



The Scientific Report on the Third Russian Symposium «Kinetics and Dynamics of Exchange Processes» and on the XIV Conference «Ionites-2014»

The XIV conference “Physical-Chemical Foundation of Ion-Exchange and Chromatographical Processes” and the Third Russian Symposium “Kinetics and Dynamics of exchange processes” with international participation were held in October, 9-14, 2014 in Voronezh State University. The organizers of the conference and symposium: Russian Academy of Science; Scientific Council on Physical Chemistry; Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry named after A.N. Frumkin; Voronezh State University; Scientific and Educational Center “Ionites and Membranes”; Russian Foundation for Basic Research. Co-chairs of the Conference and the Symposium: Prof. V. F. Selemenev, Prof. A. K., Prof. R. H. Khamizov, Acad. A.Yu. Tsvadze.

143 researchers from Moscow, St. Petersburg, Ekaterinburg, Samara, Perm, Saratov, Belgorod, Voronezh, Oldenburg (Germany), Dnepropetrovsk (Ukraine) took part in the conference and in the symposium. Scientific program included 16 plenary lectures, 44 oral and 118 poster presentations. 18 lectures and 38 posters have been presented by young researches.

The presentations were devoted to the basic aspects of ion-exchange and chromatography: physical-chemical foundation of ion-exchange and chromatographical processes; history and development of ion-exchange in Russia; theoretical description of sorption equilibrium, kinetics and dynamics; intermolecular interactions and the peculiarities of substances retention; separation of mixtures using ion-exchange resins; progress in membrane separation methods; sensors based on polymer materials; synthesis and properties of sorbents for ion-exchange and chromatography; computer simulation and optimization of separation processes; chemometrics aspects in ion-exchange and sorption studies; role of ion-exchange materials in the solution of ecological, biochemical and medical problems; new trends in chromato-mass-spectroscopy equipment etc.

Научный отчет о проведении Третьего Всероссийского симпозиума «Кинетика и динамика обменных процессов» и конференции «Физико-химические основы ионообменных и хроматографических процессов (ИОНИТЫ-2014)»

С 9 по 14 октября 2014 г. на базе Воронежского государственного университета проведены XIV конференция «Физико-химические основы ионообменных и хроматографических процессов (ИОНИТЫ–2014)» и Третий Всероссийский симпозиум «Кинетика и динамика обменных процессов» с международным участием. Организаторами конференции и симпозиума выступали Российская академия наук; Научный Совет по физической химии; Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина; Воронежский государственный университет; Научно-образовательный центр ВГУ «Иониты и мембраны»; Российский фонд фундаментальных исследований. Сопредседатели симпозиума и конференции являлись проф. В.Ф. Селеменев, проф. А.К. Буряк, проф. Р.Х. Хамизов и акад. А.Ю. Цивадзе

В работе конференции и симпозиума приняли участие 143 исследователя из Москвы, Санкт-Петербурга, Екатеринбургa, Самары, Перми, Саратова, Белгорода,

Воронежа, Ольденбурга (Германия), Днепропетровска (Украина). Научная программа включала 16 пленарных докладов, 44 устных и 118 стендовых. Из них 18 устных и 38 стендовых докладов были представлены молодыми учеными.

В докладах конференции освещены основные аспекты ионного обмена и хроматографии: физико-химические основы ионообменных и хроматографических процессов; история открытия, становления и развития обменных процессов в России; теоретические представления о равновесии, кинетике и динамике сорбции; механизм межмолекулярных взаимодействий и закономерности удерживания веществ; разделение смесей веществ с помощью ионообменников; развитие мембранных методов разделения; сенсоры на основе полимеров; синтез и исследование свойств полимерных сорбентов и носителей для ионного обмена и хроматографии; компьютерное моделирование и оптимизация процессов разделения; хемометрические аспекты ионообменных процессов; роль ионообменных процессов в решении экологических, биологических и медицинских проблем; новые разработки по хромато-масс-спектрометрическому оборудованию.

