ХИМИЧЕСКАЯ БЕЗОПАСНОСТЬ / CHEMICAL SAFETY SCIENCE, 2025, 9, (1), 65 – 81

Технологии ликвидации источников химической опасности

УДК 544.723.2: 546.05

DOI: 10.25514/CHS.2025.1.28004

Исследование сорбционных свойств сорбента на основе наноразмерного углерода по отношению к ионам La(III) и оптимизация условий сорбции методом математического моделирования

Р. Р. Ильясова¹, А. В. Москова¹, И. А. Массалимов¹, А. Г. Мустафин¹

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение высшего образования «Уфимский университет науки и технологий», Уфа, Россия, e-mail: <u>ilyasova_r@mail.ru</u>

Поступила в редакцию 09.04.2025 г. после доработки: 09.06.2025 г.; принята в печать: 10.06.2025 г.

Аннотация – Изучены сорбционные свойства наноразмерного углерода (размер частиц 10– 100 нм с максимумом 30 нм) по отношению к ионам La(III). Установлено, что сорбция ионов La(III) частицами наноразмерного углерода описывается моделью Ленгмюра. Оптимизация условий сорбции позволила достичь высокой сорбционной активности наноразмерного углерода по отношению к ионам La(III) и составила 87%. Приведена математическая модель процесса сорбции, рассчитанная на базе программного обеспечения OpenFOAM, которая показала, что максимальная концентрация ионов La(III) наблюдалась на поверхности сорбента. Проведенные исследования направлены на разработку эффективного сорбента для извлечения ионов La(III) из сточных вод промышленных предприятий.

Ключевые слова: сорбция, частицы наноразмерного углерода, математическое описание сорбции.

Technologies for elimination of chemical hazards

UDC 544.723.2: 546.05

DOI: 10.25514/CHS.2025.1.28004

Research of the sorption properties of a sorbent based on nano-sized carbon in relation to La(III) ions and optimization of the conditions for its sorption using mathematical modeling

Rimma R. Ilyasova^{1 \boxtimes}, Alesya V. Moskova¹, Ismail A. Massalimov¹, and Akhat G. Mustafin¹

¹Ufa Scientific and Technical University, Ufa, Russia, e-mail: <u>Ilyasova_r@mail.ru</u>

Received: April 9, 2025; Revised: June 9, 2025; Accepted: June 10, 2025

Abstract – This research describes the sorption of lanthanum(III) ions by nanosized carbon particles with a particle size of 10 - 100 nm with a maximum of 30 nm. The sorption properties of

nano-sized carbon in relation to lanthanum (III) ions were researched. It has been established that the sorption of lanthanum(III) ions by nanosized carbon particles is described by the Langmuir model. Optimization of sorption conditions made it possible to achieve a high sorption activity of nanocarbon towards lanthanum(III) ions of 87 %. A high sorption efficiency of nano-sized carbon was revealed in comparison with literature data. A mathematical model of the sorption process, calculated using OpenFOAM software, is presented, with the maximum concentration of lanthanum(III) ions of the sorbent.

Key words: sorption, nano-sized carbon particles, mathematical description of sorption.

введение

В последние годы в высокоразвитых странах наблюдается увеличение спроса на производство редкоземельных элементов (РЗЭ) (Россия, Китай, Казахстан и др.), в частности, лантана. Соединения лантана широко применяются для изготовления сверхпроводников, оптических линз, энергосберегающих ламп, катализаторов, лекарственных средств и т.д.

Основным методом получения La(III) является переработка полиметаллических Реализация данного отличается руд. метода трудоемкостью, требует больших затрат времени, финансов и энергоресурсов. Кроме того, получение ценного металла указанным методом нередко приводит к нарушениям норм ПДК по иону металла в сточных водах предприятий, потере ценных металлов из промывных вод и фильтратов.

