

очистки – не менее 98%). В таких очистных сооружениях стоки не аккумулируются, как в устаревших аналогах, а перерабатываются. Очищенная вода после переработки совершенно прозрачна, не имеет запаха, теряет склонность к загниванию. В настоящее время существует достаточно большое количество методов утилизации отработанного активного ила, что делает биологическую очистку воды эффективным и рациональным методом.

Степень очистки воды зависит от большого количества факторов, поэтому есть необходимость контролировать процесс очистки. В качестве контролируемого параметра сточных вод было выбрано содержание хлорид-ионов. Для достижения поставленной цели, был выбран метод ионометрии, как наиболее оптимальный по возможности автоматизации и дешевизне. Метод ионометрии – вариант потенциометрического анализа, в котором напрямую измеряется активность иона в растворе. Измерения производят при помощи пары электродов, погружаемых в анализируемый раствор. Ионометрия удобный, простой и экспрессный современный метод.

Для определения концентрации хлорид-ионов в исследуемом растворе необходимо произвести регистрацию потенциала ионселективного датчика в исходном растворе. Работоспособность датчика определяется в автоматическом режиме через определенные временные интервалы путем генерирования определенного количества хлорид-ионов в замкнутом объеме, где находится ионселективный электрод, и последующей регистрацией датчиком полученного содержания хлорид-ионов.

Список литературы:

1. Ф. Берне, Ж. Кордонье. Водочистка. – М.: Химия, 1997. – 288 с.
2. А. Ф. Сокольский, О. В. Тюменцев. Влияние абиотических факторов на биоценоз активного или очистных сооружений // УКД 628.355.2 – 2011. – С. 121–125.
3. А. И. Булатов. Справочник инженера-эколога. – Изд-во «Недра», 1999. – Ч.1. Вода. – 732 с.

Исследование сорбционных способностей различных углеродных модификаций с целью создания системы хранения водородного топлива

Видяев Д.Г., Борецкий Е.А., Верхорубов Д.Л.¹

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Россия, г. Томск

E-mail: eboretsky@mail.ru

В настоящее время существует несколько моделей автомобилей, работающих на водородном топливе. Водород хранится в баллонах под высоким давлением, приблизительно 150 атмосфер. Кроме того, для постоянного хранения водорода необходимо поддерживать температуру газа на уровне -243 °С, что вызывает необходимость использовать дополнительную систему охлаждения на основе жидкого азота. Учитывая условия хранения водорода, необходимо отметить, что также существует вероятность его детонации в случае разгерметизации баллона. В связи с этим актуальным становится создание систем, способных аккумулировать водород. Преимущество таких систем состоит в том, что водород находится внутри в молекулярно-связанном состоянии. Поэтому такой способ хранения является одним из наиболее безопасных. Тем не менее существует ряд затруднений, которые необходимо решить. Основной проблемой является создание системы, которая обладала бы относительно высокой сорбционной емкостью по водороду.

Различные углеродные модификации, обладающие высокоразвитой поверхностной структурой, позволяют предположить, что они могли бы быть использованы в качестве перспективных сорбционных систем [1]. Для изучения возможности применения таких систем для аккумулирования водорода была проведена оценка их сорбционной емкости по водороду.

С целью определить сорбционные свойства структурных модификаций углерода было произведено моделирование наиболее распространенных форм: фуллерены C₆₀, одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ) и слои технического углерода (СТВ). Задание электронной и атомной структур осуществлялось с использованием методов квантовой химии и молекулярной динамики с применением пакета программ HyperChem. При нахождении энергии адсорбции системы и оптимизации ее геометрии был использован полуэмпирический метод MNDO (модифицированное пренебрежение двухатомным перекрыванием). После моделирования и оптимизации геометрии рассматриваемой системы проводилось присоединение атомов водорода к атомам рассматриваемых структур. Степень покрытия определялась как отношение числа адсорбированных атомов водорода к числу атомов рассматриваемой наноструктуры:

$$\theta = N_H / N, \quad (1)$$

где θ – степень покрытия рассматриваемой наноструктуры водородом; N_H – число адсорбированных атомов водорода; N – количество атомов в рассматриваемой системе.

