

Школа Инженерная школа природных ресурсов (ИШПР)

Направление подготовки (специальность) 18.04.01 Химическая технология

Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Исследование экстракции родамина в объеме полиметакрилатной матрицы

УДК: 547.633.6.056:667.283.8

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ11	Тань Минь		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Гавриленко Михаил Алексеевич	д.х.н., доцент		01.06.2023

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП	Креницына Зоя Васильевна	к.т.н., доцент		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Сечин Андрей Александрович	к.т.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Гавриленко Михаил Алексеевич	д.х.н., доцент		

Перечень компетенций ООП

Код компетенции СУОС	Наименование компетенции СУОС
Универсальные компетенции	
УК(У)-1	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действия
УК(У)-2	Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла
УК(У)-3	Способен организовывать и руководить работой команды, выработывая командную стратегию для достижения поставленной цели
УК(У)-4	Способен применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном(ых) языке(ах), для академического и профессионального взаимодействия
УК(У)-5	Способен анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия
УК(У)-6	Способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки
Общепрофессиональные компетенции	
ОПК(У)-1	Способен организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок
ОПК(У)-2	Способен использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты
ОПК(У)-3	Способен разрабатывать нормы выработки, технологические нормативы на расход материалов, заготовок, топлива и электроэнергии, контролировать параметры технологического процесса, выбирать оборудование и технологическую оснастку
ОПК(У)-4	Способен находить оптимальные решения при создании продукции с учетом требований качества, надежности и стоимости, а также сроков исполнения, безопасности жизнедеятельности и экологической чистоты
Профессиональные компетенции	
ПК(У)-1	Способен проводить научно-исследовательские и опытно-конструкторские разработки при исследовании самостоятельных тем
ПК(У)-2	Способен проводить поиск, обработку, анализ и систематизацию научно-технической информации по теме исследования, выбирать методики и средства решения задачи
ПК(У)-3	Способен осуществлять технологическое и методическое сопровождение в области синтеза и переработки полимерных материалов
ПК(У)-4	Способен проектировать и организовывать учебный процесс по образовательным программам с использованием современных образовательных технологий

Школа Инженерная школа природных ресурсов (ИШПР)

Направление подготовки (специальность) 18.04.01 Химическая технология

Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП
 _____ Гавриленко М. А.
 (Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерской диссертации

(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ11	Тань Минь

Тема работы:

Исследование экстракции родамина в объеме полиметакрилатной матрицы	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	

Срок сдачи студентом выполненной работы:	04 июня 2023 г.
--	-----------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе</p> <p><i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p>	<p>Объект исследования – полиметилметакрилатная матрица, краситель родамина, бриллиантового зеленого, кристаллического фиолетового.</p>
---	---

<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов <i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<p>Применение ксантовых красителей в химической промышленности и получение прозрачного полимера полиметилметакрилата Исследовать изотермические кривые сорбции различных красителей на матрице ПММ Результаты исследования и обсуждение Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение Социальная ответственность Заключение</p>
--	---

<p>Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>	<p>Презентация</p>
--	--------------------

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы
(с указанием разделов)

Раздел	Консультант
<p>Применение ксантовых красителей в химической промышленности и получение прозрачного полимера полиметилметакрилата Изотермические кривые сорбции красителей на матрице ПММ Результаты исследования и обсуждение</p>	<p>Гавриленко Михаил Алексеевич</p>
<p>Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение</p>	<p>Криницына Зоя Васильевна</p>
<p>Социальная ответственность</p>	<p>Сечин Андрей Александрович</p>
<p>Иностранный язык</p>	<p>Сыскина Анна Александровна</p>

Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:

<p>На русском: Исследование экстракции родамина в объеме полиметакрилатной матрицы</p>
<p>На английском: Rhodamine extraction research into a polymethacrylate matrix</p>

<p>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</p>	
--	--

Задание выдал руководитель / консультант (при наличии):

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
<p>Профессор</p>	<p>Гавриленко Михаил Алексеевич</p>	<p>д.х.н., доцент</p>		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
<p>2ДМ11</p>	<p>Тань Минь</p>		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ11	Тань Минь

Школа	Инженерная школа природных ресурсов	Отделение школы (НОЦ)	ОХИ
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	18.04.01 Химическая технология

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

Исследование формирования флуориметрического сигнала в объеме полиметилметакрилатной матрицы	Работа с научной литературой, представленной в российских и иностранных научных публикациях, аналитических материалах
--	---

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив разработки проекта с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Проведение предпроектного анализа. Определение целевого рынка и проведение его сегментирования. Выполнение SWOT-анализа проекта
2. Планирование и формирование бюджета разработки	Определение целей и ожиданий, требований проекта. Определение бюджета научного исследования
3. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности разработки	Проведение оценки экономической эффективности, ресурсоэффективности и сравнительной эффективности различных вариантов исполнения

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Матрица SWOT
3. График проведения и бюджет НИИ
4. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИИ

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
--	--

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП	Креницына Зоя Васильевна	к.т.н., доцент		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ11	Тань Минь		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа 2ДМ11		ФИО Тань Минь	
Школа	Инженерная школа природных ресурсов	Отделение (НОЦ)	ОХИ
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	18.04.01 Химическая технология

Тема ВКР:

Исследование экстракции родамина в объеме полиметакрилатной матрицы	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
<p>Введение</p> <ul style="list-style-type: none"> – Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика) и области его применения. – Описание рабочей зоны (рабочего места) при разработке проектного решения/при эксплуатации 	<p><i>Объект исследования:</i> аналитический сигнал после адсорбции красителей полиметилметакрилатной матрицей.</p> <p><i>Область применения:</i> экология, нефтяное обследование.</p> <p><i>Рабочая зона:</i> лабораторное помещение ОХИ НИ ТПУ.</p> <p><i>Размеры помещения климатическая зона*):</i> для работы в полевых условиях.</p> <p><i>Количество и наименование оборудования рабочей зоны:</i> полиметилметакрилатной матрицы, красители.</p> <p><i>Рабочие процессы, связанные с объектом исследования, осуществляющиеся в рабочей зоне:</i> спектрофотометрический и визуальный сигналы красителя, адсорбированного в матрице, для дальнейшего сенсорного определения диапазона определяемых веществ</p>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<p>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности при эксплуатации: специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства;</p> <ul style="list-style-type: none"> – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<p>ГОСТ 4650-2014 (ISO 62:2008) Пластмассы. Методы определения водопоглощения (с Поправками) ГОСТ 8.229-2013 Государственная система обеспечения единства измерений (ГСИ). Спектрофотометры инфракрасные. Методика поверки (с Поправкой) ПНД Ф 12.13.1-03 Методические рекомендации. Техника безопасности при работе в аналитических лабораториях (общие положения)</p>
<p>2. Производственная безопасность при эксплуатации: Анализ выявленных вредных и опасных производственных факторов</p> <ul style="list-style-type: none"> – Расчет уровня опасного или вредного производственного фактора 	<p>1.1. Выявление вредных факторов в химической лаборатории: - недостаточная освещенность рабочей зоны; - действие вредных факторов на организм;</p> <p>1.2. Выявление опасных факторов при разработке и эксплуатации научного исследования: - несоответствующие нормативам параметры микроклимата.</p> <p>Требуемые средства коллективной и индивидуальной защиты от выявленных факторов: средства коллективной защиты - работа под вытяжным шкафом; индивидуальные средства защиты - перчатки, халат, респиратор;</p>

	Расчет: расчет шума от работы оборудования
3. Экологическая безопасность <u>при эксплуатации:</u>	<p>Воздействие на литосферу: утилизация органических и неорганических отходов;</p> <p>Воздействие на гидросферу: химическое загрязнение водостоков в результате удаления неорганических и органических отходов в канализационную сеть;</p> <p>Воздействие на атмосферу: влияние вредных веществ, которые выделяются или используются во время эксперимента через вентиляционную систему.</p>
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях <u>при эксплуатации:</u>	<p>Возможные ЧС: При разработке и эксплуатации проектируемого решения:</p> <ul style="list-style-type: none"> - возгорание оборудования; - выход оборудования из строя; - ухудшение состояния исследователя. <p>Наиболее типичная ЧС:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Использование огнетушителя, песка, асбестового одеяла в случае пожара; 2. В случае стихийных бедствий отключение воды и электричества.
Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Сечин Андрей Александрович	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ11	Тань Минь		

Реферат

Объем выпускной квалификационной работы составляет 121 страниц, в том числе 21 рисунков, 27 таблиц, 56 источников информации и 2 приложения.

Ключевые слова: полиметакрилатная матрица (ПММ), твердофазная экстракция, родамин, бриллиантовый зеленый, кристаллический фиолетовый, изотермическая сорбция, кинетика сорбции.

В научно-исследовательской работе изучены сорбционная способность прозрачной полимерной матрицы ПММ, использование метода твердофазной экстракции с использованием матрицы ПММ для сорбции ксантеновых и трифенилметановых красителей и влияние кислотности среды на сорбированные красители. В качестве метода регистрации сигнала использована спектрофотометрия с в диапазоне 0,01-10 мг/л.

Объектами являются прозрачная полимерная матрица ПММ, ксантеновый краситель родамин 6 Ж и трифенилметановые красители бриллиантовый зеленый и кристаллический фиолетовый.

Цель исследования: Закономерности твердофазной экстракции ксантенового красителя родамин 6 Ж в сравнении с трифенилметановыми красителями на матрице ПММ.

Задачи исследования:

- критическое сравнение литературных данных для выбора способа иммобилизации ксантеновых красителей и трифенилметановых красителей в объем полимерных сорбентов;
- выявление закономерностей твердофазной экстракции родаминового, бриллиантового зеленого и кристаллического фиолетового красителей в зависимости от pH среды;
- исследование кинетики сорбции красителей в объем матрицы ПММ и разграничение стадий сорбции на основании анализа изотермических кривых сорбции.

Область применения: внелабораторное определение красителей в диапазоне 0,01-10 мг/л.

Определения, названия, сокращения, нормативные ссылки

В данной работе используются следующие термины и их соответствующие определения:

УФ-спектрофотометры: Аналитический прибор, использующий для проведения анализа поглощение излучения молекулами в ультрафиолетово-видимой области спектра (200-760 нм).

твёрдофазная экстракция (ТФЭ): разделение смесей с использованием твёрдых сорбентов.

сорбция: явление, при котором поверхность твёрдого вещества притягивает молекулы или ионы из окружающей среды (жидкости или газа).

предел количественного определения (LOQ): предел содержания, также известный как диапазон обнаружения, нижний предел обнаружения.

предел обнаружения: наименьшая концентрация вещества, которая может быть обнаружена аналитическим методом.

Список используемых обозначений и сокращений

ПММ-полиметакрилатной матрицы

RhB-родамин В

ВЭЖХ-высокоэффективная жидкостная хроматография

ТФЭ-твёрдофазная экстракция

МОФ-металлоорганические каркасы

ИЖ-ионные жидкости

МIPs-молекулярные мембраны

СРЕ-экстракция в точке помутнения

МТФЭ-магнитная твёрдофазная экстракция

ДТФЭ-дисперсная твёрдофазная экстракция

МIT-молекулярный импринтинг

КФ-кристаллический фиолетовый

БЗ-бриллиантовый зеленый

Оглавление

Глава 1. Определение ксантеновых красителей	11
1.1. Использование ксантеновых красителей в технологических процессах	12
1.2. Методы определения ксантеновых красителей	14
1.2.1. Электрохимические методы	14
1.2.2. Хроматографические методы	16
1.3. Спектрофотометрическое определение родамина	17
1.4. Флуориметрическое определение родамина	19
1.5. Твердофазная экстракция красителей на сорбенты	21
1.5.1 Состояние исследований твердофазной экстракции ксантеновых красителей.....	21
1.5.2 Применение твердофазной экстракции	23
1.5.3 Изотермы сорбции	25
Глава 2. Материалы и методы исследования	28
2.1 Методы исследования	28
2.1.1. Метод изотерм сорбции	28
2.1.2. Методика эксперимента	29
2.2. Приборы и оборудование	30
Глава 3. Исследование экстракции красителей в объем полиметакрилатной матрицы.....	31
Глава 4. Кинетика сорбции красителей на матрице ПММ.....	47
Глава 5. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....	51
5.1 Предпроектный анализ	51
5.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования	51
5.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	52
5.1.3 SWOT-анализ	53
5.1.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации	55
5.1.5 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования.....	57
5.2 Инициация проекта	57
5.2.1 Цели и результат проекта	57
5.2.2 Организационная структура проекта.....	59
5.2.3 Ограничения и допущения проекта	60
5.3 Планирование управления научно-техническим проектом	60
5.3.1 Иерархическая структура работ проекта.....	60
5.3.2 План проекта	61
5.4 Бюджет научного исследования.....	64
5.5 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности	72
5.5.1 Оценка абсолютной эффективности исследования	72

5.5.2 Чистая текущая стоимость (NPV).....	73
5.5.3 Индекс доходности (PI).....	75
5.5.4 Внутренняя ставка доходности (IRR).....	75
5.5.5 Дисконтированный срок окупаемости	78
5.5.6 Оценка сравнительной эффективности исследования.....	79
Глава 6. Социальная ответственность	84
6.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	85
6.2 Производственная безопасность	86
6.2.1 Анализ опасных и вредных производственных факторов и обоснование мероприятий по снижению уровней их воздействия на исследователя (работающего)..	88
6.3 Экологическая безопасность	96
6.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях	98
Приложение А. Экспериментальные данные.	112
Приложение Б	121

Глава 1. Определение ксантеновых красителей

Ксантеновые красители представляют собой сложные органические молекулы со структурой ксантена, включают флуоресцеин, эозины и родамины. По сравнению с соответствующими арилметановыми красителями вследствие наличия мостикового атома кислорода спектр поглощения в видимой области, как правило, сильно смещен в коротковолновую область, устойчивость окрасок к свету немного выше. Благодаря своим ярким цветам и сильной они используются в синтезе основных красителей, кислотных красителей, растворителей и дисперсных красок. Многие ксантеновые красители могут быть получены конденсацией производных фталевого ангидрида с производными резорцина или 3-аминофенола. Ксантеновые красители, как правило, флуоресцентные, от желтого до розового и голубовато-красного цвета, блестящие красители. По химической структуре (Рис. 1) их можно разделить на аминоксантеновые, гидрокси-ксантеновые, амино-гидрокси-ксантеновые и фенил-ксантеновые красители.

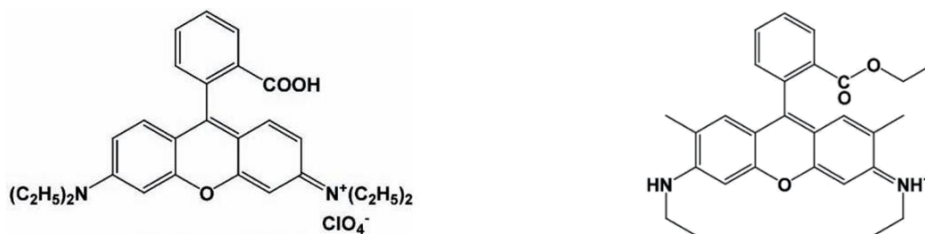


Рис. 1 – Структуры родамина В (слева) и родамина 6Ж (справа)

Введение различных заместителей в ароматическое кольцо изменяет длину волны поглощения красителя, поэтому ксантеновые красители характеризуются ярким цветом и сильной флуоресценцией. Например, введение замещающего галогена углубляет цвет, чем больше его вводится, тем темнее цвет, спектр смещен в желтые, красные и синие цвета. Они находят широкое применение в дисперсных красителях, флуоресцентных красителях, флуоресцентных пигментах, трассерных веществах для гидрологического мониторинга и контроля нефтяных месторождений.

1.1. Использование ксантеновых красителей в технологических процессах

Родамин В и родамин 6Ж являются одними из старейших и наиболее часто используемых синтетических красителей. Они широко используются в качестве цветовой добавки в косметической, пищевой, фармацевтической промышленности, а также в качестве красителя в нефтяной промышленности, текстильной и пластиковой промышленности [1,2]. Поскольку родамин В и родамин 6Ж обладают канцерогенностью и токсичностью для репродуктивной системы и развития, их применение для окрашивания пищевых продуктов вызвало серьезные проблемы, и многие страны ограничили их применение.

Ксантеновые красители [3] имеют большое значение в промышленности красящих веществ, особенно в области типографской продукции. Типичные области применения включают копировальную безуглеродную бумагу, чувствительная к давлению, и бумагу для термопечати. Флуоран позволяет получить темно-фиолетовое изображение при контакте с силикагелем и черное изображение в присутствии бисфенола А. Красители на основе ксантена, такие как флуоресцеин, родамин и родол, являются очень популярными флуорофорными каркасами вследствие их превосходных фотофизических свойств (высокие квантовые выходы и коэффициенты экстинкции, отличная растворимость в воде и фотостабильность).

В работе [2] авторы использовали красители в чернилах для струйной печати. Ксантеновые красители с их узкими кривыми поглощения и склонностью к использованию для получения очень ярких отпечатков этим способом. Для этих целей синтезировано производное родамина CI Acid Red 52, нашедшее широкое применение в чернилах, не смотря на низкую светостойкость этой хромофорной системы.

Благодаря таким характеристикам, как высокая интенсивность излучения, яркий цвет и сильная флуоресценция, ксантеновые красители представляют собой класс функциональных красителей с очень многообещающими перспективами применения в области текстильной промышленности [6].

Полиэфирные ткани, окрашенные флуоресцентным желтым цветом, обладают большей стойкостью окраски к свету, стойкостью окраски к истиранию и устойчивостью окраски к стирке.

В медицине в качестве сенсоров катионов металлов также часто используют ксантеновые красители [4], например, новое производное родамина Л5 для обнаружения Cu^{2+} в водных растворах и в живых клетках. Этот колориметрический сенсор мгновенно обратим для ионов Cu^{2+} и способен селективно определять биологически активные количества меди при высоких концентрациях других катионов металлов. Другие колориметрические сенсоры на основе родамина [5] способны определять микроколичества катиона Hg^{2+} не только по флуоресцентному сигналу, но также использовать цветовую реакцию на предварительное присутствие катионов Hg^{2+} .

Ксантановые красители также широко используются в *нефтяной промышленности*, в основном в качестве трассеров для изучения степени распространения нефти, тестирования грунтовых вод и разведки нефти, везде, где существует проблема внесения внешнего загрязнения в контролируемую систему [7]. По мере того, как разработка нефтяных месторождений переходит на среднюю и позднюю стадии, растет спрос на трассерные технологии мониторинга месторождений, поскольку осуществляется переход от односкважинной и однослойной закачки к многоскважинной, многослойной, многораундовой и блочной закачке. В соответствии с расчетной схемой поэтапного контроля профиля и характеристиками канализирования и заводнения воды в трещиноватых коллекторах со сверхнизкой проницаемостью, разработан метод временного проектирования межскважинного трассирования, оптимизирован принцип выбора химического трассирующего вещества и формула расчета дозы трассирующего вещества [8], а также создан метод прогнозирования оптимизации параметров поэтапного контроля профиля на основе многоэтапного межскважинного трассирования с применением ксантеновых красителей. Результаты применения метода показывают, что многоступенчатое межскважинное химическое трассирование может

эффективно отражать динамические изменения параметров трещины, а результаты мониторинга совпадают с результатами динамических производственных испытаний, демонстрируя хорошую адаптивность метода.

Косметическая промышленность широко использует ксантеновые и триарилметановые красители, причем это связано не только с поиском новых оттенков окраски, но чаще с определением запрещенных красителей в косметических продуктах. Разработан новый, простой и экологичный метод, основанный на одноступенчатой воздушно-ассистированной жидкостно-жидкостной микроэкстракции (OS-AALLME), для извлечения красителей Судана и Orange G, используемых в губной помаде [9]. Для группового определения четырех основных красителей и одного кислотного красителя, используемых в качестве постоянных компонентов красок для волос, разработали метод, основанный на разведении образца в воде и SPE для спектрофотометрического определения [10]. Наиболее часто родамин С и его производные используют в декоративной косметике (губная помада, румяна и лак для ногтей) [11], родамины В и 6Ж (CI 45160) [12] в губной помаде. Другие замещенные родамина находят применение в составе шампуня, подводки для глаз и тенях для век [13].

1.2. Методы определения ксантеновых красителей

В настоящее время к методам определения ксантеновых красителей в основном относятся: электрохимические; хроматография (разные варианты); спектрофотометрия; флуориметрия. В основном представлены электрохимические и хроматографические методы определения ксантеновых красителей.

1.2.1. Электрохимические методы

Электрохимический анализ основан на явлениях переноса электронов, которые происходят в исследуемой среде или на границах фаз и связаны с изменениями в структуре, химическом составе или концентрации аналита.

Электрохимические методы отличаются простотой, быстротой, высокой чувствительностью и миниатюрностью и подходят для определения синтетических красителей в различных объектах.

Описано [14] использование электрохимически восстановленного электрода из ацетиленовой черной пасты, модифицированного графеном (ERGO/ABPE), в качестве рабочего электрода предлагается простой и чувствительный электроаналитический метод определения родамина В (RhB). Модифицированный электрод оказывает хороший каталитический эффект на электрохимическое окисление RhB и может значительно улучшить чувствительность определения в диапазоне от 0,02 мкМ до 1,0 мкМ, предел обнаружения составляет 0,01 мкМ. Метод был применен для определения RhB в образцах паприки с удовлетворительными результатами.

В исследовании [15] создана миниатюрная электрохимическая система для чувствительного анализа родамина В (RhB) путем интеграции карбоксилированных многостенных углеродных нанотрубок и модифицированного ионной жидкостью графитового электрода (MWCNTs-COOH/IL/PGE), отличительной особенностью этой системы является малый объем образцов от миллилитра до микролитра, необходимый для анализа, что очень важно, когда доступно лишь небольшое количество образца. В оптимальных условиях пиковый ток окисления был линейным в зависимости от концентрации RhB в диапазоне 0,005-2,0 мкМ с низким пределом обнаружения 1,0 нМ.

Для флуоресцеина предложен способ определения концентрации с помощью дифференциальной импульсной вольтамперометрии и спектрофлуориметрии [16]. Результаты вольтамперометрических измерений показали, что флуоресцеин является электрохимически активным соединением, на электрохимическую активность которого влияет рН среды. Сравнение каждого метода измерения позволило утверждать, что электрохимические методы более пригодны для определения флуоресцеина растворах с низким рН, в то время как спектрофлуориметрический метод более выгоден в случае

щелочных растворов.

Для определения ксантенового красителя эозина разработана чувствительная процедура адсорбционного стриппинга [17]. Хорошо развитый вольтамперометрический пик, вероятно, связанный с катодным восстановлением карбонильной группы, получен в ацетатном буфере рН (5) при -550 мВ в диапазоне концентраций $5,0 \times 10^{-8} - 5,0 \times 10^{-7}$ моль/л ($r = 0,99$). Предел обнаружения составил $8,73 \times 10^{-10}$ моль/л (0,566 ppb).

Электрохимическая активность эозина Y также изучена в буферной среде при различных условиях рН методом циклической и дифференциальной импульсной вольтамперометрии [18]. Хорошо развитый вольтамперометрический пик, вероятно, связанный с катодным восстановлением карбонильной группы, был получен в ацетатном буфере рН 4.0 при -0.6 В. Необратимость процесса восстановления была подтверждена методом циклической вольтамперометрии. При оптимизированных условиях катодный пиковый ток эозина Y пропорционален концентрации в диапазоне от 50 ppb до 300 ppb с пределом обнаружения 20 ppb методом дифференциальной импульсной вольтамперометрии.

1.2.2. Хроматографические методы

Метод ВЭЖХ позволяет разделить практически любую смесь синтетических красителей. Основой разделения является различное распределение компонентов между двумя несмешивающимися фазами – подвижной (элюент) и неподвижной. НФ обычно представляет собой твердое тело (сорбент) или жидкую пленку, осажденную на твердом теле. ПФ это жидкость или газ, протекающие через неподвижную фазу.

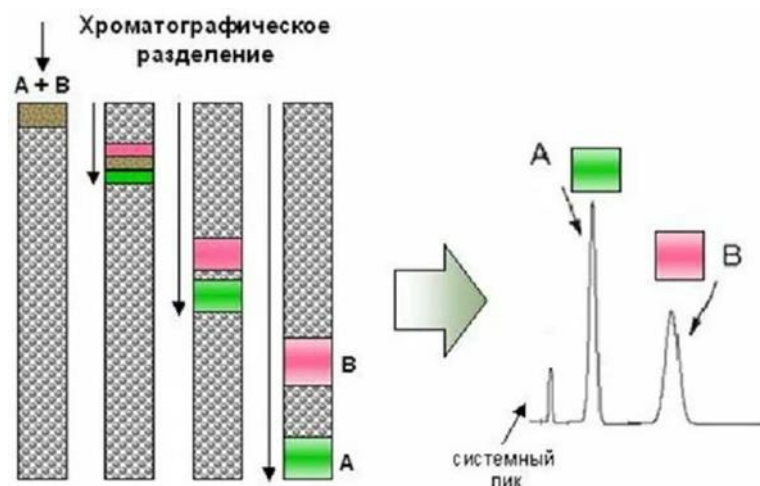


Рис. 2 – Обзорная схема метода хроматографического анализа

Исследования на животных показали, что ксантеновые красители могут вызывать замедление роста и повреждение печени, гемолиз эритроцитов и подавление иммунного ответа в изолированных клетках селезенки. Высокоэффективная жидкостная хроматография (ВЭЖХ) с флуоресцентным детектированием [19], обеспечивает быстрое и чувствительное определение флуоресцеина и его метаболитов в плазме крови. Аналогичный подход использован для определения родамина [20] в плазме кролика и человека. В работе [21] описано определение родамина В пищевых продуктах, содержащих чили. Краситель экстрагируется из образцов метанолом и анализируется с помощью высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ) в сочетании с флуоресцентным детектированием (FLD) с пределом количественного определения 10 мкг/кг. Общий коэффициент восстановления находится в диапазоне 98-103 % в порошке чили и в диапазоне 87-100 % в масле чили в зависимости от концентрации родамина В в пищевых продуктах.

1.3. Спектрофотометрическое определение родамина

Спектрофотометрия идеально подходит для определения красителей с поглощением света в видимой области спектра и широко применяется при изучении строения и состава различных соединений, для качественного и количественного определения веществ. Предложена методика определения

родамина в косметических продуктах и образцах воды с помощью UV-VIS спектрофотометра при 550 нм [22]. Предел обнаружения (LOD), предел количественного определения (LOQ), коэффициент преконцентрации (PF) и относительное стандартное отклонение (RSD %) составили 2,2 мкг/л, 7,3 мкг/л, 25 и 2,3% соответственно.

В работе [23] был разработан быстрый и эффективный метод концентрирования для извлечения родамина 6Ж с помощью дисперсионной жидкостно-жидкостной микроэкстракции (DLLME) перед UV-VIS спектрофотометрией. Исследование показало, что оптимизированные условия (экстрагирующий растворитель: 300 мкл хлороформа, диспергирующий растворитель: 3 мл ацетона, pH: 8 и без добавления соли) привели к получению линейного калибровочного графика в диапазоне 5-900 мкг/л родамина 6Ж в исходном растворе с $R^2 = 0,9988$ ($n=5$). Пределы обнаружения и количественного определения составили 2,39 и 7,97 мкг/л, соответственно.

