Фейзиев Г.К., Гусейнова Г.Г., Исмаилов Р. Т. Бессточные методы частичного умягчения воды катионированием с безреагентной утилизацией стоков / Известия высших учебных заведений и энергетических объединений СНГ - Энергетика: научно-технический и производственный журнал. - 2010. - №2. - С. 52-56.

5. Шмидт К.В., Карбышев С.А., Охорзина Т. И. Малосточные схемы ионитных установок / Молодежь и наука: сборник материалов IX Всероссийской научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых с международным участием, посвященной 385-летию со дня основания г. Красноярск. Сибирский федеральный ун-т, 2013.

6. Авдохин В.М. Обогащение углей: учебник для вузов в 2 т. – М.: Издательство «Горная книга», 2012. Т. №1. «Процессы и машины». С. 424.

7. Бураков И.А., Никитина И.С., Аладушкин С.В. Использование сточных вод промышленных и энергетических объектов в энерготехнологических процессах / Материалы международной (XX всероссийской) научно-технической конференции «Состояние и перспективы развития электро- и теплотехнологии» (Бенардосовские чтения), 29 – 31 мая, 2019 года, II том «Теплоэнергетика», Иваново. С. 147 - 149.

8. Ходырев Б.Н., Федосеев, Б.С., Калашников А.И. и др. Опыт внедрения установки обратного осмоса УОО-166 на Нижнекамской ТЭЦ-1 / Электрические станции. 2002. № 6. С. 54-62.

9. Абрамова И.А., Чернов С.А., Майков В.М. Опыт эксплуатации установки обратного осмоса Новосибирской ТЭЦ-2 / Теплоэнергетика. 2008. N. С. 69-71.

10. Рочева О.А., Зарипова Р.С., Рочева Я.О. Экологическая составляющая качества жизни населения / Энергетика, инфокоммуникационные технологии и высшее образование: материалы Международной конференции. Казань, 2023. Т. 3. С. 325-328.

\*\*\*\*\*

#### HYBRID WATER TREATMENT PLANT FOR THERMAL POWER PLANT WITH MINIMUM WASTEWATER DISCHARGE

Vlasova A. Y., Chupaev A. V., Savdur S. N.

*Interest in the development and implementation of low- and zero-waste technologies at thermal power plants is growing every year. The reason is that the cost of both natural water and administrative fines for wastewater discharge increases. The article presents a literary analysis of the purification technologies used today, describing the advantages and disadvantages. Using the example of a power plant in the Republic of Bashkortostan, options for modernizing a water treatment plant to reduce the amount of wastewater are presented. A technological scheme of a drainless water treatment plant using membrane purification modules has been developed and described in detail.*

**Keywords:** water treatment plant, hybrid technology, wastewater treatment.

---

#### Сведения об авторах:

**Власова Алена Юрьевна:**

Кандидат технических наук, доцент кафедры «Атомные и тепловые электрические станции», ФГБОУ ВО «Казанский государственный энергетический университет»

**E-mail:** [vlasovaay@mail.ru](mailto:vlasovaay@mail.ru)

**Чупаев Андрей Викторович:**

кандидат технических наук, доцент, ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет»

**Савдур Светлана Николаевна:**

кандидат технических наук, доцент кафедры «Биотехнологии, животноводства и химии», ФГБОУ ВО «Казанский государственный аграрный университет»

**E-mail:** [savdur.svetlana@yandex.ru](mailto:savdur.svetlana@yandex.ru)



# БИОТЕХНОЛОГИЯ

---

УДК 57.08

## **ВЛИЯНИЕ НЕГАТИВНЫХ ФАКТОРОВ НА РАБОТУ БИОСЕНСОРОВ, ОСНОВАННЫХ НА МИКРООРГАНИЗМАХ АКТИВНОГО ИЛА**

Белоусова Татьяна Сергеевна

*В данной статье рассматривается важность мониторинга биохимического потребления кислорода (БПК) как в сточных, так и в природных водах. Этот параметр является ключевым показателем уровня загрязнения водных ресурсов и позволяет оценить эффективность работы очистных сооружений. Одним из перспективных методов мониторинга является использование различных биосенсоров, которые позволяют быстро и точно определить уровень БПК в реальном времени. Применение биосенсоров особенно актуально в условиях растущего экологического контроля и необходимости обеспечения высокого качества водных ресурсов. Микроорганизмы активного ила являются важным компонентом БПК-биосенсоров, поскольку они обладают высокой чувствительностью к изменению уровня биохимического потребления кислорода. Они способны быстро реагировать на изменение концентрации органических загрязнителей в воде, что позволяет получать точные и своевременные данные о состоянии водных ресурсов. Использование микроорганизмов активного ила в биосенсорах также является экологически безопасным подходом, поскольку не требует использования вредных химических реагентов. В статье рассмотрены влияние pH и содержания NaCl на эффективность работы биосенсоров на основе микроорганизмов активного ила для определения индекса биохимического потребления кислорода.*

**Ключевые слова:** биохимическое потребление кислорода, биосенсоры, активный ил, pH

Мониторинг состояния водных ресурсов и контроль их качества являются критически важными задачами для поддержания устойчивого экологического баланса и благополучия окружающей среды. Определение степени загрязнения воды включает оценку уровня биохимического потребления кислорода (БПК) – показателя, характеризующего количество кислорода, необходимое для полного биохимического разложения органических загрязнителей в водной среде [1]. В основе этого процесса лежит деятельность микроорганизмов, которые используют кислород для метаболизма органических веществ.

До настоящего времени в качестве стандартного метода определения БПК использовался метод, основанный на проведении серии анализов проб воды, каждый из которых занимал от 5 до 20 рабочих дней [2]. Этот метод включает проведение инкубации проб воды в строго контролируемых условиях температуры и аэрации, что позволяет оценить уровень кислорода, потребляемого микроорганизмами в процессе своего метаболизма. Однако данный метод является трудоемким, требует длительного времени и не подходит для мониторинга воды в режиме реального времени.

Существуют различные исследования по разработке БПК-биосенсоров с применением различных ферментов, колоний и ассоциаций микроорганизмов [3, 4, 5]. В них рассматриваются разные подходы и используются материалы и биологические объекты для разработки биосенсорных систем, но все эти системы объединяет ряд преимуществ по сравнению со стандартным методом определения БПК: упрощение пробоподготовки, дешевизна из-за использования меньшего количества специальных реактивов и посуды и высокая экспрессность метода. Высокая скорость анализа позволяет быстро реагировать на возникающие опасные ситуации в виде каких-либо выбросов легкоокисляемых веществ в водоемы [6].

В связи с этим, актуальной становится задача разработки новых методов определения БПК, позволяющих сократить время анализа и проводить мониторинг состояния воды в реальном времени. Одним из перспективных направлений в данной области является использование биосенсоров на основе микроорганизмов активного ила. Активный ил представляет собой сообщество микроорганизмов и простейших, способных к быстрому размножению и разложению органических веществ.

В последнее время наблюдается растущий интерес к исследованию биосенсоров на основе биопленки микроорганизмов, полученных из активного ила и модифицированных различными типами углеродных нанотрубок. Ранее большая часть исследований микробных пленок была сосредоточена на их негативном воздействии, особенно на здоровье человека, а также способах борьбы с ними; например, было обнаружено, что, по данным Центров США по контролю и предотвращению заболеваний, до 80% всех бактериальных инфекций в западных странах вызываются мультимикробными плёнками [7].

Использование в данной работе биопленок микроорганизмов обусловлено их высокой устойчивостью [8,9] по сравнению с колониями микроорганизмов, иммобилизованных в биосенсор в виде суспензий, т.к. микроорганизмы внутри биопленки способны образовывать внеклеточный матрикс [8,10] и крепиться друг к другу и к поверхности [10].

**Цель исследования.** Изучить влияние pH среды и содержания NaCl на эффективность работы разработанного БПК-биосенсора и определить наилучший биосенсор.

#### **Материалы и методы исследования.**

Для культивирования микроорганизмов на поверхность агаризованной среды Лурия-Бертрани (LB) производился пересев микроорганизмов активного ила из жидкой пробы. Колонии микроорганизмов прорастали на твердой среде в термостате при температуре 28°C. Далее из выросших колоний микроорганизмов были выбраны и идентифицированы 4 колонии: *Pseudarthrobacter scleromae* BKM Ac-2995, *Arthrobacter halodurans* BKM Ac-2997, *Brevundimonas vesicularis* BKM B-3699, *Rhodococcus fascians* BKM Ac-2996. Эти колонии пересеивались и выращивались отдельно путем посева с твердой питательной среды на твердую.

Формирование электродов проходило по следующему алгоритму: в пластиковую трубку (рисунок 1) помещали графитовую пасту (в агатовой ступке замешивались 0,1 г графитовой пудры и 40 мкл минерального масла). На поверхность электрода наносилась суспензия УНТ (углеродных нанотрубок). Суспензию готовили путём добавления к 0,25 г УНТ 1 мл деионизированной воды. Далее микроцентрифужную пробирку с суспензией помещали в ультразвуковую баню на 30 минут. Затем содержимое пробирки обрабатывали с помощью центрифуги вортекс в течение 5 минут при максимальном перемешивании. Электрод опускался в пробирку с жидкой питательной средой LB. В пробирку пересеивалась колония микроорганизмов путем посева с твердой питательной среды на жидкую. На границе касания поверхности электрода с питательной средой образовывалась биопленка. Биоплёнку наращивали в термостате в течении 7 суток. Образовавшуюся биопленку закрывали диализной мембраной и закрепляли пластиковым кольцом. Готовые электроды хранятся в фосфатном буфере pH 6,8.



Рисунок 1. А - процесс нанесения биопленки микроорганизмов на поверхность электрода.

Б - Схема рабочего электрода

Измерение зависимости ответа сенсора от рН проводили при помощи гальванопотенциостата, интегрированного с персональным компьютером (рисунок 2). Рабочий потенциал определялся с помощью вольтамперометрии. Измерения проводили при температуре 23°C; объем измерительной ячейки составлял 5 см<sup>3</sup>. В измерительную ячейку вводился калий-натрий-фосфатный буферный раствор с различными рН 5,4-8. Измерения велись при непрерывном перемешивании раствора с помощью магнитной мешалки (300 об/мин). После установления стабильного уровня тока в ячейку вводили одинаковое количество глюкозо-глутаматной смеси. После каждого измерения производили промывку ячейки калий-натрий-фосфатным буферным раствором рН=6,8. Измеряемым параметром сигнала сенсора являлась амплитуда изменения силы тока, определяемая как разность между конечным и начальным значениями токов до и после введения исследуемого соединения в измерительную кювету.

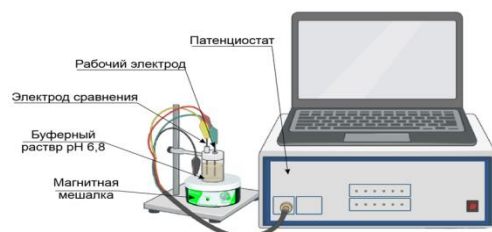


Рисунок 2. Схема рабочей установки

Измерение зависимости ответа сенсора от концентрации NaCl проводилось аналогично измерению зависимости ответа сенсора от рН. В измерительную ячейку вводился калий-натрий-фосфатный буферный раствор рН 6,8 с различным содержанием NaCl ( $w(\text{NaCl})=0\%-20\%$ ). После установления стабильного уровня тока в ячейку вводили одинаковое количество глюкозо-глутаматной смеси. После каждого измерения производили промывку ячейки калий-натрий-фосфатным буферным раствором рН=6,8. Измеряемым параметром сигнала сенсора являлась амплитуда изменения силы тока, определяемая как разность между конечным и начальным значениями токов до и после введения исследуемого соединения в измерительную кювету.

#### Результаты исследования и их обсуждение.

Важным критерием для эффективной работы сенсора является определение оптимального рН среды, при котором наблюдается наибольший отклик системы. Для этого проводилась серия экспериментов, в которой количество и концентрация используемого субстрата оставались неизменными, а изменяемым критерием являлся рН буфера, достигаемыми различными фосфатными буферными растворами (рисунок 3).

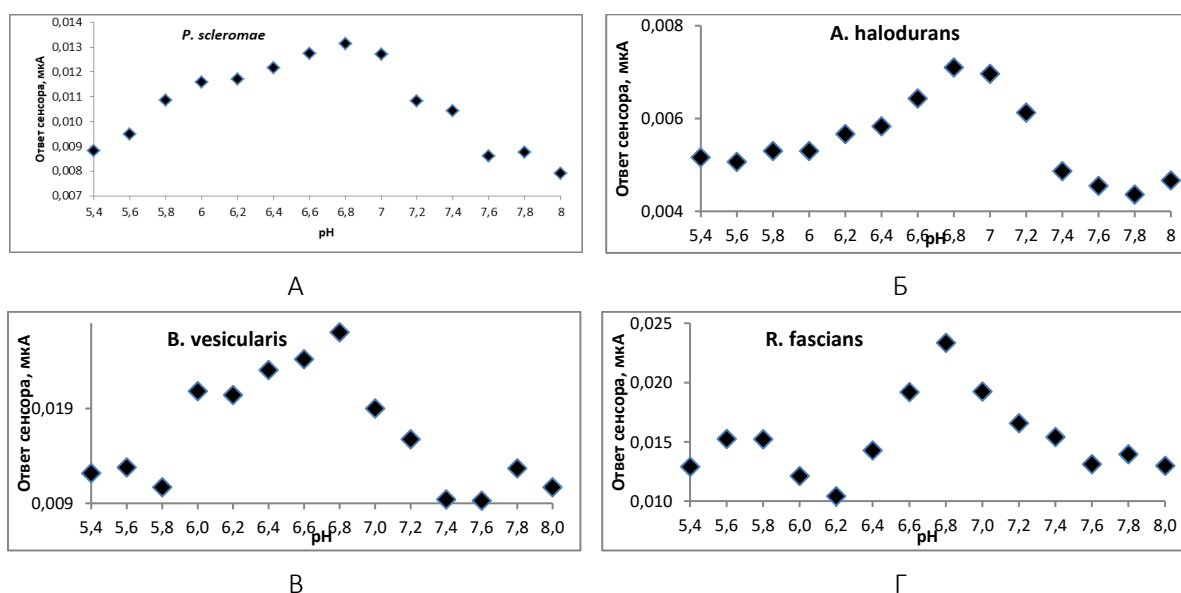


Рисунок 3. Зависимость ответа сенсора от рН, для биосенсора на основе микроорганизмов А – *P. scleromae*, Б – *A. halodurans*, В – *B. vesicularis*, Г – *R. fascians*

Исходя из полученных данных можно сделать вывод, что pH 6,8 является оптимальным для работы биосенсоров на основе биопленок всех 4х микроорганизмов. Один из исследованных биосенсоров на основе микроорганизмов *P. scleromae* демонстрирует меньшую чувствительность к изменению pH окружающей среды в сравнении с другим биосенсором. Основываясь на полученных данных, можно предположить, что структура и состав рецепторного слоя данного биосенсора обеспечивают его более высокую стабильность и устойчивость к изменениям кислотности среды.

Для определения мешающих компонентов проводилась серия экспериментов, в которой количество и концентрация используемого субстрата оставались неизменными, а изменяемым критерием являлось содержание NaCl в буфере (рисунок 4).

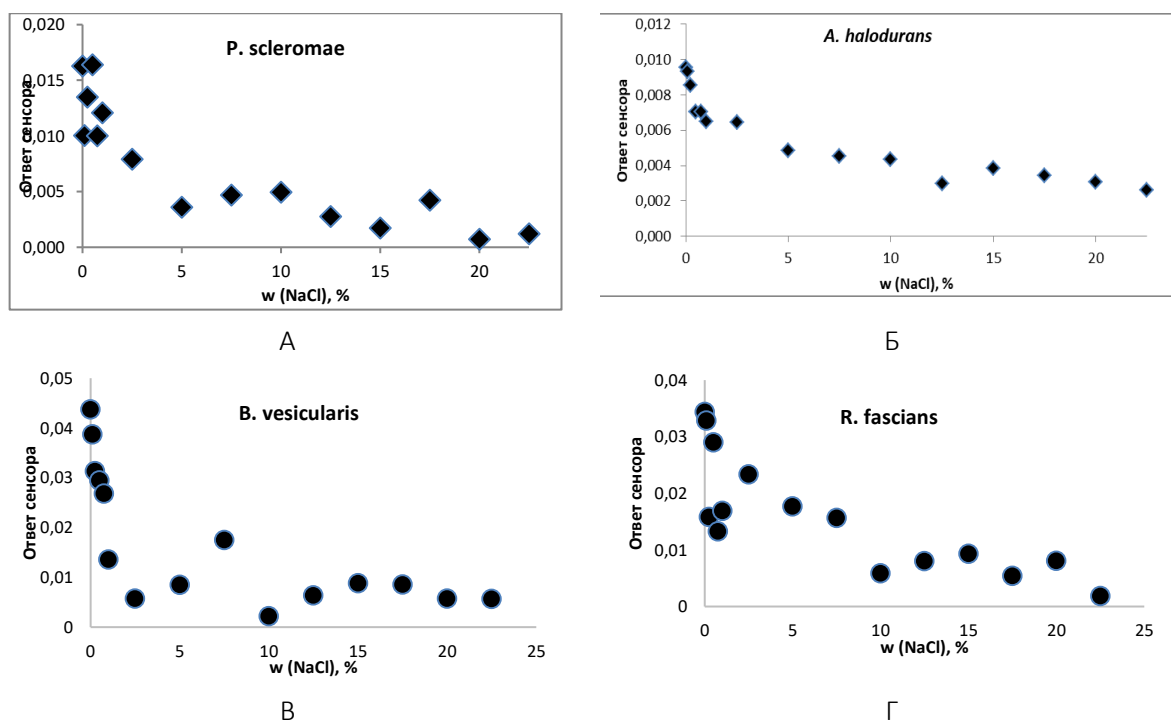


Рисунок 4. Зависимость ответа сенсора от содержания NaCl, для биосенсора на основе микроорганизмов А – *P. scleromae*, Б – *A. halodurans*, В – *B. vesicularis*, Г – *R. fascians*

Исходя из полученных данных можно сделать вывод, что содержание NaCl уменьшает величину силы тока и NaCl является мешающим компонентом при определении БПК. Наиболее устойчивым к воздействию NaCl является биосенсор на основе *A. halodurans*. Возможно, это связано со структурой и составом рецепторного слоя данного сенсора, которые обеспечивают его стабильность и устойчивость к солености окружающей среды.

В результате проведенной работы были определены 2 типа биосенсоров, обладающими наилучшими характеристиками устойчивости к воздействию окружающей среды. Благодаря тому, что биосенсор на основе микроорганизмов *A. halodurans* обладает наибольшей устойчивостью к содержанию NaCl в окружающей среде, а биосенсор на основе микроорганизмов *P. scleromae* обладает наибольшей устойчивостью к изменениям pH оба биосенсора могут быть использованы для мониторинга окружающей среды и оценки ее качества, однако биосенсор на основе *A. halodurans* будет более подходящим для анализа соленых сред, таких как морская вода, в то время как биосенсор на основе *P. scleromae* будет более эффективным для измерения кислотности в различных природных и промышленных системах.

