## 

УДК 502.55:504.054

# ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫЕ ПРОФИЛИ КОНЦЕНТРАЦИЙ ЭТИЛБЕНЗОЛА В ГЛИНИСТОЙ ПОЧВЕ В ПРОЦЕССЕ ЕЕ ЭЛЕКТРОКИНЕТИЧЕСКОЙ РЕМЕДИАЦИИ

© 2022 г. И. В. Кумпаненко<sup>1</sup>, К. А. Шиянова<sup>1\*</sup>, Е. О. Панин<sup>1</sup>, О. В. Шаповалова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук, Москва. Россия

> \**E-mail: shiyanovakseniya@mail.ru* Поступила в редакцию 19.07.2021; после доработки 17.08.2021; принята в печать 20.08.2021

Изучен процесс электрокинетической ремедиации (ЭКР) глинистой почвы, содержащей примесь этилбензола – часто наблюдаемого вблизи автозаправок и хранилищ нефтепродуктов органического загрязняющего вещества (3В). Экспериментальное измерение зависимости концентрации 3В от времени и пространственной координаты в ходе электрокинетической леконтаминации почвы проволилось на специально разработанной установке с использованием хромато-масс-спектрометрического метода и процедуры, близкой к описанной в методических указаниях МУК 4.1.1061-01. С целью интенсификации процесса ЭКР органического ЗВ применена методика использования в качестве технологической жидкости водного раствора двух поверхностно-активных веществ: анионита АВ-17 и неонола АФ 9-12. Обработка полученных результатов эксперимента проводилась с помощью описанного в ранее эмпирико-математического метода и предложенной в нем функции. Продемонстрировано хорошее качество аппроксимации экспериментальных зависимостей концентрации от обеих координат с помощью этой функции: во всех рассмотренных опытах коэффициенты детерминации  $R^2 > 0.9986$ . Рассчитаны параметры аппроксимирующих функций. Определены кривые границ достижения концентрацией этилбензола в образцах почвы уровня ПДК-MPC ≤ 0.5 мг/кг (MPC – Maximum Permissible Concentration) в процессе ЭКР. На основании этих данных предложены практические рекомендации по выбору условий и режимов проведения процесса ЭКР, максимально снижающих временные и финансовые затраты и улучшающих его качество.

*Ключевые слова:* загрязняющее вещество, этилбензол, пространственно-временные профили концентраций, электрокинетическая ремедиация, дренажный раствор, глинистая почва, эмпирикоматематический метод.

DOI: 10.31857/S0207401X22120068

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Как мы уже отмечали в наших предыдущих статьях [1–3], причинами возрастающего в последнее время интереса к технологии электрокинетической ремедиации (ЭКР) почвы являются ее техническая простота, малозатратность и высокая эффективность. Технология ЭКР основана на экспериментально наблюдаемом перемещении находящихся в грунтах загрязняющих веществ (ЗВ) в результате приложения постоянного электрического напряжения между парой электродов, имплантированных в грунт по обеим сторонам загрязненного участка.

Теоретические основы ЭКР были детально изучены ранее [4–11]. Существует несколько электрохимических явлений, происходящих при приложении электрического поля к почвен-

ному массиву. Однако основными транспортными механизмами, релевантными с точки зрения рекультивации, являются электромиграция, электроосмос и электрофорез. Очевидно, что в этих условиях значительную роль играют поверхностно-активные свойства дренажного раствора — технологической жидкости, применяемой в процессе ЭКР.

В предлагаемой статье описано исследование ЭКР глинистой почвы, загрязненной органическим соединением — этилбензолом, выбранным в качестве модельного гидрофобного загрязнителя, поскольку он часто встречается на загрязненных участках почв вблизи возможных мест его утечки: бензозаправочных станций, хранилищ нефтепродуктов и т.п.



Рис. 1. Схематическое изображение мицеллы: 1 – гидрофобная часть мицеллы, содержащая "н-парафиновые" гидрофобные участки молекул; 2 – гидрофильная часть мицеллы, состоящая из полиоксиэтиленовых частей цепей, образующих гидрофильную "шубу" мицеллы.

