УДК. 544.5

# ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАДИАЦИОННО–ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ПОЛИХЛОРИРОВАННЫХ БИФЕНИЛОВ В РАСТВОРЕ ГЕКСАНА, ИЗОПРОПИЛОВОГО СПИРТА И ЩЕЛОЧИ КОН

# NUMERICAL MODELING OF RADIATION–CHEMICAL TRANSFORMATIONS OF POLYCHLORINATED BIPHENYLES IN SOLUTION OF HEXANE, ISOPROPYL ALCOHOL AND ALKALI KOH

***©Джаванширова А. А.***
*Институт радиационных проблем НАН Азербайджана*
*г. Баку, Азербайджан, afa_javanshirova@yahoo.com*
***©Djavanshirova A.***
*Institute of Radiation Problems of NA of Azerbaijan Republic*
*Baku, Azerbaijan, afa_javanshirova@yahoo.com*
***©Искендерова З. И.***
*канд. хим. наук*
*Институт радиационных проблем НАН Азербайджана*
*г. Баку, Азербайджан, z_iskenderova@mail.ru*
***©Iskenderova Z.***
*Ph.D., Institute of Radiation Problems of NA of Azerbaijan Republic*
*Baku, Azerbaijan, z_iskenderova@mail.ru*
***©Маммедов С. Г.***
*канд. хим. наук*
*Институт радиационных проблем НАН Азербайджана*
*г. Баку, Азербайджан, mammadov_sahib@yahoo.com*
***©Mammedov S.***
*Ph.D., Institute of Radiation Problems of NA of Azerbaijan Republic*
*Baku, Azerbaijan, mammadov_sahib@yahoo.com*
***©Курбанов М. А.***
*д–р хим. наук*
*Институт радиационных проблем НАН Азербайджана*
*г. Баку, Азербайджан, m_gurbanov@mail.ru*
***©Gurbanov M.***
*Dr. habil.,*
*Institute of Radiation Problems of NA of Azerbaijan Republic*
*Baku, Azerbaijan, m_gurbanov@mail.ru*
***©Абдуллаев Э. Т.***
*канд. хим. наук*
*Институт радиационных проблем НАН Азербайджана*
*г. Баку, Азербайджан, elsad_abdullayev@hotmail.com*
***©Abdullayev E.***
*Ph.D., Institute of Radiation Problems of NA of Azerbaijan Republic,*
*Baku, Azerbaijan, elsad_abdullayev@hotmail.com*

*Аннотация.* В работе проведено численное моделирование радиационно–химических превращений хлорированных бифенилов в растворе гексана, изопропилового спирта в присутствии щелочи КОН, включающее 52 элементарных реакций активных частиц радиолиза гексана (основного компонента) с молекулами изопропилового спирта и ион–радикалами $OH^-$, образующихся при электролитической диссоциации молекул щелочи.

Рассчитаны кинетические кривые превращения ПХБ изомеров в «Совтоле 10» (ПХБ 101, 138, 180, 194, ПХБ 18, ПХБ 52) и таких продуктов, как монохлорбифенилов, бифенилов и $Cl^-$ при разных поглощенных дозах. Показано, что часть изомеров с повышением дозы расходуется монотонно, а часть по кинетике, характеризующейся максимумами. Полученные расчетные значения радиационно-химических выходов близки к экспериментально полученным величинам.

*Abstract.* Numerical simulation of radiation–chemical transformations of chlorinated biphenyls in a hexane solution, isopropyl alcohol in the presence of alkali KOH is carried out. It includes 52 elementary reactions of radiolysis of hexane active particles (main component) with molecules of isopropyl alcohol and ion radicals $OH^-$ formed during electrolytic dissociation of alkali molecules. The kinetic curves of the conversion of PCB isomers in “Sovtol 10” (PCB 101, 138, 180, 194, PCB 18, and PCB 52) and products such as monochlorobiphenyls, biphenyls and $Cl^-$ at different absorbed doses were calculated. It is shown that some of the isomers are monotonously consumed with increasing doses, and a part of the kinetics is characterized by peaks. The calculated values of the radiation–chemical yields are agreed with the experimentally obtained values.

