



ОРИГИНАЛЬНЫЕ СТАТЬИ

Научная статья

УДК 541.183

doi: 10.17308/sorpchrom.2022.22/10713

Сорбционно-спектрометрическое определение фенольных антиоксидантов в водах

Елена Алексеевна Подолина^{1✉},

Виктор Михайлович Мухин², Миниса Абдуллаевна Ханина³,

Марина Георгиевна Лежнина³, Юлия Александровна Кузнецова³

¹Московский политехнический университет (филиал в г. Электросталь), Электросталь, Россия, podolina70@mail.ru[✉]

²ЭНПО «Неорганика», Электросталь, Россия

³Государственный гуманитарно-технологический университет, Орехово-Зуево, Россия

Аннотация. Исследована адсорбция и десорбция фенольных антиоксидантов (ФА) из водных растворов на активном угле БАУ-А. В соответствии с теорией объемного заполнения пор (ТОЗМ) можно отметить особый механизм адсорбции фенольных антиоксидантов (фенола, крезолов, ионола, гидроксифенолов) в микропорах АУ БАУ-А, в процессе адсорбции происходит не покрытие поверхности пор, а их объемное заполнение. Для описания процессов поглощения фенольных антиоксидантов АУ БАУ-А использованы теория ТОЗМ (модифицированное уравнение Дубинина-Радушкевича) и теория мономолекулярной адсорбции (ТМА) (уравнение Ленгмюра). На основании полученных зависимостей рассчитаны константы адсорбционного равновесия и емкости монослоя.

ФА практически не десорбируются в статических условиях, поэтому их десорбцию из АУ БАУ-А осуществляли в динамических условиях. Полученные диаграммы десорбции ФА показывают, что при использовании в качестве элюента бинарной смеси вода – этанол, вода – ацетонитрил и метанол выход фенолов составляет 78-85%, а элюирование составляет 30 мин.

На основании проведенных экспериментальных данных предложена сорбционно-спектрометрическая методика определения ФА в очищенных сточных водах. Разработанная методика сорбционно-спектрометрического определения ФА характеризуется следующими параметрами: продолжительность единичного анализа 45-60 мин, предел обнаружения 0.1 ПДК «фенольного индекса».

Ключевые слова: активный уголь, адсорбция, десорбция, фенол, крезолы, ионол, гидроксифенолы.

Для цитирования: Подолина Е.А., Мухин В.М., Ханина М.А., Лежнина М.Г., Кузнецова Ю.А. Сорбционно-спектрометрическое определение фенольных антиоксидантов в водах // *Сорбционные и хроматографические процессы*. 2022. Т. 22, № 5. С. 673-683. <https://doi.org/10.17308/sorpchrom.2022.22/10713>

Original article

Sorption-spectrometric determination of phenolic antioxidants in water

Elena A. Podolina^{1✉}, Viktor M. Mukhin², Minisa A. Khanina³,

Marina G. Lezhnina³, Yuliya A. Kuznetsova³

¹Moscow Polytechnic University (Elektrostal branch), Elektrostal, Russian Federation, deineka@bsu.edu.ru[✉]

²ENPO "Neorganika", Elektrostal, Russian Federation

³State University of Humanities and Technology, Orekhovo-Zuevo, Russian Federation

Abstract. The adsorption and desorption of phenolic antioxidants (PA) from aqueous solutions on BAU-A activated carbon was studied. In accordance with the theory of micropore volumetric filling (TMVF), a special mechanism of adsorption of phenolic antioxidants (phenol, cresols, ionol, hydroxyphenols) in the micropores of BAU-A AC can be revealed; during the adsorption process, the filling of the volume of the pores rather than coverage of the surface of the pores occurs. The TMVF theory (modified Dubinin-Radushkevich equation) and



the monomolecular adsorption theory (MAT) (Langmuir equation) were used to describe the adsorption processes of phenolic antioxidants on BAU-A AU. Based on the dependences obtained, the constants of adsorption equilibrium and monolayer capacitance were calculated.

PA were practically not desorbed under static conditions; therefore, their desorption from BAU-A AC was carried out under dynamic conditions. The resulting PA desorption diagrams showed that when a binary mixture of water-ethanol, water-acetonitrile, and methanol was used as an eluent, the yield of phenols was 78-85%, and the elution time was 30 min.

Based on the experimental data, a sorption-spectrometric method for the determination of PA in purified waste water was proposed. The developed technique for the sorption-spectrometric determination of PA is characterized by the following parameters: the duration of a single analysis was 45-60 min, the detection limit was 0.1 MPC of the "phenol index".

Keywords: active carbon, adsorption, desorption, phenol, cresols, ionol, hydroxyphenols.

For citation: Podolina E.A., Mukhin V.M., Khanina M.A., Lezhnina M.G., Kuznetsova Yu.A. Sorption -spectrometric determination of phenolic antioxidants in water. *Sorbtsionnye i khromatograficheskie protsessy*. 2022. 22(5): 673-683. (In Russ.). <https://doi.org/10.17308/sorpchrom.2022.22/10713>

Введение

Фенольные антиоксиданты (ФА) все чаще становятся приоритетными загрязнителями водных объектов. Так, очищенные сточные воды различных химических производств (черная и цветная металлургия, нефтепереработка и фармацевтика) содержат фенол, гидроксид-, алкилфенолы [1-4]. Одним из важнейших экологических показателей качества водных ресурсов является ПДК вредных (токсичных) индивидуальных веществ, а также интегральный показатель группы веществ, например, «фенольный индекс» [5,6].