Вторым альтернативным и более современным методом получения металла является его извлечение из промышленных сточных вод физикохимическими методами (хроматография, экстракция, сорбция). Применение альтернативного метода получения ценного металлического сырья из промышленных жидких отходов дает возможность решить существующую экологическую проблему, а именно проблему очистки загрязненной ионами токсичных металлов водной среды.

В число физико-химических методов входят сорбционные методы, которые обладают рядом достоинств: простота, экономичность, возможность удаления следов органических и неорганических веществ на глубоких стадиях очистки загрязненных водных объектов, возможность автоматизации процесса использующиеся сорбции. Однако следует отметить, что на сегодня сорбенты, дорогостоящие, промышленные как правило, недостаточно эффективны, требуют соблюдения строгих условий хранения сорбентов, а также особых условий для проведения эффективной обработки загрязненных водных объектов [1, 2].

Разработка эффективных сорбционных материалов новых действия универсального спектра И экономически подходящих ДЛЯ отечественного производства является актуальной задачей для ученых. С этой точки зрения интерес представляют углеродные нанотрубки. Частицы УНТ имеют цилиндрическую форму с диаметром в несколько нанометров и длиной сантиметров. 1 нескольких Наноразмерные цилиндры OT МКМ до сформированны графеновым который свернутым листом, имеет

66

гексагональную структуру и состоит из углеродных шестигранников, в которых атомы углерода связаны друг с другом прочной ковалентной связью [3–5].

Цель настоящей работы состояла в изучении сорбционных свойств углеродных нанотрубок по отношению к ионам La(III), а также в разработке математической модели процесса сорбции ионов La(III) частицами углеродных нанотрубок на базе программного обеспечения OpenFOAM.

Цифровое моделирование позволяет оптимизировать исследовательский процесс и получить результаты с высокой степенью достоверности [6–8].

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Все реагенты, включая La(NO₃)₃×6H₂O, использованные в экспериментах, соответствовали аналитической степени чистоты («хч», Россия) и использовались без дальнейшей очистки. Разбавленные растворы нитрата La(III) готовились разбавлением исходного раствора дистиллированной водой.

Углеродные нанотрубки синтезированы учеными Уфимского государственного нефтяного технического университета [9]. Определение размера частиц УНТ проведено с помощью лазерного анализатора размера частиц SALD 7071 (Шимадзу, Япония).

Сорбционное извлечение ионов La(III) изучено в статическом режиме по известной методике [10]. В коническую колбу в качестве сорбента помещался 1 грамм углеродных нанотрубок, добавлялся модельный раствор нитрата La(III). Смесь перемешивалась в течение определенного времени. После сорбции фильтрованием отделялся осадок от фильтрата и определялось остаточное содержание иона La(III) в фильтрате.

Эффективность сорбции определялась по расчету степени извлечения R(%) и величины сорбции α (моль/г):

$$R = [C - C_p / C] \times 100\%$$

$$\alpha = (C - C_p) V / m$$

где C и C_p – исходная и равновесная концентрации извлекаемых ионов в водном (модельном) растворе, (моль/л)

V-объем раствора соли, л; m - масса сорбента, г

Для количественного анализа ионов La(III) в фильтрате после проведения сорбционного процесса использовался пламенно-фотометрический метод определения содержания лантана по известной методике [11, 12]. Количественный анализ выполнен в лаборатории ГБУ РБ Управление государственного аналитического контроля (Уфа).

Оценка погрешности полученных результатов экспериментов проведена с использованием критериев Стьюдента (t) и уровня значимости (p). Различия считали статистически значимыми при p < 0,05.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

В данной работе предложено математическое описание данного процесса, алгоритм которого интегрирован и реализован на базе открытой платформы для численного моделирования OpenFOAM.

В рамках разработки и реализации алгоритма численного решения задачи сорбции ионов La(III) частицами углеродных нанотрубок предложена модель, представленная на рисунке 1.



Рис. 1. Физическая модель сорбционного извлечения La(III) частицами нанотрубок.