Работа выполнена при поддержке гранта ректора ТулГУ для обучающихся по образовательным программам высшего образования – программам магистратуры № 8937ГРР\_М

## БИБЛИОГРАФИЯ

1. Hu J. et al. A mediated BOD biosensor based on immobilized *B. subtilis* on three-dimensional porous graphene-poly pyrrole composite //Sensors. – 2017. – Т. 17. – №. 11. – С. 2594.
2. ПНДФ 14. 1:2:3:4. 123-97. Количественный химический анализ вод. Методика выполнения измерений биохимической потребности в кислороде после n-дней инкубации (БПКполн) в поверхностных пресных, подземных (грунтовых), питьевых, сточных и очищенных сточных водах. – М.: 1997. 25 с.
3. Yamashita T. et al. Energy savings with a biochemical oxygen demand (BOD)-and pH-based intermittent aeration control system using a BOD biosensor for swine wastewater treatment //Biochemical Engineering Journal. – 2022. – Т. 177. – С. 108266.
4. Ma Y. et al. A systematic study on self-powered microbial fuel cell based BOD biosensors running under different temperatures //Biochemical Engineering Journal. – 2022. – Т. 180. – С. 108372.
5. Reynoso E. C. et al. Enzymatic biosensors for the detection of water pollutants //Nanomaterials for biocatalysis. – Elsevier, 2022. – С. 463-511.
6. Kurbanalieva S. et al. Electroactive biofilms of activated sludge microorganisms on a nanostructured surface as the basis for a highly sensitive biochemical oxygen demand biosensor //Sensors. – 2022. – Т. 22. – №. 16. – С. 6049.
7. Verstraelen H., Swidsinski A. The biofilm in bacterial vaginosis: implications for epidemiology, diagnosis and treatment //Current opinion in infectious diseases. – 2013. – Т. 26. – №. 1. – С. 86-89.
8. An D., Parsek M. R. The promise and peril of transcriptional profiling in biofilm communities //Current opinion in microbiology. – 2007. – Т. 10. – №. 3. – С. 292-296.
9. Donders G. G. G. et al. Definition of a type of abnormal vaginal flora that is distinct from bacterial vaginosis: aerobic vaginitis //BJOG: an international journal of obstetrics and gynaecology. – 2002. – Т. 109. – №. 1. – С. 34-43.
10. López D., Vlamakis H., Kolter R. Biofilms //Cold Spring Harbor perspectives in biology. – 2010. – Т. 2. – №. 7. – С. a000398.

\*\*\*\*\*

## THE INFLUENCE OF NEGATIVE FACTORS ON THE OPERATION OF BIOSENSORS BASED ON ACTIVATED SLUDGE MICROORGANISMS

Belousova T. S.

*This paper discusses the importance of monitoring biochemical oxygen demand (BOD) in both wastewater and natural waters. This parameter is a key indicator of water pollution level and allows assessing the efficiency of wastewater treatment plants. One promising monitoring method is the use of various biosensors, which can quickly and accurately determine BOD levels in real time. Biosensor application is particularly relevant in the context of increasing environmental control and the need to ensure high water quality. Activated sludge microorganisms are an important component of BOD biosensors as they have high sensitivity to changes in biochemical oxygen demand levels. They are able to quickly respond to changes in the concentration of organic pollutants in water, allowing for accurate and timely data on the state of water resources. The use of activated sludge microorganisms in biosensors is also an environmentally friendly approach as it does not require the use of harmful chemical reagents. The article examines the effect of pH and NaCl content on the performance of biosensors based on activated sludge microorganisms for determining the biochemical oxygen demand index.*

**Keywords:** biochemical oxygen demand, biosensors, activated sludge, pH

Сведения об авторе:

**Белоусова Татьяна Сергеевна**

М.н.с. лаб. «БАСИБ» БиохимТех Центра ТулГУ, магистрант каф. Химии,  
ФГБОУ ВО «Тульский государственный университет», г. Тула

E-mail: [tatyana.belousova.2000@mail.ru](mailto:tatyana.belousova.2000@mail.ru)

УДК 502.51; 502.175

## **ДИНАМИКА ИЗМЕНЕНИЯ ГИДРОХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ВОД РЕКИ БАРСУК ПОД ВЛИЯНИЕМ ПРИРОДНЫХ И АНТРОПОГЕННЫХ ФАКТОРОВ**

---

Белоусова Юлия Олеговна,  
Ларин Сергей Иванович,  
Шуплецова Полина Алексеевна,  
Ларина Наталья Сергеевна

Объектом исследования являлась малая р. Барсук – правый приток более крупной р. Ишим (Тюменская область). Для изучения динамики гидрохимического состава вод малой реки Барсук и ее притоков с учетом воздействия климатических и антропогенных факторов пробы воды отбирались вблизи населенных пунктов. Изучены гидрохимические особенности самой реки и ее притоков, а также проведено сопоставление полученных данных с результатами прошлых лет (данные 1967 и 1991 гг.). За рассматриваемый период (1967-2020гг.) тип вод остался неизменным (гидрокарбонатно-натриевый тип), хотя на протяжении реки содержание главных ионов существенно изменяется. Произошло защелачивание вод, особенно в самой реке (в притоках этот процесс не наблюдался), что может быть связано с антропогенным влиянием. Общая минерализация воды в реке не претерпевает существенных изменений и соизмерима с данными 1967г. Однако в 1991 году данный показатель был в 2 раза ниже. Эти же факторы определяют снижение содержания взвешенных веществ в 2020 г. в 2 раза по сравнению с 1991г. Максимальное негативное воздействие на качество вод р. Барсук было зафиксировано вблизи с. Базариха, где практически все исследованные показатели имеют аномальные значения по сравнению с другими точками отбора. Воды реки Барсук используются для орошения, водопоя скота и рыбного хозяйства, что делает уровень антропогенной нагрузки в некоторых населенных пунктах недопустимой.

**Ключевые слова:** гидрохимия, малые реки, Приишимье, качество воды, взвешенное вещество

---

Охрана природных вод является одной из наиболее актуальных современных проблем, поскольку дефицит пресных вод в глобальном и региональном масштабах возрастает, что многократно отмечалось ООН и другими международными организациями. Проблема качества природных вод в России также остра, как и во всем мире, несмотря на значительные ресурсы, которые не всегда соответствуют нормативам качества. Управление водными ресурсами, сложной природно-хозяйственной системой, требует достоверной и полной информации об этой системе. Значительную часть этой информации получают в результате мониторинга водных объектов, в том числе, за природными и антропогенными факторами воздействия на них [1,13,14]. Существенную роль в формировании качества пресных вод играют малые реки, которые являются формирующим звеном крупных речных систем, определяют гидрохимические и гидрологические особенности рек, играют существенную роль в формировании биоценозов [6]. Однако, в связи с тем, что площадь бассейна и промысловый режим малых рек ограничены, способность к самоочищению низкая, малые реки отличаются более высокой уязвимостью к загрязнениям [2,5,11]. В условиях изменяющегося климата и увеличивающейся антропогенной нагрузки, происходит преждевременный переход малых рек в фазу старения: снижается водность, усиливается зарастание и заболачивание [9].

Объектом данного исследования являлась малая р. Барсук, являющаяся правым притоком более крупной р. Ишим. Эти реки играют значительную роль в гидрологической сети юга



Тюменской области. Река Барсук берет начало из болота Килейное и впадает в староречье р. Ишим протоку Старица, соединяющуюся с р.Ишим у с. Викулово. Длина реки 80 км, площадь водосбора 1300 км<sup>3</sup>, общее падение реки 36,5 м. Основные притоки – Крутиха, Черемшанка, Базариха. Бассейн реки расположен в лесостепной полосе Западносибирской низменности, на междуречье рек Ишима и Иртыша. Почти половина площади бассейна реки заболочена, особенно в северной и северо-восточной частях. Приречная наиболее дренированная полоса бассейна шириной 8-10 км используется под пашни. Грунты, слагающие бассейн, представлены суглинками, перекрытыми в заболоченных понижениях торфом. Пойма сложена песчано-илистыми грунтами, перекрытыми в присклоновой полосе отложениями торфа. Русло сильноизвилистое, неразветвленное, заросшее в прибрежной части. Дно реки илистое, местами глинистое [8].

Целью данного исследования являлось изучение динамики гидрохимического состава вод малой реки Барсук и ее притоков (р. Сартамак, р. Базариха, р. Черемшанка) с учетом воздействия климатических и антропогенных факторов. Учет антропогенного воздействия заключался в отборе проб воды вблизи населенных пунктов, расположенных на берегах реки и активно их использующих. Полученные результаты проанализированы в комплексе с данными исследований, проведенных ранее [3,8] для установления динамики воздействия антропогенной нагрузки на водный объект со временем.

#### Экспериментальная часть

Пробы воды отбирались в июле-августе 2020 года в р. Барсук (пробы 1-7) и ее притоках (пробы 8-10), в местах с высокой антропогенной нагрузкой – вблизи населенных пунктов (рис.1).



Рисунок 1. Карта-схема мест отбора проб воды на р. Барсук и ее притоках

Отбор проводился в соответствии с нормативными документами [4]. Отобранные пробы воды фильтровались через беззольный фильтр «синяя лента». В фильтрате определяли основные интегральные показатели (рН, удельную электропроводность (УЭП)), гидрохимический состав и биогенные элементы (методом капиллярного электрофореза).

#### Результаты исследований

Для оценки качества вод р. Барсук в пробах воды было определены некоторые интегральные гидрохимические показатели, гидрохимический состав вод, содержание биогенных и органических веществ.

**Интегральные гидрохимические показатели**, к числу которых относятся значения рН, удельная электропроводность (УЭП), цветность, содержание взвешенных веществ дают общую характеристику качества вод.

рН в пробах воды изменялось незначительно, во всех пробах рН выше 8, среднее значение по р. Барсук составило  $8,46 \pm 0,10$ , т.е. воды относятся к классу слабощелочных (рис. 2,а). В нижнем течении реки (т. 5-7) рН не превышает среднее значение. Существенное изменение рН происходит в т.4 (с. Базариха), где рН=8,74. Затем к устью реки рН закономерно снижается к устью. В притоках реки Барсук рН составило 8,01 (р. Сартамак), 8,55 (р. Базариха) и 8,23 (р. Черемшанка). Во всех пробах р. Барсук вода имеет более высокие значения рН, характерных для р. Ишим (рН=8,10) [7], и выше значений, наблюдавшихся в р. Барсук в 1968г. (7,85) [8] 1991 году (7,63) [3],

т.е. в настоящий период происходит процесс защелачивания вод, особенно в верхнем течении реки.

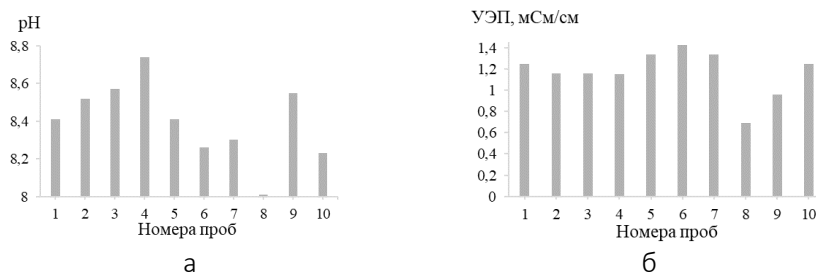


Рисунок 2. Значение рН (а) и электропроводности (б) в пробах воды р. Барсук и ее притоков

Удельная электропроводность (УЭП), характеризующая минерализацию вод, во всех пробах р. Барсук превышает 1 г/л (рис. 2,б) и может быть отнесена к водам высокой минерализации (по Алекину) или к слабосоленоватым водам (по Прохорову) [10]. Минерализация вод в притоках (т. 8 - р. Сартамак и т. 9 - р. Базариха), значительно ниже среднего значения по реке (0,69 и 0,96 мСм/см, соответственно). Среднее значение УЭП в р. Барсук в 2020 году составило  $1,26 \pm 0,07$  мСм/см (сумма ионов 1019 мг/л), что незначительно отличается от данных 1968 года (сумма ионов 1128 мг/л) [8]. В 1991г. [3] сумма ионов в р. Барсук составляла 730 мг/л, что соизмеримо с минерализацией воды в р. Ишим (690 мг/л) [7]. Это в 2 раза ниже данных 1967 и 2020 гг., что может свидетельствовать о ритмичности в изменении факторов, определяющих данный показатель. Скорее всего, это связано преимущественно с климатическими факторами (температура, количество осадков) и может привести к повышению минерализации в принимающей реке.

Цветность воды в реке изменяется незначительно, среднее значение составило  $44,5 \pm 3,6$  град. цветности (рис. 3,а). Максимальное значение наблюдалось в р. Сартамак (т.8), где цветность достигала 60,1 град. цветности.

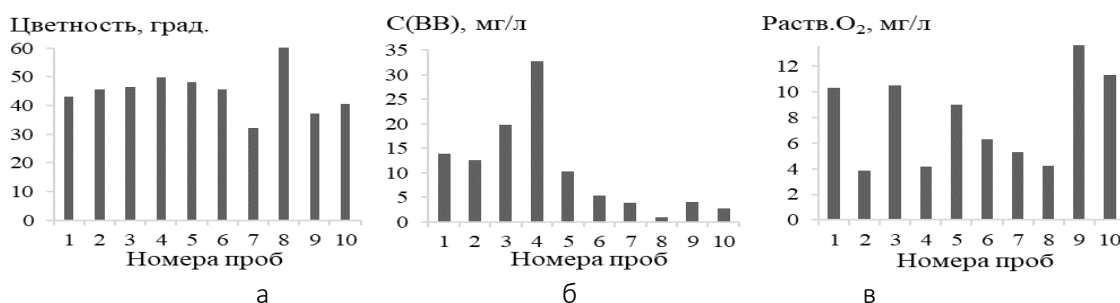


Рисунок 3. Изменение цветности (а), содержания взвешенных веществ (б) и концентрации растворенного кислорода (в) в воде р. Барсук и ее притоков

Взвешенное вещество (ВВ) в воде в значительной степени определяется местом отбора проб и изменяется по реке неравномерно. До т.4 концентрация взвешенных веществ в воде растет экспоненциально, затем резко падает, но остается на относительно высоком уровне. Среднее содержание взвешенного вещества в р. Барсук составило  $14,1 \pm 6,1$  мг/л (рис. 3,б). В притоках концентрация ВВ значительно ниже среднего и составляет 0,9 (р. Сартамак), 4,1 (р. Базариха) и 2,7 (р. Черемшанка) мг/л. В значительной степени это определяется скоростью течения реки и характером водосборной площади. Однако в т.4 (с. Базариха) вероятно наличие антропогенного источника загрязнения ( $C(ВВ) = 32,7$  мг/л), но даже это максимальное значение существенно ниже концентрации ВВ, полученных в 1991 году у с. Калинино (51 мг/л) [3].

Содержание растворенного кислорода в водах реки изменялось в широком интервале от 3,85 до 10,5 мг/л, при среднем содержании  $7,05 \pm 1,76$  мг/л (рис. 3,в). Минимальное содержание растворенного кислорода наблюдалось в т.2 (с. Калинино), т.4 (с. Базариха) и т.8 (р. Сартамак), в данных пробах кислород находился ниже нормы (6 мг/л) и составил 3,85, 4,15 мг/л и 4,20 мг/л, соответственно. Максимальное содержание кислорода наблюдалось в притоках - т. 9 (р.

Базариха) и т. 10 (р. Черемшанка), где содержание кислорода достигало 18,4 и 11,3 мг/л, соответственно. В 1991 году данный показатель, измеренный у с. Калинино, составлял  $7,5 \pm 0,7$  мг/л [3], что свидетельствует о значительном ухудшении качества воды и способности ее к самоочищению. В притоках наблюдается тенденция к пересыщению вод кислородом, что может свидетельствовать об активизации процесса зарастания водоема в период отбора проб при очень слабом течении.

**Гидрохимический состав вод.** Для характеристики гидрохимического состава вод реки Барсук во всех точках отбора было определено содержание главных ионов (рис.4). Из рисунка видно, что наиболее стабильным на всем протяжении реки является содержание ионов калия и магния в катионном составе воды, что может свидетельствовать об отсутствии влияния антропогенных факторов на данные показатели. Содержание ионов кальция имеет тенденцию к снижению от истока к устью более, чем в 2 раза, исключение составляет т. 1 (с. Усть-Барсук), где содержание ионов кальция выше. Еще более нестабильно содержание ионов натрия в воде реки. Максимальные концентрации натрия наблюдаются в точках 1, 2, 3, которые превышают содержание этих ионов в низовьях реки, также очевидно увеличение преобладания данного иона в катионном составе.

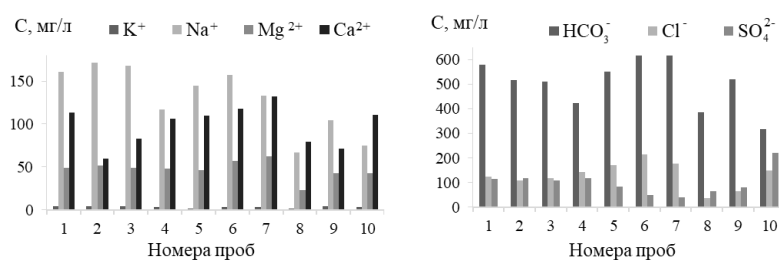


Рисунок 4. Распределение содержания главных ионов в воде р. Барсук

В содержании анионов очевидно преобладание гидрокарбонат-ионов. Концентрация сульфат-ионов имеет тренд к возрастанию от истока к устью, а хлорид-ионов – к убыванию. Относительно высокое содержание хлорид и сульфат ионов отмечено в р. Черемшанка, при этом концентрация гидрокарбонат-ионов в этом притоке минимально.

По средним значениям полученных показателей для р. Барсук была построена диаграмма Толстихина (рис. 5, а) в соответствии с которой, воду реки можно классифицировать как гидрокарбонатную натриево-кальциевую с незначительным преобладанием натрия в катионном составе. В литературных источниках [3, 8] приводятся гидрохимические данные для р. Барсук в одной точке на реке, причем в разные годы отбор проб был произведен в различных пунктах. По данным 2020г. установлено, что концентрация главных ионов заметно изменяется от точки к точке (рис.4), поэтому для сопоставления динамики изменения гидрохимического состава были построены диаграммы Толстихина (рис. 5, б, в) у с. Коточиги (1967г. и 2020г.) и у с. Калинино (1991г. и 2020г.).

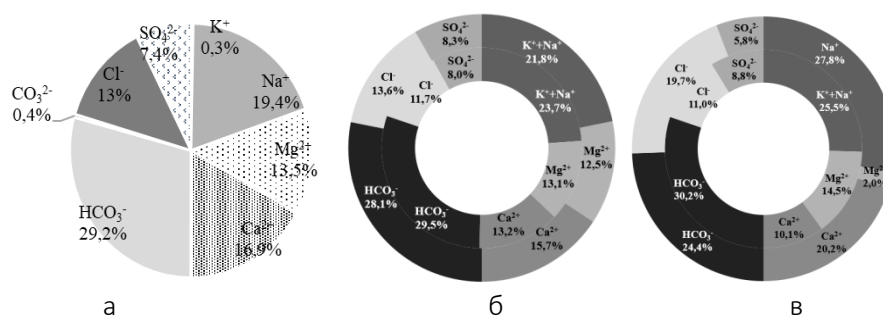


Рисунок 5. Диаграммы Толстихина для проб воды р. Барсук: а – средние значения (2020г.); б – у с. Коточиги (внешнее - 1967г.; внутреннее - 2020г.); в – у с. Калинино (внешнее - 1991г.; внутреннее - 2020г.)

По данным исследования 1967г. [8] воды в реке Барсук близ с. Коточиги относились к гидрокарбонатно-натриевым, в 2020г. произошли незначительные изменения в гидрохимическом составе. На 2% уменьшилось содержание кальция в пользу натрия в катионном

составе и примерно в таком же соотношении в анионном составе произошло увеличение содержания гидрокарбонат-ионов при уменьшении концентрации хлорид-ионов. Тип вод остался неизменным (рис.5, б).

По данным исследования 1991г. [3] воды в реке Барсук у села Калинино были отнесены к гидрокарбонатно-натриевым, но при высоком содержании хлорид-ионов и ионов кальция. По данным исследования 2020г. значительно снизилось содержание ионов кальция – в 2 раза, и хлорид-ионов – в 1,5 раза, а содержание ионов магния существенно увеличилось – в 7 раз (рис.4, б), хотя тип вод остался тем же.