В докладе Р.Х. Хамизова (ГЕОХИ РАН) «Сорбционные материалы и новые технологии переработки природных и техногенных вод», сделанном на открытии конференции, был представлен обобщенный анализ промышленного производства в России полимерных и неорганических сорбционных материалов, главным образом, ионообменных смол. В докладе показаны современные тенденции в производстве ионитов и молекулярных сорбентов крупнейшими западными компаниями, а именно:

- производство монофазных сильнокислотных и сильноосновных ионообменных смол, что позволило радикальным образом повысить эффективность технологий водоподготовки в энергетике за счет перехода к противоточной регенерации;

- создание и производство новых модификаций хелатообразующих смол, в основном, для очистки сточных вод от тяжелых металлов и переработки технологических растворов;

- создание и производство «сверхселективных» органоминеральных наноконструкций для решения специальных экологических и технологических задач.

В презентации были приведены многочисленные примеры интересных технологических решений на базе выпускаемых у нас сорбционных материалов, однако было подчеркнуто, что без возрождения промышленного производства ионитов в России не может быть обеспечена технологическая безопасность страны.

В докладе В.А. Даванкова с сотрудниками (ИНЭОС РАН), посвященном механизмам удерживания соединений на сверхсшитых полистирольных сорбентах, приведены примеры сорбции (концентрирования) полярных соединений из водных сред, полярных и ароматических соединений из неполярных сред, селективная сорбция ионов переходных металлов, а также сорбция малых молекул из их смеси с полимерами. Особый интерес представляет препаративная ситовая хроматография минеральных ионов. Комплексная детоксикация сверхсшитыми гемосорбентами, сочетающая сорбционные и ситовые свойства материалов, активно внедряются в клиническую практику.

Весьма интересный доклад «Различные стационарные состояния при набухании сшитых полиэлектролитов и гидрофильных гелей», сделанный В. А. Ивановым, меняет наши представления о достижении простых ионообменных равновесий на полимерных сорбентах. Оказывается, при обменных процессах в бинарных системах с участием некоторых многозарядных ионов, например, с участием катионов А и Б, в зависимости от направления процесса перехода к одной

и той же смешанной форме со стороны ионной формы А или В, при которых по-разному изменяется объем набухшего полимера, возникают стационарные состояния, которые не совпадают друг с другом. В докладе была поставлена проблема корректного описания механизмов соответствующих процессов. Большой интерес вызвали представленные в докладе экспериментальные данные по двухтемпературным циклическим процессам набухания – сжатия ионитов с концентрированием и разбавлением контактирующих растворов.

Известный теоретик А.М. Долгоносов сделал на конференции два доклада, посвященных вопросам теории и моделирования хроматографических процессов. Доклад «Достижения и перспективы математического моделирования хроматографического анализа» продемонстрировал, что понимание современных проблем химического анализа делает актуальным математическое описание хроматографии. От качества, точности, детальности и фундаментальности математической модели, описывающей хроматографический процесс, зависят универсальность, предсказательная сила, экономическая эффективность и научная ценность программного продукта. В докладе были подробно обсуждены проблемы описания селективности разделения, продемонстрированы результаты многолетней работы, проводящейся в ГЕОХИ РАН, по созданию математических моделей и компьютерных программ для решения задач методом высокоэффективной колоночной хроматографии.

В докладе «Стерические эффекты адсорбции молекул на хроматографических фазах» был представлен развитый А.М. Долгоносовым и сотрудниками метод априорного расчета константы Генри, использующий связи между структурными характеристиками молекул и их энергетическими, геометрическими и топологическими свойствами, проявляющимися в адсорбции. Отличительной особенностью подхода, существенно уточняющего традиционные подходы на базе атом-атомных потенциалов, является применение теории обобщенных зарядов, дающей неэмпирическое описание межмолекулярных взаимодействий.

Доклад А.К. Буряка (ИФХЭ РАН) был посвящен хромато-спектральным методам анализа. Проведено сравнение масс-спектрометрических и классических спектральных методов. Показано, что даже наиболее мощный детектор «диодная матрица» менее информативен, чем двумерная масс-спектрометрия.