Fig. 1. Physical model of sorption extraction of La(III) by nanotube particles

Углеродные нанотрубки, представляющие собой сорбент, локализуются вдоль левой границы модели. Ионы La(III) распределены в воде. В ходе протекания сорбционного процесса ионы La(III) группируются на поверхности сорбента, не проникая внутрь, образуя монослой.

Предположено, что сорбция протекает согласно механизму сорбции Лэнгмюра: образование мономолекулярного слоя происходит на отдельных активных сорбционных центрах так, что одному иону La(III) соответствует один сорбционный центр.

Принцип взаимодействия ионов La(III) и активных сорбционных центров основан на положениях теории межмолекулярных взаимодействий, согласно которым энергия связи E_s имеет обратную связь с расстоянием между ионом и активным сорбционным центром:

$$E_s = -\frac{C_{int}}{R^6},$$

где C_{int} – константа межмолекулярных взаимодействий изолированных молекул *R* – расстояние между La(III) и свободным сорбционным центром.

Физический смысл существования обратной пропорциональности энергии связи и расстояния между ионом и активным сорбционным центром представлен на рисунке 2.



Puc. 2. Физический смысл взаимодействия иона и активного сорбционного центра *Fig. 2.* Physical meaning of the interaction between an ion and an active sorption center

Интегрирование формулы для энергии связи в пределе от R_0 до ∞ позволяет получить основу для вывода уравнения скорости движения ионов

La(III) по направлению к поверхности сорбента, содержащего свободные сорбционные центры:

$$E_{s} = -\frac{\pi N C_{int}}{6} \times \frac{1}{R_{0}^{3}} = -\frac{C_{s}'}{R_{0}^{3}}$$

где *N* – численное количество сорбционных центров на поверхности сорбента *R* – расстояние между La(III) и свободным сорбционным центром

C[']_s – константа межмолекулярных взаимодействий в процессах физической сорбции

Таким образом, выражение для скорости движения ионов к поверхности сорбента представляет собой следующее:

$$\boldsymbol{\nu}_{s} = \frac{\pi C_{int}(a_{m}-a)}{6x^{4}}t,$$

где *a_m* – предельная величина сорбции ионов La(III) частицами УНТ

а – величина сорбции La(III) частицами УНТ

х – координата иона La(III)

t – время протекания сорбционного процесса

Ядром системы уравнений математической модели рассматриваемого процесса является уравнение конвективной диффузии ионов La(III), уравнение изотермы Лэнгмюра и уравнение Шишковского:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \boldsymbol{v}_x \frac{\partial c}{\partial x} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \quad 0 < x < x_{max},$$

где *с* – концентрация ионов La(III)

 v_x – скорость движения ионов La(III)

D – коэффициент диффузии ионов La(III)

$$a = a_m \frac{b_s c}{1+b_s c}$$
,

где b_s – отношение константы десорбции к константе сорбции

$$\sigma = \sigma_0 - a_m RT \ln(1 + b_s c),$$

где σ – величина поверхностного натяжения раствора La(III)

R – универсальная газовая постоянная

Т – температура среды

Начальным условием для решения уравнения конвективной диффузии является равенство концентрации исходному содержанию ионов La(III) в растворе. Граничные условия характеризуют непроницаемость границ модели.

Для решения разработанной системы уравнений математической модели проведена процедура ее обезразмеривания и получен неявный дискретный аналог одномерного уравнения конвективной диффузии.

Дискретный аналог получен согласно принципам метода контрольного объема (МКО). Расчетная область представлена в виде совокупности контрольных объемов (рис. 3).



Puc. 3. Схема узлов контрольных объемов. *Fig. 3.* Scheme of control volume nodes.