*Ключевые слова:* математическое моделирование, полихлорбифенилы, радиационно–химический выход, «Совтол-10», γ–излучение.

*Keywords:* mathematical modeling, polychlorinated biphenyls, radiation–chemical yield, “Sovtol-10”, γ–radiation.

Полихлорбифенилы (ПХБ) являются синтетическими диэлектрическими жидкостями, которые широко используются в энергетическом секторе — в трансформаторах, конденсаторах, электрических ключах и других оборудованиях. Причиной тому является высокие диэлектрические и изоляционные свойства, химическая и термическая стойкость, в результате которых они довольно долго живут в окружающей среде и распространяются на дальние расстояния, приводя к глобальному загрязнению. Из-за способности аккумуляции в жировых тканях организмов они сильно ослабляют иммунитет, и очень близки по действию к диоксинам [1, с. 31–63; 2, с. 788–800]. Учитывая вышеизложенное, они включены в список Стокгольмской конвенции о стойких органических загрязнителях. В разных странах выпускались технические ПХБ масла, содержащие 3–6 атомов хлора. «Совтол-10» выпускалось в бывшем СССР и до сих пор используется в энергетических оборудованиях. Согласно требованию Стокгольмской конвенции электрическое оборудование, использующее трансформаторное масло с концентрацией> 50 мг/кг ПХБ должны быть выведены из эксплуатации, а масло отправлено на переработку с целью очистки от ПХБ до 2028 года. Поэтому во всем мире интенсивно проводится исследование по переработке ПХБ содержащих масел, что привело к разработке разных технологических процессов. Одним из перспективных процессов является применение радиационной технологии для очистки масел от ПХБ соединений, что обусловлено простотой технологии, отсутствием использования химических реагентов, проведение процесса при низких температурах и давлениях. [3, с. 45–50; 4, с. 601–609; 5, с. 1053–1055; 6, с. 2461–2464]. Основным препятствием применения радиационной технологии является сложный спектр полученных продуктов превращения, идентификация которых затрудняется отсутствием инструментальных методик. В этом аспекте численное моделирование протекающих превращений создает возможности выяснения механизма радиолитического превращения ПХБ.

Целью работы является изучение кинетических особенностей химических приращений при γ–облучении модельной системы ПХБ + гексан + изопропиловый спирт + щелочь (КОН) методом численного моделирования по программе «КИНЕТ», разработанной в МГУ им. Ломоносова.

Модельная система содержит следующие ПХБ изомеры: ПХБ-18, ПХБ-28+31, ПХБ-52, ПХБ-44, ПХБ-149+118, ПХБ-153, ПХБ-138, ПХБ-180, ПХБ-194.

*Результаты и их обсуждение*

Расчет эффективных констант скоростей $k_{эф}$ образования радикалов, ионов и электронов проводили по следующей формуле с учетом мощности дозы и радиационно-химического выхода активных частиц радиолиза гексана:

$$G\,J\,10^{-2} = k_{эф}\,[C_6H_{14}],$$

где G — радиационно-химический выход соответствующих активных частиц при радиолизе гексана, J — мощность поглощенной дозы, $[C_6H_{14}]$ — концентрация гексана. Отсюда для $k_{эф}$ получим $k_{эф} = \frac{G\,J\,10^{-2}}{[C_6H_{14}]}$

Расчетные значения $k_{эф}$ приведены в Таблице 1.

Таблица 1.

РАСЧЕТНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ $k_{ЭФ}$

| *Частицы* | $k_{эф}$ , $c^{-1}$ |
|---|---|
| $C_6H_{14}^{+}$ | $1{,}33\times10^{-8}$ |
| $CH_3$ | $2{,}26\times10^{-9}$ |
| $C_2H_5$ | $9{,}7\times10^{-10}$ |
| $C_3H_7$ | $9{,}7\times10^{-10}$ |
| $C_4H_9$ | $8{,}75\times10^{-10}$ |
| $C_6H_{13}$ | $1{,}33\times10^{-8}$ |
| $e^{-}$ | $1{,}5\times10^{-6}$ |

Использованы значения констант скоростей элементарных реакций с литературных данных, но в некоторых случаях (если не известна константа скорости) подобрали значения констант с известных аналогичных реакций.