#### 2. ОСОБЕННОСТИ ПОВЕДЕНИЯ ДРЕНАЖНЫХ РАСТВОРОВ В ПРОЦЕССЕ ЭКР

В ранних работах, посвященных ЭКР грунтов, не уделялось особого внимания выбору дренажных растворов. Обычно в качестве таковых, особенно в случае ЭКР почв, загрязненных металлами, выбирались растворы простейших электролитов — солей галогенидов щелочных металлов. Например, в наших работах [1, 3, 12], посвященных очистке почв от ртути, дренажным раствором служил 1%-ный раствор бромида натрия.

Экспериментальные данные показывают, что тип дренажных растворов играет ключевую роль в показателях эффективности удаления тех или иных 3В. Так, для увеличения мобильности органических 3В в ходе ЭКР в почве обычно используются поверхностно-активные вещества (ПАВ) [13, 14], тогда как для очистки от тяжелых металлов применяются электролиты и комплексные агенты [15].

Наиболее отчетливо эта роль заметна, когда в качестве дренажного раствора выступают смеси ПАВ, причем очень часто эффективность удаления ЗВ является более значительной при использовании смеси ПАВ по сравнению с применением каждого из ее компонентов по отдельности. Следует подчеркнуть, что выбор ПАВ для эксперимента, как правило, проводится методом проб и ошибок.

Наш собственный эксперимент показал, что в процессе ЭКР почвы от таких органических ЗВ, как этилбензол, наиболее эффективным является сочетание анионита AB-17 – N<sup>+</sup>(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>Cl<sup>-</sup> или анионита AHKC – CH<sub>2</sub>N(C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>SH)C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>N(C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>SH)<sub>2</sub> и неионогенного ПАВ неонола оксиэтилированного моноалкилфенола A $\Phi$  9-*n* – C<sub>9</sub>H<sub>19</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>O(C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O)<sub>*n*</sub>H,

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 12 2022

где число атомов углерода в алкильном радикале равно 9, а n — усредненное число молей окиси этилена, присоединенное к молю алкилфенола, равное, как правило, 4, 6, 8, 9, 10, 12. Ниже мы подробнее остановимся на относительном соотношении этих ПАВ в дренажном растворе.

Здесь возникает вопрос: почему именно эти ПАВ играют такую важную роль в процессе ЭКР? Обратимся к существующим представлениям о структурообразовании в растворах ПАВ.

Благодаря своей асимметричной структуре мономер ПАВ, в данном случае неионогенного ПАВ АФ 9-n, агрегируется в огромную молекулу, которая называется мицеллой (рис. 1). Мицелла содержит гидрофобную часть I внутри, в ядре, и гидрофильную головную группу 2 снаружи. Следовательно, мицелла будет либо захватывать органические загрязнители в центральной части, либо связывать противоионы на поверхности, чтобы отделить загрязнители от окружающей среды. Смесь анионных и неионных ПАВ обладает уникальными характеристиками: низкой критической концентрацией мицелл и низким адсорбционным сродством к почвенной среде.

Поэтому ожидается и в эксперименте наблюдается, что эффективность рекультивации смешанного раствора ПАВ будет лучше, чем у одного из компонентов раствора ПАВ. Более подробно о повышении результативности рекультивации почв, содержащих органические ЗВ с низкой гидропроницаемостью, с помощью дренажных растворов, содержащих смеси ПАВ с различной ионогенностью, т.е. о так называемом эффекте синергизма, написано в работах [16, 17].

Настоящая статья посвящена исследованию ЭКР глинистой почвы, загрязненной этилбензолом, при использовании в качестве технологической жидкости растворов в воде ПАВ — сильноосновного анионита AB-17 и неионогенного неонола AФ 9-12 с различной концентрацией и фиксированным концентрационным соотношением между ними, равным 1 : 4.

### 3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

#### Лабораторная установка для проведения ЭКР-исследований

Установка схематично показана на рис. 2. Главным элементом установки является реактор 1 в форме параллелепипеда, изготовленный (склеенный) из листового оргстекла. Общая длина реактора равна 30 см. Он состоит из трех больших отделений: анодного отсека 2, рабочего отсека 3 и катодного отсека 4. Рабочий отсек, заполняемый песком, условно разбит сетчатыми перегородками 5 (размер ячеек перегородок не позволяет перемещаться частицам песка вдоль реактора, но не препятствует движению молекул (ионов) среды), на 10 камер 6, обозначающих собой участки почвы, находящиеся на различных расстояниях от анода и образующих так называемый пространственный профиль. В ходе эксперимента из этих камер берутся пробы почвы для анализа содержания в них 3B, к анодному (2) и катодному (4) отсекам подводятся анод 7 и катод 8.