Полученный дискретный аналог уравнения конвективной диффузии решен с помощью Tridiagonal Matrix Algorithm (TDMA). Результаты численного расчета сопоставлены с результатами экспериментального исследования.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Углеродные нанотрубки имеют высокую удельную поверхность, которая обладает большим количеством двойных углеродных связей, что способствует образованию разнообразных молекулярных комплексов и увеличению сорбционной эффективности УНТ [13].

Измерение размеров частиц УНТ показало, что размер частиц нанотрубок составил от 10 до 100 нм с максимумом в 30 нм размера частиц (рис. 4).



Puc. 4. Размер частиц углеродных нанотрубок, нм. *Fig. 4.* Size of carbon nanotube particles, nm.

Известно, что сорбционная способность сорбентов зависит от ряда факторов, в том числе: pH раствора, температура, время установления сорбционного равновесия, соотношение массы сорбента к объему водного раствора соли.

Влияние кислотности раствора соли La(III) в интервале pH 3–8 на степень извлечения La(III) частицами углеродных нанотрубок в модельном растворе показано на рисунке 5. Видно, что максимальное извлечение ионов

наблюдается при рН 7.4. При более низких или более высоких значениях рН наблюдается уменьшение степени извлечения исследуемых ионов: в области низких рН, по всей видимости, происходит конкурентная сорбция за сорбционные центры сорбента между ионами H(I) и La(III). С ростом рН возрастает количество свободных сорбционных центров на поверхности сорбента, что приводит к существенному росту степени извлечения. В щелочной области рН образуется малорастворимый в воде La(OH)₃, экранирующий активные центры сорбента. В дальнейшем все исследования проведены при рН 7.4.



Рис. 5. Зависимость степени извлечения La(III) от pH среды сорбции частицами углеродных нанотрубок при 20 °C

Fig. 5. Dependence of the degree of extraction of La(III) on the pH of sorption by carbon nanotubes particles at 20 $^{\circ}$ C

Влияние температурного фактора на сорбционное извлечение исследуемых катионов показано на рисунке 6. Видно, что оптимальной температурой сорбции является 20° С, при этом достигается максимальная степень извлечения (R = $78 \pm 5\%$). С увеличением температуры сорбция ионов La(III) частицами УНТ уменьшается, что, согласно литературным данным [14], свидетельствует о протекании физической сорбции и отсутствии химического взаимодействия между частицами сорбента и La(III), при этом физическая сорбция обусловлена слабо специфическими взаимодействиями. В дальнейшем все исследования проведены при 20° С и pH 7,4.

При сорбционном извлечении важную роль играет время установления сорбционного равновесия (время контакта или фаз время сорбции). Кинетические особенности сорбции первую очередь связаны В с характеристиками диффузионными веществ В приповерхностном слое, удельной площадью поверхности и пористостью сорбента.



Рис. 6. Зависимость степени извлечения La(III) частицами углеродных нанотрубок от температуры сорбции

Fig. 6. Dependence of the degree of extraction of La (III) by submicron carbon nanotubes particles on the sorption temperature

Изучено влияние времени на сорбцию ионов La(III). Как видно из зависимостей, приведенных на рисунке 7, максимальная степень извлечения достигается ($R = 75 \pm 3\%$) за 20 мин. Это важно в случае концентрирования в статическом режиме ионов металлов из водных растворов с их низким содержанием. В дальнейшем все исследования проведены при оптимальном времени сорбции 20 мин, температуре 20°C и pH 7.4.



Рис. 7. Зависимость степени извлечения La(III) частицами углеродных нанотрубок от времени установления сорбционного равновесия при 20°С.

Fig. 7. Dependence of the degree of extraction of La(III) by submicron carbon nanotubes particles on the time of establishing sorption equilibrium at 20°C.

На рисунке 8 показана зависимость степени извлечения La(III) от соотношения массы сорбента к объему водного раствора соли. Экспериментально установлено, что оптимальным соотношением массы

72

сорбента к водному раствору соли La(III) является 1:10, достигается максимальная степень извлечения ($R = 68 \pm 4\%$). В дальнейшем все исследования проведены при соотношении $m_{copбента}$:V_{раствора соли} 1:10.