Расчеты проводили с использованием соответствующих значений при комнатной температуре. Рассчитаны следующие параметры процесса: концентрация ПХБ изомеров, изопропилового спирта, кислорода и радикалов.

Формальная кинетическая схема приведена ниже в Таблице 2 [7, с. 407–414; 8, с. 407–414; 9, 1562–6016, 10, с. 50–54].

Таблица 2.

ФОРМАЛЬНАЯ КИНЕТИЧЕСКАЯ СХЕМА

| *№* | *Реакции* | *Константы скорости* |
|---|---|---|
| *1* | *2* | *3* |
| 1 | $C_6H_{14}^{*} \rightarrow C_6H_{13} + H$ | $1{,}33\times10^{-8}$ 1/c |
| 2 | $C_6H_{14}^{*} \rightarrow CH_3^{\cdot} + C_5H_{11}$ | $2{,}26\times10^{-9}$ 1/c |
| 3 | $C_6H_{14}^{*} \rightarrow C_3H_7^{\cdot} + C_3H_7^{\cdot}$ | $9{,}7\times10^{-10}$ 1/c |
| 4 | $C_6H_{14}^{*} \rightarrow C_2H_5^{\cdot} + C_4H_9^{\cdot}$ | $9{,}7\times10^{-10}$ 1/c |
| 5 | $H + C_6H_{14} \rightarrow H_2 + C_6H_{13}$ | $1{,}5\times10^{8}$ |
| 6 | $H + H \rightarrow H_2$ | $5\times10^{9}$ |
| 7 | $CH_3^{\cdot} + C_6H_{14} \rightarrow CH_4 + C_6H_{13}^{\cdot}$ | $2\times10^{9}$ |
| 8 | $CH_3^{\cdot} + CH_3^{\cdot} \rightarrow C_2H_6$ | $5\times10^{9}$ |
| 9 | $CH_3^{\cdot} + CH_3^{\cdot} \rightarrow C_2H_4 + H_2$ | $2\times10^{9}$ |
| 10 | $C_2H_5^{\cdot} + C_6H_{14} \rightarrow C_2H_6 + C_6H_{13}^{\cdot}$ | $3\times10^{9}$ |
| 11 | $C_2H_5^{\cdot} + C_2H_5^{\cdot} \rightarrow C_4H_{10}$ | $5\times10^{9}$ |
| 12 | $C_2H_5^{\cdot} + C_2H_5^{\cdot} \rightarrow C_4H_6 + H_2$ | $2\times10^{9}$ |
| 13 | $C_3H_7^{\cdot} + C_6H_{14} \rightarrow C_3H_8 + C_6H_{13}^{\cdot}$ | $3\times10^{9}$ |

Продолжение Таблицы 1.

