Национальный исследовательский Томский политехнический университет
Национальный исследовательский Томский государственный университет
Томский государственный архитектурно-строительный университет
Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники

ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ НАУК

Сборник научных трудов
XIII Международной конференции студентов, аспирантов
и молодых ученых

Том 2. Химия

РОССИЯ, ТОМСК, 26 – 29 апреля 2016 г.

PROSPECTS OF FUNDAMENTAL SCIENCES DEVELOPMENT

XIII International Conference of students, graduate students
and young scientists

Volume 2. Chemistry

RUSSIA, TOMSK, April 26 – 29, 2016

Конференция проведена при финансовой поддержке
Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 16-32-10075.

Издательство Томский политехнический университет

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
Национальный исследовательский Томский государственный университет
Томский государственный архитектурно-строительный университет
Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники

ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ НАУК

Сборник научных трудов
XIII Международной конференции студентов, аспирантов
и молодых ученых

Том 2. Химия

РОССИЯ, ТОМСК, 26 – 29 апреля 2016 г.

PROSPECTS OF FUNDAMENTAL SCIENCES DEVELOPMENT

XIII International Conference of students, graduate students
and young scientists

Volume 2. Chemistry

RUSSIA, TOMSK, April 26 – 29, 2016

Томск 2016

ПРОГРАММА ПОВЫШЕНИЯ КВАЛИФИКАЦИИ

Химический факультет и Институт дистанционного образования Томского государственного университета приглашает дипломированных специалистов пройти программу повышения квалификации

«МЕТОДЫ ИЗУЧЕНИЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ БИОМЕДИЦИНСКОГО И ФУНКЦИОНАЛЬНОГО НАЗНАЧЕНИЯ»

Направление 04.03.01 Химия

Модульная структура обучения:
Модуль 1: Биология и биомедицина
Модуль 2: Химия и химические технологии
Модуль 3: Наноматериалы и нанотехнологии

Профессиональные компетенции, формируемые в результате обучения:

- **формирование представлений о современных подходах в области синтеза материалов биомедицинского и функционального назначения с заданными свойствами;**
- формирование представлений о новых методологических подходов в использовании различного оборудования для изучения физиологии человека и материалов биологического и биомедицинского назначений.
- формирование представлений о принципиальных основах, практических возможностях и ограничениях современных методов исследования материалов биомедицинского и функционального назначения;
- ознакомление с аппаратурным оснащением и условиями проведения современного эксперимента, процессами интерпретации и оценивания экспериментальных данных, в том числе публикуемых в научной литературе;
- формирование прогностического понимания фундаментальных проблем и практических методов их решения в области современного материаловедения с учетом новых представлений о способах создания и организации функциональных систем;
- получение теоретических знаний в области исследования структуры, состава и физико-химических свойств функциональных материалов.

Обучение в рамках образовательной программы реализуют ученые с высокой научной квалификацией из ведущих научных организаций РФ. Практическая часть курса проводится с использованием современного аналитического и исследовательского оборудования Лаборатории каталитических исследований и Лаборатория трансляционной клеточной и молекулярной биомедицины ТГУ, Научно-образовательного центра «Наноматериалы и нанотехнологии» ТПУ.

КОНТАКТЫ

Руководитель программы: Слижов Юрий Геннадьевич, к.х.н., доцент, декан химического факультета ТГУ, dekanat@chem.tsu.ru.

Координатор программы: Зыкова Анна Петровна, к.ф.-м.н., ассистент ТПУ, zykovaap@mail.ru.

АДРЕС

г. Томск, ул. А. Иванова, 49, корпус № 6, Химический факультет ТГУ

УДК 50(063)
ББК 20л0
П27

П27 **Перспективы развития фундаментальных наук** [Электронный ресурс]: сборник трудов XIII Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. Россия, Томск, 26–29 апреля 2016 г. / под ред. И.А. Курзиной, Г.А. Вороновой. – Томск: Изд-во – Национальный Исследовательский Томский политехнический университет, 2016. – Режим доступа: http://science-persp.tpu.ru/Arch/Proceedings_2016_vol_2.pdf – 514 с.

ISBN 978-5-4387-0653-3
ISBN 978-5-4387-0651-9

Сборник содержит труды участников XIII Международной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Перспективы развития фундаментальных наук». Включает доклады студентов, аспирантов и молодых ученых, представленные на секциях «Физика», «Химия», «Математика», «Биомедицина», «Экономика», «Строительство и архитектура», «Конкурс архитектурных работ», «IT-технологии и электроника». Сборник представляет интерес для студентов, аспирантов, молодых ученых и преподавателей.

