

процессов исходя из экологических возможностей региона. Они дают, в отличие от обратимых оценок, близкие к реальности, а иногда и реализуемые “образцы” оптимальной организации.

*Статья написана на основе работ, проводившихся при поддержке MNF, фондов INTAS и РФФИ.*

### Литература

1. Цирлин А.М. Оптимальное управление процессами необратимого тепло- и массопереноса // Изв. АН СССР, сер. “Техническая кибернетика” №2, 1991, с.171-179.
2. Кузнецов А.Г., Руденко А.В., Цирлин А.М. Оптимальное управление в термодинамических системах с конечной емкостью источников//Автоматика и телемеханика. №6, 1985, с.20-32.
3. Розоноэр Л.И., Цирлин А.М. Оптимальное управление термодинамическими процессами // Автоматика и телемеханика. №1, №2, №3, 1983.
4. Новиков И.И. Эффективность атомных электростанций//Атомная энергия №3, 1957, с.409.
5. Curzon F.L., Ahlborn B. Efficiency of a Carnot engine a maximum power output // American Journal of Physics. N 3, 1975.
6. Andresen B.// Finite-time thermodynamics. Uniwersitet of Copenhagen. 1983, 149p.
7. S.Sieniutycz and P.Salamon (ed.). Advances in thermodynamiks. Vol 4. Finite-Time Thermodynamics .Taylor and Francis, N-Y. 1990.
8. Bejan A. Entropy generation minimization //J.Appl.Phys. 79, 1996, 1191-1217.
9. A.M. Tsirlin, V. Kazakov, R.S. Berry. Finite-Time Thermodynamics Limiting Performace of Rectification and Minimal Entropy Production in Mass Trauster // J.of.Phys.Chem. 1994. 98, p.3330-3336.
10. Розоноэр Л.И., Руденко А.В., Цирлин А.М. Использование методов оптимизации для оценки предельных возможностей абсорбционно-десорбционных циклов//Теоретические основы химической технологии. №3, 1984, с. 362-370.

### **Корреляционный анализ содержания тяжелых металлов в донных отложениях**

к.т.н. доцент Шигабаева Г.Н., Ахтырская Е.О.  
Тюменский государственный университет, г. Тюмень  
8(906)821-79-97

*Аннотация:* В работе приведены результаты химического анализа донных отложений некоторых озер таежной хоны Западной Сибири. Определены валовое содержание и подвижные формы тяжелых металлов, построены корреляционные диаграммы по содержанию тяжелых металлов и рассчитаны кларковые концентрации. Построена матрица парных корреляций с использованием программы Statistika 6.0.

*Ключевые слова:* тяжелые металлы, парные корреляции, кларковые концентрации

В водных экосистемах между донными отложениями (ДО) и водой происходят непрерывные процессы обмена веществами. В этой связи большой интерес представляет изучение влияния донных отложений на загрязнение воды в результате вторичного загрязнения. Этот процесс наблюдается, когда ранее перешедшие из толщи воды загрязняющие вещества в результате различных внутриводоемных процессов (изменение окислительно-восстановительной обстановки, биохимические процессы) могут переходить из ДО в воду, вновь загрязняя ее [1].

Среди множества токсикантов, попадающих в природные воды, особое значение

имеют тяжелые металлы (ТМ). Активно включаясь в миграционные циклы, они аккумулируются в различных компонентах водных экосистем. Особая опасность ТМ заключается в том, что, в отличие от токсикантов органической природы, в большей или меньшей степени разлагающихся в природных водах, ТМ в них стабильны и изменяют только свои формы нахождения.

В группу тяжелых металлов (ТМ) входит большое число химических элементов (металлов и металлоидов), удельная плотность которых больше  $5 \text{ г/см}^3$ . При всей условности такого объединения все тяжелые металлы обладают одним общим свойством: они могут быть биологически активными.