В докладе Н.А. Тихонова «Особенности кинетики трехкомпонентного ионного обмена в зернах сорбента» представлены результаты, полученные при аналитическом решении для зависимостей от времени напряженности радиального электрического поля и концентраций компонентов в зерне сорбента. Кроме того, показана модель динамики для слоя с учетом нелинейных эффектов в кинетике. На основании этой модели были интерпретированы эффекты появления волн на выходной кривой одного из компонентов в многокомпонентном ионном обмене. В докладе были проанализированы различные возможные причины появления нелинейных эффектов в кинетике обмена и показано, что наличие электрического поля не является обязательным условием при рассмотрении гетерофазной модели для гранулы сорбента. В частности, с использованием локально-детерминированной модели, но в представлении сорбента в виде двух фаз, по одной из которых происходит перенос компонента, а в другой - его накопление, были получены результаты численных решений для концентрационных волн в зерне ионообменника и немонотонных кинетических кривых.

Доклады А.Н. Крачак и А.Н. Груздевой из ГЕОХИ РАН были посвящены различным аспектам изучения и практического использования явления удерживания кислоты на сильноосновных анионитах. Первый из докладов был посвящен

изучению механизма удерживания, второй – возможности тонкого разделения компонентов при переработке сложных высококонцентрированных растворов.

В докладе Я.И.Яшина (ЗАО «Интерлаб») приведены экспериментальные данные по влиянию структуры молекул полифенолов (более 30) на чувствительность амперометрического детектора. Эти данные могут быть использованы для предсказания связи структуры природных и синтетических антиоксидантов с их антиоксидантной активностью. Синтетические антиоксиданты широко применяются в химической и нефтехимической промышленности, их добавляют в пластики, резины, лаки, краски, моторные масла и топлива. Во втором докладе автор показал, что можно выбрать конструкцию ячейки амперометрического детектора, который может устойчиво работать без электрода сравнения.

В работе конференции и симпозиума с пленарными, устными докладами приняли участие сотрудники ВГУ. В пленарном докладе заслуженного деятеля науки, д.х.н., профессора Шапошника В.А. «Химические связи при ионном обмене» предлагались новые представления о природе химических связей в ионообменнике, согласно которым с увеличением заряда противоиона увеличивается соотношение между ионной и водородной связью.

Энергонасыщенным нанокompозитным материалам металл-ионообменник на конференции был посвящен пленарный доклад д.х.н., профессора Кравченко Т.А. В докладе были рассмотрены вопросы целенаправленного синтеза, агрегативной устойчивости и способности нанокompозитов металл-ионообменник к редокс-сорбции, каталитическим и электрокаталитическим процессам.

На конференции ряд сообщений, посвященных потенциометрическим мультисенсорным системам с ПД-сенсорами, был выполнен сотрудниками научной группы д.х.н., профессора Бобрешовой О.В. В устном докладе докторанта, к.х.н. Паршиной А.В. были представлены сведения о разработанных мультисенсорных системах на основе модифицированных мембран для совместного определения органических и неорганических ионов в водных растворах. В докладах аспиранта Титовой Т.С. и магистра Денисовой Т.С. уделено внимание обеспечению одновременного измерения и обработки откликов перекрестно чувствительных сенсоров в полиионных растворах с целью снижения накопления ошибок при градуировке и определении.

В устном сообщении к.х.н., доцента Хохловой О.Н. рассматривался вопрос формирования ионно-молекулярных структур в растворе и сорбенте при сверхэквивалентной сорбции аминокислот ионообменниками. Методами квантовой химии исследована гидратация и ассоциация ароматических аминокислот в водном растворе, а также установлена структура ионно-молекулярного ассоциата в фазе сульфокатионообменника.

Доцент кафедры аналитической химии ВГУ, к.х.н. Карпов С.И. в устном докладе привел анализ кинетических и равновесных параметров сорбции физиологически активных веществ различной природы на высокоупорядоченных неорганических кремнийсодержащих материалах. Было показано, что варьированием природы модификатора исходной кремнийсодержащей матрицы можно добиться разделения близких по природе и свойствам физиологически активных веществ.