Для снабжения установки дренажным раствором имеются входной 9 и выходной 10 штуцеры, через которые в установку поступает и из нее выходит дренажный раствор. Дренажный раствор поступает в анодный отсек 2 по линии 11 через входной штуцер 9 с помощью перистальтического насоса 12 из сосуда с раствором 13, который готовится заранее с соблюдением исходных концентраций ПАВ. Из катодного отсека 4 дренажный раствор вытекает через выходной штуцер 10 по линии 14 в сливной сосуд 15. Анодный и катодный отсеки отгорожены от рабочего отсека пористым материалом 16 и 17, размер пор которого не позволяет перемещаться частицам песка вдоль реактора, но не препятствует движению молекул (ионов) среды.

Всего было проведено четыре опыта по измерению зависимости концентрации  $C(M\Gamma/K\Gamma)$  этилбензола в почве в ходе ее ЭКР от расстояния x (см) точки измерения до анода (расположения камеры  $\delta$  в установке) и времени измерения t (сут).

Концентрации дренажных растворов в этих опытах показаны в табл. 1. В этой таблице приведены также параметры, определенные нами в процессе аппроксимации экспериментальных зависимостей теоретической функцией C(x,t) – пространственно-временным профилем (ПВП) концентраций этилбензола в реакторе. (Подробно о виде этой функции см. ниже, в разд. 4 статьи.)

В ходе предварительных тестов было установлено, что оптимальное отношение концентрации анионита к концентрации неиногенного ПАВ в дренажном растворе равно 1 : 4 (вес.%). Это совпадает с данными, представленными в работах [16, 17] для аналогичных систем. Суммарная концентрация ПАВ в наших экспериментах изменялась от 0.75 до 3.0 вес.%.

Порядок работы на установке в ходе всех опытов однотипен. Вначале рабочий отсек 3 (рис. 1) заполняется образцом испытуемого грунта. В настоящей работе в качестве такового использовалась глинистая почва, взятая на садовом участке в Дмитровском районе Московской области. Исходные образцы почвы пропитывались этилбензолом с усредненной общей концентрацией в 100 мг/кг. Далее сосуд 13 и реактор 1, состоящий из анодного отсека 2, рабочего отсека с грунтом 3 и катодного отсека 4, заполняются дренажным раствором необходимой концентрации. Затем включаются постоянное напряжение между электродами 7 и 8 (в большинстве экспериментов оно



Рис. 2. Схема электрокинетической установки (подробнее см. в тексте).

составляет 20 В) и перистальтический насос 12, прокачивающий дренажную жидкость через глинистую почву в рабочем отсеке. Обычная продолжительность эксперимента — около 30 ч. С интервалом в 1 ч из каждой камеры 6 берутся пробы почвы, содержание этилбензола в которых анализируется хромато-масс-спектрометрически с помощью методики, схожей с описанной в методических указаниях МУК 4.1.1061-01 [18].

Всего в ходе одного опыта общей продолжительностью 30 ч с разбивкой в 1 ч (t = 0, 1, 2, ...,30 ч) проводится измерение  $31 \times 10 = 310$  величин концентраций C(x,t) этилбензола в пробах почвы, взятых в 10 камерах. Наборы из этих величин, описывающие ПВП концентраций этилбензола в данном ЭКР-процессе в численном виде, из-за их громоздкости мы здесь не приводим. Полученные результаты измерений в каждом из опытов представлены в виде трехмерных графиков зависимостей  $C(x,t) - \Pi B \Pi$  процесса ЭКР. На этих графиках (рис. 3-6) экспериментальные значения концентраций 3B с координатами ( $x_i$ ;  $t_i$ ;  $C_i$ ) показаны в виде точек (шариков). Количество точек, особенно в областях немонотонного изменения концентрации от пространственной координаты и времени, настолько велико и их взаимное расположение столь замысловато, что понять показанное на рисунках, без одновременной демонстрации описывающих экспериментальные зависимости  $C_i$  от  $x_i$  и  $t_i$  теоретических поверхностей C(x,t), не представляется возможным. Поэтому после нанесения экспериментальных точек ( $x_i$ ;  $t_i$ ;  $C_i$ ) в 3D-пространстве следующим шагом для нас стало теоретическое построение ПВП концентраций ЗВ в процессе ЭКР грунта, загрязненного этилбензолом.