| *1* | *2* | *3* |
|---|---|---|
| 14 | $C_3H_7^{\cdot} + C_3H_7^{\cdot} \rightarrow C_6H_{14}$ | $5\times10^9$ |
| 15 | $C_3H_7^{\cdot} + C_3H_7^{\cdot} \rightarrow C_6H_{12} + H_2$ | $2\times10^9$ |
| 16 | $C_4H_9^{\cdot} + C_6H_{14} \rightarrow C_4H_{10} + C_6H_{13}^{\cdot}$ | $3\times10^9$ |
| 17 | $C_4H_9^{\cdot} + C_4H_9^{\cdot} \rightarrow C_8H_{18}$ | $5\times10^9$ |
| 18 | $C_4H_9^{\cdot} + C_4H_9^{\cdot} \rightarrow C_8H_{16} + H_2$ | $2\times10^9$ |
| 19 | $C_5H_{11}^{\cdot} + C_6H_{14} \rightarrow C_5H_{12} + C_6H_{13}^{\cdot}$ | $3\times10^9$ |
| 20 | $C_5H_{11}^{\cdot} + C_5H_{11}^{\cdot} \rightarrow C_{10}H_{22}$ | $5\times10^9$ |
| 21 | $C_5H_{11}^{\cdot} + C_5H_{11}^{\cdot} \rightarrow C_{10}H_{20} + H_2$ | $1,5\times10^9$ |
| 22 | $C_6H_{13}^{\cdot} + C_6H_{14} \rightarrow C_6H_{14} + C_6H_{13}^{\cdot}$ | $3\times10^9$ |
| 23 | $C_6H_{13}^{\cdot} + C_6H_{13}^{\cdot} \rightarrow C_{12}H_{26}$ | $5\times10^9$ |
| 24 | $C_6H_{13}^{\cdot} + C_6H_{13}^{\cdot} \rightarrow C_{12}H_{24} + H_2$ | $1,2\times10^9$ |
| 25 | $C_6H_{13}^{\cdot} + C_6H_{13}^{\cdot} \rightarrow C_6H_{14} + C_6H_{12}$ | $3\times10^9$ |
| 26 | $H + O_2 \rightarrow HO_2$ | $1,4\times10^{10}$ или $2,1\times10^{10}$ |
| 27 | R ($CH_3$, $C_2H_5$, $C_3H_7$, $C_4H_9$, $C_5H_{11}$, $C_6H_{13}$, $C_7H_{15}$) + $O_2 \rightarrow RO_2$ | ($CH_3$) $4,7\times10^9$, ($C_2H_5$) $2,9\times10^9$ (в воде), ($C_4H_9$) $4,9\times10^9$ (в циклогексане) |
| 28 | $HO_2 + RH \rightarrow H_2O_2 + R$ | $10^4$ |
| 29 | $HO_2 + HO_2 \rightarrow H_2O_2$ | $8,3\times10^5$ |
| 30 | $C_6H_{14} \rightarrow C_6H_{14}^+ + e^-$ | $1,33\times10^{-8}$ |
| 31 | $C_6H_{14}^+ + (CH_3)_2CHOH \rightarrow (CH_3)_2CHOH^+ + C_6H_{14}$ | $10^{10}$–$10^{11}$ |
| 32 | $(CH_3)_2CHOH^+ + (CH_3)_2CHOH \rightarrow (CH_3)_2CHOH_2^+ + (CH_3)_2COH^{\cdot}$ | $10^{10}$–$10^{11}$ |
| 33 | $(CH_3)_2CHOH_2^+ + e^- \rightarrow (CH_3)_2COH + H$ | $10^{11}$–$10^{12}$ |
| 34 | $(CH_3)_2CHOH + H \rightarrow (CH_3)_2COH + H_2$ | $9\times10^7$ |
| 35 | $2(CH_3)_2COH \rightarrow (CH_3)_2CO + (CH_3)_2COH$ | $3,8\times10^8$ |
| 36 | $(CH_3)_2COH + O_2 \rightarrow (CH_3)_2C(OO)OH$ | $3,9\times10^9$ |
| 37 | $(CH_3)_2C(OO)OH \rightarrow (CH_3)_2CO + HO_2$ | $10^4$ |
| 38 | $(CH_3)_2COH + H_2O_2 \rightarrow (CH_3)_2CO + HO_2 + OH$ | $7,0\times10^5$ |
| 39 | $(CH_3)_2CHOH + OH \rightarrow (CH_3)_2COH^{\cdot} + H_2O$ | $1,6\times10^9$ |
| 40 | $KOH \rightarrow K^+ + OH^-$ | |
| 41 | $(CH_3)_2COH^{\cdot} + OH^- \rightleftarrows (CH_3)_2CO^- + H_2O$ | $10^8$–$10^9$ |
| 42 | $(CH_3)_2CO^- + C_{12}H_{10-n}Cl_n \rightarrow (CH_3)_2CO + C^{\cdot}{}_{12}H_{10-n}Cl_{n-1} + Cl^-$ (n=1–10) | n=1 $k_1 = 1,2\times10^8$<br>n=2 $k_2 = 1,4\times10^8$<br>n=3 $k_3 = 1,6\times10^8$<br>n=4 $k_4 = 1,8\times10^8$<br>n=5 $k_5 = 2\times10^8$<br>n=6 $k_6 = 2,2\times10^8$<br>n=7 $k_7 = 2,4\times10^8$<br>n=8 $k_8 = 2,6\times10^8$<br>n=9 $k_9 = 2,8\times10^8$<br>n=10 $k_{10} = 3\times10^8$ |
| 43 | $C^{\cdot}{}_{12}H_{10-n}Cl_{n-1} + O_2 \rightarrow$ гидроперекисные ароматические соединения | $10^8$–$10^9$ |
| 44 | $Cl^- + C_6H_{14} \rightarrow C_6H_{13}^{\cdot} + HCl + e^-$ | $10^8$–$10^9$ |