УДК 50(063)
ББК 20л0

Редакционная коллегия

И.А. Курзина, доктор физико-математических наук, доцент;
Г.А. Воронова, кандидат химических наук, доцент;
С.А. Поробова

ISBN 978-5-4387-0653-3
ISBN 978-5-4387-0651-9

© ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», 2016
© Томский политехнический университет, электронный текст, 2016

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПЛАЗМЕННОЙ ОБРАБОТКИ АММИАЧНО-ХЛОРИДНЫХ МАТОЧНЫХ РАСТВОРОВ
И.Ю. Никишкин 319

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МЕХАНИЧЕСКОЙ АКТИВАЦИИ ИСХОДНЫХ РЕАГЕНТОВ НА ТВЕРДОФАЗНЫЙ СИНТЕЗ ЛИТИЕВОГО ФЕРРИТА $LiFeO_2$
Е.В. Николаев, Е.Н. Лысенко 322

ДИЛАТОМЕТРИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ СПЕКАНИЯ ЛИТИЕВОГО ФЕРРИТА С ДОБАВКОЙ ZrO_2
С.А. Николаева, Е.Н. Лысенко 325

СВС ПОРИСТОЙ СИАЛОНОВОЙ КЕРАМИКИ. ВЛИЯНИЕ ФТОРСОДЕРЖАЩЕЙ ДОБАВКИ НА ПРОЦЕСС
А.В. Овчинников, Н.С. Пичугин 328

ПРОЕКТИРОВАНИЕ ЧИСТЫХ СПИНОВЫХ ФУНКЦИЙ В DFT РЕШЕНИЯХ С НАРУШЕННОЙ СПИНОВОЙ СИММЕТРИЕЙ В БАЗИСЕ ПАРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ
Д.А. Овчинников, С.Ф. Рузанкин, И.Л. Зильберберг 331

VERBUNDKERAMIK AUF DER BASIS VON ALUMINIUMNITRID
A.S. Orechov 334

ПОЛУЧЕНИЕ КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ ПРОДУКТОВ В ПЛАЗМЕ БАРЬЕРНОГО РАЗРЯДА НА ПРИМЕРЕ ПОЛУЧЕНИЯ ОКИСИ ПРОПИЛЕНА
А.Н. Очередько, С.В. Кудряшов, А.Ю. Рябов 337

УДАЛЕНИЕ СЕРОВОДОРОДА ИЗ УГЛЕВОДОРОДОВ В БАРЬЕРНОМ РАЗРЯДЕ В ПРИСУТСТВИИ ДОБАВОК O_2 И CO_2
А.Н. Очередько, С.В. Кудряшов, А.Ю. Рябов 340

АДСОРБЦИЯ ГЛУТАМИНОВОЙ КИСЛОТЫ НА ПОВЕРХНОСТИ НАНОЧАСТИЦ TiO_2
Ю.В. Папина 343

СОРБЦИОННОЕ КОНЦЕНТРИРОВАНИЕ ЛЕТУЧИХ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ИЗ ВОДНЫХ СРЕД НА ХЕЛАТСОДЕРЖАЩИХ ХИМИЧЕСКИ МОДИФИЦИРОВАННЫХ КРЕМНЕЗЕМАХ
Е.А. Пахнутова, Д.В. Дубникова 346

ВЛИЯНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ХРОМА НА АКТИВНОСТЬ Cr-Al КАТАЛИЗАТОРА В ПРОЦЕССЕ ГИДРОФТОРИРОВАНИЯ ТЕТРАХЛОРЭТИЛЕНА
Р.В. Петров, А.А. Зирка 349

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ ГАЗОФАЗНОГО СИНТЕЗА ОЗОНОБЕЗОПАСНОГО ХЛАДОНА R-125 НА Cr-Al КАТАЛИЗАТОРЕ
Р.В. Петров, А.А. Зирка 352

ИЗУЧЕНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ТВЕРДОГО КОМПОЗИТНОГО ЭЛЕКТРОДА ДЛЯ ПОТЕНЦИОМЕТРИЧЕСКОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ СЕРЕБРА В РАСТВОРАХ
М.А. Петрова, С.В. Шумар 355

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА НА ГРАФИТОВОМ ЭЛЕКТРОДЕ
М.С. Петрушин, И.С. Хисамутдинов, Д.О. Перевезенцева 358

THE RELAXATION OF THE CRUDE OILS AFTER ULTRASONIC IRRADIATION
A.V. Petukhova, R.V. Anufriev, G.I. Volkova 361

СВОЙСТВА ПОРИСТОЙ КЕРАМИКИ НА ОСНОВЕ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ
Н.В. Пигалева, Р.В. Левков 364

ПЛАЗМЕННАЯ УТИЛИЗАЦИЯ ОТХОДОВ ПЕРЕРАБОТКИ ОТРАБОТАВШЕГО ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА
Т.Е. Пироженко 367

ЭКОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ПОРИСТЫХ NI-AL ГОРЕЛОК
Н.С. Пичугин, А.В. Овчинников 370

