

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
РОССИЙСКИЙ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Д. И. МЕНДЕЛЕЕВА

УСПЕХИ
В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ
ТЕХНОЛОГИИ

Том XXXV

№ 2

Москва
2021

УДК 66.01-52
ББК 24. 35
У78

Рецензент:
Российский химико-технологический университет
имени Д. И. Менделеева

Успехи в химии и химической технологии: сб. науч. тр. Том XXXV,
У78 № 2 (237). – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2021. – 55 с.

В сборнике "Успехи в химии и химической технологии" опубликованы статьи по актуальным вопросам в области теории и практики устойчивого развития в рамках МКХТ-2021.

Материалы сборника были представлены для широкого обсуждения на XIII научно-практической конференции «Образование и наука для устойчивого развития», посвященная 100-летию МХТИ-РХТУ и Году науки и технологии.

Сборник находится в открытом доступе, научные статьи включены в систему Российского индекса научного цитирования (РИНЦ) на платформе Elibrary.ru.

Сборник представляет интерес для научно-технических работников, преподавателей, аспирантов и студентов химико-технологических вузов.

УДК 66.01-52
ББК 24. 35



20 – 22 апреля 2021 года в РХТУ им. Д.И. Менделеева была проведена XIII Всероссийская научно-практическая конференция «Образование и наука для устойчивого развития» посвященная 100-летию МХТИ-РХТУ и Году науки и технологии.

Председатель конференции – член-корр. РАН, директор Института химии и проблем устойчивого развития РХТУ им. Д.И. Менделеева, профессор Тарасова Н.П.

Ученый секретарь конференции профессор Кузнецов В.А.

Работа конференции была организована по секциям:

Окружающая среда и устойчивое развитие (председатель секции – профессор, А.С. Макарова секретарь секции – ассистент каф. ЮНЕСКО «Зеленая химия для устойчивого развития Е.Г. Кривобородов (vv1992@yandex.ru).

Зеленая химия для устойчивого развития (сопредседатели секции – профессора Я.О. Межуев, В.Ф. Травень, В.Г. Цирельсон, секретари секции – доцент А.Н. Егорова (anegor@mustr.ru) и ассистент А.Л. Лусс (al.luss@yandex.ru).

Социально-экономические аспекты устойчивого развития (председатель секции профессор А.Е. Хачатуров-Тавризян, секретарь – доцент Я.П. Молчанова (yanamolchanova@gmail.com).

Содержание

Секция «Окружающая среда и устойчивое развитие»

Лазарев В.М., Корнеев Д.А.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КАРБОНОВЫХ ФЕРМ ДЛЯ ФИКСАЦИИ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА 7

Суворова А.А.

МЕТОДИКА КОЛИЧЕСТВЕННОГО АНАЛИЗА СОДЕРЖАНИЯ ЧАСТИЦ
МИКРОПЛАСТИКА В ПЛАНКТОННЫХ ОРГАНИЗМАХ..... 10

Федосеев А.Н., Макарова А.С.

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ИММОБИЛИЗАЦИИ РТУТИ В ОТХОДАХ НА ОСНОВЕ
ПРИНЦИПОВ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ РТУТИ И ЕЕ СОЕДИНЕНИЙ В СУЛЬФИД
РТУТИ..... 12

Сапрошина А.А., Макарова А.С.

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ СОЛЕЙ
ОКСИЭТИЛИДЕНДИФОСФОНОВОЙ КИСЛОТЫ ДЛЯ ОЧИСТКИ ВОДНЫХ
ОБЪЕКТОВ 15

Полтавский Е.А., Кузнецов В.А.

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ПРОИЗРАСТАНИЯ КАШТАНА КОНСКОГО НА ТЕРРИТОРИИ
ПАРКА ПОБЕДЫ Г. МОСКВЫ НА СОСТОЯНИЕ ДЕРЕВЬЕВ И РАСПРОСТРАНЕНИЕ
МИНИРУЮЩЕЙ МОЛИ-ПЕСТРЯНКИ 18

Секция «Зеленая химия для устойчивого развития»

Алаторцев О.А., Артоболевский С.В., Махров Д.Е., Венер М.В.

ОЦЕНКА ЭНЕРГИИ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ В
МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОГИДРАТАХ
ЛЕКАРСТВЕННОГО НАЗНАЧЕНИЯ 22

Деревнин И.А., Тарасова М.А., Лусс А.Л., Дятлов В.А.

МОДИФИКАЦИЯ ЭТИЛ-2-ЦИАНОАКРИЛАТА ДЛЯ СИНТЕЗА НАНОРАЗМЕРНЫХ
НОСИТЕЛЕЙ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ НА ЕГО ОСНОВЕ 26

Бармина А.И., Кривобородов Е.Г., Занин А.А.

О МЕХАНИЗМЕ РАДИОЛИТИЧЕСКОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ ИМИДАЗОЛИЕВЫХ
ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЯ 29

Егорова А.Н., Иванькова Ю.И., Жегучева Ю.В., Цирельсон В.Г.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СИСТЕМЕ «МОДЕЛЬ ИОННОЙ ЖИДКОСТИ
(ДИМЕТИЛФОСФАТ-АНИОН-1 + NH₄⁺) – ЭЛЕМЕНТНАЯ СЕРА» 33

Сергина Т.С., Ивановская Е.В., Филимонова Е.А., Лусс А.Л., Дятлов В.А.

МЕТОД СВЕТОРАССЕЯНИЯ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ НАНОКОРПУСКУЛЯРНЫХ
НОСИТЕЛЕЙ ЛЕКАРСТВ, СИНТЕЗИРОВАННЫХ НА ОСНОВЕ НОВЫХ
ЦИАНАКРИЛАТНЫХ МОНОМЕРОВ 36

Секция

«Социально-экономические аспекты устойчивого развития»

Ергина В.Е., Молчанова Я.П. РОССИЙСКИЙ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ ДМИТРИЯ ИВАНОВИЧА МЕНДЕЛЕЕВА КАК «ЗЕЛЁНЫЙ» ВУЗ: ПЕРСПЕКТИВЫ ПРЕВРАЩЕНИЯ.....	40
Киракосян Д. В., Молчанова Я. П. АНАЛИЗ ПЕРВЫХ ПОСЛЕДСТВИЙ НЕФТЯНОГО РАЗЛИВА В НОРИЛЬСКЕ	43
Савельева А. Н., Додонова А. А. ОБРАЗОВАНИЕ В ОБЛАСТИ ЗЕЛЁНОЙ ХИМИИ КАК ВОЗМОЖНОСТЬ ДОСТИЖЕНИЯ УСТОЙЧИВОГО РАЗВИТИЯ СТУДЕНТАМИ ХИМИКАМИ	47
Роганова А.А., Хачатуров-Тавризян А.Е. РАЗРАБОТКА СТРАТЕГИИ ИННОВАЦИОННОГО РАЗВИТИЯ НЕФТЕГАЗОВОГО КОМПЛЕКСА НА ОСНОВЕ СИСТЕМНОГО ПОДХОДА.....	51

Секция «Окружающая среда и устойчивое развитие»

УДК 63

Лазарев В.М., Корнеев Д.А.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КАРБОНОВЫХ ФЕРМ ДЛЯ ФИКСАЦИИ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА

Корнеев Даниил Александрович, бакалавр 1-го года обучения, к кафедре не прикреплен;

korneev06102002@gmail.com.

Лазарев Валерий Михайлович, кандидат химических наук, доцент кафедры общей и неорганической химии; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

*В статье описывается карбоновая ферма, её возможности в использовании для фиксации атмосферного углерода. Так же авторы рассматривают механизм фотосинтеза, как базисный механизм функционирования карбоновой фермы. На основе калориметрического анализа поверхности листа делается вывод об интенсивности процесса фотосинтеза различных растений в отличающихся температурных условиях.**Ключевые слова: фиксация углерода; глобальное потепление; фотосинтез; карбоновая ферма; парниковый эффект***THE USE OF CARBON FARMS FOR CARBON DIOXIDE FIXATION**

Korneev D.A., Lazarev V.M.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

*The article describes a carbon farm and its usage to fixate the atmosphere carbon. Also the authors consider to mechanism of photosynthesis as a base mechanism in carbon farms work. Based on calorimetric analysis of leaf authors make a conclusion about intensity of photosynthesis in different temperature environment.**Key words: carbon fixation; global warming; photosynthesis; carbon farm; greenhouse effect***Введение**

В настоящее время человечество столкнулось с проблемой глобального потепления связанного с увеличением парникового эффекта [1,2], вызванного нарушением природного круговорота углерода (рис. 1). Большой вклад в увеличение парникового эффекта вносит диоксид углерода (CO_2), который за последние несколько сотен лет стал активно выделяться в атмосферу ввиду увеличения объёмов сжигаемого человеком топлива (уголь, продукты переработки нефти, природный газ) [1,2].

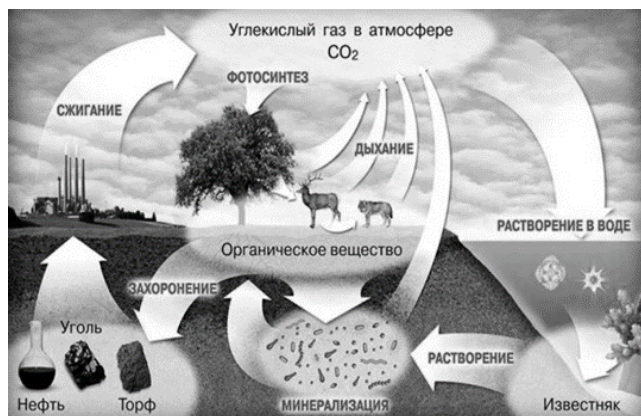


Рис. 1. Круговорот углерода.

Углерод, миллионами лет копившийся в литосфере, начал выделяться в атмосферу, а леса, численность которых редет с каждым годом, не могут возвращать углерод в литосферу и поддерживать прежний состав воздуха. Во многом данная проблема обусловлена условиями, в которых происходило запасание углерода в литосфере, а точнее их отсутствием. Таким образом перед нами стоит задача увеличение продуктивности фиксации углекислого газа

растениями и разработка наиболее рациональных и эффективных методов хранения или же использования полученного в результате фотосинтеза углерода [2].

Механизм фотосинтеза и его эффективность в различных условиях.

Всем нам хорошо известно общее уравнение реакции фотосинтеза: 6 молекул диоксида углерода, 6 молекул воды образуют одну молекулу глюкозы и 6 молекул кислорода [3]. Однако, рассматривая механизм фотосинтеза мы обнаружим множество факторов, способных повлиять на его эффективность, тогда приведённое выше уравнение покажется больше уравнением в идеальных условиях. В реальности у фотосинтеза имеется большое количество лимитирующих факторов, которые включают в себя:

1) Тепло окружающей среды во многом определяет скорость фотосинтеза как в конкретный период времени (разница температур поверхности листа и окружающей среды ввиду того, что фотосинтез является эндотермической реакцией и не возможен при пониженных температурах) так и своим влиянием на жизнедеятельность растения в целом (повреждения растений под действием сильно повышенной или пониженной температуры ведут к уменьшению эффективности фотосинтеза или полной утраты этой функции) [4].

2) Свет является не менее лимитирующим фактором чем тепло. Он переводит хлорофилл в возбуждённое состояние, инициирует процессы фотосинтеза и фотолиза воды. Отсутствие света делает процесс фотосинтеза невозможным [4].

3) Вода, как важнейшая молекула всех биологических систем сильно ограничивает эффективность фотосинтеза при её недостатке как из-за ограничения всех жизненных функций в целом, так и из-за прямой зависимости эффективности фотосинтеза от тургорного давления в фотосинтезирующих тканях, при сильном уменьшении тургора фотосинтез прекращается совсем [4].

Проект карбоновой фермы и методы его реализации.

Карбоновыми фермами называют различные сельскохозяйственные методы, направленные на поглощение углекислого газа из атмосферы и его дальнейшей фиксации на длительные периоды времени. Реализуются карбоновые фермы многими путями: озеленение огромных вырубленных пространств деревьями, максимально эффективно фиксирующими углерод из атмосферы, выращивание больших объёмов морских водорослей [6] и их захоронение в глубинах океана, восстановлением болот [5].

Частично все эти проекты смогут увеличить объёмы углекислого газа, вовлекаемого в круговорот углерода, однако, как было упомянуто выше, углерод в современных реалиях больше не может быть погребён в виде угля или природных углеводородов, из-за чего-то количество диоксида углерода, которое человечество высвободило за сотни лет так и

останется несвязанным и влияющим на парниковый эффект. Предполагается несколько путей реализации проекта. Восстановление лесов, строительство карбоновых полигонов с участием самых эффективных растений-фиксаторов углерода. Довольно существенным увеличением продуктивности таких растений на полигонах является их генетическая модификация, с помощью которой можно добиться увеличения эффективности фотосинтеза. Дополнительной мерой для увеличения продуктивности высаженных деревьев может послужить отбор пород или гибридов деревьев на основе скорости их роста и интенсивности фотосинтеза.

Исследовательская работа.

В данной работе проводится изучение эффективности фотосинтеза различных растений в период активной вегетации. Производится термохимическая оценка эффективности фотосинтеза различных растений, на основе термической оценки поверхности листа и сравнения полученной температуры с энтальпией образования одной молекулы глюкозы в ходе эндотермической реакции. На основе полученных данных делается вывод об возможностях использования различных растений в проектах карбоновых ферм, рациональности использованного метода анализа эффективности, необходимости его доработки.

Таблица 1. Оценка термическое сравнение температур фотосинтезирующих частей растения

Исследуемый образец	Температуры, С°			Изменение температуры, Δt, С°			Среднее изменение температуры, Δt, С°
	19.07	09.08	24.08	19.07	09.08	24.08	
Сосна	23,8	20,1	20,3	4,2	8,9	10,7	7,933333
Дуб	23,3	18,7	23,3	4,7	10,3	7,7	7,566667
Ель	23,9	18,9	26,2	4,1	10,1	4,8	6,333333
Орех	26,8	19,1	22,6	1,2	9,9	8,4	6,5
Крапива	23,6	21,4	20,5	4,4	7,6	10,5	7,5
Малина	23,3	19,6	22,1	4,7	9,4	8,9	7,666667
Овёс	24,2	20,4	25,4	3,8	8,6	5,6	6
Смородина	22,1	19,1	23,3	5,9	9,9	7,7	7,833333
Трава	23,7	25,4	18,8	2,7	1,4	1,9	2
Температура почвы*	26,4	26,8	20,7	-	-	-	-
Температура воздуха	28	29	31	-	-	-	-

*для оценки эффективности травы рациональнее использовать температуру на поверхности почвы, как температуру среды, в которой находятся фотосинтезирующие части.

Для каждого растения производится измерение температуры поверхности фотосинтезирующей части, после чего, высчитывается разница температуры окружающей среды и фотосинтезирующей части в соответствующее время замера температуры. Полученную разность температуры вносят в таблицу, высчитывают среднее значение изменения температуры, по этому значению производится сравнение эффективности фотосинтеза на основе знания о том, что фотосинтез является реакцией протекающей с поглощением тепла. Таким образом растение с наибольшей средней разницей температур будет самым эффективным на карбоновых полигонах.

$\Delta t = t_{\text{среды}} - t_{\text{образца}}$ – изменение температуры в процессе фотосинтеза;

$\bar{\Delta t} = (\sum \Delta t_i) / i$ – среднее изменение температуры

Заключение

На основе представленной в статье информации, а также проделанной работы делается вывод о действительной роли карбоновых ферм в фиксации углерода, их влиянии на снижение парникового эффекта, и предлагаются методы использования углерода, полученного на карбоновых фермах. Главным образом оспаривается возможность полностью устранить действие парникового эффекта на землю посредством использования карбоновых ферм. В первую очередь карбоновые фермы служат лишь временной мерой, позволяющей человечеству увеличить время на разработку соответствующих технологий, способных полностью побороть парниковый эффект или же его под контроль. Необходимо также провести дополнительное исследование по поводу подбора кандидатов на использование на карбоновых полигонах в средней полосе Российской Федерации.

Список литературы

1. EPA. Greenhouse Gas Emissions [Электронный ресурс] // U.S. Environmental Protection Agency: сайт. — URL: <https://www.epa.gov/ghgemissions/overview-greenhouse-gases> (дата обращения 10.04.2021)
2. Устойчивое развитие [Электронный ресурс] сайт. — URL:

<https://www.un.org/sustainabledevelopment/ru/climate-change/> (дата обращения 10.04.2021)

3. Эффективность фотосинтеза [Электронный ресурс] // Википедия, свободная энциклопедия сайт.

4. — URL: https://ru.wikipedia.org/wiki/Эффективность_фотосинтеза (дата обращения 10.04.2021)

5. Крамер, П. Д. Физиология древесных растений [Текст] / Пол Д. Крамер, Теодор Т. Козловский ; пер. с англ. И. Г. Завадской и др. - Москва : Лесн. пром-сть, 1983. - 462 с..

6. Zedler, Joy B.; Kercher. "WETLAND RESOURCES: Status, Trends, Ecosystem Services, and Restorability"

7. Duarte, Carlos M.; Wu, Jiaping; Xiao, Xi; Bruhn, Annette; Krause-Jensen. "Can Seaweed Farming Play a Role in Climate Change Mitigation and Adaptation?" [Электронный ресурс] // *Frontiers in Marine Science* сайт. — URL:

<https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fmars.2017.00100/full> (дата обращения 10.04.2021)

УДК 2788.7642

Суворова А.А.

МЕТОДИКА КОЛИЧЕСТВЕННОГО АНАЛИЗА СОДЕРЖАНИЯ ЧАСТИЦ МИКРОПЛАСТИКА В ПЛАНКТОННЫХ ОРГАНИЗМАХ

Суворова Анастасия Александровна – магистрант 1-го года обучения кафедры ЮНЕСКО «зеленая химия для устойчивого развития»; lovesuvorchik@mail.ru.

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

Статья посвящена проблеме загрязнения океана микропластиком и разработке метода растворения органических тканей, позволяющего количественно определить наличие пластиковых частиц в планктонных организмах.

Ключевые слова: микропластик, планктонные организмы, Artemia salina, морские загрязнения, морской мусор.

THE METHOD OF QUANTITATIVE ANALYSIS OF THE CONTENT OF MICROPLASTIC PARTICLES IN PLANKTONIC ORGANISMS

Suvorova A.A.¹.

¹D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article is devoted to the problem of microplastics ocean pollution and to the organic tissue dissolution method development, which allows us to quantify the presence of plastic particles in planktonic organisms.

Key words: microplastics, planktonic organisms, Artemia salina, marine pollution, marine debris.

Введение

Пластмассы широко используются во всех отраслях нашей повседневной жизни, благодаря своему малому весу, долговечности, хорошей пластичности, а также низкой цене [1]. Мировой годовой объём пластмасс превысил 300 миллионов тонн [2]. Однако интенсивное потребление и быстрая утилизация пластмассовых изделий приводят к заметному накоплению полимерных отходов. Опасность этих изделий заключается в том, что они разлагаются в окружающей среде в течение очень долгого времени (до столетий), а также они склонны распадаться на более мелкие частицы, которые называются микропластиком [3].

Особую опасность полимерные отходы представляют для океана, где они могут незаметно накапливаться в течение долгого времени, при этом возможности «уборки» океана человеком крайне ограничены. Еще в 70-х годах двадцатого столетия были замечены мельчайшие пластиковые кусочки в открытом океане, а чуть позже выяснили, что их количество увеличивается с каждым годом, нанося вред биоте [4]. Имея сходные размеры и внешний вид с натуральными продуктами питания, эти небольшие фрагменты представляют потенциальную опасность для многих морских организмов, включая зоопланктон. Съеденные частицы микропластика могут повреждать внутренние органы морских обитателей, быть носителями различных токсичных загрязняющих веществ и тяжёлых металлов, а также попадать в трофическую цепь [5].

Изучение микропластика является актуальной экологической проблемой 21-го века. В настоящее время опубликовано достаточное количество работ, посвященных оценке содержания пластика в мировых водах [6].

Однако не так много публикаций посвящено

изучению содержания частиц микропластика в живых системах, в частности, в планктонных сообществах, в то время как именно планктон является основной кормовой базой для огромного количества морских обитателей, многие из которых употребляются человеком в пищу. Небольшое количество публикаций на данную тему связано с методологическими трудностями выделения, идентификации и количественной оценки частиц микропластика из живых организмов.

Экспериментальная часть

В данной научно-исследовательской работе целью являлось разработать методику для оценки содержания частиц микропластика в планктоне.

Artemia salina имеет большое значение для науки. На примере этих ракообразных изучается структурная организация хромосом, нуклеиновых кислот, механизмы биосинтеза белка, роль ферментов в различных процессах и т.п. Устойчивость этих существ делает их идеальными тестовыми организмами в экспериментах. А также *Artemia salina* является одним из стандартных организмов для тестирования токсичности химических веществ.

Были выбраны именно эти рачки, поскольку по способу питания они являются активными фильтраторами. *Artemia salina* не обладают способностью избирательно захватывать и заглатывать только пищевые частицы. Если в воде имеется взвесь тонкого песка и пищевых частиц, заглатываются и те, и другие. К тому же отмечено, что твердые частички стимулируют сам акт глотания.

В рамках первого этапа была поставлена задача вырастить рачков *Artemia salina*. Для этого в искусственно созданную морскую воду (35 г соли/литр) с аэрацией поместили цисты. Спустя 48 часов, при отборе первой пробы, в бинокляре были замечены первые науплии (личинки артемий). Затем

в течение следующих двух недель рачки поедали микроводоросли *Tetraselmis*.

Когда взрослые особи достигли размеров от 10 мм до 15 мм, часть из них была выловлена и помещена в аквариум, снабженный электрической кормушкой, в которой находились частицы микропластика. В течение следующего дня рачки поедали мельчайшие пластиковые обломки (Рис.1), а затем были зафиксированы 40%-ым формалином для дальнейшего исследования.



Рис.1 Фрагмент микропластика в кишечнике рачка *Artemia salina*.

После изъятия из формалина рачки предварительно промывались дистиллированной водой. Затем мягкие ткани помещались в коническую колбу с 10%-ым раствором перекиси водорода, которую закрывали фольгой и ставили на электрическую плиту с мешалкой при $t=30$ °С. Как только раствор становился прозрачным, растворение прекращалось.

Далее образцы отфильтровывались с помощью целлюлозно-мембранного фильтра. Вещества, собранные на фильтрах, промывались в стеклянных бутылках с использованием 10%-ой перекиси водорода для полного растворения органических веществ. Затем в колбу добавлялся концентрированный раствор хлорида натрия для полного отделения частиц микропластика и других антропогенных остатков. Смешанные жидкости

оставляли на ночь для полного осаждения. Вышележащая вода осторожно удалялась и фильтровалась на целлюлозно-бумажном фильтре с использованием вакуумной системы. Собранные вещества помещались в чистую чашку Петри с крышкой для дальнейшего качественного и количественного анализа микропластика методами ИК-спектроскопии и оптической микроскопии.

Заключение

Таким образом, при помощи разработанной техники выделения пластмассовых частиц из планктона, а также при помощи методов анализа была поставлена методика, позволяющая количественно оценить в них наличие микропластика.

В дальнейшем поставленный метод может быть использован для мониторинга уровня загрязнения вод Мирового океана частицами микропластика.

Автор выражает благодарность Набиуллину А.Ф. за предоставленное исследовательское оборудование в лаборатории инженерного материаловедения МГУ им. М.В. Ломоносова.

Список литературы

1. Barnes D., Galgani F., Thompson R., Barlaz M. Accumulation and fragmentation of plastic debris in global environments. //Philos Trans. R. Soc. B. **2009**. 364(1526):1985–1998.).
2. Plastic Europe, **2016**.
3. Wang C., Zhao J., Xing B. Environmental Source, Fate, and Toxicity of Microplastics. // Journal of Hazardous Materials. **2020**. V.407.
4. Cole M., Lindeque P., Halsband C., Galloway T. S. Microplastics as contaminants in the marine environment. // Marine pollution bulletin. **2011**. № 62. P. 2588-2597.
5. Mauro R., Kupchik M., Benfield M. Abundant plankton-sized microplastic particles in shelf waters of the northern Gulf of Mexico. // Environmental Pollution. **2017**. V. 230. P. 798-809.
6. Литвинюк Д.А., Сахонь Е.Г., Багаев А.В. Методика отбора проб, сепарации и количественного учёта частиц микропластика в поверхностных водах Севастопольской бухты. **2019**.

УДК 546.49;121 546.492

Федосеев А.Н., Макарова А.С.

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ИММОБИЛИЗАЦИИ РТУТИ В ОТХОДАХ НА ОСНОВЕ ПРИНЦИПОВ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ РТУТИ И ЕЕ СОЕДИНЕНИЙ В СУЛЬФИД РТУТИ

Федосеев Андрей Николаевич, студент 2 курса магистратуры института химии и проблем устойчивого развития; e-mail: andrew7080@yandex.ru

Макарова Анна Сергеевна, д.т.н., профессор кафедры ЮНЕСКО «Зелёная химия для устойчивого развития». Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия.

В данной статье предложена технология иммобилизации ртути из ртутьсодержащих отходов, с учётом принципов зелёной химии. Исследован процесс преобразования ртути и ее соединений в сульфид ртути до достижения предельно-допустимой концентрации ртути в почве.

Ключевые слова: иммобилизация, иммобилизация ртути, пирит, ртуть, ртутьсодержащие отходы.

DEVELOPMENT OF A TECHNOLOGY FOR IMMOBILIZATION OF MERCURY IN WASTE BASED ON THE PRINCIPLES OF CONVERSION OF MERCURY AND ITS COMPOUNDS INTO MERCURY SULFIDE

Fedoseev Andrey Nikolaevich, Makarova Anna Sergeevna

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia.

This article proposes a technology for the immobilization of mercury from mercury-containing waste, taking into account the principles of green chemistry. The process of transformation of mercury and its compounds into mercury sulfide until reaching the maximum permissible concentration of mercury in the soil has been investigated.

Keywords: immobilization, immobilization of mercury, pyrite; mercury, mercury-containing waste.

Введение

Ртуть, - наиболее опасный во многих отношениях тяжёлый металл, - в связи с высокой мобильностью в настоящее время является признанным глобальным загрязнителем. По этой причине несмотря на отсутствие на той или иной территории источников интенсивного промышленного ртутного загрязнения его актуальность может иметь место по ряду других причин. К их числу следует отнести ртутьсодержащие бытовые отходы, трансграничный перенос ртути, геохимические особенности территорий.