73

Параметры	Ед.изм.	Опыт 1	Опыт 2	Опыт 3	Опыт 4
Концентрация анионита АВ-17 в воде	%	0.15	0.2	0.5	0.6
Концентрация неонола АФ 9-12 в воде	%	0.6	0.8	2.0	2.4
$C_0$	мг/кг	100	100	100	100
$k_{ m t}$	$cyt^{-1}$	0.04	0.04	0.04	0.04
$t_0$	сут	0.03	0.03	0.03	0.03
$k_{\mathrm{xt}}$	$\mathrm{cm}^{-1}\mathrm{cyt}^{-1}$	0.03	0.03	0.03	0.03
$x_0$	СМ	1.5	1.5	1.5	1.5
L	СМ	20	20	20	20
$C_{g\ 1}$	мг/кг	80	60	40	40
$k_{gx\ 1}$	$cm^{-1}$	0.5	0.5	0.5	0.5
$x_{g\ 1}$	СМ	11	11	11	11
<i>t</i> <sub>g 1</sub>	СУТ	4	4	4	4
$k_{gt1}$	$cyt^{-1}$	0.15	0.15	0.15	0.15
$\alpha_1$	рад	1.7	1.7	1.7	1.7
$C_{g2}$	мг/кг	60	40	20	10
k <sub>gx 2</sub>	$\mathrm{cm}^{-1}$	0.1	0.1	0.1	0.1
$x_{g 2}$	СМ	6	4	2	1
t <sub>g 2</sub>	СУТ	15	15	15	15
k <sub>gt 2</sub>	$cyt^{-1}$	0.05	0.05	0.05	0.05
$\alpha_2$	рад	-0.8	-0.8	-0.8	-0.8
$C_{g3}$	мг/кг	40	20	10	5
k <sub>gx 3</sub>	$\mathrm{cm}^{-1}$	0.1	0.1	0.1	0.1
$x_{g3}$	СМ	8	6	2	1
$t_{g3}$	сут	25	25	25	25
k <sub>gt 3</sub>	$\operatorname{cyt}^{-1}$	0.05	0.05	0.05	0.05
$\alpha_3$	рад	1.2	1.2	1.2	1.2
MPC	мг/кг	0.5	0.5	0.5	0.5
$R^2$	—	0.99862	0.99875	0.99898	0.99869

Таблица 1. Значения параметров формул, описывающих ПВП концентраций ЗВ, определенные в процессе аппроксимации экспериментальных данных теоретическими зависимостями

# 4. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА РЕЗУЛЬТАТОВ ИЗМЕРЕНИЙ

Математическая обработка экспериментальных ПВП загрязняющих веществ в процессе ЭКР проводилась согласно формуле, приведенной ранее [3]:

$$C(x,t) = \begin{bmatrix} = C_0 \exp\{-k_t(t-t_0) - k_{xt}(t-t_0)(L-x+x_0)\} + & (1a) \end{bmatrix} \\ + C_{g1} \exp\{-k_{gx1}[(L-x-x_{g1})\cos(\alpha_1) - (t-t_{g1})\sin(\alpha_1)]^2 - k_{gt1}[(L-x-t_{g1})\cos(\alpha_1)]^2 + & (1b) \end{bmatrix} \\ + C_{g2} \exp\{-k_{gx2}[(L-x-x_{g2})\cos(\alpha_2) - (t-t_{g2})\sin(\alpha_2)]^2 - k_{gt2}[(L-x-t_{g2})\sin(\alpha_2)]^2 - k_{gt2}[(L-x-t_{g2})\sin(\alpha_2) + (t-t_{g2})\cos(\alpha_2)]^2 + & (1b) \end{bmatrix}$$
(1)  
$$+ C_{g3} \exp\{-k_{gx3}[(L-x-x_{g3})\cos(\alpha_3) - (t-t_{g3})\sin(\alpha_3)]^2 - k_{gt3}[(L-x-t_{g3})\sin(\alpha_3) + (t-t_{g3})\cos(\alpha_3)]^2 \}.$$

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 12 2022



Рис. 3. Пространственно-временные профили концентраций этилбензола в почве в процессе ее ЭКР. Опыт 1 (см. табл. 1 и текст).