Современные методики количественного определения фенола, гидроксид- и алкилфенолов на уровне ПДК включают стадию предварительного концентрирования (жидкостно-жидкостная экстракция (ЖЖЭ), сорбция) и дальнейшего определения с помощью различных физико-химических и комбинированных методов анализа. ЖЖЭ фенола, алкил- и гидроксифенолов подробно изучена в [7-10], однако данные по сорбции алкил- и гидроксифенолов активными углями (АУ) практически отсутствуют [11,12]. Целью настоящей работы была разработка сорбционно-спектрометрической методики определения фенольных антиоксидантов в водах.

Теоретическая часть

Активный уголь (АУ) БАУ-А имеет ячеисто-пористую структуру, напомина-

ющую неорганизованную паутину, поверхность которого образована боковыми фрагментами кристаллита и содержит различные функциональные группы: R-, H-, фенольные, хиноидные, карбоксильные, лактонные и карбонильные [13,14].

Для контроля качества АУ применяются различные химические методы, позволяющие определять основные физико-химические свойства: такие как, абсорбционная активность по йоду, по метиленовому голубому, суммарный объем пор [15]. В то же время для АУ, изготавливаемых из растительного сырья, можно применить так называемый fingerprint-метод идентификации – «метод отпечатков пальцев» – микроэлементный состав [16]. Определение микроэлементного состава АУ БАУ-А и древесины березы осуществляли по методике, описанной в [17,18]. В результате анализа обнаружено 60 элементов (кроме водорода, углерода, кислорода, азота и серы), для шести элементов (Se, Ge, Ru, Re, Tl, Pt) содержание оказалось ниже предела обнаружения.

Визуализация распределения химических элементов, входящих в состав АУ БАУ-А и древесины березы представлены в виде диаграммы (рис. 1), отражающей зависимость концентрации химических элементов в объектах исследования (АУ и древесина) от их порядкового номера в Периодической системе хими-

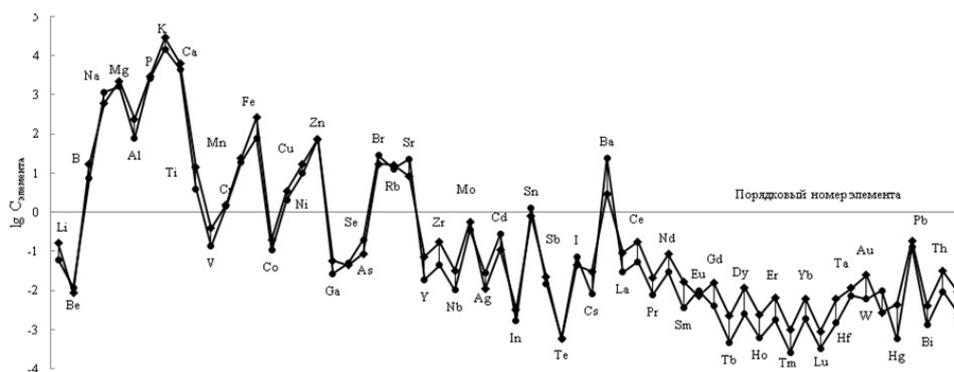


Рис. 1. Периодическая зависимость $\lg C$ химических элементов в АУ БАУ-А и древесины березы от порядкового номера элемента в периодической системе Д.И. Менделеева.
Fig. 1. Periodic dependence of the $\lg C$ of chemical elements in AU BAU-A and birch tree on the ordinal number of the element in the periodic system of D.I. Mendeleev.

ческих элементов Д.И. Менделеева. Визуальный анализ диаграмм, отражающих периодическую зависимость в распределении химических элементов в объектах исследования, показывает их идентичность.

Экспериментальная часть

Используемые в исследовании реактивы: этанол, х.ч., 95 об.% (ПХФК ОАО «Медхимпром»); ацетонитрил, (хром. ч), метанол, х.ч., 99.5 масс.%; 4-аминобензолсульфокислота (сульфаниловая кислота) (ч.д.а.), карбамид (мочевина) (ч.д.а.), NaNO_2 (х.ч.), NaOH (х.ч.), HCl (х.ч.); ФА: фенол (ФЛ), 2-метилфенол (о-крезол), 3-метилфенол (м-крезол), 4-метилфенол (п-крезол), 4-метил-2,6-дитретбутилфенол (ионол), 2-гидроксифенол (пирокатехин), 3-гидроксифенол (резорцин), 4-гидроксифенол (гидрохинон) (табл. 1) квалификации х.ч.; состав элюирующих растворов: вода – этанол ($\varphi_2=50\%$); вода – ацетонитрил ($\varphi_2=80\%$), метанол. Сорбент АУ БАУ-А (ГОСТ 6217-74) изготовлен в НПО «Неорганика» (Электросталь, Московской области).