Особенности динамики сорбции ванилина из жидких сред с применением низкоосновных анионообменников рассматривались в докладе доцента, к.х.н. Воронюк И.В. Установлено, что среди исследованных анионообменных смол более эффективной для сорбционного извлечения ванилина из водных растворов в динамических условиях является Purolite A 830.

В докладе аспиранта Васильевой С.Ю. (научный руководитель – д.х.н., профессор Котова Д.Л.) уделено внимание поиску новых перспективных сорбентов для выделения и концентрирования биологически активных веществ, в частности витаминов, из продуктов растительного происхождения. Установлена возможность выделения α -токоферола (витамин Е) из растительных масел сорбционным методом с применением клиноптилолитового туфа.

Доклады сотрудников научной группы д.х.н., профессора Васильевой В.И. были посвящены изучению и развитию мембранных технологий (электродиализа и диализа). В докладе Акберовой Э.М. была дана оценка термодинамической устойчивости ионообменных мембран, влияния изменений структуры в результате термического воздействия на эффективность процесса электродиализа. Возможности применения нейтрализационного диализа с профилированными ионообменными мембранами для деминерализации растворов смеси аминокислоты с минеральными солями были рассмотрены в сообщении Голевой Е.А.

Сравнительный анализ электромембранной деминерализации растворов аминокислот, представленный в сообщении аспиранта Хариной А.Ю. (научный руководитель – к.х.н., доцент Елисеевой Т.В.), показал, что при электродиализе растворов аминокислот в смеси с сильными электролитами учет особенностей поведения минеральных компонентов может позволить оптимизировать процесс очистки органических амфолитов в зависимости от требований к целевому продукту.

Несколько докладов, представленных сотрудниками ИФХЭ РАН (В.В. Милютин, В.М. Гелис, Н.А. Некрасова, О.В. Харитонов, Л.А. Фирсова, Е.А. Козлитин), были посвящены использованию сорбционных процессов в прикладной радиохимии. Главные сферы применения сорбционных процессов: добыча и переработка урановых руд, радиохимическая переработка отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) и утилизация жидких радиоактивных отходов (ЖРО).

При переработке облученного ядерного топлива (ОЯТ) сорбционная технология используется для выделения ^{137}Cs на сорбенте ФС-10 (ферроцианид меди-калия). Технология внедрена на ФГУП ПО «Маяк» и с 1985 г используется в промышленном масштабе для получения препаратов цезия-137 высокой степени чистоты и для очистки высокоактивных отходов.

Для выделения и разделения редкоземельных (РЗЭ) и транслютрониевых (ТПЭ) радиоактивных элементов был показан метод вытеснительной комплексообразующей хроматографии (ВКХ). В качестве сорбентов используют сульфокатионит КУ-2 \times 8 или его зарубежные аналоги. Разработанные технологии используются на ФГУП ПО «Маяк» для получения радиопрепаратов ^{147}Pm , ^{151}Sm , ^{144}Ce , ^{241}Am , ^{244}Cm и др. высокой степени чистоты.

При переработке жидких радиоактивных отходов (ЖРО) сорбционные методы используются, в основном, для очистки растворов от долгоживущих радионуклидов цезия и стронция. К сорбентам, проявляющим повышенную селективность к ионам цезия относятся: ферроцианиды переходных металлов (меди, никеля, кобальта и др.); синтетические и природные цеолиты; фосфаты титана и циркония; резорцинформальдегидные смолы; силикотитанаты щелочных металлов. К сорбентам селективным к ионам стронция относятся: оксиды марганца(III, IV); титанаты натрия и калия; силикаты бария; силикотитанаты щелочных металлов.

Технологии с использованием вышеперечисленных сорбентов используются в настоящее время для переработки ЖРО атомного флота, вод спецканализации, вод бассейнов выдержки отработанных тепловыделяющих сборок, вод промышленных водоемов ПО «Маяк», ЖРО спецкомбинатов «Радон» и АЭС. Результаты

промышленной эксплуатации сорбционных технологий показали их высокую эффективность для очистки ЖРО различного химического и радионуклидного состава.

Среди разработчиков и производителей ионообменных материалов в России можно выделить две компании: ЗАО «Аксион - РДМ», г. Пермь (торговая марка «Аксион») и производственное объединение «ТОКЕМ» (бывш. НПО «Карболит»), г. Кемерово (торговая марка «ТОКЕМ»).