Из всех соединений ртути наиболее стабильной ее формой является сульфид (киноварь), который существует в двух формах: стабильной α -HgS (гексагональная, красная) и метастабильной β -Hg (кубическая, черная). Обе формы имеют низкую растворимость в воде ($9 \cdot 10^{-20}$ мг/л) и растворах кислот, не выделяют ртутных паров, стабильны в широком температурном интервале (температура сублимации – 580 °С) и на три порядка величины менее токсичны, чем сама ртуть и потому одним из широко используемых методов иммобилизации ртути и / или ее соединений является ее превращение в сульфиды. Необходимо также отметить, что в соответствии с Федеральным классификационным каталогом отходов (ФККО 2017) утвержден Приказом Росприроднадзора от 22.05.2017 № 242 (взамен ФККО 2016) и действует с 24 июня 2017 (в ред. Приказов Росприроднадзора от 20.07.2017 № 359, от 28.11.2017 № 566, от 02.11.2018 № 451 (в т.ч. с изменениями вст. в силу 08.12.2018)) к 4 классу

опасности относятся следующие виды обезвреженных ртутьсодержащих отходов:

- лом ртутных, ртутно-кварцевых, люминесцентных ламп термически демеркуризованный;

- бой стекла после демеркуризации ртутьсодержащих изделий раствором на основе полисульфида кальция;

- отходы демеркуризации боя ртутьсодержащих изделий и люминофора раствором на основе полисульфида кальция.

То есть после химической демеркуризации, например, полисульфидом кальция, в результате которой образуется сульфид ртути отходы могут считаться неопасными и подлежать захоронению на полигонах ТКО.

Глобальные инициативы, такие как Минаматская конвенция (конвенция в настоящий момент подписана 128 странами и ратифицирована 113. Российская Федерация также подписала конвенцию в 2014 году и в настоящее время ведется обсуждение о возможности ее ратификации), определили ртутьсодержащие отходы (PCO) как вещества, состоящие из ртути или ртутных соединений, которые оказывают негативное воздействие на окружающую среду и здоровье человека. [1]. Был проведен анализ научных интересов в области PCO с составлением семантической карты (в зависимости от частоты встречаемости ключевых слов вершины графа имеют разный размер (рис. 1)).

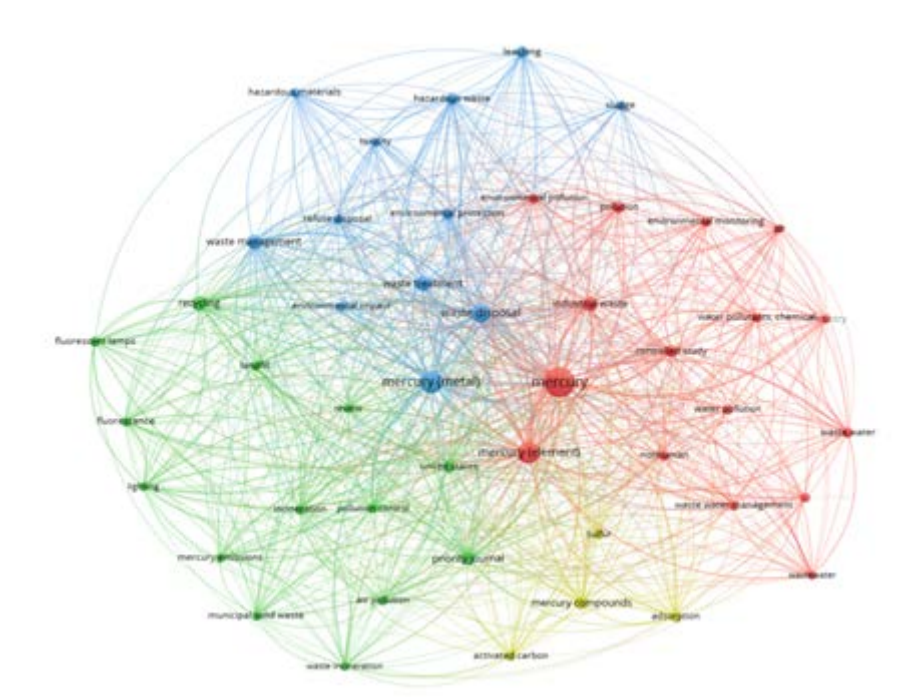


Рис. 1. Семантическая карта аспекта поиска — ртутьсодержащие отходы

Анализируя семантическую карту, можно отметить, что ртутьсодержащие отходы вызывают большой научный интерес, т.к. сопутствующими ключевыми словами с ртутьсодержащими отходами являются: опасные материалы, токсичность, опасные отходы, загрязнение воздуха и другие.

Базельская конвенция установила глобальные рамки в отношении обращения с ними: сбор, транспортировка и утилизация. Это означает, что должны соблюдаться строгие требования безопасности, чтобы предотвратить вторичное загрязнение в результате улетучивания или выщелачивания в водной среде. Для переработки вышеупомянутых отходов было предложено

ограничить поступления в окружающую среду ртути и ее соединений из PCO за счет иммобилизации. Одним из вариантов иммобилизации PCO является перевод в HgS , который считается плохо растворимым и стабильным веществом в окружающей среде [2].

Ранее нами была проверена возможность иммобилизации ртути серой [4], однако, результат иммобилизации достигался не более 95%, поэтому в данном исследовании рассматривался пирит и смесь серы и пирита.

Результаты иммобилизации металлической ртути различными серосодержащими соединениями (S_8 и FeS_2) представлены на рисунке 2.

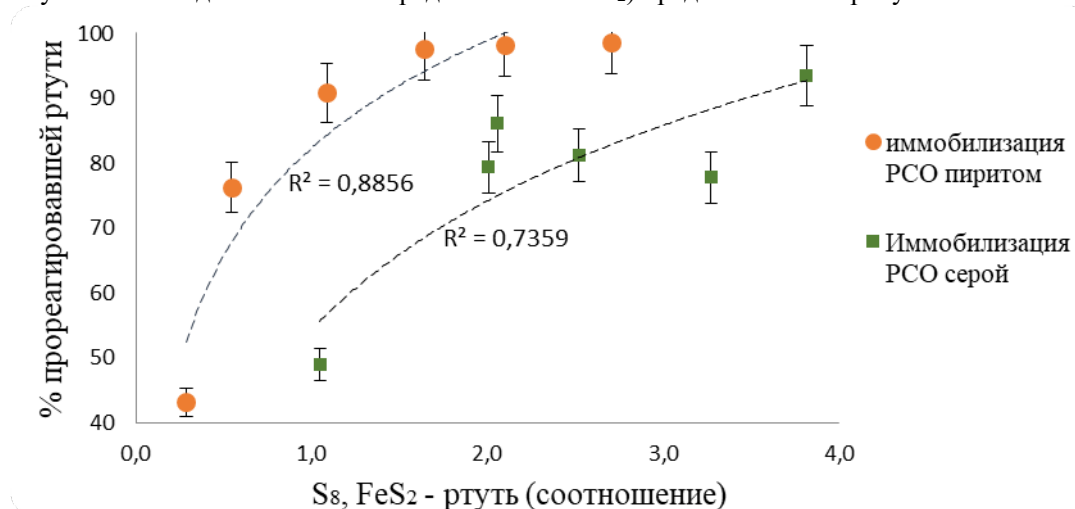


Рис. 2. Результаты иммобилизации металлической ртути серой и пиритом в PCO (соотношение ртути к стеклу в которых составляет 1:10). Продолжительность воздействия на реакционную смесь – 90 минут

Из графика на рисунке 2 видно, что пирит способствует более полной иммобилизации ртути, чем сера и при 90 минутах достигаются значительно лучшие результаты при меньшем расходе сырья. Необходимо отметить, что дополнительно

проведенные исследования с сульфидом железа показали явно более низкую способность данного реагента к иммобилизации ртути.

При соотношении $FeS:Hg$ равное 1, удалось достичь иммобилизации менее 60% содержащейся в

отходах металлической ртути, в то время как при иммобилизации PCO пиритом при тех же условиях было удавалось перевести в сульфид более 75%.

Кроме того, было установлено, что пирит лучше по сравнению с элементарной серой (рис. 3) способствует иммобилизации оксида ртути. Образование оксидов ртути по мнению многих авторов возможно при доступе кислорода в процессе иммобилизации.

Также была исследована иммобилизация ртути смесью серы и пирита при различном соотношении как серы, так и пирита (рис. 4).

Количество смеси бралось по отношению ко ртути в соотношении $Hg:(FeS_2+S_8) = 1:3$. Установлено, что увеличение содержания серы приводит к заметному снижению иммобилизации, а увеличение содержание пирита в смеси не дает никакого эффекта.

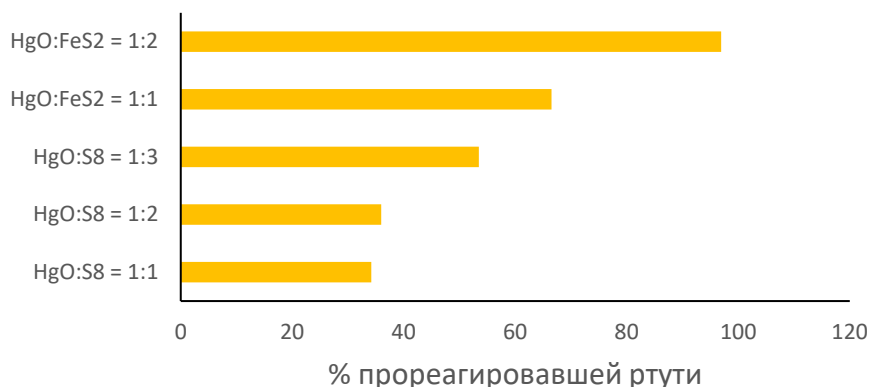


Рис. 2. Результаты иммобилизации оксида ртути серой и пиритом в PCO. Продолжительность воздействия на реакцию смесь – 90 минут

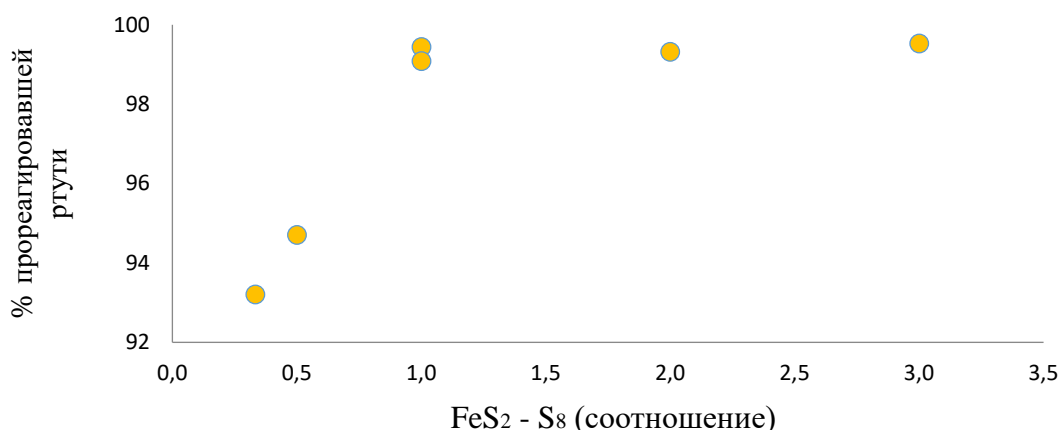


Рис. 4. Иммобилизация ртути смесью серы и пирита при различных соотношениях серы и пирита

Пирит способствует более полной иммобилизации ртути, чем сера и при 90 минутах достигаются значительно лучшие результаты при меньшем расходе сырья.

Значительную иммобилизацию (более 99%) за 90 минут можно достичь при использовании смеси серы и пирита при соотношении 1:1.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 18–29–24212) и связана с достижением цели № 12: Обеспечение перехода к рациональным моделям потребления и производства.

Список используемой литературы

1. Ртутьсодержащие отходы: источники, политика и технологии обработки для восстановления и безопасного удаления ртути / – Пер. ст.: Chalkidis

A., Jampaiah D., Aryana A., Wood C.D., Hartley P.G., Sabri Y.M., Bhargava S.K. из журн.: J Environmental Management. – 2020. – Vol. 270,110945.

2. Уточнение термодинамических констант сульфидов ртути (II) в равновесии с метациннабаром при субмикромольных концентрациях водных сульфидов. / – Пер. Drott A., Björn E., Bouchet S., Skyllberg U. из журн.: Environmental Science & Technology. – 2013. – Vol. 47 (9) – P. 4197–4203.

3. Разработка технологии иммобилизации ртути в твердых ртутьсодержащих отходах. / – Пер. Makarova A.S., Yarovaya O.V., Fedoseev A.N., Yakubovich L.M. из журн.: Cleaner Engineering and Technology. – 2020. – Vol. 1. 100030.

УДК 504.4.054

Сапрошина А.А., Макарова А.С.

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ СОЛЕЙ ОКСИЭТИЛИДЕНДИФОСФОНОВОЙ КИСЛОТЫ ДЛЯ ОЧИСТКИ ВОДНЫХ ОБЪЕКТОВ

Сапрошина Анастасия Александровна, магистрант кафедры ЮНЕСКО “Зеленая химия для устойчивого развития”. Институт химии и проблем устойчивого развития (ИПУР). Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Москва, Россия.

E-mail: nakasap@mail.ru

Макарова Анна Сергеевна, д.т.н., профессор кафедры ЮНЕСКО “Зеленая химия для устойчивого развития”. Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия.

E-mail: annmakarova@mail.ru

В результате разнообразной деятельности человека в водные объекты попадает большое количество тяжелых металлов. Восстановление окружающей среды при помощи растений вызывает широкий интерес во всем мире благодаря возможностям, которые открывает технология фиторемедиации. В статье рассматривается использование углеродного волокна в качестве носителя $K_2OЭДФ$, что способствует лучшей сорбции тяжелых металлов в сточной воде. Процесс очистки происходит благодаря естественной способности ряда живых организмов и растений поглощать, разлагать и перерабатывать загрязнители.

Ключевые слова: фиторемедиация; биоремедиация; тяжелые металлы; загрязнение окружающей среды; очистка сточных вод.

ESTIMATION OF THE EFFICIENCY OF THE USE OF SALTS OF HYDROXYETHYLIDENE DIPHOSPHONIC ACID FOR CLEANING WATER BODIES

Saproschina Anastasia, Makarova Anna

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia.

As a result of various human activities, a large amount of metals enters water bodies. Plant-based environmental regeneration has generated widespread interest worldwide because of the opportunities offered by phytoremediation technology. This article discusses the use of carbon fiber as a carrier of K_2HEDP , which promotes better sorption of heavy metals in wastewater. The cleaning process occurs due to the natural ability of a number of living organisms and plants to absorb, decompose and recycle pollutants.

Keywords: phytoremediation; bioremediation; heavy metals; environmental pollution; wastewater treatment

Введение

Соединения тяжелых металлов (ТМ) являются наиболее распространенными загрязнителями, поступающими в водоемы с промышленными отходами и представляющими значительную опасность для биоценозов при достижении концентрации ТМ в воде выше санитарно-гигиенических норм [1].

Одним из эффективных способов очистки водных объектов от загрязнений, включая ТМ, является фиторемедиация. При помощи растений можно очистить компоненты окружающей среды от металлов, вследствие чего постепенно происходит внедрение фиторемедиации – комплекс методов очистки сточных вод, грунтов и атмосферного воздуха с использованием зеленых растений, которые позволяют удалить загрязнители [2].

Искусственные корни из углеродного волокна помогают повысить эффективность процесса очистки водных объектов от загрязнителей. Углеродное волокно состоит из связки сверхтонких нитей, которые постепенно распускаются в воде и занимают значительную по объему площадь [3]. Микроорганизмы, находящиеся в воде, оседают на большой поверхности распустившихся нитей и

образуют биопленку. Эта биопленка адсорбирует загрязнители, где они расщепляются микроорганизмами [4].

В представленной работе проводилась оценка эффективности использования солей $K_2OЭДФ$ на искусственных корнях для очистки водных объектов. Для этого оценивались пригодность водного гиацинта (эйхорнии – лат. *Eichhornia crassipes*) для целей фиторемедиации, влияние $K_2OЭДФ$ на сорбцию ТМ в сточной воде, а также возможность использования углеродного волокна в качестве носителя $K_2OЭДФ$.

Экспериментальная часть

Экспериментальная установка представляет собой 7 контейнеров с водой контрольной и экспериментальной группы. Для создания искусственных корней использовалось углеродное волокно. Длина одного пучка искусственных корней составляла 20 см, масса пучка I типа 1,6 г (m), масса пучка II типа 3,2 г (2m). К каждому растению в контейнерах №3–7 были прикреплены по одному пучку углеродного волокна (для растений в контейнерах №3,5 – I типа, для растений в контейнерах №4,6,7 – II типа).

Необходимо было приготовить раствор с $K_2OЭДФ$: в конической колбе смешивалось 500 мл

дистиллированной воды и 20 мл исходного раствора (массовая доля $K_2OЭДФ = 28,3\%$). В растворе с $K_2OЭДФ$ производилось вымачивание искусственных корней в течение 2 недель для проведения эксперимента в контейнерах №5-7.

Растения (эйхорния – лат. *Eichhornia crassipes*) с прикрепленным углеродным волокном были помещены в контейнеры экспериментальной группы (№2–7), в которые предварительно были добавлены различные концентрации Ni и Zn.

Над контейнерами были размещены фитолампы, позволяющие поддерживать необходимые условия для роста и развития растений (рис. 1).

Продолжительность эксперимента составляла 18 дней. Отбор проб воды производился в 1 (через 5 минут после добавления загрязнителей), 2, 4, 7, 9, 11, 14 и 18 день эксперимента. Анализы образцов воды на содержание в воде тяжёлых металлов производились с помощью атомно-эмиссионного спектрометра с индуктивно связанной плазмой iCAP6300 Duo в лаборатории ЦКП НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА. Прибор осуществляет регистрацию эмиссионных спектров различных элементов и дальнейший расчет содержания элементов, на основе полученных спектральных данных.

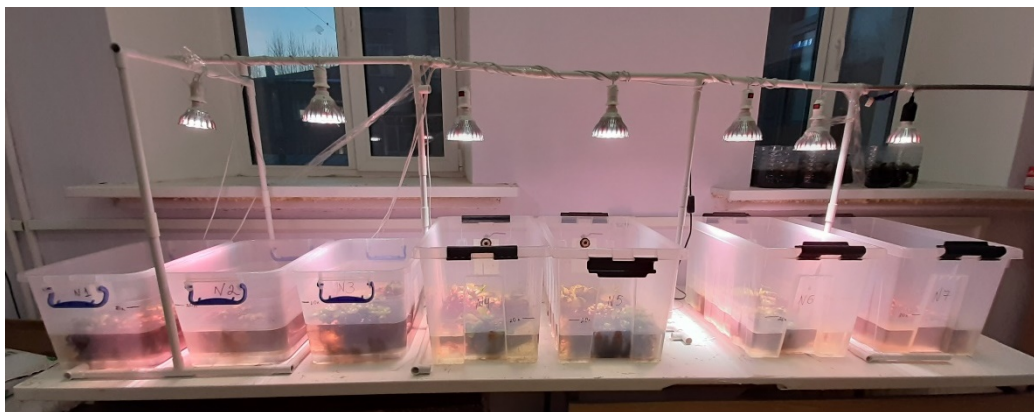


Рис.1. Установка для проведения эксперимента

Контейнер 1 – КОНТР.: контрольный - без загрязнителей, без углеродного волокна (у/в)

Контейнер 2 – ТМ: без углеродного волокна, с добавлением ТМ (Zn, Ni)

Контейнер 3 – ТМ + у/в I: с углеродным волокном I типа (с массой m); с добавлением ТМ

Контейнер 4 – ТМ + у/в II: с углеродным волокном II типа (с массой 2m); с добавлением ТМ

Контейнер 5 – ТМ + у/в I + $K_2OЭДФ$ (с промыв.): с углеродным волокном I типа, предварительно вымоченном в растворе $K_2OЭДФ$, перед экспериментом искусственные корни промывались водопроводной водой в течение 5 минут; с добавлением ТМ

Контейнер 6 – ТМ + у/в II + $K_2OЭДФ$ (с промыв.): с углеродным волокном II типа, предварительно вымоченном в растворе $K_2OЭДФ$, перед экспериментом искусственные корни промывались водопроводной водой в течение 5 минут; с добавлением ТМ

Контейнер 7 – ТМ + у/в II + $K_2OЭДФ$ (без промыв.): с углеродным волокном II типа, предварительно вымоченном в растворе $K_2OЭДФ$; с добавлением ТМ

На рисунке 2 приведено сравнение внешнего вида растений в первый и последний день эксперимента.

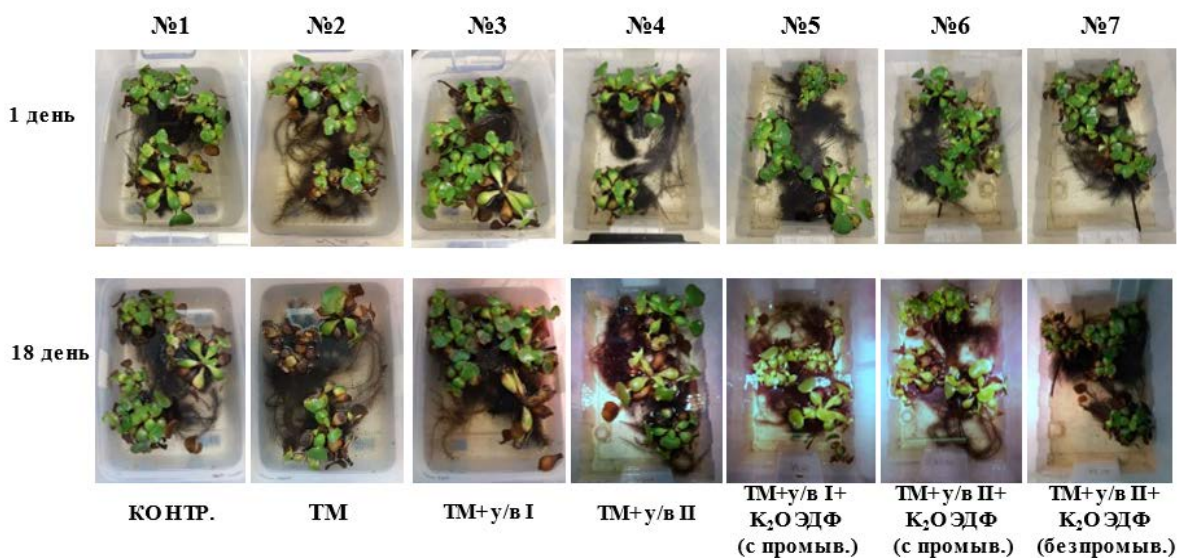


Рис.2. Сравнение внешнего вида растений в первый и последний день эксперимента

После окончания эксперимента было проанализировано содержание металлов (Zn, Ni) в воде. Количество оставшихся в воде ТМ после проведения фиторемедиации представлено на гистограммах (рис. 3, 4). За 100% принято содержание ТМ в воде в 1 день проведения фиторемедиации. По гистограммам (рис. 3, 4) можно сделать вывод, что в результате проведения эксперимента с течением времени концентрация тяжелых металлов в воде стремительно снижается.

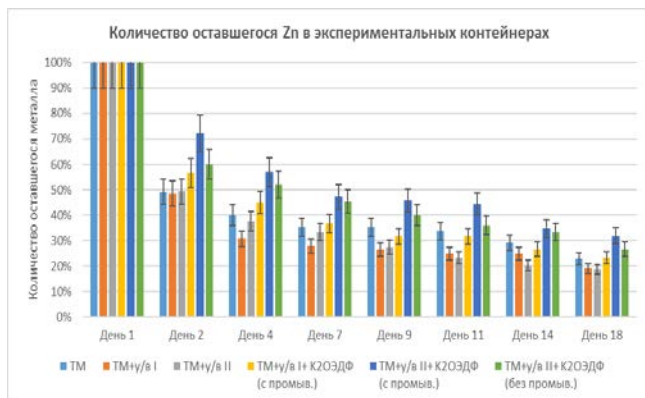


Рис. 3. Количество оставшегося тяжёлого металла (Zn) в воде

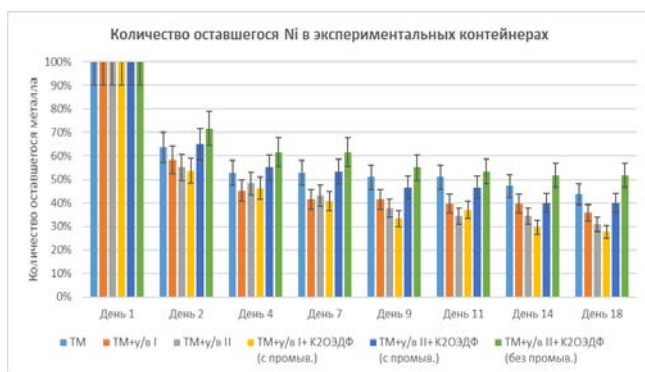


Рис. 4. Количество оставшегося тяжёлого металла (Ni) в воде

Заключение

В результате проведенного эксперимента было установлено, что водный гиацинт (лат. *Eichhornia crassipes*) способен накапливать ТМ и обладает устойчивостью к их действию, это позволяет использовать данный вид растения для извлечения металлов из воды в процессе фиторемедиации.

По результатам анализов в проведенном эксперименте можно сделать вывод, что искусственные корни эффективно сорбируют тяжелые металлы из сточной воды, это позволяет использовать их в процессе фиторемедиации.

Применение раствора K_2O_3DF на углеродных волокнах с массой m оказало положительное влияние на степень очистки воды от избыточной концентрации Ni, количество оставшегося тяжелого металла в воде имеет наименьший показатель (28%) среди данных по пробам воды других контейнеров экспериментальной группы. Количество оставшихся тяжелых металлов в воде в присутствии раствора K_2O_3DF на углеродных волокнах с массой $2m$ больше, чем при отсутствии данного сорбента. Можно сделать вывод, что требуются дополнительные исследования с использованием других концентраций исходного раствора K_2O_3DF .

Наименьшее значение оставшегося тяжелого металла среди проб воды было зафиксировано в контейнере с применением углеродного волокна, предварительно вымоченном в растворе K_2O_3DF . Исходя из полученных данных можно сделать вывод, что возможно использование углеродного волокна в качестве носителя K_2O_3DF .