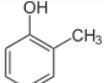
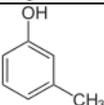
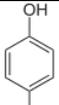
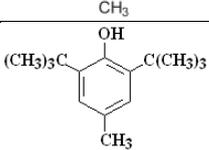
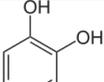
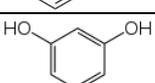
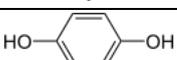
Оборудование. Количественное определение ФА осуществляли на спектрофотометре UNICO, модель 2800; перемешивание сорбционной системы в статических условиях осуществляли на смеси-

теле типа Vortex, скорость перемешивания 1500 об/мин. Сорбцию и десорбцию ФА осуществляли по методикам, описанным в [21]. Водные растворы ФА проявляют слабокислотные свойства (pK_a принимают значения от 9.32 (резорцин) до 12.33 (ионол)), поэтому адсорбцию и десорбцию этих соединений осуществляли при pH 3-5.

Определение ФА в контактных растворах (сорбции и десорбции) осуществляли методом спектрометрии по реакции ФА с диазотированной сульфаниловой кислотой (ДСК). Методика приготовления раствора ДСК для определения индивидуальных фенолов и «фенольного индекса» описана в [22-24].

Полученные азокрасители (продукты взаимодействия ФА с ДСК) поглощают в интервале от 360 до 410 нм, минимальный сигнал внутригрупповой селективности наблюдается при 380 нм, поэтому для всех исследуемых фенолов количественное определение осуществляли при аналитической длине волны 380 нм [22]. Коэффициенты линейной корреляции градуировочных зависимостей $R=0.98-0.99$ (рис. 2), минимально определяемая концентрация 0.1-0.4 мкмоль/дм³.

Таблица 1. Физико-химические параметры исследуемых фенольных антиоксидантов [19,20]
 Table 1. Physicochemical parameters of the studied phenolic antioxidants [19,20]

ФА	pK _a	c _с , мг/дм ³	d, Å	μ, Д	lg P	ПДК в воде, мг/дм ³
	9.89	67.0	5.7	1.6	1.46	0.001
	10.29	58.66	6.51	1.35	2.13	0.002
	10.09	58.57	6.52	1.61	2.00	0.004
	10.26	58.48	6.53	1.58	2.13	0.004
	12.33	55.34	6.9	1.66	5.54	ПДК в воздухе 10 мг/м ³
	9.34	59.39	6.43	2.62	0.88	0.1
	9.15	58.67	6.4	2.07	0.8	0.1
	9.85	59.76	6.39	0	0.59	0.2

ПДК «фенольный индекс» – 0.1 мг/дм³

Расчет величины адсорбции и десорбции, а также обработку полученных изотерм и физико-химических параметров сорбции ФА проводили с учетом компьютерных программ «Statisticafor» Windows 10.

Обсуждение результатов

В таблице 2 приведены экспериментально определенные времена достижения сорбционного равновесия ФА, степени их сорбции. Полученные результаты статистически обработаны, (δс) относительная погрешность определения при доверительной вероятности (P) не превышает 10%. Как показывают исследования, проведенные в [21] при турбулентном перемешивании сорбционной системы (сорбат – сорбент) наиболее полное сорбирование исследуемых фенолов достигается за 4-6 мин. Для выяснения

механизма сорбции ФА построены изотермы сорбции и их линеаризация (рис. 3-5).

Сорбция всех изученных ФА на АУ БАУ-А протекает по механизму физической сорбции и соответствуют изотермам Ленгмюра (начальные участки изотермы прямолинейны, а при увеличении концентрации наблюдается эффект насыщения) [25]. О-крезол, ионол и пирокатехин образуют с ОН-группой фенола внутримолекулярные водородные связи, поэтому сорбируются лучше, чем ФА у которых метильный или гидроксильный радикал расположен в *m*- или *n*-положениях. В соответствии с теорией объемного заполнения микропор (ТОЗМ) можно отметить особый механизм адсорбции ФА в микропорах АУ БАУ-А, в

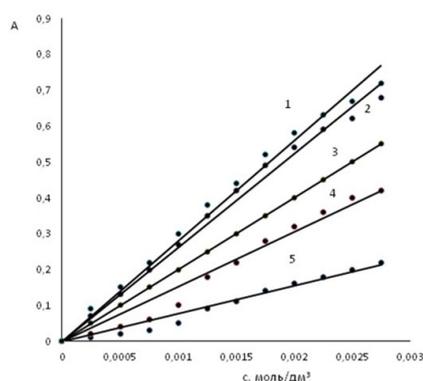


Рис. 2. Вееры градуировок при определении фенольных антиоксидантов по реакции с диазотированной сульфаниловой кислотой $\lambda=380$ нм, pH=8: 1 – о-крезол, 2 – м-крезол, 3 – фенол, 4 – резорцин, 5 – пирокатехин.