Рис. 8. Зависимость степени извлечения La(III) частицами углеродных нанотрубок от соотношения массы сорбента и объема водного раствора соли при 20°С. *Fig.* 8. Dependence of the degree of extraction of La(III) particles of submicron carbon nanotubes from the ratio of the mass of the sorbent and the volume of aqueous solutions of salts at 20°C.

Для построения изотерм сорбции и вычисления параметров процесса растворы La(III) встряхивали с сорбентом в течение 20 мин, полученные изотермы приведены на рис. 9. По форме изотермы можно предположить, что в данном случае наблюдается монослойная сорбция, при этом. Об этом свидетельствует и высокое значение коэффициента корреляции (табл. 1).



Рис. 9. Изотермы сорбции La(III) из водных растворов частицами углеродных нанотрубок при 20°С

Fig. 9. Isotherms of La(III) sorption from aqueous solutions by submicron carbon nanotubes particles at 20°C

Для определения констант в уравнении Ленгмюра использована линейная форма уравнения данной модели.

$$1/A = 1/S + 1/K \times S \times C_p$$

где A – количество сорбированного иона металла на единицу массы сорбента в состоянии равновесия, мг/г; C_p – равновесная концентрация ионов в растворе, моль/л; K – константа сорбции; S – максимальная емкость сорбента, моль/г.

Полученные значения приведены в таблице 1.

Габлица 1		Константы изо	терм	Ленгмюра
-----------	--	---------------	------	----------

Параметры сорбции	Величина параметров сорбции	
Величина сорбции А, мг/г	18	
Константа сорбции, Л × мг ⁻¹	2,5	
R	0,998	

Table 1. Langmuir isotherm constants

Высокое значение степени извлечения La(III) частицами УНТ ($87 \pm 5\%$) при оптимальных условиях сорбции (pH сорбции 7,4; температура 20°С; соотношение массы сорбента к объему водного раствора соли 1 г на 10 мл; время контакта фаз 20 минут) свидетельствует об эффективности сорбционного концентрирования и извлечения ионов металла частицами УНТ (табл. 2).

В таблице 2 для сравнения приведены степени извлечения, полученные при сорбции La(III) частицами различных сорбентов: УНТ, активированного угля и макропористого сульфокатионита/

Таблица 2. Степень извлечения *R* ионов La(III) частицами различных сорбентов: УНТ, активированного угля и макропористого сульфокатионита

<i>Table 2.</i> The degree of extraction of La(III) by particles of various sorbents:				
UNT, activated carbon and macroporous sulfocationite				

	R, %			
Ион металла	Изученный УНТ	Активированный уголь (БАУ - 2) [15]	Макропористый сульфокатионит МТС 1600 [16]	
La(III)	87	38	80	

Видно, что аллотропная модификация углерода в виде УНТ является более эффективным сорбентом по отношению к ионам La(III) по сравнению с указанными в таблице сорбентами (БАУ-2, макропористый сульфокатионит).

Для численного моделирования сорбции ионов La(III) частицами углеродных нанотрубок построена модель, представленная на рисунке 10.





Fig. 10. Computational domain represented as non-overlapping control volumes connected by nodes.

В начале процесса сорбции наблюдается распределение ионов La(III) в объеме воды (рисунок 11).



Рис. 11. Концентрационное распределение La(III) в объеме воды в начале сорбции (Время - 1 с)

Fig. 11. Concentration distribution of La(III) in the volume of water at the beginning of sorption (Time - 1 s)



Рис. 12. Концентрационное распределение La(III) в объеме воды в конце сорбции (Время – 1200 с).

Fig. 12. Concentration distribution of La(III) in the volume of water at the end of sorption. (Time -1200 s).