Данная работа соотносится с 6 целью устойчивого развития — обеспечение наличия и рационального использования водных ресурсов и санитарии для всех, так как происходит восстановление изначальных показателей воды путем биоремедиации.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 18–29–24212).

Список использованной литературы:

1. Экология. Проблемы загрязнения окружающей среды тяжелыми металлами. Чистка водоемов от щелочных и тяжелых металлов с помощью высших водных растений. URL: <https://studwood.ru>. Дата обращения: 24.01.2021.
2. Титов А.Ф., Таланова В.В., Казнина Н.М., Лайдинен Г.Ф. Устойчивость растений к тяжелым металлам [отв. ред. Н.Н. Немова]; Институт биологии КарНЦ РАН. Петрозаводск: Карельский научный центр РАН, 2007. С. 172.
3. Углеродные волокна MiraCarbon для очистки водоемов, рек и стоков. Описание углеродного волокна. URL: <https://ochistka.btigroup.ru>. Дата обращения: 05.01.2021.
4. UNIDO, 2019. Water treatment with Carbon Fiber. URL: http://www.unido.or.jp/en/technology_db/1670. Дата обращения: 20.02.2021.

УДК

Полтавский Е.А., Кузнецов В.А.

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ПРОИЗРАСТАНИЯ КАШТАНА КОНСКОГО НА ТЕРРИТОРИИ ПАРКА ПОБЕДЫ Г. МОСКВЫ НА СОСТОЯНИЕ ДЕРЕВЬЕВ И РАСПРОСТРАНЕНИЕ МИНИРУЮЩЕЙ МОЛИ-ПЕСТРЯНКИ

Полтавский Евгений Алексеевич – магистрант 2-го года обучения кафедры «ЮНЕСКО Зелёная химия для устойчивого развития»; poltavskiyevgen@yandex.ru.

Кузнецов Владимир Алексеевич – доктор технических наук, профессор кафедры «ЮНЕСКО Зелёная химия для устойчивого развития»; vakuz@inbox.ru

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассмотрены факторы, влияющие на рост, развитие и минирование каштановой минирующей молью каштанов конских в Парке Победы в г. Москве. Показана разница в характеристиках почв рабаток и газонов, на которых произрастают каштаны конские в Парке Победы. Проведено обследование воздушного бассейна Парка Победы методом лихеноиндикации и пассивной дозиметрией. Показаны различия в степени минирования каштанов конских в Парке Победы на рабатках и на газонах.

Ключевые слова: каштан конский, посадки на рабатках и газонах, загрязнение воздушной среды, Охридский минёр - каштановая минирующая моль-пестрянка, состояние почв

THE INFLUENCE OF THE GROWING CONDITIONS OF HORSE CHESTNUT ON THE TERRITORY OF THE VICTORY PARK IN MOSCOW ON THE CONDITION OF TREES AND THE SPREAD OF THE MINING MOTH-MOTH

Poltavskiy E.A., Kuznetsov V.A.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article examines the factors influencing the growth, development and mining of chestnut-mining moths of horse chestnuts in Victory Park in Moscow.

Keywords: horse chestnut, planting on ridges and lawns, air pollution, Ohrid miner - chestnut miner moth, soil condition

Одна из Целей устойчивого развития провозглашенная ООН на период 2016—2030 гг. (Sustainable Development Goals № 11) напрямую связана с городами: «Обеспечение открытости, безопасности, жизнестойкости и экологической устойчивости городов и населенных пунктов». Одним из показателей для достижения данной цели является повышение эффективности экосистемных услуг, в частности их культурной составляющей, связанной с нематериальными выгодами, которые люди получают от экосистем посредством духовного обогащения, развития познавательной деятельности, рекреации [1] и повышением качества окружающей среды. Развитие и поддержание сети городских парков и озелененных участков в городах вносит значительный вклад в достижение данных задач.

Привычными и весьма распространенными деревьями в системе озеленения городов стали каштаны конские. Эти деревья, имеющие обычно широкую крону из крупных листьев, удивляют своей красотой весной в период цветения, дают много тени в летние жаркие дни, а осенью радуют причудливыми плодами. Однако в последние годы во многих местах с появлением и распространением каштановой минирующей моли или охридского минёра [2] эстетическое восприятие каштанов и ущерб, связанный с уменьшением эффективности экосистемных услуг во многих городах, резко возросли.

Как уже отмечалось ранее в работе [3] насаждения каштана конского в Парке Победы на Поклонной горе в г. Москве, в основном, произрастают в двух различных биотопах, на рабатках и газонах, расположенных вдоль аллеи Мира в Парке Победы г. Москвы параллельно Кутузовскому проспекту. Посаженные в одно и то же время деревья на рабатках и газонах имеют существенные отличия в росте и развитии. Листья каштанов, растущих на рабатках в отличие от листьев на деревьях, растущих на газонах, в значительной степени подвержены краевому некрозу и имеют более короткий период вегетации. Кроме того, минирование листьев деревьев каштанов и газонов Охридским минёром неоднородно: деревья рабаток больше подвержены минированию, нежели деревья газонов.

Проведенные нами дополнительные исследования позволили выявить еще ряд отличий в росте и развитии каштанов на данной территории (рис. 1) и распространении Охридского минера на деревьях каштана конского растущих на одной и той же территории но в разных условиях.

Прежде всего, обращает на себя внимание разница в высоте деревьев, толщине стволов и размере листьев. Каштаны на газонах от 1,5 до 2 раз выше, чем в рабатках. Средний диаметр деревьев в рабатках оказался на 37% меньше, чем у деревьев, растущих на газонах.



Рисунок 1. Сравнение внешнего вида деревьев рабаток (справа) и газонов (слева) в 2021 году.

Листья каштанов на рабатках и на газонах разительно отличались друг от друга размерами и

формой листьев. В среднем, площадь листа на каштанах, растущих на рабатках, были в 1,5 раза меньше, чем листья на деревьях газонов (табл. 1).

Для исследования влияния состава атмосферного воздуха на рабатках и газонах помимо метода пассивной дозиметрии [3] был использован метод лишеноиндикации [5]. Осмотр лишайникового покрова проводился на деревьях рабаток и газонов, стоящих друг напротив друга. Лишайники, как известно, активно реагируют на состояние воздушной среды, поэтому, в городах редко можно встретить больше 4 видов лишайников на определенной территории. В нашем исследовании, как на рабатках, так и на газонах встречаются следующие виды (представлены в порядке убывания по распространённости): Пармелия бороздчатая, Гипогимния вздутая, Ксантория постенная.

Таблица 1.

Основные отличия в росте и развитии каштанов в Парке Победы

Место произрастания каштанов	Средняя длина окружности деревьев, *см.	Средняя высота деревьев, *м.	Средние размеры листьев, **см	
			Длина	Ширина
Рабатки	77 ± 10	4,5 ± 0,5	14 ± 5	6 ± 3
Газон	123 ± 10	6,5 ± 0,7	19 ± 5	8 ± 3

*Выборка из 15 деревьев.

** Выборка из 30 листьев.

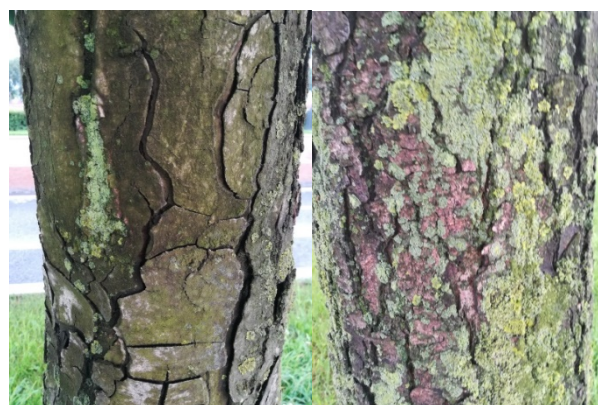
Как проективное покрытие, так и количество видов лишайников, встречающихся на деревьях рабаток и газонов, оказалось различным. На газонах проективное покрытие палетки лишайниками на некоторых деревьях достигало 50%, тогда как на рабатках, оно не превышало 30 % (см. табл. 2). Однако, на наш взгляд, такая значительная разница в средней степени покрытости стволов каштана лишайниками на рабатках и газонах не связана со различием загрязнения воздуха на этих участках парка. Как показали результаты исследования степени загрязнения воздуха, проведенные методом пассивного пробоотбора, в период обследования среднее содержание диоксида азота в воздухе на рабатках составляло 0,53 мг/м³ в то время, как на газонах оно было меньше лишь на 8%. (табл.2). Вероятно, на развитие лишайникового покрова помимо качества атмосферного воздуха, влияют и другие факторы (такие как возраст дерева, сторона дерева, на котором растёт дерево, качество субстрата и т.д.).

Таблица 2.

Степень развития лишайникового покрова на стволах каштанов и содержания диоксида азота на различных участках произрастания каштана конского в Парке Победы

Место произрастания каштанов	Средняя степень покрытости стволов лишайниками, %*	Содержание диоксида азота в воздухе, мг/м ³
Рабатки	27 ± 20	0,53 ± 0,05
Газон	46 ± 20	0,49 ± 0,05

*выборка из 15 деревьев



а)

б)

Рис. 2. Сравнение лишайникового покрова деревьев рабаток (а) и газонов (б).

Помимо исследования атмосферной части паркового биотопа, было проведено изучение почв рабаток, газонов и фоновых территорий парка Победы. Одним из исследований почвенного покрова было исследование содержания гумуса. Определение содержания гумуса было проведено по классической методике И.В. Тюрина [6], основанный на окислении органического вещества почвы хромовой кислотой до образования углекислоты. Результаты исследования представлены в таблице 4.

Помимо содержания гумуса в водных вытяжках почв, отобранных на рабатках и газонах, было проведено определение содержания в почвах водорастворимых соединений цинка, марганца, железа и меди, имеющих большое значение для роста и развития деревьев. Как известно, цинк – играет важную роль в жизненных процессах растений, связанных с

процессом дыхания [7]. Марганец относится к важнейшим элементам, недостаток которого в почвах, приводит к заболеваниям растений (отмирают отдельные участки листьев, замедляется рост семян и т.п.) [8]. Железо – необходимо растениям, так как участвует в окислительно-восстановительных процессах, в кислородном обмене, при недостатке железа в почве растения заболевают, замедляется синтез хлорофилла, задерживаются их рост и развитие [8]. Медь - участвует в процессе фиксации азота растениями, повышает устойчивость к полеганию. Недостаток меди вызывает у растений задержку роста и цветения, хлороз листьев, потерю упругости клеток (увядание растений) [9];

Как показал анализ результатов определения содержания тяжёлых металлов в почвах рабаток и

газонов, выполненный в Центра коллективного пользования имени Д.И. Менделеева в лаборатории атомно-абсорбционной спектроскопии РХТУ им. Д.И. Менделеева, содержание тяжёлых металлов в рабатках и газонах отличается друг от друга (табл. 4). Поскольку данные ТМ, как это уже отмечалось выше, относятся к важнейшим микроэлементам, влияющих на развитие деревьев, это могло сказаться на общем состоянии и привести к различиям в развитии каштанов на рабатках и газонах. Однако на наш взгляд значительно больший вклад в степень развития может вносить факторы, мешающие развитию корневой системы деревьев, растущих на рабатках. Поскольку площади поверхности почвы под деревьями на рабатках весьма ограничены.

Таблица 4.

Различия в содержании гумуса и тяжелых металлов в почвах в местах произрастания каштанов конских в Парке Победы (осень 2020 г.)

Место произрастания каштанов	Количество гумуса, %	Содержание тяжелых металлов, * мг/кг			
		Zn	Mn	Fe	Cu
Рабатки	14,6 (± 1%)	0,39 (± 3,66%)	0,10 (± 1,55%)	1,21(± 1,28%)	0,03(± 2,26%)
Газон	14,5 (± 1%)	1,05(± 3,66%)	0,20 (± 1,55%)	0,98(± 1,28%)	0,03(± 2,26%)

*По результатам определения содержания тяжелых металлов в почвенной вытяжке методом атомно абсорбционной спектроскопии. Анализ проводился в Центре коллективного пользования в лаборатории атомно-абсорбционной спектроскопии РХТУ им. Д.И. Менделеева.

Для оценки степени распространения минирующей моли пестрянки на деревьях каштана конского на рабатках и газонах Парка Победы нами были использованы феромонные ловушки «Дельта». В июне 2021 года ловушки в одно и тоже время были вывешены на деревьях, растущих на рабатках и газонах друг напротив друга на одной и той же высоте. По истечению 5 суток был произведен подсчет пойманных молей, который показал, что в среднем количество насекомых на газонах в три раза превышало их количество, пойманное ловушками на рабатках. Вероятно, моль предпочитает селиться и размножаться на деревьях с более развитой кроной. Меньшему количеству молей на рабатках может способствовать и тот факт, что осенью почва под каштанами на рабатках очищается от опавшей листвы, в которой могут перезимовать имаго фитофагов, более тщательно, чем на газонах.

Список литературы

1. Бобылев С.Н. Экологическая устойчивость городов: оценивая экосистемные услуги и климатические изменения с. 63-74. В книге «Устойчивое развитие городов: коллективная монография / под ред. К. В. Папенова, С. М. Никонорова, К. С. Ситкиной». — М.: Экономический факультет МГУ имени М. В. Ломоносова, 2019. 288 с.
2. Сайт «Википедия». Дата обращения: 01.06.2021 https://ru.wikipedia.org/wiki/Каштановая_минирующая_моль.
3. Кузнецов Владимир Алексеевич, Беднова Ольга Викторовна, Полтавский Евгений Алексеевич Оценка влияния качества атмосферного воздуха и почв на

состояние каштана конского и его устойчивость к минирующей моли-пестрянке (*cameraria ohridella*). Успехи в химии и химической технологии, 34, 2020 (2 (225)), 15-17.

4. Беднова О.В., Губарев И.В. Перспективы биологического контроля численности охридского минёра в насаждениях Москвы / "Лес-2021" XXI Международная научно-техническая конференция 1 мая - 1 июня, 2021, Сборник материалов №59. Секция 2. Экология лесных сообществ и охрана леса, ресурсосберегающие технологии, 76-80.

5. Андерсон Ф.К., Трешоу М. Реакция лишайников на атмосферное загрязнение. — М., 1984, 295–321.

6. Добровольский В.В. География почв с основами почвоведения / Учебник для геогр. спец. вузов. — М.: Высшая школа, 1989. — 320 с.: ил. 94, табл. 59

7. Воропаев, Пашкова Цинк в почвах и растениеводческой продукции стационарного опыта// Вестник Брянской государственной сельскохозяйственной академии. 2009. № 2. С. 31-35.

8. Хомченко Г.П., Цитович И.К. «Неорганическая химия», учебник для сельскохозяйственных вузов. — 2-е изд., перераб. и доп. М.: Высшая школа, 1987. 464 с.

9. Сайт «Главагронум». Дата обращения: 20.05.2021. <https://glavagronom.ru/articles/znachenie-i-primeneniemedi-v-zemledele>

10.Голосова М.А., Гниненко Ю.И., Голосова Е.И. Каштановый минер *Camerariaohridella* - опасный карантинный вредитель на объектах городского озеленения. Москва: ВПРС МОББ, МГУЛ, ВНИИЛМ. 2008. 26 с.

Секция «Зеленая химия для устойчивого развития»

УДК 544.142.4

Алаторцев О.А., Артоболевский С.В., Махров Д.Е., Венер М.В

ОЦЕНКА ЭНЕРГИИ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОГИДРАТАХ ЛЕКАРСТВЕННОГО НАЗНАЧЕНИЯ

Алаторцев Олег Александрович – бакалавр 3-го года обучения факультета естественных наук; alatorcevoleg3@gmail.com.

Артоболевский Сергей Владимирович – бакалавр 3-го года обучения факультета естественных наук;

Махров Денис Евгеньевич – бакалавр 3-го года обучения факультета естественных наук;

Венер Михаил Владимирович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры квантовой химии; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

*В работе изложены результаты исследования многокомпонентных молекулярных кристаллов 2-аминоникотиновой кислоты с малеиновой кислотой и фумаровой кислотами. Изучена структурообразующая роль воды в стабилизации такого типа структур. Энергия межмолекулярных водородных связей оценена согласно нескольким эмпирическим подходам.**Ключевые слова: водородные связи, молекула воды, молекулярные кристаллы, метод Розенберга, расчеты методами ТФП.***ESTIMATION OF THE ENERGY OF INTERMOLECULAR HYDROGEN BONDS IN MULTICOMPONENT ORGANIC CRYSTALLOHYDRATES FOR DRUG PURPOSES**

Alatorcev O.A., Artobolevskii S.V., Makhrov D.E., Vener M.V.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

*The work presents the results of a study of multicomponent molecular crystals of 2-aminonicotinic acid with maleic acid and fumaric acids. The structure-forming role of water in the stabilization of this type of structures has been studied.**The energy of intermolecular hydrogen bonds has been estimated according to several empirical approaches.**Key words: hydrogen bonds, water molecule, molecular crystals, Rosenberg approach, DFT computations*

Значительная доля соединений медицинского назначения и промышленных материалов разрабатывается и производится в виде органических молекулярных кристаллов. Их физико-химические свойства и фармацевтические качества определяются в наибольшей степени природой межмолекулярных взаимодействий, которые ответственны за упаковку молекул или ионов в многокомпонентных органических кристаллах. Расчёты и экспериментальные данные показывают, что зачастую состав таких систем значительно усложняется: на практике вместо гетеродимеров реализуются структуры, содержащие воду или молекулы других растворителей. Этот факт служит основой мощной стратегии улучшения и модификации наиболее важных свойств материалов, включая их растворимость и скорость растворения в воде, физическую стабильность, биодоступность, проницаемость, механическую прочность, температуру плавления и др.

Несмотря на структурное разнообразие биологически активных веществ, зачастую удается выделить такие их общие фрагменты, которые используют для предсказания свойств необходимых фармацевтически активных соединений. Примером такого фрагмента является группа $-N=C(R)-NH_2$ (рис.1). Она входит в состав активного вещества препарата «Ламивудин» - нуклеозидного ингибитора обратной транскриптазы, применяемого в

комбинированной антиретровирусной терапии против ВИЧ и гепатита В. Схожий активный центр можно встретить и во многих других лекарственных соединениях.

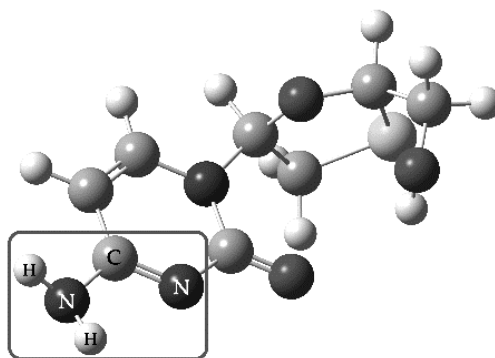


Рис.1. Активный центр «Ламивудина», содержащий фрагмент $N=C(R)-NH_2$.

Так как структура упаковки в одно- и многокомпонентных кристаллах диктуется балансом между нековалентными взаимодействиями различной природы, систематическая количественная оценка их энергии имеет решающее значение, поскольку она обеспечивает более глубокое понимание сути фундаментальных принципов, лежащих в основе структуры и свойств многокомпонентных молекулярных кристаллов.

Наличие в молекуле кислой и основной функциональных групп с близкими значениями рКа (разница менее 3 единиц) приводит к образованию амфотерных или цвиттер-ионных соединений. Многие цвиттер-ионные лекарственные соединения имеют высокую температуру плавления, что объясняется достаточно сильными межмолекулярными взаимодействиями (прежде всего водородных связей (Н-связи) и диполь-дипольных контактов) между заряженными фрагментами молекул в кристалле. Вследствие большой энергии кристаллической решетки значительное число цвиттер-ионных соединений являются плохо растворимыми как в полярных, так и неполярных растворителях.

Использование в синтетических целях дорогостоящих лекарственных соединений, в том числе – противовирусных препаратов, зачастую не оправдано. В качестве модельного объекта, воспроизводящего все необходимые свойства исследуемого класса веществ, нами была выбрана 2-аминоникотиновая кислота.

В работе [1] нами была показана важнейшая роль внутримолекулярной водородной связи в коформере; в связи с этим основой для синтеза многокомпонентных кристаллов 2-

аминоникотиновой кислоты послужили стереоизомеры – малеиновая и фумаровая кислоты. Данные соединения обладают различным числом внутримолекулярных Н-связей; отдельный интерес представляет сравнительный анализ их кристаллогидратов. В рамках проделанной работы специалистами института химии растворов им. Г.А. Крестова РАН (г. Иваново) были синтезированы предсказанные структуры. Гетеродимеры «2-аминоникотиновая кислота + фумаровая кислота» и «2-аминоникотиновая кислота + малеиновая кислота» реализовались в виде кристаллогидратов.

Характерной особенностью сетки Н-связей в обоих кристаллах являются бифуркатные Н-связи, образованные CO_2^- группой дикарбоновых кислот. В отличие от работы [2], все Н-связи, образованные CO_2^- группами, являются «классическими» и достаточно сильными (таблица 1). Заметим, что соединения с С=О и Р=О-группами гораздо чаще образуют подобные связи в молекулярных кристаллах [3], тогда как образование таких связей CO_2^- -группой есть явление более редкое. В обоих кристаллах реализуется большое число межмолекулярных Н-связей, причем короткие Н-связи образуются при участии протонов CO_2^- групп.

Таблица 3. Теоретические значения энтальпии $\Delta H_{\text{НВ}}$ и энергии $E_{\text{НВ}}$ межмолекулярных Н-связей в кристаллах, оцененных с помощью различных подходов. Значения приведены в кДж/моль. Расстояния $\text{O}\cdots\text{H}$, $R(\text{O}\cdots\text{H})$ рассчитаны с использованием расчётов по методу ТФП-ПГУ в приближении ВЗЛР/6-311++G**.

Суммарные значения $\Delta H_{\text{НВ}}/E_{\text{НВ}}$ Н-связей, образуемых молекулой воды приведены в скобках.

Фрагмент ¹⁾	$R(\text{O}\cdots\text{H})$, Å	$-\Delta H_{\text{НВ}}$ ²⁾	$-\Delta H_{\text{НВ}}$ ³⁾	$E_{\text{НВ}}$ ⁴⁾
[2AmNic+Fum+H ₂ O] (1:1:1)				
O12...H21-N2	1.840	23.4	-	26.8
O11...H11-N1	1.628	34.0	-	45.7
O12...H31-O3	1.709	29.3	27.8	35.8
O13...H32-O3	2.034	17.2	18.3	24.3
O11...H14-O14	1.563	38.5	39.7	52.9
O3...H1-O1	1.571	37.9	40.7	52.1
$\Sigma(-\Delta H_{\text{НВ}}/E_{\text{НВ}})$	-	180.3 (84.4)	(86.8)	237.6 (112.1)
[2AmNic+Me+H ₂ O] (1:1:1)				
O12...H21-N2	1.792	25.4	-	30.5
O11...H11-N1	1.785	25.7	-	30.2
O12...H31-O3	1.725	28.5	24.8	34.9
O13...H32-O3	1.797	25.2	17.6	28.5
O3...H1-O1	1.525	41.5	43.5	58.2
$\Sigma(-\Delta H_{\text{НВ}}/E_{\text{НВ}})$	-	146.3 (95.2)	(85.9)	182.3 (121.6)

¹⁾ Нумерация атомов приведена на рисунках 2 и 3.

²⁾ Оценена с использованием метода Розенберга: $-\Delta H_{\text{НВ}}$ [кДж/моль] = $0.134R(\text{O}\cdots\text{H})^{-3.05}$, где $R(\text{O}\cdots\text{H})$ – расстояние $\text{O}\cdots\text{H}$ (нм).

³⁾ Оценена с использованием метода Йогансена: $-\Delta H_{\text{НВ}}$ [кДж/моль] = $1.386(\Delta\nu [\text{см}^{-1}] - 40)^{0.5}$, где $\Delta\nu = \nu(\text{OH}_{\text{free}}) - \nu(\text{OH})$ есть значение красного сдвига валентных колебаний ОН-группы, вызванного образованием водородной связи, с протондонорной ОН-группой. $\nu(\text{OH}_{\text{free}})$ и $\nu(\text{OH})$ – частоты локализованных не взаимодействующих колебаний типа “stretching” ОН-группы.

⁴⁾ Оценена с использованием метода Эспинозы: $E_{\text{НВ}}$ [кДж/моль] = $1124 \cdot G_b$ [атомные единицы] где G_b – положительно определенная локальная плотность кинетической энергии электронов в критической точке связи $\text{O}\cdots\text{H}$.

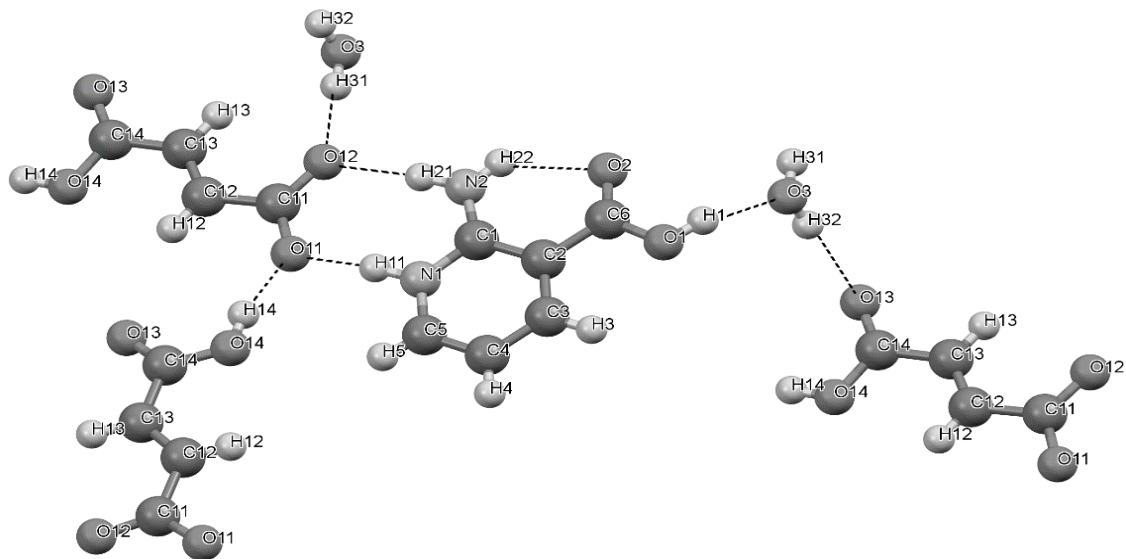


Рис.2. Фрагмент кристалла 2-аминоникотиновая кислота – фумаровая кислота – вода (1:1:1).