Fig. 2. Fans of graduations in the determination of phenolic antioxidants by reaction with diazotized sulfanylic acid $\lambda = 380$ nm, pH=8

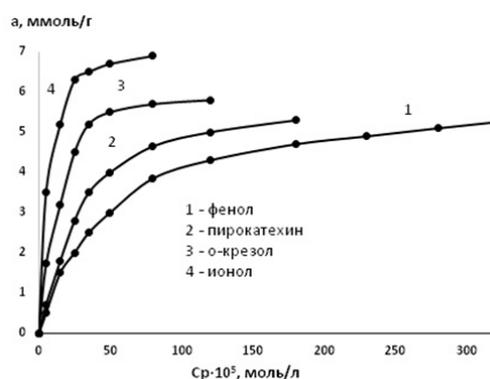


Рис. 3. Изотермы сорбции фенола, алкил- и гидроксифенолов на АУ БАУ-А

Fig. 3. Isotherms of sorption of phenol, alkyl- and hydroxyphenols on AU BAU-A

Таблица 2. Время достижения (t, мин) сорбционного равновесия, и величина степени сорбции R, % растворов ФА на АУ БАУ-А; размер частиц АУ – 2.8-2.0 мм; n=5, P=0.95; S²=0.0019-0.010; S=0.04-0.11; Sr =0.04-0.11; $\delta c=4-9$ %

Table 2. Time to reach (t, min) sorption equilibrium, and the degree of sorption R, % of PA solutions on BAU-A AC; AC particle size was 2.8-2.0 mm; n=5, P=0.95

ФА	t=2 мин	R, %	t=4 мин	R, %	t=6 мин	R, %
фенол		87.9±1.2		94.5±0.7		98.2±1.3
о-крезол		91.3±1.1		96.2±0.8		99.1±0.9
м-крезол		89.1±1.3		95.8±1.0		98.7±0.8
п-крезол		88.5±1.2		95.2±1.1		98.7±0.7
ионол		93.9±1.1		97.1±0.9		99.2±0.6
пирокатехин		92.9±0.9		96.5±0.9		99.1±0.6
резорцин		91.3±0.8		95.8±1.6		98.9±0.9
гидрохинон		89.9±0.7		95.1±0.8		98.5±0.8

процессе адсорбции происходит не покрытие поверхности пор, а их объемное заполнение. Плато на изотермах сорбции соответствует заполнению пор в процессе, аналогичном капиллярной конденсации, а не послойному образованию адсорбционной пленки на стенках пор.

Для описания процессов поглощения ФА АУ БАУ-А использованы ТОЗМ (модифицированное уравнение Дубинина-Радускевича) и теория мономолекулярной адсорбции (ТМА) (уравнение Ленгмюра). На основании полученных зависимостей рассчитаны константы адсорбционного равновесия и емкости монослоя (табл. 3).

Изменение энергии Гиббса имеет отрицательный характер, что свидетельствует о самопроизвольности процесса адсорбции, максимальное значение емкости монослоя характерно для ионола.

На рис. 5 представлены изотермы ФА в координатах уравнения Дубинина-Радускевича. На основании полученных уравнений прямых рассчитаны параметры сорбции (табл. 4). Согласно ТОЗМ, можно предположить, что адсорбция ФА осуществляется в микропорах, поэтому в процессе адсорбции происходит не покрытие пор, а их объемное заполнение.

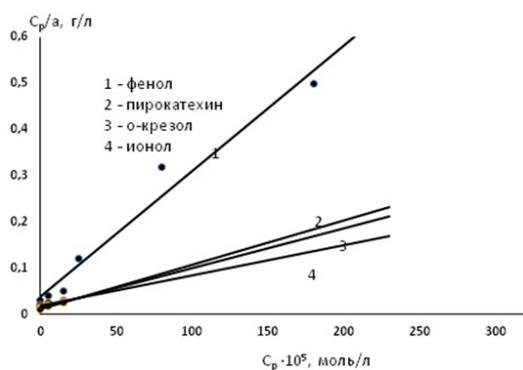


Рис. 4. Спрямоленные изотермы адсорбции фенола, алкил- и гидроксифенолов в координатах уравнения Ленгмюра
 Fig. 4. Linearized adsorption isotherms of phenol, alkyl- and hydroxyphenols in the coordinates of the Langmuir equation

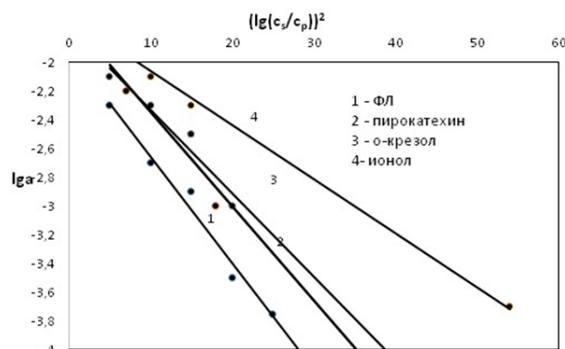


Рис. 5. Спрямоленные изотермы адсорбции фенола, алкил- и гидроксифенолов в координатах Дубинина-Радушкевича
 Fig. 5. Linearized adsorption isotherms of phenol, alkyl- and hydroxyphenols in Dubinin-Radushkevich coordinates

Таблица 3. Сорбционные параметры ФА на АУ БАУ-А, рассчитанные по уравнениям Ленгмюра и Дубинина-Радушкевича

Table 3 Sorption parameters of PA on BAU-A AC, calculated using the Langmuir and Dubinin-Radushkevich equations