Сорбционные технологии с использованием ионитов российского производства, позволяют успешно решать ряд сложных задач современной радиохимической промышленности.

В докладе А.И. Калиничева (ИФХЭ РАН) представлены результаты математического моделирования многокомпонентной ($i=1,2,\dots$) кинетики диффузионного неселективного массопереноса двух входящих (${}_2V, {}_3C$) и одного выходящего (${}_1A$) i -компонента в ионо-обменных матрицах (r -зерно, ro -волокно) в случае обмена: $R_1A / ({}_2V + {}_3C)$ трех i -компонентов ($i=1,2,3$), которое осуществлено на основе компьютерных расчетов X_i -концентрационных профилей (волн).

В результате компьютерных модельных расчетов получен и представлен в докладе новый вытеснительный эффект для входящих в матрицу ${}_2V, {}_3C$ -волн (профилей) - как результат взаимодействия этих концентрационных ${}_2V, {}_3C$ -волн с результирующим немонотонным поведением интегральной кинетической $F_B(T)$ -кривой для ${}_2V$ -компонента в случаях различных значений D_i - диффузивностей i -компонентов. В кинетическом процессе массопереноса для двух входящих в матрицу ионита концентрационных ${}_2V, {}_3C$ -волн имеет место вытеснение быстрой ${}_2V$ -волны медленной концентрационной ${}_3C$ -волной ($D_B > D_C$) с накоплением B -концентрации в ${}_2V$ -волне второго ($i=2$) компонента. Эффект вытеснения ${}_2V$ -волны локализован в головной части вытесняющей концентрационной ${}_3C$ -волны (вблизи $X_{3C} \sim 0$) за счет «выдавливания» быстрой ${}_2V$ -волны наступающим передним фронтом медленной концентрационной ${}_3C$ -волны. Этот новый вытеснительный эффект был наглядно представлен в устном докладе, и в презентации расчетными авторскими компьютерными анимациями (легко воспринимаемыми аудиторией). для упомянутых распространяющихся трех концентрационных ${}_1A, {}_2V, {}_3C$, -волн.

В докладе д.х.н. Л.А. Онучак с соавторами (СамГУ) были представлены экспериментальные результаты по сорбционным и селективным свойствам углеродных и кремнеземных сорбентов, модифицированных моно-, бислоями и фазовыми пленками супрамолекулярного жидкого кристалла 4-(3-гидроксипропилокси)-4'-формилазобензола (ГПОФАБ) и β -циклодекстрина (β -ЦД). Представленные результаты, несомненно, обладают научной новизной, так как показывают, что включение в архитектуру моно-, бислоя и смешанного мультислоя супрамолекулярного ЖК и β -ЦД (хирального селектора) приводит к сочетанию высокой упорядоченности (за счет ассоциации) и возможности молекулярного распознавания вследствие супрамолекулярной самосборки. Разработанные сорбенты обладают как структурной селективностью, так и энантиоселективностью по отношению к оптическим изомерам неполярных соединений в широкой области температур. Работа поддержана грантом РФФИ (проект № 13-03-01197).

С интересными и содержательными докладами выступили молодые участники конференции. В докладе аспирантки Потолицыной Веры (СПбГУ) «Расширение аналитических возможностей капиллярного электрофореза и капиллярной электрохроматографии для определения микроконцентраций белков в биологических жидкостях» (первая премия) предложен общий подход к динамической модификации стенок кварцевого капилляра при введении

сверхразветвленных полимеров с мальтозной оболочкой в состав рабочего буфера, обеспечившее при электрофоретическом групповом анализе белков эффективность $\sim 4 \times 10^5$ т.т./м. Установлено, что сочетание электростэкинга и стэкинга с большим объемом вводимого образца обеспечивает концентрирование белков с факторами концентрирования ~ 1000 . Предложена технология подготовки PLOT-колонок на основе метакрилатных полимеров и мальтозилированных сверхразветвленных полиэтилениминов, характеризующихся высокой воспроизводимостью покрытия и параметров миграции аналитов. Все это позволило предложить автору данного сообщения схему электрофоретического определения альбумина в биологических жидкостях (сыворотка крови и моча) с электрокинетическим вводом на уровне диагностически-значимых концентраций.