Описан метод [24] чувствительного и селективного определения следовых количеств родамина, который основан на экстракции родамина В из водного раствора с помощью Тритона X-100 в кислой среде. Экстрагированную фазу, богатую ПАВ, разбавляют водой и измеряют ее поглощение при 563 нм с помощью спектрофотометра. При оптимальных условиях получен линейный калибровочный график в диапазоне 5-550 мкг/л родамина В в исходном растворе с $r = 0,9991$ ($n = 15$). Метод был применен для определения родамина В в образцах художественных красок, жидкого мыла и смеси текстильных красителей.

Работа [25] предлагает провести спектрофотометрическое определение родамина В в технологических растворах после твердофазной экстракции. Разработан новый, экологичный, простой и быстрый метод [26] спектрофотометрического определения малахитового зеленого, кристаллического фиолетового и родамина В в образцах воды на основе экстракции Micro-cloud Point (MCPE) при комнатной температуре. При оптимизированных условиях калибровочные кривые оказались линейными в диапазоне концентраций 0,06-0,60 мг/л, 0,10-0,80 мг/л и 0,03-0,30 мг/л с

коэффициентами обогащения 29,26, 85,47 и 28,36 соответственно для малахитового зеленого, кристаллического фиолетового и родамина В. Пределы обнаружения составили от 2,2 до 5,1 мкг/л.

Представлен простой, экологичный и точный аналитический метод [27] разделения и предварительного концентрирования родамина В в образцах пищевых продуктов и воды, основанный на микроэкстракции с использованием UV-Vis спектрофотометра. Применение метода было оценено для экстракции и определения родамина в выбранных образцах пищи и воды с погрешностью $\leq 3,6\%$.

1.4. Флуориметрическое определение родамина

Метод флуоресцентного анализа основан на возбуждении электронно-эмиссионных спектров молекул аналита под внешним УФ-облучением и измерении интенсивности их фотолюминесценции. Для возникновения люминесценции молекулы вещества должны быть переведены из основного состояния в возбужденное, которое сохраняется в течение достаточной продолжительности, чтобы произошел радиационный переход электронов из возбужденного состояния в основное. Как правило, методы более чувствительны, чем фотометрические методы.

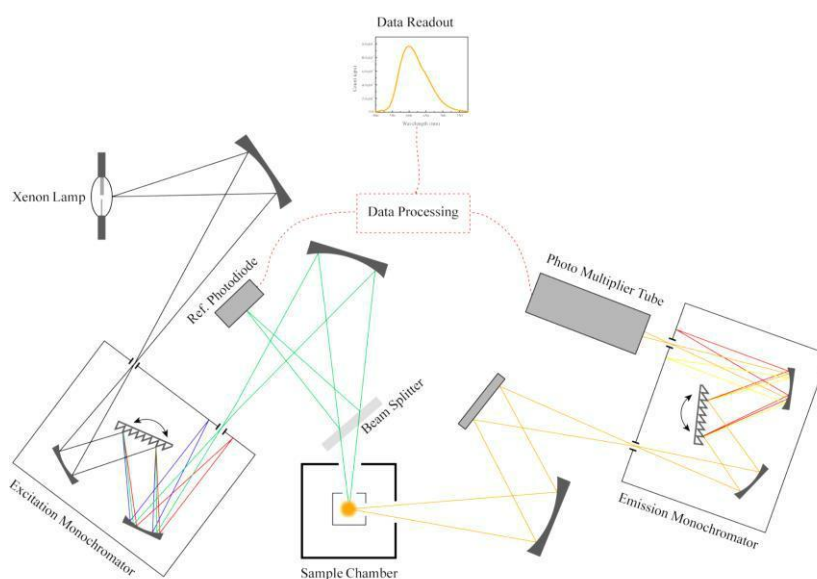


Рис. 3 – Схема флуоресцентной спектроскопии

Описан метод [28] чувствительного и селективного определения водного трассера родамина WT. Эта методика, основанная на совместном применении твердофазной экстракции (ТФЭ) с использованием C18-колонки ВЭЖХ-разделения с флуоресцентным детектированием для анализа, имеет важные преимущества перед прямыми флуориметрическими методами. Подход, представленный в данной работе, по сути, является методом нулевого фона, что позволяет измерять гораздо более низкие концентрации красителей. Использование твердофазной экстракции на стадии пробоподготовки позволяет еще больше повысить предел обнаружения.

Предлагается простой и быстрый метод [29] спектрофлуориметрического определения родамина с использованием анионных поверхностно-активных веществ. Он основан на образовании ионной пары с родамином-В в 0,5 М HCl и последующей экстракции ассоциата в бензол. Коэффициент вариации составил 4,8% при 0,23 ppm ПАВ. Метод был применен для определения анионных поверхностно-активных веществ в городских сточных водах, давая извлечение, близкое к 100%.

В исследовании [30] предлагается флуориметрическое определение родамина В с применением разделения с помощью поверхностно-активного вещества. Экспериментальные параметры, влияющие на этапы разделения и определения, такие как концентрация ПАВ, время и температура уравнивания, pH экстракции, природа и состав разбавителя фазы, насыщенной ПАВ, были изучены и оптимизированы. Реализация этапа разделения позволила успешно устранить помехи от матричных компонентов, улучшив селективность и чувствительность. Разработанная методика обеспечивает линейность в диапазоне от $4,67 \times 10^{-2}$ до 100 мкг/л с коэффициентом корреляции 0,999. При оптимальных условиях эксперимента получены LOD $1,40 \times 10^{-2}$ мкг/л и LOQ $4,67 \times 10^{-2}$ мкг/л.

1.5. Твердофазная экстракция красителей на сорбенты

1.5.1 Состояние исследований твердофазной экстракции ксантеновых красителей

Основной принцип ТФЭ заключается в переносе цели из водной фазы в объем твердой фазы. Преимуществами ТФЭ являются высокие коэффициенты обогащения и операционная гибкость, быстрая кинетика сорбции, многоразовое использование экстрагентов, низкое потребление органических реагентов, низкое образование отходов и легкое затвердевание неудачного материала. Современные технологии твердофазной экстракции сосредоточены на двух аспектах: средствах разделения и методах разделения.

Разделительная среда [31] качестве сорбентов для ТФЭ используются металлоорганические каркасы (MOF), графен (Г)/оксид графена (ГО), ионные жидкости (ИЖ), молекулярные мембраны (MIPs). Молекулярные полимерные мембраны наиболее часто используются в качестве аффинных разделительных сред для предварительного обогащения и изоляции образцов благодаря их заранее заданной способности к распознаванию, стабильности, относительной простоте и низкой стоимости приготовления.

Твердофазная экстракция является хорошо зарекомендовавшим себя методом предварительного концентрирования, обычно применяемым для анализа следовых количеств аналитов в образцах окружающей среды. Он также был предложен в качестве альтернативного метода экстракции ксантеновых красителей из кометических средств [32] [13]. Ионообменная смола Sepabeads SP 70 использована в качестве твердофазного адсорбента для предварительного концентрирования следов родамина в образцах сточных вод и безалкогольных напитков [32], но он также применялся для экстракции красителя в губной помаде, предварительно растворенной в воде при нагревании и перемешивании. Родамин, сохранившийся в адсорбенте, элюировался 5 мл ацетонитрила и анализировался с помощью UV-Vis спектрофотометра. Родамин В был идентифицирован и количественно определен в двух видах помады в

концентрациях 39 и 127 мкг·г⁻¹.

Два метода экстракции на основе ТФЭ и СРЕ (экстракция в точке помутнения) предложены для определения родамина В в губной помаде [25]. Для SPE в качестве адсорбента использовался амберлит XAD-1180, а для элюирования родамина 5 мл этанола. Для СРЕ в качестве поверхностно-активного вещества использовали Tergitol NP-7. С учетом экспериментальной процедуры, ТФЭ предполагает более короткое время отбора проб, более высокий коэффициент концентрирования и лучшую воспроизводимость. С другой стороны, чувствительность немного лучше в случае СРЕ.

Для селективного извлечения и быстрого определения родамина В из образцов загрязненной морской воды в сочетании с флуоресцентной спектрометрией был разработан высокоэффективный метод [34] очистки и концентрирования образцов с MIPs в качестве сорбентов. В оптимальных условиях предложенный метод показал возможность определения в диапазоне концентраций 2,5 ~ 112,5 мкг/л, с пределом обнаружения 0,45 мкг/л. Работа [35] посвящена разработке подхода к синтезу MIPs как сорбента именно для твердофазной экстракции родамина В с последующим разделением и количественным определением методом высокоэффективной жидкостной хроматографии с ультрафиолетовым/видимым детектированием. При оптимальных условиях предел обнаружения и количественного определения предложенного метода составили 0,005-15 мг/кг, 0,0015 мг/г и 0,00488 мг/кг, соответственно, с относительным стандартным отклонением <6,1%.

Использование ионных жидкостей (ИЖ), считающихся более экологичными, улучшает чувствительность и селективность, становясь интересным подходом; однако для диспергирования и осаждения ИЖ часто требуются диспергирующие растворители, нагревание и охлаждение, ультразвук или дополнительные химические реагенты, что приводит к длительному времени отбора проб, как, например, метод, основанный на дисперсионной жидкостно-жидкостной микроэкстракции ионной жидкости (IL-DLLME) для определения Brilliant Blue (CI 42090) в туалетной воде и шампуне [33].

Многочисленные исследования показали, что SPE является хорошим выбором для извлечения и концентрирования ксантеновых красителей.

1.5.2 Применение твердофазной экстракции

С точки зрения методов разделения существуют магнитная твердофазная экстракция (МТФЭ) для эффективного разделения, дисперсная твердофазная экстракция (ДТФЭ) и твердофазная экстракция с помощью электрических и ультразвуковых полей (E-SPE) для оптимизации методов экстракции. В методах МТФЭ магнитный сорбент диспергируется непосредственно в растворе образца, что представляет собой дисперсионный способ экстракции, который увеличивает площадь контакта между сорбентом и аналитом. Магнитные сорбенты, которые обычно состоят из магнитного носителя и функции, играют решающую роль в методах МТФЭ, поскольку они влияют не только на эффективность экстракции, но и на чувствительность и селективность метода. Дисперсионная твердофазная экстракция (ДТФЭ) — это метод, при котором сорбент подвергается воздействию аналита через процесс диспергирования, что обеспечивает большую площадь поверхности и высокую сорбционную емкость. Ее преимущества заключаются в коротком времени уравнивания, отсутствии фазы кондиционирования и высокой степени извлечения. Экстракция с помощью электрического поля — это новый метод разделения, который повышает эффективность разделения путем применения электрического поля для усиления массопереноса. Его преимущества заключаются в простой операции жидкофазной экстракции, хорошем эффекте обогащения, электрическое поле может ускорить массоперенос и улучшить селективность.

Среди традиционных методов подготовки проб твердофазная экстракция (ТФЭ) обычно используется для выделения и предварительного концентрирования аналитов из фоновой матрицы. Однако традиционные адсорбенты не могут обеспечить достаточное распознавание вследствие недостаточной селективности в отношении целевых аналитов. Одна из

возможностей решения этой проблемы заключается во внедрении технологии молекулярного импринтинга (MIT) благодаря ее способности повышать селективность процессов обработки проб.

Твердофазная экстракция бриллиантового зеленого (БЗ) проводилась после накопления на наночастицах оксида цинка, загруженных на активированный уголь (ZNO-NP-AC), нетоксичных и зеленых в качестве материала. Было изучено [36] и оптимизировано влияние таких переменных, как рН, начальная концентрация БЗ, время контакта, количество адсорбента, элюент и температура на удаление и извлечение БЗ. Кроме того, подгонка экспериментальных данных равновесия к многочисленным традиционным моделям изотерм показала, что модель Ленгмюра с высоким коэффициентом корреляции и низкой погрешностью анализа более пригодна для объяснения экспериментальных данных.

Для определения бриллиантового зеленого в образцах рыбы и морской воды методом спектрофотометрии после его экстракции и в сочетании с дисперсионной жидкостно-жидкостной микроэкстракцией была использована высокочувствительная, простая и быстрая методика обогащения наночастицами хитозана - оксида цинка. Микроконцентрации бриллиантового зеленого были диспергированы в органическую фазу в методе DLLME [37] после добавления диспергирующего растворителя и наночастиц хитозана - оксида цинка. Для повышения эффективности экстракции были исследованы такие экспериментальные факторы, как количество наночастиц хитозана-оксида цинка, концентрация Triton X-114, тип объема экстракции и диспергирующего растворителя, время экстракции, скорость и время центрифугирования, объем образца и рН. После оптимизации условий микроэкстракции и инструментальных факторов был достигнут коэффициент обогащения 169,0. Аналитическая кривая "абсорбция – концентрации" была линейной в диапазоне 1,0-200,0 мкг/л бриллиантового зеленого. Предел обнаружения и относительное стандартное отклонение составили 0,3 мкг/л и <6,1 %, соответственно.

Описан метод удаления некоторых токсичных красителей, таких как

бриллиантовый зеленый и кислотный красный [38] из водного раствора методом твердофазной экстракции, в котором в качестве абсорбирующей поверхности для адсорбции красителя используется твердая фаза HNC. Экспериментальные данные процесса адсорбции показали, что HNC может удалить большинство красителей в течение 30 мин, с адсорбционной емкостью 12,5 мг/г для красителя А.Р и 13,9 мг/г для красителя БЗ на твердой фазе HNC при оптимальных условиях.

Проведена одновременная прекоцентрация и определение красителей аурамин (АО) и кристаллический фиолетовый (КФ) из водного раствора методом твердофазной микроэкстракции [39] с помощью ультразвука на основе композитного активированного угля. Основные и взаимодействующие влияния рабочих параметров, таких как рН, время ультразвуковой обработки, количество сорбента и тип элюента, на эффективность экстракции исследованы методом спектрофотометрии диффузного отражения.

Процедура твердофазной прекоцентрации с использованием наносорбента SBA-3 предложена для быстрого разделения и прекоцентрации кристаллического фиолетового (КФ) в образцах воды методом спектрофотометрии с оптоволоконно-линейным детектированием [40]. В оптимизированных экспериментальных условиях были определены аналитические параметры, включая предел обнаружения, линейный рабочий диапазон и относительное стандартное отклонение. В исходном растворе предел обнаружения КФ составил $1,3 \text{ мкг L}^{-1}$. При оптимальных условиях максимальная адсорбционная емкость составила $344,83 \text{ мг г}^{-1}$.

1.5.3 Изотермы сорбции

Изотерма адсорбции - зависимость количества адсорбируемого вещества (величины адсорбции) от парциального давления (или концентрации раствора) этого вещества в газовой фазе при постоянной температуре. Рассматривая эту изотерму, можно понять, как происходит процесс адсорбции, а значит, как частицы взаимодействуют с поверхностью и каковы свойства поверхности.

Анализ изотермы позволяет определить, является ли поверхность гладкой, пористой или микропористой, также возможна конденсация. В общем виде уравнение изотермы адсорбции записывается следующим образом:

$$\Gamma = f(C)$$

где Γ – величина равновесной адсорбции, моль/см²; C – равновесная концентрация, моль/л.

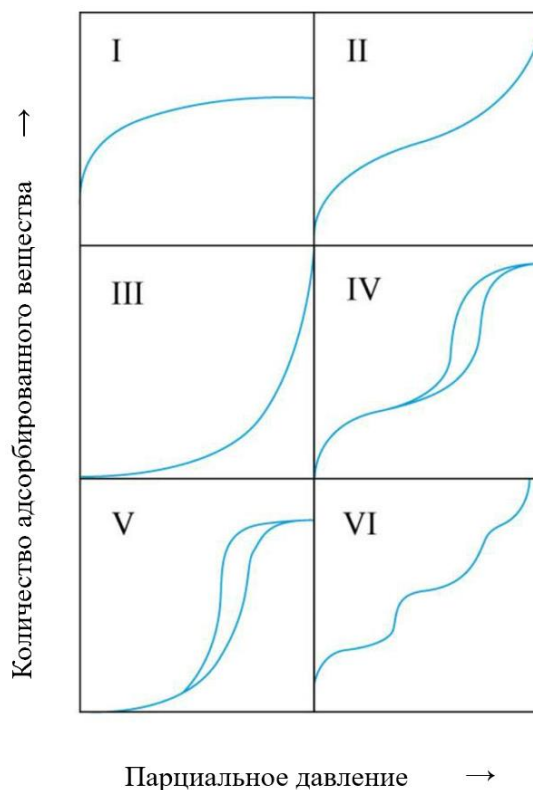


Рис. 4 – Типы изотерм адсорбции

Существует шесть основных типов изотерм адсорбции (рисунок. 4). Тип I характерен для микропористых твердых веществ с относительно небольшой площадью внешней поверхности. Тип II представляет собой многомолекулярную адсорбцию на непористых или макропористых адсорбентах. Тип III характерен для непористых адсорбентов с низкой энергией взаимодействия адсорбент-адсорбат. Типы IV и V аналогичны типам II и III, но используются для пористых адсорбентов. Изотермы типа VI характерны для непористых адсорбентов с однородной поверхностью. Независимо от единиц или переменных, используемых для осей X (p/p_0) и Y (X), ось X показывает, какое давление или

концентрация сорбента действует на твердое тело; ось Y показывает количество сорбата, которое фактически адсорбировано на поверхности твердого тела или сорбента.

Изотерма I типа, также известная как изотерма Ленгмюра. Происходит своего рода хемосорбция, т.е. частицы или адсорбаты прочно связаны с поверхностью твердого тела или адсорбента. Как только на поверхности не остается места для дальнейших частиц, адсорбция прекращается. Другая причина, оправдывающая изотермы типа I, - физическая адсорбция, т.е. частицы лишь очень слабо взаимодействуют с поверхностью (не образуют химических связей). В этом случае частицы попадают в микропору и после того, как они заполнили поверхность, дополнительной поверхности для последующей адсорбции не остается, т.е. внешняя поверхность почти не доступна (как если бы это была очень тонкая сетка).

Изотерма II типа, также известная как S-изотерма. Она описывает процесс физической адсорбции непористых и макропористых твердых веществ. Адсорбируемые частицы образуют единый молекулярный слой на поверхности адсорбента. Как только монослой завершен, на первой частице адсорбируются еще частицы, образуя многослойный слой. Именно здесь можно наблюдать характерный подъем этой изотермы. Другая причина появления изотермы типа II заключается в том, что сродство частиц к поверхности больше, чем их сродство к самим себе.

Изотермы типа III можно интерпретировать аналогично изотермам типа II: многослойность и физорбция. Однако на этот раз взаимодействие между многослойными слоями сильнее, чем взаимодействие монослоев с твердой поверхностью. Таким образом, это нерегулярная адсорбция с большим количеством адсорбированных частиц и долей свободной поверхности.

Изотермы типа IV также описывают процессы физорбции и многослойности, аналогичные изотермам типа II; однако теперь в пористых (и мезопористых) твердых телах возможна конденсация частиц газа в небольшом количестве жидкости. До тех пор, пока поры не "забиты" жидкостью, монослой

не является полным.

Изотерма типа V похожа на изотерму типа IV, с той разницей, что на этот раз многослойная структура формируется легче, чем соответствующая однослойная. Другими словами, она напоминает адсорбцию, описываемую изотермой типа III. Здесь многослойная структура достигает своей максимальной толщины, и больше нет места для адсорбции других частиц.

Адсорбция на границе раздела твердое тело-жидкость более сложна, чем адсорбция на границе раздела твердое тело-газ, поскольку, помимо силового поля в твердой фазе, необходимо также учитывать межмолекулярные взаимодействия в жидкой фазе. Кроме того, по крайней мере два компонента, растворитель и растворимое вещество, адсорбируются из жидкой фазы и конкурируют друг с другом за место на поверхности.

Глава 2. Материалы и методы исследования

2.1 Методы исследования

2.1.1. Метод изотерм сорбции

На количество адсорбированного из раствора твердого вещества влияют следующие факторы: площадь поверхности адсорбента, природа растворенного вещества, его химическая структура и взаимодействие с растворителем, природа самого растворителя, природа взаимодействия между поверхностью и растворителем адсорбированного в растворе вещества, структура, толщина и температура адсорбированного слоя.

Сорбция твердым адсорбентом описывается изотермой Ленгмюра, имеющей вид:

$$a = \frac{a_{\infty} Kc}{1 + Kc},$$

где a и a_{∞} - количество адсорбированного материала, которое является максимально возможной характеристикой в момент времени t и при данных условиях адсорбции и процесса, соответственно, моль/см² ; K - константа равновесия процесса адсорбции, выраженная как отношение скоростей прямого

и обратного процессов, т.е. адсорбции и десорбции (характеризует сродство адсорбента к адсорбированному материалу); c - равновесная концентрация адсорбата в растворе после адсорбции, моль/л.

Для анализа изотерм удобно использовать линейную форму уравнения Ленгмюра:

$$\frac{1}{a} = \frac{1}{a_{\infty}} + \frac{1}{a_{\infty}Kc}.$$

Адсорбция Ленгмюра обусловлена почти химическими, локальными силами и происходит в активных центрах, т.е. на определенных участках поверхности адсорбента. Активные центры являются независимыми и могут быть насыщенными: молекула или ион могут быть адсорбированы на активном центре. Насыщенное состояние поверхности адсорбента соответствует ограниченной удельной адсорбции a_{∞} .

Для описания адсорбции из растворов широко применяется эмпирическое уравнение Фрейндлиха:

$$\Gamma = Kc^{1/n},$$

где K и n – эмпирические константы. Для нахождения констант его логарифмированием приводят к уравнению прямой: $\lg K + n \lg c$.

Приведенное выше уравнение относится к адсорбции отдельных молекул и не учитывает латеральные взаимодействия, когда адсорбционный слой насыщен (взаимодействия между соседними молекулами в адсорбционном слое называются латеральными взаимодействиями). Электростатические взаимодействия в адсорбционном слое также необходимо учитывать при диссоциации растворителей в растворе и их адсорбции на ионизированных поверхностях.

2.1.2. Методика эксперимента

Для изучения процесса изменения количества адсорбции при изменении концентрации адсорбата при определённой температуре был проведён следующий экспериментальный процесс. Концентрация адсорбата и

адсорбционная способность являются важными ориентирами в процессе определения.

1. Приготовить 100 мг/л исходного раствора красителя.

2. Создать кислую среду добавкой соляной кислоты. Приготовить разбавленные растворы:

2.1. 4 мл исходного раствора родамина.

2.2. 2мл раствора родамина 1 +2 мл воды.

2.3. 2мл раствора родамина 2 +2 мл воды.

2.4. 2мл раствора родамина 3 +2 мл воды.

2.5. 2мл раствора родамина 4 +2 мл воды.

2.6. 2мл раствора родамина 5 +2 мл воды.

2.7. Фотометрировать раствор родамина 1 и 6 в кювете толщиной 1 см.

Рассчитать концентрацию родамина в растворах 2,3,4,5,6 если концентрация родамина в растворе 1.

2.8. Рассчитать концентрацию родамина в пластинках 1,2,3,4,5,6 по разнице между разбавлением раствора родамина и его экспериментальной концентрацией.

2.9. Построить график с концентрацией родамина в растворе по оси X в мг/мл или с концентрацией родамина в пластинке по оси Y в мг/г.

2.2. Приборы и оборудование

В работе использованы растворы родамина, бриллиантового зеленого и кристаллического фиолетового. Растворы исходных красителей готовили по точной навеске, растворы меньших концентраций последовательным разбавлением исходных растворов непосредственно перед использованием. Целевой уровень pH достигнут с использованием HCl. Все используемые реагенты были химически чистыми и аналитического качества.

Спектры поглощения регистрировали с использованием спектрофотометров UV-1800 (Shimadzu, Япония), Evolution 201 (Thermo Fisher Scientific Inc., США). Значения pH измеряли с помощью ионметра И-160 (НПО

«Измерительная техника», Россия) с рН-селективным стеклянным электродом. Абсолютная погрешность для иономера составляет $\pm 0,02$ рН, и его калибровали при 25 °С с использованием буферных растворов с рН 1,00 и 9,18. Для перемешивания использовали мультитротатор MultiBio RS-24 (BioSan, Латвия).

Глава 3. Исследование экстракции красителей в объем полиметакрилатной матрицы

Известно, что молекулы незтерифицированных родаминов (например, родамина Б (РБ)) содержат карбоксифинильный фрагмент и в зависимости от рН среды, температуры, кислотноосновных свойств растворителя, его полярности, концентрации раствора могут находиться в одной из трех форм: катионной (РБ⁺), цвиттерионной (РБ[±]) и лактонной (РБЛ). Равновесие между этими формами можно схематически представить следующим образом: РБ⁺ \leftrightarrow РБ[±] \leftrightarrow РБЛ. Каждая из форм обладает характерными спектральнолюминесцентными свойствами. В работе [41] проведено квантовохимическое исследование равновесия РБ⁺ \leftrightarrow РБ[±] и показано, что образование и стабилизация РБ[±] возможна только в протоноакцепторных растворителях. Полученные результаты теоретических расчетов находятся в согласии с имеющимися экспериментальными данными по спектрам поглощения. Равновесие между РБЛ и РБ[±] схематически изображено на рисунке (Рис. 5). В апротонных неполярных растворителях устойчива РБЛ. В таких растворителях обнаруживается только коротковолновая флуоресценция. При этом спектр возбуждения коротковолновой совпадает со спектром поглощения РБЛ, а флуоресценция РБ[±] отсутствует. В полярных апротонных растворителях (ацетонитрил, дихлорметан и т.д.) и бинарных смесях растворителей (диоксан–вода) РБЛ проявляет двойную флуоресценцию, приписываемую излучению двух форм красителя: РБЛ и РБ[±], т.е. наряду с коротковолновой флуоресценцией РБЛ наблюдается вторая длинноволновая флуоресценция РБ[±]. Форма РБ[±] образуется после диссоциации лактонной связи в возбужденном состоянии, о чем свидетельствуют спектры возбуждения обеих полос двойной, которые совпадают со спектром поглощения

РБЛ испектром возбуждения РБЛ в неполярном апротонном растворителе. Положение максимума длинноволновой полосы в спектре РБЛ, в отличие от положения максимума длинноволновой полосы поглощения, в большей мере зависит от природы растворителя.