сорбат	$-\Delta G$, кДж/моль	a_m , ммоль/г	K	r^2	E, кДж/моль	α_{∞} , ммоль/г	R, %
фенол	21 ± 1	2.6 ± 0.1	5940	0.98	16.0 ± 0.8	7.1 ± 0.4	98
о-крезол	21.6 ± 1	5.6 ± 0.2	18800	0.99	12.0 ± 0.7	16.2 ± 0.6	98
м-крезол	$21,3 \pm 1$	5.1 ± 0.2	4330	0.99	13.2 ± 0.9	4.8 ± 0.3	97
п-крезол	21.2 ± 1	4.9 ± 0.1	4450	0.98	15.5 ± 0.8	5.2 ± 0.4	97
ионол	29.5 ± 1	13.5 ± 0.2	43580	0.99	4.8 ± 0.2	21.6 ± 0.2	98
пирокатехин	19.2 ± 1	2.2 ± 0.1	6850	0.98	17.0 ± 0.5	6.5 ± 0.6	97
резорцин	20.3 ± 1	2.4 ± 0.2	6680	0.98	16.5 ± 0.3	6.4 ± 0.3	98
гидрохинон	20.5 ± 1	2.6 ± 0.2	6430	0.99	15.9 ± 0.4	6.2 ± 0.4	98

ФА практически не десорбируются в статических условиях, поэтому их десорбцию из АУ БАУ-А осуществляли в динамических условиях. Полученные диаграммы десорбции ФА показывают, что при использовании в качестве элюента бинарной смеси вода – этанол, вода – ацетонитрил и метанол выход фенолов составляет 78-85%, а время элюирования составляет 30 мин.

На основании проведенных экспериментальных данных предложена сорбционно-спектрометрическая методика определения ФА в очищенных сточных

водах. Методика количественного определения ФА в очищенных сточных водах заключается в том, что анализируемую пробу очищенной сточной воды (5.00 см³) помещали в центрифужную пробирку, вместимостью 50 см³, подкисляли 2 моль/дм³ раствором H₂SO₄ до pH=2-3, добавляли навеску АУ (~0.025 г) БАУ-А, помещали на платформу смесителя Vortex и перемешивали в турбулентном режиме в течение 6 мин. Далее сорбент отделяли от контактного раствора и помещали в колонку длиной 180 мм, диаметром 15 мм и элюировали ФА бинарными



Таблица 4. Метрологические характеристики сорбционно-спектрометрического определения ФА.
 Table 4 Metrological characteristics of the sorption-spectrometric determination of PA.

аналиты	X_{cp}	S^2	S	P	$t(P, f)$	ΔX	$\Delta, \%$
фенол	1.97	0.000125	0.008	0.95	2.57	0.02	1.5
пирокатехин	1.93	0.000127	0.009	0.95	2.57	0.04	1.0
о-крезол	1.92	0.000128	0.007	0.95	2.57	0.03	1.0
ионол	1.95	0.000123	0.008	0.95	2.57	0.02	0.5

Таблица 5. Определение правильности, методики сорбционно-спектрометрического определения ФА в очищенных сточных водах методом «введено-найденно»

Table 5 Determination of the correctness of the methods for the sorption-spectrometric determination of PA in purified waste water using the spike recovery test

Аналиты	Содержание фенолов, мг/см ³	Введено ГСО, мг/см ³	Найдено фенолов, мг/см ³	Ошибка определения	
				абс, мг	отн, %
фенол	1.0±0.06	1.00	1.97±0.02	0.03	1.5
пирокатехин	0.95±0.05	1.00	1.93±0.04	0.02	1.0
о-крезол	0.94±0.04	1.00	1.92±0.03	0.02	1.0
ионол	0.96±0.05	1.00	1.95±0.02	0.01	0.5

элюентами (вода – этанол, вода – ацетонитрил, метанол). В полученный элюат добавляли диазотированную сульфаниловую кислоту и фотометрировали при аналитической длине волны 380 нм. Содержание ФА, в пересчете на «фенольный индекс», в очищенной сточной воде определяли по формуле:

$$c_1 = \frac{c_2 \times 1000}{R_1 \times R_1 \times V_{\text{пробы}}}$$

где c_1 – концентрация ФА в анализируемой водной пробе, мг/см³; c_2 – концентрация ФА, найденная по градуировочному графику, мг/см³; R_1 – степень сорбции ФА, R_2 – степень десорбции ФА, $V_{\text{пробы}}$ – объем анализируемой пробы воды, см³.

Разработанная методика сорбционно-спектрометрического определения ФА характеризуется следующими параметрами: продолжительность единичного анализа 45-60 мин, предел обнаружения 0.1 ПДК «фенольного индекса». В таблице 4 приведены метрологические характеристики разработанной методики сорбционно-спектрометрического определения ФА. Правильность разработанной сорбционно-спектрометрической методики определена методом «введено-найденно» (табл. 5).

Закключение

Таким образом, показано, что АУ БАУ-А при турбулентном перемешивании в статических условиях обладает высокой адсорбционной способностью по отношению к ФА и сорбирует их по механизму физической сорбции (изотермы Ленгмюра). Константы адсорбционного равновесия и емкости монослоя, рассчитанные с помощью уравнений Дубинина-Радускевича (теория ТОЗМ) и Ленгмюра (ТМА), подтверждают, что поры в АУ заполняются аналогично капиллярной конденсации. Десорбирование в динамических условиях элюирующими бинарными смесями: вода – этанол, вода – ацетонитрил или метанол позволяет выделить из сорбента 78-85% аналитов.