СОРБЦИОННОЕ КОНЦЕНТРИРОВАНИЕ ЛЕТУЧИХ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ ИЗ ВОДНЫХ СРЕД НА ХЕЛАТСОДЕРЖАЩИХ ХИМИЧЕСКИ МОДИФИЦИРОВАННЫХ КРЕМНЕЗЕМАХ

Е.А. Пахнутова, Д.В. Дубникова
Научный руководитель: доцент, к.х.н. Ю.Г. Слижов
Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050
E-mail: pakhnutovae@mail.ru

SORPTION CONCENTRATION OF VOLATILE ORGANIC COMPOUNDS FROM WATER ENVIRONMENT CHELATES PACKING CHEMICALLY MODIFIED SILICA

E.A. Pakhnutova, D.V. Dubnikova
Scientific Supervisor: Ph., D. Yu.G. Slizhov
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050
E-mail: pakhnutovae@mail.ru

Abstract. *Sorbents based on silica Silohrom C-120 synthesized with covalently fixed layer acetylacetonate of copper. Sorption properties of chelate packing materials received and evaluated the analytical capabilities of their application for the rapid sorption concentration of volatile organic compounds from water bodies.*

Определение летучих органических соединений (ЛОС) при анализе объектов окружающей среды является важной задачей современной аналитической химии [1]. Проблема установления низких содержаний ЛОС в растворах сложного состава, в числе которых природные и производственные сточные воды, довольна сложна и трудно решаема даже с использованием современных инструментальных методов. Разделение и концентрирование органических компонентов растворов улучшает метрологические характеристики применяемых методов и существенно расширяет круг решаемых задач [2]. Одним из наиболее эффективных и распространенных методов концентрирования является динамическая сорбция [3] с применением различных типов адсорбентов [4].

Универсальными сорбентами для концентрирования являются химически модифицированные кремнеземы (ХМК), отличающиеся развитой удельной поверхностью и значительной пористостью, термической, механической и химической устойчивостью.

Объектом исследования в данной работе был выбран SiO_2 марки Силохром С-120, химически модифицированный ацетилацетонатом меди [5]. Параметры пористой структуры и термическая устойчивость исследуемых материалов приведены в табл. 1.

Таблица 1

Параметры пористой структуры и термическая устойчивость сорбентов

Сорбент	$S_{уд}$, м²/г	Объем пор, см³/г	Размер пор, нм	T_{max}, °С
Силохром С-120	112	1,08	38	-
Силохром С-120 + ацетилацетонат меди	99	0,81	33	290

Для оценки аналитических возможностей исследуемых сорбентов применяли метод динамического газоэкстракционного концентрирования. Для этого инертный газ-экстрагент – гелий пропускали через модельные водные растворы ЛОС (толуол, гексан, метанол, ацетон) с заданной концентрацией 20 мг/дм^3. Время экстракции варьировали в интервале 1-60 мин. Извлечение сконцентрированных органических веществ осуществляли методом термодесорбции, при этом концентратор помещали в испаритель газового хроматографа, прогретый до температуры 180°С. Исследования выполняли на газовом хроматографе “Chrom-5” с пламенно-ионизационным детектором с использованием насадочной колонки Хроматон-N-AW-DMCS + 15% Carbowax в изотермическом режиме при температуре 150°С.

С целью определения объемов удерживания V_R и объема до проскока V_B на полученных хроматограммах измеряли высоты пиков анализируемых веществ (h) и относили их к h_0 – высоте пиков, полученных при вводе в хроматографическую колонку модельных смесей аналитов заданной концентрации. Отношение h/h_0 в линейной области зависимости сигнала детектора от концентрации пропорционально отношению C/C_0, где C и C_0 – концентрации тестовых соединений на выходе из патрона-концентратора и на входе в него. Для расчета объемов строили выходные кривые удерживания в координатах $C/C_0 – V$, где V – объем газа-экстрагента гелия [6].

На рис. 1 представлены выходные кривые удерживания гексана, толуола, ацетона и метанола на исследуемых сорбентах.

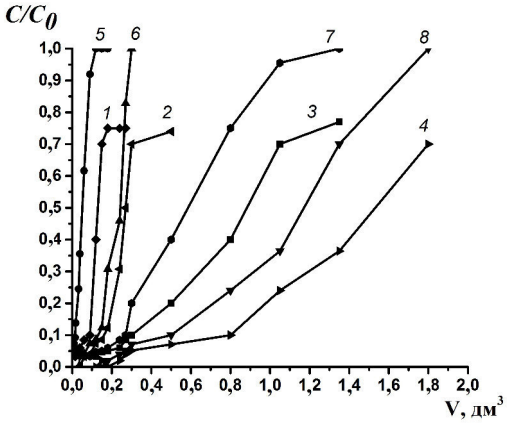

Рис. 1. Выходные кривые удерживания ЛОС на исследуемых сорбентах: а) Силохром С-120; б) Силохром С-120 + ацетилацетонат меди