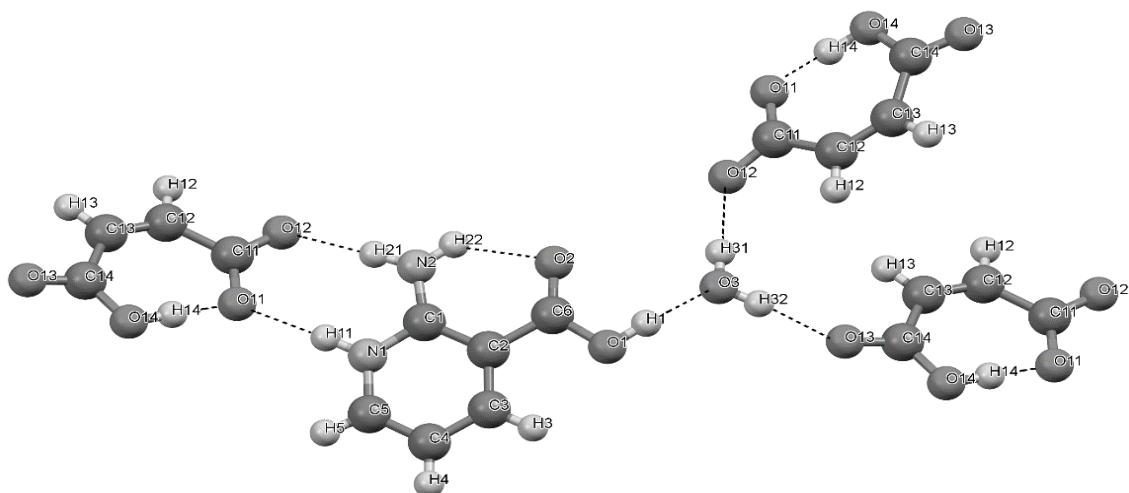


Рис.3. Фрагмент кристалла 2-аминоникотиновая кислота – малеиновая кислота – вода (1:1:1).

Несмотря на наличие большого числа межмолекулярных Н-связей, образованных CO_2^- группой дикарбоновых кислот в обоих кристаллах, важную роль играет вода. В обоих кристаллах она образует три Н-связи, причем самой короткой является Н-связь с COOH -группой катиона 2-аминоникотиновой кислоты.

В литературе предложено несколько схем оценки энергии (энтальпии) межмолекулярных Н-связей в кристаллах. В большинстве случаев используются эмпирические подходы, связывающие энергию межмолекулярного взаимодействия с тем или иным параметром электронной плотности в критической точке связи [4]. В этом случае используются расчетные значения электронной плотности, значения параметров, полученные из прецизионных рентгеноструктурных данных. Для получения более надежных оценок энергий /энтальпий Н-связей мы использовали несколько подходов, два из которых оценивают энтальпию межмолекулярных Н-связей по спектроскопическим и геометрическим характеристикам этих связей в кристаллах. Следует отметить, что оценка энергии внутримолекулярных

Н-связей в твердом состоянии требует использования других эмпирических подходов.

В соответствии с литературными данными [5], все подходы дают энергии/энтальпии слабых и умеренных Н-связей, которые хорошо согласуются между собой. Существенные различия в расчетных значениях наблюдаются только для коротких (сильных) Н-связей ($R(\text{O}\dots\text{O}) < 2,6 \text{ \AA}$), что обусловлено вкладом ковалентной составляющей в энергию этих связей. Все схемы оценки энергии/энтальпии Н-связей приводят к выводу, что суммарная энергия Н-связей, образованных молекулами воды, больше энергии восьмичленного цикла с частичным переносом протона. Согласно всем подходам, суммарная энергия/энтальпия Н-связей, образованных молекулой воды, составляет около 40% и 50% у кристаллов «2-аминоникотиновая кислота – фумаровая кислота – вода» и «2-аминоникотиновая кислота – малеиновая кислота – вода» соответственно. Это позволяет нам сделать заключение о структурообразующей роли молекул воды в образовании исследуемых многокомпонентных кристаллов.

Расчеты проводились в дискретно-континуальном приближении по программе Gaussian16 [6] - модель РСМ - с помощью функционала B3LYP/6-311++G**.

Подтверждена концепция метода поиска наилучших коформеров. На основании данных предположений синтезированы кристаллы 2-аминоникотиновой кислоты с малеиновой и фумаровой кислотами, обладающие практической ценностью. Изучена структура и описаны свойства полученных кристаллов. Получены данные, позволяющие высказать предположение о транспортных путях протона.

Данная работа связана с достижением одной из целей устойчивого развития: Цель 3 Обеспечение здорового образа жизни и содействие благополучию для всех в любом возрасте.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ № 19-73-10005 «Дизайн и исследование новых многокомпонентных кристаллических форм антигельминтных лекарственных соединений. Совместное применение экспериментальных подходов и методов молекулярного моделирования», руководитель – А.О. Суров (ИХР РАН).

Список литературы

1. Артоболевский С.В., Махров Д.Е., Алаторцев О.А., Венер М.В. Межмолекулярные нековалентные взаимодействия: обнаружение эффекта усиления водородной связи в различных гетеродимерах //

Успехи в химии и химической технологии. – 2020. – Том 34. – №2. – С.71-73.

2. Mirzaei, M., Sadeghi F., Molčanov K., Zaręba J.K., R.M. Gomila R.M., and Frontera A. Recurrent Supramolecular Motifs in a Series of Acid–Base Adducts Based on Pyridine-2,5-Dicarboxylic Acid N-Oxide and Organic Bases: Inter- and Intramolecular Hydrogen Bonding // Crystal Growth & Design. – 2020. –20(3). – P.1738-1751.

3. Tupikina, E.Y., Bodensteiner M., Tolstoy P.M., Denisov G.S., and Shenderovich I.G. P=O Moiety as an Ambidextrous Hydrogen Bond Acceptor //The Journal of Physical Chemistry C. – 2018. –122(3). – P.1711-1720.

4. Kuznetsov, M.L. Can halogen bond energy be reliably estimated from electron density properties at bond critical point? The case of the (A)nZ—Y•••X– (X, Y = F, Cl, Br) interactions //International Journal of Quantum Chemistry. –2019. –119(8). –P. 25869.

5. Medvedev A.G., Mikhaylov A.A., Chernyshov I.Y., Vener M.V., Lev O., and Prikhodchenko P.V. Effect of aluminum vacancies on the H2O2 or H2O interaction with a gamma-AlOOH surface. A solid-state DFT study // International Journal of Quantum Chemistry. –2019. – 119(13). –P. 25920.

6. <https://gaussian.com/>

7. Surov A.O., Vasilev N.A., Churakov A.V., Parashchuk O.D., Artobolevskii S.V., Alatorsev O.A., Makhrov D.E., Vener M.V. Two faces of water in the formation and stabilization of multicomponent crystals of zwitterionic drug-like compounds // Symmetry. — 2021. — Vol. 13, no. 3. — P. 425.

УДК 542-97

Деревнин И.А., Тарасова М.А., Лусс А.Л., Дятлов В.А.

МОДИФИКАЦИЯ ЭТИЛ-2-ЦИАНОАКРИЛАТА ДЛЯ СИНТЕЗА НАНОРАЗМЕРНЫХ НОСИТЕЛЕЙ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ НА ЕГО ОСНОВЕ

Деревнин Игорь Алексеевич – магистрант 1-го года обучения кафедры биоматериалов; derevninigor616@yandex.ru.

Тарасова Мунира Акбаровна – аспирантка 1-го года обучения кафедры биоматериалов;

Лусс Анна Леонидовна – кандидат химических наук, ассистент кафедры биоматериалов;

Дятлов Валерий Александрович – доктор химических наук, профессор, кафедра химической технологии пластических масс;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассмотрены способы получения цианоакриловой кислоты и аддуктов на основе этилцианоакрилата. Строение полученных соединения исследовали методами ^1H ЯМР спектроскопии и MALDI-TOF масс-спектрометрии. На основе аддуктов этилцианоакрилата с жирными предельными спиртами были получены и охарактеризованы пустые водонаполненные наноразмерные частицы. Также были получены и охарактеризованы наночастицы с инкапсулированным модельным веществом – противотуберкулезным препаратом рифампицином.

Ключевые слова: 2-цианоакрилаты, наночастицы, системы доставки лекарственных средств.

MODIFICATION OF ETHYL 2-CYANOACRYLATE FOR THE SYNTHESIS OF NANOSIZED CARRIERS OF PHYSIOLOGICALLY ACTIVE SUBSTANCES ON ITS BASIS

Derevnin I.A., Tarasova M.A., Luss A.L., Dyatlov V.A.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article discusses methods for producing cyanoacrylic acid and adducts based on ethyl cyanoacrylate. The structure of the obtained compounds was investigated by ^1H NMR spectroscopy and MALDI-TOF mass-spectrometry.

Empty water-filled nanosized particles based on ethyl cyanoacrylate adducts with fatty saturated alcohols were obtained and characterized. Also, nanoparticles with an encapsulated model substance, the anti-tuberculosis drug rifampicin, were obtained and characterized.

Key words: 2-cyanoacrylates, nanoparticles, drug delivery systems.

Введение

Системы доставки физиологически активных веществ (ФАВ), традиционно применяемые для терапии различных тяжёлых заболеваний имеют ряд недостатков, снижающих их эффективность. Возможность использования этил-2-цианоакрилата (ЭЦА) и его поверхностно-активных производных в качестве основного материала для синтеза нанокорпускулярных носителей ФАВ различного типа связано с тем, что алкил 2-цианоакрилаты могут легко полимеризоваться по анионному механизму даже в присутствии следов слабых нуклеофилов (например, воды) без присутствия дополнительных инициаторов. Кроме того, 2-цианоакрилаты являются биоразлагаемыми, биосовместимыми и нетоксичными полимерами, и, следовательно, подходящими для использования в медицине в

качестве основы для создания таргетных носителей лекарственных веществ. Цель настоящей работы — модификация этил-2-цианоакрилата с помощью жирных первичных спиртов с целью получения новых поверхностно-активных мономеров, а также синтез и исследование наноразмерных частиц на их основе.

Экспериментальная часть

На первом этапе методом вакуумного пиролиза из этил-2-цианоакрилата по механизму термического β -распада карбоксильных соединений получали 2-цианоакриловую кислоту (ЦАК) (рис. 1). Продукт реакции очищали методом перекристаллизации из толуола. Строение вещества было подтверждено комбинированным методом ИК и ^1H ЯМР спектроскопии.

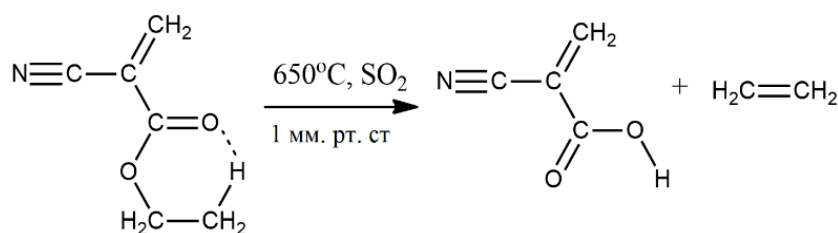


Рис.1 Схема вакуумного пиролиза этил-2-цианоакрилата с образованием ЦАК

Полученная ЦАК использовалась в дальнейших синтезах в виде кислотного катализатора реакции нуклеофильного присоединения –ОН группы молекулы спирта по двойной связи ЭЦА с образованием поверхностно-активного аддукта, вследствие её нетоксичности, высокой кислотности, хорошей растворимости в собственных производных, а также способностью участвовать в реакции полимеризации, встраиваясь в полимерную цепь.

На следующем этапе исследования присоединяя первичные линейные спиртов с разной длиной алкильного радикала к β-углеродному атому этил-2-цианоакрилата (рис. 2.1) были получены новые поверхностно-активные мономеры-аддукты ЭЦА. При введении в систему небольшого количества ЦАК повышали кислотность среды до pH≈2, что ингибировало процесс преждевременной полимеризации мономера и смещало равновесие в

сторону его образования. Строение аддуктов и равновесный характер реакции их образования подтверждали с помощью ¹H ЯМР спектроскопии (рис. 3) и МАЛДИ анализа (рис. 4).

При попадании в нейтральную водную среду поверхностно-активные аддукты организуются в мицеллы, после чего происходит их полимеризация (рис. 2.2) с образованием двухфазной системы (нижняя фракция — водная суспензия полых цианоакрилатных частиц, верхняя — выделяющийся спирт).

На основе аддуктов ЭЦА и гексанола, гептанола, октанола и додеканола, были получены модельные водонаполненные частицы. Методом динамического светорассеивания была установлена связь между средним гидродинамическим диаметром водонаполненных нанообъектов и молекулярной массы мономеров (таблица 1).

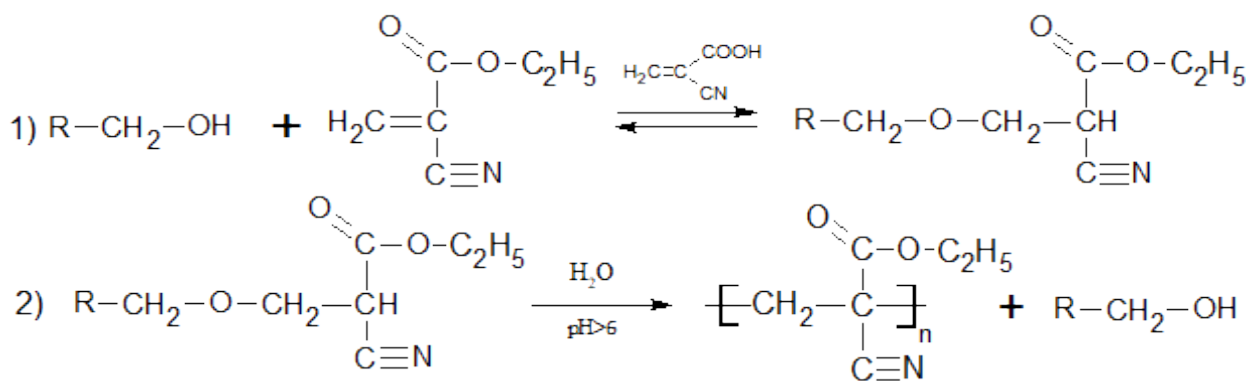


Рис.2 Схемы: 1) - образования аддукта ЭЦА и первичного спирта; 2) - полимеризации аддукта в водной среде

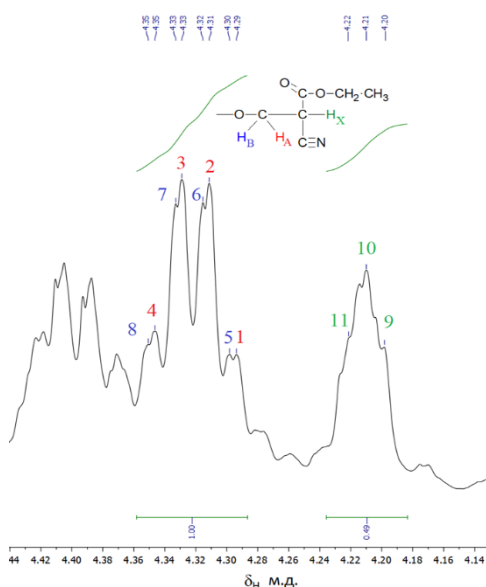


Рис.3 Фрагмент ¹H ЯМР спектра системы ЭЦА+цетиловый спирт



Рис.4 Масс-спектр системы ЭЦА+цетиловый спирт

Таблица 1. Результаты исследования модельных частиц методом динамического светорассеяния

Реакционная система	Длина алкильного радикала спирта, нм	Средний гидродинамический диаметр частиц, нм		
		ПЭЦА капсулы	Мицеллы спирта	Пористые ПЭЦА частицы
ЭЦА+гексанол	1,232	36,09	-	-
ЭЦА+гептанол	1,540	62,17	13,10	-
ЭЦА+октанол	1,848	80,87	9,49	559,8
ЭЦА+додеканол	2,156	90,57	-	586,1

В среднем, размер получаемых нанообъектов увеличивается при повышении длины и, соответственно, молекулярной массы присоединяемого первичного спирта.

Представленная методика позволила инкапсулировать физиологически активное вещество (противотуберкулёзный препарат рифампицин) внутри частиц, полученных на основе системы

ЭЦА+стеарет-21. Размер частиц был установлен методом динамического светорассеяния (рис. 5). Средний гидродинамический диаметр наполненных частиц составил 350 нм. Методом УФ-спектрофотометрии исследовали содержание ФАВ. Оно составило 5% от общей массы продукта и 95% от массы изначально загруженного препарата.

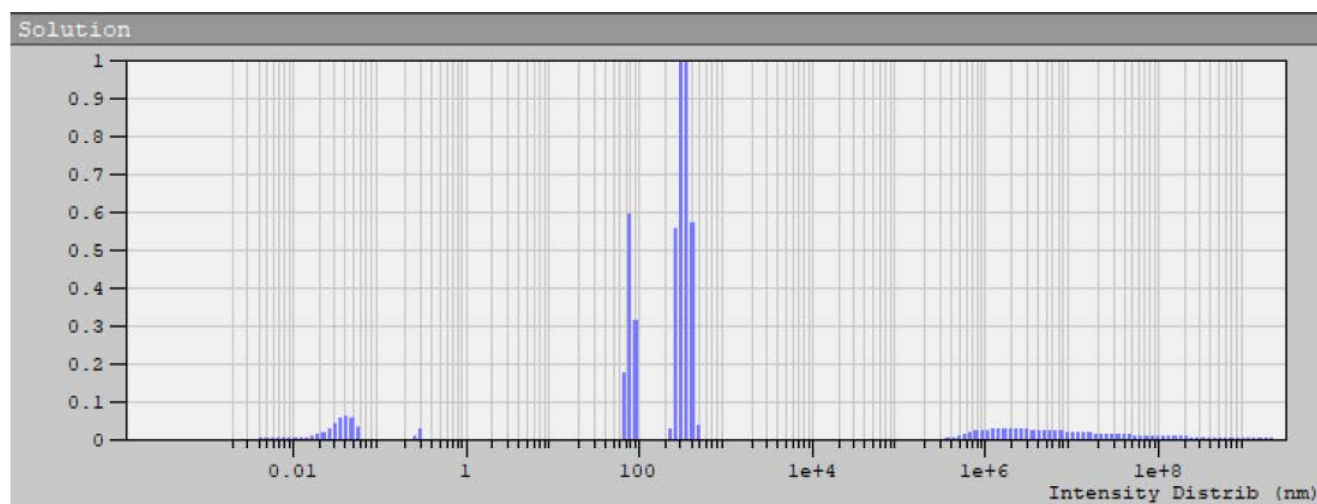


Рис. 5 Результаты исследования наполненных частиц методом динамического светорассеяния

Заключение

Таким образом, была разработана методика получения содержащих физиологически активное вещество полимерных наноразмерных частиц, на основе модифицированного этил-2-цианоакрилата, способных к разложению внутри организма, которые могут быть в дальнейшем использованы для векторной доставки лекарственных средств, что открывает новые перспективы в терапии ряда тяжёлых заболеваний.

Данная работа связана с достижением одной из целей устойчивого развития: Цель 3 Обеспечение здорового образа жизни и содействие благополучию для всех в любом возрасте.

Список литературы

1. Лусс А. Л. Наноразмерные агрегаты амфифильного поли-N винилпирролидона, как носители лекарственных веществ: дис. ... канд. хим. наук: 02.00.06. – М. 2018. – 115 с.
 2. Дятлов В. А. Акрилимидобразующие полимеры: синтез, свойства и применение: дис. ... док. хим. наук: 02.00.06. – М. 2015. – 129 с.
 3. Domb A.J., Kost J., Wiseman D. Handbook of Biodegradable Polymers – Boca Raton: CRC Press. – 1998. – 544 P.
- Dyatlov V.A., Katz G.A. Process for the preparation of esters of 2-cyanoacrylic acid and use of the esters so prepared as adhesives. Int. Application No PCT/IE 94/000002, Int. Publication No WO94/015907, 1994.

УДК 544.541

Бармина А.И., Кривобородов Е.Г., Занин А.А.

О МЕХАНИЗМЕ РАДИОЛИТИЧЕСКОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ ИМИДАЗОЛИЕВЫХ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЯ

Бармина Анастасия Игоревна – магистрант 2 года обучения кафедры ЮНЕСКО «Зелёная химия для устойчивого развития»; anastasia_barmina1997@mail.ru.

Кривобородов Ефрем Георгиевич – ассистент кафедры ЮНЕСКО «Зелёная химия для устойчивого развития»;

Занин Алексей Андреевич – кандидат химических наук, доцент кафедры ЮНЕСКО «Зелёная химия для устойчивого развития»;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассмотрена трансформация ионных жидкостей под воздействием излучений высоких энергий. На основании полученных данных было предположено, что катионы имидазолия, исследуемых ионных жидкостей, трансформировались путём переноса алкильных групп и атома водорода с сохранением противоионной части.

Ключевые слова: ионные жидкости, имидазолиевые ионные жидкости, гамма-излучение, радиолитическая трансформация.

TRANSFORMATION OF IMIDAZOLIUM IONIC LIQUIDS UNDER THE INFLUENCE OF GAMMA RADIATION

Barmina A.I., Krivoborodov E.G., Zanin A.A.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article discusses transformation of ionic liquids under the influence of gamma radiation was studied. Based on the data received, suggest that the imidazolium cations of the studied ionic liquids were transformed by the transfer of alkyl groups and hydrogen atom with the preservation of the counter-ionic part.

Key words: ionic liquids, imidazolium ionic liquids, gamma radiation, radiolytic transformation

Введение

Изучение поведения ионных жидкостей (ИЖ) под воздействием ионизирующего излучения является актуальным научным направлением, связанным с потенциальной возможностью использования ИЖ в качестве растворителей в процессах с участием радиоактивных материалов [1-3].

Ранее в ряде работ отмечалось радиационно-индуцированное изменение цвета имидазолиевых ИЖ под воздействием γ -излучения. Результаты комплекса методов физико-химического анализа свидетельствуют о высокой радиационной стабильности ИЖ, так как выход их радиолитических продуктов не велик, и составляет менее 1% [1-3]. Светопоглощение ИЖ на $\lambda = 340$ нм линейно увеличивалось с ростом поглощенной дозы излучения. Это позволило авторам предположить, что окрашенные продукты возникали в результате радиолитических превращений органического катиона, а скорость радиолитического поглощения излучения в видимом диапазоне зависит от природы их аниона [2].

В УФ-вид. спектре облученных γ -квантами (500 кГр) образцах (трифторметилсульфонил)имида 1-бутил-3-метилимидазолия $[C_4mim][NTf_2]$ была обнаружена новая полоса поглощения при 230–400 нм, соответствующая окрашенным продуктам радиолитического распада, причем интенсивность поглощения возрастала с увеличением поглощенной дозы излучения (рис. 1). Было исследовано влияние анионов ИЖ на изменение поглощения излучения в видимом диапазоне. Авторы высказали предположение о том, что, поскольку значение электронной плотности аниона гексафторфосфата $[PF_6]^-$ ниже, чем таковые для (трифторметилсульфонил)имида $[NTf_2]$, катион гексафторфосфата 1-бутил-3-метилимидазолия $[C_4mim][PF_6]$ поглощал большую дозу излучения, чем катион (трифторметилсульфонил)имида 1-бутил-3-метилимидазолия $[C_4mim][NTf_2]$, что приводило к более окрашенным продуктам радиолитического распада и более интенсивному поглощению в УФ диапазоне (200-300 нм) [3].

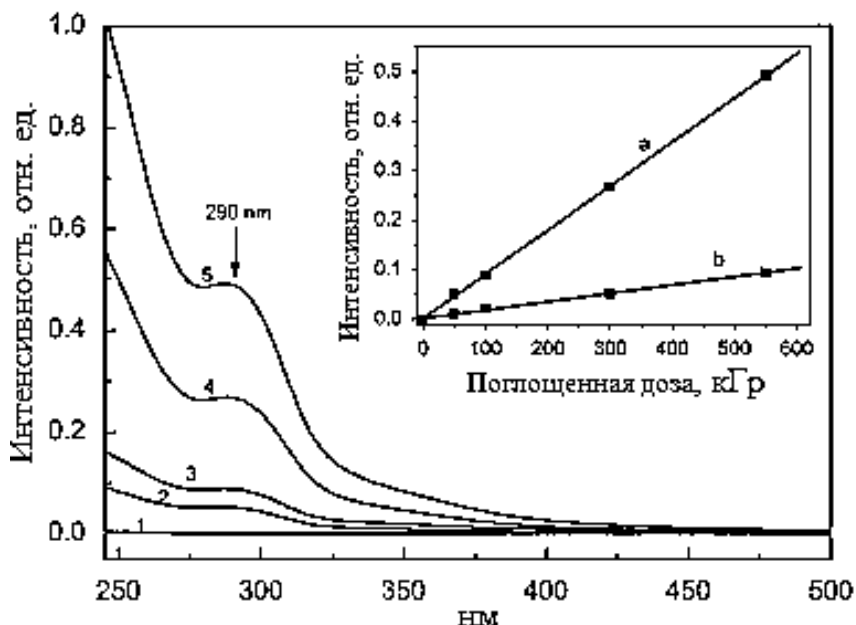


Рис. 1 УФ-видимые спектры облученного (трифторметилсульфонил)имида 1-бутил-3-метилимидазолия $[C_4mim][NTf_2]$ до и после до (1) и после γ -облучения при 50 (2), 100 (3), 300 (4) и 550 (5) кГр в атмосфере азота (коэффициент разбавления 600) [3]

На вставке показана зависимость интенсивности сигнала облученного $[C_4mim][NTf_2]$ от поглощенной дозы при 290 нм (а) и 340 нм (б) [3].

Однако, механизм радиолитической деградации имидазолиевых ИЖ так и не был идентифицирован, в следствии чего, основной целью данной работы являлось выдвижение гипотезы с установлением механизма трансформации имидазолиевых ИЖ под воздействием γ -излучения.

Экспериментальная часть

В данной работе исследовалось поведение ИЖ трифторметансульфоната 1-*n*-бутил-3-

метилимидазолия $[C_4mim][OTf]$ и тетрафторбората 1-*n*-бутил-3-метилимидазолия $[C_4mim][BF_4]$ под влиянием γ -излучения (550 кГр).