На основе полученных экспериментальных данных разработана сорбционно-спектрометрическая методика определения ФА в очищенных сточных водах. Разработанная методика позволяет определять ФА на уровне 0.1 ПДК «фенольного индекса», время проведения единичного анализа 45-60 мин, относительная погрешность определения не более 1.5%.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет известных финансовых конфликтов интересов или личных отношений, которые

Список литературы

1. Очистка сточных вод при производстве продукции (товаров), выполнении работ и оказании услуг на крупных предприятиях. Информационно-технический справочник. М.: Бюро НДТ, 2015. 129 с.

2. Elmobarak Wamda Faisal, Nameed Bassim H., Almomani Fares A. A Review on the Treatment of Petroleum Refinery Wastewater Using Advanced Oxidation Processes // *Academic Editors: Irina Levchuk, Javier Moreno-Andrés and Juan José Rueda-Márquez Catalysts*. 2021. 11(7). P. 782.

3. Ягафарова Г.Г., Аминова А.Ф., Хангильдина А.Р., Хангильдин Р.И. Разработка метода очистки сточных вод от трудноокисляемых органических соединений // *Вода: химия и экология*. 2016. № 1. С. 24-29.

4. Гаджиева С.Р., Кадырова Э.М. Определение фенола и его производных, содержащихся в сточных водах после каталитического крекинга // *Advances in Biology & Earth Sciences*. 2018. Vol. 3. no. 3. P. 248-256.

5. Тропынина Л.В., Карташова А.В., Жилина И.В., Романов П.В. Достоверность и информативность показателя «фенольный индекс» // *Методы оценки соответствия*. 2012. № 12. С. 27-30.

6. Lempart A., Kudlek E., Dudziak M. The potential of the organic micropollutants emission from swimming accessories into pool water // *Environment International*. 2020. Vol. 136. P. 105442.

7. Подолина Е.А. Экстракционная способность смешанных растворителей: применение в анализе производных фенола: монография. Воронеж: Воронеж. гос. арх.-строит. ун-т., 2011. 186 с.

8. Kumar B., Kumar Verma V., Sharma Ch.Sh., Avinash B. Polychlorinated Biphenyls in Residential Soils and their Health Risk and Hazard in an Industrial City in India //

могли бы повлиять на работу, представленную в этой статье.

Journal of Xenobiotics. 2014. Vol. 4. No. 4680. P. 46-52.

9. Подолина Е. А. Определение фенолов в конденсированных средах с применением гидрофобных и гидрофильных экстракционных систем: специальность 02.00.02 «Аналитическая химия»: диссертация на соискание ученой степени д.х.н. Воронеж. 2013. 362 с.

10. Подолина Е.А., Рудаков О.Б. Экстракционно-инструментальные способы определения дигидроксibenзолов // *Сорбционные и хроматографические процессы*. 2011. Т. 11, № 4. С. 568-571.

11. Emigdio Z-F., Bassam A., Leonardo T., Perla Ju., Youness H. Modeling the adsorption of phenols and nitrophenols by activated carbon using genetic programming. *Journal of cleaner production*. 2017. Vol. 161. P. 860-870.

12. Каюгин А.А. Закономерности адсорбции низкомолекулярных аналогов гуминовых кислот природным каолином // *Вестник Тюменского государственного университета. Экология и природопользование*. 2015. Т.1, №2(2). С.84-91.

13. Подолина Е.А., Ханина М.А., Лежнина М.Г., Кузнецова Ю.А. Сорбционно-хроматографическое определение фенола и его нитропроизводных в очищенных сточных водах // *Материалы Всероссийской научно-практической конференции «Наука-Общество-Технологии-2022»*. Москва. 1-4 марта 2022. С. 258-267.

14. Ягодский В.Д. Адсорбция / учебное пособие Электрон. текстовые дан. (1 файл pdf : 219 с.). М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. <https://studylib.ru/doc/6254756/v.-d.-yagodskij.-adsorbciya-2015>

15. Активные угли. Эластичные сорбенты. Катализаторы, осушители А43 и



химические поглотители на их основе: Каталог/ Под общ. Ред. В.М. Мухина. М.: Издательский дом «Руда и металлы», 2003. 280 с.

16. Кочетова М.С., Семенистая Е.Н., Ларионов О.Г., Ревина А.А. Определение биологически активных фенолов и полифенолов в различных объектах методами хроматографии // *Успехи химии*. 2007. Т. 76, № 1. С. 88-100.

17. Определение содержания химических элементов в диагностируемых биосубстратах, препаратах и биологически активных добавках методом масс-спектрометрии с индуктивно-связанной аргонной плазмой: Методические указания МУК 4.1.1483 – 03. – М.: ФЦ ГСЭН МЗ РФ, 2003. 36 с.

18. Ханина М.А., Родин А.П., Подолина Е.А., Ханина М.Г., Небольсин А.Е., Рудаков О.Б. Элементы надземной части *centaurea cyanus l.* // *Вестник ВГУ, Серия: Химия. Биология. Фармация*. 2018. №3. С.30-36.