Согласно полученным данным по параметрам удерживания анализируемых веществ, применение немодифицированного SiO_2 нецелесообразно для газовой экстракции, так как степень извлечения сконцентрированных компонентов не превышает 70%, что обусловлено развитой удельной поверхностью (табл. 1) и затруднением десорбции из мелких пор. Модифицирование поверхности Силохрома С-120 ацетилацетонатом меди приводит уменьшению площади удельной поверхности и пористости, что способствует более быстрому элюированию сорбатов и увеличению степени их извлечения до 100%.

Основным параметром, характеризующим динамическое сорбционное концентрирование, является коэффициент концентрирования *К (%),* который рассчитывали как отношение концентрации сорбата в сорбенте после проведения газовой экстракции к его концентрации в исходном растворе (рис. 2).

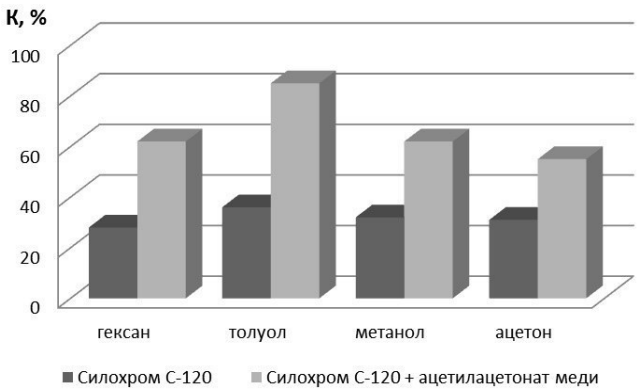

Рис. 2, Коэффициенты концентрирования ЛОС на исходном и модифицированном сорбенте

Нанесение хелатов металлов на поверхность кремнезема приводит к образованию активных центров, за счет которых идет сорбция. Согласно полученным данным наибольшими значениями *К* в отношении тестовых соединений обладает химически модифицированный ацетилацетонатом меди SiO_2 за счет, преимущественно, межмолекулярных донорно-акцепторных взаимодействий с молекулами ацетона, образования водородных связей с метанолом, π-комплексообразования с толуолом и неспецифических взаимодействий с гексаном [5, 6].

Таким образом, химически модифицированный ацетилацетонатом меди Силохром С-120 может быть использован для экспрессного сорбционного концентрирования ЛОС из водных объектов.

Работа выполнена в рамках госзадания (№$_{госрег.}$ 114051370021) Минобрнауки РФ по проекту № 1432.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Глазунова Л.Д., Панина Л.И., Сакодынский К.И. Использование пористых полимерных сорбентов для концентрирования микропримесей органических соединений из газовой и жидких сред // Успехи химии. – 1983. – Т.1. – № 7. – С. 1225–1245.
2. Филиппов О.А., Тихомирова Т.И., Цизин Г.И., Золотов Ю.А. Динамическое концентрирование органических веществ на неполярных сорбентах // Журнал аналитической химии. – 2003. – Т.58. – № 5. С. 454–479.
3. Сычев К.С., Даванков В.А. Материалы и метод пробоподготовки в хроматографии: твердофазное концентрирование и адсорбционная очистка // Сорбционные и хроматографические процессы. –2004. – Т. 4. – № 1. – С. 5–28.
4. Родинков О.В., Бугайченко А.С., Москвин Л.Н. Композиционные сорбенты для сорбционного и хроматографического концентрирования и выделения летучих органических веществ из водных и газовых сред // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2009. – Т. 75. – № 8. – С. 11–17.
5. Pakhnutova E.A., Slizhov Yu. G. Synthesis and study of structural and chromatographic characteristics of chelate-containing sorbents based on silica // Russian Journal of Applied Chemistry. – 2013. – Vol. 86. – Is. 4. – P. 529–533.
6. Пахнутова Е.А. Синтез и исследование физико-химических свойств газохроматографических сорбентов на основе силикагелей с привитыми хелатами β-дикарбонильных соединений: Автореф. дис. … канд. хим. наук. – Томск, 2015. – 26 с.

Научное издание

ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ НАУК

Сборник научных трудов
XIII Международной конференции студентов, аспирантов
и молодых ученых

Издано в авторской редакции

Компьютерная верстка С.А. Поробова

Редактор Г.А. Воронова, И.А. Курзина

Тираж 100 экз.

Национальный исследовательский
Томский политехнический университет
Система менеджмента качества
Издательства Томского политехнического
университета сертифицирована в соответствии с
требованиями ISO 9001:2008
. 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30
Тел./факс: 8(3822)56-35-35, www.tpu.ru