#### **Выводы**

В ходе проведенного мониторинга малой реки Барсук (правый приток реки Ишим) были изучены гидрохимические особенности самой реки и ее притоков, а также проведено сопоставление полученных данных с результатами прошлых лет (данные 1967 и 1991 гг.). За рассматриваемый период (1967-2020гг.) тип вод остался неизменным (гидрокарбонатно-натриевый тип), хотя на протяжении реки содержание главных ионов существенно различается. Однако произошло защелачивание вод, особенно в самой реке (в притоках этот процесс не наблюдался), причем изменение показателя по течению реки неравномерно, что может быть связано с антропогенным влиянием. Общая минерализация воды в реке не претерпевает существенных изменений и соизмерима с данными 1967г. Однако в 1991 году данный показатель был в 2 раза ниже. Такая динамика изменения показателя свидетельствует об определяющем влиянии водности рек, связанной с меняющимися климатическими условиями, но в то же время свидетельствует о ритмичности в их изменении. Эти же факторы определяют снижение содержания взвешенных веществ в 2020 г. в 2 раза по сравнению с 1991г. Наиболее существенное влияние антропогенного фактора сказывается на содержании растворенного кислорода, содержание которого у с. Калинино в 3 раза ниже, наблюдавшегося в 1991 г., что свидетельствует о неблагоприятной ситуации в этой части реки, связанное с высокой антропогенной нагрузкой. Максимальное негативное воздействие на качество вод р. Барсук было зафиксировано вблизи с. Базариха, где практически все исследованные показатели имеют аномальные значения по сравнению с другими точками отбора. Часть показателей затем восстанавливается за счет процессов самоочищения, а некоторые остаются на более высоком уровне по сравнению с истоком реки.

Воды реки Барсук используются для орошения, водопоя скота и рыбного хозяйства, что делает уровень антропогенной нагрузки в некоторых населенных пунктах недопустимой.

*Исследование выполнено в рамках госзадания № 1021061810416-7 на оборудовании ЦКП ТюмГУ (Министерство науки и высшего образования РФ, контракт 05.594.21.0019).*

#### **БИБЛИОГРАФИЯ**

1. Баренбойм, Г.М. Некоторые научно-технические проблемы проектирования, создания и функционирования систем мониторинга водных объектов / Г.М. Баренбойм, Е.В. Веницианов, В.И. Данилов-Данильян // Вода: химия и экология. – 2008. – №1. – С. 3-7.
2. Гришанцева, Е.С. Эколого-геохимические исследования малых рек, впадающих в Ивановское водохранилище (р.Волга) / Е. С. Гришанцева, Я. В. Бычкова, Л. П. Федорова // Вода: химия и экология. – 2019. – № 1-2. – С. 15-26.
3. Калинин, В.М. Малые реки в условиях антропогенного воздействия (на примере Восточного Зауралья) / М.В. Калинин, С.И. Ларин, И.М. Романова. – Тюмень: издат. ТюмГУ, 1998. – С. 35-48.
4. Комплексное гидрохимическое и биологическое исследование качества вод и состояния водных и околотовных экосистем / О.А. Алешина, Л.А. Волкова, С.Н. Гашев [и др.]. – Тюмень: Изд-во Тюменского государственного университета, 128 с.
5. Ларина, Н.С. Техногенное загрязнение природных вод / Н.С. Ларина, В.Г. Катанаева, Н.А. Шелпакова. – Тюмень: Мандр-Ика, 2004. – 224 с.
6. Прожорина, Т.И. Оценка экологического состояния малых рек Воронежской области / Т.И. Прожорина, С.А. Куролап, Т.В. Нагих // Научные ведомости Белгородского Государственного Университета. Серия: естественные науки. – 2018. – Т. 42, № 2. – С. 298-308.

7. Протокол лабораторных испытаний № 6267 и №6268 от 30 ноября 2020г. // Официальный портал органов государственной власти Тюменской области. – URL: <https://abatsk.admtumen.ru/> (дата обращения: 25.10.2023).
8. Ресурсы поверхностных вод СССР. Алтай и Западная Сибирь. Нижний Иртыш и Нижняя Обь. Л.: Гидрометеиздат, 1973. – Т.15. – Вып.3. – 423 с.
9. Семененко, С. Я. Формирование гидрохимических показателей поверхностных вод малых степных антропогенно нагруженных рек / С. Я. Семененко, Н. В. Морозова, С. С. Марченко // Известия Нижневолжского агроуниверситетского комплекса: Наука и высшее профессиональное образование. – 2022. – № 3(67). – С. 474-487.
10. Справочник по гидрохимии: справочное издание / А. М. Никаноров; ред. А. М. Никаноров. – Ленинград: Гидрометеиздат, 1989. – 391с.
11. Ткачев, Б.П. Малые реки: современное состояние и экологические проблемы / Б.П. Ткачев, В.И. Булатов. – Новосибирск, 2002. – 114 с.
12. Хмельницкая, О. К. Основные гидрохимические характеристики промежуточных и глубинных водных масс Северной Атлантики / О. К. Хмельницкая // Вестник Московского университета. Серия 5: География. – 2011. – № 6. – С. 60-66.
13. Шуплецова П.А., Белоусова Ю.О., Ларина Н.С., Ларин С.И. Оценка степени эвтрофирования малой реки Китерня (бассейн реки Ишим)//В сборнике: Экологические чтения - 2023. Материалы XIV Национальной научно-практической конференции (с международным участием). Омск, 2023. С. 691-696.
14. Prem Assessment of Surface Water Quality in the Big Sunflower River Watershed of Mississippi Delta Using Nonparametric Analysis / Y. Ouyan, G. Feng, P. Parajuli [et al.] // Water, Air, & Soil Pollution. – 2018. – V. 229 (11). – P. 1-13.

\*\*\*\*\*

#### DYNAMICS OF CHANGES IN THE HYDROCHEMICAL WATER COMPOSITION OF THE BARSUK RIVER UNDER THE INFLUENCE OF NATURAL AND ANTHROPOGENIC FACTORS

Belousova Yu.O., Larin S.I., Shupletsova P.A., Larina N.S.

*The object of the study was the small river is Barsuk River, which is the right tributary of the larger Ishim River (Tyumen region). Water samples were taken near populated areas to study the dynamics of the hydrochemical composition of the small Barsuk River waters and its tributaries, considering the influence of climatic and anthropogenic factors. The hydrochemical features of the river and its tributaries were studied. The obtained data were compared with the results of previous years (data from 1967 and 1991). Over the period under review (1967-2020), the type of water remained unchanged (bicarbonate-sodium type), although along the river the content of the main ions changes significantly. Alkalinization of waters occurred, especially in the river itself (this process was not observed in the tributaries), which may be due to anthropogenic influence. The total mineralization of water in the river does not undergo significant changes and is comparable with the data of 1967. However, in 1991 this indicator was 2 times lower. The same factors determine the reduction in suspended solids content in 2020 by 2 times compared to 1991. The maximum negative impact on the water quality of the river was recorded near the Bazarikha Village, where almost all studied indicators have anomalous values compared to other sampling points. The waters of the Barsuk River are used for irrigation, livestock watering and fishing, which has a significant anthropogenic impact on some populated areas.*

**Keywords:** hydrochemistry, small rivers, Ishim region, water quality, suspended matter

#### Сведения об авторах:

**Белоусова Юлия Олеговна**

Тюменский государственный университет, Институт химии, магистр.

E-mail: [belousova1485@gmail.com](mailto:belousova1485@gmail.com)

**Ларин Сергей Иванович**

Институт криосферы Земли ТюмНЦ СО РАН, и.о. директора; к.г.н.

E-mail: [silarin@yandex.ru](mailto:silarin@yandex.ru)

**Шуплецова Полина Алексеевна**

Тюменский государственный университет, Институт химии, Центр коллективного пользования «Рациональное природопользование и физико-химические исследования», инженер 2 категории

E-mail: [polina.a.shupletsova@gmail.com](mailto:polina.a.shupletsova@gmail.com)

**Ларина Наталья Сергеевна**

Тюменский государственный университет, Институт химии, кафедра органической и экологической химии, профессор; к.х.н.

E-mail: [nslarina@yandex.ru](mailto:nslarina@yandex.ru)

**ПРОЦЕССЫ И АППАРАТЫ  
ХИМИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ  
(ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ)**

---

УДК 66.067.12 54.4

## СЕТЧАТЫЕ СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК КАК МАТЕРИАЛ ДЛЯ ФИЛЬТРАЦИИ

Вершинина Анна Игоревна,  
Звиденцова Надежда Семеновна,  
Гордая Олеся Руслановна,  
Шандаков Сергей Дмитриевич

*В работе на качественном уровне проведена оценка эффективности фильтрации водного золя золотых наночастиц (НЧ) через фильтр на основе сетки однослойных углеродных нанотрубок (ОУНТ), полученных аэрозольным CVD-методом с использованием этанола и ферроцена. Предложен простой способ изготовления трехслойных фильтров на основе сеток ОУНТ для водных растворов с предварительной обработкой диметилсульфоксидом с целью улучшения смачиваемости фильтра. Методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) изучена морфология и определен средний диаметр НЧ золота. Методами абсорбционной спектроскопии и ПЭМ изучено влияние ОУНТ на эффективность фильтрации водного золя золотых НЧ со средним диаметром  $44 \pm 6$  нм. Показано, что фильтры на основе сеток ОУНТ могут выступать в качестве фильтров для наночастиц.*

**Ключевые слова:** углеродные нанотрубки, однослойные углеродные нанотрубки, фильтрация, наночастицы, спектр поглощения гидрозольа наночастиц Au.

Развитие нанотехнологий ведет к появлению множества новых материалов, которые могут содержать металлические наночастицы. В частности, золотые наночастицы представляют особый интерес в силу их разнообразных свойств, которые находят широкое применение, как в материаловедении, так и в медицине. С одной стороны, многие исследования показывают высокую эффективность наночастиц золота в качестве инструмента таргетированной доставки лекарств, при лечении рака, отмечается их высокая биосовместимость, с другой стороны, обнаруживаются негативные факторы, проявляющиеся в возможности накопления наночастиц в тканях живых организмов, цитотоксичность не только к патогенным микроорганизмам и раковым клеткам [1-4]. Все эти факторы требуют создания эффективных инструментов для предотвращения неконтролируемого распространения наночастиц золота в окружающей среде, чтобы устранить негативные эффекты при их применении в различных областях. На сегодняшний день хорошо известны методики получения наночастиц золота с высокой степенью их однородности по размерам. Наночастицы золота были выбраны в качестве тест-объекта ввиду ведущихся дискуссий об их потенциальной эко- и цитотоксичности, что справедливо в отношении наноматериалов в целом. А также, при изучении эффективности фильтров на основе сеток ОУНТ данный выбор обусловлен сочетанием их уникальных свойств, позволяющих осуществлять их эффективную идентификацию в объеме фильтруемого раствора при помощи абсорбционной спектроскопии видимого диапазона, что обусловлено наличием эффекта плазмонного резонанса у наночастиц золота.

### Материалы и методы исследования

#### Синтез ОУНТ

Сетки ОУНТ получали аэрозольным CVD-методом с плавающим катализатором при температуре 825 °С в кварцевом трубчатом реакторе. В качестве источника углерода был использован 95,6% этиловый спирт ( $C_2H_5OH$ ), ферроцен ( $C_{10}H_{10}Fe$ ) (Sigma Aldrich, 98%) использовался в качестве прекурсора катализатора [5,6]. Концентрация раствора ферроцена в этаноле составляла 200 мл/л. Преимущество данного метода синтеза состоит в том, что сбор



продуктов происходит на выходе из реактора, путем фильтрации газового потока через нитроцеллюлозный фильтр с диаметром пор 0,45 мкм (Millipore Corp). Образцы представляют собой тонкие сетки, состоящие из хаотичных пучков ОУНТ с длинами ~1-5 мкм, диаметры ОУНТ ~1-2 нм (см. рисунок 1). Полученная сетка ОУНТ при необходимости также может быть перенесена на любую поверхность или подложку путем прижатия с помощью пресса.

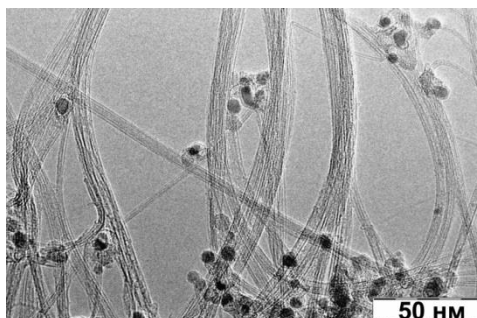


Рисунок 1. ПЭМ-микрофотография ОУНТ

Методом КРС (комбинационного рассеяния света) была произведена регистрация спектров для сетки ОУНТ при помощи рамановского спектрометра Horiba LabRAM HR 800. Данный метод является широко применяемым и неразрушающим для исследования структурных характеристик углеродных наноматериалов.

На рис. 2 представлены измеренные при длине волны возбуждающего света 633 нм КРС-спектры. Измеренные спектры имеют ряд характерных для ОУНТ областей, таких как RBM-полоса (радиальные дыхательные моды) и тангенциальные G- и D-моды. RBM-полоса расположена в интервале 100–300 см<sup>-1</sup>; G- и D-полоса, обусловленная колебаниями атомов углерода в плоскости графенового слоя, имеют максимум соответственно при 1592 и 1312 см<sup>-1</sup>.

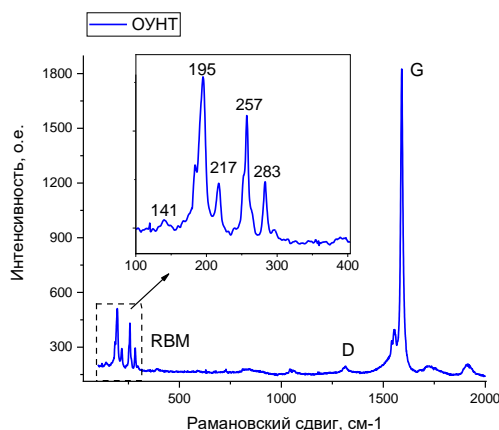


Рисунок 2. КР-спектр ОУНТ, полученных аэрозольным CVD-методом

По положению RBM-пиков можно оценить диаметры в пучках ОУНТ согласно выражению:

$$\omega_{RBM} = \frac{A}{d_t} + B, \quad (1)$$

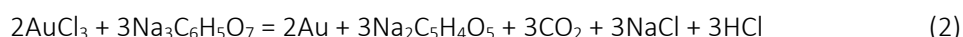
где  $A = 234 \text{ см}^{-1}$ ,  $B = 10 \text{ см}^{-1}$  [7]. Пики в RBM-полосе наблюдаются при частотах 141 см<sup>-1</sup>, 195 см<sup>-1</sup>, 217 см<sup>-1</sup>, 257 см<sup>-1</sup> и 283 см<sup>-1</sup>, что соответствует ОУНТ с диаметрами 1,8 нм, 1,3 нм, 1,1 нм, 0,95 нм и 0,86 нм соответственно.

Отношение интенсивностей D- и G- пиков ( $I_D/I_G$ ) для ОУНТ составляет ~0,1, что говорит о высоком качестве ОУНТ, получаемых аэрозольным CVD-методом.

**Получение гидрозоля НЧ золота**

В качестве тестовых растворов для оценки эффективности полученных фильтров были приготовлены гидрозолы наночастиц золота. Золи наночастиц благородных металлов являются весьма эффективным средством для оценки качества фильтрации ввиду наличия у них характерных спектров оптического поглощения, зависящих от размеров наночастиц в золе и их концентрации, что обусловлено плазмонным резонансом.

Для получения гидрозоля наночастиц золота использовался цитратный метод: в кипящий раствор золотохлористоводородной кислоты ( $\text{HAuCl}_4$ ) объемом 20 мл с концентрацией 0,001 М добавляли 2 мл 1%-го 0,039 М раствора цитрата натрия ( $\text{Na}_3\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7$ ). Затем продолжали кипятить и непрерывно интенсивно перемешивать раствор до появления рубиново - красной окраски. Далее раствор охлаждали до комнатной температуры и выдерживали его еще 10–15 минут до окончательного созревания. Отличительной особенностью цитратного метода является то, что цитрат-ион выступает в качестве стабилизатора и восстановителя, поэтому его концентрация играет важную роль. Реакция идет по следующему уравнению, если принять, что окисление цитрата идет до ацетондикарбоксилата и углекислоты [8]:



### Сборка фильтров на основе сетки ОУНТ и фильтрация

Фильтр состоит из трех слоев: первый слой – фильтровальная бумага, которая выступала в качестве каркаса для предотвращения механических повреждений при фильтрации, второй слой – гидрофильный, универсальный нитроцеллюлозный фильтр с диаметрами пор 0,45 мкм (Millipore Corp), третий слой – сетка ОУНТ (см. рисунок 3). Используемый аэрозольный CVD-метод для получения сеток ОУНТ позволяет получать по сути уже готовые фильтры, состоящие из пористой подложки (нитроцеллюлозный фильтр) и сетки ОУНТ [9]. Таким образом, исключается стадия диспергирования нанотрубок для получения тонких слоев, состоящих из УНТ, так как тонкая сетка ОУНТ формируется в процессе синтеза. Далее такую трехслойную конструкцию необходимо обработать диметилсульфоксидом (ДМСО) ( $\text{C}_2\text{H}_6\text{OS}$ ) в объеме 2 мл и оставить на 15 минут. Под действием ДМСО нитроцеллюлоза начнет растворяться и сетка ОУНТ пропитается растворенной нитроцеллюлозой в ДМСО. Затем данный фильтр необходимо аккуратно поместить в дистиллированную воду, чтобы вымыть излишки ДМСО, таким образом, нитроцеллюлозный фильтр окажется модифицирован ОУНТ. После данной обработки фильтр с сеткой ОУНТ позволит пропускать любой водный раствор.

Следует отметить, что обработка фильтра ДМСО производилась с целью улучшения смачиваемости фильтра, ввиду гидрофобности УНТ. Кроме того такая обработка обеспечивает более прочное закрепление сетки УНТ на поверхности подложки.

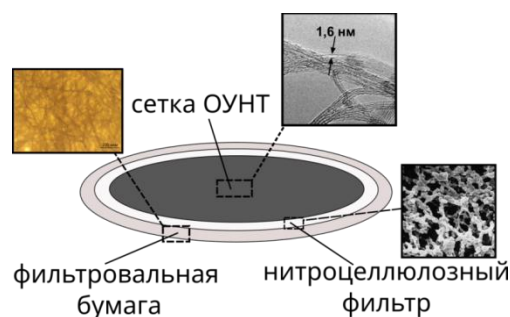


Рисунок 3. Схема трехслойного фильтра с сеткой ОУНТ

Для фильтрации использовалась колба Бунзена подключенная к водоструйному насосу. Сверху на отверстие колбы помещался трехслойный фильтр с ОУНТ и производили фильтрацию, путем равномерного распределения капель гидрозоля НЧ Au. Создаваемое водоструйным насосом разрежение, способствовало прохождению гидрозоля НЧ Au через фильтр. Раствор отфильтровывался однократно. Регистрация спектров гидрозолей проводилась на

спектрофотометре СФ-56 в диапазоне от 400-700 нм в сравнении с дистиллированной водой. Для измерения все растворы были разбавлены 1:6.

Диаметр НЧ золота оценивали по микрофотографиям, полученных на просвечивающем электронном микроскопе JEM JEOL 2100. Оценка распределения по размерам и расчет среднего диаметра со среднеквадратичным отклонением НЧ золота производился по 20 ПЭМ-микрофотографиям с общим количеством наночастиц 678 с помощью программы Image J.

#### Основные результаты

Оценка эффективности фильтров на основе ОУНТ осуществлялась путём сравнения спектров оптического поглощения золя НЧ золота до и после пропускания через фильтр. Измеренные спектры оптического поглощения гидрозоль НЧ Au до и после фильтрации представлены на рисунке 4. На кривой оптического поглощения для исходного гидрозоль НЧ Au наблюдается максимум в области  $\lambda = 532$  нм. Появление пика плазмонного пика в данной области спектра обусловлено наличием наночастиц золота.