Окончание Таблицы 1.

| *1* | *2* | *3* |
|---|---|---|
| 45 | $e^- + C_{12}H_{10-n}Cl_n \rightarrow C_{12}H_{10-n}Cl_{n-1} + Cl^-$ (n=1–10) | n=1 $k_1=1,5\times10^9$<br>n=2 $k_2= 2,1\times10^9$<br>n=3 $k_3= 2,7\times10^9$<br>n=4 $k_4= 3,3\times10^9$<br>n=5 $k_5= 3,9\times10^9$<br>n=6 $k_6= 4,5\times10^9$<br>n=7 $k_7= 5,1\times10^9$<br>n=8 $k_8= 5,7\times10^9$<br>n=9 $k_9= 6,3\times10^9$<br>n=10 $k_{10}= 6,9\times10^9$ |
| 46 | $C^{\cdot}{}_{12}H_{10-n}Cl_{n-1} + (CH_3)_2CHOH \rightarrow C_{12}H_{10-n+1}Cl_{n-1} + (CH_3)_2C^{\cdot}OH$ | $10^6–10^7$ |
| 47 | $R_iOO + C_6H_{14} \rightarrow R_iOOH + C_6H_{13}$ | $10^5$ |
| 48 | $R_iOOH \rightarrow R_iO + OH$ | $2\times10^{-4}$ |
| 49 | $R_iO + C_6H_{14} \rightarrow R_iOH + C_6H_{15}$ | $10^7$ |
| 50 | $R_iO + (CH_3)_2CHOH \rightarrow R_iOH + (CH_3)_2COH$ | $5\times10^7$ |
| 51 | $e + O_2 \rightarrow O_2^-$ | $1,9\times10^{10}$ |
| 52 | $(CH_3)_2CHOH_2^+ + O_2^- \rightarrow (CH_3)_2CHOH + HO_2$ | $10^{11}$ |

В Таблице 3 представлены исходные параметры расчета.

Таблица 3.

ИСХОДНЫЕ ПАРАМЕТРЫ РАСЧЕТА

| *Компоненты исходной смеси* | *Концентрация, моль/л* |
|---|---|
| $C_6H_{14}$ | 7,2 |
| $C_3H_7OH$ | 0,78 |
| $O_2$ | 0,0045 |
| ПХБ-18 (2,2',5-трихлорбифенил) | $0,198*10^{-3}$ |
| ПХБ-28+31 (2,4,4'-трихлорбифенил + 2,4',5-трихлорбифенил) | $0,198*10^{-3}$ |
| ПХБ-52 (2,2',5,5'-тетрахлорбифенил) | $2,1*10^{-3}$ |
| ПХБ-44 (2,2',3,5'-тетрахлорбифенил) | $2,1*10^{-3}$ |
| ПХБ-101 (2,2',4,5,5'-пентахлорбифенил) | $0,63*10^{-2}$ |
| ПХБ-149+118 ((2,3',4,4',5-пентахлорбифенил + 2,2',3,4',5',6-гексахлорбифенил) | $1,37*10^{-2}$ |
| ПХБ-153 (2,2',4,4',5,5'- гексахлорбифенил l) | $0,37*10^{-2}$ |
| ПХБ-138 (2,2',3,4,4',5'- гексахлорбифенил) | $0,497*10^{-2}$ |
| ПХБ-180 (2,2',3,4,4',5,5'гептахлорбифенил) | $0,87*10^{-3}$ |
| ПХБ-194 (2,2',3,3',4,4',5,5'-октахлорбифенил) | $0,0186*10^{-3}$ |

Результаты расчета представлены на Рисунке. На рисунке представлено изменение концентрации ПХБ изомеров, включающее монохлорбифенилы (ПХБ 1), а также образующихся продуктов, таких как бифенил и ионов хлора.