Результаты ИК и ЯМР спектроскопии (рис. 2, 3) подтверждают, ранее сформулированные в известных литературных источниках, выводы о высокой радиолитической устойчивости имидазолиевых ионных жидкостей, так как никаких заметных изменений в спектрах исследуемых образцов до и после облучения γ -квантами зафиксировано не было.

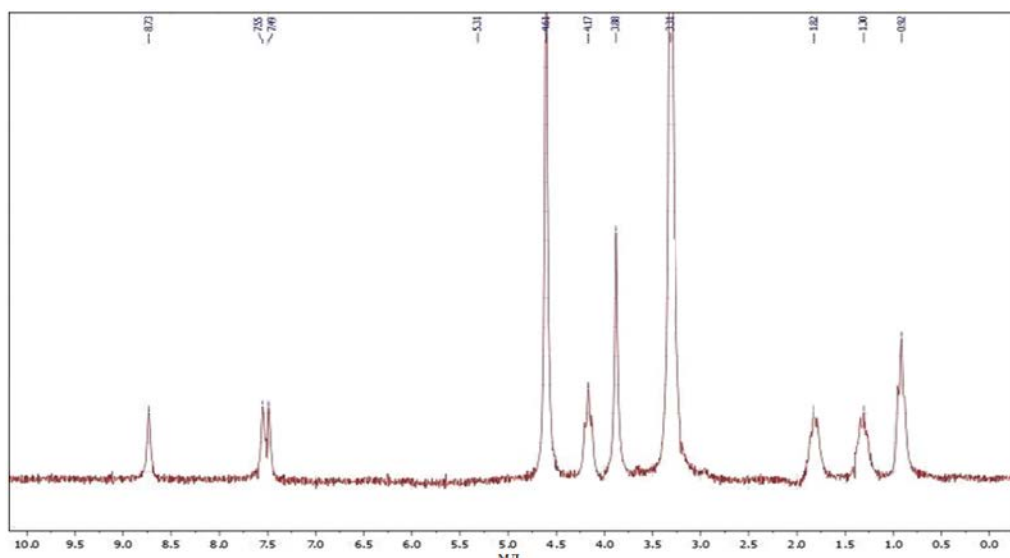


Рис. 2 ЯМР-спектр на ядрах 1H 1-*n*-бутил-3-метилимидазолия тетрафторбората $[n-BuMIm]BF_4$ до облучения гамма-квантами (550 кГр)

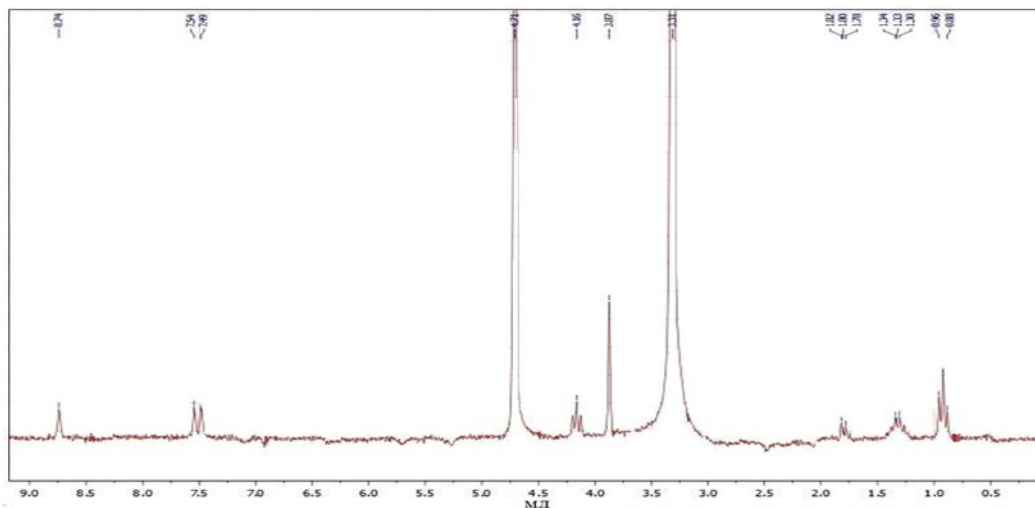


Рис. 3 ЯМР-спектр на ядрах ^1H 1-н-бутил-3-метилимидазолия тетрафторбората $[\text{n-BuMeIm}]\text{BF}_4$ после облучения гамма-квантами (550 кГр)

Данные УФ-спектроскопии, представленные на рис. 4 и рис. 5, позволяют заключить, что трансформация ИЖ, исследуемых в работе, протекает за счет катионной части, о чем свидетельствует

наличие одинаковых полос поглощения в УФ-спектрах образцов, подвергнутых γ -облучению несмотря на их различные анионы (тетрафторборат и трифторметансульфонат).

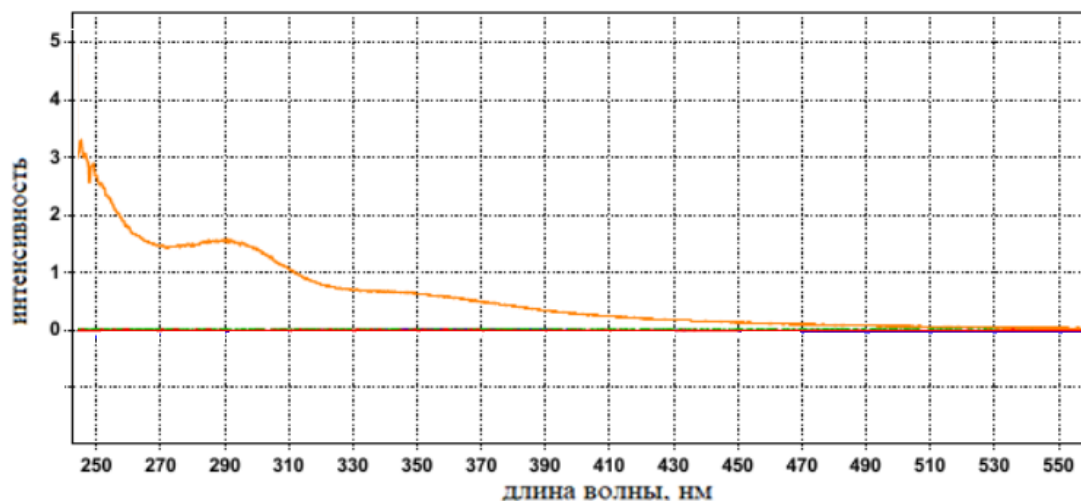


Рис. 4 УФ-спектры 1-н-бутил-3-метилимидазолия тетрафторбората $[\text{n-BuMeIm}]\text{BF}_4$ до (красный) и после (оранжевый) облучения гамма-квантами (550 кГр)

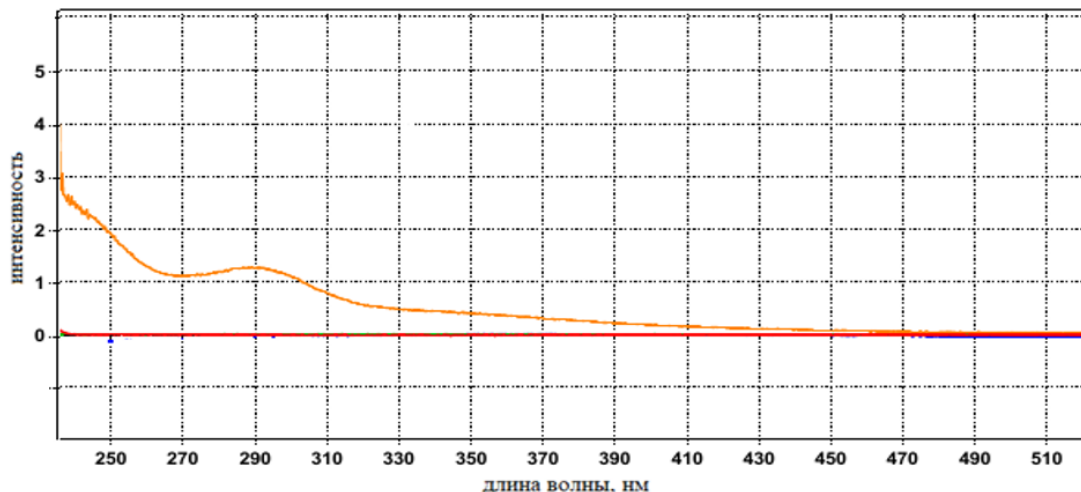


Рис. 5 УФ-спектры 1-н-бутил-3-метилимидазолия трифторметансульфоната $[\text{nBuMeIm}]\text{SO}_3\text{CF}$ до (красный) и после (оранжевый) облучения гамма-квантами (550 кГр)

Сопоставление УФ-спектров облученных катионов, исследуемых ИЖ, путем трансфера алкильных групп и водорода, с сохранением противоионной части (схема 1). [C₄mim][OTf], [C₄mim][BF₄] и некоторых имидазолинов [4] позволяет выдвинуть предположение о трансформации имидазолиевых

катионов, исследуемых ИЖ, путем трансфера алкильных групп и водорода, с сохранением противоионной части (схема 1).

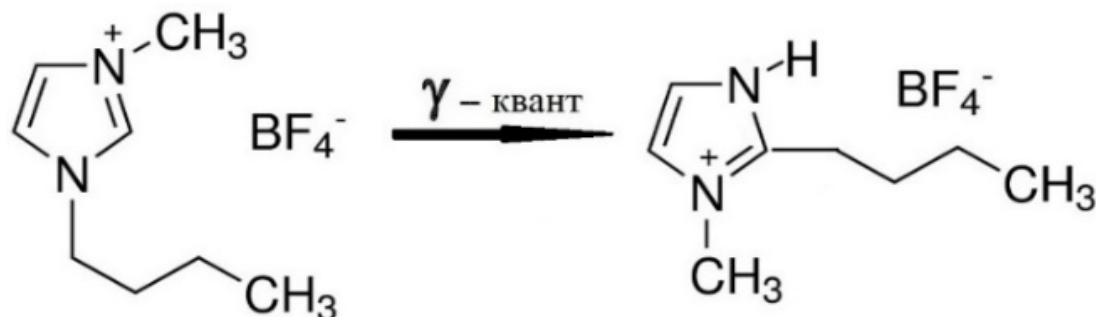


Схема 1 Трансформация катиона 1-*n*-бутил-3-метилимидазолия тетрафторбората [C₄mim][BF₄] под воздействием γ -излучения (550 кГр)

Заключение

Проведено исследования поведения двух имидазолиевых ионных жидкостей под воздействием гамма-излучения. С помощью ПМР спектроскопии показано, что гамма-радиолизу подвергается лишь незначительная в процентном соотношении часть имидазолиевых ионных жидкостей.

На основании данных УФ-спектроскопии облученных тетрафторбората 1-*n*-бутил-3-метилимидазолия и трифторметансульфоната 1-*n*-бутил-3-метилимидазолия, а также известных значений полос поглощения некоторых имидазолинов, характеризующихся наличием длинной алкильной цепи во втором положении кольца, выдвинуто предположение о трансформации 1-*n*-бутил-3-метилимидазолиевого катиона ионных жидкостей посредством трансфера водорода и алкильных групп с переходом бутильного фрагмента во второе положения имидазолиевого кольца.

Данная работа связана с достижением следующих целей устойчивого развития: Цель 7 Обеспечение всеобщего доступа к недорогим, надежным, устойчивым и современным источникам

энергии для всех; Цель 12 Обеспечение перехода к рациональным моделям потребления и производства.

Работа выполнена при поддержке РХТУ им. Д. И. Менделеева, проект № 2020-040

Список литературы

1. Allen, D., Baston, G., Bradley A. E. An investigation of the radiochemical stability of ionic liquids // Green Chemistry. – 2002. – V. 4. – P. 152-158.
2. Berthon, L., Nikitenko, S.I., Bisel, I. Influence of gamma irradiation on hydrophobic room-temperature ionic liquids [BuMeIm]PF₆ и [BuMeIm](CF₃SO₂)₂N // Dalton Transactions. –2006. – V. 21. – P. 2526-2534.
3. Wang, Y., Peng, J. Huang, W. A new strategy for identifying the water-insoluble radiolytic products of BPC6/ionic liquids and accessing their influence on the Cs extraction // Radiation Physics and Chemistry. –2019. – V. 165. – P. 130-134.
4. Lestari, I. I., Rahayu, D. U. C., Nurani, D. A., Krisnandi, Y. K., Budianto, E. Ethylenediamine-derived imidazoline synthesis using MAOS (Microwave Assisted Organic Synthesis) method. // AIP Conference Proceedings. –2019. – V. 2168. – №1. – P. 020066.

УДК 544.18

Егорова А.Н., Иванькова Ю.И., Жегучева Ю.В., Цирельсон В.Г

ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СИСТЕМЕ «МОДЕЛЬ ИОННОЙ ЖИДКОСТИ (ДИМЕТИЛФОСФАТ-АНИОН-1 + NH₄⁺) – ЭЛЕМЕНТНАЯ СЕРА»Егорова Анна Николаевна – кандидат химических наук, старший научный сотрудник, доцент кафедры квантовой химии; anegor@muctr.ru.

Иванькова Юлия Игоревна – магистрант 2-ого года обучения кафедры ЮНЕСКО «Зеленая химия для устойчивого развития»;

Жегучева Юлия Владимировна – студентка 2-ого курса факультета ТНВ и ВМ;

Цирельсон Владимир Григорьевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой квантовой химии;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,

Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

*Совместным использованием квантово-топологического анализа электронной плотности и анализа сил в электронной подсистеме охарактеризованы внутримолекулярные взаимодействия в комплексе ДМФ⁻¹-S₈-NH₄⁺.**Ключевые слова: ионные жидкости, диметилфосфат-анион, молекула S₈, метод Кона-Шэма, электронная плотность, сила, действующая на электрон в системе.***INTERACTIONS IN THE SYSTEM «MODEL OF AN IONIC LIQUID (DIMETHYLPHOSPHATE-ANION⁻¹ + NH₄⁺) – ELEMENTAL SULFUR»**

Egorova A.N., Ivan'kova Y.I., Zhegucheva Y.V., Tsirelson V.G.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

*Intramolecular interactions in the DMF⁻¹-S₈-NH₄⁺ complex are characterized by the combined use of quantum-topological analysis of electron density and analysis of forces in the electronic subsystem.**Key words: ionic liquids, dimethylphosphate anion, S₈ molecule, Kohn-Sham method, electronic density, internal electronic force***Введение**

Современные требования к экологичности топлив привели к избытку серы после нефтегазовой переработки. Для решения проблемы серных отвалов актуальным является поиск новых путей использования элементной серы, для чего может быть применен перевод её в активную форму через раскрытие серного кольца. Использование ионных жидкостей (ИЖ) позволит осуществить этот процесс без дополнительных энергетических затрат. Исследования показали активность ИЖ по отношению к элементной сере, которая проявляется в том, что в результате реакции серы и ИЖ, имеющих в своем составе нуклеофил диметилфосфат-анион (ДМФ⁻¹), происходит раскрытие цикла S₈ [1]. Ранее нами проведено квантово-химическое моделирование взаимодействий в системе диметилфосфат анион⁻¹-S₈, которое показало образование связанной системы ДМФ⁻¹-S₈, однако устойчивого раскрытия серного кольца получено не было [2].

Цель работы – квантово-химическое моделирование взаимодействий в системе ДМФ⁻¹+S₈+NH₄⁺, где ДМФ⁻¹+NH₄⁺ – модель ионной жидкости, и их характеристика, в том числе, в терминах сил, действующих на электрон в области ковалентных и нековалентных взаимодействий.

Проведенное методом Кона-Шэма (B3LYP/STO-3G и B3LYP/6-311+G*) квантово-химическое моделирование показало, что добавление катиона

NH₄⁺ к системе ДМФ⁻¹ + S₈ приводит к устойчивому раскрытию серного кольца и образованию связанной системы ДМФ⁻¹-S₈-NH₄⁺. Все расчеты проводили для синглетного состояния. Полученные многоэлектронные волновые функции B3LYP/6-311+G* использовали для расчета теоретической электронной плотности (ЭП) и ее характеристик, а также потенциала, действующего на электрон в молекуле (РАЕМ), и электростатического потенциала (ESP) и порождаемых ими сил в электронной подсистеме.

Квантово-топологический анализ распределения ЭП выявил большое количество критических точек связи (КТ) и проходящих через них связевых путей между атомами в комплексе ДМФ⁻¹-S₈-NH₄⁺, что указывает на сформированность комплекса (рис.1). Расчет топологических характеристик критических точек связи (таблица 1) позволил провести классификацию внутримолекулярных взаимодействий в комплексе. Судя по параметрам критических точек, структурообразующими в комплексе являются взаимодействия между атомом кислорода ДМФ⁻¹ и атомом серы серного кольца (O₁₁-S₁₉), а также между концевым атомом серы и атомом водорода NH₄⁺ (S₂₀...H₂₅). Взаимодействия в парах атомов S₁₈...H₂₄, S₁₄...H₂₆, S₁₆...N₂₂, O₁₂...S₁₇ и S₁₉...S₂₀ (таблица 1) играют вторичную роль при образовании системы.

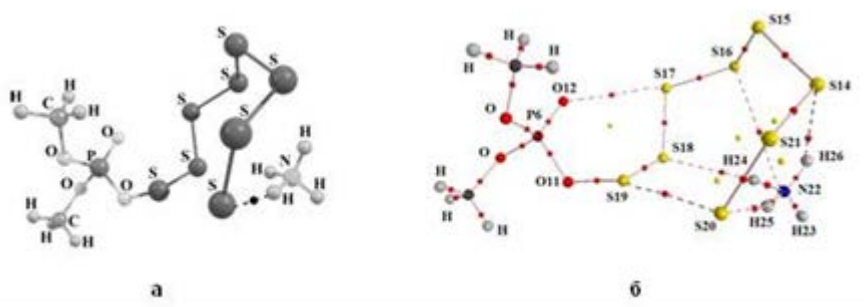


Рис.1 Оптимизированная структура комплекса ДМФ⁻¹-S₈-NH₄⁺¹ (а) и его молекулярный граф (б); расчет методом B3LYP/6-311+G*. Показаны взаимодействия: сплошные линии – ковалентные, пунктир – нековалентные. Красные точки – критические точки связи, жёлтые точки – циклические критические точки.

Таблица 1. Межатомные расстояния R в комплексе ДМФ⁻¹-S₈-NH₄⁺¹ и топологические характеристики критических точек внутримолекулярных взаимодействий (B3LYP/6-311+G*)

Атомы	R, Å	Топологические характеристики ЭП						
		ρ_b , а.е.	$\nabla^2 \rho_b$, а.е.	$g(r_b)$, а.е.	$v(r_b)$, а.е.	$ v(r_b) /g(r_b)$	$h(r_b)$, а.е.	I_b , а.е.
O ₁₁ – S ₁₉	1.784	0.1496	-0.0596	0.0908	-0.1057	1.16	-0.0149	-0.10
S ₂₀ ... H ₂₅	1.955	0.0529	0.0592	0.0266	-0.0118	0.44	0.0148	0.28
S ₁₈ ... H ₂₄	2.692	0.0109	0.0324	0.0067	-0.0014	0.21	0.0053	0.49
S ₁₄ ... H ₂₆	2.591	0.0139	0.0404	0.0086	-0.0014	0.16	0.0072	0.52
O ₁₂ ... S ₁₇	3.200	0.0084	0.0280	0.0062	-0.0008	0.13	0.0054	0.64
S ₁₆ ... N ₂₂	3.824	0.0040	0.0128	0.0026	-0.0006	0.23	0.0020	0.50
S ₁₉ ... S ₂₀	2.926	0.0263	0.0560	0.0141	-0.0001	0.01	0.0140	0.53

$\rho(r_b)$ и $\nabla^2 \rho(r_b)$ – электронная плотность и лапласиан ЭП в КТ связи; $v(r_b)$ и $g(r_b)$ – локальные плотности потенциальной и кинетической энергии электронов; $h(r_b) = g(r_b) + v(r_b)$ – плотность полной электронной энергии; $I_b = h(r_b)/\rho(r_b)$ – параметр степени связывания.

Для дополнительного анализа межатомного связывания в комплексе ДМФ⁻¹-S₈-NH₄⁺¹ нами рассчитаны значения в КТ связей потенциала $v_{РАЕМ}(\mathbf{r}) < 0$, действующего на каждый электрон в молекуле в точке \mathbf{r} : $v_{РАЕМ}(\mathbf{r}) = -v_{ЕСР}(\mathbf{r}) + v_{ХС}(\mathbf{r})$. Здесь $v_{ЕСР}(\mathbf{r})$ – электростатический потенциал, порождаемый ядерной и электронной составляющими зарядовой плотности; $v_{ХС}(\mathbf{r}) < 0$ – обменно-корреляционный потенциал. Были рассчитаны и значения потенциала $v_{ЕСР}(\mathbf{r})$. Используя

предположение [3], что зависимость $E_{взаим.}$ от локальных свойств критических точек ЭП (P_{r_b}) может быть аппроксимирована линейным уравнением $E_{взаим.} = k_0 + k \cdot P_{r_b}$ (P_{r_b} – локальное свойство КТ), мы оценили энергии межатомных взаимодействий в комплексе (таблица 2). Значения коэффициентов k_0 и k для соответствующих пар взаимодействующих атомов взяты из [3].

Таблица 2. Межатомные расстояния R в комплексе ДМФ⁻¹-S₈-NH₄⁺¹, локальные свойства критических точек связи и энергии взаимодействий (B3LYP/6-311+G*)

Атомы	R, Å	ESP, а.е.	РАЕМ, а.е.	g, а.е.	v, а.е.	$E_{взаим.}$, кДж/моль
O ₁₁ – S ₁₉	1.784	0.909	-1.762	0.091	-0.106	-171
S ₂₀ ... H ₂₅	1.955	0.274	-0.885	0.027	-0.012	-59
S ₁₈ ... H ₂₄	2.692	0.132	-0.551	0.007	-0.001	-8
S ₁₄ ... H ₂₆	2.591	0,141	-0.584	0.009	-0.001	-13
O ₁₂ ... S ₁₇	3.200	0,020	-0,386	0.006	-0.001	-29
S ₁₆ ... N ₂₂	3.824	0,076	-0.421	0.003	-0.001	-4

Параметры критических точек в таблице 2 также указывают на структурообразующую роль взаимодействий между атомом кислорода ДМФ⁻¹ и атомом серы серного кольца (O₁₁-S₁₉) и между концевым атомом серы и атомом водорода NH₄⁺¹ (S₂₀...H₂₅) в комплексе.

Распределения потенциалов $v_{РАЕМ}(\mathbf{r})$ и $v_{ЕСР}(\mathbf{r})$ и порождаемых ими сил даны на рисунке 2. Сила, порождаемая РАЕМ, увлекает электроны к ядрам атомов. Она включает электростатическую $F_{esp}(\mathbf{r})$, обменную $F_x(\mathbf{r})$ и корреляционную $F_c(\mathbf{r})$ составляющие:

$$-\nabla v_{\text{раем}}(\mathbf{r}) = \mathbf{f}(\mathbf{r}) \quad \mathbf{f}(\mathbf{r}) = -F_{\text{esp}}(\mathbf{r}) + F_x(\mathbf{r}) + F_c(\mathbf{r})$$

Сила кинетического происхождения образует в поле потенциала $v_{\text{кин}}(\mathbf{r}) = -v_{\text{РАЕМ}}(\mathbf{r})$ (с точностью до постоянной) атомоподобные бассейны вокруг ядер. Обе силы способствуют образованию «мостиков»

электронной плотности, соответствующих в классической химии и в квантовой теории атомов в молекулах и кристаллах химическим связям [4].

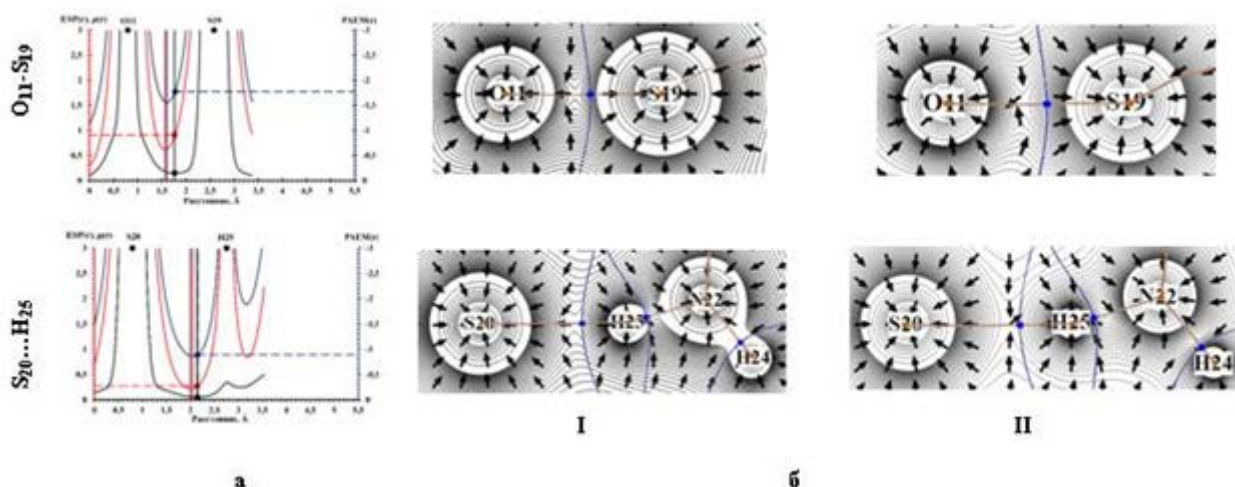


Рис.2 Комплекс ДМФ⁻¹-S₈-NH₄⁺¹: а - одномерные профили ESP(r) (левая шкала, а.е.) и РАЕМ(r) (правая шкала, а.е.) вдоль межатомного расстояния; б - суперпозиции границ атомных бассейнов в ЭП (полужирные синие линии), потенциала $-v_{\text{РАЕМ}}(r)$ и сил РАЕМ (I) и $v_{\text{ESP}}(r)$ и электростатических сил, действующих на электрон (II) во фрагментах комплекса. Силы показаны стрелками. Коричневые линии – связевые пути в ЭП, точки - КТ связей.