Попадая в результате антропогенной деятельности в природные среды, многие из них могут накапливаться в живых организмах до таких уровней концентраций, когда они начинают оказывать токсические воздействие на организмы. К числу наиболее токсичных для биоты тяжелых металлов относятся свинец, кадмий, ртуть, мышьяк, медь, цинк, ванадий, кобальт, хром и др. Загрязнение природной среды некоторыми тяжелыми металлами уже приобрело глобальный характер. Источники поступления тяжелых металлов в морские бассейны подразделяются на две группы – природного и антропогенного происхождения.

К природным относится в первую очередь речной сток, куда химические элементы попадают в растворенном и взвешенном виде, в результате химического и физического выветривания пород и почв водосбора, со стоком подземных вод, атмосферными выпадениями, при эрозии берегов и дна, за счет поступления богатых металлами иловых вод из донных отложений, а также при водообмене с другими водоемами.

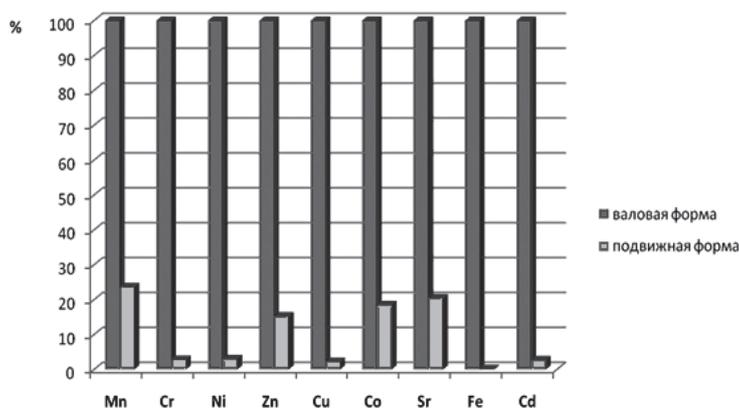
Антропогенными источниками являются разработки месторождений различных руд, нефти, газа, промышленные, перерабатывающие и ремонтные предприятия (особенно металлургические заводы), автомобильный, авиационный и морской транспорт, сельское хозяйство, морские порты, муниципальные стоки городов, санаторно-курортные комплексы и т.д. [2].

Всё это определило цель данной работы: получение экспериментальных данных по содержанию тяжелых металлов в донных отложениях и выявление корреляционных зависимостей по содержанию тяжелых металлов.

Объектами исследования являлись донные отложения, из 40 озер таежной зоны Западной Сибири.

При определении валового содержания донные отложения прокаливали при  $450 \text{ }^\circ\text{C}$  и растворяли в концентрированной фтористоводородной кислоте. Подвижные формы тяжелых металлов извлекались ацетатно-аммонийным буферным раствором с  $\text{pH}=4,8$ . Элементный состав донных отложений был определен атомно-адсорбционным анализом.

По результатам определений была рассчитана доля подвижных форм металлов от их общего содержания.



**Рисунок 1. Доля подвижных форм тяжелых металлов от их общего содержания в донных отложениях озер**

Из диаграммы видно, что доля подвижных форм Ni, Cr, Cd, Cu, Fe составляет соответственно от 0,2 % до 3% от их общего содержания. Доля подвижных форм Mn, Zn, Co, Sr в донных отложениях от их общего содержания достаточно велика от 15% до 21%, что увеличивает их реальную токсичность, поскольку подвижная форма является лабильной и при небольшом закислении водоема может перейти в водную фазу [3].

В большинстве литературных источников по анализу данных тяжелых металлов в природных объектах принято построение матриц парных корреляций с целью выявления отсутствия или наличия корреляций между содержаниями тяжелых металлов.

Нами была построена матрица парных корреляций с использованием программы Statistika 6.0.