Для оценки вклада подложки в фильтрацию, состоящей из фильтровальной бумаги и нитроцеллюлозного фильтра без ОУНТ, также пропитанной ДМСО и промытой дистиллированной водой, пропускали исходный гидрозоль НЧ Au. Как видно из рисунка 3, интенсивность плазмонного пика в области 532 нм уменьшается в 3 раза после фильтрации через подложку, что обусловлено пропорциональным уменьшением концентрации НЧ Au.

На графике оптического поглощения для гидрозоль, который прошел через фильтр с ОУНТ, плазмонный пик фактически исчезает (см. рисунок 4), что свидетельствует об отсутствии или достаточно низкой концентрации НЧ Au.

После фильтрации через фильтр с ОУНТ, цвет гидрозоль НЧ Au стал прозрачным (см. рисунок 5), следовательно, данный трехслойный фильтр достаточно эффективен.

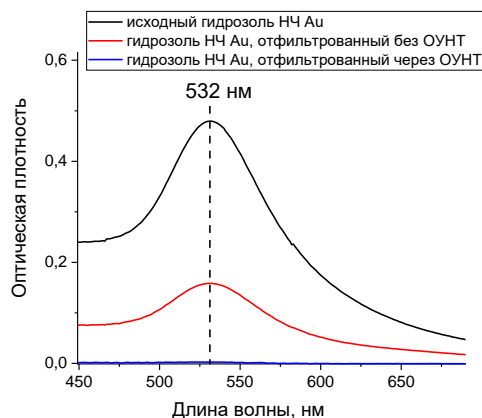


Рисунок 4. Спектры поглощения гидрозоль наночастиц Au: исходного (черная кривая), отфильтрованного через фильтр из фильтровальной бумаги и нитроцеллюлозного фильтра без ОУНТ (красная кривая), отфильтрованного через фильтр с ОУНТ (синяя кривая)



Рисунок 5. Гидрозоль НЧ Au: 1 — исходный, 2 — отфильтрованный, через фильтр с ОУНТ

Проведенные исследования методом ПЭМ исходного гидрозоль показывают наличие наночастиц Au сферической формы (см. рисунок 6) с диаметрами в диапазоне  $\sim 20-80$  нм ( $d_{cp} = 44 \pm 6$  нм). По гистограмме распределения НЧ Au видно, что в гидрозоль преобладают наночастицы Au с диаметром  $\sim 40$  нм (см. рисунок 7).

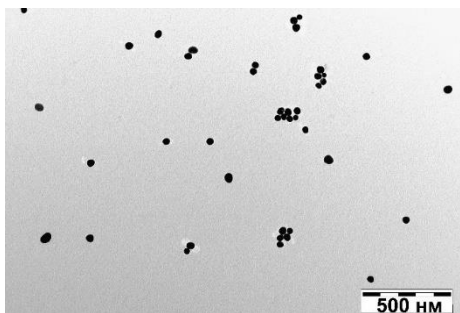


Рисунок 6. ПЭМ-микрофотография гидрозоля НЧ Au

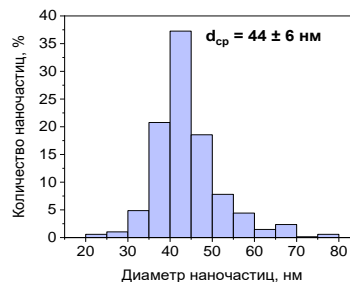


Рисунок 7. Гистограмма распределения исходного гидрозоля НЧ Au по размерам

После фильтрации гидрозоля НЧ Au через фильтр с ОУНТ, по данным ПЭМ видно, что встречаются только единичные сферические наночастицы Au с диаметрами  $\sim 40$  и  $\sim 50$  нм, соответственно (см. рисунок 8). То есть, после фильтрования через фильтр с ОУНТ их концентрация достаточно низкая, что согласуется с данными абсорбционной спектроскопии.

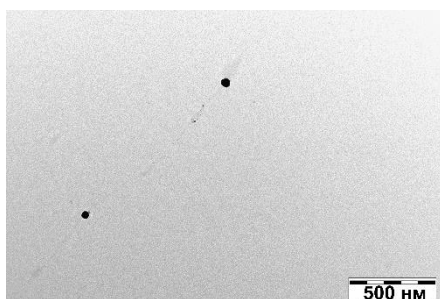


Рисунок 8. ПЭМ-микрофотография гидрозоля НЧ Au после фильтрации через фильтр с ОУНТ

В работе представлены результаты исследования свойств фильтров на основе сеток из ОУНТ, полученных аэрозольным методом с использованием этилового спирта и ферроцена. Предложен простой способ изготовления фильтров на основе сеток ОУНТ для водных растворов, что может допускать дальнейшее масштабирование и широкое применение.

*Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FZSR-2020-0007 в рамках государственного задания № 075-03-2020-097/1).*

*Авторы выражают благодарность м.н.с. Руссакову Д.М. за помощь в проведении ПЭМ измерений и м.н.с. Чирковой И.М. за помощь в проведении исследований методом КРС.*

## БИБЛИОГРАФИЯ

1. Kus-Liśkiewicz M. Biocompatibility and Cytotoxicity of Gold Nanoparticles: Recent Advances in Methodologies and Regulations / M. Kus-Liśkiewicz, P. Fickers, I. Ben Tahar // International Journal of Molecular Sciences. – 2021. – Vol. 22. – № 20. – P. 10952. – DOI 10.3390/ijms222010952.
2. Sani A. Toxicity of gold nanoparticles (AuNPs): A review / A. Sani, C. Cao, D. Cui // Biochemistry and Biophysics Reports. – 2021. – Vol. 26. – P. 100991. – DOI 10.1016/j.bbrep.2021.100991.
3. Carnovale C. Identifying Trends in Gold Nanoparticle Toxicity and Uptake: Size, Shape, Capping Ligand, and Biological Corona / C. Carnovale, G. Bryant, R. Shukla, V. Bansal // ACS Omega. – 2019. – Vol 4. – № 1. – P. 242-256. – DOI 10.1021/acsomega.8b03227.
4. Marcelino M.Y. Synthesis and characterization of gold nanoparticles and their toxicity in alternative methods to the use of mammals / M.Y. Marcelino, F. A. Borges, L. Scorzoni et al. // Journal

of Environmental Chemical Engineering. – 2021. – Vol. 9. – № 6. – P. 106779. – DOI 10.1016/j.jece.2021.106779

5. Shandakov S.D. Controllable growth of single-walled carbon nanotubes by ethanol-ferrocene aerosol method / S.D. Shandakov, M.S. Rybakov, A. V. Kosobutsky et al. // Nanotechnologies in Russia. – 2012. – Vol. 7, № 7-8. – P. 370-376.

6. Shandakov S.D. Effect of gaseous and condensate products of ethanol decomposition on aerosol CVD synthesis of single-walled carbon nanotubes / S.D. Shandakov, A. V. Kosobutsky, M.S. Rybakov et al. // Carbon. – 2018. – Vol. 126. – P. 522-531. – DOI 10.1016/j.carbon.2017.10.064.

7. Milnera, M. Periodic resonance excitation and intertube interaction from

8. quasicontinuous distributed helicities in single-wall carbon nanotubes / M. Milnera, J. Kürti, M. Hulman, H. Kuzmany // Physical Review Letters. – 2000. – Vol. 84, № 6. – P. 1324-1327. DOI 10.1103/PhysRevLett.84.1324.

9. Богатырев, В. А. Методы синтеза наночастиц с плазмонным резонансом / В. А. Богатырев, Л. А. Дыкман, Н. Г. Хлебцов. – Саратов: Саратов. гос. ун-т, 2009. – 35 с.

10. Lomakin, M. V. Filters Based on Carbon Nanotube Networks for Nanoparticle Deposition / M. V. Lomakin, A.I. Vershinina, S.D. Shandakov et al. // Russian Physics Journal. – 2016. – Vol. 59. – № 6. – P. 907-910. DOI –10.1007/s11182-016-0852-2.

\*\*\*\*\*

## NETWORK STRUCTURES BASED ON CARBON NANOTUBES AS A MATERIAL FOR FILTERING

Vershinina A.I., Zvidentsova N.S., Gordaya O.R., Shandakov S.D.

*The work qualitatively assessed the efficiency of filtration of an aqueous sol of gold nanoparticles (NPs) through a filter based on a network of single-walled carbon nanotubes (SWCNTs) obtained by the aerosol CVD method using ethanol and ferrocene. A simple method has been proposed for the manufacture of three-layer filters based on SWCNT networks for aqueous solutions with pre-treatment with dimethyl sulfoxide in order to improve the wettability of the filter. Using transmission electron microscopy (TEM), the morphology was studied and the average diameter of gold NPs was determined. The effect of SWCNTs on the filtration efficiency of an aqueous sol of gold NPs with an average diameter of  $44\pm 6$  nm was studied using absorption spectroscopy and TEM. It has been shown that filters based on SWCNT networks can act as filters for nanoparticles.*

**Keywords:** carbon carbon nanotubes, single-walled carbon nanotubes, filtration, nanoparticles, absorption spectrum of Au nanoparticle hydrosol

### Сведения об авторах:

#### Вершинина Анна Игоревна

Младший научный сотрудник лаборатории углеродных наноматериалов научно-инновационного управления, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Кемеровский государственный университет», г. Кемерово, Россия

E-mail: [annaver89@mail.ru](mailto:annaver89@mail.ru)

SPIN-код: 3645-9654

#### Звиденцова Надежда Семеновна

К.х.н, доцент, кафедра общей и экспериментальной физики, Институт фундаментальных наук, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Кемеровский государственный университет», г. Кемерово, Россия

E-mail: [pluskova@kemsu.ru](mailto:pluskova@kemsu.ru)

SPIN-код: 6854-3856

**Гордая Олеся Руслановна**

Аспирант, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Кемеровский государственный университет», г. Кемерово, Россия

E-mail: [mikranscha@mail.ru](mailto:mikranscha@mail.ru)

SPIN-код: 5273-4137

**Шандаков Сергей Дмитриевич**

Д.ф.-м.н., доцент, главный научный сотрудник лаборатории углеродных наноматериалов научно-инновационного управления, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Кемеровский государственный университет», г. Кемерово, Россия

E-mail: [sergey.shandakov@gmail.com](mailto:sergey.shandakov@gmail.com)

SPIN-код: 9323-7596

# РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ И ОПТИМИЗАЦИИ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА

---

Заитов Руслан Ильдарович,  
Дукаев Магомед Ширваниевич,  
Умархаджиев Магомед-Хабиб Русланович

*Научная статья рассматривает актуальные методы машинного обучения для предсказания химических реакций и оптимизации условий синтеза. Сфера химического синтеза является ключевой в науке и промышленности, и внедрение методов машинного обучения представляет собой инновационный подход к решению сложных проблем в этой области. Статья обсуждает применение графовых нейронных сетей, рекуррентных нейронных сетей и генеративных моделей для предсказания реакций с высокой точностью. Также рассматриваются методы оптимизации условий синтеза, основанные на машинном обучении, с акцентом на предсказании оптимальных параметров реакции.*

**Ключевые слова:** машинное обучение, химический синтез, предсказание реакций, рекуррентные нейронные сети, алгоритмы.

---

Химический синтез, как важнейшая область химии, постоянно стремится к разработке эффективных методов получения новых соединений с желаемыми свойствами. Однако, из-за сложности молекулярных взаимодействий и множества факторов, определение оптимальных условий синтеза и предсказание результатов химических реакций остаются сложными задачами.

В последние десятилетия машинное обучение (МО) привнесло революционные изменения в подходы к решению задач химического синтеза. Применение методов машинного обучения для предсказания результатов реакций и оптимизации условий синтеза стало перспективным направлением исследований. В данной статье рассматриваются последние достижения в области разработки методов машинного обучения в контексте химического синтеза, а также их применимость к прогнозированию химических реакций и оптимизации условий синтеза. Важным аспектом исследований является объединение экспертных знаний в химии с высокоточными методами машинного обучения для создания интегрированных решений, способных революционизировать подходы к химическому синтезу.

В современных исследованиях предсказания химических реакций, ключевым аспектом является использование обширных баз данных, содержащих информацию о разнообразных реакциях. Эти данные включают в себя молекулярные структуры, условия реакций, и конечные продукты. Методы глубокого обучения, такие как графовые нейронные сети (GNN) и рекуррентные нейронные сети (RNN), широко применяются для анализа и обработки молекулярных данных [3, с. 99].

Графовые нейронные сети позволяют учесть топологическую структуру молекул и их взаимодействие, что делает их мощным инструментом для предсказания реакций. Рекуррентные нейронные сети, с другой стороны, обрабатывают последовательности данных, что особенно важно для моделирования химических реакций, где важна последовательность взаимодействия атомов.

Графовые нейронные сети используют различные методы для кодирования информации о молекулах. Одним из широко применяемых методов является Graph Convolutional Network (GCN), который обобщает свертки на графах. Этот метод позволяет учитывать информацию о соседних атомах и связях в молекуле, создавая уникальное представление для каждого атома.

В процессе обучения, графовые нейронные сети применяют методы передачи информации по графу, что позволяет модели учиться на основе контекста каждого атома и его окружения. Это важно для предсказания реакций, где взаимодействие различных частей молекулы играет критическую роль.

Графовые нейронные сети обладают значительными преимуществами в предсказании химических реакций, включая способность обработки графовых структур и учет контекста атомов. Однако, вызовы включают в себя необходимость в больших объемах разнообразных данных для обучения, а также сложность интерпретации полученных результатов.

С использованием графовых нейронных сетей, исследователи активно стремятся улучшить точность предсказания химических реакций, открывая новые горизонты в области химического синтеза и дизайна новых молекул [1, с. 102].

Принцип работы графовых нейронных сетей (GNN) можно объяснить с использованием математических формул, которые описывают процессы кодирования и передачи информации в графах. Давайте рассмотрим базовый метод Graph Convolutional Network (GCN) для примера.

### 1. Представление графа

Предположим, у нас есть граф  $G=(V,E)$ , где  $V$  - множество узлов (атомов), а  $E$  - множество ребер (связей). Каждый узел  $v$  имеет свой признаковый вектор  $h_v$ , представляющий его химические свойства.

### 2. Аффинное преобразование и агрегация

Основная идея GCN заключается в том, чтобы обновлять представления узлов с учетом их соседей. Это можно выразить следующим образом:

$$h'_v = (\sum_{u \in N(v)} |N(v)|^{-1} \cdot h_u) \cdot W$$

Где:

- $h'_v$  - новое представление узла  $v$ ,
- $N(v)$  - множество соседей узла  $v$ ,
- $\sigma$  - нелинейная активационная функция (например, ReLU),
- $W$  - матрица весов, которая обучается в процессе обучения.

Это уравнение описывает аффинное преобразование признаков соседей и текущего узла, а затем агрегацию по всем соседям.

### 3. Итеративный процесс

Обычно GCN применяются итеративно для улучшения представления узлов в графе. После  $K$  итераций, новое представление узла  $v$  ( $h_{vK}$ ) может быть выражено как:

$$h_{vK} = (\sum_{k=1}^K \sum_{u \in N(v)} |N(v)|^{-1} \cdot h_{u,k-1}) \cdot W_k$$

Где  $W_k$  - матрица весов на  $k$ -й итерации.

Таким образом, через несколько итераций GCN учитывает информацию о структуре графа и обновляет представления узлов, что делает его мощным инструментом для анализа и обработки графовых данных, таких как молекулярные структуры.

Рекуррентные Нейронные Сети (RNN) представляют собой класс нейронных сетей, спроектированный для работы с последовательными данными и обнаружения зависимостей во времени. Эта архитектура нейронной сети имеет важное применение в анализе последовательностей, таких как тексты, временные ряды, и, в контексте химических исследований, структуры молекул.

### Основные компоненты RNN

1. **Рекуррентные Связи:** Основной особенностью RNN являются рекуррентные связи между нейронами, которые позволяют информации циркулировать в сети и сохранять состояние сети на протяжении последовательности входных данных. Это делает RNN способными запоминать информацию о предыдущих шагах и использовать ее для анализа последующих элементов последовательности. На каждом временном шаге RNN получает входные данные и обновляет свое скрытое состояние, используя как текущие входные данные, так и информацию из предыдущего временного шага. Это позволяет модели учитывать контекст и последовательные



зависимости в данных, что особенно полезно в анализе последовательностей, таких как тексты или структуры молекул в химических реакциях [9, с. 50].

Однако, рекуррентные связи могут столкнуться с проблемой затухающих градиентов или, наоборот, взрывающихся градиентов в процессе обратного распространения ошибки. Это может затруднить эффективное обучение модели на длинных временных последовательностях. Для преодоления этой проблемы были разработаны улучшенные архитектуры, такие как долгая краткосрочная память (LSTM) и gated recurrent units (GRU).

LSTM и GRU представляют собой развитие рекуррентных связей, которые специально разработаны для более эффективного управления информацией на длинных временных интервалах. Они включают дополнительные механизмы (ворота), которые регулируют поток информации через сеть, помогая бороться с проблемой затухающих и взрывающихся градиентов.

В контексте предсказания химических реакций, рекуррентные связи в RNN могут эффективно моделировать взаимодействия атомов и связей в молекулах, что делает их мощным инструментом для анализа структурных зависимостей. Их способность к учету контекста и последовательных паттернов делает их особенно подходящими для решения задач в области химического синтеза и предсказания результатов реакций [10, с. 44].

Рекуррентные связи остаются ключевым элементом в эволюции нейронных сетей и продолжают привлекать внимание исследователей в контексте разработки более эффективных и точных моделей для анализа временных последовательностей в различных областях науки, включая химию.

Принцип работы рекуррентных нейронных сетей (RNN) можно объяснить с использованием математических формул. Давайте введем несколько основных обозначений:

- $x_t$  - входной вектор на временном шаге  $t$ .
- $h_t$  - скрытое состояние на временном шаге  $t$ .
- $W_{hx}$ ,  $W_{hh}$ ,  $W_{hy}$  - матрицы весов для входных данных, скрытых состояний и выходных данных соответственно.
- $b_h$  и  $b_y$  - векторы смещения для скрытых состояний и выходных данных соответственно.
- $f$  - функция активации.

Принцип работы RNN можно описать следующим образом:

Обновление скрытого состояния:  $h_t = (W_{hh}h_{t-1} + W_{hx}x_t + b_h)$

Это уравнение описывает, как новое скрытое состояние  $h_t$  обновляется на основе предыдущего скрытого состояния  $h_{t-1}$ , текущего входного вектора  $x_t$  и матриц весов  $W_{hh}$  и  $W_{hx}$ , а также вектора смещения  $b_h$ . Функция активации  $f$  вводится для внесения нелинейности и улавливания сложных зависимостей.

Получение выхода:  $y_t = W_{hy}h_t + b_y$

Здесь  $y_t$  представляет собой выходной вектор на временном шаге  $t$ , который зависит от текущего скрытого состояния  $h_t$ , матрицы весов  $W_{hy}$  и вектора смещения  $b_y$ .

Весь процесс обновления скрытого состояния и получения выхода повторяется для каждого временного шага в последовательности данных.

Эти уравнения демонстрируют, как RNN сохраняет информацию из предыдущих шагов и использовать ее для обработки последующих элементов последовательности. Однако, важно отметить, что стандартные RNN могут сталкиваться с проблемой затухающих градиентов, и для борьбы с этими проблемами были разработаны более сложные архитектуры, такие как LSTM и GRU [9, с. 243].

**2. Входные и Выходные Слои:** Как и в других типах нейронных сетей, RNN имеют входной слой для приема данных и выходной слой для генерации предсказаний или выходных данных. Входной слой RNN играет ключевую роль в приеме последовательных данных. Каждый элемент последовательности, будь то атом, символ или другой временной шаг, представляется в виде входного вектора. Эти вектора составляют входные данные для каждого временного шага, что позволяет сети анализировать последовательность пошагово.

Одним из методов представления входных данных является использование векторного кодирования, где каждый уникальный элемент в последовательности представляется

уникальным вектором. Это позволяет сети учесть зависимости между различными элементами и их взаимодействиями.