Для основных структурообразующих взаимодействий в комплексе ДМФ⁻¹-S₈-NH₄⁺¹ мы нашли, что (рис. 2):

- для связи O₁₁-S₁₉ потенциалы РАЕМ и ESP имеют в КТ достаточно высокие значения. Разность между значениями РАЕМ и $-ESP$ характеризует потенциал, создаваемый обменом и корреляцией электронов (рис. 2, а). Обменная часть в этом потенциале превалирует, обеспечивая накопление ЭП между атомами и значительную долю ковалентности во взаимодействии. Анализ распределения потенциалов и создаваемых ими сил указывает на то, что в ходе этого взаимодействия силы, формируемые атомом S₁₉, прижимают к нему атом O₁₁ (рис. 2, б).

- для связи S₂₀...H₂₅ значение РАЕМ и ESP в КТ связи существенно ниже, чем в случае взаимодействия O₁₁-S₁₉. Значение ЭП и разность между РАЕМ и $-ESP$ ниже (рис. 2, а), что обусловлено, по-видимому, большей корреляцией электронов. Это указывает на малый вклад обмена (т.е. ковалентности) в связь S₂₀...H₂₅. Силы, порождаемые атомом H₂₅, слабее прижимают к нему атом S₂₀ (рис. 2, б).

Сопоставление рисунков 2, а и 2, б и данных таблиц 1 и 2 приводит к выводу, что взаимодействие O₁₁-S₁₉ представляет собой полярную ковалентную связь, тогда как взаимодействие S₂₀...H₂₅ можно охарактеризовать как водородную связь средней силы с небольшой степенью ковалентности.

Таким образом, представленные результаты позволяют охарактеризовать и ранжировать атомные взаимодействия. Это особенно важно при решении задач зеленой химии, касающихся химических процессов, использующих трудно поддающиеся

измерению свойства или опасные для жизни вещества.

Данная работа связана с достижением одной из целей устойчивого развития: Цель 9 Создание стойкой инфраструктуры, содействие всеохватной и устойчивой индустриализации и инновациям.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных исследований (грант 19-03-00141 а).

Список литературы

1. Тарасова Н.П., Межуев Я.О., Занин А.А., Кривобородов Е.Г. О взаимодействии ионных жидкостей с серой // Доклады Академии Наук. – 2019. – Том 484. – №2. – С. 167-171.
2. Ивановка Ю.И., Егорова А.Н., Цирельсон В.Г. Силы в электронной подсистеме комплекса диметилфосфат анион⁻ - S₈ в области ковалентных и нековалентных взаимодействий // Успехи в химии и химической технологии. – 2020. – Том 34. – №2. – С.48-50.
3. Bartashevich E., Matveychuk Y., Mukhitdinova S., Sobalev S., Khrenova M., Tsirelson V. The common trends for the halogen, chalcogen, and pnictogen bonds via sorting principles and local bonding properties. // *Theor. Chem. Acc.* – 2020. – V. 139. – № 16. – P. 4-13.
4. Tsirelson V., Stash A. Orbital-Free Quantum Crystallography: View on Forces in Crystals. // *Acta Crystallographica, Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials.* – 2020. – V. B76. – № 5. – P. 769-778.

УДК 66.091.7

Серегина Т.С., Ивановская Е.В., Филимонова Е.А., Лусс А.Л., Дятлов В.А
**МЕТОД СВЕТОРАССЕЯНИЯ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ НАНОКОРПУСКУЛЯРНЫХ
НОСИТЕЛЕЙ ЛЕКАРСТВ, СИНТЕЗИРОВАННЫХ НА ОСНОВЕ НОВЫХ
ЦИАНАКРИЛАТНЫХ МОНОМЕРОВ**

Серегина Татьяна Сергеевна – магистрант 1 курса кафедры биоматериалов;
email: tatiana.seregina.2016@yandex.ru;

Ивановская Екатерина Владиславовна – студентка 3 курса кафедры химической технологии пластических масс;
Филимонова Екатерина Андреевна – магистрант 1 курса кафедры химической технологии пластических масс;
Лусс Анна Леонидовна – кандидат химических наук, ассистент кафедры биоматериалов;
Дятлов Валерий Александрович – доктор химических наук, профессор, кафедра химической технологии пластических масс;
ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»,
Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

Методами динамического светорассеяния (DLS) и статического светорассеяния (SLS) изучено спонтанное образование ниосом из амфифильного эндкепированного поливинилпирролидона и временных поверхностно-активных цианоакрилатных мономеров, образующих поли-2-цианоакрилатные ниосомы после мицеллообразования и полимеризации внешней стенки в результате элиминирования жирного спирта. Обнаружено, что метод статического светорассеяния в водных средах мало пригоден для изучения ММР амфифильных полимеров. Синтезированные полимеросомы, содержащие внутри протионамид, используются в качестве модельного лекарства.

Ключевые слова: амфифильный эндкепированный поливинилпирролидон, нанокорпускулярные носители, поли-2-цианоакрилатные полимеросомы, инкапсулированный протионамид, статическое светорассеяние, динамическое светорассеяние.

**THE METHOD OF LIGHT SCATTERING IN THE STUDY OF NANOCARRIERS OF DRUGS
SYNTHESIZED ON THE BASIS OF NEW CYANOACRYLATE MONOMERS**

Seregina T.S., Ivanovskaya E.V., Filimonova E.A., Luss A.L., Dyatlov V.A.
D.I. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia.

By methods of dynamic light scattering and static light scattering studied spontaneous formation of niosomes obtained from amphiphilic end-capped polyvinylpyrrolidone and temporal surface-active cyanoacrylate monomers, forming poly-2-cyanoacrylate niosomes after micellization and polymerization of outer layer as a result of the elimination of alcohol. It was found that the method of static light scattering in aqueous medium is not very suitable for studying mmd of amphiphilic polymers. Synthesized polymerosomes with prothionamide inside are used as a model drug.

Keywords: amphiphilic end-capped polyvinylpyrrolidone, nanocarriers, poly-2-cyanoacrylate polymerosomes, encapsulated prothionamide, static light scattering, dynamic light scattering.

Введение

Ниосомы (полимеросомы), синтезируемые из поверхностно-активных мономеров и амфифильных полимеров, получили широкое распространение в качестве носителей лекарственных средств при терапии тяжелых форм онкологических и генетически обусловленных заболеваний. Цианоакрилатные мономеры обладают рядом уникальных свойств, которые вызвали повышенный интерес к этим мономерам в качестве основы полимеров медицинского назначения. Главным является, их способность к полимеризации, в отсутствие радикальных инициаторов, с образованием полимеров, способных к биодegradации внутри организма. Это позволяет применять их в качестве основы эндопротезов и носителей лекарств без риска вызвать осложнения, связанные с блокадой клубочковой фильтрации почек высокомолекулярными фракциями полимеров. Полицианоакрилаты являются наиболее безопасным типом акриловых полимеров медицинского назначения. Их используют в качестве основы клеевых композиций для склеивания костей, кожи, мягких тканей, а также паринхемы печени в тех

случаях, когда использование шовного материала нежелательно или невозможно. Амфифильные полимеры на основе поливинилпирролидона также являются перспективными соединениями для получения нанокорпускулярных носителей. Однако их использование требует тщательного контроля молекулярной массы, поскольку пвп не является деградирующим элементом. В настоящей работе изучена применимость методов динамического и статического многоугольного светорассеяния для исследования молекулярно-массовых характеристик и размеров нанокорпускулярных носителей, полученных на основе поверхностно-активных мономеров и полимеров.

В настоящей работе использовались полимеросомы, полученные из амфифильных сополимеров поливинилпирролидона (схема 1), а также из поверхностно-активных 2-цианоакрилатных мономеров с «временной» амфифильностью (схема 2). Из указанных амфифильных веществ сформировали полимеросомы по схемам 3 и 4.

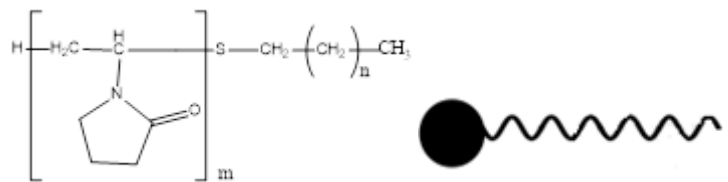


Схема 1 Структура поливинилпирролидона

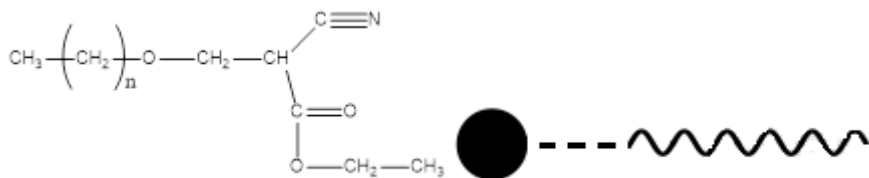


Схема 2 Структура 2-цианакрилатных мономеров



Схема 3 Образование мицеллы из поливинилпирролидона

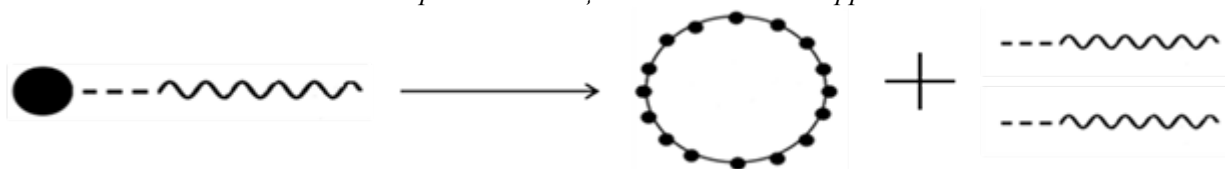


Схема 4 Образование полимеросомы из 2-цианакрилатных мономеров

Методами статического и динамического светорассеяния изучили влияние молекулярно-массовых характеристик на формирование мицелл. Исследовали 4 вида полимеросом, сформированных из поверхностно-активных полимеров и мономеров: 1) пустые полимеросомы на основе амфифильного

эндкепированного поливинилпирролидон (PVP), 2) полимеросомы на основе PVP с протиионамидом внутри (PVP*) (рис. 1), 3) пустые полицианоакрилатные ниосомы (PCA), 4) полицианоакрилатные ниосомы с протиионамидом (PCA) (рис.2).

а)

б)

в)

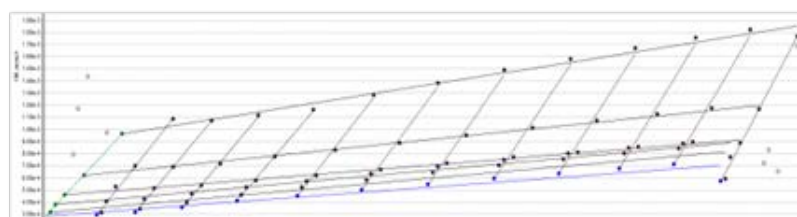
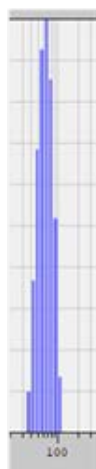
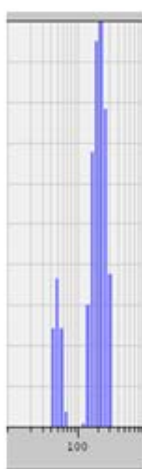
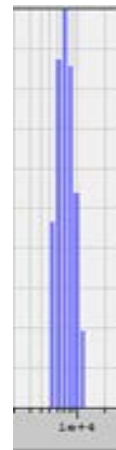


Рис.1 Спектры: а) DLS спектр пустых полимеросом из поливинилпирролидона б) DLS спектр полимеросом из поливинилпирролидона с протиионамидом; в) SLS спектр амфифильного поливинилпирролидона по Berry



а)



б)

Схема 6 Спектры: а) DLS спектр пустых ниосом из полицианакрилата;
б) DLS спектр ниосом из полицианакрилата с протионамидом

Полученные результаты измерений представлены в таблице 1.

Таблица 1 Результаты измерений молекулярной массы полимеров методом SLS и размера пустых полимеросом, полученных на основе амфифильного эндкепированного поливинилпирролидона и полицианоакрилатных полимеров, а также полимеросом, содержащих протионамид внутри, методом DLS.

№	Вещество	Метод анализа				
		DLS, нм		SLS		
				Zimm	Berry	Guinier
1	PVP	48	206	$1,1 \cdot 10^5$	$1,2 \cdot 10^4$	$8,3 \cdot 10^3$
2	PVP*	65		$1,6 \cdot 10^5$	$1,3 \cdot 10^4$	$9,7 \cdot 10^3$
3	PCA	90	586	-	-	-
4	PCA*	7586		-	-	-

Таким образом, установлено, что:

- метод статического светорассеяния SLS непригоден для определения молекулярно-массовых характеристик в средах, в которых полимер образует мицеллы. Для определения молекулярной массы требуется дополнительно исследовать мицеллообразование в органических растворителях и в присутствии халотропных реагентов, с независимым контролем агрегации полимеров методом гель-проникающей хроматографии;
- спонтанная самоорганизация поверхностно-активных полимеров приводит к образованию пустых бислойных полимеросом размером около 200 нм;
- инкапсулирование нерастворимого в воде лекарства, протионамида, методом осаждения из раствора в непрерывную фазу, содержащую амфифильные полимеросомы, приводит к образованию ниосом, с частицами протионамида внутри, диаметром около 600 нм. Специальные

методики позволяют получать капсулы большого размера, около 7000 нм, с протионамидом внутри.

Данная работа связана с достижением одной из целей устойчивого развития: Цель 3 Обеспечение здорового образа жизни и содействие благополучию для всех в любом возрасте.

Список литературы

1. Dyatlov V.A., Maleev V.I. Intermediates for the preparation of poly(2-cyanoacrylates) and applications of the poly(2-cyanoacrylates) so prepared. Int. Application No PCT/IE 94/000018, 1994, Int. Publication No WO95/026371, 1995.
2. Dyatlov V.A., Katz G.A. Small diameter nanocapsules, process for their preparation and application thereof. Int. Application No PCT/IE 94/000001, Int. Publication No WO94/015590, 1994.

**Секция
«Социально-экономические аспекты устойчивого развития»**

УДК 378.1:504.75

Ергина В.Е., Молчанова Я.П.

РОССИЙСКИЙ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ ДМИТРИЯ ИВАНОВИЧА МЕНДЕЛЕЕВА КАК «ЗЕЛЁНЫЙ» ВУЗ: ПЕРСПЕКТИВЫ ПРЕВРАЩЕНИЯ

Ергина Владислава Евгеньевна – студентка 3-го года обучения кафедры ЮНЕСКО «Зеленая химия для устойчивого развития»; erginav@gmail.com.

Молчанова Яна Павловна – кандидат технических наук, доцент кафедры ЮНЕСКО «Зелёная химия для устойчивого развития»; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И.

Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье рассмотрена концепция «зелёного» университета, способного снизить негативное воздействие на окружающую среду, сформировать экологическую культуру у студентов и сотрудников, апробировать различные образовательные программы и научные разработки, а также поднять престиж университета и повысить лояльность абитуриентов. В работе представлены некоторые рекомендации по организации внутренней «зелёной» системы в Российском химико-технологическом университете им. Д. Менделеева.

Ключевые слова: «зелёный» университет; рейтинг «зелёных» вузов; устойчивое развитие; цели устойчивого развития; раздельный сбор отходов.

D. MENDELEEV UNIVERSITY OF CHEMICAL TECHNOLOGY OF RUSSIA AS A «GREEN» UNIVERSITY: PERSPECTIVES OF TRANSFORMATION

Ergina V.E.¹, Molchanova Ya.P.¹

¹ D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article examines the concept of green university which can reduce the negative impact on the environment, develop an ecological culture of students and employees, approve various educational programs and scientific developments, as well as raise the prestige of the university and increase the loyalty of applicants. It's supplied with the guidelines for organizing the inner green system in D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia.

Keywords: green university; green university ranking; sustainable development; goals of sustainable development; separate collection of waste.

Введение

«Зелёный» вуз – это высшее учебное заведение, которое внедряет принципы «зелёной» экономики и устойчивого развития в свою деятельность [1]. Это набирающий популярность и внедряемый в прогрессивных университетах мира подход к организации и администрированию всех сфер деятельности вуза, который направлен на снижение «экологического следа» вуза и на защиту окружающей среды благодаря внедрению конкретных экологических мер и реализации экологических проектов и программ как на базе вуза, так и в местных сообществах [2].

Можно выделить следующие признаки «зелёного» вуза:

- образовательная и научно-исследовательская деятельность вуза в сфере охраны окружающей среды и устойчивого развития;

- просветительская деятельность в сфере охраны окружающей среды и устойчивого развития и формирование экологической культуры в вузовской среде;

- система ответственного обращения с отходами;

- меры по энергосбережению и повышению энергоэффективности;

- меры по водосбережению;

- меры по снижению транспортного следа;

- экологически ответственные (зелёные) закупки [1].

«Зелёный» вуз может получить следующие преимущества:

- позиционирование вуза как экологически ответственного учреждения;

- экономический эффект, связанный с ресурсосбережением;

- дополнительная возможность для студенческих стажировок;

- развитие открытой отчетности в области устойчивого развития;

- повышение лояльности абитуриентов;

- новые возможности для сотрудничества с партнёрами/спонсорами [1].

Основоположником экологизации высших учебных заведений считают Дэвида Орра, американского эколога. Он проводил исследования по использованию энергии, воды и материалов в нескольких университетских городках США в 1987 году, которые помогли запустить движение «зелёных» кампусов. Также Опп предложил поставить цель по достижению углеродной нейтральности в колледжах и университетах, а затем организовал и профинансировал разработку плана для своего кампуса в Оберлине [3].

Во многих ведущих зарубежных университетах уже давно внедряют экологические практики, ведут программы по уменьшению углеродного следа, придерживаются политик устойчивого развития. Примерами реализации концепции «зелёного» вуза

являются Гарвард, Центрально-Европейский университет, Университет Копенгагена и многие другие.

В отечественных вузах активная экологизация ведётся только последнее десятилетие. Например, РУДН один из первых взял курс на «озеленение» и является самым экологичным вузом России согласно UI GreenMetric за 2020 год [4]. В СПбГУ внедрена экологическая политика, организован отдельный сбор отходов с 2015 года, есть активное инициативное неформальное экологическое сообщество [5].

Студенты являются движущей силой в экологизации университетов. Именно они зачастую являются инициаторами внедрения отдельного сбора отходов, формирования экологического сознания у обучающихся и преподавателей. Однако силами одних студентов невозможно сделать вуз «зелёным». Так, например, экологический клуб «Sustainable Future» уже более двух лет ведёт диалог с администрацией об экологизации университета, реализации отдельного сбора отходов на его территории. Без поддержки и помощи со стороны руководства это невозможно воплотить в жизнь. Создание «зелёного» офиса и программы устойчивого развития позволили бы институализировать экологические практики, наметить план для достижения поставленных целей на несколько лет вперёд. Стоит отметить, что при осуществлении всего этого необходимо показывать и рассказывать студентам и сотрудникам о проделанной работе. Открытость и прозрачность в экологических проектах важна для людей. Поэтому многие сайты «зелёных» университетов имеют страницы, содержащие отчеты об экологической деятельности.

Позиционирование университета как «зелёного» важно для формирования социально-ответственного имиджа. Участие в международном и российском рейтинге «зелёных» вузов может способствовать этому. Участие и высокие позиции в рейтинге открывают следующие преимущества для вуза:

- улучшение имиджа вуза на российском и международном уровне как экологически ответственного учреждения;
- повышение показателей энергоэффективности и экономии бюджета за счет внедрения ресурсосберегающих практик;
- продвижение в направлении позиционирования в международных рейтингах устойчивости университетов;
- повышение инвестиционной привлекательности вуза и возможность привлечь дополнительные средства на развитие учреждения;
- повышение привлекательности вуза для студентов и абитуриентов как экологически ответственного учреждения;
- новые возможности для развития партнерства с другими вузами и организациями для исследовательской, научно-просветительской деятельности на российском и международном уровнях.

Рейтинги позволяют определить не только сильные стороны, но и потенциал для развития в экологизации университета [6, 7].

В ходе работы была проанализирована деятельность РХТУ на соответствие критериям (требованиям) рейтингов. На основании этого были сделаны выводы, что критерии рейтинга UI GreenMetric World University Ranking применимы в большей степени к кампусным университетам, в отличие от отечественного рейтинга. По этой причине у РХТУ им. Д. И. Менделеева нет шансов занять лидирующие позиции, так как он всегда будет проигрывать в показателях площади (доли) зелёных зон и в реализации возможностей сокращения количества индивидуальных парковочных мест. Однако у РХТУ хороший потенциал, обусловленный большим количеством образовательных программ экологической направленности и наличием межфакультетских курсов, связанных с охраной окружающей среды и устойчивым развитием. Можно также отметить проводимую в РХТУ в последние годы работу, направленную на повышение энергоэффективности: замену освещения на светодиодное, установку пластиковых окон.

Университет является отличным местом апробации новых решений в области устойчивого развития, которые впоследствии можно тиражировать. Так, например, интерес представляет внедренный в Пермском национальном исследовательском политехническом университете научно-исследовательский модуль для оценки эффективности применения энерго- и ресурсосберегающих технологий iHouse и лабораторный комплекс глубокой оптико-механической сортировки отходов [8].

Будучи частью города, университет должен развиваться вместе с ним. Например, с 1 января 2020 года в столице стартовала двухпоточная система сбора ТКО [9]. А в московских корпусах и студгородке университета всё ещё нет отдельного сбора отходов. Более того, на территории Миусского комплекса стоят баки для смешанных отходов и вторсырья, однако по какой-то причине бутылки от воды, которые можно переработать, лежали в сером баке. Ежемесячной акции «Чистая Суббота» по сбору вторсырья в студгородке, сбора батареек и пластиковых крышек недостаточно, необходимо внедрить непрерывный отдельный сбор отходов на территории всех корпусов. Реализация РСО в общежитиях будет затруднена наличием мусоропроводов в зданиях, которые стоило бы заварить или заменить на те, которые имеют несколько клапанов приёма отходов.

Заключение

Таким образом, структура в университете, отвечающая за устойчивое развитие, необходима для планирования, исполнения и контроля работ в области устойчивого развития. Важно не только создавать планы устойчивого развития университета и дорожные карты, но и ежегодные отчеты. Так сообщество вуза и его партнеры наглядно могут

наблюдать изменения, которые происходят благодаря внедрению различных экологических, экономических и социальных практик. На территории вуза можно реализовывать различные научно-исследовательские экологические проекты. Выполненный анализ университетов и рейтингов позволил выделить следующие ключевые направления деятельности «зелёного» вуза:

- наличие раздельного сбора отходов на территории кампуса;
- использование ресурсосберегающих технологий (например, сбор и использование дождевой воды);
- реализация курсов и программ дополнительного образования по охране окружающей среды и устойчивому развитию;
- создание подразделения при администрации университета, которое будет ответственно за разработку, реализацию и контроль экологической политики;
- поддержка на систематической основе инициатив студентов, сотрудников, направленных на реализацию принципов устойчивого развития и экологических инициатив;
- взаимодействие со студентами и сотрудниками, направленное на улучшение деятельности по экологизации университета.

Концепция «зелёного» вуза является концепцией университета будущего, в которое устремлен РХТУ им. Д. И. Менделеева. А значит, ему необходимо соответствовать экологическим стандартам уже сейчас. Несмотря на то, что уже сейчас в университете применяются меры по энергосбережению, реализуются и существует студенческое экологическое движение, этого недостаточно для участия в рейтингах и претензии на звание «зелёного» вуза. Введение экологических, устойчивых инициатив положительно скажется на конкурентоспособности вуза и повысит лояльность абитуриентов.

Список использованной литературы:

1. Тихонова И. И. Как сделать вуз «зелёным»: [тренинг: материалы IV слёта Ассоциации «зелёных» вузов России, экопарк «Ясно Поле», д. Вележево, 17-19 сентября 2020 г.]
2. «Как стать «зелёным» вузом?» Ассоциация «зелёных» вузов России. – Текст: электронный // Зеленые вузы России: [сайт]. – Режим доступа: <http://зеленыевузы.рф/присоединиться/> (дата обращения: 04.10.2020).
3. Leaf Litter Talks with David Orr. – Текст: электронный // Biohabitats [сайт]. – Режим доступа: <https://www.biohabitats.com/newsletter/sustainability-in-higher-education-2/leaf-litter-talks-with-david-orr/> (дата обращения: 02.04.2021).
4. Overall Rankings 2020. — Текст: электронный // UI Green Metric: [сайт]. – Режим доступа: <http://greenmetric.ui.ac.id/overall-rankings-2020/> (дата обращения: 27.12.2020).
5. «Зелёный университет». – Текст: электронный // СПбГУ: [сайт]. – Режим доступа: <https://spbu.ru/studentam/studencheskiy-kampus/zelenyy-universitet> (дата обращения: 06.10.2020).
6. Рейтинг «зеленых» вузов России. – Текст: электронный // Зеленые вузы России: [сайт]. – Режим доступа: <http://greenuniversity.ru/ranking/> (дата обращения: 07.11.2020).
7. Criteria & Indicators. – Текст: электронный // UI Green Metric: [сайт]. – Режим доступа: <http://greenmetric.ui.ac.id/criteria-indicator/> (дата обращения: 04.11.2020).
8. Проекты. – Текст: электронный // Зелёный Политех. Эко-программа Пермского Политеха: [сайт]. – Режим доступа: <https://green-prgru.nethouse.ru/services> (дата обращения: 15.10.2020).
9. Москва начнет первый этап перехода к раздельному сбору мусора 1 января. – Текст: электронный // Официальный сайт Мэра Москвы: [сайт]. – Режим доступа: <https://www.mos.ru/mayor/themes/1299/6089050/> (дата обращения: 02.04.2021).

УДК 504.05

Киракосян Д. В., Молчанова Я. П.

АНАЛИЗ ПЕРВЫХ ПОСЛЕДСТВИЙ НЕФТЯНОГО РАЗЛИВА В НОРИЛЬСКЕ

Киракосян Диана Валерьевна – магистрантка 1-го года обучения кафедры ЮНЕСКО «Зеленая химия для устойчивого развития», ИПУР; kirakosyan.diana2015@yandex.ru.

Молчанова Яна Павловна – кандидат технических наук, доцент кафедры ЮНЕСКО «Зеленая химия для устойчивого развития», ИПУР, ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

В статье проанализированы последствия аварии в Норильске. Приведены результаты анализа проб и данные по оценке ущерба окружающей среде, водным объектам и коренным народам Севера.