19. Раевский О.А. Дескрипторы молекулярной структуры в компьютерном дизайне биологически активных веществ // *Успехи химии*. 1999. Т. 68, № 6. С. 555-575.

20. Маннхольд Р., Пода Г.И., Остерманн С., Тетко И.В. Расчет молекулярной липофильности: современный уровень техники и сравнение методов log P для более чем 96 000 соединений // *Журн. фармцев. наук*. 2009. Т. 98, № 3. С.861-93.

21. Свойства органических соединений: Справ. / Под ред. А.А. Потехина. Л.: Химия, 1984. 520 с.

22. Подолина Е.А., Ханина М.А., Мухин В.М., Лежнина М.Г., Кузнецова Ю.А., Небольсин А.Е. Сорбция коричной и гидроксикоричных (кофейной и хлорогеновой) кислот, таксифолина и умбеллиферона на активном угле БАУ-А // *Сорбционные и хроматографические процессы*. 2020. Т.20, №2. С. 240-248.

23. Бриленок Н.С., Бахарева М.В., Вершинин В.И. УФ-спектрометрическое определение суммы фенолов с применением диазотированной сульфаниловой

кислоты // *Журнал аналитической химии*. 2018. Т.73, №6. С. 446-454.

24. Вершинин В.И. Определение суммарного содержания одготипных органических веществ (теория интегральных показателей). Омск: ОмГУ, 2016. 288 с.

25. Сиггиа С., Ханна Дж. Количественный органический анализ по функциональным группам / Пер. с англ. А.П. Сергеева. М.: Химия, 1983. 672 с.

26. Lorenc-Grabowska E., Gryglewicz G., Diez M.A. Kinetics and equilibrium study of phenol adsorption on nitrogen-enriched activated carbons. // *Fuel*. 2013. Vol. 114. P. 235-243.

References

1. Sewage purification during production work and servicing at large plants. Information-technical reference book. M. bureau NDT. 2015. 129 p.

2. Elmobarak Wamda Faisal, Hameed Bassim H., Almomani Fares A. A Review on the Treatment of Petroleum Refinery Wastewater Using Advanced Oxidation Processes. Academic Editors: Irina Levchuk, Javier Moreno-Andrés and Juan José Rueda-Márquez Catalysts. 2021; 11(7): 782; <https://doi.org/10.3390/catal11070782>

3. Yagafarova G.G., Aminova A.F., Khangildina A.P., Khalgildin R.I. Razrabotka metoda ochistki stochnykh vod ot trudnookislyayemykh organicheskikh soyedineniy. *Water, Chemistry and ecology*. 2016; 1: 24-29.

4. Hajiyeva S.R., Gadirova E.M. Determination of phenol and phenolic derivatives in contaminated waters after the catalytic cracking process // *Advances in Biology & Earth Sciences*. 2018;3(3): 248-256.

5. Tropynina L.V., Kartashova A.V., Zhilina I.V., Romanov P.V. Reliability and information content of the indicator "phenolic index». *Valuation method of conformity*. 2012; 12: 27-30.

6. Lempart A., Kudlek E., Dudziak M. The potential of the organic micropollutants emission from swimming accessories into pool water. *Environment International*.