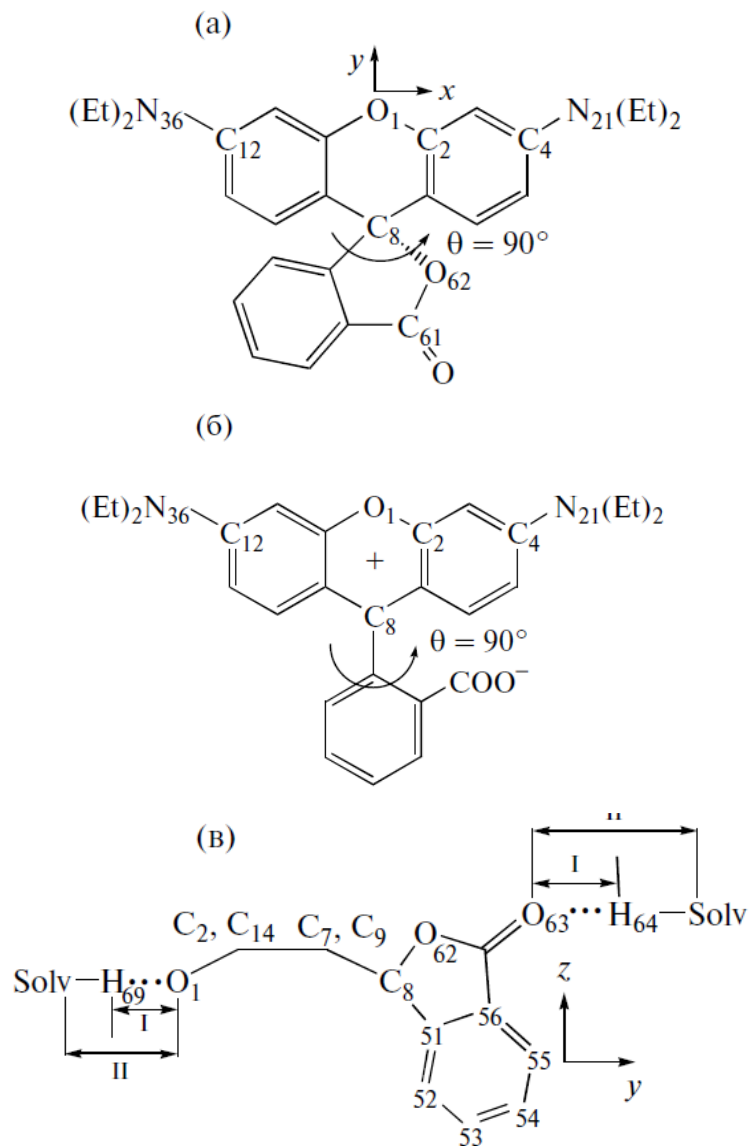


Рис. 5 – Равновесие между лактонной (а) и цвиттерионной (б) формами РБ, геометрическая структура и заданная нумерация атомов в молекуле РБЛ; в – комплекс РБЛ-растворитель

Причина диссоциации лактонной связи в возбужденном состоянии и наличие двойной до сих пор во многом не ясны. Предполагается, что в лактоне происходит разрыв -СО-СО- связи лактонного цикла, а не -С-ОСО- связи, как это

следует из представлений о динамическом равновесии между молекулярными формами РК (Рис. 5). Из экспериментальных данных достаточно уверенно можно предположить лишь определяющую связь этих особенностей спектральных свойств РБЛ с окружающей средой (растворителем), локализованного над атомами азота, что, вероятно, будет только ослаблять специфические межмолекулярные взаимодействия между молекулами растворителя и атомами азота, что подтверждается результатами эксперимента.

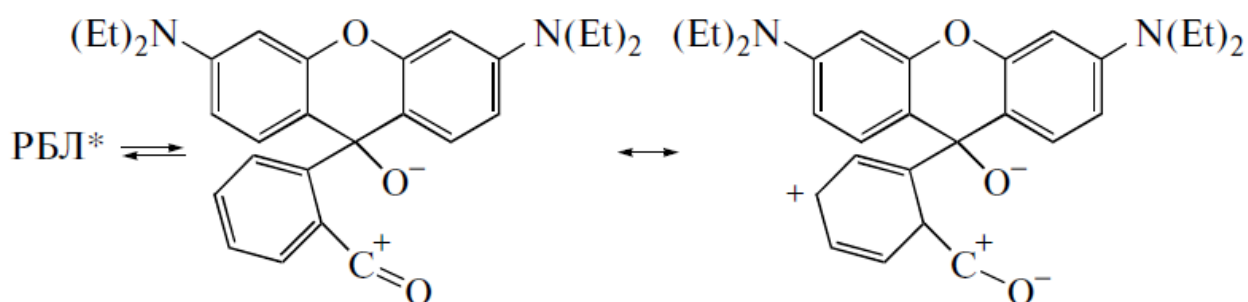


Рис. 6 – Схема перехода форм родамина при изменении кислотности среды

Специфические взаимодействия между протонодонорными растворителями и аминогруппами КК возможны только при рН \sim 0.5, при этом происходит протонирование аминогруппы КК, сопровождающееся коротковолновым сдвигом первой полосы поглощения, уширением и уменьшением интенсивности на порядок полосы. Вблизи атомов кислорода обоих фрагментов молекулы происходит увеличение отрицательного значения минимумов МЭСП, что, скорее всего, усилит взаимодействия между этими атомами и молекулами растворителя и образование мезомерных форм родамина (Рис.).

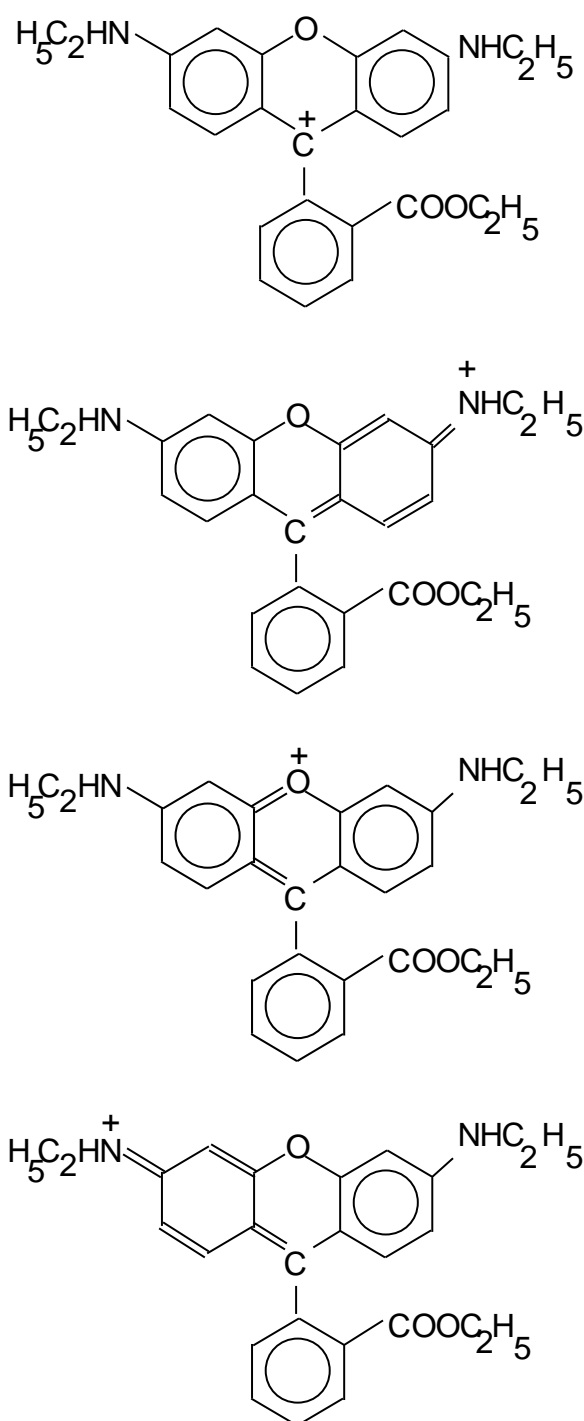


Рис. 7 – Мезомерные структуры катиона родамина 6Ж

Для изучения процесса адсорбции родаминового красителя на пластине ПММ необходимо исследовать изотерму его адсорбции. Конкретные экспериментальные данные приведены на приложении А. Как видно на рисунке 8, эта кривая соответствует кривой изотермы адсорбции III, относящейся к многослойной и физической адсорбции. Тип III представляет собой обратную

кривую Ленгмюровского типа, изотерма этого типа вогнута вниз вдоль направления координаты количества адсорбции.

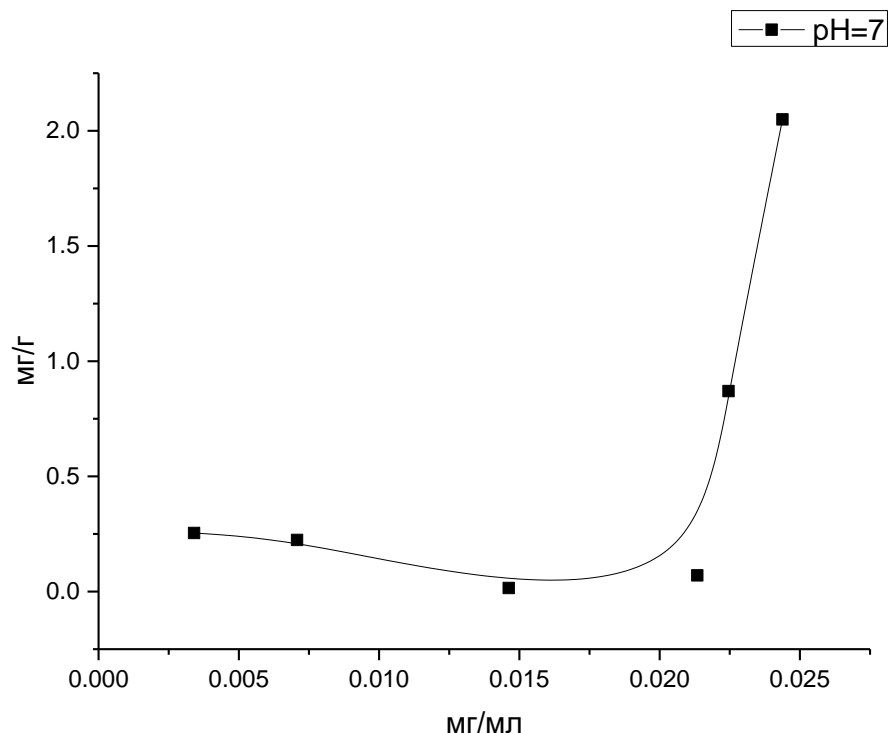
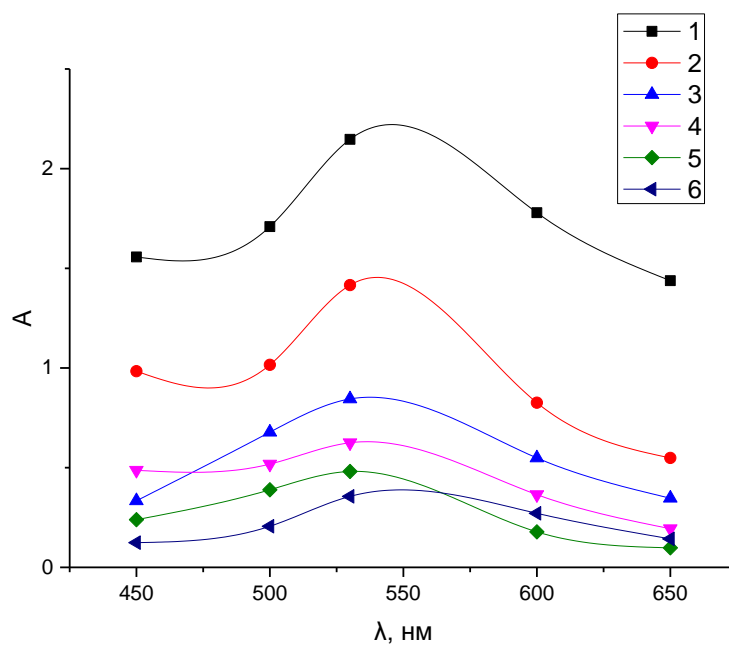


Рис. 8 – Изотерма адсорбции пластинки ПММ в растворе родамина в нейтральной среде

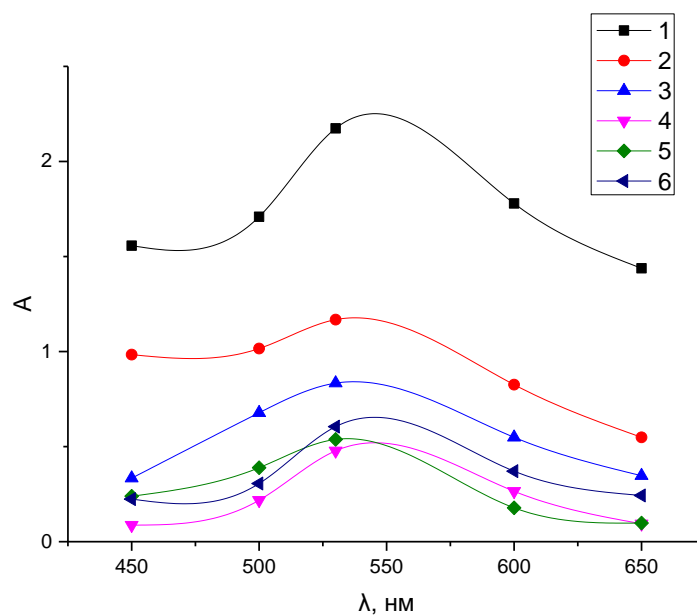
Этот тип изотермы проявляется, когда адсорбционное взаимодействие твёрдого тела и адсорбата меньше, чем взаимодействие между адсорбатами. Когда концентрация мала, сила между твёрдой поверхностью и адсорбированными молекулами относительно слаба, а сила между адсорбированными молекулами относительно велика, поэтому содержание родамина в матрице ПММ очень мало. С увеличением концентрации увеличивалось и содержание родамина в матрице.

Для исследования влияния pH на адсорбцию раствора родамина пластинки ПММ, пластинку ПММ помещали в раствор родамина, содержащий различные концентрации соляной кислоты, и удаляли через 10 мин. Спектры пластинки ПММ измеряли при 535 нм с помощью УФ-спектрофотометра, как показано на рис. 9(а, б, в). Результаты показали, что существует тенденция к увеличению сигнала в матрице при увеличении концентрации соляной кислоты.

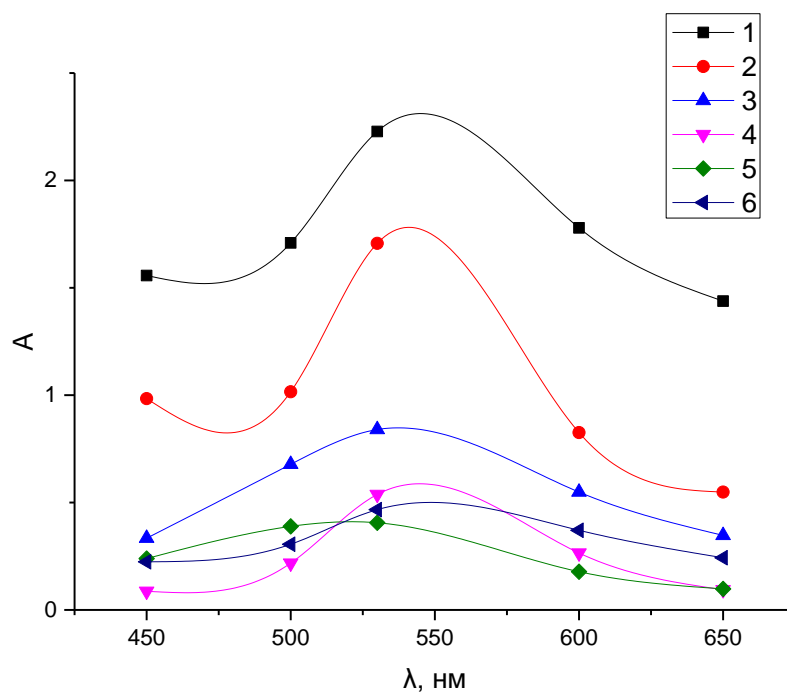
При одинаковой концентрации соляной кислоты в растворе родамина сигнал в матрице ПММ также имел тенденцию к уменьшению по мере уменьшения концентрации раствора родамина.



а. pH 5-6



б. pH 3-4



в. рН 2

Рис. 9 – Спектры поглощения ПММ после сорбции из раствора родамина различной концентрации 1-6, соответствующей разд.2.1.

По полученным данным рассчитана концентрация раствора родамина и содержание родамина в пластинах ПММ после сорбции при различном содержании соляной кислоты. Значение рН является важным фактором в процессе изотермической адсорбции. Добавление раствора соляной кислоты во время эксперимента приводит к кислотной протонизации родамина, что приводит к более высокой адсорбционной способности адсорбата вследствие изменения ионной формы красителя. Как показано на рисунке 10, с увеличением содержания соляной кислоты, чем меньше значение рН, тем сильнее адсорбционная способность адсорбата.

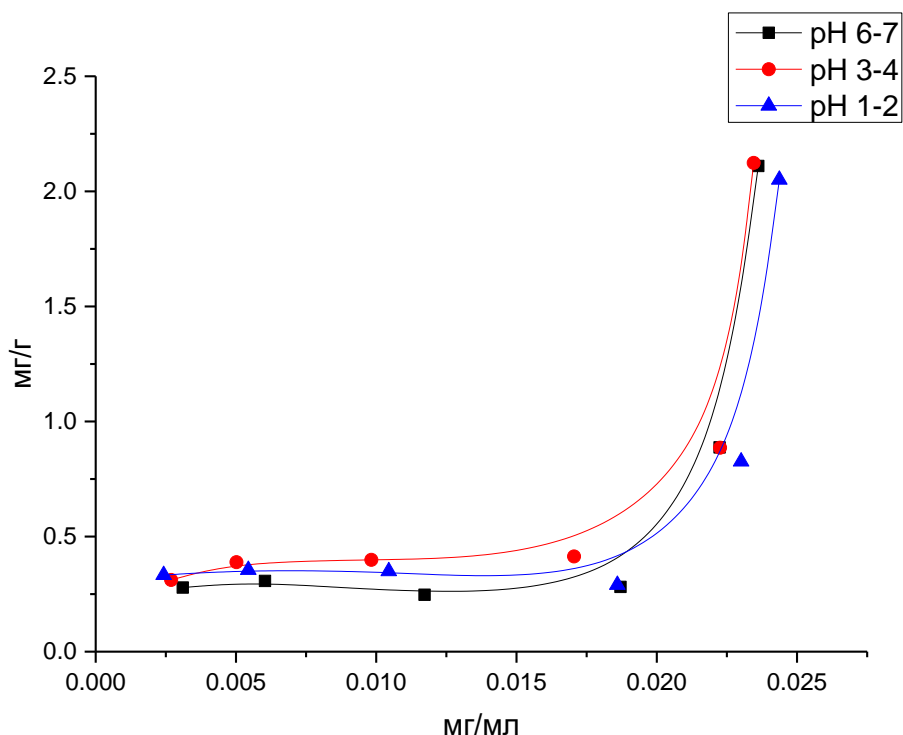


Рис. 10 – Изотермы адсорбции пластинки ПММ в растворах родамина с различным содержанием соляной кислоты

Хотя концентрация раствора родамина невелика, содержание родамина в матрице выше, чем без добавления соляной кислоты. При добавлении 5 капель раствора соляной кислоты (pH=3-4) содержание родамина в матрице было наибольшим, что свидетельствует о существенном влиянии концентрации соляной кислоты на процесс адсорбции.

Для изучения процесса адсорбции бриллиантового зеленого красителя на пластине ПММ необходимо исследовать изотерму его адсорбции. Как видно из рисунка 11, эта кривая соответствует кривой изотермы адсорбции II, также известной как сигмоидальная изотерма, он описывает процессы физадсорбции как для непористых, так и для макропористых твердых тел, так и для макропористых твердых веществ. Это означает, что адсорбированные частицы образуют монослой на поверхности адсорбента. Как только монослой завершен, другие частицы сначала адсорбируются на нем, образуя многослойность. Именно здесь мы видим характерное увеличение этой изотермы. По мере

увеличения концентрации раствор бриллиантового зеленого содержание бриллиантового зеленого в матрице ПММ сначала увеличивается, затем стабилизируется, а затем продолжает увеличиваться.

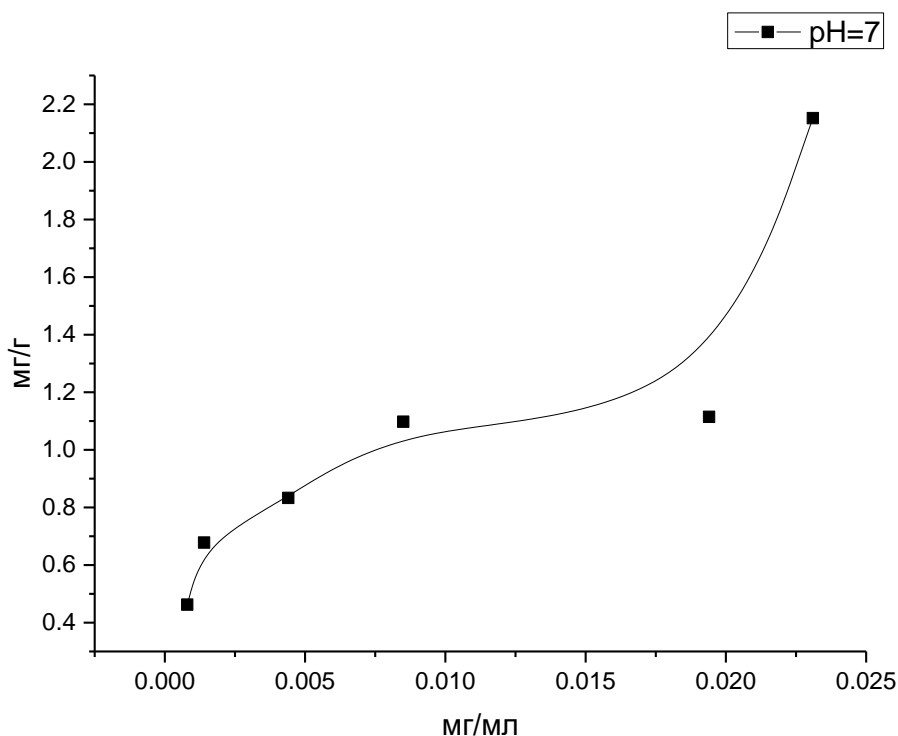
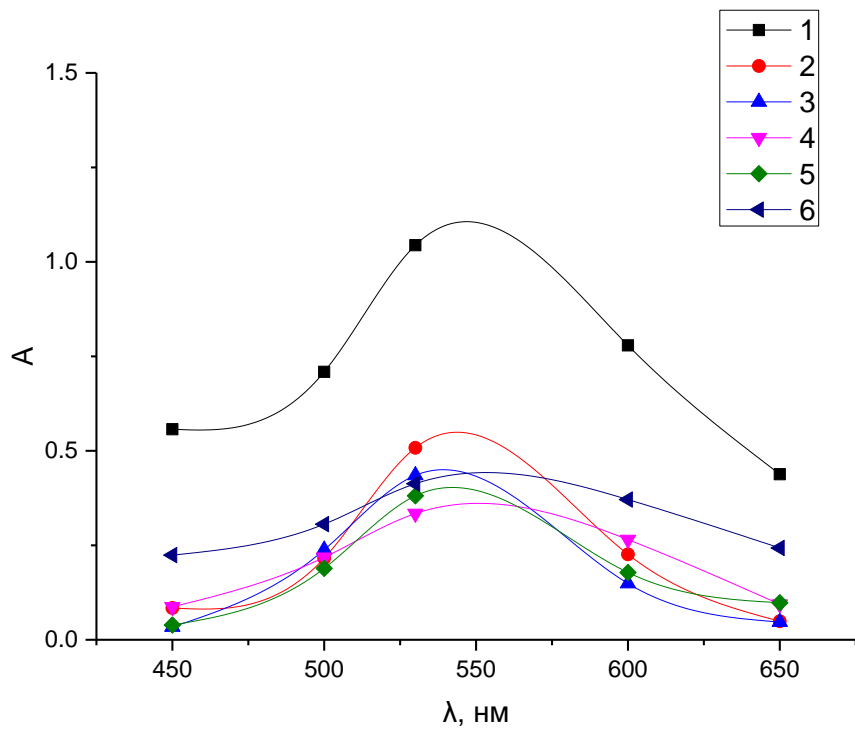
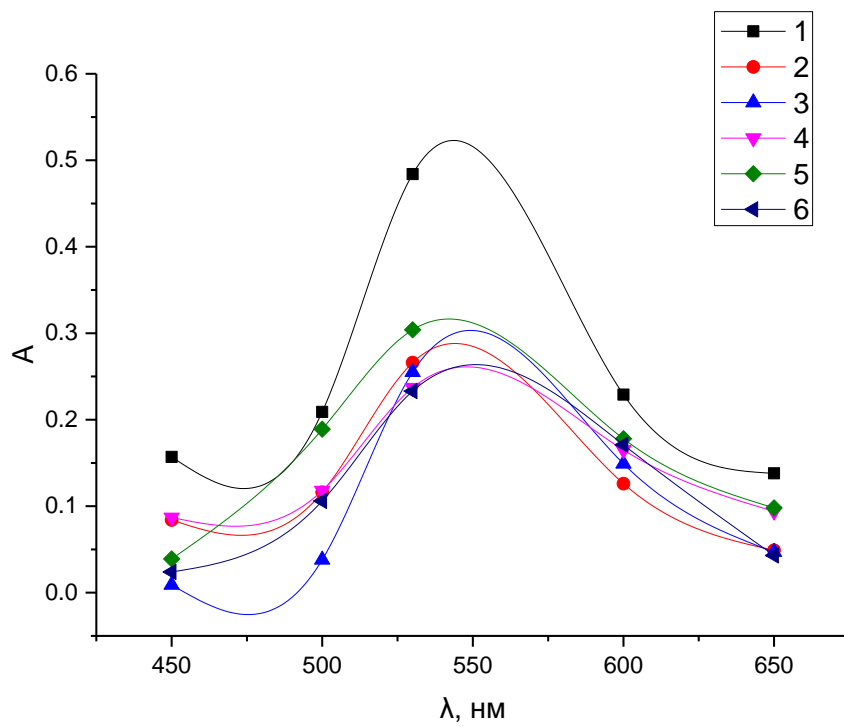


Рис. 11 – Изотерма адсорбции бриллиантового зеленого в ПММ в нейтральной среде

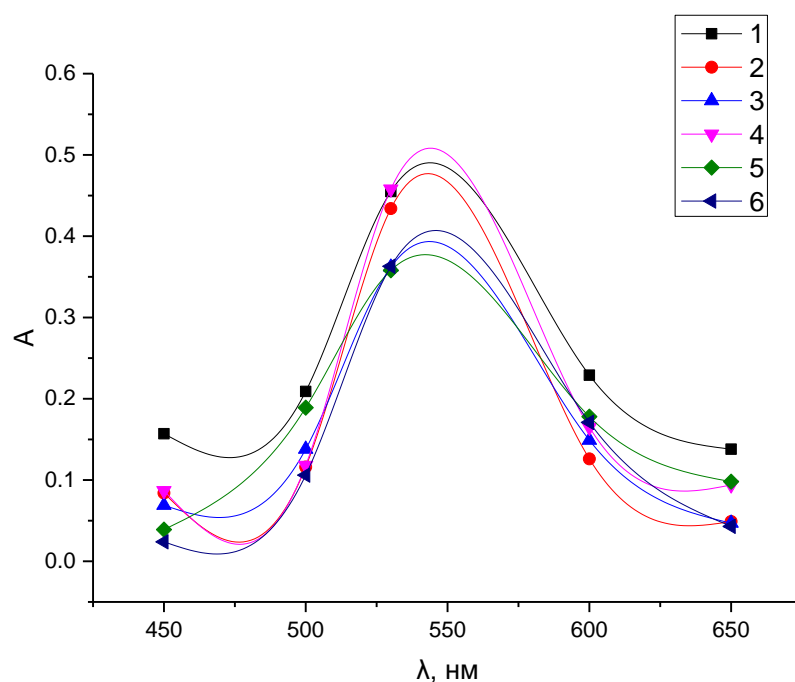
Для изучения влияния pH на адсорбцию красителя бриллиантового зеленого пластинами ПММ пластины помещали в раствор бриллиантового зеленого, содержащий различные концентрации соляной кислоты, и извлекали через 10 минут. Спектры пластин ПММ измерены при 630 нм, как показано на рисунке 12 (а, б, в). Бриллиантовый зеленый краситель является основным красителем, который нейтрализуется соляной кислотой с переходом в молекулярную форму. Результаты показывают, что существует тенденция к уменьшению сигнала в матрице при увеличении концентрации соляной кислоты. И при той же концентрации соляной кислоты в растворе красителя бриллиантового зеленого сигнал также имеет тенденцию к снижению.



a. pH 5-6



б. pH 3-4



в. рН 2

Рис. 12 – Спектры поглощения ПММ после сорбции из раствора бриллиантового зеленого различной концентрации 1-6, соответствующей разд.2.1.