Удельная энергия адсорбции рассчитывалась по формуле:

$$E_{\text{адс}} = (E_{\text{сис}} - E_N - N_H * E_H) / N_H, \quad (2)$$

где $E_{\text{адс}}$ – удельная энергия адсорбции водорода; $E_{\text{сис}}$ – полная энергия системы "наноструктура – адсорбент"; E_N – полная энергия свободной наноструктуры; E_H – энергия одного атома водорода; N_H – общее число адсорбированных атомов водорода.

Энергии $E_{\text{сис}}$ и E_N брались для оптимизированной геометрии [2]. В результате определялась удельная энергия адсорбции – на один атом водорода. В случае, если энергия адсорбции имела отрицательное значение, то изучаемая структура считалась стабильной.

После этого определялась предельная сорбционная емкость по водороду из формулы:

$$\eta_H = \frac{m_H}{m_H + m_N} \cdot 100\%, \quad (3)$$

где η_H – предельная сорбционная емкость по водороду, мас.%; m_H – масса адсорбированного водорода; m_N – масса свободной наноструктуры.

Таблица 1. Значения предельной сорбционной емкости различных систем по водороду

Модификация	Фуллерен C ₆₀	ОУНТ	Тех. углерод
η_H , % масс	7,7	7,7	9,1

По результатам расчетов сорбционной емкости для структурных модификаций углерода показана перспективность их использования в качестве аккумуляторов водорода.

В связи с этим нами был выбран образец фуллеренсодержащей сажи и проведен структурный анализ его поверхности. Анализ сделали с помощью сканирующего электронного микроскопа высокого разрешения «JEOLJSM-7500FA», позволяющего проводить сканирующую электронную микроскопию материалов с кратностью увеличения от 25 до 1000000 и разрешением до 1 нм. Результаты исследований приведены на рисунке 1.

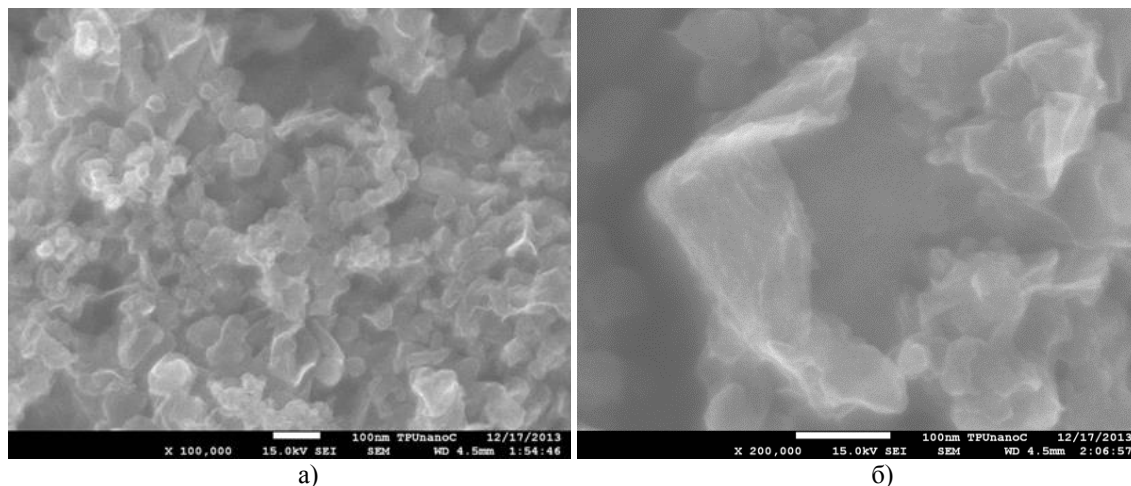


Рис. 1. Структура поверхности графитового слоя при увеличении в: а) 100000 и б) 200000 раз

Для имеющегося образца был проведен рентгенофазный анализ. По результатам которого, стало понятно, что исследуемый образец полностью состоит из углерода в фазе графита.

На основании полученных данных о структуре поверхности выбранного образца показана перспективность его дальнейших экспериментальных исследований по изучению сорбционных свойств.