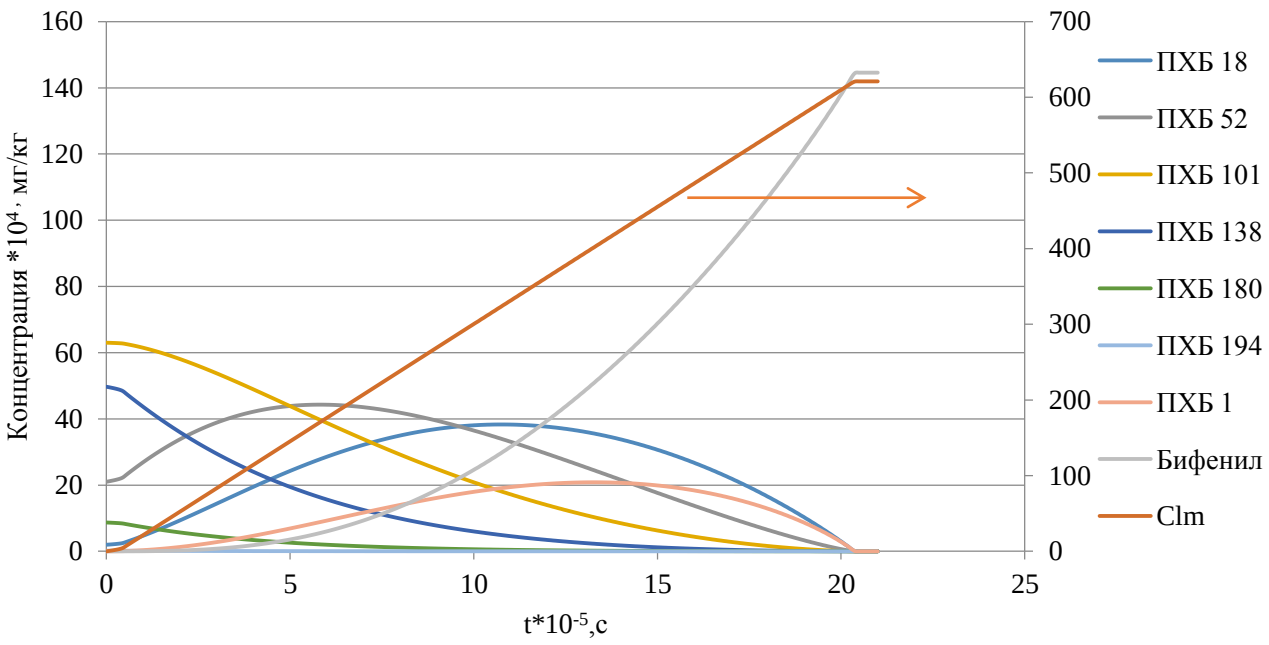


Рисунок. Кинетика изменения концентрации ПХБ изомеров, а также образующихся продуктов, таких как бифенил и ионов хлора от времени облучения.

Как видно, кинетические кривые изменения концентрации в зависимости от времени облучения характеризуются стабильными значениями концентраций до $t \sim 0{,}5\times10^5$ с и достигает максимума при $t \sim 12\times10^5$ с, $10\times10^5$ с и $5\times10^5$ с соответственно для монохлорбифенила, ПХБ 52 и ПХБ 18.

Указанные изомеры ПХБ содержат до 4 атомов хлора в составе. В отличие от них, концентрация оставшихся изомеров, а именно ПХБ 101, 138, 180, 194 уменьшается монотонно с ростом времени облучения. Эти изомеры содержат более 5 атомов хлора в составе. Образование бифенилов, которые являются продуктами дехлорирования ПХБ изомеров, происходит с индукционным периодом. Интенсивные процессы образования бифенилов происходят при времени облучения $t > 5\times10^5$ с. Полученные результаты показывают, что дехлорирование ПХБ изомеров происходит ступенчато, сначала происходит дехлорирование ПХБ изомеров с высоким содержанием хлора и образованием ПХБ изомеров с низким содержанием хлора. С ростом времени облучения, образующиеся ПХБ изомеры, с низким содержанием хлора также дехлорируются с образованием бифенилов. Наблюдаемая в начале облучения стабильность концентрации ПХБ изомеров связана, по-видимому, с захватом электронов молекулами кислорода, так как оценка относительной скорости расхода электронов молекулами кислорода и ПХБ показывает, что кислород в начале процесса практически полностью захватывает электроны.