Значение рН по-прежнему является одним из важных факторов для изотермической адсорбции. Поскольку краситель бриллиантовый зеленый является щелочным, при добавлении соляной кислоты происходит реакция кислотно-основной нейтрализации, в результате чего концентрация бриллиантового зеленого в растворе снижается, что приводит к увеличению адсорбционной способности адсорбента. Как показано на рисунке 13, при добавлении в раствор бриллиантового зеленого 1 капли соляной кислоты (рН=6-7) изотермическая кривая адсорбции соответствует изотерме типа I, адсорбент прочно фиксируется на пластине ПММ, и адсорбция прекращается, как только на поверхности не остается места для новых частиц. Поэтому при увеличении концентрации раствора бриллиантового зеленого количество бриллиантового зеленого на пластине ПММ увеличивается и постепенно стабилизируется. А изотермические кривые адсорбции растворов бриллиантового зеленого с 5 и 10 каплями соляной кислоты (рН=3-4 и рН=1-2) соответствуют изотерме II типа.

Содержание бриллиантового зеленого в пластинке ПММ постепенно увеличивается с концентрацией соляной кислоты.

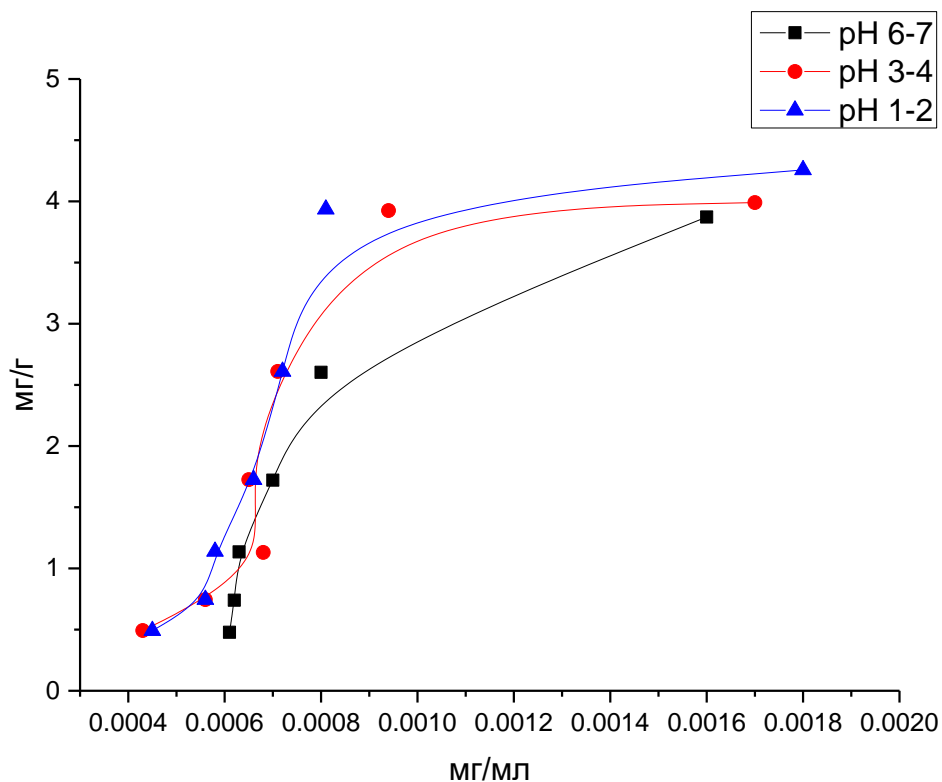


Рис. 13 – Изотермы адсорбции пластинки ПММ в растворах БЗ с различным содержанием соляной кислоты

Для изучения процесса адсорбции кристаллического фиолетового красителя на пластине ПММ необходимо исследовать изотерму его адсорбции. Как видно на рисунке 14, эта кривая соответствует кривой изотермы адсорбции III, относящейся к многослойной и физической адсорбции. Этот тип изотермы проявляется, когда адсорбционное взаимодействие твёрдого тела и адсорбата меньше, чем взаимодействие между адсорбатами.

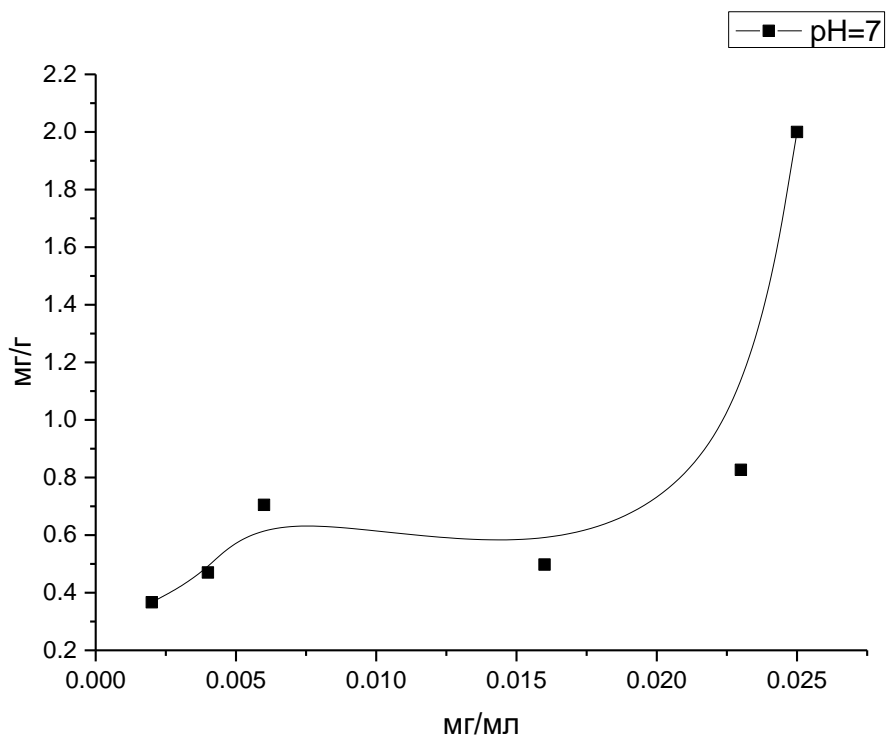
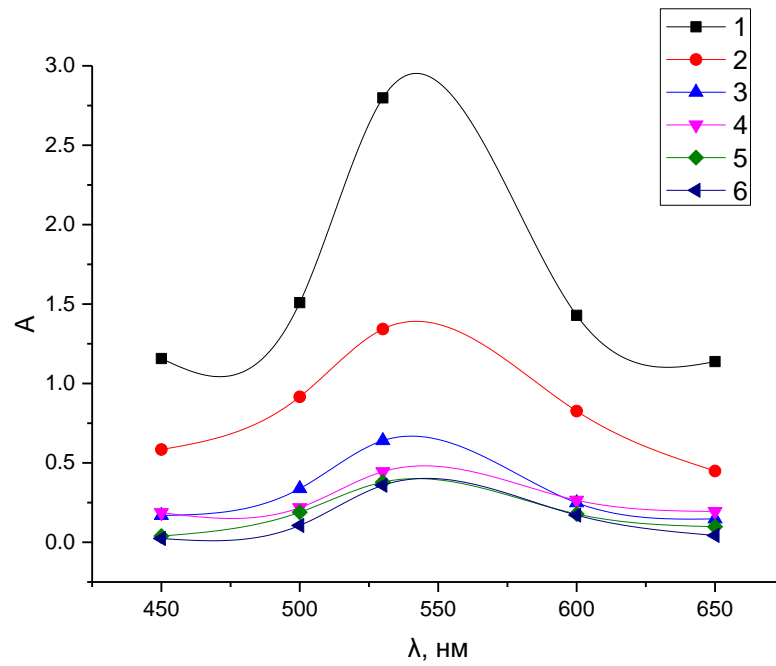


Рис. 14 – Изотерма адсорбции пластинки ПММ в растворе кристаллического фиолетового (без соляной кислоты)

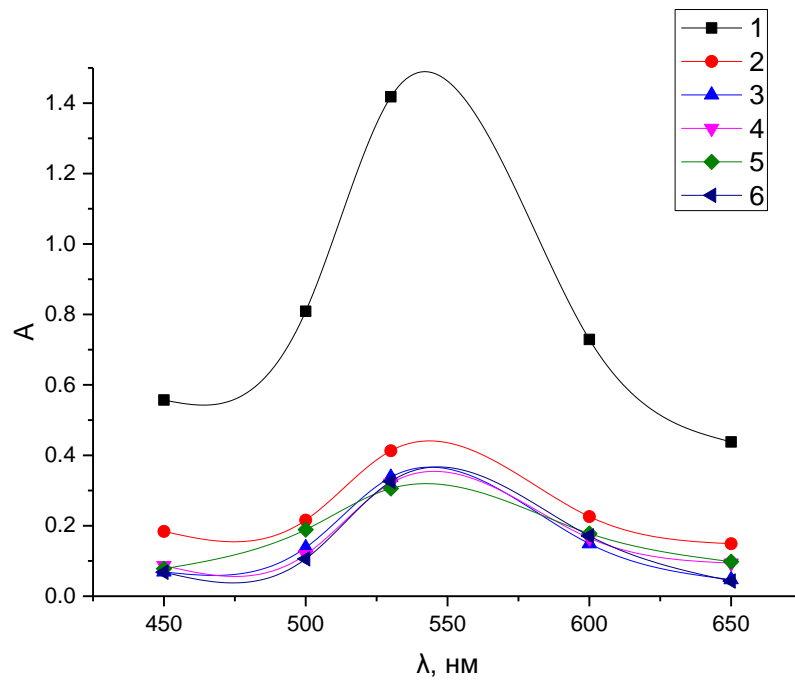
При более низких концентрациях раствора кристаллического фиолетового, сила между твёрдой поверхностью и адсорбированными молекулами относительно слаба, а сила между адсорбированными молекулами относительно велика, поэтому содержание кристаллического фиолетового в матрице ПММ очень мало. С увеличением концентрации в растворе увеличивалось содержание кристаллического фиолетового в матрице.

Для изучения влияния рН на адсорбцию красителя ПММ пластины помещали в раствор кристаллического фиолетового, содержащий различные концентрации соляной кислоты, и извлекали через 10 минут. Спектры пластин ПММ были измерены при 595 нм, как показано на рисунке 15 (а, б, в). Кристаллический фиолетовый также является основным красителем, и добавление соляной кислоты приводит к нейтрализации кислоты и основания, уменьшая количество кристаллического фиолетового в растворе. Результаты показывают, что существует тенденция к уменьшению сигнала в матрице при увеличении концентрации соляной кислоты. И при той же концентрации соляной

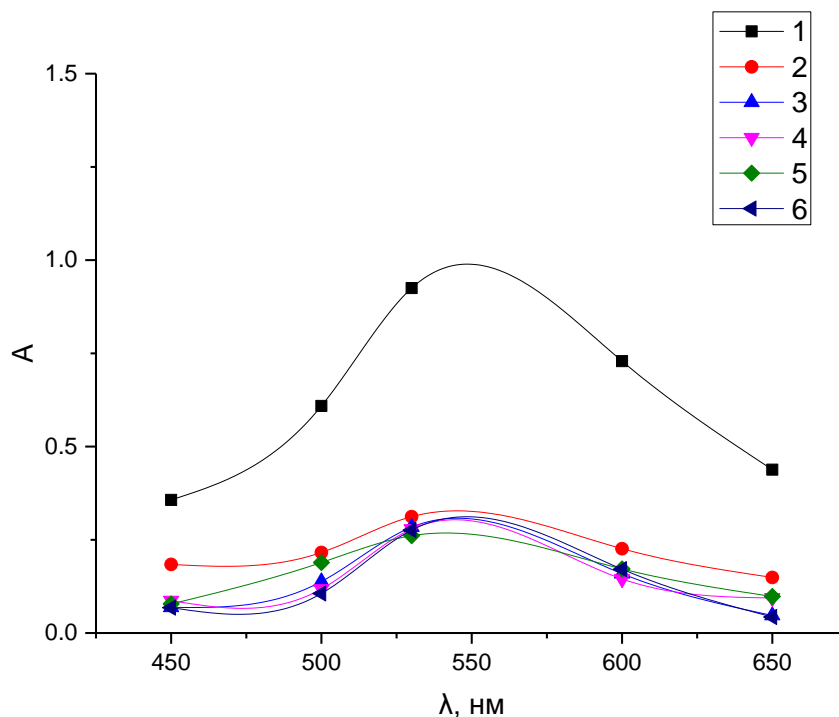
кислоты в растворе красителя кристаллического фиолетового сигнал также имеет тенденцию к снижению.



а. pH 6-7



б. pH 4-5



в. рН 2-3

Рис. 15 – Спектры поглощения ПММ после сорбции из раствора бриллиантового зеленого различной концентрации 1-6, соответствующей разд.2.1.

Значение рН по-прежнему является одним из важных факторов для изотермической адсорбции. Изотермическая кривая адсорбции кристаллического фиолетового красителя изменяется аналогично кривой адсорбции бриллиантового зеленого красителя. Как показано на рисунке 16, при добавлении в раствор кристаллического фиолетового с 1 каплям соляной кислоты (рН=6-7) изотермическая кривая сорбции соответствует изотерме типа I, адсорбент прочно фиксируется на пластине ПММ, и адсорбция прекращается, как только на поверхности не остается места для новых частиц.

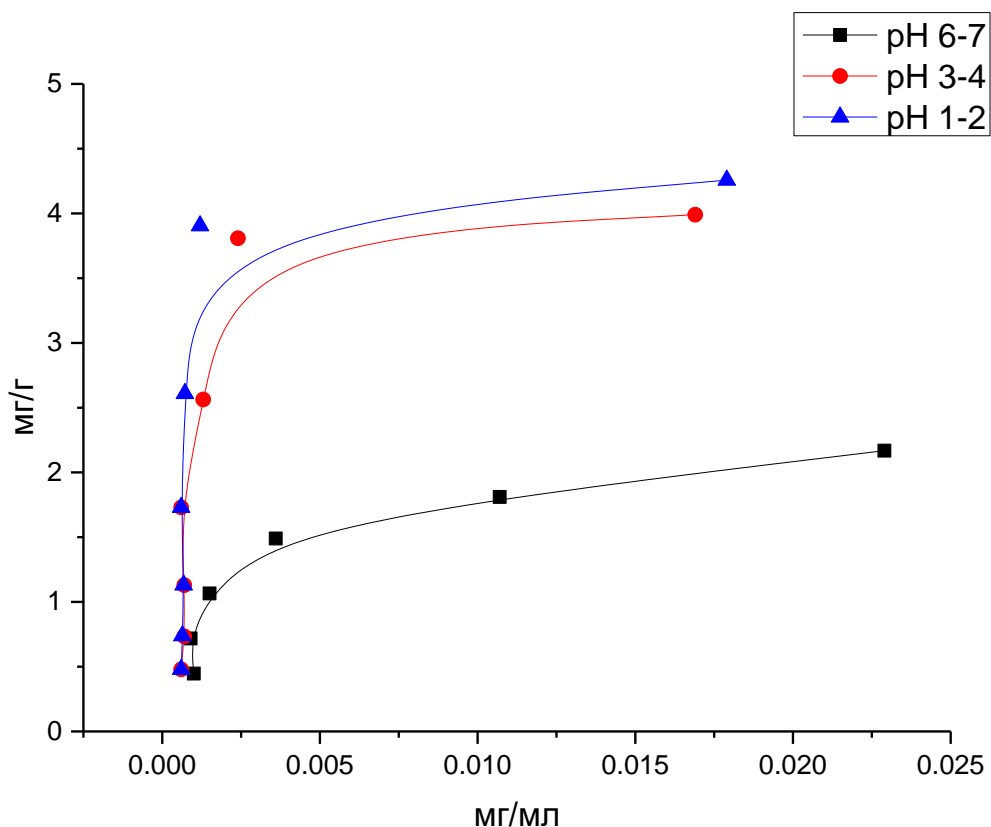


Рис. 16 – Изотермы адсорбции пластинки ПММ в растворах кристаллического фиолетового с различным содержанием соляной кислоты

Поэтому при увеличении концентрации раствора кристаллического фиолетового количество кристаллического фиолетового на пластине ПММ увеличивается и постепенно стабилизируется. Изотермические кривые адсорбции растворов кристаллического фиолетового с 5 и 10 каплями соляной кислоты (рН=3-4 и рН=1-2) соответствуют изотерме II типа. Содержание бриллиантового зеленого в пластинке ПММ постепенно увеличивается с концентрацией соляной кислоты.

Глава 4. Кинетика сорбции красителей на матрице ПММ

С точки зрения кинетики исследован механизм сорбции [42] с целью установления соотношения стадии процесса диффузии и стадии взаимодействия между катионами и функциональными группами сорбентов ПММ. Сорбция красителя на измеряемом субстрате в момент времени t рассчитывается по следующей формуле:

$$S_i = \frac{(A_0 - A_i) \cdot V}{m}, \quad (1)$$

где S_i - определяют поглощение матрицы адсорбированным красителем во времени t ; A_0 - начальное поглощение, $A_0=0$; A_i - поглощение в растворе во времени t ; V -объем матрицы, cm^3 ; m - масса матрицы, г.

Для изучения равновесного процесса матричных сорбционных красителей измерение рассчитывается по следующей формуле:

$$F = \frac{S_i}{S_n}, \quad (2)$$

где F – степень достижения равновесия в системе, $F=S_i/S_n$.

Содержание адсорбции красителя в единицу времени t сначала исследовали по формуле (1), экспериментальные данные представлены в Приложении А, таблицы 10, 11. Для выяснения связи между спектром поглощения и временем погружения после поглощения красителя матрицей получают его кинетическую кривую (рисунок 17). Можно видеть, что на ранней стадии поглощения адсорбция происходит относительно медленно, а по мере увеличения времени скорость адсорбции высока, и измеренный спектр поглощения очевиден. Это показывает, что диффузия красителя в начале происходит относительно медленно, а внутренняя диффузия на более поздней стадии происходит быстро. Условия равновесия процесса экстракции рассчитаны по формуле (2) по данным Приложении А, таблица 12.

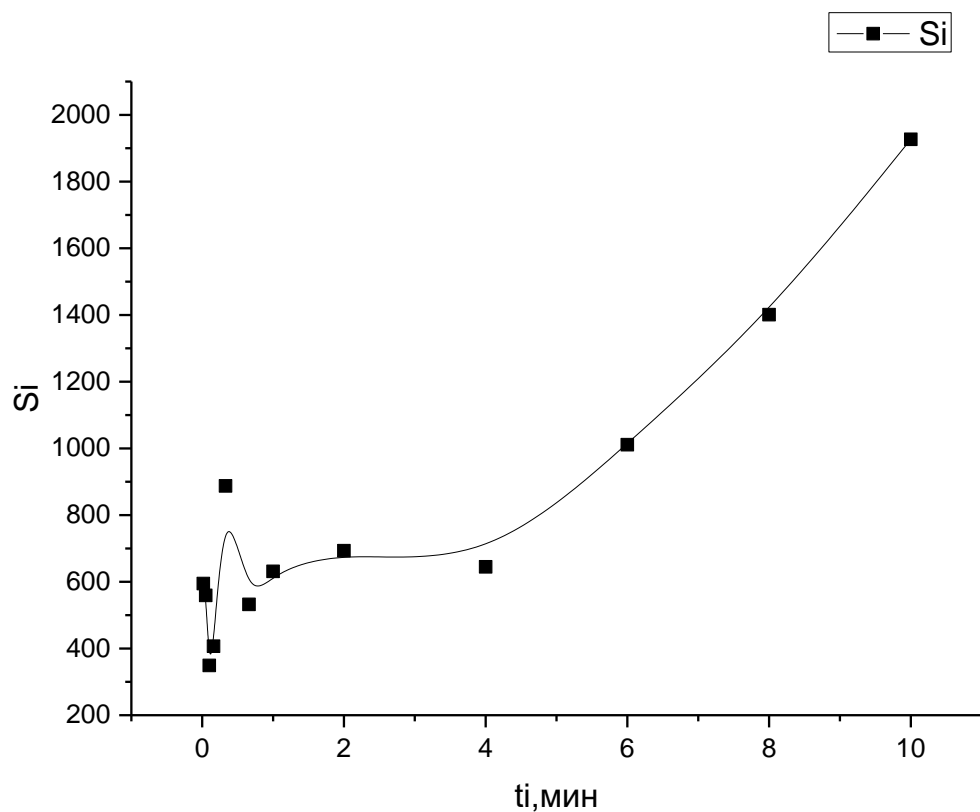


Рис. 17 – Кинетические кривые спектров поглощения красителей, абсорбированных матрицей ПММ

Кинетическая зависимость соответствует уравнениям процесса автодиффузии (рисунок 18). Однако по кривой $-\ln(1-F)-t_i$ было обнаружено, что кривая стала стремиться к прямой, не проходя через начало координат через 4 мин после начала эксперимента. Этот факт показывает, что процесс адсорбции красителя на матрице ПММ осуществляется по пути смешанной диффузии, которая контролируется внешней диффузией и внутренней диффузией.

Для иллюстрации соответствия между кинетическими кривыми и процессом внутренней диффузии была построена диаграмма кинетических кривых $S_i-t^{0.5}$ (рисунок 19). Результаты показывают, что с увеличением времени контакта матрицы с красителем измеренный спектр поглощения стремится к определенному отношению к значению $t^{0.5}$, что свидетельствует о наличии многостадийного эффекта во всей адсорбции процесс.

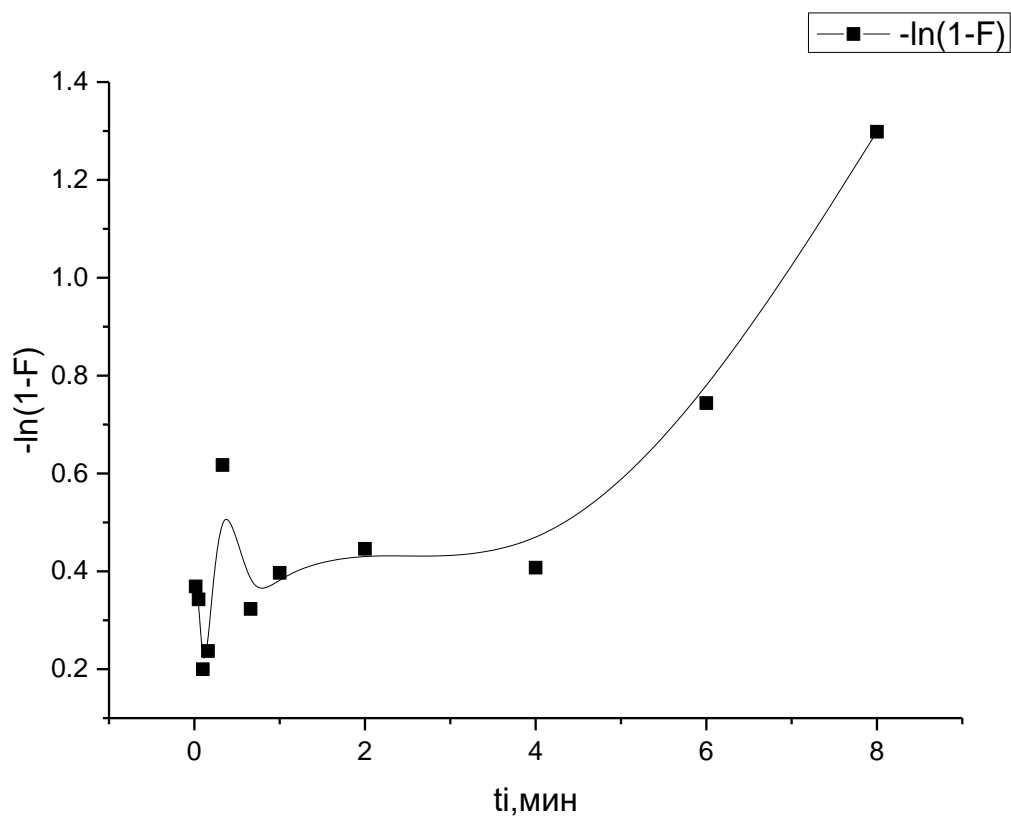


Рис. 18– Анаморфоз кинетической кривой равновесия спектра поглощения во времени при адсорбции красителей матрицей

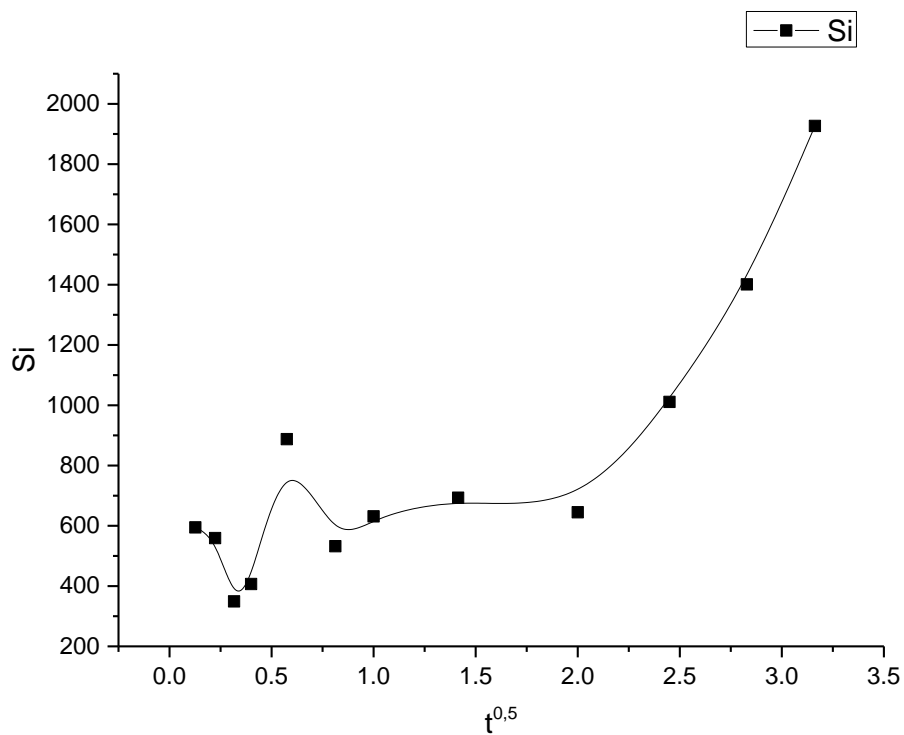


Рис. 19– Зависимость изменения экстракционной способности матрицы

Заключение

- В отсутствие соляной кислоты как родаминовый, так и кристаллический фиолетовый красители относятся к изотерме типа III, где количество красителя в матрице увеличивается по мере увеличения концентрации раствора красителя, тогда как бриллиантовый зеленый краситель относится к изотерме типа II, где количество красителя в матрице увеличивается, затем плато, а затем продолжает увеличиваться по мере увеличения концентрации раствора бриллиантового зеленого красителя.