Функция (1) состоит из двух частей: слагаемого (1а) и остальных слагаемых – части (1б)–(1г). Часть (1а) – базовая функция, описывающая ПВП с асимптотическим поведением одновременно по пространственной, x, и временной, t, координатам. Значения параметров в части (1а) следующие:  $C_0$  (мг/кг) — исходная концентрация 3В в почве, не зависящая от *x*;  $k_t$  (сут<sup>-1</sup>) – эффективная константа скорости удаления ЗВ из грунта в базовом процессе;  $t_0$  (сут) – коэффициент, характеризующий расположение поверхности, описываемой базовой функцией (1a), вдоль оси t;  $k_{xt}$  (см<sup>-1</sup> · сут<sup>-1</sup>) — коэффициент, описывающий "крутизну" изменения концентрации ЗВ в зависимости от пространственной координаты х в текущий момент времени t;  $x_0$  (см) — коэффициент, характеризующий расположение базовой функции (1а) вдоль оси x; L (см) – расстояние между анолом и католом.

Слагаемые (1б), (1в) и (1г) представляют собой добавочные двумерные гауссовые пики, описывающие неассимптотическое поведение ПВП рассматриваемого ЭКР-процесса. Значения этих параметров для одного из пиков (для примера – первого) следующие:  $C_{g1}$  (мг/кг) – концентрация ЗВ в максимуме двумерной гауссовой функции;  $k_{gx1}$  (см<sup>-1</sup>) и  $k_{gt1}$  (сут<sup>-1</sup>) – константы, характеризующие "крутизну" гауссова пика в направлении координат *x* и *t*, соответственно;  $x_{g1}$  (см) и  $t_{g1}$  (сут) – па-

раметры, описывающие положение точки проекции максимума гауссового пика на координатную плоскость (x; t);  $\alpha_1$  (рад) — угол между "осью" проекции на плоскость (x; t) гауссового пика в направлении координаты t и осью системы координат t. Аналогично описываются параметры для гауссовых пиков 2, 3, ... и т.д. Все перечисленные параметры функции (1), а также коэффициенты детерминации R<sup>2</sup> были определены в ходе обработрезультатов четырех КИ опытов методом аппроксимации с помощью итерационного алгоритма Левенберга-Марквардта (Levenberg-Marquardt) в рамках программы OriginPro 2015 и приведены в табл. 1.

На рис. 3-6 серой сеткой изображены теоретические поверхности, рассчитанные по формуле (1) с помощью наборов параметров соответствующих опытов (табл. 1). Обратим внимание на следующие важные факты, наблюдаемые при рассмотрении результатов аппроксимации ЭКР-экспериментов теоретической формулой (1).

1. Качество аппроксимации во всех четырех опытах оказалось достаточно высоким, несмотря на наблюдаемый разброс экспериментальных точек, особенно на участках с высокими значениями концентраций. Во всех рассмотренных случаях коэффициенты детерминации  $R^2 > 0.9986$ .

2. В ряду различных величин концентраций дренажных растворов параметры базовой функ-



Рис. 4. Пространственно-временные профили концентраций этилбензола в почве в процессе ее ЭКР. Опыт 2 (см. табл. 1 и текст).

ции (1a) с асимптотическим поведением не меняются.

3. Высота гауссовых пиков с ростом концентрации дренажного раствора монотонно падает.

4. Положение максимумов гауссовых пиков как по временной, так и по координатной осям и их поворот относительно координатных осей при изменении концентрации дренажного раствора, за некоторыми исключениями, не меняется.

5. К исключениям относятся два гауссовых пика, положение которых по временной оси также не изменяется и составляет 15 и 25 сут, но с ростом концентрации дренажного раствора смещается в сторону катода.

В нижней части рис. 3–6 кривыми линиями очерчены границы достижения концентрацией этилбензола в образцах почвы уровня ПДК-МРС (Maximum Permissible Concentration).