На выходном слое RNN генерируются предсказания или заключения на основе анализа последовательности. В зависимости от конкретной задачи, выходной слой может иметь различные конфигурации. Например, в задачах классификации молекулярных реакций, выходной слой может быть настроен для предсказания класса реакции. Для задач, связанных с химическим синтезом, выходной слой может представлять собой последовательность предсказанных атомов или связей в реакции. Это предоставляет информацию о том, какие изменения произойдут в структуре молекулы в результате реакции.

3. **Скрытый Слой:** В RNN присутствует скрытый слой, который содержит рекуррентные нейроны. Эти нейроны играют решающую роль в сохранении и передаче информации во времени.

RNN обрабатывают последовательные входные данные шаг за шагом. На каждом шаге они принимают новый элемент последовательности и обновляют своё внутреннее состояние, учитывая предыдущие элементы. Это позволяет RNN учиться находить временные зависимости в данных.

Химический синтез, как многокомпонентный и многопараметровый процесс, требует тщательной оптимизации условий реакции для достижения высокой степени конверсии и выхода продукта. В данном разделе рассматриваются современные методы машинного обучения, применяемые для оптимизации условий синтеза.

Одним из подходов является использование алгоритмов оптимизации для нахождения оптимальных параметров реакции. Генетические алгоритмы, методы оптимизации суррогатной модели и другие эволюционные методы позволяют систематически исследовать множество условий и находить оптимальные комбинации, улучшая выход реакции [2, с. 22].

Генетические алгоритмы (ГА) представляют собой эволюционный метод оптимизации, вдохновленный процессами естественного отбора в природе. В контексте оптимизации условий синтеза, генетические алгоритмы создают популяцию "генетических" представлений различных наборов условий реакции. Путем кроссинговера и мутаций, алгоритм эволюционирует популяцию, приближаясь к оптимальным условиям синтеза. Этот процесс повторяется до достижения заданных критериев сходимости или заданного числа итераций. Генетические алгоритмы (ГА) базируются на принципах естественного отбора и генетики. Они являются эволюционным методом оптимизации, использующим понятия генов, хромосом и популяций для эмуляции процессов биологической эволюции. Процесс оптимизации осуществляется через генетические операторы: селекцию, кроссинговер и мутацию.

Принципы работы:

1. Представление хромосомы: Каждый индивид (возможный набор условий реакции) представляется хромосомой, состоящей из генов (параметров). Например, если у нас есть  $N$  параметров, то хромосома может быть представлена в виде вектора длиной  $N$ .

Хромосома: [ген1,ген2,...,ген] $[$ ген1,ген2,...,ген $N]$

2. Функция приспособленности (целевая функция): Оценочная функция, измеряющая "приспособленность" индивида. В контексте синтеза, это может быть выход продукта, энергия активации и т.д.

Целевая функция: (хромосома) $f$ (хромосома)

3. Инициализация популяции: Начальная группа индивидов (популяция) создается случайным образом.

4. Селекция: Индивиды с более высокой приспособленностью имеют больше шансов быть выбранными для создания следующего поколения. Это осуществляется на основе их значения целевой функции.

Вероятность выбора индивида  $i$ :  $=\sum P(i)=\sum f(j)f(i)$

5. Кроссинговер: Процесс обмена генетической информацией между двумя родителями для создания потомства. Это может быть выполнено различными способами, например, одноточечным или многоточечным кроссинговером.

6. Мутация: С вероятностью мутации гены индивида изменяются случайным образом. Это позволяет внести случайные изменения в популяцию.

7. Вероятность мутации гена  $i$ : = вероятность мутации  $P(i)$  = вероятность мутации

8. Эволюция: После выполнения селекции, кроссинговера и мутации формируется новое поколение. Процесс эволюции повторяется до достижения критерия остановки (например, достижения определенного значения целевой функции или превышения числа итераций).

Генетические алгоритмы успешно применяются в оптимизации условий синтеза, где множество параметров может быть сложно оптимизировано методами прямого поиска. Использование ГА позволяет эффективно исследовать пространство параметров, стремясь к оптимальным условиям химического синтеза.

Методы оптимизации суррогатной модели представляют собой эффективный подход к нахождению оптимальных условий синтеза, основанный на использовании математических моделей, приближающих сложные зависимости между параметрами реакции и целевой функцией. Развитие высокоточных суррогатных моделей, таких как гауссовские процессы и нейронные сети, сделали этот метод более привлекательным для химиков и инженеров [5, с. 49].

Гауссовские процессы (GP) представляют собой мощный метод аппроксимации неизвестной функции. Они обеспечивают не только предсказания средних значений, но и оценки неопределенности, что является критическим аспектом при принятии решений в условиях неопределенности. Гауссовские процессы могут эффективно использоваться для оптимизации суррогатной модели, адаптируясь к изменениям формы целевой функции.

Применение нейронных сетей в качестве суррогатных моделей становится все более популярным. Глубокие нейронные сети обладают способностью обучаться сложным нелинейным зависимостям, что особенно полезно в случае химических систем с множеством переменных. Использование нейронных сетей позволяет создавать более гибкие модели, способные адаптироваться к различным типам реакций.

Применение нейронных сетей в методах оптимизации суррогатной модели основано на их способности обучаться сложным, нелинейным зависимостям в данных. Ниже представлено, как нейронные сети используются в рамках формального определения:

Пусть у нас есть набор данных об условиях синтеза и соответствующих значениях целевой функции, обозначенных как  $D = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^N$ , где  $x_i$  - вектор параметров реакции,  $y_i$  - значение целевой функции.

Нейронная сеть может быть представлена как функция  $f_{\vartheta}(x)$ , где  $\vartheta$  - параметры (веса и смещения) нейронной сети. Обучение нейронной сети заключается в оптимизации параметров  $\vartheta$  с использованием обучающего набора данных  $D$ . Это выполняется путем минимизации функции потерь  $L(\vartheta)$ , которая измеряет разницу между предсказанными значениями и фактическими значениями целевой функции.

Математически, обучение нейронной сети выполняется путем решения задачи оптимизации:

$$\min_{\vartheta} L(\vartheta) = \min_{\vartheta} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N L(f_{\vartheta}(x_i), y_i)$$

где  $L$  - функция потерь, такая как среднеквадратичная ошибка (MSE) или абсолютная ошибка.

После обучения нейронной сети может быть использована в качестве суррогатной модели для оптимизации условий синтеза. Например, в методах оптимизации, основанных на градиенте, градиенты целевой функции могут быть получены путем дифференцирования выходов нейронной сети по параметрам реакции. Это позволяет использовать методы градиентного спуска или стохастического градиентного спуска для поиска оптимальных параметров.

Получается, нейронные сети, взятые в качестве суррогатных моделей, предоставляют гибкий и мощный инструмент для оптимизации условий синтеза, способный улавливать сложные зависимости в данных и обобщать их для прогнозирования оптимальных параметров реакции.

Важным аспектом методов оптимизации суррогатной модели является активное обучение. Этот процесс включает в себя систематическое улучшение суррогатной модели, например, с добавлением новых данных там, где существующая модель показывает низкую точность. Активное обучение помогает снизить количество экспериментов, требуемых для достижения высокой точности модели.

Суррогатные модели часто интегрируются с алгоритмами оптимизации, такими как алгоритмы глобальной или локальной оптимизации. Это позволяет совмещать преимущества точных методов оптимизации с эффективностью суррогатных моделей, создавая баланс между точностью и вычислительной эффективностью [7, с. 105].

Методы оптимизации суррогатной модели успешно применяются в химической промышленности для оптимизации процессов синтеза и снижения затрат на эксперименты. Их использование улучшает эффективность исследований и разработок, сокращая временные и финансовые затраты на получение оптимальных условий синтеза.

Одной из перспектив развития является создание гибридных моделей, объединяющих различные подходы машинного обучения. Комбинирование графовых нейронных сетей, рекуррентных сетей и методов обучения с подкреплением может значительно улучшить точность предсказаний химических реакций. Интеграция различных типов нейронных сетей и алгоритмов машинного обучения может компенсировать их индивидуальные ограничения. Например, комбинирование графовых нейронных сетей, способных улавливать структурные особенности молекул, с рекуррентными сетями, способными учитывать временные зависимости в химических процессах, может привести к более полным и универсальным моделям.

Преимущества и Вызовы Применения Методов Машинного Обучения в Химическом Синтезе. Преимущества:

1. **Повышенная Эффективность Синтеза:** Применение методов машинного обучения позволяет значительно увеличить эффективность процессов химического синтеза. Модели могут быстро анализировать сложные структуры молекул и предсказывать оптимальные условия реакции, что приводит к ускорению и улучшению результатов.

2. **Точное Предсказание Реакций:** Модели машинного обучения способны учиться на основе обширных наборов данных о химических реакциях, что обеспечивает точные предсказания. Это особенно важно в условиях, где необходимы высокая степень чистоты и выбороспособности продукции.

3. **Оптимизация Ресурсов:** Алгоритмы оптимизации, основанные на машинном обучении, могут помочь сократить использование ресурсов, таких как реагенты и растворители, путем предсказания оптимальных условий реакции. Это приводит к экономии материальных и финансовых ресурсов.

4. **Автоматизация Исследований:** Применение машинного обучения позволяет создавать автоматизированные системы для анализа данных и проектирования новых химических соединений. Это сокращает время, требуемое для проведения исследований и разработок.

Вызовы:

1. **Необходимость Качественных Данных:** Для успешного обучения моделей машинного обучения требуются высококачественные и разнообразные данные. Недостаток данных или их неадекватность может привести к недостаточной обученности моделей и снижению точности предсказаний.

2. **Интерпретируемость Результатов:** Модели машинного обучения, особенно глубокие нейронные сети, могут быть сложными и труднопонимаемыми. Возникает вызов в области интерпретации результатов, что важно для химиков и исследователей, желающих понять логику предсказаний модели.

3. **Проблемы Обобщения:** Некоторые модели могут сталкиваться с трудностями обобщения на новые, ранее не встречавшиеся соединения. Это может стать проблемой в условиях постоянного изменения химической палитры и новых синтетических методов.

4. **Этические и Безопасностные Аспекты:** Применение автоматизированных методов в химическом синтезе также поднимает вопросы этики и безопасности. Необходимо обеспечивать надежность моделей и предотвращать потенциальные риски, связанные с автоматизацией синтетических процессов.

Итак, применение методов машинного обучения в химическом синтезе предоставляет уникальные возможности для улучшения процессов и оптимизации результатов. Однако, для полного реализации этого потенциала, необходимо активное преодоление вызовов, связанных с

данными, интерпретацией и этикой, чтобы создать устойчивые и надежные системы химической автоматизации.

На протяжении последних лет разработка методов машинного обучения для предсказания химических реакций и оптимизации условий синтеза привела к значительным достижениям в области химии. Использование инновационных подходов, таких как графовые нейронные сети и алгоритмы оптимизации, позволяет более эффективно проводить синтез химических соединений, сокращая время и ресурсы, необходимые для этого.

Перспективы использования методов машинного обучения в химии крайне обнадеживают, и их дальнейшее развитие может привести к созданию более устойчивых и эффективных методов синтеза, открывая новые возможности для разработки инновационных материалов и применений. Совокупность знаний в области химии и машинного обучения будет служить движущей силой для преодоления текущих вызовов и формирования будущего, где синтез химических соединений станет еще более точным, быстрым и устойчивым к изменениям.

## БИБЛИОГРАФИЯ

1. Горбачев, А. Ю., & Рудницкая, Л. А. (2019). Применение методов машинного обучения в химии: обзор современных подходов. *Журнал химической теории и практики*, 17(3), 1021-1032.
2. Зайцев, А. М., & Смирнов, И. В. (2018). Исследование применения графовых нейронных сетей для предсказания химических реакций. *Журнал вычислительной химии*, 39(5), 731-740.
3. Иванов, В. С., & Петрова, Н. Н. (2020). Развитие методов оптимизации условий синтеза с использованием машинного обучения. *Химическая инженерия*, 65(8), 920-932.
4. Кузнецов, Д. С., & Соколов, А. В. (2017). Применение рекуррентных нейронных сетей для предсказания кинетики химических реакций. *Журнал физической химии*, 45(2), 245-254.
5. Макаров, В. А., & Казанцев, Н. В. (2019). Машинное обучение в химическом синтезе: новые возможности и перспективы. *Химия и жизнь*, 21(4), 56-65.
6. Николаев, В. А., & Крылов, С. Н. (2018). Глубокое обучение в химии: перспективы и вызовы. *Журнал химической информатики*, 48(7), 1450-1467.
7. Орлов, А. В., & Семенов, В. С. (2020). Исследование применения генеративных моделей для создания новых молекул. *Химические технологии*, 25(6), 743-756.
8. Павлов, И. П., & Кузнецова, О. А. (2017). Интеграция методов машинного обучения и квантово-химических расчетов в изучении химических реакций. *Журнал компьютерной химии*, 38(9), 1245-1256.
9. Смирнов, А. В., & Григорьев, С. В. (2019). Автоматизация анализа химических реакций с использованием методов машинного обучения. *Журнал химической автоматизации*, 15(4), 567-580.
10. Тихонов, А. А., & Жуков, Д. В. (2018). Роль машинного обучения в процессе оптимизации химических синтезов. *Журнал химической инженерии*, 40(6), 823-834.

\*\*\*\*\*

## DEVELOPMENT OF MACHINE LEARNING METHODS FOR PREDICTION OF CHEMICAL REACTIONS AND OPTIMIZATION OF SYNTHESIS CONDITIONS

Zaitov R.I., Dukaev M.S., Umarkhadzhiev M.-Kh. R.

*This scientific article explores current machine learning methods for predicting chemical reactions and optimizing synthesis conditions. The field of chemical synthesis is pivotal in both science and industry, and the integration of machine learning methods represents an innovative approach to addressing complex challenges in this domain. The article discusses the application of graph neural networks, recurrent neural networks, and generative models for predicting reactions with high accuracy. Additionally, optimization methods for synthesis conditions based on machine learning are examined, with a focus on predicting optimal reaction parameters.*

**Keywords:** machine learning, chemical synthesis, reaction prediction, recurrent neural networks, algorithms.

---

## Сведения об авторах:

**Зайтов Руслан Ильдарович:**

ФГБОУ ВО "Казанский Государственный энергетический университет",  
кафедра: "Энергообеспечение предприятий, строительство зданий и сооружений"  
г.Казань, Российская Федерация  
E-mail: [zaitov\\_ruslan@rambler.ru](mailto:zaitov_ruslan@rambler.ru)

**Дукаев Магомед Ширваниевич:**

преподаватель факультета среднего профессионального образования, Грозненский  
государственный нефтяной технический университет им.акад. М.Д. Миллионщикова  
г.Грозный, Российская Федерация  
E-mail: [dukaev\\_92@mail.ru](mailto:dukaev_92@mail.ru)

**Умархаджиев Магомед-Хабиб Русланович:**

ассистент кафедры «программирование и инфокоммуникационные технологии»,  
ФГБОУ ВО «Чеченский государственный университет им. А.А. Кадырова»,  
г. Грозный, Российская Федерация  
E-mail: [Umrhd@internet.ru](mailto:Umrhd@internet.ru)

## РАССЛОЕНИЕ TETRA-PAK ХИМИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

---

Иванов Захар Александрович,

Байдуров Богдан Андреевич,

Васюк Александра Евгеньевна

Научный руководитель: Есякова О.А.

*В статье рассматривается химический способ расслоения упаковочного композитного материала вида Tetra-Pak. Совместно с химическим воздействием веществ использовались дополнительные способы расслоения композитной упаковки. Расслоение достигалось путём механической и химической обработки различными кислотами разных концентраций с последующим термическим воздействием различными диапазонами температур. Произведён сравнительный анализ условий проведения опытов, а также произведён подбор наиболее эффективного реагента среди использованных в ходе множественных опытов кислот разной степени разбавления. По результатам опытов были выбраны наиболее подходящие и выгодные для разделения на слои упаковки Tetra-Pak условия. Результаты способности и скорости расслоения упаковочных материалов в разных условиях, а также при различном внешнем воздействии, приведены в виде графических зависимостей. Проанализированы полученные в ходе реакции продукты, а также приведены рекомендации по их применению далее. Кроме того, произведена оценка полученных разделённых слоёв упаковки Tetra-Pak, их изменения в ходе произведённых реакций, изменения в массе, внешние отличия. В выводе работы отражены общие результаты и эффективность проведённых опытов по разделению многослойной упаковки.*

**Ключевые слова:** переработка, композитные материалы, кислоты, расслоение, термическая обработка.

---

Проблема утилизации отходов становится все актуальнее в условиях современного развития общества. На данный момент в Российской Федерации мало развита инфраструктура рециклинга, поэтому решение данной проблемы имеет высокую степень значимости.

Согласно оценке текущего состояния экологической безопасности в России, приведенной в Стратегии [1], ежегодно образуется около 4 млрд. тонн отходов производства и потребления. Из них 50-60 млн. т составляют твердые коммунальные отходы (ТКО). По современным данным, в России только 7 % отходов от общего количества образуемого мусора подвергается промышленной переработке, 3 % подвергаются мусоросжиганию и целых 90 % ТКО оказываются на полигонах, что является одним из самых плохих показателей среди европейских стран [2].

При рассмотрении состава твёрдых коммунальных отходов можно выявить большой процент содержания композитных материалов, составляющих примерно 12% от общей массы поступающих на полигоны отходов. Подробнее состав ТКО мы можем пронаблюдать на приведённом ниже рис. 1

Учитывая весьма сложный состав отходов, поступающих на полигоны, перед детальной проработкой способа утилизации или переработки того или иного вида отхода, большое значение имеет разделение отходов на фракции, после этого приступить к переработке.

Проблема, из-за которой необходимо разделение, это невозможность переработки комплексного отхода, то есть для каждой фракции необходим собственный метод, в большинстве случаев принципиально отличающийся от метода другой фракции [3].



*Рисунок 1. Состав ТКО*

Наиболее актуальным решением на данный момент является внедрение селективного сбора отходов у источника их образования, подготовка к переработке и, соответственно, последующая передача отсортированного и подготовленного отхода на переработку утилизируемых видов отходов.

В п. 8 ст. 12 закона № 89-ФЗ установлен запрет на захоронение отходов, в состав которых входят полезные фракции, подлежащие утилизации [4].

Предмет исследования данной работы – композитная упаковка Tetra-Pak – включает в свой состав полезные фракции, такие как слой картона и алюминия. Таким образом, композитная упаковка становится видом отхода, который по закону захоронению не подлежит.

Для начала выделим определение упаковки Tetra-Pak: Tetra-Pak – это тип композитной упаковки, используемой для продуктов питания и напитков. Она состоит из нескольких слоев разных материалов, включая бумагу, полиэтилен и алюминий. Тетра Пак – это не только продукт компании Tetra-Pak, но и аналогичная упаковка от других производителей, таких как SIG, Elopak и Tralin Pak. Упаковка легкая и разработана для сохранения продукта, минимизируя ее воздействие на окружающую среду [5].

Однако в России отходы продолжают захоранивать на полигонах, нарушая этим самым множество предписаний и законов о захоронениях. В настоящее время количество полигонов постоянно возрастает, захватывая всё большие территории под своё обустройство. Почва на территориях расположения мусорных полигонов является загрязненной, посредством чего загрязняются не только плодородные слои земли, но и подземные и грунтовые воды. Загрязнение влияет не только на территорию близлежащих свалок, но и на реки, озера и мировой океан, что в конечном итоге можно считать за одну из причин тех многих экологических бедствий, с которыми мы сталкиваемся во чаще.

Опасность свалок заключается в том, что происходящие химические реакции между различными компонентами ТКО, а также биохимические процессы приводят к образованию токсических соединений и становятся источниками инфекционного заражения. Свалки подвергаются воздействию атмосферных осадков, что ведет к образованию сточных вод. Обогащенная токсическими соединениями вода проникает в грунт, где загрязняет уже грунтовые воды. Помимо химических токсических соединений, тяжелых металлов, сточные воды содержат и патогенные микроорганизмы. Фракции отходов, которые не реагируют с окружающей средой и на первый взгляд не вызывают негативных последствий, остаются в почве на протяжении долгих лет, превращая почву в непригодную как для проживания на ней, так и для сельского хозяйства.