- Поскольку все эти красители являются основными красителями, спектр поглощения красителя в каждой матрице имеет тенденцию к постепенному уменьшению. Напротив, для изотермической кривой адсорбции, по мере увеличения концентрации соляной кислоты, чем ниже значение pH, тем сильнее адсорбционная способность адсорбента, и, хотя концентрация раствора красителя низкая, содержание красителя в матрице выше, чем было бы без добавления соляной кислоты.

- Из кинетической кривой адсорбции красителя видно, что кривая не проходит через начало координат, а затем становится прямой линией, что свидетельствует о том, что диффузия красителя осуществляется в смешанном виде. краситель диффундирует по поверхности только на ранней стадии, а когда краситель входит в матрицу, очевидна внутренняя диффузия.

Глава 5. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

В настоящее время перспективность научного исследования определяется не столько масштабом открытия, оценить которое на первых этапах жизненного цикла высокотехнологического и ресурсоэффективного продукта бывает достаточно трудно, сколько коммерческой ценностью разработки. Оценка коммерческой ценности разработки является необходимым условием при поиске источников финансирования для проведения научного исследования и коммерциализации его результатов.

Целью раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» является определение перспективности и успешности научно-технического исследования, оценка его эффективности, уровня возможных рисков, разработка механизма управления и сопровождения конкретных проектных решений на этапе реализации. Для достижения обозначенной цели необходимо решить следующие задачи:

- организовать работы по научному исследованию;
- осуществить планирование этапов выполнения исследования;
- оценить коммерческий потенциал и перспективность проведения научного исследования;
- рассчитать бюджет проводимого научно-технического исследования;
- произвести оценку социальной и экономической эффективности исследования.

5.1 Предпроектный анализ

5.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Разработка, которой посвящена данная статья, заключается в использовании полимерной матрицы из полиметилметакрилата для адсорбции ксантеновых красителей и измерении флуоресцентных сигналов в пластинах ПММ с помощью УФ-спектрофотометра для обнаружения флуоресцентных трассеров в нефтяных буровых растворах.

Буровые растворы чрезвычайно важны для нефтяной промышленности во

время разведки нефти, и трассеры часто используются в буровых растворах для того, чтобы измерить степень распространения нефти, определить степень распространения нефти и снизить стоимость разведки нефти.

Целевым рынком для проекта являются компании или организации, занимающиеся разведкой нефти. Помимо этого, разработка может быть интересна научно-исследовательским институтам, для проведения различных испытаний.

5.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения позволяет провести оценку сравнительной эффективности научной разработки и определить направления для ее будущего повышения. Целесообразно проводить данный анализ с помощью оценочной карты, которая приведена в таблица 1.

Таблица 1 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Бф	Бк1	Бк2	Кф	Кк1	Кк2
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Точность определения	0,1	4	5	4	0,4	0,5	0,4
2. Экспрессность	0,2	5	2	2	1	0,4	0,4
3. Простота эксплуатации	0,1	5	4	4	0,5	0,4	0,4
Экономические критерии оценки эффективности							
1. Конкурентоспособность продукта	0,1	3	5	3	0,3	0,5	0,5
2. Стоимость оборудования	0,2	5	4	3	0,5	0,4	0,3
3. Затраты на подготовку специалиста	0,1	4	4	3	0,4	0,4	0,3
4. Стоимость реактивов	0,2	4	4	3	0,4	0,4	0,3
Итого	1	30	28	22	3,5	3,0	2,6

Позиция разработки и конкурентов оценивается по каждому показателю

по десятибалльной шкале, где 1 – наиболее слабая позиция, а 5 – наиболее сильная. Веса показателей, определяемые экспертным путем, в сумме должны составлять 1.

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum B_i \cdot \text{Б}_i$$

где: K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

B_i – вес показателя (в долях единицы);

Б_i – балл i -го показателя.

5.1.3 SWOT-анализ

SWOT (сильные и слабые стороны, возможности, угрозы) – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта. SWOT-анализ применяют для исследования внешней и внутренней среды проекта.

Результаты первого этапа SWOT-анализа представлены в таблице 2.

Таблица 2 – Матрица SWOT-анализа

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта:	Слабые стороны научно-исследовательского проекта:
	<p>С1. Простота применения и экспресс-способ</p> <p>С2. Адекватность разработки</p> <p>С3. Относительно невысокая денежная затратность проекта</p>	<p>Сл1. Отсутствие прототипа научной разработки</p> <p>Сл2. Отсутствие сертификации</p> <p>Сл3. Отсутствие бюджетного финансирования.</p>
Возможности:	<p>Простота применения и адекватность разработки может вызвать спрос на нее, а это в свою очередь увеличит количество спонсоров. Кроме того, унифицированность и адекватность разработки может уменьшить конкурентоспособность других разработок.</p> <p>Невысокая затратность проекта может привлечь больше</p>	<p>Инновационные инфраструктуры ТПУ могут оказать помощь в финансировании проекта.</p>

	сотрудников и исполнителей.	
У1. Отсутствие спроса на новые технологии У2. Значимая конкуренция У3. Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования со стороны государства	В силу того, что в данной разработке используется более новая информация наряду со старой, то это может повысить спрос и конкуренцию разработки. В силу малой затратности проекта представляется возможность вложения дополнительных денежных средств в другие услуги, такие как сертификация.	Отсутствие прототипа научной разработки говорит об отсутствии спроса на новые технологии и отсутствии конкуренции проекта. Несвоевременное финансирование научного исследования приведет к невозможности получения сертификации.

После того как сформулированы четыре области SWOT переходят к реализации второго этапа, который состоит в выявлении соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды. Это соответствие или несоответствие должны помочь выявить степень необходимости проведения стратегических изменений.

В рамках данного этапа необходимо построить интерактивную матрицу проекта. Ее использование помогает разобраться с различными комбинациями взаимосвязей областей матрицы SWOT. Каждый фактор помечается либо знаком «+» – сильное соответствие сильных сторон возможностям, либо знаком «-» – слабое соответствие; «0» – если есть сомнения в том, что поставить «+» или «-». Пример интерактивной матрицы проекта представлен в табл. 3.

Таблица 3 - Интерактивная матрица проекта

		Сильные стороны проекта		
		С1.	С2.	С3.
Возможности проекта	В1.	-	-	+
	В2.	-	-	-
	В3.	+	+	-
		Сильные стороны проекта		
		С1.	С2.	С3.
Угрозы	У1.	0	+	-
	У2.	+	+	+
	У3.	-	-	-

		Слабые стороны проекта		
Возможности проекта		Сл1.	Сл2.	Сл3.
	V1.	-	-	+
	V2.	-	-	+
	V3.	+	+	-
		Слабые стороны проекта		
Угрозы		Сл1.	Сл2.	Сл3.
	У1.	+	+	0
	У2.	0	+	-
	У3.	-	+	+

5.1.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации

Для определения стадии жизненного цикла научной разработки необходимо оценить степень ее готовности к коммерциализации и выяснить уровень собственных знаний для ее проведения (или завершения). Оценка степени готовности представлена в таблице 4.

Таблица 4 – Оценка степени готовности проекта к коммерциализации

№ п/п	Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
1	Определен имеющийся научно-технический задел	4	4
2	Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	4	3
3	Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	4	5
4	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	3	4
5	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	3	3
6	Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	2	3

7	Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	2	3
8	Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	2	4
9	Определены пути продвижения научной разработки на рынок	3	3
10	Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	2	2
11	Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	1	1
12	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	1	1
13	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	2	2
14	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	2	2
15	Проработан механизм реализации научного проекта	2	3
	ИТОГО БАЛЛОВ	37	43

При проведении анализа по таблице 4, приведенной выше, по каждому показателю ставится оценка по пятибалльной шкале. При этом система измерения по каждому направлению (степень проработанности научного проекта, уровень имеющихся знаний у разработчика) отличается. Так, при оценке степени проработанности научного проекта 1 балл означает не проработанность проекта, 2 балла – слабую проработанность, 3 балла – выполнено, но в качестве не уверен, 4 балла – выполнено качественно, 5 баллов – имеется положительное заключение независимого эксперта. Для оценки уровня имеющихся знаний у разработчика система баллов принимает следующий вид: 1 означает не знаком или мало знаю, 2 – в объеме теоретических знаний, 3 – знаю теорию и практические примеры применения, 4 – знаю теорию и самостоятельно выполняю, 5 – знаю теорию, выполняю и могу консультировать.

Оценка готовности научного проекта к коммерциализации (или уровень имеющихся знаний у разработчика) определяется по формуле:

$$B_{\text{сум}} = \sum B_i$$

где: $B_{\text{сум}}$ – суммарное количество баллов по каждому направлению;

B_i – балл по i -му показателю.

В результате можно сделать вывод, что перспективность разработки научного проекта и уровень имеющихся знаний у разработчика находятся на одном уровне и имеют среднюю перспективность.

5.1.5 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования

В качестве метода коммерциализации выбирается торговля патентными лицензиями и инжиниринг. Торговля патентными лицензиями подразумевает передачу третьим лицам права использования объектов интеллектуальной собственности на лицензионной основе и тем самым будут получены средства для продолжения дальнейших научных исследований. Выбор данного метода коммерциализации будет способствовать успешному продвижению разработки на той стадии, на которой находится научный проект. Также в качестве метода коммерциализации выбран инжиниринг, в связи с тем что данный метод предполагает предоставление на основе договора инжиниринга одной стороной, именуемой консультантом, другой стороне, именуемой заказчиком, комплекса или отдельных видов инженерно-технических услуг, связанных с проектированием, строительством и вводом объекта в эксплуатацию, с разработкой новых технологических процессов на предприятии заказчика, усовершенствованием имеющихся производственных процессов вплоть до внедрения изделия в производство и даже сбыта продукции.

5.2 Инициация проекта

5.2.1 Цели и результат проекта

Группа процессов инициации состоит из процессов, которые выполняются для определения нового проекта или новой фазы существующего.

В рамках процессов инициации определяются изначальные цели и содержание и фиксируются изначальные финансовые ресурсы. Определяются внутренние и внешние заинтересованные стороны проекта, которые будут взаимодействовать, и влиять на общий результат научного проекта. Данная информация закрепляется в Уставе проекта.

Информация о заинтересованных сторонах проекта, которые активно участвуют в проект или интересы которых могут быть затронуты в результате завершения проекта представлены в таблице 5.

Таблица 5 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
НИ ТПУ	Удовлетворение потребностей страны в высококвалифицированных специалистов
Разработчик проекта (магистрант)	Ксантеновые красители адсорбировались на матричных пластинах из полиметилметакрилата, а их характеристики поглощения анализировались путем измерения спектров поглощения в матрице с помощью УФ-спектрофотометрии.
Измерение спектров поглощения	Измерение спектров поглощения в матрице и растворе с помощью УФ-спектрофотометра

В таблице 6 представлена информация о иерархии целей проекта и критериях достижения целей.

Таблица 6 – Цели и результат проекта

Цели проекта:	Ксантеновые красители адсорбировались на матричных пластинах из полиметилметакрилата, а их характеристики поглощения анализировались путем измерения спектров поглощения в матрице с помощью УФ-спектрофотометрии.
Ожидаемые результаты проекта:	Ксантеновые красители адсорбировались на матричных пластинах из полиметилметакрилата, а их характеристики поглощения анализировались путем измерения спектров поглощения в матрице с помощью УФ-спектрофотометрии.

Критерии приемки результата проекта:	Адекватность результатов
Требования к результату проекта:	Требования:
	Исследование твердофазной адсорбции растворов ксантенового красителя на матричных пластинах из полиметилметакрилата и измерение спектров поглощения в матрице.
	Изучить влияние pH на адсорбцию ксантеновых красителей субстратом в процессе адсорбции.
	Определите метод измерения спектра поглощения, используя УФ-спектрофотометрию.

5.2.2 Организационная структура проекта

Следующим шагом является определение следующих вопросов: кто будет входить в рабочую группу данного проекта, определить роль каждого участника в данном проекте, а также прописать функции, выполняемые каждым из участников и их трудозатраты. Данная информация представлена в таблице 7.

Таблица 7 – Рабочая группа проекта

№ п/п	ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудозатраты, час.
1	Гавриленко М.А., ТПУ, ОХИ, проф., к.х.н.	Руководитель проекта	Реализация проекта в пределах заданных ограничений по ресурсам, координация деятельности участников проекта	150
2	Мананкова А.А., ТПУ, к.х.н.	Эксперт проекта	Консультирование по выполнению английской части	5
3	Креницына З.В., ТПУ, доцент, к.э.н.	Эксперт проекта	Консультирование по выполнению раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»	5
4	Сечин А.А., ТПУ, доцент. к.т.н.	Эксперт проекта	Консультирование по выполнению раздела «Социальная ответственность»	5

5	Тань Минь, ТПУ, ОХИ, магистрант	Исполнитель по проекту	Исследование формирования флуориметрического сигнала в объеме полиметилметакрилатной матрицы	800
ИТОГО				965

5.2.3 Ограничения и допущения проекта

Ограничения проекта – это все факторы, которые могут послужить ограничением степени свободы участников команды проекта, а также «границы проекта» - параметры проекта или его продукта, которые не будут реализованных в рамках данного проекта. Эту информацию представить в табличной форме (табл. 8).

Таблица 8 – Ограничения проекта

Фактор	Ограничения
1. Бюджет проекта	1000000 рублей
2. Источник финансирования	НИТПУ
3. Сроки проекта	15.11.2021 – 31.05.2023
3.1 Фактическая дата утверждения плана управления проектом	15.11.2021
3.2 Плановая дата завершения проекта	31.05.2023

5.3 Планирование управления научно-техническим проектом

5.3.1 Иерархическая структура работ проекта

Группа процессов планирования состоит и процессов, осуществляемых для определения общего содержания работ, уточнения целей и разработки последовательности действий, требуемых для достижения данных целей.

План управления научным проектом должен включать в себя следующие элементы:

- иерархическая структура работ проекта;

- контрольные события проекта;
- план проекта;
- бюджет научного исследования.

Иерархическая структура работ (ИСР) – детализация укрупненной структуры работ. В процессе создания ИСР структурируется и определяется содержание всего проекта. На рисунке 17 представлен шаблон иерархической структуры.



Рис. 20 – Иерархическая структура по магистерской диссертации

5.3.2 План проекта

В рамках планирования научного проекта построены календарный и сетевой графики проекта. Календарный план проекта представлен в таблице 9.

Таблица 9 – Календарный план проекта

Код раб.	Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окон-я работ	Состав участников (ФИО исполн.)
1	Утверждение проекта	46	15.11.2021	31.12.2021	Гавриленко М.А.
2	Изучение литературы,	45	01.01.2022	15.02.2022	Тань Минь,

	составление литературного обзора				Гавриленко М.А.
3	Проведение физ-мех испытаний	393	16.02.2022	15.03.2023	Тань Минь
4	Обсуждение полученных результатов	25	16.03.2023	10.4.2023	Тань Минь
5	Подготовка отчета	50	11.4.2023	31.5.2023	Тань Минь
6	Защита магистерской диссертации по теме проекта	13	01.6.2023	14.6.2023	Тань Минь
ИТОГО:		572	15.11.2021	14.06.2023	

Диаграмма Ганта – это тип столбчатых диаграмм (гистограмм), который используется для иллюстрации календарного плана проекта, на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ (таблица10).

Таблица 10 – Календарный план график проведения НИОКР по теме

Наименование этапа	Т, дней	2021		2022										2023					
		Ноябрь	Декабрь	Январь	Февраль	Март	Апрель	Май	Июнь	Сентябрь	Октябрь	Ноябрь	Декабрь	Январь	Февраль	Март	Апрель	Май	Июнь
Составление технического задания		■																	
Изучение литературы				■				■									■		
Экспериментальная часть					■	■	■	■	■					■	■	■			
Обработка результатов																	■	■	■



– магистрант (Тань Минь)



– руководитель (Гавриленко М.А.)

5.4 Бюджет научного исследования

В процессе формирования бюджета, планируемые затраты группируются по статьям, представленным в таблице 11.

Таблица 11 – Группировка затрат по статьям

Вид работ	Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов), покупные изделия и полуфабрикаты	Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ
Получение пластин полиметакрилатной матрицы (ПММ)	Метилметакрилат (ММА)	Круглодонная колба, плитка с магнитной мешалкой, обратный холодильник, штатив с лапками
Иммобилизация катиона металла в пластине полиметакрилатной матрицы (ПММ)	полиметакрилатная матрица (ПММ)	Лабораторный шейкер, спектрофотометр, дозатор, пробки
Перенос цветных реакций на ксантеновых красителях в полимерную матриц	Пластины ПММ, вода	Лабораторный шейкер, спектрофотометр, дозатор, пробки
Определение влияния рН растворов на процесс переноса цветных реакций в полимерную матрицу	Пластины ПММ, вода, Соляная кислота	Лабораторный шейкер, спектрофотометр, дозатор, пробки
Определение спектров поглощения различных растворов ксантеновых красителей	Пластины ПММ, вода	Лабораторный шейкер, спектрофотометр, дозатор, пробки

Для учета затрат на приобретение всех видов материалов, комплектующих изделий и полуфабрикатов, производится расчет стоимости материальных затрат по действующим прейскурантам или договорным ценам.

Результаты представлены в таблице 12.

Таблица 12 – Сырье, материалы и комплектующие изделия

Наименование	Кол-во	Цена за единицу с НДС, руб	Сумма, руб
Полиметилметакрилат	10г	144	144
Родамин Ж	1 шт.	1168	1168
Бриллиантовый зеленый	1 шт.	450	450
Кристаллический фиолетовый	1 шт.	240	240
Соляная кислота	1 шт.	278	278
50 мл стакан	10 шт.	1500	1500
Стеклянная палочка	10 шт.	2	20
Пластиковая капельница	2 шт.	60	120
Перчатки	30 шт.	25	750
Халат	1 шт.	1000	1000
Всего за материалы			5670
Транспортно-заготовительные расходы (3-5%)			170
Итого по статье С _м			5840

Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ

Далее описаны все затраты, связанные с приобретением специального оборудования, необходимого для проведения работ по конкретной теме и занесены в таблицу 13.

Таблица 13 – Расчет затрат по статье «Спецоборудование для научных работ»

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, руб.	Общая стоимость оборудования, руб.
1	Спектрофотометр Evolution 201	1	335150	330000
2	Центрифуга лабораторная	1	16640	16640
3	Лабораторный шейкер	1	22700	22700
ИТОГО				369340

Расчет основной заработной платы

Величина расходов по заработной плате определяется исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы оплаты труда. Расчет основной заработной платы сводится в таблице 14.

$$C_{ЗП} = З_{ОСН} + З_{ДОП},$$

где: $З_{ОСН}$ – основная заработная плата;

$З_{ДОП}$ – дополнительная заработная плата

Основная заработная плата ($З_{ОСН}$) руководителя (лаборанта, инженера) от предприятия (при наличии руководителя от предприятия) рассчитывается по следующей формуле:

$$З_{ОСН} = З_{ДН} \cdot T_{раб},$$

где: $З_{ОСН}$ – основная заработная плата одного работника;

$T_{раб}$ – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн.;

$З_{ДН}$ – среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{дн} = \frac{Z_M \cdot M}{F_D},$$

где: Z_M – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

при отпуске в 24 раб. дня $M = 11,2$ месяца, 5-дневная неделя;

при отпуске в 48 раб. дней $M = 10,4$ месяца, 6-дневная неделя;

F_D – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн.

Таблица 14 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Магистрант
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
- выходные дни	52-8	52-4
- праздничные дни	14	0
Потери рабочего времени		
- отпуск	56	28
- невыходы по болезни	0	0
Действительный годовой фонд рабочего времени	235	281

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_M = Z_б \cdot (k_{ПР} + k_D) \cdot k_P,$$

где: $Z_б$ – базовый оклад, руб.;

$k_{ПР}$ – премиальный коэффициент, (определяется Положением об оплате труда);

k_D – коэффициент доплат и надбавок (в НИИ и на промышленных

предприятиях – за расширение сфер обслуживания, за профессиональное мастерство, за вредные условия: определяется Положением об оплате труда);

k_p – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Основная заработная плата руководителя (от ТПУ) рассчитывается на основании отраслевой оплаты труда. Отраслевая система оплаты труда в ТПУ предполагает следующий состав заработной платы:

1) оклад – определяется предприятием. В ТПУ оклады распределены в соответствии с занимаемыми должностями, например, ассистент, ст. преподаватель, доцент, профессор. Базовый оклад $Z_б$ определяется исходя из размеров окладов, определенных штатным расписанием предприятия.

2) стимулирующие выплаты – устанавливаются руководителем подразделений за эффективный труд, выполнение дополнительных обязанностей и т.д.

3) иные выплаты; районный коэффициент.

Расчёт основной заработной платы приведён в таблице 15.

Таблица 15 – Расчёт основной заработной платы

Исполнители	$Z_б$, руб.	$K_{пр}$	K_d	K_p	Z_m , руб.	$Z_{дн}$, руб.	$T_{раб.}$, раб. дн.	$Z_{осн.}$, руб.
Руководитель	39300	1,00	0,014	1,30	26891,28	1381,57	235	324669
Магистрант	26200	-	-	1,30	3250,00	166,97	281	46918,5

Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала

Дополнительная заработная плата рассчитывается исходя из 10-15% от

основной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнении темы:

$$Z_{\text{доп}} = K_{\text{доп}} \cdot Z_{\text{осн}}$$

где: $Z_{\text{доп}}$ – дополнительная заработная плата, руб.;

$K_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной зарплаты;

$Z_{\text{осн}}$ – основная заработная плата, руб.

В таблице 16 приведена форма расчёта основной и дополнительной заработной платы.

Таблица 16– Заработная плата исполнителей НТИ

Заработная плата	Руководитель	Магистрант
Основная зарплата, руб.	324669	46918,5
Дополнительная зарплата, руб.	32466,9	4691,8
Итого по статье $C_{\text{зп}}$, руб.	357135,9	51610,3

Отчисления на социальные нужды

Статья включает в себя отчисления во внебюджетные фонды.

$$C_{\text{внеб.}} = k_{\text{внеб.}} (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп.}}) = 0,302 \cdot (324669 + 32466,9) = 107855 \text{руб.}$$

где: $k_{\text{внеб}}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.).

Накладные расходы

Накладные расходы составляют 80-100 % от суммы основной и дополнительной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнении темы.

Расчет накладных расходов ведется по следующей формуле:

$$C_{накл} = k_{накл} (Z_{осн} + Z_{доп.}),$$

где: $k_{накл}$ – коэффициент накладных расходов.

$$C_{накл} = 0,3 \cdot (324669 + 32466,9) = 107140 \text{руб.}$$

Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Расчитанная величина затрат научно-исследовательской работы является основой для формирования бюджета затрат проекта, который при формировании договора с заказчиком защищается научной организацией в качестве нижнего предела затрат на разработку научно-технической продукции.

Затраты по статьям						
Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов), покупные изделия и полуфабрикаты	Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	Основная заработная плата	Дополнительная заработная плата	Накладные расходы	Отчислен на социальные нужды	Итого плановая себестоимость
5840	369340	371587,5	37158,7	107140	107855	998921,2
5000	550000	550000	55000	165000	166100	1491100
5900	1000000	300000	30000	90000	90600	1516500

Организационная структура проекта

В практике используется несколько базовых вариантов организационных

структур: функциональная, проектная, матричная (табл. 17). Для научного проекта выбираем проектную организационную структуру.

Таблица 17 – Организационная структура проекта

Критерии выбора	Функциональная	Матричная	Проектная
Степень неопределенности условий реализации проекта	Низкая	Высокая	Высокая
Технология проекта	Стандартная	Сложная	Новая
Сложность проекта	Низкая	Средняя	Высокая
Взаимозависимость между отдельными частями проекта	Низкая	Средняя	Высокая
Критичность фактора времени (обязательства по срокам завершения работ)	Низкая	Средняя	Высокая
Взаимосвязь и взаимозависимость проекта от организаций более высокого уровня	Высокая	Средняя	Низкая

План управления коммуникациями проекта

План управления коммуникациями, отражающий требования к коммуникациям со стороны участников проекта представлен в таблице 18.

Таблица 18 – План управления коммуникациями

№ п/п	Какая информация передается	Кто передает информацию	Кому передается информация	Когда передает информацию
1	Статус проекта	Руководитель проекта	Представителю заказчика	Ежеквартально (первая декада квартала)
2	Информация о текущем состоянии научного проекта	Участники проекта	Исполнителю проекта	Еженедельно (пятница)
3	Еженедельный отчет и информация о проведенных внештатных работах	Исполнитель проекта	Руководителю проекта	Не позже дня контрольного события по плану производства

5.5 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности

5.5.1 Оценка абсолютной эффективности исследования

В основе проектного подхода к инвестиционной деятельности предприятия лежит принцип денежных потоков (cashflow). Особенностью является его прогнозный и долгосрочный характер, поэтому в применяемом подходе к анализу учитываются фактор времени и фактор риска. Для оценки общей экономической эффективности используются следующие основные показатели:

- чистая текущая стоимость (NPV);
- индекс доходности (PI);
- внутренняя ставка доходности (IRR);
- срок окупаемости (DPP).

5.5.2 Чистая текущая стоимость (NPV)

Чистая текущая стоимость (NPV) – это показатель экономической эффективности инвестиционного проекта, который рассчитывается путём дисконтирования (приведения к текущей стоимости, т.е. на момент инвестирования) ожидаемых денежных потоков (как доходов, так и расходов).

Расчёт NPV осуществляется по следующей формуле:

$$NPV = \sum_{t=1}^n \frac{ЧДП_{опt}}{(1+i)^t} - I_0$$

где: $ЧДП_{опt}$ – чистые денежные поступления от операционной деятельности;

I_0 – разовые инвестиции, осуществляемые в нулевом году;

t – номер шага расчета ($t= 0, 1, 2 \dots n$)

n – горизонт расчета;

i – ставка дисконтирования (желаемый уровень доходности инвестируемых средств).

Расчёт NPV позволяет судить о целесообразности инвестирования денежных средств. Если $NPV > 0$, то проект оказывается эффективным.

Расчет чистой текущей стоимости представлен в таблице 19. При расчете рентабельность проекта составляла 10 %, амортизационное отчисления 10 %.