Пространственное изменение концентрации ионов La(III) в водном растворе в начальный и конечный моменты времени процесса сорбции представлено на рисунках 13 и 14. Ось абсцисс графиков соответствует координатной прямой оси Х.



Рис. 13. Пространственная кривая распределения La(III) в объеме воды в начале сорбции (Время – 1 с)

Fig. 13. Spatial distribution curve of La(III) in the volume of water at the beginning of sorption (Time - 1 s)



Рис. 14. Пространственная кривая распределения La(III) в объеме воды в конце сорбции (Время – 1200 с).

Fig. 14. Spatial distribution curve of La(III) in the volume of water at the end of sorption. (Time -1200 s).

По результатам полученных графиков выявлено, что к концу процесса сорбции область наивысшей концентрации La(III) соответствует поверхности сорбента. При этом концентрация La(III) в объеме водной фазы стремится к нулю. В результате получена очищенная вода.

На рисунке 15 представлено изменение концентрации на поверхности частиц углеродных нанотрубок от времени протекания процесса. Отмечается характерный для стадии насыщения рост концентрации ионов La(III) до предельного значения. Время указано в секундах.



Puc. 15. Динамика изменения концентрации La(III) в ходе процесса сорбции *Fig. 15.* Dynamics of changes concentration of La(III) during the sorption process

Рисунок 16 показывает, что скорость сорбции ионов La(III) уменьшается по мере заполнения свободных сорбционных центров.



Puc. 16. Динамика изменения скорости сорбции La(III). *Fig. 16.* Dynamics of changes speed of La(III) sorption.

Изменение величины сорбции ионов La(III) частицами углеродных нанотрубок от времени происходит до тех пор, пока на поверхности сорбента существуют вакантные сорбционные центры (рисунок 17). В результате абсолютного насыщения поверхности сорбента ионами La(III) отмечается выход кривой на плато.



Puc. 17. Динамика изменения величины сорбции La(III) в ходе протекания процесса сорбции. *Fig.* 17. Dynamics of changes sorption value of La(III) during the sorption process.

На рисунке 18 показана динамика изменения поверхностного натяжения водного раствора La(III) в ходе протекания смоделированного сорбционного процесса вблизи поверхности сорбента. Характер кривой обусловлен компенсацией присутствовавшего избытка поверхностной энергии на границе раздела фаз. В результате, в конце процесса система приходит в равновесие.



Puc. 18. Динамика изменения поверхностного натяжения водного раствора *Fig. 18.* Dynamics of changes of surface tension of an aqueous solution

По результатам численного моделирования рассчитана степень извлечения La(III) частицами углеродных нанотрубок, которая составила 87,5% (табл. 3).

Таблица 3. Расчет степени извлечения ионов La(III) частицами углеродных нанотрубок по результатам численного моделирования

 Table 3. Calculation of the degree of extraction of La(III) ions by carbon nanotube particles based on numerical simulation results

Параметр	Численно полученный результат	
Исходная концентрация (усредненная по всей системе)	0,000905574	
Равновесная концентрация (усредненная по всей системе)	0,00011318	
Степень извлечения, %	87,50183496	

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- 1. Установлено, что наибольшая степень извлечения La(III) в условиях статической сорбции частицами углеродных нанотрубок (размер частиц от 10 до 100 нм с максимумом 30 нм) достигается при pH раствора 7,4; температуре 20°С, времени контакта фаз 20 минут, соотношении массы сорбента к объему водного раствора соли 1 г : 10 мл.
- 2. Процесс поглощения ионов La(III) углеродными нанотрубками описывается изотермой Ленгмюра, что указывает на монослойный характер сорбции.
- 3. Ионы La(III) поглощаются по механизму физической сорбции, при этом с повышением температуры степень поглощения снижается.
- 4. Оптимизация условий (pH, температура, время, m : V) сорбции ионов La(III) позволила достичь высокой сорбционной активности ионов металлов частицами УНТ 87%, что было подтверждено экспериментально.
- 5. Разработана математическая модель сорбции ионов La(III) частицами углеродных нанотрубок. Показана высокая сходимость результатов экспериментального исследования и математически полученных данных. Численно полученная степень извлечения La(III) частицами УНТ составила 87,5%.
- 6. Таким образом, УНТ рекомендуются для сорбционного концентрирования ионов La(III) в статическом режиме.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

CONFLICT OF INTERESTS: The authors declare no conflict of interests.