Ключевые слова: окружающая среда, нефтепродукты, авария, дизельное топливо, нефтяное загрязнение, корпоративная социальная ответственность, Арктика.

ANALYSIS OF FIRST CONSEQUENCES OF THE OIL SPILL IN NORILSK

Kirakosyan D.V., Molchanova Y.P.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

The article discusses the consequences of the accident in Norilsk. Sample analysis results and data on the assessment of damage to the environment, water bodies and indigenous peoples of the North are presented.

Key words: environment, oil products, emergency, diesel fuel, oil pollution, corporate social responsibility, Arctic.

Введение

Утечки и разливы нефти и нефтепродуктов представляют серьезную экологическую опасность, вызывают озабоченность общественности и проблемы у местного населения.

Публикация посвящена анализу последствий аварии в Норильске, которая произошла 29 мая 2020 г., когда на ТЭЦ-3 из-за внезапного проседания опор получил повреждения резервуар хранения дизельного топлива (ДТ), в результате утечка составила 21 тыс. т. Основной причиной аварии на данный момент считают упущения в проектировании и строительстве свайного основания резервуара. В результате часть свай не опиралась на скальный грунт, это и привело к неравномерному распределению нагрузки [1].

Масштабы и объемы работ по ликвидации последствий аварии выглядят впечатляющие:

- в ликвидации последствий разлива были задействованы 163 резервуара общим объемом около 30 тыс. м³;

- в районе ТЭЦ-3 и р. Амбарной собрали более 34 тысяч кубометров водно-топливной смеси;

- на площадке ТЭЦ-3 отсепарировали 4768 м³;

- с использованием сорбента очистили 423 тыс. м² территории в водосборе р. Амбарной [1].

К октябрю 2020 г. на месте аварии были завершены основные этапы ликвидации последствий: собрано 90% вытекшего топлива, завершено удаление загрязненных грунтов. В ближайшие годы «Норникель» планирует продолжить активную работу по ликвидации последствий произошедшего разлива и рекультивации пострадавших земель [2].

Если сравнивать экологические последствия разливов нефти и нефтепродуктов, то можно прийти к выводу, что продукты переработки нефти представляют большую опасность, чем необработанная нефть, поскольку они менее гидрофобны, что делает неэффективным механический способ очистки воды.

Водные объекты подверглись существенному воздействию. По сравнению с реками, озера наиболее

чувствительны к различным загрязнениям. Это связано замедленным водообменом. Именно поэтому озеро Пясино может испытывать наибольшую экологическую нагрузку. Есть опасения, что для восстановления экосистеме озера потребуется продолжительное время, есть даже вероятность, что до своего первоначального состояния озеро уже не восстановится никогда. К этому следует добавить, что небольшая часть дизельного топлива попала в морскую экосистему Карского моря.

Значительные и долговременные превышения предельно допустимых концентраций загрязняющих веществ в Норильско-Пясинской системе могут привести к деградации хрупких арктических экосистем.

Ущерб был нанесён краснокнижным видам рыб ручья Надеждинского, рек Далдыкана, Амбарной и Пясины, а также озера Пясино. По оценкам специалистов Федерального агентства по рыболовству [3], восстановление водной экосистемы после аварии в Норильске может занять около 18 лет.

Всероссийский научно-исследовательский институт рыбного хозяйства и океанографии (ВНИРО) предварительно оценил затраты на восстановление Норило-Пясинской озерно-речной системы после аварии в 40 млрд рублей, а стоимость утраченных водных биологических ресурсов – в 3,5 млрд рублей [3].

Сегодня ученые и общественность все еще продолжают обсуждать и анализировать последствия прошлогодней аварии в Норильске, которую уже можно отнести к крупнейшим известным разливам нефтепродуктов в российской Арктике и в том числе самым масштабным разливам жидкого дизельного топлива на планете.

Экспериментальная часть

В июле и августе 2020 г. сотрудниками Института биофизики и ИВЭП было отобрано 40 проб донных отложений рек Амбарная и Дадькан, оз. Пясино и Карского моря. Пробы отбирали с помощью дночерпателя, а на мелководных каменистых участках рек – совком.

Органическое вещество играет важную роль в круговороте химических элементов в водной экосистеме. Оно имеет природный (продукты жизнедеятельности гидробионтов) и антропогенный генезис и оказывает существенное влияние на донные отложения. Количественное содержание органики в грунтах позволяет оценить трофность водоема и обеспеченность высших трофических уровней веществом и энергией. Уровень накопления органических соединений в отложениях регулирует циклы биогенных элементов и газовый режим на границе «вода-дно». Органическое вещество играет значимую роль в аккумуляции в осадках тяжелых металлов, углеводородов и других токсичных соединений. Наиболее репрезентативным показателем органического вещества является органический углерод [4].

Органический углерод (Сорг) в донных осадках определяли методом сухого сжигания на анализаторе

АН-7560. Экспресс-анализатор АН-7560 предназначен для определения массовой доли углерода в сталях, сплавах и других материалах методом автоматического кулонометрического титрования. В анализаторе применен метод автоматического титрования по величине рН.

Содержание Сорг в донных осадках варьировало от 1,51 до 6,81 %. Пространственное распределение Сорг характеризовалось неоднородностью.

Наибольшая интенсивность аккумуляции Сорг свойственна заиленным грунтам, что обусловлено более высокой сорбционной емкостью глинистых осадков в сравнении с песчаными. При этом большая часть поверхностных донных осадков оз. Пясино представлена песчаным материалом преимущественно кварцполевошпатового характера. На рисунке 1 можно увидеть высокие показатели Сорг на некоторых участках по сравнению с остальной загрязненной территорией.

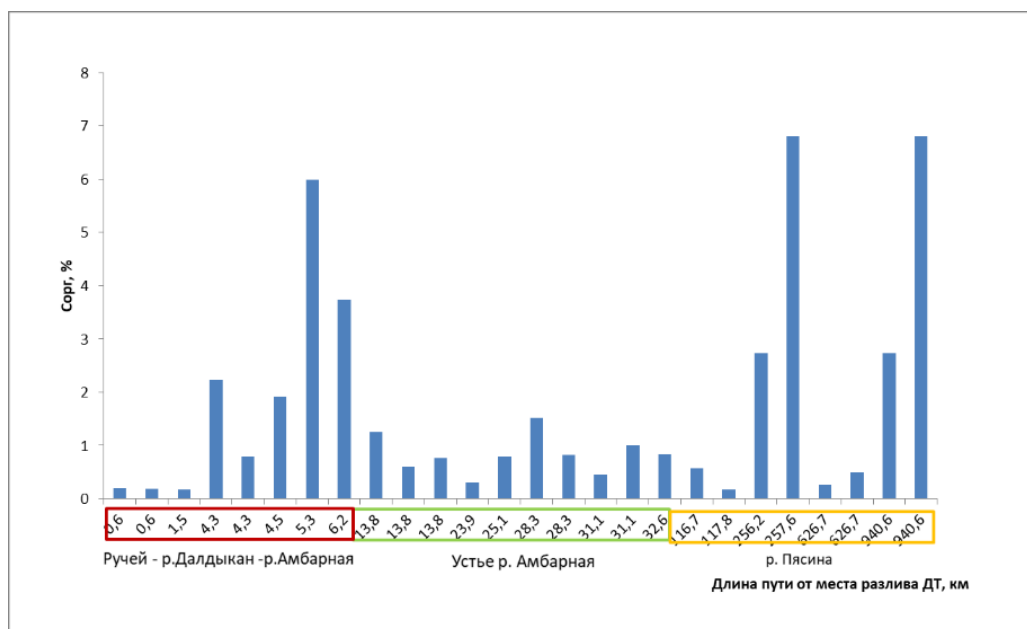


Рис.1 Содержание Сорг в донных осадках

Содержание и состав ПАУ определяли методом высокоэффективной жидкостной хроматографии на хроматографе LC-20 Prominence (фирма Shimadzu) с колонкой Envirosep RP при температуре термостата колонки 40°C, с флуоресцентным детектором RF-20A в градиентном режиме (от 50% объемной доли ацетонитрила в воде до 90%). Скорость потока элюента – 1 см³/мин. Расчет проводили с помощью программного обеспечения LC Solution. Калибровали прибор при помощи индивидуальных ПАУ (фирмы Supelco) и их смесей. В результате были определены индивидуальные полиарены, рекомендованные ЕРА: нафталин (Naph), 1-метилнафталин (M_Naph), 2-метилнафталин (2M_Naph), аценафтен (Ace), флуорен (Flu), фенантрен (Phen), антрацен (Antr), флуорантен (Flt), пирен (Pyr), бенз(а)антрацен (BaA), хризен (Chr), бенз(е)пирен (BeP), бенз(а)пирен (BaP), дибенз(а, h)антрацен (DbA), бенз(g,h,i)перилен (BPI), индено[1,2,3-с,d]пирен (Ip), бенз(б)флуорантен (BbFlu).

Суммарное содержание ПАУ с учетом всех индивидуальных полиаренов в донных осадках варьировало от 55,6 до 3764,4 нг/г. В составе проб доминировали нафтенy (нафталин (НАФ), 1-метилнафталин (1-МеНАФ), 2-метилнафталин (2-МеНАФ)) и фенантрен (ФЕН).

На рисунке 2 показано содержание бенз(а)пирена в донных осадках, так как из ПАУ только он нормируется в почве (ПДК составляет 20 нг/г), по мере удаления от места разлива ДТ.

Было установлено, что, несмотря на использование оградительных бонов, содержание бенз(а)пирена спустя месяц после аварии на некоторых участках превышало ПДК. Это может быть связано с растворимостью дизельного топлива в воде и тем, что оградительные боны хуже удерживают менее вязкое, чем нефтепродукты в среднем, дизельное топливо.

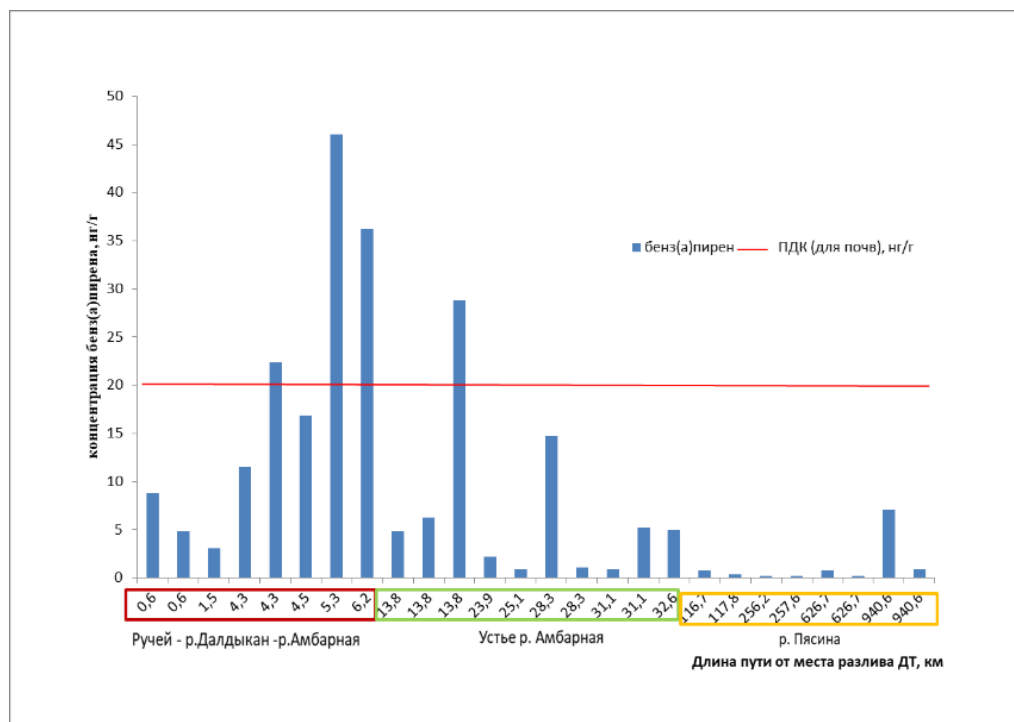


Рис.2 Концентрация бенз(а)пирена в донных осадках

Проблема идентификации природы загрязнений (источника поступления ПАУ и, следовательно, содержащих их нефтей и нефтепродуктов (НП)) осложняется тем, что это распространенные вещества, формирующиеся во многих как природных, так и техногенных процессах. С точки зрения генезиса условно все ПАУ подразделяются на пирогенные (образовавшиеся в результате различных процессов горения, в том числе и бытовых отходов), биогенные и петрогенные (например, нефтяного происхождения, не связанные с горением). Петрогенные ПАУ образуются в результате многих геохимических процессов с участием углеводородов.

Более тяжелые и сложные соединения сырой нефти и НП характеризуются относительно более высокой устойчивостью к микробной деградации. В водной среде ПАУ различного происхождения осаждаются на частицах (глина, ил, организмы, детрит и микробы) и оседают на осадках, где микробное сообщество усваивает их до более простых и легких соединений. Накопление и биологическая аккумуляция ПАУ в водной среде и организмах обратно коррелирует с потенциалом и способностью углеводородов к метаболизму, а также их химическим превращениям.

Следуя предложенному Хаустовым А. П. и Рединой М. М. подходу для идентификации происхождения загрязнений [5], основанному на использовании геохимических маркеров, были рассчитаны индикаторные соотношения ПАУ по концентрациям индивидуальных ПАУ (в том числе доля нафталинов от суммы ПАУ).

При 50 % случаев соответствия проб интервалу соотношения ФЕН/АНТР можно говорить о петрогенном происхождении ПАУ, в данном случае >10 оказалось 62,5 %.

Почти все значения соотношения АНТР/(АНТР+ФЕН) получились меньше 0,1, кроме

станции ИБФ 2 (0,20), что свидетельствует о петрогенном происхождении.

Только 10% значений отношения БаА/(БаА+ХР) составляют больше 0,50, поэтому можно с уверенностью говорить о нефтяном происхождении.

Было также выявлено, что неустойчивые нафталины составляют до 70% от общего содержания ПАУ, что свидетельствует о значительном нефтяном загрязнении.

На сегодняшний день «Норникель» позиционирует себя как лидера в области корпоративной социальной ответственности. 10 марта 2021 г. АО «НТЭК» выплатила 146,2 миллиарда рублей компенсации ущерба окружающей среде. 145,5 миллиарда рублей направили в доход федерального бюджета, еще 684,9 миллиона — в доход Норильска в качестве возмещения вреда почвам [6]. Средства для выплаты штрафа были предоставлены «Норильским никелем».

Также по факту разлива была создана комиссия по этнологической экспертизе, перед которой была поставлена задача установить, как разлив ДТ может повлиять на уклад жизни и традиционные промыслы коренных народов. В ходе экспедиции было изучено текущее и будущее техногенное влияние на ведение охоты и рыбалки, оленеводства, а также сохранения культурных традиций. Проведение такого исследования стало уникальной практикой в современной истории России [2].

Уже известно, что «Норникель» начал осуществлять выплаты в размере 175 млн руб. по программе поддержки коренных малочисленных народов севера в Красноярском крае, выделив в 2020 г. 94 млн руб. [2, 7].

И, несмотря на жесткую критику, которую тоже можно в последнее время встретить в адрес компании [8], важно отметить свежую инициативу компании построить предприятие по производству сжиженного природного газа (СПГ) на территории бывшего Никелевого завода [9]. Производство СПГ откроет

возможности для перевода тяжелой карьерной техники компании на двухтопливное потребление. Это хороший пример предотвращения самой возможности возникновения аварийных ситуаций, связанных с хранением больших количеств жидких углеводородов, и перехода на более экологичные виды топлива. Последнее приобретает дополнительное значение в условиях работы в особо уязвимых северных регионах страны. В планах компании – 40%-ное замещение дизельного топлива на СПГ. Важно и то, что применение новой технологии позволит существенно сократить выбросы сажи, а также оксидов углерода, азота и серы.

В ответ на аварию на ТЭЦ-3 АО «НТЭК» Группа компаний «Норникель» для широкого круга заинтересованных сторон подготовила документ [2], в котором представила официальную позицию о причинах произошедшего инцидента, мероприятиях, предпринятых для ликвидации последствий, компенсационных мерах, а также последовавших организационных преобразованиях, направленных на недопущение подобных случаев в будущем. Дополнительную информацию и видеоматериалы о ходе ликвидации аварии на ТЭЦ-3 можно найти на сайте Компании (www.nornickel.ru/sustainability/cleanup/).

Заключение

Таким образом, данный пример нам очень хорошо продемонстрировал связь между экологической, экономической и социальной составляющими устойчивого развития.

Проведенные анализы позволили установить основные характеристики загрязнения водных объектов:

- содержание Сорг в донных осадках на некоторых участках достигло 6,81 %;
- суммарное содержание ПАУ в донных осадках на некоторых участках достигло 3764,4 нг/г.

Результаты выполненных анализов показали, что неустойчивые нафталины составляют до 70% от общего содержания ПАУ, что свидетельствует о значительном нефтяном загрязнении почв на руч. Надежденский, рек Далдыкан, Амбарная, Пясино, Теряя, Дудыпта, Безымянный, Норилка, оз. Пясино.

ПАО «Горно-металлургическая компания «Норильский никель» – крупнейший в мире производитель никеля, палладия и один из крупнейших производителей платины и меди, позиционирующий себя как лидера в области корпоративной социальной ответственности. Отсюда закономерны не только пристальное внимание ученых, широкой общественности к деятельности компании, в том числе ее влиянию на окружающую среду, и как результат большое количество исследований и публикаций в СМИ, посвященных прошлогодней аварии, но и ответное поведение со стороны компании.

Благодарности

Выражаю благодарность своему научному руководителю Немировской Инне Абрамовне (Институт океанологии им. П. П. Ширшова РАН) за

помощь в обработке материалов. Отдельная благодарность представителями Института биофизики СО РАН и Институт водных экологических проблем СО РАН за предоставленные материалы для проведения анализов.

Список литературы

1. Акт технического расследования аварии топливного резервуара АО «НТЭК», Ростехнадзор, 10.11.2020 [Электронный ресурс]: сайт. — URL: <https://www.gosnadzor.ru/news/65/3325/>
2. Белая книга о ликвидации последствий аварии на ТЭЦ- АО «НТЭК» и мерах, принятых компанией. Группа компаний «Норникель». 2021. [Электронный ресурс]: сайт. — URL: <https://www.nornickel.ru/files/ru/investors/white-paper-2020.pdf>
3. Шестаков И. Объединенная пресс-служба Росрыболовства. 25.09.2020 [Электронный ресурс]: сайт. — URL: <http://fish.gov.ru/obiedinennaya-press-sluzhba/novosti/31469-ilya-shestakov-vosstanovlenie-vodnoj-ekosistemy-posle-avarii-v-norilске-zajmet-18-let>
4. Федоров Ю.А., Доценко И.В., Кузнецов А.Н., Белов А.А., Логинов Е.А. Закономерности распределения Сорг в донных отложениях российской части Азовского моря // Океанология. 2009. Т. 49. №2. С. 229-236.
5. Хаустов А. П., Редина М. М. Полициклические ароматические углеводороды как геохимические маркеры нефтяного загрязнения окружающей среды. Экспозиция нефть газ, 2014, № 4 (36), с. 92-96
6. Последствия разлива топлива в Норильске [Электронный ресурс]: сайт. — URL: <https://www.rbc.ru/business/04/06/2020/5ed7b3a19a79470f8a58995b>
7. В МЧС майский разлив дизельного топлива в Норильске назвали самым масштабным на планете. 24.12.2020 [Электронный ресурс]: сайт. — URL: <https://news.rambler.ru/ecology/45496462-v-mchs-mayskiy-razliv-dizelnogo-topliva-v-norilске-nazvali-samym-masshtabnym-na-planete/>
8. Васильчук Т., Одиссонова В. Период распада «Норникеля» // Новая Газета № 28 от 17 марта 2021 г. [Электронный ресурс]: сайт. — URL: <https://novayagazeta.ru/articles/2021/03/17/period-raspada-nornikelia>
9. Савосин Д. Норникель хочет построить малотоннажный СПГ-завод для собственных нужд. 09.02.2021 [Электронный ресурс]: сайт. — URL: <https://neftegaz.ru/news/spg-szhzhennyu-prirodnyu-gaz/664378-nornikel-khochet-postroit-malotonnazhnyu-spg-zavod-dlya-sobstvennykh-nuzhd/>

УДК 378:66:504

Савельева А. Н., Додонова А. А.

ОБРАЗОВАНИЕ В ОБЛАСТИ ЗЕЛЁНОЙ ХИМИИ КАК ВОЗМОЖНОСТЬ ДОСТИЖЕНИЯ УСТОЙЧИВОГО РАЗВИТИЯ СТУДЕНТАМИ ХИМИКАМИ

Савельева Анна Николаевна – бакалавр 3-го года обучения кафедры ЮНЕСКО «Зеленая химия для устойчивого развития»; ann_sav@bk.ru.

Додонова Анна Анатольевна – кандидат химических наук, доцент кафедры ЮНЕСКО «Зеленая химия для устойчивого развития»; ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И.

Менделеева», Россия, Москва, 125047, Миусская площадь, дом 9.

Химия в контексте устойчивого развития занимает важное место, поскольку помогает решать многие проблемы – от изучения молекулярных основ жизни до создания новых источников энергии, которые могут обеспечить устойчивое развитие в будущем. Зеленая химия – это область химии и химической технологии, ориентированная на создание продуктов и процессов с минимальным использованием и образованием опасных веществ.

Ключевые слова: зелёная химия; образование; устойчивое развитие

EDUCATION IN THE FIELD OF GREEN CHEMISTRY AS AN OPPORTUNITY TO ACHIEVE SUSTAINABLE DEVELOPMENT BY CHEMISTRY STUDENTS

Saveleva A.N., Dodonova A.A.,

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation

Chemistry in the context of sustainable development occupies an important place, as it helps to solve many problems

–from studying the molecular foundations of life to creating to new sources of energy that can ensure sustainable development in the future. Green chemistry is a field of chemistry and chemical technology focused on creating products and processes with minimal use and formation of hazardous substances.

Keywords: green chemistry; education; sustainable development

Введение

В современной хозяйственной деятельности человека сегодня остро стоят вопросы полной переработки сырья и уменьшения количества промежуточных продуктов и отходов производства. Решением данной проблемы занимается химическая технология, которая во многом контролирует, перераспределяет и регулирует производственные процессы. Проблемы химических производств и технологических схем часто связаны с

- наличием побочных продуктов, наносящих вред окружающей среде,
- безграмотным применением химической продукции,
- неправильной утилизацией отходов,
- сбрасыванием сточных вод производства,
- нерациональным использованием природного сырья и т.д.

Очевидно, что необходимо разрабатывать и внедрять не только экономически выгодные, но экологически чистые химические технологии. В промышленности нужна экологическая модернизация и в этом могут быть полезны исследования в области зеленой химии, разработка новых химических технологий с применением принципов зеленой химии.

Зелёная химия ищет пути решения проблем, создавая альтернативные технологии, в то время как наука об охране окружающей среды устанавливает источники, оценивает состояние окружающей среды и разъясняет последствия антропогенной нагрузки. Два эти направления тесно связаны между собой и направлены на улучшение взаимоотношений

человека и окружающей среды, т.е. на достижение устойчивого развития.

Зеленая химия — это область химии и химической инженерии, направленная на разработку продуктов и процессов, которые минимизируют или исключают использование и образование опасных веществ. Она фокусируется на воздействии химии на окружающую среду, включая сокращение потребления невозобновляемых ресурсов и технологические подходы к предотвращению загрязнения [1].

Устойчивое развитие – это развитие, которое удовлетворяет потребности настоящего времени, но не ставит под угрозу способность будущих поколений удовлетворять свои собственные потребности [2].

Химия в контексте устойчивого развития занимает важное место, так как помогает решить множество задач, – от изучения молекулярных основ жизни до создания новых источников энергии, способных обеспечить устойчивое развитие в будущем.

В РХТУ им. Д. И. Менделеева студенты с направлений «Химическая технология» и «Химия» слушают дисциплины, связанные с экологической тематикой, а также ходят на межфакультетские учебные курсы «Зелёная химия как инструмент устойчивого развития» и «Планетарные границы, цели устойчивого развития: роль химической технологии». Благодаря анализу тематики и направленности выпускных квалификационных работ (ВКР) студентов РХТУ им. Д.И. Менделеева за последние годы, можно определить влияние этих

дисциплин и межфакультетских учебных курсов на процесс понимания важности и актуальности концепции зеленой химии и устойчивого развития среди студентов-химиков.

Для того, чтобы провести анализ ВКР студентов, понадобилось обратиться к базе данных Информационно-библиотечного центра РХТУ им. Д.И. Менделеева (ИБЦ), в котором представлены все ВКР с 2016 года по 2020 год [3].

Экспериментальная часть

Для анализа были выбраны работы по направлениям «Химическая технология» и «Химия», исключая работы кафедр менеджмента и маркетинга, промышленной экологии и кафедры ЮНЕСКО «Зеленая химия для устойчивого развития». Распределив все работы в папки по годам защит,

через поиск, по ключевым словам, определили встречаемость компонентов слов: *эколог**, *ресурс**, *сбереж**, *иннов**, *зелен**, *охран**, *окаж**.

Рассмотрим принцип поиска на примере компоненты *зелен**. При поиске компоненты можно было столкнуться с разными ситуациями. На рис.1 в работе компонента *зелен** не относится к зеленой химии или устойчивому развитию, но при этом сама работа имеет экологическую направленность.

На рис.2 компонента *зелен** не относит к зеленой химии, как и сама выпускная квалификационная работа.

За счёт таких работ могла образоваться незначительная погрешность в расчетах.