Таблица 19 – Расчет чистой текущей стоимости по проекту в целом

№	Наименование показателей	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1	Выручка от реализации, руб.	0,0	1085023,2	1085023,2	1085023,2	1085023,2
2	Итого приток, руб.	0,0	1085023,2	1085023,2	1085023,2	1085023,2
3	Инвестиционные издержки, руб.	-986384,7	0,0	0,0	0,0	0,0
4	Операционные затраты, руб.	0,0	197276,9	197276,9	197276,9	197276,9
5	Налогооблагаемая прибыль, руб.	0,0	887746,2	887746,2	887746,2	887746,2
6	Налоги 20 %, руб.	0,0	177549,2	177549,2	177549,2	177549,2
7	Итого отток, руб.	-986384,7	374826,2	374826,2	374826,2	374826,2
8	Чистая прибыль, руб.	0,0	710197,0	710197,0	710197,0	710197,0
9	Чистый денежный поток (ЧДП), руб.	-986384,7	808835,5	808835,5	808835,5	808835,5
10	Коэффициент дисконтирования (КД)	1,0	0,909	0,826	0,751	0,683
11	Чистый дисконтированный денежный поток (ЧДД), руб.	-986384,7	735231,4	668098,1	607435,4	552434,6
12	$\sum \text{ЧДД}$, руб.	2563199,6				
13	Итого NPV, руб.	1576814,9				

Коэффициент дисконтирования рассчитан по формуле:

$$КД = \frac{1}{(1+i)^t},$$

где: i – ставка дисконтирования, 10 %;

t – шаг расчета.

Таким образом, чистая текущая стоимость по проекту в целом составляет 1576814,9 рублей, что позволяет судить об его эффективности.

5.5.3 Индекс доходности (PI)

Индекс доходности (PI) – показатель эффективности инвестиции, представляющий собой отношение дисконтированных доходов к размеру инвестиционного капитала. Данный показатель позволяет определить инвестиционную эффективность вложений в данный проект. Индекс доходности рассчитывается по формуле:

$$PI = \sum_{t=1}^n \frac{ЧДП_t}{(1+i)^t} / I_0$$

где: ЧДД - чистый денежный поток, млн. руб.;

I_0 – начальный инвестиционный капитал, млн. руб.

Таким образом PI для данного проекта составляет:

$$PI = \frac{2563199,6}{986384,7} = 2,60$$

Так как $PI=2,60 > 1$, следовательно, проект эффективен

5.5.4 Внутренняя ставка доходности (IRR)

Значение ставки, при которой NPV обращается в нуль, носит название «внутренней ставки доходности» или IRR. Формальное определение «внутренней ставки доходности» заключается в том, что это та ставка дисконтирования, при которой суммы дисконтированных притоков денежных

средств равны сумме дисконтированных оттоков или $NPV = 0$. По разности между IRR и ставкой дисконтирования i можно судить о запасе экономической прочности инвестиционного проекта. Чем ближе IRR к ставке дисконтирования i , тем больше риск от инвестирования в данный проект.

$$\sum_{t=1}^n \frac{ЧДП_{опт}}{(1+IRR)^t} = \sum_{t=0}^n \frac{I_t}{(1+IRR)^t}$$

Между чистой текущей стоимостью (NPV) и ставкой дисконтирования (i) существует обратная зависимость. Эта зависимость представлена в таблице 20 и на рисунке 2.

Таблица 20 - Зависимость NPV от ставки дисконтирования

№	Наименование показателя	0	1	2	3	4	Сумма, руб.
1	Чистые денежные потоки, руб.	-986384,7	808835,5	808835,5	808835,5	808835,5	
2	Коэффициент дисконтирования						
	0,1	1	0,909	0,826	0,751	0,683	
	0,2	1	0,833	0,694	0,578	0,482	
	0,3	1	0,769	0,592	0,455	0,350	
	0,4	1	0,714	0,510	0,364	0,260	
	0,5	1	0,667	0,444	0,295	0,198	
	0,6	1	0,625	0,390	0,244	0,153	
	0,7	1	0,588	0,335	0,203	0,112	
	0,8	1	0,556	0,309	0,171	0,095	
	0,9	1	0,526	0,277	0,146	0,077	
	1	1	0,500	0,250	0,125	0,062	
3	Дисконтированный денежный поток, млн. руб.						

0,1	-986384,7	735231,4	668098,1	607435,4	552434,6	1576814,9
0,2	-986384,7	673759,9	561331,8	467506,9	389858,7	1106072,6
0,3	-986384,7	621994,5	478830,6	368020,1	283092,4	765552,9
0,4	-986384,7	577508,5	412506,1	294416,1	210297,2	508343,2
0,5	-986384,7	539493,3	359122,9	238606,5	160149,4	310987,4
0,6	-986384,7	505522,2	315445,8	197355,9	123751,8	155691,0
0,7	-986384,7	475595,3	270959,9	164193,6	90589,6	14953,6
0,8	-986384,7	449712,5	249930,2	138310,9	76839,4	-71591,8
0,9	-986384,7	425447,5	224047,4	118090,0	62280,3	-156519,5
1,0	-986384,7	404417,7	202208,9	101104,4	50147,8	-228505,9

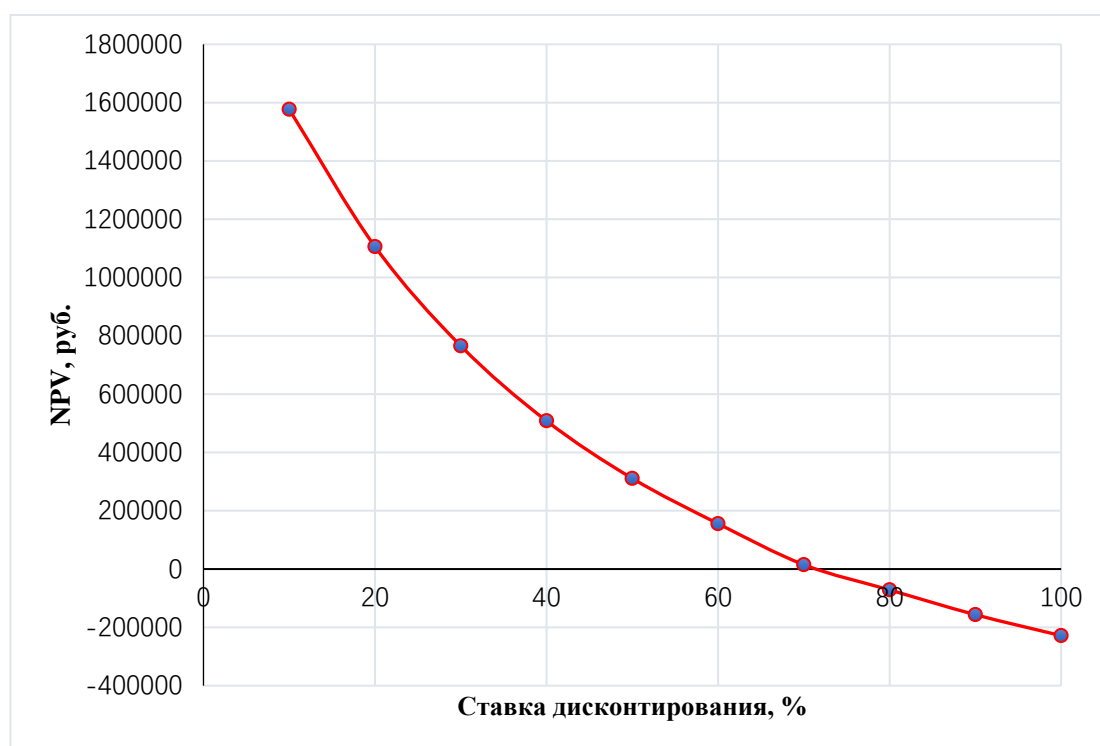


Рис. 21 – Зависимость NPV от ставки дисконтирования

Из таблицы и графика следует, что по мере роста ставки дисконтирования чистая текущая стоимость уменьшается, становясь отрицательной. Значение ставки, при которой NPV обращается в нуль, носит название «внутренней ставки доходности» или «внутренней нормы прибыли». Из графика получаем, что IRR

составляет 0,71.

Запас экономической прочности проекта: $71\% - 20\% = 51\%$

5.5.5 Дисконтированный срок окупаемости

Как отмечалось ранее, одним из недостатков показателя простого срока окупаемости является игнорирование в процессе его расчета разной ценности денег во времени.

Этот недостаток устраняется путем определения дисконтированного срока окупаемости. То есть это время, за которое денежные средства должны совершить оборот.

Наиболее приемлемым методом установления дисконтированного срока окупаемости является расчет кумулятивного (нарастающим итогом) денежного потока (см. таблица3).

Таблица 21 – Дисконтированный срок окупаемости

№	Наименование показателя	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1	Дисконтированный чистый денежный поток ($i = 0,10$), руб.	-986384,7	735231,4	668098,1	607435,4	552434,6
2	То же нарастающим итогом, руб.	-986384,7	-251153,3	416944,8	1024380,3	1576814,9
3	Дисконтированный срок окупаемости	$PP_{диск} = 1 + 251153,3 / 668098,1 = 1,36$ года				

5.5.6 Оценка сравнительной эффективности исследования

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат трех (или более) вариантов исполнения научного исследования. Для этого наибольший интегральный показатель реализации технической задачи принимается за базу расчета (как знаменатель), с которым соотносятся финансовые значения по всем вариантам исполнения.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется по следующей формуле:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}}$$

где: $I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i}$ – интегральный финансовый показатель разработки;

Φ_{pi} – стоимость i -го варианта исполнения;

Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

$$I_{\phi}^p = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\max}} = \frac{986384,71}{1552600} = 0,64$$

$$I_{\phi}^{a1} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\max}} = \frac{1355590}{1552600} = 0,87$$

$$I_{\phi}^{a2} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\max}} = \frac{1552600}{1552600} = 1,0$$

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное увеличение бюджета затрат разработки в размах (значение больше единицы), либо соответствующее численное удешевление стоимости разработки в размах (значение меньше единицы, но больше нуля).

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить по следующей формуле:

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i$$

где: I_{pi} – интегральный показатель ресурсоэффективности для i -го варианта исполнения разработки;

a_i – весовой коэффициент i -го варианта исполнения разработки;

b_i^a, b_i^p – бальная оценка i -го варианта исполнения разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности приведен в форме таблицы (табл. 22).

Таблица 22 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

ПО	Весовой	Текущий	Аналог 1	Аналог 2
----	---------	---------	----------	----------

Критерии	коэффициент параметра	проект		
1. Способствует росту производительности труда пользователя	0,1	5	4	3
2. Цена (уменьшение себестоимости продукции)	0,2	4	4	3
3. Помехоустойчивость	0,1	5	4	3
4. Энергосбережение	0,2	5	4	2
5. Надежность	0,2	5	5	5
6. Безопасность	0,2	5	5	5
Итого	1	4,8	4,4	3,6

$$I_m^p = 5 \times 0,1 + 4 \times 0,2 + 5 \times 0,1 + 5 \times 0,2 + 5 \times 0,2 + 5 \times 0,2 = 4,8$$

$$I_1^A = 4 \times 0,1 + 4 \times 0,2 + 4 \times 0,1 + 4 \times 0,2 + 5 \times 0,2 + 5 \times 0,2 = 4,4$$

$$I_2^A = 3 \times 0,1 + 3 \times 0,2 + 3 \times 0,1 + 2 \times 0,2 + 5 \times 0,2 + 5 \times 0,2 = 3,6$$

Интегральный показатель эффективности разработки ($I_{финр}^p$) и аналога ($I_{финр}^a$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{финр}^p = \frac{I_m^p}{I_\phi^p} = \frac{4,8}{0,64} = 7,5,$$

$$I_{финр}^{a1} = \frac{I_m^{a1}}{I_\phi^{a1}} = \frac{4,4}{0,87} = 5,06,$$

$$I_{финр}^{a2} = \frac{I_m^{a2}}{I_\phi^{a2}} = \frac{3,6}{1,0} = 3,6,$$

Сравнение интегрального показателя эффективности текущего проекта и аналогов позволит определить сравнительную эффективность проекта.

Сравнительная эффективность проекта определяется по формуле:

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{финр}^p}{I_{финр}^{a1}} = \frac{7,5}{4,4} = 1,70$$

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{финр}^p}{I_{финр}^{a2}} = \frac{7,5}{3,6} = 2,08$$

где: \mathcal{E}_{cp} – сравнительная эффективность проекта;

$I_{финр}^p$ – интегральный показатель разработки;

$I_{финр}^a$ – интегральный технико-экономический показатель аналога.

Сравнительная эффективность разработки по сравнению с аналогами представлена в таблице 23.

Таблица 23 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Разработка	Аналог 1	Аналог 2
1	Интегральный финансовый показатель разработки	1,0	0,87	0,64
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,8	4,4	3,6
3	Интегральный показатель эффективности	7,5	5,06	3,6
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1,70		2,08

Вывод по разделу:

Сравнение значений интегральных показателей эффективности позволило определить, что существующий вариант решения поставленной в магистерской диссертации технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности является наиболее приемлемым.

Проведя анализ показателей эффективности инвестиций, получили чистую текущую стоимость (NPV) – 1576814,9 руб. Таким образом, инвестиционный проект считается выгодным, NPV является положительной. Срок окупаемости проекта (PP) составил 1,36 года. Внутренняя ставка доходности (IRR) – 0,71, что позволяет признать инвестиционный проект экономически оправданным, так как выполнение неравенства $IRR > i$. Индекс доходности (PI) – 2,60, что больше единицы, такая инвестиция приемлема.

Глава 6. Социальная ответственность

В настоящем разделе ВКР рассматриваются вопросы охраны труда, связанные с работой в лаборатории, а также разрабатываются мероприятия по предотвращению воздействия на здоровье опасных и вредных факторов для работников лаборатории и создание безопасных условий труда для обслуживающего персонала. Исследовательская работа по использованию трассера красителя родамина, используемого в нефтеразведке, адсорбированного на пластиковые пластины матрицы ПММ, и измерению сигнала в матрице с помощью УФ-спектроскопии для определения степени распространения нефти. Выполнение выпускной квалификационной работы осуществляется в лаборатории оптических сенсоров (лаборатория оптодов) НИ ТПУ.

Объектом исследования является полимерная матрица, полиметилметакрилата (ПММ), краситель родамина, соляная кислота.

Оборудование, необходимое для осуществления работы: спектрофотометр, персональный компьютер, лабораторный стеклянный инструмент, материальное обеспечение лаборатории оптических сенсоров ТПУ.

Химическая лаборатория расположена в помещении с комбинированным освещением, оборудована системами отопления, водоснабжения, вентиляции и канализацией. Данное помещение лаборатории обеспечено первичными средствами пожаротушения и оборудовано средствами автоматической пожарной сигнализации.

Организация рабочего места должна соответствовать общепринятым и специальным требованиям техники безопасности, нормам санитарии, экологической и пожарной безопасности.

6.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

На производстве отношения между нанимателем и исполнителем работы должны регулироваться согласно Трудовому Кодексу Российской Федерации. Для данного проекта предпочтителен режим гибкого рабочего времени. При работе в режиме гибкого рабочего времени начало, окончание или общая продолжительность рабочего дня (смены) определяется по соглашению сторон [43]. Данный режим позволяет оптимально использовать рабочее время на выполнения различных операций.

Защита персональных данных работника должна осуществляться по требованиям Трудового кодекса Российской Федерации. Для работников, занятых на работах с вредными и (или) опасными условиями труда, предусмотрено обязательное медицинское обследование при приеме на работу и в течение всего рабочего времени приказом Министерства здравоохранения и социального развития Российской Федерации.

Рабочее место исследователя должно быть организовано согласно ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ «Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования», если работа проводится в сидячем положении. Если работа выполняется стоя, то рабочее место должно быть организовано

согласно ГОСТ 12.2.033-78 ССБТ «Рабочее место при выполнении работ стоя. Общие эргономические требования»

Для предотвращения несчастных случаев необходимо проводить обучение и проверять знания работников согласно ГОСТ 12.0.004-90. «Организация обучения безопасности труда». Для работы в лаборатории необходимо проводить инструктаж и вести журнал инструктажа по технике безопасности согласно ПНДФ 12.13.1-03. «Методические рекомендации. Техника безопасности при работе в аналитических лабораториях (общие положения)».

6.2 Производственная безопасность

В таблице 24 перечислены факторы риска и вредности при исследовании формирования флуоресцентного сигнала путем адсорбции красителей родамина на матрице ПММ.

Таблица 24 - Возможные опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ			Нормативная документация
	Разработка	Изготовлен	Эксплуатация	
1. Работа с вредными химическими веществами	+	+		1.1 ГОСТ 12.1.005-88 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны (с Изменением N 1) [44]
2. Отклонение показателей микроклимата	+	+	+	
3. Превышение уровня шума		+	+	
4. Недостаточная	+	+	+	

освещенность рабочей зоны				1.2 ГОСТ 12.1.007-76 Система
5.Электробезопасность	+	+	+	<p>стандартов безопасности труда (ССБТ). Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности (с Изменениями N 1,2) [45]</p> <p>2. СанПиН 2.2.4.548-96 Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений [46]</p> <p>3. ГОСТ 12.1.003-83 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Шум. Общие требования безопасности (с Изменением N 1) [47]</p> <p>4. СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95 [48]</p> <p>5. ГОСТ Р 12.1.019-2017 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты [49]</p>

6.2.1 Анализ опасных и вредных производственных факторов и обоснование мероприятий по снижению уровней их воздействия на исследователя (работающего)

6.2.1.1 Работа с вредными химическими веществами

Работа в аналитической лаборатории требует соблюдения техники безопасности, охраны труда работников, индивидуальной защиты [50]. Условия труда должны быть максимально безвредными. Научно-исследовательская работа по теме: «Исследование экстракции родамина в объеме полиметакрилатной матрицы» связана с химическими реактивами и электроприборами.

Используются вредные и опасные химические вещества, при несоблюдении мер безопасности они могут причинить вред здоровью и угрозу жизни [51]. В аналитической лаборатории химик – аналитик подвергается физическим факторам: параметры микроклимата (температура воздуха, относительная влажность воздуха, скорость движения воздуха), параметры световой среды (искусственное освещение (освещенность) рабочей поверхности). При нарушении санитарно-гигиенического режима в аналитической лаборатории на работников могут воздействовать неблагоприятные факторы производственной среды. Основными из них являются, прежде всего, контакт с токсичными химическими веществами, значительное напряжение зрения при выполнении анализов, работа с приборами и взвешивание на аналитических весах.

Характеристика химических веществ, используемых при выполнении НИР, согласно ГН 2.2.5.1313-03, представлена в таблице 25. Минимизировать возможный незначительный риск для здоровья в процессе выполнения работы и снизить содержание реактивов в воздухе рабочей зоны позволили следующие мероприятия:

1. Использование средств индивидуальной защиты (очки, щитки, маски, респираторы, резиновые перчатки, спецодежда).
2. Герметизация тары хранения и оборудования для проведения реакции.
3. Вытяжная система вентиляции (вытяжной шкаф).

Таблица 25 – Характеристика химических веществ

Наименование	Физические свойства	Величина ПДК, мг/м ³	Класс опасности	Токсическое действие
Полиметилметакрилат	Бесцветный прозрачный пластик	10	2	Дефицит, тошнота, повторяющаяся рвота, головная боль, головокружение, плотность груди, краткосрочное сознание исчезает, увеличение нейтрального лейкоцитов.
Родамин Ж	Порошок, от темно-	0,01	4	Благодаря контакту с кожей

	коричневого до красно- коричневого			и слизистыми мембранами организм вторгается в организм человека, заставляя терять клетки.
Соляная кислота	Бесцветная, прозрачная, едкая жидкость	5	3	Раздражающий глаза и дыхательные пути человека.

6.2.1.2 Отклонение показателей микроклимата

Показателями метеорологических условий производственной среды согласно ГОСТ 12.1.005 –являются температура, относительная влажность и скорость движения воздуха. Негативные значения показателей микроклимата становятся причиной уменьшения производственных показателей в работе, простуды, радикулита, хронического бронхита и многих других заболеваний. Устанавливаются оптимальные и допустимые значения этих параметров с учетом избытка теплоты, тяжести выполнения работ и сезонов года. В таблице 26 представлены нормы показателей метеорологических условий в рабочей зоне, которые соблюдаются в данной лаборатории.

Таблица 26 – Допустимые нормы микроклимата

Сезон года	Категория тяжести выполняемых работ	Температура, °С		Относительная влажность, %		Скорость движения, м/с	
		Фактич.	Доп.	Фактич.	Доп.	Фактич.	Доп.
Холодный	Па	18	19-21	50-40	60-40	0,2	0,2
Теплый	Па	19	20-22	50-40	60-40	0,2	0,2

К средствам коллективной защиты можно отнести установки кондиционирования воздуха, основная задача которых поддерживать параметры воздуха в установленных пределах, для обеспечения надежной работы и комфортных условий для работников.

В лаборатории необходимо создать приток свежего воздуха. Воздух, который используется для вентиляции лаборатории, должен быть очищен от пыли. Для обеспечения допустимых норм микроклимата в рабочей зоне необходимо установить в холодный период времени отопительную систему. Помещение, где находится рабочее место, должно соответствовать нормам, количеству размещенного в нем оборудования и размерам (объем, площадь) по количеству рабочих мест. Нормальные условия труда согласно СанПиН 2.2.4.548 – 96 (Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений) устанавливает, что на одно рабочее место должно отводиться не менее 4,5 м² площади в помещении и 20 м³ воздуха. Площадь данного помещения составляет 24 м², объем 72 м³. В данном помещении работают 2 человека, соответственно на одного человека приходится 12 м² и 36 м³ воздуха. Это соответствует санитарным нормам.

6.2.1.3 Превышение уровня шума

Шум является одним из наиболее распространенных вредных факторов на производстве, он крайне негативно влияет на здоровье человека. Длительное воздействие шума вызывает ухудшение слуха, реже приводит к глухоте, но также уменьшается внимание и увеличивается расход энергии человеком при выполнении какого-либо вида работ. Для рабочего места характерно наличие шумов: установки кондиционирования создают аэродинамический шум, УФ-спектроскопии – электрический [52].

Уровни шума не должны превышать значений, установленных в ГОСТ 12.1.003 – 83 (с изм. на 10.12.2018) и ГОСТ 17187 – 81 (СТ СЭВ 1351-78) (с Изменением N 1) и проводится не реже двух раз в год. По СН 2.2.4/2.1.8.562-96 нормируются параметры шума и составляют: для лаборатории ПДУ 75 - Дб; для вентиляции ПДУ - 70 Дб. Контроль шума осуществляется шумером. Для снижения шума в лабораториях используется шумобезопасная техника, звукоизоляция, звукопоглощение, рациональная планировка помещения и т.д.

6.2.1.4 Освещенность рабочей зоны

Освещение является незаменимым фактором на работе. Однако по условиям зрительной работы в лаборатории естественного освещения, как правило, недостаточно, поэтому на рабочих местах оказывается задействованным и искусственное освещение [53]. Оно может быть обеспечено с помощью люминесцентных ламп ЛВ (белого цвета) мощностью 20, 40, 80 Вт.

Для рабочих мест с искусственным освещением регламентирована допустимая освещенность, согласно действующим санитарным нормам и правилам СанПиН 1.2.3685-21. Безусловно, источник света не должен давать пульсаций и мерцаний, образовывать тени и блики. Качество света влияет на общее состояние человека, степень его утомляемости и производительность труда. В таблице 27 приведены нормы искусственного освещения.

Таблица 27 – Нормы искусственного освещения

Характеристика зрительной работы	Разряд зрительной работы	Искусственное освещение	
		Освещенность, лк	
		При комбинир. освещении	При общем освещении
Наивысшей точности	1	500	600

6.2.1.5 Электробезопасность

Источниками электрической опасности являются: оголенные части проводов или отсутствие изоляции, отсутствие заземления, замыкания, статическое напряжение. Электробезопасность должна обеспечиваться в любых возможных нормальных и аварийных эксплуатационных ситуациях. Наибольшую опасность при эксплуатации электрических устройств и проведении ремонтнопрофилактических работ представляет поражение электрическим током вследствие присоединения к токоведущим частям аппаратуры и к частям прибора, находящимся под напряжением. Поражающее воздействие электрического тока напрямую зависит от длительности и значения

протекания электрического тока через организм человека, частоты и рода тока, места прохождения через тело человека, индивидуального состояния человека. Наибольшую опасность для организма человека представляет переменный ток с частотой от 20 до 100 Гц.

6.2.1.6 Расчет уровня опасного или вредного производственного фактора

Расчет параметров шума

Фактические параметры уровня шума: источниками шумового воздействия на рабочем месте в лаборатории оптодов являются:

1) Телефонный аппарат ТЕЛТА-214-01 (уровень звукового давления при работе составляет 51дБ);

2) Клавиатура Genius KB-06X black PS/2, (уровень звукового давления при наборе текста - 31 дБ);

3) Системный блок, в котором источниками шума являются:

- УФ-видимый спектрофотометр Thermo Evolution60S (шум, А — ≤ 0,00015 при 0 А, ≤ 0,00025 при 1 А, <0,00050 при 2 А);

- вентилятор блока питания (вентилятор Cooler Master Hyper TX3 (RR910-НТХ3-GR), 24.3 дБ);

- жесткий диск SATA-3 500Gb Seagate 7200 Barracuda 7200.12 (уровень шума простоя – 26 дБа, уровень шума работы – 27 дБа).

Таким образом, на рабочем месте имеется 5 основных источников шумового воздействия. Для простоты расчетов будем считать, что телефонный аппарат ТЕЛТА-214-01 в режиме работы на протяжении всего рабочего дня.

Для перевода к эквивалентному уровню звука от уровня звукового давления для промышленной частоты в 1000 Гц воспользуемся тем, что численное значение эквивалентного уровня звука на 5 больше, чем уровень звукового давления. Предельно допустимые уровни звукового давления, уровни звука и эквивалентные уровни звука для основных наиболее типичных видов трудовой деятельности и рабочих мест содержатся в СН 2.2.4_2.1.8.562-96 Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки. Следовательно, получим следующие характеристики:

- УФ-видимый спектрофотометр Thermo Evolution60S – 40 дБа;
- вентилятор блока питания – 29,3 дБа;
- жесткий диск – 32 дБа;
- телефонный аппарат ТЕЛТА-214-01 при работе 56 дБа;
- клавиатура уровень 36 дБа;

Уровень шума, возникающий от нескольких некогерентных источников, работающих одновременно, подсчитывается на основании принципа энергетического суммирования излучений отдельных источников:

$$L_{\text{сум}} = 10 \lg \sum_{i=1}^n 10^{0,1L_i}$$

Где $L_{\text{сум}}$ - суммарный уровень звукового давления от всех источников шума (дБа);

L_i - уровень звукового давления i -го источника шума (дБ);

n - количество источников звукового давления.

$$L_{\text{сум}} = 10 \lg(10^4 + 10^{2,93} + 10^{3,2} + 10^{5,6} + 10^{3,6}) = 10 \lg 414524,27 = 56,17 \text{ дБа.}$$

$L_{\text{сум}}$ - действующее (фактическое) значение мощности источника опасности α_1 . Действующее (фактическое) значение времени опасного воздействия $\phi_2 = 8$ - с учётом обеденного перерыва (ч).