- 2020; 136: 105442.
<https://doi.org/10.1016/j.envint.2019.105442>
7. Podolina E.A. Extractational ability of mixed solvents: the usage of phenol derivations in analyses. Voronezh. Voronezh, State architectural - construction University. 2011; 186 p. (In Russ.)
8. Kumar B., Kumar Verma V., Sharma Ch.Sh., Avinash B. Polychlorinated Biphenyls in Residential Soils and their Health Risk and Hazard in an Industrial City in India. *Journal of Xenobiotics*. 2014; 4(4680): 46-52.
9. Podolina E.A. Phenol determination in condensed media with the usage of hydrophobic and hydrophilic extraction system. Speciality 02.00.02."Analytic chemistry". Submitted thesis for a doctor degree, Voronezh; 2013. 362 p.
10. Podolina E.A., Rudakov O.B. Extraction-instrumental methods for the determination of dihydroxybenzenes. *Sorbtsionnye I khromatograficheskiye protsessy*. 2011; 11(4): 568-571.
11. Emigdio Z-F., Bassam A., Leonardo T., Perla Ju., Youness H. Modeling the adsorption of phenols and nitrophenols by activated carbon using genetic programming. *Journal of cleaner production*. 2017; 161: 860-870.
12. Kayugin A.A. Patterns of Adsorption of Low-Molecular Analogues of Humic Acids by Natural Kaolinite. *Vestnik of Tumen state University. Ecology and nature use*. 2015; 1(2): 84-91.
13. Podolina E.A., Khanina M.A., Lezhnina M.G., Kuznetsova Yu.A. Sorption-chromatographic determination of phenol and its nitro derivatives in treated wastewater. *Materials of All-Russian science-practical conference. "Science-Society-Technology*. Moscow 1-4 march 2022; 258-267.
14. Yagodovsky V.D. Adsorption Textbook the 2-nd edition// <https://studylib.ru/doc/6254756/v.-d.-yagodovskij.-adsorbciya-2015> (In Russ.)
15. Active coals. Elastic sorbents. Catalysts, drainers, A-43 and chemical absorbers on their base: Catalog edited by V. M. Mukhin. M.: Publishing house Ore and metals. 2003; 280 p.
16. Kochetova M.S., Semenistaya E.N. Larionov O.G., Revina A.A. Determination of biologically active phenols and polyphenols in various objects by chromatographic techniques. *Chemistry successes*. 2007; 76(1); 88-100.
17. The determination of chemical elements content in diagnosed biosubstrate, preparations and biological active additions by the mass-spectrometry method with inductively connected arc plasma. Methodical recommendations MU K 4.1.1483-03-m: Health ministry R. F. 2003. 36 p.
18. Khanina M.A. Rodin A.P., Podolina E.A., Khanina M.G., Nebolsin A.E., Rudakov O.B. Elements of the aerial part of centaurea cyanus l. *Vestnik VSU, seria: Chemistry. Biology. Pharmacology*. 2018; 3: 30-36. (In Russ.)
19. Raevsky O.A. Molecular structure descriptors in computer design of biologically active substances. *Chemistry Successes*. 1999; 68(6): 555-575.
20. Mannhold R., Poda G.I., Ostermann C., Tetko I.V. Calculation of molecular lipophilicity: State-of-the-art and comparison of log P methods on more than 96,000 compounds. *Journal of Pharmaceutical Sciences*. 2009; 98(3): 861-93. PMID [18683876](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/18683876/) <https://doi.org/10.1002/Jps.21494>
21. Properties of organic connections. Reference book edited by A.A. Potekhin. L., Chemistry, 1984; 520 p.
22. Podolina E.A., Khanina M.A., Mukhin V.M., Lezhnina M.G., Kuznetsova S.A., Nebolsin A.E. Sorption of cinnamic and hydrocinnamic (coffee and chlorogenic) acids, taxifolin and umbelliferone on active carbon BAU-A *Sorbtsionnye I khromatograficheskiye protsessy*. 2020; 20(2): 240-248. <https://doi.org/10.17308/sorpchrom.2020.20/2778>
23. Brilenok N.S., Bakhareva M.V., Vershinin V.I. UV-spectrometric determination of total phenols using diazotized sulfanilic



acid. *Analytical Chemistry journal*. 2018; 73(6); 446-454. (In Russ.)

24. Vershinin V.L. The total content determination of one-type organic substances. (The theory of integral indicators). Monograph Omsk: OMSU. 2016; 288 p. (In Russ.)

25. Siggia S. Khanna G. The quantitative organic. Analyses according to functional

groups. translated by A. P. Sergeev, M.: Chemistry. 1983; 672 p.

26. Lorenc-Grabowska E., Gryglewicz G., Diez M.A. Kinetics and equilibrium study of phenol adsorption on nitrogen-enriched activated carbons. *Fuel*. 2013; 114: 235-243. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2012.11.056>

Информация об авторах / Information about the authors

Е.А. Подолкина – профессор кафедры машиностроительных и металлургических технологий, д. хим. н., доцент, Московский политехнический университет (филиал в г. Электросталь, Электросталь, Россия)

В.М. Мухин – начальник лаборатории АУЭ-СиК, д. тех. наук, профессор, Научно-производственное объединение «Неорганика», Электросталь, Россия

М.А. Ханнина – заведующий кафедрой химии, д. фарм.н., профессор, Государственный гуманитарно-технологический университет, Орехово-Зуево, Россия

М.Г. Лежнина – доцент кафедры химии, к. фарм.н. Государственный гуманитарно-технологический университет, Орехово-Зуево, Россия

Ю.А. Кузнецова – старший преподаватель биолого-химического факультета, Государственный гуманитарно-технологический университет, Орехово-Зуево, Россия

E.A. Podolina – Professor Department of Mechanical Engineering and Metallurgical Technologies, Doctor of Chemistry, associate professor, Moscow Polytechnic University (branch in Elektrostal), Elektrostal, Russian Federation, e-mail: podolina70@mail.ru

V.M. Mukhin – Head of the Laboratory of active carbons, elastic sorbents and catalysts, D. Tech. Sci., Professor, Scientific Production Association “Neorganika”, Elektrostal, Russian Federation

M.A. Khanina – professor and the Head of the Chemistry Chair, Doctor of the Pharmaceuticals Sciences, Humanity-Technological State University, Orekhovo-Zuyevo, Russian Federation, e-mail: khanina06@mail.ru

M.G. Lejnina – associate Professor of the Department of chemistry, Candidate of pharmaceutical sciences, Orekhovo-Zuyevo, Russian Federation, e-mail: xm_86@mail.ru

Yu.A. Kuznetsova – Senior Lecturer, Faculty of Biology and Chemistry, State University for the Humanities and Technology of Orekhovo-Zuyevo, Orekhovo-Zuyevo, Russian Federation, e-mail: hronok-sia@mail.ru

Статья поступила в редакцию 12.07.2022; одобрена после рецензирования 29.08.2022; принята к публикации 07.09.2022.

The article was submitted 12.07.2022; approved after reviewing 29.08.2022; accepted for publication 07.09.2022.