Сообщение аспирантки первого курса Дерябиной Екатерины (СПбГУ) «Ионные жидкости – модификаторы электрофоретических систем» было посвящено влиянию ионных жидкостей на основе имидазола с алкильными радикалами C12 и C16 в качестве модификаторов электрофоретических систем и экстрагентов при определении гидрофильных (катехоламинов, аминокислот, катехинов) и гидрофобных (стероидных гормонов) соединений в биологических жидкостях, что способствовало селективному извлечению аналитов, сокращению общего времени анализа и повышению эффективности. Выявлена на примере аминокислот их роль в образовании псевдостационарной фазы, в модифицировании стенок кварцевого капилляра с обращением электроосмотического потока, в возможности одновременного определения поглощающих (прямое детектирование) и не поглощающих в УФ-области (косвенное детектирование) аналитов; предложены варианты on-line концентрирования с участием ионных жидкостей для снижения пределов обнаружения определяемых соединений.

Порадовала своим сообщением и самая юная участница конференции студентка Дзёма Дарья (СПбГУ) «Синтез и газохроматографическая оценка аналитических возможностей новых фторсодержащих полимеров», насыщенным значимыми результатами. Ею осуществлен синтез и фракционирование сополимеров этилена и перфторированного аллилового эфира (перфтор(3,6-диокса-4-метил-8-нонен)сульфонилфторида) — аналогов нафтона. Для дальнейшего использования полученных сополимеров в хроматографии и капиллярном электрофорезе предложены новые и простые способы перевода фторсульфонильных групп в сульфонатные с участием тетраэтоксисилана и триэтиламина и в сульфамидные по реакции полимера с избытком предварительно высушенного газообразного аммиака. Для оценки относительной полярности и выявления возможных типов взаимодействий синтезированного фторированного полимера с аналитами различной природы методом газовой хроматографии определены индексы удерживания реперных соединений и константы Мак-Рейнольдса. Ориентируясь на газохроматографические данные, выбраны аналиты для последующих экспериментов в жидкостной хроматографии и капиллярном электрофорезе. Высказано предположение и экспериментально подтверждено, что ионогенный фторполимер может, как модифицировать стенки кварцевого капилляра, влияя на электроосмотический поток и миграционные характеристики определяемых соединений, так и взаимодействовать с гидрофобными аналитами в качестве псевдостационарной фазы, обеспечивая возможность их детектирования.

Доклад Шафигулиной А.Д. (ИФХЭ РАН) был посвящен изучению возможностей применения метода хроматографии и масс-спектрометрии для исследования обратно-мицеллярных растворов наночастиц серебра. С помощью метода жидкостной хроматографии автору удалось разделить наночастицы серебра в

зависимости от их физико-химических свойств, а также сделать предположение о механизме адсорбции этих наночастиц на сорбенте ProntoSIL 120-5 C18 AQ. Для наночастиц также были подобраны условия «мягкой» ионизации, в которых удалось зафиксировать кластеры серебра с числом атомов до 21. Доклад был удостоен первого места в конкурсе, проводимом на конференции в рамках школы молодых ученых.

Доклад Гончаровой И.С. (ИФХЭ РАН) был посвящен исследованию кластеров галогенидов серебра, меди, свинца на модельных поверхностях и поверхностях конструкционных материалов методом масс-спектрометрии с поверхностно-активированной лазерной десорбцией/ионизацией (ПАЛДИ). Доклад был удостоен второго места в конкурсе молодых ученых.