Согласно [54] уровень шума на рабочем месте для нашего класса работ (высококвалифицированная работа, требующая сосредоточенности, измерительные и аналитические работы в лаборатории) не должен превышать 60дБа. Сравним действующие и допустимые значения параметров источника опасности:

$$\alpha_1 = 56,17 \text{ (дБа)} < \alpha_{1d} = 60 \text{ дБа}$$

$$\phi_1 = 8 \text{ (ч)} = \phi_{1d} = 8 \text{ (ч)}$$

Вычислим общий показатель безопасности для данного источника опасности:

$$b_1 = 1/2((60-56,17)/60 + (8-8)/8) = 0,03$$

Показатель безопасности источника положителен, следовательно, источник находится в безопасном состоянии.

6.3 Экологическая безопасность

Изготовление полимерной матрицы и ее определение осуществляется в лаборатории. Поскольку изготовление полимерных матриц в лаборатории не предполагает промышленных масштабов, экологические проблемы, которые

могут возникнуть в ходе проекта, минимальны. Рассмотрим некоторые из этих проблем.

При изготовлении полимерных матриц возможны выбросы твердых частиц, в частности мелких фракций полимера ПММА в процессе сушки, в атмосферу, литосферу, гидросферу. В виду возможных выбросов, рекомендуются следующие меры по снижению выбросов твердых частиц: установка электростатических пылеуловителей, мешочных фильтров или мокрых скрубберов; поддержание чистоты и порядка в лаборатории, влажная уборка.

При работе в лаборатории образуются специфические отходы химических веществ, преимущественно в виде различных сливов, стоков и остатки химических реактивов (например соляная кислота, красители родамин, кристаллический фиолетовый краситель, бриллиантовый зеленый краситель, использованные растворители) не подлежащие дальнейшему использованию (данный вид отхода (по ФККО: лабораторные отходы и остатки химикалиев; код – 5930000000000 [55]) согласно современной классификации отходов производства и потребления представляет повышенную опасность, как для здоровья человека, так и для окружающей природной среды). Известно несколько способов утилизации лабораторных отходов и остатков химикалиев: сжигание; высокотемпературная обработка с доступом и без доступа кислорода; захоронение; безотходная переработка (превращение в добавку для производства цемента).

Данная лаборатория является практически безотходной, поэтому отработанные реактивы и ядовитые вещества, остатки веществ после анализа сливаются в специальную посуду и отправляются на регенерацию или уничтожение. Пластины из ПММА после использования хранятся для дальнейшей переработки.

6.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Чрезвычайная ситуация — это состояние, при котором в результате возникновения источника ЧС на объекте, определенной территории или акватории нарушаются нормальные условия жизни и деятельности людей, возникает угроза их жизни и здоровью, наносится ущерб имуществу населения, народному хозяйству и природной среде.

Чрезвычайные ситуации в лаборатории

К чрезвычайным ситуациям в лаборатории можно отнести пожары, взрывы, выбросы химически опасных веществ. Согласно [56] химическая лаборатория университета относится к категории В. Основными источниками возникновения пожара и взрыва в химической лаборатории могут быть:

- неисправные электроприборы
- неисправная электропроводка
- возгорание ЛВЖ либо ГЖ
- курение в неполюженном месте
- работа с открытым огнем либо использование приборов с открытыми источниками накаливания

В случае возникновения пожара в здании автоматически срабатывают датчики, и звуковая система оповещает всех сотрудников о немедленной эвакуации из здания. В помещении лаборатории находится огнетушитель, а на этаже - пожарный рукав.

Чрезвычайные ситуации природного характера

К природным относятся ЧС, связанные с проявлением стихийных сил природы: землетрясения, цунами, наводнения, извержения вулканов, оползни, сели, ураганы, смерчи, бури, природные пожары и др. Катастрофы природного характера, как правило, неожиданны. Они в короткое время разрушают территории, жилища, коммуникации, приводят вслед за собой голод, болезни. В последние годы ЧС природного происхождения имеют тенденцию к росту. Во всех случаях землетрясений, наводнений, оползней возрастает их разрушительная сила. При стихийных бедствиях, авариях и катастрофах жизнь человека подвергается огромной опасности и требует сосредоточения всех его духовных и физических сил, осмысленного и хладнокровного применения знаний и умений по действию в той или иной чрезвычайной ситуации. В случае возникновения чрезвычайной ситуации природного характера необходимо принять меры по эвакуации, т.е. рассредоточению и эвакуации населения из города в пригороды.

Таким образом, при разработке раздела «Социальная ответственность» были рассмотрены вопросы соблюдения прав персонала на труд, выполнения требований к безопасности и гигиене труда, к промышленной безопасности,

охране окружающей среды и ресурсосбережению. В результате работы, можно сделать вывод о том, что лаборатория оптодов ТПУ отвечает требованиям санитарных норм и правилам безопасности. Рабочие зоны лаборатории оборудованы согласно требованиям нормативно-правовой документации. Выявлены опасные и вредные факторы, которые могут возникать при проведении исследований в лаборатории, а также мероприятия по снижению уровней их воздействия на работника. Рассмотрен комплекс мер, способствующий обеспечению экологической безопасности при работе в лаборатории, а также рассмотрены наиболее распространенные чрезвычайные ситуации и причины их возникновения.

Выводы по разделу

Проведение любого исследования в химической лаборатории требует знание техники безопасности. Перед началом работы в лаборатории нужно провести инструктаж сотрудника по технике безопасности, рассказать про меры устранения вероятных чрезвычайных ситуаций, а также рассказать про правильную эксплуатацию оборудования лаборатории. Так же следует обратить внимание на факторы, негативно влияющие на окружающую среду, и провести ряд мероприятий по их минимизации. Рабочее место сотрудника должно быть организовано согласно требованиям ГОСТа. Отношения между сотрудником и руководителем должны основываться на Трудовом Кодексе Российской Федерации.

Список используемых источников

1. Chiang, T.-L. Trace determination of rhodamine B and rhodamine 6G dyes in aqueous samples by solid-phase extraction and high-performance liquid chromatography coupled with fluorescence detection / Chiang, T.-L., Wang, Y.-C., Ding, W.-H. // Journal of the Chinese Chemical Society, 59 (4), pp. 515-519.
2. Carr K. Dyes for Ink-Jet Printing / Carr K. // Colorants for Non-Textile Applications, 2000, Pages 1-34.
3. Brian A. Keay. 2.08 - Furans and their Benzo Derivatives: Applications / Brian A. Keay, Peter W. Dibble. // Comprehensive Heterocyclic Chemistry II, 1996, Pages 395-436.
4. Minglei Zhao. A rhodamine-based chromogenic and fluorescent chemo sensor for copper ion in aqueous media / Minglei Zhao, Xiao-Feng Yang, Shenfeng He, Liping Wang. // Sensors and Actuators B: Chemical, Volume 135, Issue 2, 2009, Pages 625-631.
5. Qian Zhang. Rational design of a FRET-based ratio metric fluorescent probe with large Pseudo-Stokes shift for detecting Hg²⁺ in living cells based on rhodamine and anthracene fluorophores / Qian Zhang, Haichang Ding, Xiaohang Xu, Huaxin Wang, Gang Liu, Shouzhi Pu. // Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, Volume 276, 2022, 121242.

6. Ма Цзяньчао. Флуоресцентное крашение полиэфирных тканей / Ма Цзяньчао, Жэнь Бикун, Ма Синань, Чжан Ин. // Печать и крашение, 2018, 44(23): 18-20.
7. Laura A. Richards. Use of lithium tracers to quantify drilling fluid contamination for groundwater monitoring in Southeast Asia / Laura A. Richards, Daniel Magnone, Bart E. van Dongen, Christopher J. Ballentine, David A. Polya // Applied Geochemistry; Volume 63, December 2015, Pages 190-202.
8. PU Chunsheng. Multistage interwell chemical tracing for step-by-step profile control of water channeling and flooding of fractured ultra-low permeability reservoirs / PU Chunsheng, JING Cheng, HE Yanlong, GU Xiaoyu, ZHANG Zhiying, WEI Jikai. // PETROLEUM EXPLORATION AND DEVELOPMENT, Volume 43, Issue 4, August 2016, Pages 679–688.
9. Barfi, B. Organic solvent-free air-assisted liquid-liquid microextraction for optimized extraction of illegal azo-based dyes and their main metabolite from spices, cosmetics and human bio-fluid samples in one step / Barfi, B, Asghari, A., Rajabi, M., Sabzalian, S. // J. Chromatogr. B: Anal. Technol. Biomed. Life Sci. 2015, 998, 15–25.
10. Franco, J.H. Using ionic liquid combined with HPLC-DAD to analyze semi-permanent hair dyes in commercial formulations / Franco, J.H., Silva, B.F., Zanoni, M.V.B. // Anal. Methods 2015, 7, 1115–1122.

11. Ozkantar, N. Spectrophotometric detection of rhodamine B in tap water, lipstick, rouge, and nail polish samples after supramolecular solvent microextraction / Ozkantar, N, Soylak, M., Tuzen, M. // Turkish J. Chem.2017,41, 987–994.
12. Ranjbari, E. Optimization of magnetic stirring assisted dispersive liquid-liquid microextraction of rhodamine B and rhodamine 6G by response surface methodology: Application in water samples, soft drink, and cosmetic products. / Ranjbari, E., Hadjmohammadi, M.R. // Talanta 2015,139, 216–225.
13. Bagheri, H. A novel magnetic poly(aniline-naphthylamine)-based nanocomposite for micro solid phase extraction of rhodamine B / Bagheri, H., Daliri, R., Roostaie, A. // Anal. Chim. Acta2013,794, 38–46.
14. Дэн Пейхун. Определение родамина электрохимическим восстановлением модифицированного графеном ацетиленового электрода из черной пасты с помощью вольтамперометрии В / Дэн Пейхун, Ван Чунжи, Тан Цин, Цзэн Цзюнь, Чжу Цинцин, Вэнь Лэй. // Журнал Hengyang Normal University, 2018, 39(06): 60-65.
15. Xiaolin Zhu. A miniature and low-cost electrochemical system for sensitive determination of rhodamine B / Xiaolin Zhu, Guanlan Wu, Chengzhi Wang, Dongmei Zhang, Xing Yuan. // Measurement, Volume 120, 2018, Pages 206-212.
16. Paziewska-Nowak. Evaluation of Fluorescein as a Label in Electrochemical and Optical Measurements / Paziewska-Nowak, T. Raczyński, D. G.

- Pijanowska, D. Janczak and M. Jakubowska // 2018 XV International Scientific Conference on Optoelectronic and Electronic Sensors (COE), Warsaw, Poland, 2018, pp. 1-4.
17. Ali F Alghamdi. A sensitive procedure for the rapid electrochemical determination of Eosin-Y dye using voltammetric techniques onto a mercury electrode surface / Ali F. Alghamdi, Fethi Kooli. // J. Mater. Environ. Sci. 4 (5) (2013) 762-769.
 18. R. Dhasarathan. Electrochemical sensors of food colorant – Eosin Y dye on carbon nanomaterials modified glassy carbon electrode / R. Dhasarathan, B. Kavitha, H. Aswathaman, N. Senthilkumar, S. Rani // materialstoday proceedings, Volume 48, Part 2, 2022, Pages 556-560.
 19. F. Selan. High-performance liquid chromatographic analysis for fluorescein and fluorescein monoglucuronide in plasma / F. Selan, N. Blair, M.A. Evans // Journal of Chromatography B: Biomedical Sciences and Applications, Volume 338, 1985, Pages 213-218.
 20. R.W. Mason. High-performance liquid chromatographic determination of rhodamine B in rabbit and human plasma, Journal of Chromatography B / R.W. Mason, I.R. Edwards // Biomedical Sciences and Applications, Volume 491, 1989, Pages 468-472.
 21. PingQia. Development of a rapid, simple and sensitive HPLC-FLD method for determination of rhodamine B in chili-containing products / PingQia, ZhihaoLin, JiaxuLi, ChengLongWang, WeiWeiMeng, HongHong,

XuewuZhang // Food Chemistry, Volume 164,1 December 2014, Pages 98-103.

22. Erkan Yilmaz. Новый и простой метод глубокой жидкофазной микроэкстракции родамина В в косметических продуктах и образцах воды на основе эвтектического растворителя перед его спектрофотометрическим определением / Erkan Yilmaz, Mustafa Soylak // Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc.5 сентября 2018;202:81-86.
23. Pourya Biparva. Application of dispersive liquid–liquid microextraction and spectrophotometric detection to the rapid determination of rhodamine 6G in industrial effluents / Pourya Biparva, Elias Ranjbari, Mohammad Reza Hadjmohammadi // Analytica Chimica Acta, Volume 674, Issue 2, 3 August 2010, Pages 206-210.
24. N. Pourreza. Micelle-mediated cloud point extraction and spectrophotometric determination of rhodamine B using Triton X-100 / N. Pourreza, S. Rastegarzadeh, A. Larki // Talanta, Volume 77, Issue 2, 15 December 2008, Pages 733-736.
25. Bişgin, A.T. Separation, Preconcentration and Spectrophotometric Determination of Rhodamine B in Industrial, Cosmetic and Water Samples by Cloud Point and Solid Phase Extraction / Bişgin, A.T, Sürme, Y., Uçan, M. et al // J. Anal Chem 73, 452–458 (2018).
26. Elham Ghasemi. Application of Micro-cloud point extraction for spectrophotometric determination of Malachite green, Crystal violet and

- Rhodamine B in aqueous samples / Elham Ghasemi, Massoud Kaykhaii // Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, Volume 164, 5 July 2016, Pages 93-97.
27. Mustafa Soylak. Ultrasound-assisted quasi-hydrophobic deep eutectic solvent-based determination of trace Rhodamine B in water and food samples: A simple and green approach / Mustafa Soylak, Furkan Uzcan, Oguzhan Goktas. // Journal of Food Composition and Analysis, Volume 120, July 2023, 105287.
28. J.W. Hofstraat. Determination of rhodamine wt in surface water by solid-phase extraction and HPLC with fluorescence detection / J.W. Hofstraat, M. Steendijk, G. Vriezekolk, W. Schreurs, G.J.A.A. Broer, N. Wijnstok // Water Research, Volume 25, Issue 7, July 1991, Pages 883-890.
29. S. Rubio-Barroso. Fluorometric determination of anionic surfactants by extraction as the rhodamine-B ion pair / S. Rubio-Barroso, M. Gomez-Rodriguez, L.M. Polo-Diez // Microchemical Journal, Volume 37, Issue 1, February 1988, Pages 93-98.
30. Magdalena Alesso. Micelles mediated separation fluorimetric methodology for Rhodamine B determination in condiments, snacks and candies / Magdalena Alesso, Gabriel Bondioli, María C. Talío, Marta O. Luconi, Liliana P. Fernández // Food Chemistry, Volume 134, Issue 1, 1 September 2012, Pages 513-517.

31. Chao Zhang. Development trend and prospect of solid phase extraction technology / Chao Zhang, Huifang Xing, Liangrong Yang, Pengfei Fei, Huizhou Liu // Chinese Journal of Chemical Engineering, 2021.
32. Soylak, M. Determination of rhodamine B in soft drink, waste water and lipstick samples after solid phase extraction / Soylak, M., Unsal, Y.E., Yilmaz, E., Tuzen, M. // Food Chem. Toxicol.2011,49, 1796–1799.
33. Guo, J. Determination of Brilliant Blue FCF in food and cosmetic samples by ionic liquid independent disperse liquid-liquid micro-extraction / Guo, J, Wu, H., Du, L., Fu, Y. // Anal. Methods2013,5, 4021–4026.
34. Jiaxin Ma. Multivariate optimization of magnetic molecular imprinting solid-phase extraction to entrap rhodamine B in seawater / Jiaxin Ma, Cheng He, Ziru Lian // Microchemical Journal Volume 189, June 2023, 108565.
35. Ahmad Reza Bagheri. Synthesis of chitosan based molecularly imprinted polymer for pipette-tip solid phase extraction of Rhodamine B from chili powder samples / Ahmad Reza Bagheri, Mehrorang Ghaedi // International Journal of Biological Macromolecules, Volume 139, 15 October 2019, Pages 40-48.
36. MehrorangGhaedi. Solid phase extraction and removal of brilliant green dye on zinc oxide nanoparticles loaded on activated carbon: New kinetic model and thermodynamic evaluation / MehrorangGhaedi, GoodarzNegintaji, Hajirkarimi, FarzanehMarahel // Journal of Industrial and Engineering Chemistry, Volume 20, Issue 4,25 July 2014, Pages 1444-1452.

37. Bitá S. Dispersive solid phase extraction combined by dispersive liquid-liquid microextraction for preconcentration of brilliant green from fish and seawater samples and its determination by spectrophotometry / Bitá S, Hashemi S H, Kalmati N. // Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering, 2022, 41(2): 501-509.
38. Mohamed A. Abdel-Fadeel. A simple method for removal of toxic dyes such as Brilliant Green and Acid Red from the aquatic environment using Halloysite nanoclay / Mohamed A. Abdel-Fadeel, Naif S. Aljohani, Saedah R. Al-Mhyawi, Riyadh F. Halawani, Enas H. Aljuhani, Mohamed AbdelSalam. // Journal of Saudi Chemical Society, Volume 26, Issue 3, May 2022, 101475.
39. Faezeh Pourebrahim. Optimization of solid phase dispersive field-assisted ultrasonication for the extraction of auramine O and crystal violet dyes using central composite design / Faezeh Pourebrahim, Mehrorang Ghaedi, Kheibar Dashtian, Shadi Kheirandish, Alireza Goudarzi // Applied Organometallic Chemistry, Volume32, Issue3, March 2018, e4181.
40. Azam Azarkohan. Fast Analysis of Water Samples for Trace Amount of Crystal Violet Dye Based on Solid Phase Extraction Using Nanoporous SBA-3 prior to Determination by Fiber Optic-Linear Array Detection Spectrophotometry / Azam Azarkohan, Farzaneh Shemirani, Mahrouz Alvand. // Journal of Chemistry, Volume2013.

41. А. Н. Синельников. ФЛУОРЕСЦЕНЦИЯ ЛАКТОННОЙ ФОРМЫ МОЛЕКУЛЫ РОДАМИНА Б / А. Н. Синельников, В. Я. Артюхов // ЖУРНАЛ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ, 2013, том 87, № 8, с. 1423–1431.
42. А.В. Семенович. КИНЕТИКА СОРБЦИИ КАТИОННЫХ КРАСИТЕЛЕЙ МОДИФИЦИРОВАННОЙ КОРОЙ ХВОЙНЫХ ДРЕВЕСНЫХ ПОРОД СИБИРИ* / А.В. Семенович, С.Р. Лоскутов // ХИМИЯ РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ. 2015 №4 С 101–109.
43. А. И. Карпищенко. Медицинская лабораторная диагностика (программы и алгоритмы) / А. И. Карпищенко // - СПб.: Изд. «Интермедика», 2001, 304 стр.
44. ГОСТ 12.1.005-88. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны (с Изменением N 1).
45. ГОСТ 12.1.007-76. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности (с Изменениями N 1,2).
46. СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.
47. ГОСТ 12.1.003-83. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Шум. Общие требования безопасности (с Изменением N 1).
48. СП 52.13330.2016. Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95.

49. ГОСТ Р 12.1.019-2017. Система стандартов безопасности труда (ССБТ).
Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.
50. ТР ТС 019/2011. Технический регламент «О безопасности средств индивидуальной защиты» с изменениями на 28 мая 2019.
51. ГОСТ 12.1.007-76 ССБТ. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности.
52. СН 2.2.4/2.1.8.562–96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории застройки.
53. СП 52.13330.2016. Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95.
54. Утверждены и введены в действие постановлением Госкомсанэпиднадзора России от 31.10.96 № 36. – М.: Информационно-издательский центр Минздрава России, 1997. – 11 с. – ISBN: 978-5-973080-19-8. – Текст: непосредственный.
55. Российская Федерация. Законы. Об отходах производства и потребления. Федеральный закон от 24.06.1998 № 89-ФЗ: [Принят Государственной думой 22 мая 1998 года] (ред. от 25.11.2013). – Москва, 2016. – 36 с. – ISBN: 978-5-4374-0815-5. – Текст: непосредственный.
56. Российская Федерация. Законы. Технический регламент о требованиях пожарной безопасности. Федеральный закон от 22.07.2008 № 123-ФЗ (последняя редакция): [Принят Государственной думой 4 июля 2008

года]. – Москва, 2010. – 104 с. – ISBN: 978-5-370-02017-9. – Текст:
непосредственный.

Приложение А. Экспериментальные данные.

Поместите 0,05 г пластинки ПММ в 4мл раствор родамина с концентрацией 100 мг/л (без соляной кислоты). Затем выполните описанные выше шаги 2.2-2.7 для измерения спектрального сигнала пластины ПММ после разбавленной концентрации и спектрального сигнала раствора родамина 1-6. 100 мг/л раствора родамина $A_0=2,9$, $C_0=0,1$ мг/мл.

Таблица 1 – Спектральное обнаружение раствора родамина (без соляной кислоты), адсорбированного на пластинке ПММ

№	A пластинка	A родамин	Cx, мг/мл
1	2,799	2,828	0,024
2	1,559	2,605	0,022
3	1,088	2,476	0,021
4	0,669	1,696	0,015
5	0,472	0,821	0,007
6	0,374	0,395	0,003

По полученным данным рассчитывали разбавленную концентрацию раствора родамина в каждом стакане и содержание родамина в пластинках ПММ.

Таблица 2 – Концентрация разбавления раствора родамина и содержание родамина в пластинках ПММ

№	A	Cx, мг/мл	C идеальная, мг/мл	M в пластинке, мг/г
1	2,828	0,024	0,050	2,05
2	2,605	0,022	0,033	0,87
3	2,476	0,021	0,022	0,07
4	1,696	0,015	0,015	0,02
5	0,821	0,007	0,010	0,22
6	0,395	0,003	0,007	0,25

Добавьте в стакан 1 каплю, 5 капель, 10 капель соляной кислоты соответственно, затем добавьте 4 мл раствора родамина концентрацией 100 мг/л, затем поместите пластинку ПММ в раствор и дайте постоять 10 минут, после

чего выполните описанные выше действия 2.2. -2,7. 100 мг/л раствора родамина

$A_0=2,9$, $C_0=0,1$ мг/мл.

а. С 1 каплей HCl в каждом стакане

№	А пластинка	А родамин	Сх, мг/мл
1	2,147	2,740	0,024
2	1,416	2,584	0,022
3	0,845	2,275	0,019
4	0,625	1,368	0,012
5	0,481	0,697	0,006
6	0,356	0,361	0,003

б. С 5 каплей HCl в каждом стакане

№	А пластинка	А родамин	Сх, мг/мл
1	2,174	2,721	0,023
2	1,168	2,582	0,022
3	0,834	1,978	0,017
4	0,478	1,140	0,010
5	0,538	0,582	0,005
6	0,605	0,312	0,003

в. С 10 каплей HCl в каждом стакане

№	А пластинка	А родамин	Сх, мг/мл
1	2,228	2,827	0,024
2	1,707	2,669	0,023
3	0,840	2,157	0,019
4	0,538	1,212	0,010
5	0,406	0,631	0,005
6	0,467	0,281	0,002

Таблица 3 – Концентрация разбавления раствора родамина и содержание родамина в пластинках ПММ

а. С 1 каплей HCl в каждом стакане

№	А	Сх, мг/мл	С идеальная, мг/мл	М в пластинке, мг/г
1	2,740	0,024	0,050	2,11
2	2,584	0,022	0,033	0,89
3	2,275	0,019	0,022	0,28
4	1,368	0,012	0,015	0,25
5	0,697	0,006	0,010	0,31
6	0,361	0,003	0,007	0,28

б. С 5 каплей HCl в каждом стакане

№	A	Cx, мг/мл	C идеальная, мг/мл	M в пластинке, мг/г
1	2,721	0,023	0,050	2,12
2	2,582	0,022	0,033	0,89
3	1,978	0,017	0,022	0,41
4	1,140	0,010	0,015	0,40
5	0,582	0,005	0,010	0,39
6	0,312	0,003	0,007	0,31

в. С 10 каплей HCl в каждом стакане

№	A	Cx, мг/мл	C идеальная, мг/мл	M в пластинке, мг/г
1	2,827	0,024	0,050	2,05
2	2,669	0,023	0,033	0,83
3	2,157	0,019	0,022	0,29
4	1,212	0,010	0,015	0,35
5	0,631	0,005	0,010	0,35
6	0,281	0,002	0,007	0,33

Поместите 0,05 г пластинки ПММ в 4мл раствор бриллиантового зеленого с концентрацией 100 мг/л (без соляной кислоты). Затем выполните описанные выше шаги 2.2-2.7 для измерения спектрального сигнала пластины ПММ после разбавленной концентрации и спектрального сигнала раствора бриллиантового зеленого 1-6. 100 мг/л раствора бриллиантового зеленого $A_0=4,341$, $C_0=0,1$ мг/мл.

Таблица 4 – Спектральное обнаружение раствора бриллиантового зеленого (без соляной кислоты), адсорбированного на пластике ПММ

№	A пластинка	A бриллиантовый зеленый	Cx, мг/мл
1	1,700	4,015	0,023
2	0,847	3,371	0,019
3	0,549	1,478	0,008
4	0,327	0,767	0,004
5	0,309	0,252	0,001
6	0,251	0,145	0,0008

По полученным данным рассчитывали разбавленную концентрацию раствора бриллиантового зеленого в каждом стакане и содержание бриллиантового зеленого в пластинках ПММ.

Таблица 5 – Концентрация разбавления раствора бриллиантового зеленого и содержание бриллиантового зеленого в пластинках ПММ

№	A	C _x , мг/мл	C идеальная, мг/мл	M в пластинке, мг/г
1	4,015	0,023	0,050	2,15
2	3,371	0,019	0,033	1,11
3	1,478	0,008	0,022	1,09
4	0,767	0,004	0,015	0,83
5	0,252	0,001	0,010	0,68
6	0,145	0,0008	0,007	0,46

Добавьте в стакан 1 каплю, 5 капель, 10 капель соляной кислоты соответственно, затем добавьте 4 мл раствора бриллиантового зеленого концентрацией 100 мл/л, затем поместите пластинку ПММ в раствор и дайте постоять 10 минут, после чего выполните описанные выше действия 2.2. -2,7. 100 мг/л раствора бриллиантового зеленого $A_0=4,341$, $C_0=0,1$ мг/мл.