$$\frac{\omega_1}{\omega_2} = \frac{k_1[e][O_2]}{k_2[e][\text{ПХБ}]} = \frac{1{,}9\ 10^{10} 4{,}5\ 10^{-3}}{5\ 10^{8}\ 0{,}5\ 10^{-2}} \approx 10^1 \div 10^2 c$$

После полного расходования кислорода электроны захватываются молекулами ПХБ, что приводит к их дальнейшему дехлорированию.

Из кинетических кривых определены радиационно-химические выходы образования (ПХБ 18, 52, монохлорбифенилов, бифенилов и $Cl^-$) и разложения (ПХБ 101, 138, 180) соответствующих ПХБ изомеров. При дозе $7{,}2\times10^2$ кГр ПХБ изомеры полностью расходуются и в качестве конечных продуктов образуются бифенилы и соляная кислота.

В Таблице 4 приведены радиационно-химические выходы образования (ПХБ 18, 52 монохлорбифенилов, бифенилов и $Cl^-$) и разложения (ПХБ 101, 138, 180).

Таблица 4.

РАДИАЦИОННО–ХИМИЧЕСКИЕ ВЫХОДЫ ОБРАЗОВАНИЯ (ПХБ 18, 52 МОНОХЛОРБИФЕНИЛОВ, БИФЕНИЛОВ И $Cl^-$) И РАЗЛОЖЕНИЯ (ПХБ 101, 138, 180)

| | *ПХБ–18* | *ПХБ–52* | *ПХБ–101* | *ПХБ–138* | *ПХБ–180* | *ПХБ–194* | *ПХБ–1* | *ПХБ–0* | $Cl_m$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| G молекул / 100 эВ | 0,45 | 0,30 | −0,76 | −0,61 | −0,15 | 0 | 0,45 | 2,1 | 5,1 |

Суммарный выход разложившихся ПХБ изомеров равен 2,7 молекул / 100 эВ, что примерно равен выходу бифенила. Выход соляной кислоты больше выхода бифенила, что объясняется стехиометрией процесса дехлорирования.

*Выводы:*

1. Проведены расчеты кинетики превращения ПХБ изомеров и продуктов в зависимости от поглощенной дозы при γ–радиолизе системы ПХБ+ гексан+изопропиловый спирт+КОН. Показано, что расчетно наблюдаемые концентрации ПХБ изомеров с высоким содержанием хлора монотонно уменьшается с ростом поглощенной дозы, что соответствует экспериментальным данным.
2. Кинетические кривые изменения концентрации ПХБ изомеров с низким содержанием хлора характеризуются более широкой областью стационарности в начальной части, чем расчетные. Это обусловлено, по-видимому, дополнительной абсорбцией кислорода со свободного объема во время облучения, что не учтено при расчетах.

*Список литературы:*

1. Клюев Н. А., Бродский Е. С. Определение полихлорированных бифенилов в окружающей среде и биоте. Полихлорированные бифенилы. Супертоксиканты XXI века // ВИНИТИ. 2000. №5. С. 31–63.
2. Занавескин Л. Н., Аверьянов В. А. Полихлорбифенилы: проблемы загрязнения окружающей среды и технологические методы обезвреживания // Успехи химии. 1998. Т. 67. №8. С. 788–800.
3. Singh R. K., Nayak P., Niyogi U. K. et. al. Gamma radiation process for destruction of toxic polychlorinated biphenyls (PCBs) in transformer oils // Journal of Environmental Science & Engg. 2006. V. 48. P. 45–50.
4. Tajima N., Hasegawa J., Horioko K. An approach to reuse of PCB–contaminated transformer oil using gamma radiolysis // Journal of Nuclear Science and Technology. 2008. V. 45. №7. P. 601–609.
5. Trifan A., Calinescu I., Martin D. Transformation of polychlorinated biphenyls (PCBs) into non-hazardous products by electron beam treatment // Rev. Chim. 2009. V. 60. №10. P.1053–1055.
6. Chaychian M., Silverman J., Al–Sheikhly M. Ionizing radiation induced degradation of tetrachlorbiphenyl in transformer oil // Environmental Scientific Technologies. 1999. V. 33. P. 2461–2464.
7. Бугаенко В. Л., Бяков В. М. Количественная модель радиолиза жидкой воды иразбавленных водных растворов водорода, кислорода и перекиси водорода. I. Формулировка модели // Химия высоких энергий. 1998. Т. 32. №6. С. 407–414.
8. Fraser F. M. Radiation Physics and Chemistry 1988. Vol. 31, №1–3. P. 125.
9. Agayev T. N. Mathematical modeling of processes of radiolysis of water, hexane and water–hexane mixture // ISSN. ВАНТ. 2013. №5 (87). P. 1562–6016.
10. Нерубацкая Ю. Д., Сазонов А. Б. Радиационное окисление изопропилового спирта в углеводородных средах // Успехи в химии и химической технологии. 2013. Т. 27. №6. С. 50–54.

