

Сведения о выполненных работах и
полученных научных результатах в 2023 году

по проекту **«Научные основы технологии нейтрализации опасных химических и биологических объектов, распространяющихся в атмосфере»**,
поддержанному Российским научным фондом

Соглашение № 22-69-00108

Руководитель: Ворожцов Александр Борисович, д-р физ.-мат. наук

В рамках выполнения проекта коллективом Томского государственного университета (ТГУ) совместно с Институтом проблем химико-энергетических технологий СО РАН (ИПХЭТ СО РАН) были проведены теоретические и экспериментальные исследования в области нейтрализации опасных химических веществ с использованием энергии ВЭМ. Проведены междисциплинарные теоретические и экспериментальные исследования по областям химического синтеза и кинетики каталитических реакций, физики горения и взрыва; механики аэрозолей; бактериологии. На основе проведенных экспериментальных исследований определены параметры нейтрализации опасных микроорганизмов в атмосфере; проведено математическое моделирование процессов распространения частиц/паров нейтрализатора в замкнутом и открытом пространстве. В период выполнения междисциплинарного проекта получены новые фундаментальные знания в указанных областях науки.

Проанализированы различные способы нейтрализации и установлены кинетические закономерности фотокаталитического окисления некоторых органических соединений и имитаторов токсичных веществ.

Изготовлена и смонтирована лабораторная взрывная камера для синтеза TiO_2 , обеспечивающая давление до 10 атмосфер с максимально возможной мощностью взрыва до 100 грамм любого взрывчатого вещества по тротиловому эквиваленту.

Проведено совершенствование методов синтеза и подготовки к применению каталитических систем с повышенной десорбционной и фотокаталитической активностью.

Разработана математическая модель распространения порошкового аэрозоля, созданного импульсным способом с использованием энергии ВЭМ в замкнутом, полузамкнутом и открытом пространстве с учетом физико-химических свойств частиц аэрозоля, конвективных и направленных потоков воздуха. Представлены выражения для оценки характерных времен осаждения и диффузии частиц, массовой концентрации частиц в воздухе и на поверхности в зависимости от времени для оценки эффективности нейтрализации опасных веществ, имеющих в пространстве или на поверхностях. В результате моделирования получены зависимости концентрации и дисперсности частиц распыляемого аэрозоля от времени с учетом наличия препятствий (стенок) в помещении и условий распыления. На основе

математической модели разработаны алгоритмы, реализованные в виде программ для ЭВМ.

Показано, что после инициации процесса формируется первичное облако радиуса rs_0 , которое далее расширяется за счет диффузии до размеров Nw или осаждается за счет гравитации. Происходящие в дальнейшем эволюции облака протекают за гораздо большее время.

Разработан модельный ряд распылителей и показано, что наиболее эффективным методом распыления является импульсный метод на основе энергии ВЭМ: при таком способе распыления частицы могут находиться в воздухе несколько часов, что является необходимым условием для нейтрализации опасных веществ. Определен метод распыления и конструкция мембраны для эффективной генерации облака аэрозоля и, следовательно, эффективной нейтрализации опасных веществ. Для оценки аэрозольных частиц, осевших на поверхности камеры были проведены исследования проб, взятых с пробоотборных пластин, расположенных внутри камеры.

Проведены экспериментальные исследования воздействия аэрозолей модельных составов на основе нанопорошка диоксида титана на опасные химические вещества. Разработаны рекомендации по условиям (скорость разлета, дисперсность частиц и их масса) и методам распыления для достижения необходимой концентрации порошка в пространстве и/или на поверхности.

Проведены исследования эффективности нейтрализации микроорганизмов с использованием галогенсодержащих термитных систем. Определен эффективный состав, обеспечивающий максимальный эффект нейтрализации лактобактерий.

Проведены испытания, по количественной оценке, вирулицидной активности ряда термитных композиций на основе алюминия, оксидов меди, железа, молибдена с содержанием препаратов йода, йодоформа и оксида цинка от 20 до 40 масс. %.

Представлены результаты экспериментов по импульсному распылению модельных систем: скорость разлета частиц из сопла распылителя; функция распределения частиц по размерам и концентрация частиц в зависимости от времени. Проведено сопоставление результатов математического моделирования и измерений характеристик распыленного аэрозоля.

Проведена верифицированная кинетическая модель роста и смертности микроорганизмов по литературным, аналитическим и полученным экспериментальным данным. Проведено сопоставление полученных решений характеристикам процесса дезактивации, количественное сравнение по степени различия (по средней и максимальной ошибке) с решениями других авторов и экспериментальными данными, а также по величине коэффициента детерминации. Определены оптимальные значения порядка реакции p , параметра реакции $E_{d/R}$ и предэкспоненциального множителя A . На основе подхода, предложенного в проекте, получены уравнения для кинетических кривых, описывающих процесс смертности *Aspergillus flavus*, *Staphylococcus aureus* и *Serratia marcescens*.