а. С 1 каплей HCl в каждом стакане

№	A пластинка	A бриллиантовый зеленый	C _x , мг/мл
1	1,044	0,271	0,00156
2	0,508	0,150	0,00086
3	0,435	0,119	0,00068
4	0,433	0,110	0,00063
5	0,381	0,109	0,00062
6	0,413	0,106	0,00061

б. С 5 каплей HCl в каждом стакане

№	A пластинка	A бриллиантовый зеленый	C _x , мг/мл
1	0,484	0,163	0,0009
2	0,266	0,124	0,0007
3	0,255	0,112	0,0006
4	0,237	0,119	0,0006
5	0,304	0,098	0,0005
6	0,233	0,074	0,0004

в. С 10 каплей HCl в каждом стакане

№	A пластинка	A бриллиантовый зеленый	C _x , мг/мл
1	0,455	0,142	0,024
2	0,434	0,126	0,023
3	0,362	0,116	0,019

4	0,458	0,102	0,010
5	0,358	0,098	0,005
6	0,363	0,079	0,002

Таблица 6 – Концентрация разбавления раствора бриллиантового зеленого и содержание бриллиантового зеленого в пластинках ПММ

а. С 1 каплей HCl в каждом стакане

№	A	Cx, мг/мл	C идеальная, мг/мл	M в пластинке, мг/г
1	0,027	0,0015	0,050	3,872
2	0,150	0,0008	0,033	2,602
3	0,119	0,00068	0,022	1,723
4	0,11	0,00063	0,015	1,135
5	0,109	0,00062	0,010	0,741
6	0,106	0,00061	0,007	0,478

б. С 5 каплей HCl в каждом стакане

№	A	Cx, мг/мл	C идеальная, мг/мл	M в пластинке, мг/г
1	0,163	0,0009	0,050	3,92
2	0,124	0,0007	0,033	2,61
3	0,112	0,0006	0,022	1,73
4	0,119	0,0006	0,015	1,13
5	0,098	0,0005	0,010	0,75
6	0,074	0,0004	0,007	0,49

в. С 10 каплей HCl в каждом стакане

№	A	Cx, мг/мл	C идеальная, мг/мл	M в пластинке, мг/г
1	0,142	0,00082	0,050	3,94
2	0,126	0,00073	0,033	2,61
3	0,116	0,00067	0,022	1,72
4	0,102	0,00059	0,015	1,14
5	0,098	0,00056	0,010	0,75
6	0,079	0,00045	0,007	0,49

Поместите 0,05 г пластинки ПММ в 4мл раствор кристаллического фиолетового с концентрацией 100 мг/л (без соляной кислоты). Затем выполните описанные выше шаги 2.2-2.7 для измерения спектрального сигнала пластины ПММ после разбавленной концентрации и спектрального сигнала раствора кристаллического фиолетового 1-6. 100 мг/л раствора кристаллического

фиолетового $A_0=4,289$, $C_0=0,1$ мг/мл.

Таблица 7 – Спектральное обнаружение раствора кристаллического фиолетового (без соляной кислоты), адсорбированного на пластике ПММ

№	A пластинка	A кристаллический фиолетовый	Cx, мг/мл
1	2,608	4,289	0,025
2	1,673	3,980	0,023
3	0,894	2,678	0,016
4	0,483	1,077	0,006
5	0,304	0,607	0,004
6	0,291	0,415	0,002

По полученным данным рассчитывали разбавленную концентрацию раствора кристаллического фиолетового в каждом стакане и содержание кристаллического фиолетового в пластинках ПММ.

Таблица 8 – Концентрация разбавления раствора кристаллического фиолетового и содержание кристаллического фиолетового в пластинках ПММ

№	A	Cx, мг/мл	C идеальная, мг/мл	M в пластинке, мг/г
1	4,289	0,025	0,050	2,000
2	3,980	0,023	0,033	0,827
3	2,678	0,016	0,022	0,498
4	1,077	0,006	0,015	0,705
5	0,607	0,004	0,010	0,470
6	0,415	0,002	0,007	0,367

Добавьте в стакан 1 каплю, 5 капель, 10 капель соляной кислоты соответственно, затем добавьте 4 мл раствора кристаллического фиолетового концентрацией 100 мг/л, затем поместите пластинку ПММ в раствор и дайте постоять 10 минут, после чего выполните описанные выше действия 2.2. -2,7. 100 мг/л раствора кристаллического фиолетового $A_0=4,289$, $C_0=0,1$ мг/мл.

а. С 1 каплей HCl в каждом стакане

№	A пластинка	A кристаллический фиолетовый	Cx, мг/мл
1	2,798	3,943	0,0230

2	1,343	1,837	0,0107
3	0,640	0,620	0,0036
4	0,445	0,251	0,0015
5	0,379	0,159	0,0009
6	0,359	0,165	0,0010

б. С 5 каплей HCl в каждом стакане

№	А пластинка	А кристаллический фиолетовый	Сх, мг/мл
1	1,418	0,406	0,00236
2	0,413	0,216	0,00125
3	0,338	0,116	0,00067
4	0,321	0,124	0,00072
5	0,306	0,117	0,00068
6	0,326	0,115	0,00067

в. С 10 каплей HCl в каждом стакане

№	А пластинка	А кристаллический фиолетовый	Сх, мг/мл
1	0,925	0,205	0,00119
2	0,312	0,215	0,00072
3	0,284	0,104	0,00061
4	0,279	0,118	0,00068
5	0,261	0,111	0,00065
6	0,276	0,116	0,00068

Таблица 9 – Концентрация разбавления раствора кристаллического фиолетового и содержание кристаллического фиолетового в пластинках ПММ

а. С 1 каплей HCl в каждом стакане

№	А	Сх, мг/мл	С идеальная, мг/мл	М в пластинке, мг/г
1	3,943	0,0230	0,050	2,168
2	1,837	0,0107	0,033	1,811
3	0,620	0,0036	0,022	1,490
4	0,251	0,0015	0,015	1,065
5	0,159	0,0009	0,010	0,718
6	0,165	0,0010	0,007	0,447

б. С 5 каплей HCl в каждом стакане

№	А	Сх, мг/мл	С идеальная, мг/мл	М в пластинке, мг/г
1	0,406	0,00236	0,050	3,808
2	0,216	0,00125	0,033	2,563
3	0,116	0,00067	0,022	1,729
4	0,124	0,00072	0,015	1,129
5	0,117	0,00068	0,010	0,734
6	0,115	0,00067	0,007	0,479

в. С 10 каплей HCl в каждом стакане

№	A	Cx, мг/мл	C идеальная, мг/мл	M в пластинке, мг/г
1	0,205	0,00119	0,050	3,904
2	0,215	0,00072	0,033	2,609
3	0,104	0,00061	0,022	1,729
4	0,118	0,00068	0,015	1,131
5	0,111	0,00065	0,010	0,738
6	0,116	0,00068	0,007	0,479

В ходе эксперимента получены следующие данные:

Таблица 10 – Спектр поглощения при адсорбции красителя матрицей в момент времени t

t _i , МИН	0,016	0,05	0,1	0,16	0,33	0,66	1	2	4	6	8	10
A _i	0,949	0,892	0,557	0,649	1,416	0,849	1,007	1,106	1,029	1.613	2.235	3.074

Таблица 11 рассчитывается по формуле (1), и определяется величина спектра поглощения красителя в матрице по мере изменения времени.

Таблица 11 - Поглощение красителя матрицей в момент времени t

t _i , МИН	0,016	0,05	0,1	0,16	0,33	0,66	1	2	4	6	8	10
S _i	594,8 6	559,1 3	349,1 4	406, 81	887,5 8	532,1 7	631,2 1	693,2 7	64 5	1011 ,07	1400 ,96	1926 ,87

Рассчитайте равновесную степень процесса поглощения по формуле (2), как показано в таблице 12.

Таблица 12 - Значение степени равновесия в момент времени t

t _i , МИН	0,01 6	0,05	0,1	0,16	0,33	0,66	1	2	4	6	8	10
F	0,30 8	0,29 0	0,181	0,211	0,460	0,276	0,327	0,359	0,33 4	0,52 4	0,72 7	1
-ln(1- F)	0,36 9	0,34 2	0,199	0,237	0,617	0,323	0,396	0,445	0,40 7	0,74 3	1,29 8	

Таблица 13 – Абсорбция субстрата в течение периода полураспада

t _i , МИ Н	0,126	0,223	0,316	0,4	0,574	0,812	1	1,414	2	2,44 9	2,82 8	3,162
S _i	594,8 6	559,1 3	349,14	406,8 1	887,5 8	532,1 7	631,2 1	693,2 7	64 5	1011 ,07	1400 ,96	1926,8 7

Приложение Б

(Справочное)

Investigation of fluorimetric signal formation in a volume of polymethylmethacrylate matrix

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ11	Тань Минь		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Гавриленко Михаил Алексеевич	д.х.н.		

Консультант-лингвист отделения иностранных языков ШБИП

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОИЯ ШБИП	Сыскина Анна Александровна	к.ф.н.		

INTRODUCTION

In the research work the sorption capacity of the transparent polymer matrix PMM, the use of solid-phase extraction using the matrix PMM for the sorption of xanthene and triphenylmethane dyes and the effect of the acidity of the medium on the sorbed dyes were studied. Spectrophotometry with a range of 0.01-10 mg/l was used as the signal recording method.

Keywords: polymethacrylate matrix (PMM), solid-phase extraction, rhodamine, brilliant green, crystal violet, isothermal sorption, sorption kinetics.

The objects are the transparent polymer matrix PMM, the xanthene dye rhodamine 6 J and the triphenylmethane dyes brilliant green and crystal violet.

Aim of the study: Laws of solid phase extraction of xanthene dye rhodamine 6 J in comparison with triphenylmethane dyes on PMM matrix.

Research objectives:

- Critical comparison of literature data to select the method of immobilisation of xanthene dyes and triphenylmethane dyes in the volume of polymeric sorbents;
- to reveal regularities of rhodamine, brilliant green and crystal violet solid-phase extraction depending on pH of the medium;
- study of kinetics of dyes sorption into the PMM matrix volume and delimitation of sorption stages on the basis of analysis of isothermal curves of sorption.

Scope of application: extra-laboratory determination of dyes in the range 0.01-10 mg/l.

1. Definition of xanthene dyes

Xanthene dyes are complex organic molecules with a xanthene structure and include fluorescein, eosins and rhodamines. Compared to the corresponding aryl methane dyes, due to the presence of an oxygen bridge atom, the absorption spectrum in the visible region is generally strongly shifted to the short-wavelength region, the light fastness of the colours is slightly higher. Due to their bright colours and strong fluorescence, they are used in the synthesis of basic dyes, acid dyes, solvents and dispersion dyes. Many xanthene dyes can be prepared by condensing phthalic anhydride derivatives with resorcinol or 3-aminophenol derivatives. Xanthene dyes are generally fluorescent, yellow to pink to bluish red, shiny dyes. According to their chemical structure (Figure 1) they can be divided into amino-xanthene, hydroxy-xanthene, amino-hydroxy-xanthene and phenyl-xanthene dyes.

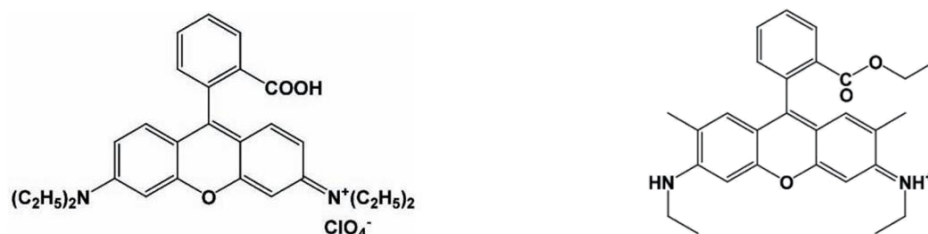


Figure 1 - Structures of rhodamine B (left) and rhodamine 6G (right)

The introduction of different substituents into the aromatic ring changes the absorption wavelength of the dye, so xanthene dyes are characterised by bright colour and strong fluorescence. For example, the introduction of a substituted halogen deepens the colour, the more it is introduced, the darker the colour, the spectrum is shifted to yellows, reds and blues. They find wide application in disperse dyes, fluorescent dyes, fluorescent pigments, tracers for hydrological monitoring and oil field

monitoring.

1.1 The use of xanthene dyes in technological processes

Rhodamine B and rhodamine 6G are among the oldest and most commonly used synthetic dyes. They are widely used as colour additives in the cosmetics, food, pharmaceutical industries, and as a dye in the petroleum, textile and plastic industries [1,2]. Since rhodamine B and rhodamine 6G have carcinogenicity and reproductive and developmental toxicity, their use in food colouring has caused serious problems and many countries have restricted their use.

Xanthene dyes [3] are important in the dye industry, especially in the area of printing products. Typical applications include pressure sensitive carbonless copy paper and thermal transfer paper. Fluorane produces a dark purple image in contact with silica gel and a black image in the presence of bisphenol A. Xanthene-based dyes such as fluorescein, rhodamine and rhodol are very popular fluorophore frameworks because of their excellent photophysical properties (high quantum yields and extinction coefficients, excellent water solubility and photostability).

In this study [2], the authors used dyes in inkjet printing inks. Xanthene dyes with their narrow absorption curves and tendency to fluorescence have been used to produce very bright prints by this method. For this purpose, a rhodamine derivative CI Acid Red 52 has been synthesised which is widely used in inks, in spite of the low light fastness of this chromophore system.

Due to characteristics such as high emission intensity, bright colour and strong fluorescence, xanthene dyes represent a class of functional dyes with very promising

prospects for textile applications [6]. Polyester fabrics dyed with fluorescent yellow have a higher dyeing resistance to light, dyeing resistance to abrasion and dyeing resistance to washing.

In medicine, xanthene dyes are also often used as sensors of metal cations [4] e.g., a new derivative of rhodamine L5 for the detection of Cu^{2+} in aqueous solutions and in living cells. This colorimetric sensor is instantly reversible for Cu^{2+} ions and can selectively detect bioactive amounts of copper at high concentrations of other metal cations. Other rhodamine-based colorimetric sensors [5] are capable of detecting microquantities of Hg^{2+} cation not only by fluorescence signal, but also using colour response to the preliminary presence of Hg^{2+} cations.

Xanthan dyes are also widely used in the oil industry, mainly as tracers to study the extent of oil spread, groundwater testing and oil exploration, wherever there is a problem of introducing external contamination into a monitored system [7]. As oil field development moves into the mid- to late-stage, there is an increasing demand for tracer field monitoring technologies as the transition is made from single-well and single-layer injection to multi-well, multi-layer, multi-round and block injection. In accordance with the design scheme of staged profile control and characteristics of water channeling and flooding in fractured reservoirs with ultra-low permeability, a method for temporal design of interwell tracing has been developed, the principle of chemical tracer selection and formula for tracer dosage calculation have been optimized [8], and a method for prediction of optimization of staged profile control parameters based on multistage interwell tracing with xanthene dyes has been created.

The results of the method show that multistage interwell chemical tracing can effectively reflect dynamic changes in fracture parameters, and the monitoring results coincide with the results of dynamic production tests, demonstrating good adaptability of the method.

The cosmetic industry makes extensive use of xanthene and triarylmethane dyes, not only in the search for new colour shades, but more often in the identification of prohibited dyes in cosmetic products. A new, simple and environmentally friendly method based on one-step air-assisted liquid-liquid microextraction (OS-AALLME) has been developed to extract Sudan and Orange G dyes used in lipstick [9]. A method based on sample dilution in water and SPE for spectrophotometric determination has been developed for the group determination of four basic dyes and one acidic dye used as permanent components of hair dyes [10]. Rhodamine C and its derivatives are most commonly used in decorative cosmetics (lipstick, blush and nail polish) [11], rhodamine B and 6J (CI 45160) [12] in lipstick. Other substituted rhodamines are used in shampoo, eyeliner and eye shadows [13].

1.2 Methods for the determination of xanthene dyes

At present the methods for the determination of xanthene dyes mainly include: electrochemical; chromatography (various variants); spectrophotometry; fluorimetry. Electrochemical and chromatographic methods for the determination of xanthene dyes are mainly presented.

1.2.1 Electrochemical methods

Electrochemical analysis is based on electron transfer phenomena that occur in

the medium under study or at the phase boundaries and are associated with changes in the structure, chemical composition or concentration of the analyte. Electrochemical methods are simple, fast, highly sensitive and miniaturised and are suitable for the determination of synthetic dyes in various objects.

The use of electrochemically reduced acetylene black paste electrode modified with graphene (ERGO/ABPE) has been described [14] and a simple and sensitive electroanalytical method for the determination of rhodamine B (RhB) is proposed as a working electrode. The modified electrode has a good catalytic effect on the electrochemical oxidation of RhB and can significantly improve the detection sensitivity in the range from 0.02 μM to 1.0 μM with a detection limit of 0.01 μM . The method has been applied for the determination of RhB in paprika samples with satisfactory results.

In a study [15], a miniature electrochemical system for sensitive Rhodamine B (RhB) analysis was developed by integrating carboxylated multi-walled carbon nanotubes and an ionic liquid modified graphite electrode (MWCNTs-COOH/IL/PGE), the distinguishing feature of this system is the small sample volume from millilitre to microlitre required for analysis, which is essential when only small sample amounts are available. Under optimal conditions, the peak oxidation current was linear as a function of RhB concentration in the range 0.005-2.0 μM with a low detection limit of 1.0 nM.

For fluorescein a method of concentration determination by differential pulse voltammetry and spectrofluorimetry has been proposed [16]. The results of

voltammetric measurements showed that fluorescein is an electrochemically active compound whose electrochemical activity is influenced by the pH of the medium. A comparison of each measurement method suggested that the electrochemical methods are more suitable for the determination of fluorescein in solutions with low pH, while the spectrofluorimetric method is more advantageous in the case of alkaline solutions.

A sensitive adsorption stripping procedure (square-wave adsorption stripping voltammetry) has been developed for the determination of xanthene dye eosin [17]. A well-developed voltammetric peak, probably related to the cathodic reduction of the carbonyl group, was obtained in acetate buffer pH (5) at -550 mV in the concentration range 5.0×10^{-8} to 5.0×10^{-7} mol/L ($r = 0.99$). The detection limit was 8.73×10^{-10} mol/L (0.566 ppb) at 0.64 RSD% and an average recovery of $107\% \pm 1.6$ SD.

The electrochemical activity of eosin Y was also studied in buffer medium at different pH conditions by cyclic and differential pulse voltammetry [18]. A well-developed voltammetric peak, probably related to the cathodic reduction of the carbonyl group, was obtained in acetate buffer pH 4.0 at -0.6 V. The irreversibility of the reduction process was confirmed by cyclic voltammetry. Under optimised conditions, the cathodic peak current of eosin Y is proportional to the concentration in the range of 50 ppb to 300 ppb with a detection limit of 20 ppb by differential pulse voltammetry.

1.2.2 Chromatographic methods

The HPLC method allows the separation of almost any mixture of synthetic dyes. The basis for the separation is the different distribution of components between

the two immiscible phases, the mobile phase (eluent) and the stationary phase. The NF is usually a solid (sorbent) or a liquid film deposited on a solid. The PF is a liquid or gas flowing through the stationary phase.

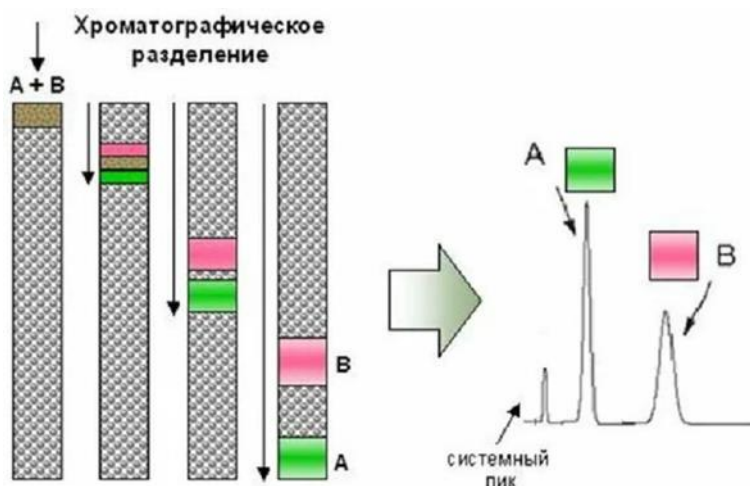


Figure 2 - Overview of the chromatographic analysis method

Animal studies have shown that xanthene dyes can cause growth retardation and liver damage, erythrocyte haemolysis and suppression of the immune response in isolated spleen cells. High performance liquid chromatography (HPLC) with fluorescence detection [19], provides a rapid and sensitive determination of fluorescein and its metabolites in plasma. A similar approach has been used for the determination of rhodamine [20] in rabbit and human plasma. In the research [21] the determination of rhodamine B in food products containing chilli has been described. The dye is extracted from the samples with methanol and analysed by high performance liquid chromatography (HPLC) combined with fluorescence detection (FLD) with a quantification limit of 10 $\mu\text{g}/\text{kg}$. The overall recovery factor is in the range 98-103% in chilli powder and in the range 87-100% in chilli oil, depending on the concentration of rhodamine B in the food.

1.3 Spectrophotometric determination of rhodamine

Spectrophotometry is ideal for the determination of dyes with light absorption in the visible region of the spectrum and is widely used in the study of the structure and composition of various compounds, for qualitative and quantitative determination of substances. A technique has been proposed for the determination of rhodamine in cosmetic products and water samples using UV-VIS spectrophotometer at 550 nm [22]. The limit of detection (LOD), limit of quantification (LOQ), preconcentration factor (PF) and relative standard deviation (RSD %) were 2.2 $\mu\text{g/L}$, 7.3 $\mu\text{g/L}$, 25 and 2.3% respectively.

In the work [23], a fast and efficient concentration method was developed for the extraction of rhodamine 6J using dispersive liquid-liquid microextraction (DLLME) before UV-VIS spectrophotometry. The study showed that optimized conditions (extraction solvent: 300 μl chloroform, dispersion solvent: 3 ml acetone, pH: 8 and no salt added) resulted in a linear calibration plot in the range 5-900 $\mu\text{g/L}$ rhodamine 6Æ in the stock solution with $R^2 = 0.9988$ ($n=5$). The detection and quantification limits were 2.39 and 7.97 $\mu\text{g/L}$, respectively.

A method [24] for sensitive and selective determination of trace amounts of rhodamine was described which is based on extraction of rhodamine B from aqueous solution with Triton X-100 in acidic medium. The surfactant-rich extracted phase is diluted with water and its absorbance at 563 nm is measured using a spectrophotometer. Under optimal conditions a linear calibration plot was obtained in the range of 5-550 $\mu\text{g/L}$ rhodamine B in the stock solution with $r = 0.9991$ ($n = 15$). The method was

applied to the determination of rhodamine B in samples of art paints, liquid soaps and a mixture of textile dyes.

The work [25] suggests spectrophotometric determination of rhodamine B in technological solutions after solid-phase extraction. A new, environmentally friendly, simple and rapid method [26] has been developed for the spectrophotometric determination of malachite green, crystal violet and rhodamine B in water samples based on Micro-cloud point extraction (MCPE) at room temperature. Under optimized conditions, the calibration curves were linear in the concentration range 0.06-0.60 mg/L, 0.10-0.80 mg/L and 0.03-0.30 mg/L with enrichment ratios of 29.26, 85.47 and 28.36 for malachite green, crystal violet and rhodamine B respectively. Detection limits were 2.2 to 5.1 $\mu\text{g/L}$.

A simple, environmentally friendly and accurate analytical method [27] for the separation and pre-concentration of rhodamine B in food and water samples based on microextraction using a UV-Vis spectrophotometer is presented. The application of the method has been evaluated for the extraction and determination of rhodamine in selected food and water samples with an uncertainty of $\leq 3.6\%$.

1.4 Fluorimetric determination of rhodamine

The method of fluorescence analysis is based on the excitation of the electron emission spectra of analyte molecules under external UV irradiation and the measurement of their photoluminescence intensity. In order for luminescence to occur, the molecules must be converted from their ground state to an excited state which lasts long enough for the radiation transition of electrons from the excited state to the ground

state to occur. Fluorescence methods are generally more sensitive than photometric methods.

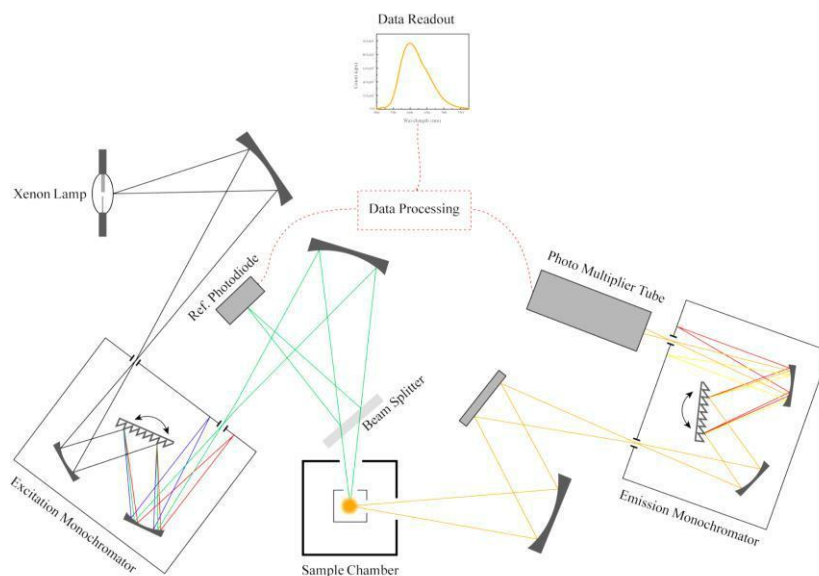


Figure 3 - Fluorescence spectroscopy scheme

A method has been described [28] for the sensitive and selective determination of the aqueous rhodamine WT tracer. This technique, based on the combined application of solid-phase extraction (SPE) using a C18 column HPLC separation with fluorescence detection for analysis, has important advantages over direct fluorometric methods. The approach presented in this work is essentially a zero-background method, which allows much lower concentrations of dyes to be measured. The use of solid-phase extraction at the sample preparation stage further increases the detection limit.

A simple and fast method [29] for spectrofluorometric determination of rhodamine using anionic surfactants has been proposed. It is based on the formation of an ionic pair with rhodamine-B in 0.5 M HCl and the subsequent extraction of the associate into benzene. The coefficient of variation was 4.8% at 0.23 ppm surfactant. The method has been applied to the determination of anionic surfactants in municipal

wastewater, yielding recoveries close to 100%.

A study [30] proposed the fluorimetric determination of rhodamine B using surfactant separation. Experimental parameters affecting the separation and determination steps such as surfactant concentration, equilibration time and temperature, extraction pH, nature and composition of surfactant saturated phase diluent were studied and optimised. The implementation of the separation step successfully eliminated interference from the matrix components, improving selectivity and sensitivity. The developed technique provides linearity in the range from 4.67×10^{-2} to 100 $\mu\text{g/L}$ with a correlation coefficient of 0.999. An LOD of 1.40×10^{-2} $\mu\text{g/l}$ and an LOQ of 4.67×10^{-2} $\mu\text{g/l}$ were obtained under optimum experimental conditions.

Conclusion

- In the absence of hydrochloric acid, both rhodamine and crystalline violet dyes belong to type III isotherm, where the amount of dye in the matrix increases as the concentration of dye solution increases, whereas diamond green dye belongs to type II isotherm, where the amount of dye in the matrix increases, then plateaus and then continues to increase as the concentration of diamond green dye solution increases.

- Since all these dyes are basic dyes, the dye absorption spectrum in each matrix tends to gradually decrease. In contrast, for the isothermal adsorption curve, as the concentration of hydrochloric acid increases, the lower the pH value, the stronger the adsorption capacity of the adsorbent, and although the concentration of the dye solution is low, the dye content in the matrix is higher than it would be without adding hydrochloric acid.

- From the dye adsorption kinetic curve, it can be seen that the curve does not pass through the origin and then becomes a straight line, indicating that the diffusion of the dye is mixed. the dye diffuses over the surface only in the early stage and when the dye enters the matrix, internal diffusion is evident.