В связи с этими факторами, принципиально важно вести работу по сокращению объемов отходов, поступающих на полигоны. Особенно это касается отходов, содержащих полезные фракции, к которым относятся композитные упаковочные материалы.

Слоистые алюминиевые упаковочные материалы – это материалы, состоящие из нескольких слоев алюминия, которые используются для упаковки различных товаров. Они широко применяются в пищевой, фармацевтической и других отраслях промышленности благодаря своим уникальным свойствам, таким как легкость, прочность и защита от воздействия внешних факторов. Слоистые алюминиевые упаковочные материалы могут быть различной толщины и конфигурации, в зависимости от требований к упаковываемому продукту. Они могут



быть однослойными или многослойными, с различными комбинациями материалов, таких как бумага, пластик, фольга и другие [6].

Такая упаковка представляет собой сложную структуру, состоящую из нескольких слоев: 75 % картона, 20 % полиэтилена, 5 % алюминия. Картон служит каркасом для пищевой упаковки. Внешний слой полиэтилена, в свою очередь, защищает картон от влаги, а внутренний слой склеивает между собой картон с алюминием. Алюминиевый слой не пропускает свет и кислород, что способствует сохранению свежести продукта внутри упаковки. Для того, чтобы алюминий не взаимодействовал с пищевым продуктом, его также покрывают полиэтиленовым слоем. Все это придает пищевой упаковке долговечность, надежность в использовании и защищает упакованные в нее продукты от внешних факторов. Из-за сложного строения переработка композитной упаковки – процесс затруднительный и требует больших ресурсов [7].

Структура композитной упаковки представлена на рис. 2

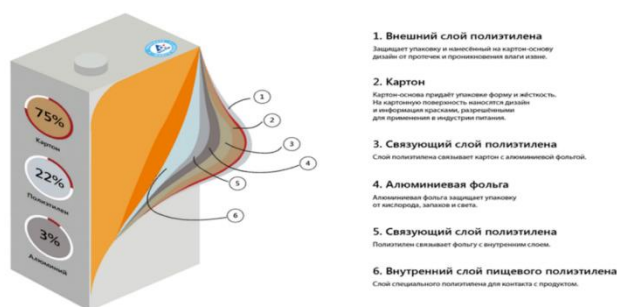


Рисунок 2. Состав и структура многослойной композитной упаковки Tetra-Pak

Как упоминалось ранее, для переработки композитной упаковки Tetra-Pak необходимо организовать селективный сбор данного отхода. Наиболее эффективным был бы сбор очищенной от пищевых остатков упаковки и необходимым, так как упаковки, загрязнённые пищевыми остатками, не подлежат к переработке. Но, к сожалению, это не представляется возможным ввиду низкого экологического воспитания общества. Поэтому в виде первого этапа переработки необходимо организовать подготовку упаковки, то есть ее промывку и сушку, полную очистку от пищевых остатков [8].

Подготовка важна ввиду использования в процессе расслоения многослойной упаковки химического метода. При наличии таких загрязнителей, как вода и остатки пищи есть вероятность протекания нежелательных реакций, которые, в свою очередь, могут изменить направление реакции или привести к изменению и отклонению от намеченного результата.

Основной целью исследования является разделение многослойной упаковки на составляющие ее компоненты путем химического и термического воздействия. Перед разделением отход необходимо измельчить для наиболее эффективного взаимодействия с реагентами при различных температурах. Стоит принять во внимание тот факт, что чем меньший размер имеет образец, тем быстрее произойдет расслоение.

Установлено, что оптимальным измельчение упаковки является до размеров 5x5 мм. Так как расслоение начинается по периметру образца, меньшая площадь способствует увеличению интенсивности расслоения в ходе реакции и внешнего воздействия на образец.

В качестве первого химического реагента использовалась азотная кислота различной концентрации: от 20 % до 60 % с шагом 10 % [9,10]. При протекании каждой реакции поддерживалась фиксированная температура: 30 °C, 40 °C, 50 °C, 60 °C. Ниже 30 °C условия не применялись в связи с увеличением продолжительности времени протекания реакции. Кроме того, при использовании сильноразбавленной кислоты реакция при комнатной температуре не происходила вовсе. Выше 60 °C температуру не использовали по причине больших потерь кислоты в виде испарений. Для получения репрезентативных данных проводили серию экспериментов в соответствии с матрицей.

Эксперимент производился следующим образом: кислота заданной концентрации заливалась в термостойкий сосуд и разогревалась до нужной температуры. По достижению

фиксированной температуры исследуемые образцы помещались в сосуд. Процесс расслоения происходил при интенсивном перемешивании, что способствует ускорению разделения слоёв.

Окончание расслоения фиксировалось визуально. На протяжении всего опыта, то есть до достижения полного расслоения, температура поддерживалась в одном значении. Методика проведения опыта фиксирована для всех опытов, проводимых в данной работе.

Для наглядности ниже в табл. 1 представлены результаты проведённой реакции при концентрации азотной кислоты, равной 20 %. Каждая последующая реакция обладала особыми условиями. Главным показателем, который был рассмотрен и по которому составлялись выводы об эффективности проведённого эксперимента, было время протекания реакции.

Таблица 1

**Знаки слоистых упаковочных материалов, подлежащих к переработке**

Температура проводимой реакции, °С	Время расслоения, мин.
30	23
40	19
50	9
60	7

Результаты первого эксперимента – расслоение Tetra-Pak азотной кислотой – представлены на рис. 3.

Каждая прямая соответствует поведению азотной кислоты в различных условиях, то есть каждая прямая показывает время расслоения композитной упаковки при изменяющейся температуре и определённой концентрации.

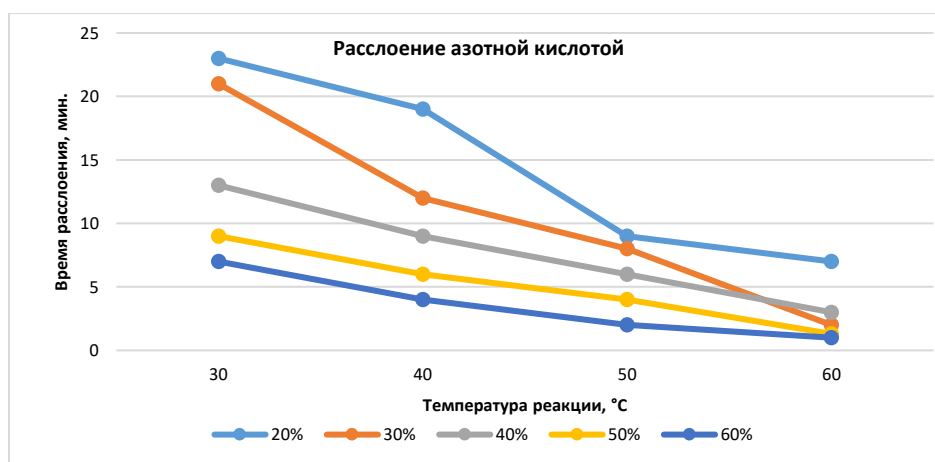
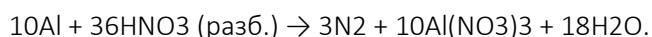


Рисунок 3. Зависимость продолжительности расслоения композитных материалов азотной кислотой от температуры

В ходе эксперимента происходит следующая химическая реакция:



Исходя из полученных результатов установлены оптимальные условия для проведения разделения слоёв упаковки с применением азотной кислоты.

Так, было определено, что при наибольшей концентрации кислоты реакция протекает за меньшее время, чем при меньших концентрациях. В свою очередь, при использовании азотной кислоты меньших концентраций необходимо проводить реакцию при повышенных температурах.

Использованная в процессе разделения отхода азотная кислота образует во время процесса дополнительный вторичный продукт в виде нитрата алюминия, который применяется в текстильной промышленности в качестве протравы при дублении кож или в качестве катализатора при очистке стоков от нефтепродуктов и т.д. Сам Tetra-Pak был полностью разделён на чистые слои. Лакокрасочный слой, нанесённый на верхний слой Tetra-Paka, был разъеден кислотой полностью.

В ходе эксперимента было выявлено, что образец упаковки, применяемый для проведения процесса расслоения, изменяет свою массу.

Далее, в таблице 2 представлены изменения массы образца композитной упаковки в ходе процесса расслоения с применением азотной кислоты с концентрацией 20 %.

Таблица 2

Изменение масс образцов композитной упаковки

Первоначальная масса образца, г.	Конечная масса образца, г.
0,0100	0,0080
0,0112	0,0100
0,2060	0,0150
0,0133	0,0106
0,0076	0,0060
0,0120	0,0106
0,0152	0,0140
0,0155	0,0137

Были проведены замеры первоначальной и конечной массы образца. За начальную массу была взята масса образца, еще не подвергшегося процессу расслоения. За конечную массу взята масса образца после расслоения, а также длительной сушки, чтобы образец не содержал влаги на момент взвешивания.

Стоит принять во внимание, что после расслоения взвешены все отдельные слои вместе.

По результатам можно сделать вывод о том, что в среднем образец теряет 20 % от своей первоначальной массы. Эти 20 % уходят на образование нитрата алюминия.

В качестве следующего реактива была применена уксусная кислота. Опыт проводился в соответствии с методикой, описанной выше. Для приготовления реагентов применялась ледяная уксусная кислота с концентрацией 100 %.

Результаты расслоения уксусной кислотой приведены на рис. 4.

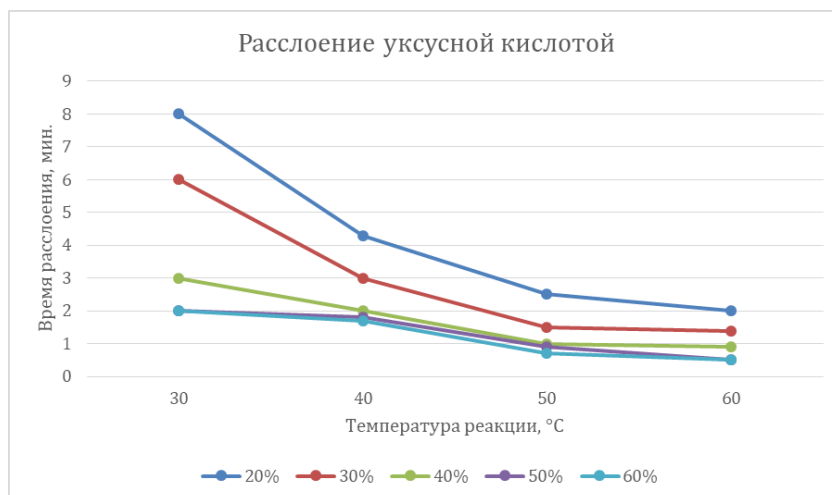


Рисунок 4. Зависимость продолжительности расслоения композитных материалов уксусной кислотой от температуры

В ходе процесса разделения произошла следующая реакция:  $Al + 3CH_3COOH = Al(CH_3COO)_3 + 3/2 H_2$ . Как мы можем увидеть, при этом образуется ацетат алюминия и выделяется элементарный водород.

Сравнив два проведенных опыта с использованием двух разных кислот, можно прийти к выводу что использование уксусной кислоты в качестве реагента для расслоения Tetra-Пака гораздо эффективнее в сравнении с азотной кислотой.

Уксусная кислота позволяет использовать реагент в менее концентрированном состоянии и при меньших температурах, чем азотная кислота.

Если рассматривать вредное воздействие кислот на человека, проводящего эксперименты по разделению композитной упаковки, особой разницы нет. Каждая из использованных кислот является опасной и вредной для человека. При проведении таких опытов необходимо, в первую очередь, не забывать о технике безопасности.

Следующим реагентом была выбрана серная кислота с концентрациями 20 %, 30 %, 40 %, 50 % и 60 %. Опыт показал, что реакция с серной кислотой проходит медленнее, чем с уксусной и азотной кислотами. Даже на первых этапах, то есть при проведении реакции серной кислоты с концентрацией 20 % при температуре 30 °C реакции длилась более 30 минут. При использовании более концентрированного раствора Tetra-Pak не разделялся вовсе. Образцы намокали и начинали расслаиваться по краям, в то время как центры образцов не подверглись даже намоканию. Слой краски, нанесенный на упаковочный материал, остался практически неповреждённым.

Можно отметить, что использование данной кислоты не рекомендовано для процесса разделения слоёв упаковок Tetra-Pak.

Ещё одной кислотой в качестве реагента для расслоения упаковок использовалась соляная кислота в трёх концентрациях: 20 %, 30 % и 40 %. Результаты эксперимента можно наблюдать на рисунке 5.

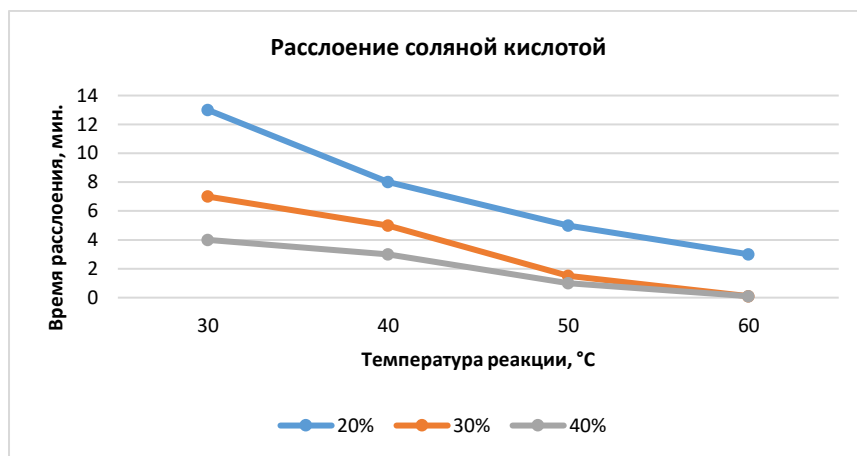


Рисунок 5. Зависимость продолжительности расслоения композитных материалов соляной кислотой от температуры

При нагревании реакция идет, образуются оксид серы (IV), сульфат алюминия и вода:  $2Al + 6H_2SO_4 \text{ (конц.)} \rightarrow Al_2(SO_4)_3 + 3SO_2 + 6H_2O$ . Реакция протекает очень быстро, расслоение проходит мгновенно, однако, при взаимодействии с кислотой происходит частичное разрушение и растворение слоёв Tetra-Paka, что ставит использование соляной кислоты в данном процессе невозможным.

Во время проведения всех опытов велся контроль массы образцов, проходивших процесс расслоения. Взвешивания образцов до реакции и после реакции, включая длительную просушку, показали, что в абсолютно каждом опыте Tetra-Pak потерял часть массы, независимо от применяемой кислоты и условий протекания реакции. Это объясняется тем, что часть алюминия перешло в образование продуктов, такие как сульфат алюминия, нитрат алюминия и так далее. Как уже было сказано выше, образцы потеряли около 20 % от своей общей массы.

В результате химико-термических процессов получают полностью разделенные слои упаковочного материала, готовые к последующей переработке, к примеру, грануляции, и вторичному использованию в качестве сырья для создания новой продукции.

Перед применением полученного сырья необходимо провести длительную и тщательную просушку. В зависимости от требований к продукции, которая будет изготовлена из данного сырья, возможны так же дополнительные методы подготовки для безопасности применения полученных слоёв в дальнейшем.

В заключении можно отметить, что наиболее подходящей кислотой для расслоения композитного упаковочного материала Tetra-Pak рекомендуется использовать уксусную кислоту средней концентрации, например, 50 % или 60 %, в режиме постоянного перемешивания.

Температурный режим будет определяться, в первую очередь, требованиями к установке по разделению слоёв. При повышенных температурах энергозатратность будет увеличиваться, но, в тоже время, разделение слоёв будет происходить быстрее.

Стоит отметить, что при масштабировании процесса расслоения многослойных упаковок химическим методом не всегда самый быстрый способ окажется самым эффективным.

Всё дело в том, что процесс расслоения композитных материалов требует точного контроля процесса, что при слишком быстром протекании реакции затруднительно. Рекомендовано завершать контакт образцов с кислотами сразу после полного отделения слоёв друг от друга.

Длительный контакт кислоты и Tetra-Pak может привести увеличенным потерям массы образцов и образованию побочных веществ. Кроме того, возможны изменения структуры и состояния материала.

Температурный режим процесса не менее важен для качества, полученного из композитной упаковки сырья. Рекомендовано не превышать установленный в данной работе диапазонов температур во избежание изменений материала.

Однако и проведение реакции при малых температурах (30 °С) обеспечивает полное разделение слоёв, но за отличающийся промежуток времени.

Если рассматривать более масштабированный процесс разделения слоёв композитной упаковки, то стоит учитывать изменение некоторых показателей. Для переработки в больших объемах бесспорно будут использоваться образцы больших размеров, чем те, которые были применены в данной работе.

Увеличение размера применяемых образцов приведет в более продолжительным процессам расслоения.

В выводе данной работы подведём значительные преимущества химического способа расслоения многослойных упаковок:

1. Экономическая эффективность: использование химического способа расслоения позволяет получить вторичные сырьевые материалы, которые могут быть использованы в производстве новых упаковочных материалов;
2. Экологическая эффективность: расслоение многослойных упаковок с помощью химических реагентов позволяет избежать сжигания или складирования таких упаковок на свалках, что снижает негативное воздействие на окружающую среду;
3. Уменьшение объема отходов: расслоение многослойных упаковок позволяет получить вторичные сырьевые материалы, что снижает объем отходов и уменьшает нагрузку на свалки;
4. Сохранение ресурсов: использование вторичных сырьевых материалов позволяет сохранить природные ресурсы, так как для их производства не требуется дополнительное использование природных ресурсов;
5. Уменьшение затрат на производство: использование вторичных сырьевых материалов позволяет снизить затраты на производство упаковочных материалов.

Важно подчеркнуть, что все использованные в эксперименте ресурсы пригодны для дальнейших использований в различных направлениях, что делает данный метод переработки наиболее безопасным среди существующих.

## БИБЛИОГРАФИЯ

1. Стратегия экологической безопасности Российской Федерации на период до 2025 года, утвержденная Указом Президента РФ. 2017. – 15 с. – Текст: непосредственный.
2. Бенин, Д. М. Негативное воздействие ТКО на окружающую среду при их складировании на объектах захоронения отходов / Д. М. Бенин, Е. С. Маркова // Инновации. Наука. Образование. – 2020. – № 18. – С. 267-277. - Текст: непосредственный.

3. Коляда, Л. Г. Проблема утилизации отходов упаковки тетра ПАК / Л. Г. Коляда, А. В. Смирнова, Е. В. Тарасюк // Качество в обработке материалов. – 2020. – № 1(12). – С. 61-63. – Текст: непосредственный.
4. Российская Федерация. Законы. Об отходах производства и потребления: Федеральный закон: [принят Государственной Думой 22 мая 1998 года: одобрено Советом Федерации 10 июня 1998 года]. – Москва: ИНФРА-М, 2021. – 151 с. – Текст: непосредственный.
5. Тихойкина, И. М. Современные требования и тенденции развития упаковки соковой продукции / И. М. Тихойкина // Образование и наука без границ: фундаментальные и прикладные исследования. – 2016. – № 4. – С. 211-215. – Текст: непосредственный.
6. Рогов, В.А. Новые материалы в машиностроении: Учеб. Пособие / В.А. Рогов, В.В. Соловьев, В.В. Копылов. – Москва: РУДН, 2008. – 324 с. – Текст: непосредственный.
7. Патент № 2681642 С2 Российская Федерация, МПК В32В 23/06, В32В 27/10, В32В 5/18. Упаковочный материал и упаковочный контейнер: № 2016151373: заявл. 28.05.2015: опубл. 11.03.2019 / Ньюман У., Альден М., Тофт Н.; заявитель Тетра Лаваль холдингз энд файнэнс С.А. – 32 с.: ил. - Текст: непосредственный.
8. Разработка комплексной технологии переработки комбинированной упаковки "Тетра-Пак" / Л. А. Иванова, А. А. Глазова, В. А. Репник [и др.] // Экология и промышленность России. – 2012. – № 12. – С. 26-29. – Текст: непосредственный.
9. Гонопольский А.А. Комплексная утилизация отходов многослойных упаковочных материалов: Автореф. ... дисс. ... канд. тех. наук. – Москва, 2011. – 122 с. – Текст: непосредственный.
10. Николайкина Н.Е., Гонопольский А.А. Рециклинг слоистых алюминированных материалов // Экология и промышленность России. – № 7, 2010. – С. 13-15. – Текст: непосредственный.