Список литературы:

1. Бокиев Б.Р., Хужаев П.С., Шарипов Ш.К., Муродов П. (2018). Сорбционный метод очистки производственных сточных вод. *Бюллетень науки и практики*. 4(7), 2–7.

- 2. Цизин Г.И., Статкус М.А., Золотов Ю.А. (2015).Сорбционное и экстракционное концентрирование микрокомпонентов в проточных системах анализа. (2015). *Журнал аналитической химии*. 70(11), 1289–1306. <u>https://doi.org/10.7868/S0044450215110171</u>.
- 3. Томишко М.М., Демичева О.В., Алексеев А.М., Томишко А.Г., Клинова Л.Л., Фетисова О.А. (2008). Многослойные углеродные трубки и их применение. *Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева, LII*(5), 39–43.
- 4. Сорокина Т.П., Квашнина О.П. (2009). Нанотрубки элементы нанотехнологий будущего. *Вестник КрасГАУ.* 9, с.141–147.
- 5. Грибачев В. (2008). Технология получения и сферы применения нанотрубок. Компоненты и технологии. 12, с. 135–137.
- 6. Аминов К.А., Ляндау Ю.В. (2023). Цифровая трансформация нефтегазового комплекса как способ повышения эффективности производственных процессов в топливноэнергетическом секторе. *Инновации и инвестиции*. *1*, с. 259–261.
- 7. Сабиров Д.Ш. (2021). Цифровая химия новое направление математической химии. *Вестник БашГУ*. 26(1), с. 27–31. <u>https://doi.org/10.33184/bulletin-bsu-2021.1.5</u>.
- Байметова Е.С., Хвалько М.Е., Армянин А.Ю. (2022). Моделирование сопряженного теплообмена в микроканалах в среде OpenFOAM. (2022). *Труды ИСП РАН. 34*(5), с. 205– 213. <u>https://doi.org/10.15514/ISPRAS-2022-34(5)-14</u>.
- Гудич И.Г., Жуков В.Т., Мануковский К.В., Новикова Н.Д., Рыков Ю.Г., Феодоритова О.Б. (2016). Численное моделирование высокоскоростной камеры сгорания с использованием пакета OpenFOAM. ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. 10, 32 с.
- 10. Садыков Т.Т. Дисс. ... канд. хим. наук. Уфа: УУНиТ, 2024.
- 11. Попков В. А., Бабков А. В. (2000). Практикум по общей химии. М.: Высшая школа.
- 12. ГОСТ 3240.9-76. Пламенно-фотометрический метод определения содержания лантана. Межгосударственный стандарт.
- 13. Запороцкая И.В., Ермакова Т.А., Какорина О.А., Акатьев В.В., Камышанова Л.В. (2022). Исследование сорбционных свойств УНТ для очистки воды от неорганических примесей. *НБИ технологии.* 16(2), с. 32–38. <u>https://doi.org/10.15688/NBIT.jvolsu.2022.2.6</u>.
- 14. Фролов Ю.Г., Белик В.В. (2017). Физическая химия. М.: Альянс.
- 15. Терещенкова АА, Статкус МА, Тихомирова ТИ, Цизин ГИ. Сорбционное концентрирование лантана на модифицированных малополярных сорбентах. (2013). Вестник МГУ, серия 2, Химия. 54(4), с. 203–208.
- 16. Чинь Нгуен Куинь. Дисс. ... канд. техн. наук, Москва: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2021.