*References:*

1. Kluyev, N. A., & Brodskiy, E. S. (2000). Determination of polychlorinated biphenyls in the environment and biota. Polychlorinated biphenyls. Supertoxicants of the XXI century. *VINITI,* (5), 31–63.
2. Zanaveskin, L. N. (1998). Polychlorobiphenyls: Problems of the pollution of the environment and technological neutralisation methods. *Russian Chemical Reviews,* 67, (8), 713–724.
3. Singh, R. K., Nayak, P., Niyogi, U. K., & et. al. (2006). Gamma radiation process for destruction of toxic polychlorinated biphenyls (PCBs) in transformer oils. *Journal of Environmental Science & Engg.,* 48, 45–50.
4. Tajima, N., Hasegawa, J., & Horioko, K. (2008). An approach to reuse of PCB–contaminated transformer oil using gamma radiolysis. *Journal of Nuclear Science and Technology,* 45, (7), 601–609.
5. Trifan, A., Calinescu, I., & Martin, D. (2009). Transformation of polychlorinated biphenyls (PCBs) into non-hazardous products by electron beam treatment. *Rev. Chim.,* 60, (10), 1053–1055.
6. Chaychian, M., Silverman, J., & Al–Sheikhly, M. (1999). Ionizing radiation induced degradation of tetrachlorbiphenyl in transformer oil. *Environmental Scientific Technologies,* 33, 2461–2464.
7. Bugaenko, V. L., & Byakov, V. M. (1998). Quantitative model of radiolysis of liquid water and dilute aqueous solutions of hydrogen, oxygen and hydrogen peroxide. I. Statement of the model. High Energy Chemistry, 32, (6), 407–414.
8. Fraser, F. M. (1988). *Radiation Physics and Chemistry,* 31, (1–3), 125.
9. Agayev, T. N. (2013). Mathematical modeling of processes of radiolysis of water, hexane and water-hexane mixture. *ISSN. BAHT,* (5), 1562–6016.
10. Nerubatskaya, Yu. D., & Sazonov, A. B. (2013). Radiative oxidation of isopropyl alcohol in hydrocarbon media. Successes in chemistry and chemical technology, 27, (6), 50–54.

*Работа поступила в редакцию 13.03.2017 г.*

*Принята к публикации 16.03.2017 г.*

---

*Ссылка для цитирования:*

Джаванширова А. А., Искендерова З. И., Маммедов С. Г., Курбанов М. А., Абдуллаев Э. Т. Численное моделирование радиационно–химических превращений полихлорированных бифенилов в растворе гексана, изопропилового спирта и щелочи KOH // Бюллетень науки и практики. Электрон. журн. 2017. №4 (17). С. 22–29. Режим доступа: http://www.bulletennauki.com/djavanshirova (дата обращения 15.04.2017).

*Cite as (APA):*

Djavanshirova, A., Iskenderova, Z., Mammedov, S., Gurbanov, M., & Abdullayev, E. (2017). Numerical modeling of radiation–chemical transformations of polychlorinated biphenyles in solution of hexane, isopropyl alcohol and alkali KOH. *Bulletin of Science and Practice,* (4), 22–29.