\*\*\*\*\*

#### TETRA-PACK STRATIFICATION BY CHEMICAL METHOD

Ivanov Z.A., Baidurov B.A., Vasyuk A.E.

*The article deals with the chemical method of layering a packaging composite material of the Tetra-Pak type. Together with the chemical effect of substances, additional methods of layering composite packaging were used. Delamination was achieved by mechanical and chemical treatment with various acids of different concentrations, followed by thermal exposure to different temperature ranges. A comparative analysis of the conditions of the experiments was carried out, as well as the selection of the most effective reagent among the acids of various degrees of dilution used in the course of multiple experiments. According to the results of the experiments, the most suitable and favorable conditions for the separation into layers of tetra pack packaging were selected. The results of the ability and speed of layering of packaging materials under different conditions, as well as under different external influences, are given in the form of graphical dependencies. The products obtained during the reaction are analyzed, and recommendations for their use are given below.*

**Keywords:** recycling, composite materials, acid, stratification, heat treatment.

#### Сведения об авторах:

**Иванов Захар Александрович:**

студент, Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М.Ф. Решетнева

**Байдуров Богдан Андреевич:**

студент, Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М.Ф. Решетнева

**Васюк Александра Евгеньевна:**

преподаватель,

Сибирский государственный университет науки и технологий  
имени академика М.Ф. Решетнева

**Научный руководитель: Есякова О.А.:**

к.б.н., доцент,

Сибирский государственный университет науки и технологий  
имени академика М.Ф. Решетнева

Российская Федерация, 660037, г. Красноярск

E-mail: [zaharivanov53345@gmail.com](mailto:zaharivanov53345@gmail.com)

# ЭКОЛОГИЯ

---



## ОЦЕНКА ЭКОЛОГИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ВОДЫ РЕКИ ЗИЛЬДЯР РЕСПУБЛИКИ БАШКОРТОСТАН

---

Газетдинов Ришат Ринатович,  
Абдулгафарова Гульназ Халиловна

*Статья посвящена экологическим проблемам загрязнения водных ресурсов при антропогенном воздействии. Вода является одним из наиболее ценных ресурсов нашей планеты, влияющим на качество жизни человека и экономические показатели страны. При определении качества воды важно определить ее гидрохимические показатели, в частности, кислотно-основные характеристики, жесткость, минерализацию, содержание ряда тяжелых металлов и органических соединений. Данные показатели позволяют оценить степень техногенного загрязняющего действия. Нами исследованы отдельные аналитические показатели воды реки Зильдяр, подверженной техногенному воздействию процесса нефтедобычи Исламгуловского нефтяного месторождения Республики Башкортостан. Установлены водородный показатель, общая жесткость, сухой остаток, катионно-анионный состав, концентрации тяжелых металлов, фенола и нефтепродуктов. Критического загрязнения воды реки Зильдяр не выявлено, нефтедобыча не оказывает существенного техногенного воздействия на исследованный водный ресурс.*

**Ключевые слова:** экология, вода, водородный показатель, тяжелые металлы, нефтепродукты, река Зильдяр.

---

За последние десятилетия индустриальное развитие и прорывные научные технологии привели к скачкообразному развитию человечества во всех областях его деятельности, следствием чего явилось рост населения Земли и улучшение благосостояния общества. Однако все виды деятельности человека незамедлительно привели к ухудшению экологической ситуации окружающей среды – воздуха, воды и почвы. Для решения этой проблемы необходимо законодательное закрепление охраны окружающей среды и природопользования, а также получение достоверной и полной информации о состоянии природных объектов и изучении динамики изменения их состояния. [1,2]

Экологическая оценка и контроль состояния воздуха, воды и почвы является важной и актуальной задачей для нашего общества. Вода, как основной растворитель на Земле и жизнеполагающая среда, определяет здоровье и деятельность человека и живых организмов, а также служит фактором функционирования и развития всех отраслей экономики. Круговорот воды в природе переносит практически почти все элементы и вещества из одной среды в другую. [3,4]

Исследования, направленные на выявление уровня загрязнения воды, а также разработка путей решения проблем загрязнения водных ресурсов, имеют особую актуальность. При эколого-аналитической оценке гидрохимических показателей воды важно определить ее кислотно-основные характеристики и содержание определенного перечня загрязнителей, включающего, как правило, ряд тяжелых металлов и некоторые органические соединения. Данные показатели позволяют оценить степень техногенного антропогенного воздействия на водный объект. [5,6]

Данная работа посвящена исследованию отдельных аналитических показателей воды реки Зильдяр, возможно подверженной техногенному воздействию процесса нефтедобычи Исламгуловского нефтяного месторождения Республики Башкортостан. [7] К основным факторам нефтезагрязнений относятся: грубые нарушения технологий добычи, перевозки, переработки и различные аварийные ситуации, из-за которых происходят разливы нефти, нефтепродуктов, воды, содержащей нефть. Изучение объектов окружающей среды, подверженных техногенному

воздействию, в том числе, от процесса нефтедобычи, представляет актуальную задачу современной экологии.

Зильдярь – это река в России, протекает по Миякинскому району Республике Башкортостан. Устье реки находится в 28 км по левому берегу реки Уязы в черте села Зильдярово. Длина реки составляет 13 км. Координаты 53°22'44" с. ш., 54°42'16" в. д. Водная система Уязы → Дёма → Белая → Нижнекамское водохранилище → Кама → Волга → Каспийское море.

По данным государственного водного реестра России относится к Камскому бассейновому округу, водохозяйственный участок реки – Дёма от истока до водомерного поста у деревни Бочкарёва, речной подбассейн реки – Белая. Речной бассейн реки – Кама. [8]



Рисунок 1. Карта-схема исследуемого района. Масштаб 1:1000. Примечание: 1 – место отбора проб; 2 – Исламгуловское месторождение нефти

Гидрохимические показатели природных вод южных районов Республики Башкортостан формируются под действием следующих факторов: рельеф, климат, почва, геолого-структурные условия, основные закономерности развития пресных вод в гидрогеологических комплексах, распространение пресных вод в водоносных горизонтах и комплексах. [9]

Отбор проб воды реки Зильдярь производился в июне-июле 2023 года согласно требованиям соответствующих регламентирующих документов. [10,11]

В соответствии с действующими нормативными документами в пробах воды реки Зильдярь определяли водородный показатель (рН), общую минерализацию, массовые концентрации тяжёлых металлов и некоторых органических соединений, а также органолептические свойства. [12,13]

Химические анализы проводились в лаборатории экологического мониторинга физико-химических загрязнений окружающей среды Уфимского университета науки и технологий.

В работе были использованы следующие методы исследования:

- органолептический (запах, цветность, мутность) – определена органолептической комиссией;
- потенциметрический (рН, удельная электропроводность, солесодержание) – измерения произведены с использованием рН-метра ИТ рН-150МИ;
- фотометрический (нитрат-ионы, нитрит-ионы, аммонийный азот, медь, железо) – измерения выполнены на спектрофотометре UNICO 1201;
- гравиметрический (сульфат-ионы, взвешенные вещества) – измерения выполнены на цифровых аналитических весах «A&D» GR200, для прокаливания использована лабораторная электропечь SNOL 7,2/1100;
- спектрометрический (тяжелые металлы) – измерения выполнены на атомно-абсорбционном спектрометре Квант.З.ЭТА с электротермической атомизацией и зеемановской коррекцией фонового поглощения резонансного излучения;

- титриметрический (жесткость, щелочность, хлорид-ионы) – анализы выполнены с использованием автоматического высокоточного многофункционального титратора АТП-02;
- флуориметрический (нефтепродукты) – анализы выполнены на флуориметре Флюорат 02-3М.

Используемые методики измерения допущены для целей государственного экологического контроля.

Для всех измерений допускаемые отклонения от среднего арифметического результатов повторных анализов при выборочном статистическом контроле определены при вероятности  $P = 0,95$ . [14]

Анализ лабораторных исследований свидетельствует, что качество воды в отобранных пробах по органолептическим показателям стабильно и соответствует нормам (Таблица 1). Гнилостные процессы, «зацветание» и затухание воды не наблюдаются.

Таблица 1

**Результаты органолептических исследований воды реки Зильдяр**

Показатель	Запах	Вкус и привкус	Цветность	Мутность	Температура, °С
Объект					
Проба воды	0	0	Бесцветна	0	14
Нормативы ПДК (баллы)	2	2-3	20	2,5	Не нормируется

Результаты исследований гидрохимических показателей образцов воды приведены в таблице 2.

Таблица 2

**Гидрохимический состав воды реки Зильдяр**

№ п/п	Показатели, ед. измерения	Значения	Нормативы ПДК СанПин 2.1.5.980-00
	Водородный показатель, ед.рН	6,78	6,5 –8,5
	Общая жесткость, ОЖ	6,66	7,00
	Сухой остаток, мг/дм <sup>3</sup>	695	1000
	Аммоний-ион, мг/дм <sup>3</sup>	< 0,5	2,0
	Калий, мг/дм <sup>3</sup>	< 1,0	не нормируется
	Натрий, мг/дм <sup>3</sup>	46	200
	Хлорид-ион, мг/дм <sup>3</sup>	88	350
	Нитрит-ион, мг/дм <sup>3</sup>	< 0,15	3,0
	Нитрат-ион, мг/дм <sup>3</sup>	2,27	45
	Фосфат-ион, мг/дм <sup>3</sup>	< 0,9	3,5
	Сульфат-ион, мг/дм <sup>3</sup>	399	500
	Кальций, мг/дм <sup>3</sup>	113	не нормируется
	Магний, мг/дм <sup>3</sup>	21	50
	Cu, мкг/дм <sup>3</sup>	1073,1	1000
	Cr, мкг/дм <sup>3</sup>	1,2	50
	Fe, мкг/дм <sup>3</sup>	29,7	300
	Cd, мкг/дм <sup>3</sup>	< 0,1	1,0
	Ni, мкг/дм <sup>3</sup>	11,6	100
	Co, мкг/дм <sup>3</sup>	1,1	100
	Pb, мкг/дм <sup>3</sup>	19,5	30
	As, мкг/дм <sup>3</sup>	0,7	50
	Zn, мкг/дм <sup>3</sup>	211,5	5000

Нефтепродукты, мг/дм <sup>3</sup>	0,08	0,1
Фенолы, мг/дм <sup>3</sup>	0,05	0,25

По полученным данным можно отметить следующие моменты:

- водородный показатель находится в пределах норм ПДК, со слабым смещением в кислую сторону;
- общая жесткость и содержание сухого остатка невысокие, характерные для относительно мягких вод;
- катионно-анионный состав удовлетворительный, не выходящий за нормы ПДК;
- содержание нефтепродуктов и фенолов ниже ПДК свидетельствует об отсутствии загрязнения этими соединениями.

Измерение массовых концентраций тяжелых металлов показало незначительное превышение норм ПДК по содержанию меди. Вероятнее всего происходит попадание избыточных количеств катионов меди из почвенного покрова, так как для почв южных районов Республики Башкортостан характерны значительные концентрации меди вследствие его содержания в горных породах и минералах. [15] Концентрации остальных изученных тяжелых металлов в пробах воды реки Зильдяр находятся в пределах значений ПДК.

Таким образом, по исследованиям воды реки Зильдяр Республики Башкортостан, можно отметить, что техногенное воздействие на изученный объект минимально. Загрязняющего действия процесса нефтедобычи на Исламгуловском месторождении и транспортировки нефти не обнаружено. Качественные и количественные показатели воды данной реки соответствует нормам, утвержденным в соответствующих нормативных документах, кроме показателя содержания меди.

#### БИБЛИОГРАФИЯ

- a. Орлов, Д.С. Экология и охрана биосферы при химическом загрязнении / Д. С. Орлов, Л. К. Садовникова, И. Н. Лозановская. – М.: Высшая школа, – 2002. – 334 с.
  - b. Сомова, Ю.В. Снижение техногенной нагрузки на окружающую среду / Ю. В. Сомова, П. А. Алексеева, Д. Швабехер, Д. А. Куц // Технологии металлургии, машиностроения и материалобработки. – 2022. – № 21. – С. 226-231.
  - c. Круговорот воды в природе. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://rosuchebnik.ru/material/krugovorot-vody-v-prirode-statya/>, свободный. – (Дата обращения: 19.11.2023).
  - d. Владимиров, А.М. Охрана и мониторинг поверхностных вод суши / А. М. Владимиров, В. Г. Орлов. – СПб.: РГГМУ, 2015. – 220 с.
  - e. Владимиров, А. М. Экологические аспекты использования и охраны водных ресурсов (вод суши) / А. М. Владимиров, В. Г. Орлов, В. М. Сакович. – СПб.: РГГМУ, 1997. – 126 с.
  - f. Водные ресурсы города Бирск и Бирского района Республики Башкортостан / Г. Г. Козлова, С. А. Онина, А. Р. Махмутов, Р. Р. Газетдинов ; Бирский филиал БашГУ. – Бирск : Башкирский государственный университет, Бирский филиал, 2021. – 80 с.
  - g. Исламгуловское месторождение. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: [http://www.nftn.ru/oilfields/russian\\_oilfields/bashkortostan\\_respublika/islamgulovskoe/23-1-0-412](http://www.nftn.ru/oilfields/russian_oilfields/bashkortostan_respublika/islamgulovskoe/23-1-0-412), свободный. – (Дата обращения: 19.11.2023).
  - h. Зильдяр. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://waterresources.ru/reki/zildyar/>, свободный. – (Дата обращения: 19.11.2023).
  - i. Абдрахманов, Р. Ф. Гидроэкология Башкортостана. / Р. Ф. Абдрахманов. – Уфа: Информреклама, 2005. - 344 с.
2. ГОСТ Р 59024-2020. Вода. Общие требования к отбору проб. – М.: Стандартинформ, 2020. – 53 с.
  3. Р 52.24.353-2012. Отбор проб поверхностных вод суши и очищенных сточных вод. – Ростов-на-Дону.: ФГБУ «ГХИ», 2012. – 39 с.

4. СанПиН 2.1.5.980-00. Гигиенические требования к охране поверхностных вод : утверждены 22.06.2000 : введены в действие 01.01.2001. – М.: ЦЕНТРМАГ, 2001. – 18 с.
5. СанПиН 1.2.3685-21. Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания : утверждены 28.01.21 : введены в действие 01.03.2021. – М.: ЦЕНТРМАГ, 2023. – 736 с.
6. Газетдинов, Р. Р. Использование программы MS Excel для статистической обработки данных в преподавании аналитической химии / Р. Р. Газетдинов, О. В. Газетдинова, И. М. Бляхина // Педагогическая информатика. – 2019. – № 3. – С. 31-39.
7. Асылбаев, И. Г. Оценка геохимического состояния почв Южного Урала: диссертация ... доктора биологических наук: 03.02.13 / И. Г. Асылбаев; [Место защиты: Башкирский государственный аграрный университет].- Уфа, 2016.- 516 с.

\*\*\*\*\*

#### ASSESSMENT OF SELECTED WATER INDICATORS OF THE ZILDYAR RIVER OF THE REPUBLIC OF BASHKORTOSTAN

Gazetdinov R. R., Abdulgafarova G. Kh.

*The article is devoted to environmental problems of water resource pollution due to anthropogenic impact. Water is one of the most valuable resources on our planet, affecting the quality of human life and the economic performance of the country. When determining water quality, it is important to determine its hydrochemical parameters, in particular, acid-base characteristics, hardness, mineralization, and the content of a number of heavy metals and organic compounds. These indicators allow us to assess the degree of technogenic polluting effects. We have studied individual analytical indicators of the water of the Zildyar River, subject to the technogenic impact of the oil production process in the Islamgulovskoye oil field of the Republic of Bashkortostan. The pH value, total hardness, dry residue, cation-anion composition, concentrations of heavy metals, phenol and petroleum products were established. No critical pollution of the water of the Zildyar River has been identified; oil production does not have a significant technogenic impact on the studied water resource.*

**Keywords:** ecology, water, pH value, heavy metals, petroleum products, Zildyar River.

---

#### Сведения об авторах:

**Газетдинов Ришат Ринатович:**

канд.хим.наук, доцент, ФГБОУ ВПО «Уфимский университет науки и технологий», филиал в г.Бирск

E-mail: [aldrich@mail.ru](mailto:aldrich@mail.ru)

**Абдулгфарова Гульназ Халиловна:**

магистр, ФГБОУ ВПО «Уфимский университет науки и технологий», филиал в г.Бирск

УДК 502.131.1:543.

## НОВЫЕ МЕТОДЫ АНАЛИЗА ЗАГРЯЗНЕНИЙ В ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЕ: СОВРЕМЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ И ОБОРУДОВАНИЕ

---

Валеев Сергей Ильдусович,  
Старовойтова Евгения Валерьевна,  
Сулумханова Хава Леидовна

*Статья исследует роль и влияние современных геоинформационных систем в борьбе с проблемами загрязнения окружающей среды. Описываются ключевые аспекты применения ГИС, такие как создание пространственных моделей загрязнений, интеграция многомерных данных, выявление источников загрязнений, и мониторинг изменений во времени. Авторы подчеркивают преимущества использования ГИС, такие как повышенная точность данных, возможность анализа на различных масштабах, и легкость визуализации результатов. Подчеркивается важность этой технологии в контексте устойчивого управления окружающей средой и предвосхищает ее влияние на будущее научных исследований и стратегий охраны природы.*

**Ключевые слова:** геоинформационные системы, анализ загрязнений, окружающая среда, пространственное моделирование, интеграция данных.

---

Современный мир сталкивается с вызовами в области охраны окружающей среды, в связи с растущим уровнем индустриализации, увеличением населения и интенсивным использованием природных ресурсов. Этот динамичный процесс влечет за собой увеличение загрязнений воздуха, воды и почвы, что приводит к серьезным последствиям для здоровья человека и биоразнообразия. Для эффективного противостояния этим проблемам необходимы точные, надежные и современные методы анализа загрязнений в окружающей среде.

В последние десятилетия наблюдается стремительный прогресс в разработке новых технологий и оборудования, направленных на более детальное и всестороннее изучение состава окружающей среды. В этой статье мы рассмотрим новейшие методы анализа загрязнений, которые не только предоставляют уникальные возможности для выявления и измерения загрязнителей, но и способствуют пониманию воздействия человеческой деятельности на экосистемы. От масс-спектрометрии до геоинформационных систем, от нанотехнологий до использования биомаркеров в биологических образцах - эти методы составляют фундаментальный инструментарий для создания более точных картин состояния окружающей среды и разработки эффективных стратегий управления природными ресурсами [1, с. 28].

Масс-спектрометрия представляет собой мощный и весьма эффективный метод анализа, который играет ключевую роль в оценке загрязнений в окружающей среде. Этот технологический подход обеспечивает высокую чувствительность, точность и возможность идентификации широкого спектра химических соединений в различных типах образцов.

Масс-спектрометрия - это аналитическая техника, которая измеряет массу заряженных частиц в ионизированных молекулах. Принцип работы масс-спектрометров основан на ионизации образца, а затем разделении ионов в магнитном поле в зависимости от их массы-заряда ( $m/z$ ).