References:

- 1. Bokiev B.R., Khuzhaev P.S., Sharipov Sh.K., Murodov P. Sorption method of industrial wastewater treatment. (2018). *Bulletin of Science and Practice*. 4(7), 2–7. (in Russ.).
- Tsizin G.I., Statkus M.A., Zolotov Yu.A. Sorption and extraction concentration of microcomponents in flow analysis systems. (2015). *Journal of Analytical Chemistry*. 70(11), 1289–1306. <u>https://doi.org/10.7868/S0044450215110171</u>. (in Russ.)
- Tomishko M.M., Demicheva O.V., Alekseev A.M., Tomishko A.G., Klinova L.L., Fetisova O.A. (2008). Multilayer carbon tubes and their application. *Russian chemical. zh. (Zh. Russian chemical. D.I. Mendeleev University, LII*(5), pp.39–43. (in Russ.).
- 4. Sorokina T.P., Kvashnina O.P. (2009). Nanotubes elements of nanotechnology of the future. *Bulletin of KrasGAU*. 9, pp.141–147. (in Russ.).
- 5. Gribachev V. (2008). Technology of production and applications of nanotubes. *Components and technologies*. *12*, pp. 135–137. (in Russ.).
- 6. Aminov K.A., Lyandau Yu.V. (2023). Digital transformation of the oil and gas complex as a way to increase the efficiency of production processes in the fuel and energy sector. *Innovation and investment*. *1*, pp. 259–261. (in Russ.).

- Sabirov D.S. (2021). Digital chemistry a new direction of mathematical chemistry. *Bulletin of BashGU*. 26(1), pp. 27–31. (in Russ.). <u>https://doi.org/10.33184/bulletin-bsu-2021.1.5</u>.
- 8. Baymetova E.S., Khvalko M.E., Armyanin A.Y. (2022). Modeling of coupled heat transfer in microchannels in the OpenFOAM environment. *Proceedings of the Spanish Academy of Sciences*. *34*(5), pp. 205–213. (in Russ.). https://doi.org/10.15514/ISPRAS-2022-34 (5)-14.
- Gudich I.G., Zhukov V.T., Manukovsky K.V., Novikova N.D., Rykov Yu.G., Feodoritova O.B. (2016). Numerical simulation of a high-speed combustion chamber using the OpenFOAM package. Publishing House of the Keldysh IPM of the Russian Academy of Sciences. 10, 32 p. (in Russ.).
- 10. Sadykov T.N. (2024). Physico-chemical properties of new composites based on polyanilines and sulfur, chitosan, carbon nanotubes (Ph.D. Dissertation). Ufa: Ufa University of Science and Technology (in Russ.).
- 11. Popkov V. A., Babkov A.V. (2000). *Workshop on general chemistry*. Moscow: Higher School. (in Russ.).
- 12. GOST (State Standart) 3240.9-76. Flame photometric method for determining the lanthanum content. The interstate standard. (in Russ.).
- Zporotskaya I.V., Ermakova T.A., Kakorina O.A., Akatiev V.V., Kamyshanova L.V. (2022). Investigation of sorption properties of CNTs for water purification from inorganic impurities. *NBI technologies*. 16(2), pp. 32–38. (in Russ.). <u>https://doi.org/10.15688/NBIT.jvolsu.2022.2.6</u>.
- 14. Frolov Yu.G., Belik V.V. (2017). Physical chemistry. M.: Alliance.
- Tereshenkova AA, Statkus MA, Tikhomirova TI, Tsizin GI. Sorption concentration of lanthanum on modified low-polar sorbents. (2013). *Bulletin of Moscow State University*. 54(4), pp. 203–208. (in Russ.).
- Chinh Nguyen Kuin. (2021). Sorption extraction of REE and other cationic impurities from phosphoric acid solution. (Ph.D. Dissertation). Moscow: D.I. Mendeleev Russian University of Chemical Technology. (in Russ.).