Выбор величины ПДК для этилбензола в почве неоднозначен и затруднителен. Если руководствоваться отечественными нормативными актами, то в качестве ПДК следует использовать величину 0.1 мг/кг сухой почвы (ГН 2.1.7.2041-06). Но в цитируемых отечественных гигиенических нормативах не дифференцируется, в какой местности и на какой глубине от поверхности взяты пробы почвы для анализа. Например, на территории ЕС (Польша) максимально допустимая концентрация этилбензола в образцах, полученных на территориях заповедников (группа A), землях с/х назначения (группа В), а также промышленнотранспортных территориях и на землях добычи полезных ископаемых (группа С), причем взятых на разных глубинах от 0 до 15 м, может различаться: от 0.05 до 250 мг/кг [19, 20]. В настоящей работе в качестве ПДК мы выбрали MPC = 0.5 мг/кг.

Эти кривые мы изобразили отдельно на рис. 7 на двумерной плоскости в координатах (x,t). Каждая из этих кривых рассчитывается по формуле неявной функции:

$$C(x,t) - MPC = 0, \qquad (2)$$

где функция C(x,t) задана формулой (1), а величина MPC приведена в табл. 1.

Построение кривых на рис. 3–7 осуществлялось с помощью программы OriginPro 2015. Из рис. 7 видно, что рост концентрации дренажного раствора не способствует очистке почвы от этилбензола в интервале времени 0–8 сут, монотонно увеличивает скорость очистки в интервале 8–32 сут и практически не влияет на время достижения степени очистки MPC  $\leq 0.5$  мг/кг, когда это время превышает 32 сут, асимптотически достигая величины MPC на пространственной оси на расстоянии 17.5 см от анода.

Отсюда следуют практические выводы:

1. При ограниченном времени ЭКР оптимальным является процесс длительностью 20–22 сут. В этом случае увеличение концентрации в водном дренажном растворе анионита AB-17 до



**Рис. 5.** Пространственно-временные профили концентраций этилбензола в почве в процессе ее ЭКР. Опыт 3 (см. табл. 1 и текст).



Рис. 6. Пространственно-временные профили концентраций этилбензола в почве в процессе ее ЭКР. Опыт 4 (см. табл. 1 и текст).



**Рис.** 7. Кривые границ достижения концентрацией этилбензола в образцах почвы уровня ПДК-МРС  $\leq 0.5$  мг/кг в процессе ЭКР. Области с МРС < 0.5 мг/кг расположены ниже каждой из изображенных линий. Номера линий соответствуют номерам опытов (см. табл. 1).

0.6 вес.% и неонола АФ 9-12 до 2.4 вес.% (опыт 4 в табл. 1) дает возможность достичь степени очист-ки уровня MPC  $\leq$  0.5 мг/кг на расстоянии 14 см от анода.

2. Во временном интервале 22–32 сут ЭКРпроцесс проводить нерационально из-за появления гауссова пика выхода этилбензола с максимумом на 25-е сут, в результате чего уровень очистки MPC  $\leq 0.5$  мг/кг в реакторе достигается лишь на расстоянии от 0 до 2.5–12.5 см от анода в ряду концентраций дренажного раствора в опытах 1–4 (табл. 1).

3. Если время не ограничено, то следует проводить процесс ЭКР в течение 32 и более суток. При этом возможно использовать минимальные концентрации в дренажном растворе: анионита AB-17 – до 0.15 вес.% и неонола A $\Phi$  9-12 – до 0.6 вес.% (опыт 1)), что значительно удешевляет процесс очистки почвы.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследован процесс ЭКР глинистой почвы, загрязненной органическим соединением этилбензолом. Для экспериментального измерения зависимости концентрации ЗВ от времени и пространственной координаты в ходе электрокинетической леконтаминации почвы разработана специальная установка. Измерение концентрации этилбензола проводилось хромато-масс-спектрометрически с помощью методики, близкой к описанной в методических указаниях МУК 4.1.1061-01.

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 12 2022

Для интенсификации процесса ЭКР органического ЗВ применена методика использования в качестве технологической жилкости волного раствора двух ПАВ: анионита АВ-17 и неонола АФ 9-12. С целью математического описания процесса применен разработанный нами ранее [3] метод эмпирико-математического анализа, в котором зависимость концентрации ЗВ от времени и координаты расположения точки измерения относительно электродов, внедренных в почву на очищаемом участке, на которые подано постоянное электрическое напряжение, описывается предложенной формулой: суммой базовой экспоненциальной асимптотической по временной и пространственной координатам функции и некоторого числа добавочных двумерных гауссовых функций, которые описывают отклонение от асимптотического поведения рассматриваемой зависимости.