Основные этапы принципа работы масс-спектрометра:

1. образец вводится в масс-спектрометр, где он подвергается процессу ионизации. Это может быть достигнуто различными методами, включая электронную ионизацию, химическую ионизацию или мягкую ионизацию, такую как электроспрей или MALDI (матрично-ассистированная лазерная десорбция ионизации);

2. ионы, образованные в результате ионизации, ускоряются с использованием электрического поля и фокусируются с помощью системы линз, чтобы обеспечить их однородный поток и точность;

3. ионы, вышедшие из ускорителя, попадают в магнитное поле. В этом поле ионы подвергаются силе Лоренца, которая действует перпендикулярно их скорости и магнитному полю. Это приводит к криволинейному движению ионов в зависимости от их массы-заряда. Ионы массы  $m$ , двигаясь в магнитном поле, описывают окружность или спираль, и радиус этой орбиты зависит от отношения  $m/z$ ;

4. после разделения в магнитном поле, ионы попадают на детектор, который регистрирует их положение и преобразует эту информацию в электрический сигнал. Регистрация сигнала происходит в зависимости от времени пролета иона от источника до детектора;

5. полученные данные обрабатываются компьютером, и на выходе формируется масс-спектр - график интенсивности ионов в зависимости от их массы-заряда. Из этого спектра можно определить молекулярные ионы и получить информацию о составе образца [4, с. 219].

Принцип работы масс-спектрометров позволяет достичь высокой разрешающей способности, чувствительности и точности в анализе химических соединений, что делает эту технику неотъемлемой в областях химии, биологии, медицины и окружающей среды. В России, как и во всем мире, используется ряд масс-спектрометров, которые обладают наибольшими значениями показателей эффективности. К ним относятся:

– *Bruker Solarix XR FTMS*: Этот высокопроизводительный масс-спектрометр от немецкой компании Bruker может применяться в различных областях, включая химию, биологию и геологию. Он обеспечивает высокую точность и разрешение.

– *Thermo Scientific LTQ-FT Ultra*: Производимый американской компанией Thermo Fisher Scientific, этот инструмент комбинирует ионо-циклотронное резонансное разделение с масс-спектрометрией. Он широко используется в исследованиях биомолекул и других сложных смесей.

– *Agilent 6460 Triple Quadrupole LC/MS*: Произведенный американской компанией Agilent Technologies, этот тандемный масс-спектрометр используется для анализа сложных смесей в биохимии, фармацевтике и других областях.

– *Shimadzu GCMS-QP2010 SE*: Производимый японской компанией Shimadzu, этот газовый хроматограф-масс-спектрометр предназначен для анализа газовых и жидких образцов, что делает его ценным инструментом в области анализа окружающей среды [9, с. 68].

Одной из важных областей применения масс-спектрометрии является анализ водных ресурсов. Современные масс-спектрометры позволяют выявлять и измерять различные загрязнители в воде, такие как химические вещества, тяжелые металлы и органические соединения. Это особенно важно для контроля качества питьевой воды и оценки воздействия промышленных выбросов на водные экосистемы.

В атмосферных исследованиях масс-спектрометрия используется для определения состава воздушных аэрозолей и газов. Это позволяет отслеживать концентрацию различных веществ, таких как азотные оксиды, сернистые соединения и органические вещества. Точные данные, полученные с использованием масс-спектрометрии, играют важную роль в борьбе с атмосферным загрязнением и разработке стратегий улучшения качества воздуха.

В области почвенных исследований масс-спектрометрия применяется для анализа содержания тяжелых металлов, пестицидов и других химических веществ. Точные результаты этого анализа помогают выявлять и контролировать загрязнения почв, что существенно для заботы о земельных ресурсах и предотвращения негативного воздействия на сельское хозяйство.

Современные масс-спектрометры обладают возможностью определения даже минимальных количеств загрязнителей, что делает этот метод важным инструментом для мониторинга окружающей среды. Интеграция масс-спектрометрии в системы мониторинга позволяет проводить регулярные и комплексные анализы, обеспечивая надежную основу для принятия решений в области охраны окружающей среды и устойчивого использования природных ресурсов.

Еще одним из мощных инструментов, который вносит существенный вклад в борьбу с этими проблемами, являются геоинформационные системы (ГИС). ГИС представляют собой технологический комплекс, объединяющий пространственные данные, аналитические

инструменты и возможности визуализации, что позволяет исследователям и специалистам в области окружающей среды лучше понимать и эффективно управлять аспектами экологической устойчивости.

Пространственное моделирование загрязнений в Геоинформационных Системах (ГИС) является ключевым элементом для более точного понимания и предсказания распределения загрязнений в окружающей среде. Этот метод позволяет ученым и экологами создавать виртуальные пространственные модели, которые отражают сложные взаимосвязи между различными факторами, воздействующими на окружающую среду, и распределение загрязнений в этом пространстве [2, с. 29].

*Основы пространственного моделирования загрязнений:*

1. пространственное моделирование начинается с сбора и интеграции разнообразных данных из различных источников. Это включает в себя информацию о выбросах, метеорологических условиях, географических особенностях, типах почв и других переменных, влияющих на распределение загрязнений;
2. на основе интегрированных данных создаются численные математические модели, которые описывают взаимодействие загрязнителей с окружающей средой. Эти модели могут варьироваться от простых расчетов концентраций воздушных загрязнителей до сложных экосистемных моделей, учитывающих влияние загрязнений на живые организмы;
3. пространственное моделирование требует определения масштабов анализа. ГИС позволяют устанавливать различные уровни пространственного разрешения, что позволяет рассматривать обширные территории на глобальном уровне или фокусироваться на отдельных участках с высокой детализацией.

*Примеры пространственного моделирования загрязнений:*

1. **Распределение атмосферных загрязнений:** Модели могут быть разработаны для прогнозирования распределения атмосферных загрязнителей, таких как оксиды азота, серы, тяжелые металлы и другие, в зависимости от их источников и метеорологических условий.
2. **Загрязнение водных ресурсов:** Пространственные модели могут оценивать влияние промышленных сбросов, аграрных сточных вод и других источников загрязнений на водные системы. Это включает в себя прогнозирование концентраций загрязнителей в воде и распределение этих загрязнений по водному бассейну.
3. **Распределение почвенных загрязнений:** Моделирование также может быть направлено на исследование распределения загрязнений в почве, их влияния на рост растений и возможные последствия для здоровья человека через продукты питания.

*Преимущества пространственного моделирования загрязнений в ГИС:*

1. пространственные модели в ГИС объединяют различные аспекты окружающей среды, что позволяет получить более полное представление о загрязнениях;
2. моделирование позволяет прогнозировать различные сценарии загрязнения и разрабатывать стратегии управления рисками;
3. ГИС помогают выявлять участки с наибольшей уязвимостью для загрязнений, что способствует более эффективному направлению ресурсов на их контроль и уменьшение;
4. визуализация через ГИС облегчает понимание сложных пространственных взаимосвязей и делает результаты доступными для широкого круга пользователей [7, с. 80].

Пространственное моделирование загрязнений в ГИС играет важную роль в улучшении понимания и управлении проблемами окружающей среды, предоставляя ценные инструменты для принятия обоснованных решений в области охраны окружающей среды и устойчивого развития.

Мониторинг изменений в окружающей среде в течение времени с помощью Геоинформационных Систем (ГИС) является ключевым инструментом для понимания динамики загрязнений и разработки эффективных стратегий управления окружающей средой. Этот процесс включает в себя несколько этапов, начиная от сбора и обработки данных до анализа тенденций и принятия информированных решений.

Сбор данных является отправной точкой для успешного мониторинга изменений в окружающей среде. Современные технологии сбора информации, такие как дистанционное зондирование и спутниковые технологии, обеспечивают обширный объем данных с высоким



разрешением. Спутники, например, предоставляют многомерные данные о климате, использовании почвы, изменениях рельефа и других параметрах, что существенно обогащает базу данных ГИС.

Важным этапом является также сбор данных на местах, таких как анализ образцов воздуха, воды, и почвы. Автоматизированные сенсорные системы и портативные устройства сбора данных позволяют проводить измерения в реальном времени и с высокой точностью. Эти данные могут включать концентрации загрязнителей, параметры климата, а также обширные географические координаты.

Интеграция всех этих данных в ГИС обеспечивает комплексный и всесторонний обзор окружающей среды. В процессе сбора данных также важно учесть их актуальность, частоту обновлений и стандартизацию методов измерений, чтобы гарантировать сопоставимость и последовательность данных в разные временные интервалы [9, с. 110].

#### *Создание базы данных*

После сбора данных начинается важный этап - создание базы данных, который представляет собой организацию, структурирование и хранение информации для последующего анализа. В контексте мониторинга изменений в окружающей среде с использованием Геоинформационных Систем (ГИС), база данных играет решающую роль в обеспечении удобного и эффективного доступа к информации.

1. данные, полученные из различных источников, таких как спутниковые изображения, аэрофотосъемка, дистанционное зондирование и географические измерения, структурируются в соответствии с логикой анализа. Создаются пространственные слои, охватывающие различные параметры окружающей среды, такие как выбросы, качество воды, климатические факторы, топография и другие;

2. геоинформационные системы работают с пространственными данными, такими как координаты, полигоны, точки и линии. База данных должна содержать геоданные, позволяющие ГИС эффективно работать с пространственными отображениями;

3. для создания целостной картины изменений в окружающей среде важно устанавливать связи между различными слоями данных. Например, можно связать данные о выбросах с данными о климатических условиях для более глубокого анализа воздействия загрязнителей на окружающую среду;

4. база данных должна учитывать временные параметры, чтобы предоставить возможность отслеживания изменений во времени. Это включает в себя создание временных рядов данных, которые позволяют анализировать динамику изменений на различных этапах;

5. важным аспектом создания базы данных является обеспечение ее безопасности и контроля доступа. Это гарантирует, что данные останутся надежными и доступными только для авторизованных пользователей;

6. база данных ГИС может быть интегрирована с другими информационными системами, такими как системы мониторинга, лабораторные базы данных и другие ресурсы. Это обеспечивает единый и комплексный подход к анализу данных и обеспечивает более полное представление об изменениях в окружающей среде;

7. база данных должна регулярно обновляться для включения новых данных и отражения изменений в окружающей среде. Это обеспечивает актуальность информации и повышает точность анализа [10, с. 43].

Создание базы данных – это неотъемлемый этап в процессе мониторинга изменений в окружающей среде, который обеспечивает надежное хранение и структурирование данных для последующего анализа и принятия обоснованных решений в области экологической устойчивости.

#### *Анализ изменений*

С использованием ГИС проводится анализ изменений в различных параметрах окружающей среды. Это может включать в себя оценку изменений в концентрациях загрязнителей, выявление новых источников выбросов, анализ воздействия климатических факторов и другие параметры, влияющие на качество окружающей среды. Важным элементом является возможность анализа изменений на различных пространственных уровнях, от местности до региона и глобального масштаба.

ГИС позволяют проводить анализ пространственных данных на предмет наличия паттернов. Это могут быть изменения в распределении загрязнителей, появление новых очагов загрязнения или изменения в структуре использования земли. Выявление этих паттернов позволяет исследователям лучше понимать, какие процессы могут влиять на окружающую среду.

ГИС позволяют анализировать взаимосвязи между различными параметрами окружающей среды. Например, изменения в климатических условиях могут влиять на распределение загрязнений, и наоборот. Анализ этих взаимосвязей помогает понять более сложные причины изменений и может быть использован для предсказания будущих тенденций.

#### *Визуализация результатов*

Одним из ключевых преимуществ ГИС является возможность визуализации данных. Специализированные инструменты позволяют строить карты, графики и диаграммы, отображающие изменения в окружающей среде в течение времени. Визуализация помогает легче воспринимать сложные данные, выявлять паттерны и обнаруживать аномалии.

#### *Мониторинг трендов и прогнозирование*

ГИС позволяют мониторить тренды и проводить прогнозирование изменений в будущем. Анализ долгосрочных данных помогает выявлять тенденции, которые могут указывать на эволюцию состояния окружающей среды. Это важно для выработки предупредительных мер и стратегий адаптации к изменениям [6, с. 99].

#### *Оценка эффективности мероприятий*

ГИС также используются для оценки эффективности предпринимаемых мероприятий по уменьшению загрязнений. Путем сравнения данных до и после внедрения экологических программ и мер, исследователи могут определить, насколько успешными были предпринятые усилия и где возможно внести дополнительные коррективы.

В итоге, применение ГИС в анализе загрязнений в окружающей среде не только обогащает наши научные знания, но и служит основой для принятия обоснованных решений в сфере охраны природы. Эта технология играет ключевую роль в стремлении к устойчивому будущему, где баланс между человеческой деятельностью и природой становится более важным чем когда-либо.

Геоинформационные системы (ГИС) представляют собой непревзойденный ресурс в современном анализе загрязнений окружающей среды. В этой статье мы рассмотрели, как эта инновационная технология обеспечивает новые горизонты для исследования и понимания динамики загрязнений, а также какие преимущества она приносит в сфере охраны окружающей среды.

Одним из ключевых достоинств ГИС является их способность создавать пространственные модели, отображающие сложные взаимосвязи между различными компонентами экосистемы. Это позволяет ученым и специалистам в области окружающей среды получать более глубокое понимание того, как загрязнители распространяются и каким образом они воздействуют на окружающую среду и здоровье человека. Интеграция данных из различных источников в ГИС дает возможность создавать всесторонние карты и проводить анализ на различных пространственных разрешениях. Это позволяет идентифицировать источники загрязнений, анализировать их воздействие и разрабатывать эффективные стратегии управления.

Кроме того, ГИС предоставляют возможность мониторинга изменений в окружающей среде в течение времени, что является ключевым аспектом в стратегическом управлении природными ресурсами. Анализ динамики загрязнений позволяет выявлять тенденции и оценивать результаты принимаемых мер по снижению воздействия на окружающую среду.

## БИБЛИОГРАФИЯ

1. Арефьев В.А. "Геоинформационные системы в экологии" - М.: Издательский дом "Логос", 2018.
2. Бурцева Л.П. "Анализ загрязнений окружающей среды и его методы" - СПб.: Издательство СПбГЭТУ, 2017.
3. Воронцова Е.Н. "Нанотехнологии в экологии" - М.: Издательский дом "Профессия", 2019.

4. Гаврилов Г.К. "Методы анализа биомаркеров в оценке качества окружающей среды" - Новосибирск: Издательство НГУ, 2016.
5. Дубинин А.В. "Современные методы масс-спектрометрии в анализе загрязнений" - М.: Издательство "Наука", 2015.
6. Зайцев П.В. "Применение геоинформационных систем для мониторинга окружающей среды" - М.: Издательство "Гео", 2017.
7. Козлова Н.И. "Новые подходы в анализе биомаркеров загрязнений" - СПб.: Издательство СПбГУ, 2019.
8. Лебедев С.В. "Использование нанотехнологий в мониторинге окружающей среды" - М.: Издательство "Экология", 2018.
9. Петров И.К. "Геоинформационные системы и их применение в экологическом мониторинге" - Санкт-Петербург: Издательство "Экологическая книга", 2017.
10. Романова О.П. "Методы анализа влияния загрязнений на биоразнообразие" - М.: Издательство "Биосфера", 2016.

\*\*\*\*\*

#### NEW METHODS FOR ANALYSIS OF POLLUTION IN THE ENVIRONMENT: MODERN TECHNOLOGIES AND EQUIPMENT

Valeev S.I., Starovoitova E.V., Sulumkhanova Kh.L.

*The article explores the role and impact of modern geographic information systems in combating environmental pollution problems. Key aspects of GIS applications are described, such as creating spatial pollution models, integrating multidimensional data, identifying pollution sources, and monitoring changes over time. The authors highlight the benefits of using GIS, such as increased data accuracy, the ability to analyze at different scales, and ease of visualization of results. Emphasizes the importance of this technology in the context of sustainable environmental management and anticipates its impact on the future of scientific research and conservation strategies.*

**Keywords:** *geographic information systems, pollution analysis, environment, spatial modeling, data integration.*

---

#### Сведения об авторах:

**Валеев Сергей Ильдусович:**

доцент, к.т.н.,

Казанский национальный исследовательский технологический университет

E-mail: [vs73@mail.ru](mailto:vs73@mail.ru)

**Старовойтова Евгения Валерьевна:**

доцент, к.т.н.,

Казанский национальный исследовательский технологический университет

E-mail: [starovojtova@inbox.ru](mailto:starovojtova@inbox.ru)

**Сулумханова Хава Леидовна:**

аспирант, ФГБОУ ВО «Чеченский государственный педагогический университет»,

Грозный, Россия,

E-mail: [khava.sulumkhanova@bk.ru](mailto:khava.sulumkhanova@bk.ru)

**Учредитель журнала:** Мельников Игорь Олегович, кандидат химических наук

**Издатель:** Общество с ограниченной ответственностью  
"Издательство "Манускрипт" (ОГРН 1226100004679)

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор), Свидетельство серия серия ПИ № ФС 77 – 31640 10.04.2008, **Адрес редакции:** 127473, Москва г., 3-й Самотечный пер., д. 23, кв. 48  
Тел. +7 951 528 22 82 **E-mail:** [VAK-info@yandex.ru](mailto:VAK-info@yandex.ru)

Отпечатано в типографии ООО «Издательство «Манускрипт», ОГРН 1226100004679),  
344114, РОСТОВСКАЯ ОБЛАСТЬ, Г.О. ГОРОД РОСТОВ-НА-ДОНУ,  
Г. РОСТОВ-НА-ДОНУ, УЛ БОРЯНА, Д. 20, 24

Подписано в печать 10.11.2023. Выход в свет 20.11. 2023г.  
Тираж 200 экз. Заказ № 26–114/ РС–23. Цена свободная

## ТРЕБОВАНИЯ К ОФОРМЛЕНИЮ СТАТЕЙ

Статья, направляемая в журнал «ВОДА: ХИМИЯ И ЭКОЛОГИЯ», предоставляется в электронном виде в текстовом редакторе Microsoft Word по e-mail: [VAK-info@yandex.ru](mailto:VAK-info@yandex.ru)

Файл с текстом статьи должен иметь расширение \*.doc или \*.docx. Разметка страницы: поля со всех сторон 2 см, ориентация книжная, формат А4. Текст набирается шрифтом Times New Roman, размер (кегель) 14, абзацный отступ 1,25 см, межстрочный интервал полуторный с использованием автоматической расстановки переносов. Аннотация (от 100 до 150 слов); ключевые слова на русском языке (5–8 слов). Название статьи, аннотация, ключевые слова, сведения об авторах должны быть переведены на английский язык.

Исключить громоздкие цифровые и формульные таблицы, а также рисунки, более, чем на 0,5 страницы. Все таблицы и рисунки должны быть в тексте, подписаны, ссылки на них по тексту обязательны.

Список использованной литературы составляется по алфавиту в конце статьи в соответствии с ГОСТ. Ссылки на литературу в тексте отмечаются арабскими цифрами в квадратных скобках.

В статье должны быть указаны следующие сведения о каждом авторе: фамилия, имя, отчество (полностью); место работы и должность; ученая степень; домашний адрес (если необходимо почтовый экземпляр); контактный телефон; адрес электронной почты. Название ВУЗов полностью, без сокращений.

**Таким образом, файл должен содержать:**

- ✓ индекс УДК
- ✓ аннотацию – 100–150 слов
- ✓ ключевые слова (не более 5–8 на русском и английском языках)
- ✓ название
- ✓ основной текст статьи
- ✓ список литературы

Основной текст рукописи экспериментальной статьи рекомендуется излагать в следующей последовательности:

- **введение** с четким и кратким изложением состояния рассматриваемого вопроса и анализом литературных данных, постановкой цели и задач данного исследования;
- **экспериментальная часть** (применяемые аппаратура, материалы, химические реактивы и методика проведения эксперимента в кратком изложении);
- **результаты** проведенных исследований и их обсуждение;

Все статьи проверяются на ПЛАГИАТ. Процент авторского текста должен составлять не менее 75%. Цитирования не более 25%.

Все поступающие в редакцию материалы должны быть проверены на наличие заимствований из открытых источников (попросту – плагиат), проверка выполняется с помощью системы AntiPlagiat.ru.

**Контактные лица:**

**Ответственный редактор:** Жанна Сергеевна, тел., +7951 528 22 82

E-mail: [VAK-info@yandex.ru](mailto:VAK-info@yandex.ru)