Таблица 1

**Корреляционная зависимость валового содержания**

	УЭП	орг. в-во	Cu	Cd	Zn	Ni	Mn	Cr	Sr	Co	Fe
УЭП	1,00	0,15	0,32	-0,06	0,15	0,07	0,08	0,15	0,39	0,13	-0,17
орг. в-во	0,15	1,00	-0,04	0,01	-0,21	-0,18	-0,19	0,15	0,37	0,17	0,05
Cu	0,32	-0,04	1,00	-0,21	0,60	0,12	0,25	0,12	0,14	0,10	-0,03
Cd	-0,06	0,01	-0,21	1,00	-0,45	-0,54	-0,36	-0,52	-0,39	-0,50	0,08
Zn	0,15	-0,21	0,60	-0,45	1,00	0,49	0,54	0,30	0,29	0,25	0,24
Ni	0,07	-0,18	0,12	-0,54	0,49	1,00	0,86	0,91	0,62	0,89	-0,06
Mn	0,08	-0,19	0,25	-0,36	0,54	0,86	1,00	0,78	0,57	0,76	0,19
Cr	0,15	0,15	0,12	-0,52	0,30	0,91	0,78	1,00	0,75	1,00	-0,07
Sr	0,39	0,37	0,14	-0,39	0,29	0,62	0,57	0,75	1,00	0,71	-0,10
Co	0,13	0,17	0,10	-0,50	0,25	0,89	0,76	1,00	0,71	1,00	-0,06
Fe	-0,17	0,05	-0,03	0,08	0,24	-0,06	0,19	-0,07	-0,10	-0,06	1,00

Проведение корреляционного анализа позволило выделить несколько значимых соответствий, таких как (Cr-Mn-Sr) – халькофильные элементы, (Co-Ni) – сидерофильные элементы и (Cu-Zn-Cd) – литофильные элементы (таблица 1). Кроме того, были обнаружены корреляции между Zn-Mn, Ni-Cr, Sr-Co, что указывает на иные механизмы формирования донных отложений. При этом были обнаружены значительные корреляции между Mn-Fe (таблица 1), что говорит о возникновении железо-марганцевых конкреций, которые возникают в озёрах таежно-лесной зоны, где много болот, в водах которых много органических кислот и органического вещества. Роль органического вещества в аккумуляции тяжелых металлов в илах незначительна.

Для характеристики накопления микроэлементов в донных отложениях озер Западной Сибири использовался кларк концентрации. Данный показатель рассчитывался как отношение содержания химического элемента в изучаемом природном теле к его кларку в земной коре. Валовые содержания микроэлементов в донных отложениях озер сравнивались с кларками осадочных пород (глинами и сланцами). Для расчета кларков концентрации были использованы таблицы кларков, составленные А.П. Виноградовым [1].

## Корреляционная зависимость подвижных форм

	УЭП	орг. в-во	Cu	Cd	Zn	Ni	Mn	Cr	Sr	Co	Fe
УЭП	1,00	0,15	0,35	0,01	-0,09	-0,35	-0,23	0,02	0,19	-0,22	-0,26
орг. в-во	0,15	1,00	0,01	-0,06	-0,13	-0,54	-0,44	-0,19	-0,34	-0,34	-0,47
Cu	0,35	0,01	1,00	-0,15	0,01	0,27	0,19	-0,32	-0,15	-0,09	0,30
Cd	0,00	-0,06	-0,15	1,00	-0,54	0,37	-0,23	-0,14	0,14	0,23	-0,27
Zn	-0,09	-0,13	0,01	-0,54	1,00	-0,02	0,45	-0,11	-0,04	0,20	0,30
Ni	-0,35	-0,54	0,27	0,37	-0,02	1,00	0,47	-0,21	-0,13	0,36	0,57
Mn	-0,23	-0,44	0,19	-0,23	0,45	0,47	1,00	-0,14	0,08	0,21	0,89
Cr	0,02	-0,19	-0,32	-0,14	-0,11	-0,21	-0,14	1,00	0,46	0,38	-0,24
Sr	0,19	-0,34	-0,15	0,14	-0,04	-0,13	0,08	0,46	1,00	0,33	-0,07
Co	-0,22	-0,34	-0,09	0,23	0,20	0,36	0,21	0,38	0,33	1,00	-0,02
Fe	-0,26	-0,47	0,30	-0,27	0,30	0,57	0,89	-0,24	-0,07	-0,02	1,00

Таблица 3

## Среднее содержание элементов в земной коре, мг/кг

Химический элемент, мг/кг	Кларк по Виноградову, мг/кг	Медианное значение валового содержания	КК
Zn	83	31,06	0,37
Cu	47	12,56	0,27
Cr	83	19,16	0,23
Co	18	4,07	0,23
Ni	58	12,82	0,22
Fe	46500	72,38	0,16
Mn	1000	87,01	0,09
Sr	340	15,89	0,05

Кларки концентраций, рассчитанные для тяжелых металлов, не превышают среднего содержания в земной коре ( $КК \ll 1$ ), поэтому можно предположить, что они рассеиваются в донных отложениях (таблица 3).