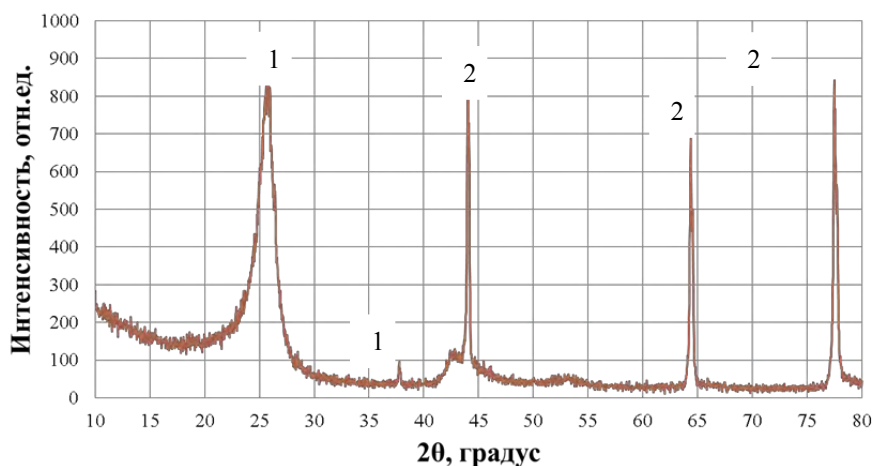


Рис. 2. Результаты рентгенофазового анализа: 1 – углерод в фазе графита, 2 – материал подложки

Для экспериментального изучения сорбции водорода, была создана установка с использованием квадрупольного масс-спектрометра МС 7-200.

Установка состоит из нагреваемого реактора *CT*, который соединен с термоконтроллером *ТС*. Откачка системы до давлений ниже атмосферного производится форвакуумным насосом *N*. Контроль давления осуществляется с помощью термпарных датчиков *PT* и манометрических преобразователей *PD*. В качестве источника водорода использована установка по получению водорода *QL 500*. Контроль выделяющегося водорода в реакторе осуществляется квадрупольным масс-анализатором МС 7 - 200.

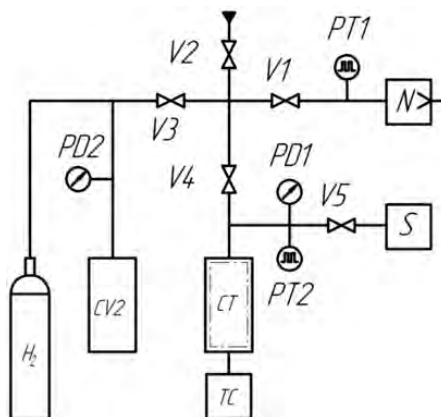


Рис. 3. Схема экспериментальной установки по изучению сорбции водорода

По получаемым экспериментальным данным производятся расчеты и определение основных кинетических параметров процессов сорбции водорода образцами. Определяются: энергия активации, тип адсорбции, порядок реакции и ее скорость, емкость системы и др.

Таким образом, подготовлена база для дальнейших теоретических и экспериментальных исследований различными структурными модификациями углерода с целью создания системы, обеспечивающей хранение водорода.

Список литературы:

1. Hirscher M., Becher M., Haluska M. et al. Hydrogen storage in carbon nanostructures // J. of Alloys and Compounds.– 2002. Vol. 330–332. – P. 654–658.
2. О кинетике сорбции водорода наноструктурными композитными материалами/Видяев Д.Г., Савостиков Д.В., Селянин А.С., Сидоркин А.С.//Известия высших учебных заведений. Физика.– 2013.– Том 56; №11/3.–С.280–283.

Математическое моделирование распространения загрязняющей примеси в осредненной постановке

Буторина Д.А., Сопруненко Э.Е., В.А. Перминов

Томский политехнический университет, Россия, г. Томск, г. Томск

E-mail: dasha-butorina@mail.ru

В настоящее время, уровень загрязнения воздуха городов в результате выбросов промышленных предприятий, зачастую, несмотря на существующие методы очистки, превышает предельно допустимые концентрации санитарных норм. В данной ситуации возникает острая необходимость эффективного решения задач, как по оценке существующего положения так и