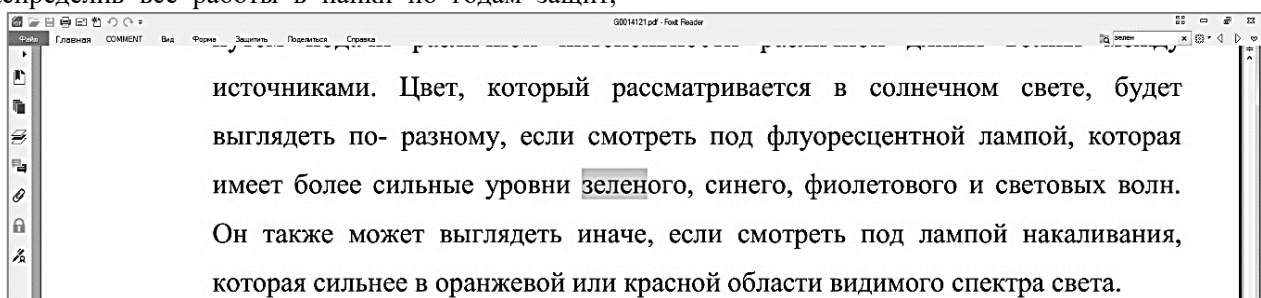


Рис.1. ВКР по теме: «Алкидные антикоррозионные грунтовки с повышенной стойкостью к агрессивным средам»

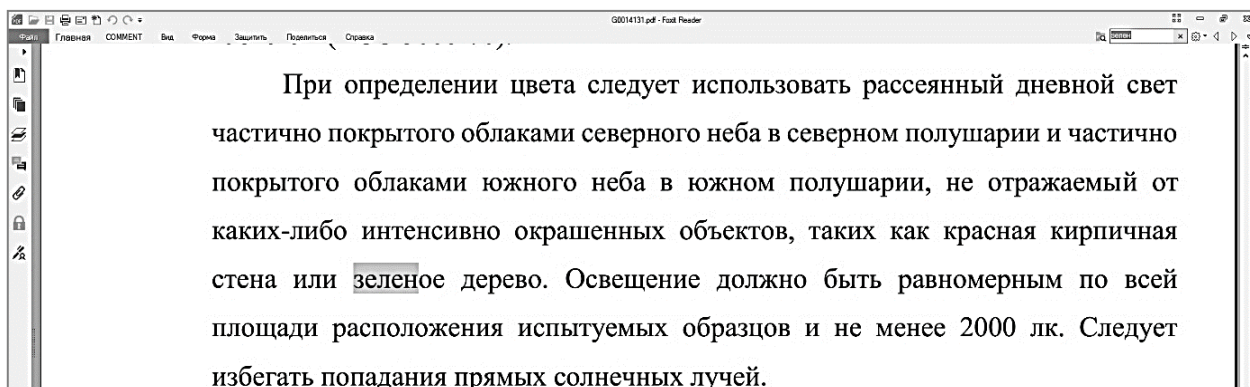


Рис.2. ВКР по теме: «Влияние модификаторов реологии на розлив водно - дисперсионных лакокрасочных материалов»

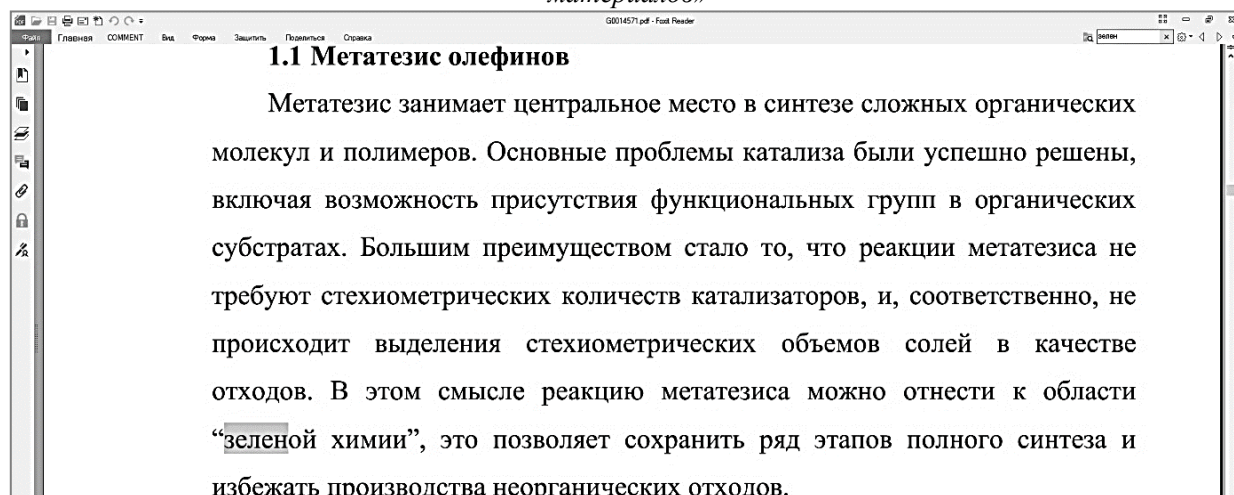


Рис.3. ВКР по теме: «Метатезисная полимеризация циклооктена и его 5-гидроксизамещенного аналога»

На рис. 3 мы видим, что компонента *зелен** использовалась и относилась непосредственно к зеленой химии. С помощью этих данных можно сравнить изменение тематики выпускных квалификационных работ по направлениям «Химическая технология» и «Химия» за последние 5 лет на предмет появления в них различных компонент. Также возможно провести анализ внедрения концепции зеленой химии в образовательный процесс в РХТУ им. Д.И. Менделеева. Общее количество защищенных в РХТУ ВКР по данным ИБЦ за последние 5 лет представлено на рис. 4.

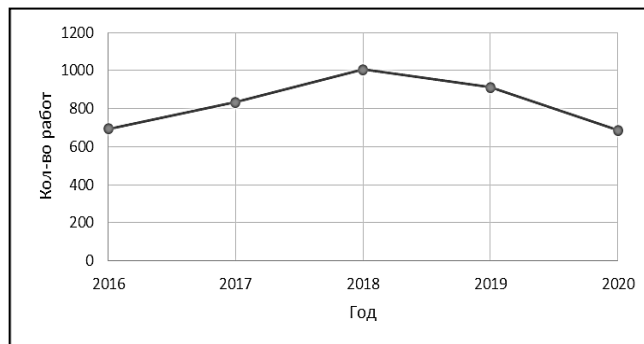


Рис. 4. График изменения количества ВКР по данным ИБЦ за последние 5 лет

На рис. 5 представлены графики изменения встречаемости компоненты (абсолютный показатель) в зависимости от года защиты ВКР за 5 лет

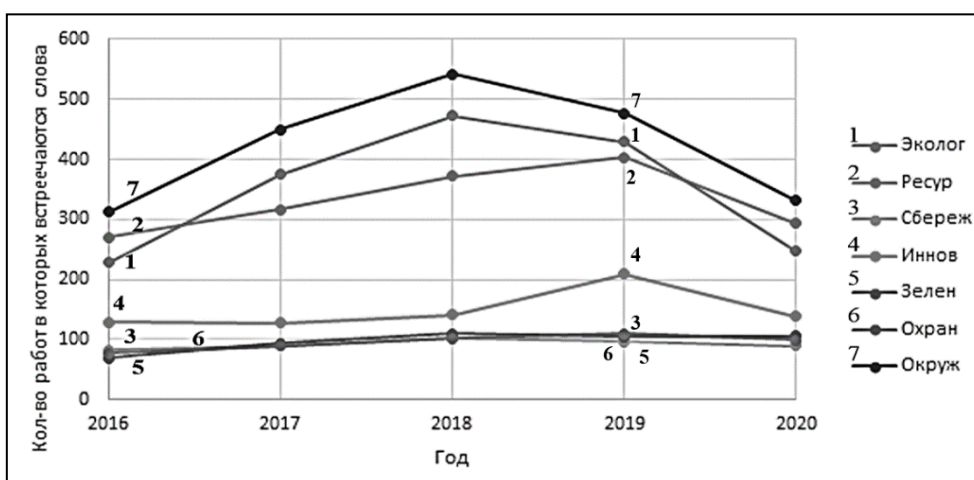


Рис. 5. График изменения встречаемости компоненты (абсолютный показатель) в зависимости от года защиты

Из рис. 5 можно определить, что компоненты *окруж**, *эколог**, *ресурс**, *иннов** росли, но в 2020 году произошел спад. В отличие от компонент *зелен**, *сбереж**, *охран** и *окруж**, которые росли хоть и незначительно. Такие различия обусловлены тем, что

в 2018 году было самое большое количество выпускных квалификационных работ и также не учтен фактор того, что в 2020 году не все кафедры опубликовали выпускные квалификационные работы.

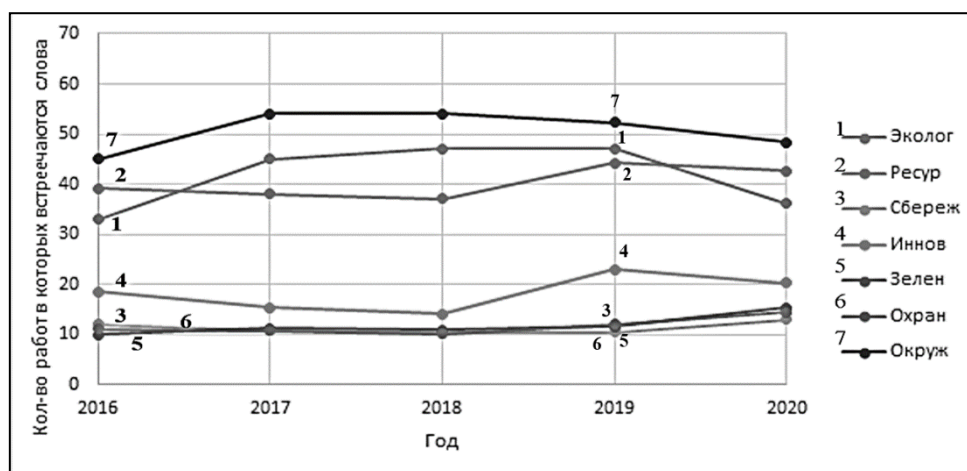


Рис. 6. График изменения встречаемости компоненты (относительный показатель) в зависимости от года защиты

Благодаря перерасчету на рис. 6 мы можем точно определить актуальность компонент в работе. Компоненты *зелен**, *сбереж**, *охран**, *окруж** и *ресурс** с каждым годом возрастали, а

*эколог**, *окруж** и *иннов** теряли свою актуальность в работах. Это связано с тем, что студенты более углубленно рассматривают вопросы, связанные с зеленой химией и устойчивым развитием.

Заключение

С помощью анализа ВКР мы определили важность изменения, которые появились благодаря внедрению в образовательный процесс РХТУ им. Д.И. Менделеева дисциплин, содержащих информацию о зеленой химии и устойчивом развитии, что приводит к изменению тематики научных исследований и способствует достижению устойчивого развития в области химических технологий.

Зеленая химия является одним из способов достижения устойчивого развития в области химических технологий, поэтому наряду с основными дисциплинами студенты-химики должны изучать дисциплины, имеющие экологическую направленность. Ещё в 2015 году на Генеральной Ассамблее ООН были сформулированы 17 Целей устойчивого развития. Выполнение данной работы способствует достижению сразу нескольких Целей устойчивого развития: цель № 4 – «обеспечение всеохватного и справедливого, качественного образования и поощрение возможности обучения на протяжении всей жизни для всех», цели №6, 12, 13, 14, 15 - затрагивают качество окружающей среды и его сохранение [4, 5].

Выражаю благодарность своему научному руководителю Додоновой Анне Анатольевне за ценные советы и рекомендации при написании статьи.

Список литературы:

1. Natalia P. Tarasova, Anna A. Dodonova, Alexey A. Zanin. The Concept of Sustainable Development and the Principles of Green Chemistry as an Integral Part of the Modern Chemical Education System. Chemistry Education for a Sustainable Society Volume 2: Innovations in Undergraduate Curricula. ACS Symposium Series 2020 Vol. 1345. Chapter 12 pp. 137-145
2. Наше общее будущее // Доклад Международной комиссии по окружающей среде и развитию / Пер. с англ. - М.: Прогресс, 1989. – 59 с.
3. Информационно-библиотечному центру РХТУ им. Д.И. Менделеева [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://lib.muotr.ru/library_search/GRWORKS (дата обращения 03.04.21)
4. Смалева П. Г. Роль экологического образования в реализации концепции устойчивого развития на глобальном и региональном уровнях (на примере Томской области) – Томск: Вестник Томского государственного педагогического университета. 2009. 98 с.
5. Тарасова Н. П., Додонова А. А., Занин А. А., Гоманова С. О. Стратегическое межсекторное партнерство в сфере образования и науки в интересах устойчивого развития// Взаимодействие кафедр ЮНЕСКО с целью стратегического планирования и устойчивого развития: материалы видеоконференции, 5 июня, 2020 г./под ред. А. И. Рудского, В. В. Окрепилова. – СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2020. С.125-127

УДК 33

Роганова А.А., Хачатуров-Тавризян А.Е.

РАЗРАБОТКА СТРАТЕГИИ ИННОВАЦИОННОГО РАЗВИТИЯ НЕФТЕГАЗОВОГО КОМПЛЕКСА НА ОСНОВЕ СИСТЕМНОГО ПОДХОДА

Роганова Анна Александровна – магистрант 2-го года обучения Института химии и проблем устойчивого развития; annaroganova@bk.ru

Хачатуров-Тавризян Александр Евгеньевич – доктор экономических наук, профессор кафедры ЮНЕСКО «Зелёная химия для устойчивого развития»;

ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева», Россия, Москва, 125047, Минусская площадь, дом 9.

Статья посвящена инновационному развитию нефтегазового комплекса. Рассматривается взаимосвязь макросистем потребления, экономики, науки и культуры и путь изменения парадигмы потребления. Анализируется инновационная деятельность ведущих нефтегазовых компаний России. Рассматриваются проблемы, связанные с развитием и осуществлением научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ. Приводится значение формирования ключевых компетенций и внедрения интегрированных систем менеджмента.

Ключевые слова: инновационное развитие, нефтегазовый комплекс, НИОКР, инновационные кластеры, парадигма потребления, макросистемный анализ.

FORMATION OF THE STRATEGY OF INNOVATIVE DEVELOPMENT OF THE OIL AND GAS INDUSTRY BASED ON A SYSTEMS THEORY

Roganova A.A., Khachaturov A.E.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia.

The article is devoted to the innovation development of the oil and gas industry. The relationship of the macrosystems of culture, science, economics and consumption and the way for changing the consumerist paradigm are considered. The research and development activities of the largest oil companies in Russia are analyzed. The importance of formation of core competencies and implementation of integrated management systems are examined.

Key words: innovation development, oil and gas industry, R&D, innovative cluster, consumerist paradigm, macrosystem analysis.

Социально-экономические потребности и нужды человека можно назвать движущими силами развития рынка и экономики. Именно потребности формируют спрос, который порождает предложение, что делает их неотъемлемым элементом экономической деятельности. Неслучайно один из основоположников теории маркетинга, Филип Котлер, выделял достижение максимально возможного высокого потребления как одну из целей системы маркетинга [1].

Потребности, как и возможные и желаемые способы их удовлетворения, могут меняться. Уровни социального и технологического развития напрямую влияют на то, чего желает человек, и то, каким образом предпочитает удовлетворять свои потребности. В условиях экспоненциального роста численности населения и ограниченности природных ресурсов направление инновационного развития должно быть выбрано исходя из целей устойчивого развития, то есть с учётом необходимости изменения существующей парадигмы производства и потребления. На протяжении многих веков природные ресурсы казались человеку неограниченными, и в соответствии с этими представлениями была сформирована преобладающая парадигма производства и потребления, в основе которой лежит неограниченный рост. Сегодня же каждому человеку, как частице общества, следует осознавать, что его потребности не должны нарушать потребности других людей, в том числе тех, кто появится в будущем.

Деятельность нефтегазового комплекса удовлетворяет потребность человека в различных видах транспорта, электричестве, отоплении. Однако нефтегазовый комплекс – одна из отраслей промышленности, оказывающих наибольшее воздействие на окружающую среду. Поэтому разработка стратегии инновационного развития нефтегазового комплекса с помощью инструментов «зелёной» экономики является актуальной темой на сегодняшний день.

Добыча и использование углеводородных ресурсов традиционными способами дорого обходится человечеству, а весь жизненный цикл – добыча, транспортировка, переработка – связан с большими рисками. При освоении месторождений, переработке сырья и транспортировке образуются потери и отходы, которые приносят не только труднооценимый экологический, но и значительный экономический ущерб. Так, ежегодно вследствие нефтяных разливов в окружающую среду попадает до 1,5 млн тонн нефти, а ущерб от них составляет до 10 млрд. рублей в год. Только в Северный Ледовитый океан ежегодно выносятся до 500 000 тонн нефтепродуктов, которые попадают в реки бассейна с нефтяных месторождений [2].

Низкая степень экологизации и переработки отходов промышленности является важной проблемой современного нефтегазового комплекса России. Образование значительных количеств нефтесодержащих отходов снижает экономическую эффективность предприятий нефтегазовой отрасли за

счёт необходимости отчуждения территории предприятий под их хранилища, увеличения экологических платежей за хранение отходов и выбросы загрязняющих веществ.

Основной путь использования углеводородного сырья, которого до сих пор придерживаются многие страны – экспортно-сырьевой. При этом значительная доля добываемых углеводородов используется по топливному варианту, то есть сжигается, что сопровождается выбросами углекислого газа, оксидов азота и серы. Эти факторы не просто сдерживают развитие экономики, а в случае неблагоприятных глобальных условий, могут явиться причиной кризиса, который погубит экономики отдельных государств. Актуальными являются проблемы, связанные с низкой эффективностью нефте- и газодобычи и истощаемостью углеводородных ресурсов.

Чтобы найти решение перечисленных выше проблем, необходимо смотреть на них с точки зрения взаимодействия четырёх макросистем. Так, картину мира можно представить в виде следующих автономно развивающихся и взаимодействующих макросистем: системы потребления с её политико-институциональными структурами, производственно-экономической системы, системы науки, техники и технологии и системы культуры (с подсистемой «образование») [3, 4].

На основании комплексного подхода к проблемам возможна разработка стратегии инновационного развития нефтегазового комплекса. Стратегия развития должна быть основана на взаимодействии отраслей, а та прибыль, которую компания получает сегодня, должна вкладываться в будущее. Для этого результат экономического использования природного капитала должен направляться на уменьшение его потребления, а именно, на развитие систем науки и культуры. При этом большую роль играет экологическое просвещение.

За счёт развития науки, вложений в научно-исследовательские и опытно-конструкторские работы (НИОКР), положительные изменения произойдут в экономике и производстве. Взаимодействие со средними специальными и высшими учебными заведениями с целью подготовки высококвалифицированных кадров – значительный вклад в будущее не только отдельной компании, но и целой отрасли. С другой стороны, речь также идёт о необходимом влиянии на потребление, смене самих потребностей и способов их реализаций и индивидуальных предпочтений людей, что необходимо для изменения глобальной парадигмы потребления.

В ходе работы было выявлено, что понятия «НИОКР», «инновация», «технология» и «модернизация» в российской нефтегазовой отрасли чётко не определены; при этом в затраты на НИОКР компании включают расходы по исследованию и разработке новых месторождений, потенциальный результат которых – только наращивание объёмов добычи.

При формировании программ НИОКР для повышения эффективности как отдельных предприятий, так и экономики в целом, необходимо учитывать, что ведущую роль играет развитие ключевых компетенций. На стыке технологических укладов для формирования стратегии важно понимать, какие компетенции способны в перспективе обеспечивать конкурентоспособность и устойчивое развитие, а какие теряют актуальность. Так, инвестиции в альтернативную энергетику позволят нефтегазовым компаниям сохранить свою рентабельность в условиях вынужденного сокращения добычи углеводородного сырья.

Обзор инновационных технологий в нефтегазовом комплексе показал, что в России инновации преимущественно затрагивают сектор разведки и добычи углеводородов («up-stream»), а такие инструменты инновационного развития, как цифровизация и интеллектуализация, соответствующие шестому технологическому укладу, поддерживаются в меньшей степени [5, 6].

Такая ситуация напрямую согласуется с существующей Доктриной энергетической безопасности Российской Федерации, в которой закреплено преобладание углеводородного сырья в топливно-энергетическом комплексе. Развитие же и распространение прорывных технологий в сфере энергетики, в том числе технологий использования возобновляемых источников энергии, является трансграничным вызовом энергетической безопасности [7]. Однако по последним прогнозам, при текущем уровне развития технологий извлекаемых запасов нефти хватит на 58 лет, а рентабельных из них – на 19 лет [8].

Так как инновационное развитие возможно только за счёт выхода за пределы своей отрасли, в том числе за счёт информационного обмена, стратегия должна учитывать, что одна и та же компания может заниматься многими вещами. При этом важность и распространение приобретает формирование экономических кластеров, как территориальных, так и экстерриториальных. Проектирование и финансирование инновационных кластеров и научно-исследовательских центров в рамках системного подхода является приоритетным направлением взаимодействия с макросистемой науки, техники и технологии. Также важно отметить, что при этом химические высшие учебные заведения могут быть частью кластера, связанного с нефтегазовым комплексом.

Внедрение конвергентных технологий в структуру нефтегазового комплекса также позволит сделать огромный шаг в инновационном развитии. Совмещение разработок в области нано-, био-, информационных, когнитивных, социо-гуманитарных наук и технологий (НБИКС) – это совершенно новый подход, который позволит миру сделать огромный рывок в сторону VI технологического уклада.

Существующие системы управления на предприятиях зачастую направлены на решение сегодняшних задач без взгляда в будущее, то есть на

сохранение себя в привычных отраслях. При ином, более широком взгляде на экономические процессы, протекающие внутри компаний, следует разрабатывать стратегии по постепенному расширению и переходу в иные отрасли. Также должны внедряться системы, нацеленные на устойчивое развитие и формирование «зелёной» экономики. Интеграция систем менеджмента качества, экологического и энергетического менеджмента открывает новые горизонты в развитии компании, увеличивая её прибыль, минимизируя воздействие на окружающую среду. При этом работа во всех направлениях должна осуществляться под эгидой инновационного менеджмента и менеджмента инноваций, а в основе интегрированной системы менеджмента следует располагать риск-менеджмент, как особенно важный инструмент для управления нефтегазовой компанией.

При формировании стратегии развития следует учитывать необходимость иного подхода к конкуренции, а именно – переход от соперничества к взаимодействию, причём как между отдельными компаниями, так и между государствами. Используя одни и те же ресурсы, нужно договариваться, как именно их использовать, чтобы достигать высокой эколого-экономической эффективности. Стратегия, основанная на взаимодействии и учитывающая комплексный подход, позволит не только минимизировать и даже предотвратить будущее воздействие на окружающую среду, но и исправить последствия деятельности предыдущих лет.

В основе качественно нового пути развития нефтегазовой отрасли может быть положена химизация отрасли, благодаря которой нефть и газ станут не топливом, а сырьём для производства необходимых материалов с заданными характеристиками, в том числе композитов. В то же время, химизация промышленности позволит повысить производительность, но при этом значительно снизить потребление энергии и ресурсов, а также сократить образование отходов. При этом нефтегазовый комплекс станет благоприятной основой для развития мало- и среднетоннажной химии, что позволит выйти на путь третьей промышленной революции [9].

Таким образом, в рамках работы были выделены следующие возможности и направления инновационного развития нефтегазового комплекса:

- 1) развитие альтернативной энергетики;
- 2) государственное стимулирование формирования совместных химических компаний с передачей им передовых химических технологий;
- 3) внедрение конвергентных технологий;
- 4) создание наукоёмких кластеров с вузами, научно-исследовательскими институтами;
- 5) увеличение расходов на научно-исследовательские и опытно-конструкторские разработки;
- 6) развитие ключевых компетенций.

Успех реализации развития перечисленных выше направлений напрямую зависит от количества и

квалификации кадров, задействованных в нефтегазовом комплексе. Так, в ходе работы было выявлено, что первоочередная задача заключается в сотрудничестве нефтегазовых компаний с элементами образовательной системы для подготовки высококвалифицированных кадров, а также в развитии собственных систем обучения и развития персонала, в обеспечении непрерывной образовательной инфраструктуры и формировании коммуникативных навыков внутри организации. При этом для обеспечения инновационного развития нефтегазового комплекса предлагается внедрение в образовательный процесс инновационных решений.

Список литературы

1. Котлер, Ф. Основы маркетинга. Краткий курс. – М.: Вильямс, 2007. – 656 с.
2. Чупров В. А. Цена экологического демпинга в нефтяной отрасли // Гринпис-информ. 2020. [электронный ресурс] URL: https://greenpeace.ru/wp-content/uploads/2020/02/Eco_Dumping_MV_03.pdf (дата обращения 10.03.2020).
3. Кретов И. И. Макросистемный анализ современного маркетинга. // Директор. 2003. Вып. 3. 53 с. [электронный ресурс] URL: <http://legprom.net/print.php?id=1570> (дата обращения 12.03.2020).
4. Кретов И. И. Методология современного международного маркетинга: Автореферат. М.: ВНИИ внешнеэкономических связей при Министерстве экономики Российской Федерации, 1998. 27 с.
5. Утверждён Прогноз научно-технологического развития отраслей ТЭК России на период до 2035. Официальный сайт Министерства энергетики Российской Федерации [электронный ресурс] URL: <https://minenergo.gov.ru/node/6365> (дата обращения 20.03.2021).
6. Стартапы и инновационные разработки в нефтегазовой отрасли // Нефтегаз. 2018. 6. 24 с. [электронный ресурс] URL: <http://oilandgasforum.ru/data/files/Digest%20site/Digest%2006%20web.pdf> (дата обращения: 27.03.2021).
7. Доктрина энергетической безопасности Российской Федерации (утверждена Указом Президента Российской Федерации от 13 мая 2019 г. № 216). Официальный сайт Президента России [электронный ресурс] URL: <http://static.kremlin.ru/media/events/files/ru/rsskwUH25X6lijBy20Doj88faOQLN4.pdf> (дата обращения 15.03.2021).
8. Тихонов С. Глава Роснедр: Извлекаемых запасов нефти России хватит на 58 лет [электронный ресурс] URL: <https://rg.ru/2021/04/04/glava-rosnedr-izvlekaemyh-zapasov-nefti-rossii-hvatit-na-58-let.html> (дата обращения 04.04.2021).
9. Хачатуров А.Е., Хачатуров-Тавризян Е.А., Старостенко Л.В. Инновационное развитие химической промышленности как локомотив неиндустриализации // // Компетентность № 6. 2019. С. 12-18

**Российский химико-
технологический
университет
имени Д.И. Менделеева**



При поддержке

**Российского химического
общества им. Д. И. Менделеева**



ООО «БИНАКОР-ХТ»



Научное издание

УСПЕХИ В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Том XXXV

№ 2 (237)

Компьютерная верстка: Зверева О.В.
Текст репродуцирован с оригиналов авторов

Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева
Студенческое трансферное агентство разработок и технологий (С.Т.А.Р.Т)

Адрес университета: 125047, г. Москва,

Миусская пл., д. 9