Таким образом, изучение состава донных отложений и расчет кларков позволили оценить степень накопления металлов. Для 40 образцов донных отложений озер таежной зоны Западной Сибири были определены валовые содержания и подвижные формы тяжелых металлов. Выявлены корреляционные зависимости по содержанию тяжелых металлов и содержанию органического вещества. Наиболее значительные корреляции обнаружены между Mn-Fe, что говорит о возможном возникновении железо-марганцевых конкреций. Проведен расчет кларков концентраций тяжелых металлов в донных отложениях.

### Литература

1. Виноградов А. П. Средние содержания химических элементов в главных типах изверженных горных пород земной коры // Геохимия, 1962. - № 7. - С. 555—571.
2. Мизандронцев И.Б. Химические процессы в донных отложениях водоемов. –Новосибирск: Изд-во Наука, 1990. – С.175.
3. Перельман А.И. Геохимия природных вод 2003. – М.: Изд-во Наука, 1982. – С.154.

### **Разработка информационной технологии и компьютерный менеджмент качества неорганических кислот особой чистоты**

д.т.н. проф. Бессарабов А.М., Трынкина Л.В., Казаков А.А., Трохин В.Е.  
Научный центр «Малотоннажная химия»  
bessarabov@nc-mtc.ru

*Аннотация.* При создании технологии получения ассортимента неорганических кислот особой чистоты нами была разработана информационная база данных гибкого производства, включающего 7 типовых аппаратурных модулей: химической очистки, ректификации, десорбции, адсорбции, абсорбции, коррекции состава и фильтрации. Для аналитического мониторинга особо чистых неорганических кислот на основе информационных CALS-технологий разработана система компьютерного менеджмента качества.

*Ключевые слова:* особо чистые вещества, неорганические кислоты, база данных, компьютерный менеджмент качества, CALS-технология

Среди веществ особой чистоты немаловажную роль играют высокочистые неорганические кислоты, применяющиеся в таких областях народного хозяйства, как атомная энергетика, микроэлектроника, полупроводниковая техника, волоконная оптика и др. В последнее время промышленное производство неорганических кислот реактивной квалификации и особой чистоты характеризуется существенным ростом требований потребителей продукции к такому понятию, как качество. Прежде всего качество особо чистой кислоты определяется содержанием в ней лимитируемых микропримесей. При выборе способов очистки предпочтение отдается методам, в которых ограничена возможность внесения дополнительных загрязнений [1, 2].

Для глубокой очистки в основном применяются такие процессы, как адсорбция, абсорбция, ректификация и т.д. В этих процессах обеспечивается очистка особо чистых кислот до содержания отдельных примесей на уровне  $10^{-6}$ - $10^{-8}$  % масс. Целью данной работы является информационная поддержка при синтезе производства ассортимента неорганических кислот особой чистоты (соляной, плавиковой, хлорной и азотной) на основе общих принципов формирования гибких технологических схем из типовых модулей [3].

Разработка модульной технологии осуществлялась путем такого сочетания отдельных технологических процессов, которое дает возможность использования максимального разнообразия исходного сырья. В качестве примера такого синтеза приводится разработка технологий высокочистых азотной и хлорной кислот [2] на одной технологической линии, и галогеноводородных кислот (плавиковой и соляной) – на другой [1]. При этом во втором случае имеет место возможность использования практически всех возможных видов исходного сырья (газ, концентрированные и разбавленные кислоты), представленного на рынке химических продуктов.

Созданная нами новая технология получения ассортимента неорганических кислот особой чистоты базируется на 7 типовых аппаратурных модулях: химической очистки, ректификации, десорбции, адсорбции, абсорбции, коррекции состава и фильтрации. При созда-