Доклад аспирантки Митиной Е.Г. с соавторами (СамГУ) был посвящен изучению гетерогенных каталитических реакций гидрирования непредельных и ароматических углеводородов на катализаторах, содержащих наночастицы меди. Исследование кинетики реакции было проведено на оригинальной установке в статическом режиме; изменение концентрации исходных веществ в ходе реакции контролировали с помощью газовой хроматографии. Результаты проведенных исследований показали значительное снижение энергии активации реакции гидрирования гексина-1. Доклад был удостоен второго места в конкурсе, проводимом на конференции школе молодых ученых. Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №13-03-00465\14

В докладе к.х.н. Р.В. Шафигулина с соавторами (СамГУ) были рассмотрены термодинамические особенности сорбции биологически активных бензимидазолов из водно-ацетонитрильных растворов на октадецилсиликагеле. Представлены значения термодинамических характеристик сорбции и изучены полипараметрические корреляционные модели «удерживание - свойство». Рассмотрены компенсационные эффекты между мольными энтальпиями и энтропиями процесса перехода бензимидазолов из водно-ацетонитрильных элюентов на поверхность октадецилсиликагеля. Установлена схожесть механизмов сорбции изученных бензимидазолов на октадецилсиликагеле из водно-ацетонитрильных растворов. Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках государственного задания по гранту № 4.110.2014/К.

В докладе к.х.н. Кудряшова С.Ю. (СамГУ) рассмотрено применение метода Монте-Карло для расчета констант Генри и термодинамических характеристик адсорбции этана на графите и толуола на графите и графите с преадисорбированным монослоем коронена в области Генри. Расчетный алгоритм был адаптирован для случая адсорбции многоатомных молекул с заторможенным (этан) и практически свободным внутренним вращением (толуол). Моделирование проводили в так называемом «гиббсовском» ансамбле (Gibbs Ensemble Monte Carlo, GEMC). Для расчета потенциальной энергии молекулы адсорбата использовали атом-атомное приближение. Суммирование атом-атомных потенциалов в форме Леннарда-Джонса (6,12) по атомам углерода кристаллической решетки графита проводили в приближении Крауэлла. При наличии на поверхности адсорбента монослоя коронена считали, что атомы углерода и водорода модификатора также равномерно распределены в плоскости монослоя (приближение изотропного монослоя). Расчет констант Генри адсорбции для обоих адсорбатов проводили при нескольких температурах, определяли дифференциальную молярную теплоту адсорбции изменение стандартной молярной энтропии, а также изменение теплоемкости при

адсорбции. Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках государственного задания по гранту № 4.110.2014/К.

В рамках мероприятия работала конкурсная комиссия по оценке устных и стендовых докладов молодых ученых. За лучшие доклады молодым ученым были подарены книги.

На заключительном заседании симпозиума были подведены итоги и принято следующее решение:

1. Очередной Четвертый симпозиум "Кинетика и динамика обменных процессов" провести в 2015 году, а конференцию «Иониты-2016» - в 2016 году.

2. Ввести в практику обязательное проведение в рамках симпозиумов и конференций школ молодых ученых и организацию дискуссий в виде круглого стола (дискуссионного форума) «Встреча поколений», «У меня есть проблема (идея)» и т.д.

3. Материалы докладов конференции и симпозиума рекомендовать к публикации в журнале «Сорбционные и хроматографические процессы».

4. Отражать в журналах «Сорбционные и хроматографические процессы» и «Аналитика» новейшие достижения в области обменных процессов, отразить персоналии ведущих хроматографистов России; написать книгу об истории хроматографии и отдельную главу «Хроматография в Воронежском университете»; подготовить к изданию в ВГУ (2017 г.) коллективную монографию «Наследие М.С. Цвета в трудах воронежских хроматографистов»; выпускать по два тематических номера в год журнала «Сорбционные и хроматографические процессы» по актуальным проблемам хроматографии и ионного обмена.

5. Участники конференции поддержали предложение ректора ВГУ Д.А. Ендовицкого о создании памятной галереи выдающимся ученым на территории ВГУ, и первым будет сооружен памятник выдающемуся русскому биохимику, первооткрывателю хроматографии Михаилу Семеновичу Цвету.

6. Учитывая формальные сложности при защите кандидатских и докторских диссертаций, выполняемых по хроматографии, продолжить работу по восстановлению специальности «Хроматография и хроматографические приборы»

Сопредседатель симпозиума и конференции
д.х.н., профессор

А.К. Буряк

Сопредседатель оргкомитета
к.х.н.

Л.Н. Коломиец