Продемонстрировано хорошее качество аппроксимации экспериментальных зависимостей концентрации от обеих координат с помощью предложенной функции: во всех рассмотренных случаях коэффициенты детерминации  $R^2 > 0.9986$ . Определены параметры аппроксимирующих функций.

Определены кривые границ достижения концентрацией этилбензола в образцах почвы уровня ПДК-МРС ≤ 0.5 мг/кг в процессе ЭКР. На основании этих данных предложены практические рекомендации по выбору условий и режимов проведения процесса ЭКР, максимально снижающих временны́е и финансовые затраты и улучшающих его качество.

Работа выполнена в рамках госзадания ФИЦ ХФ РАН по теме 1.1. (Физика и химия новых наноструктурированных систем и композитных материалов с заданными свойствами), регистрационный номер 122040500058-1.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Кумпаненко И.В., Рощин А.В., Иванова Н.А. и др. // Хим. физика. 2017. Т. 36. № 7. С. 5; https://doi.org/10.1134/S199079311704008X
- Кумпаненко И.В., Иванова Н.А., Ковалева Н.Ю. и др. // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 7. С. 47.
- 3. Кумпаненко И.В., Иванова Н.А., Шаповалова О.В. и др. // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 9. С. 55.
- Acar Y.B., Alshawabkeh A.N. // Environ. Sci. Technol. 1993. V. 27. № 13. P. 2638; https://doi.org/10.1021/es00049a002
- Acar Y.B., Galeb R.J., Alshawabkeh A.N. et al. // J. Hazard. Mater. 1995. V. 40. P. 117; https://doi.org/10.1016/0304-3894(94)00066-P
- Yeung A. T. // Separ. Purif. Technol. 2011. V. 79. P. 124; https://doi.org/10.1016/j.seppur.2011.01.022
- Wise D.L., Trantolo D.J., Cichon E.J. et al. Remediation Engineering of Contaminated Soils (Environmental Science & Pollution). 1st. ed. N.Y., USA: CRC, 2000.

- Liu W. // J. Differential Equations. 2009. V. 246. P. 428; https://doi.org/10.1016/j.jde.2008.09.010
- Alshawabkeh A.N., Acar Y.B. // J. Geotech. Engrg. 1996. V. 122. P. 186; https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9410(1996)122:3(186)
- Acar Y.B., Alshawabkeh A.N., Parker R.A. // U.S. Environmental Protection Agency. Cincinnati, OH 45268. 1997. Report № EPA/600/R-97/054.
- Tsai P., Huang C.-H., Lee E. // Langmuir. 2011. V. 27. P. 13481; https://doi.org/10.1021/la203240b
- 12. Лейкин Ю.А., Кумпаненко И.В., Рощин А.В. и др. // Рос. хим. журн. (Журн. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева). 2013. Т. 57. № 1. С. 52.
- West C.C. // Environ. Sci. Technol. 1992. V. 26. № 12. P. 2324; https://doi.org/10.1021/es00036a002
- Mercer J.W., Cohen R.M. // J. Contam. Hydrol. 1990. V. 6. P. 107; https://doi.org/10.1016/0169-7722(90)90043-G

- Lestana D., Luob C., Lib X. // Environ. Pollut. 2008. V. 153. P. 3; https://doi.org/10.1016/j.envpol.2007.11.015
- Rosen M.J. // J. Amer. Oil Chem. Soc. 1989. V. 66. P. 1840; https://doi.org/10.1007/BF02660759
- Yuan C., Weng C.-H. // Chemosphere. 2004. V. 57. P. 225; https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2004.05.02
- Определение органических веществ в почве и отходах производства и потребления: Сб. метод. указ. МУК 4.1.1061-01. М.: Федеральный центр госсанэпиднадзора Минздрава России, 2001.
- Perez A.P., Eugenio N.R. // JRC Technical Rep. EC. 2018. P. 1; https://doi.org/10.2760/093804
- 20. *Кумпаненко И.В., Иванова Н.А., Ковалева Н.Ю. и др. //* Хим. физика. 2021. Т. 40. № 1.