

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПОЛИХЛОРБИФЕНИЛОВ С ГИДРОКСИДОМ КАЛИЯ В СРЕДЕ ПОЛИАЛКАНОЛАМИНОВ

© А. В. Майорова¹, Т. В. Куликова¹, Т. И. Горбунова², М. Г. Первова²

¹ Институт металлургии УрО РАН,
620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 101

² Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского УрО РАН,
620137, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской/Академическая, д. 22/20
E-mail: imeturoan@mail.ru

Поступила в Редакцию 17 сентября 2020 г.

После доработки 14 декабря 2020 г.

Принята к публикации 29 декабря 2020 г.

Методом термодинамического моделирования исследованы взаимодействия конгенов технических смесей полихлорбифенилов (марок Трихлорбифенил, Совол) с гидроксидом калия в среде полиалканололаминов [диэтанолamina, триэтанолamina, 2-(N,N-диметиламино)этанолa, 3-(N,N-диметиламино)-1-пропанолa, N-метилдиэтанолamina]. Установлено, что диэтаноламин и триэтаноламин являются наиболее эффективными растворителями, обеспечивающими максимальную степень конверсии исходных конгенов смесей полихлорбифенилов при температуре 200°C в условиях нуклеофильного замещения.

Ключевые слова: полихлорбифенилы; нуклеофильное замещение; термодинамическое моделирование; полиалканолламины

DOI: 10.31857/S0044461821030099

Полихлорированные бифенилы являются экотоксикантами и подлежат обязательному уничтожению [1, 2]. Метод сжигания не решает проблему уничтожения полихлорбифенилов, поскольку при термической обработке хлораренов в качестве продуктов выделяются еще более токсичные фосген, полихлордибензодиоксины и дибензофураны, оксиды хлора и т. д. [3].

Подавить полностью или минимизировать протекание процесса образования вредных выбросов при термоллизе полихлорбифенилов можно, если предварительно подготовить конгены смесей полихлорбифенилов путем химической модификации, а именно их взаимодействием с нуклеофилами (S_N). В резуль-

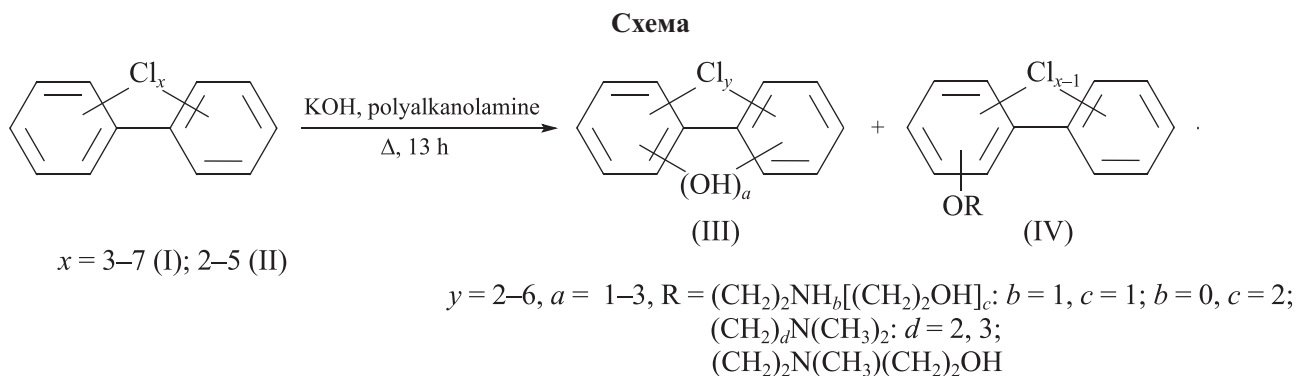
тате нуклеофильного замещения происходит частичный обмен атомов хлора на углеводородные группы. К сожалению, многочисленные экспериментальные работы показали, что осуществить исчерпывающее замещение атомов хлора на другие функциональные группы практически невозможно [4]. Тем не менее подготовка полихлорбифенилов с частичной заменой атомов галогена на другие функциональные группы позволяет получать производные полихлорбифенилов со сниженным содержанием хлора и при термоллизе минимизировать риск образования более опасных хлорорганических веществ [5, 6].

Из-за многокомпонентности составов технических смесей полихлорбифенилов, содержащих не-

сколько десятков конгенов, обладающих разными физико-химическими свойствами, экспериментальный подбор условий нуклеофильного замещения является длительным и трудоемким [7]. Ранее метод термодинамического моделирования химических взаимодействий успешно применялся для подбора условий нуклеофильного замещения (температура, состав исходных компонентов и т. д.) [8]. Так, с помощью моделирования подобраны условия взаимодействия смеси полихлорбифенилов марки Совол с гидроксидом калия в среде 2-аминоэтанола [8], что позволило на практике увеличить степень конверсии, а также содержание гидроксипроизводных в смеси конечных продуктов [аминоэтокси-, гидроксид- и аминоэтокси(гидроксид)производных полихлорбифенилов]. Последнее уточнение, касающееся гидроксипроизводных полихлорбифенилов, является существенным, поскольку при термическом окислении, протекающем по радикальному механизму, гидроксигруппа превращается в воду.

Ранее было показано, что использование для синтеза гидроксипроизводных полихлорбифенилов различных полиалканоламинов [диэтанолamina (ДЭА), триэтанолamina (ТЭА), 2-(N,N-диметиламино)э-

нола (ДМАЭ), 3-(N,N-диметиламино)-1-пропанола (ДМАП), N-метилдиэтанолamina (МДЭА)] в качестве среды во взаимодействиях конгенов смесей полихлорбифенилов Совол и Трихлорбифенил с гидроксидом калия является менее эффективным (см. схему) [9] по сравнению с применением 2-аминоэтанола [8]. Кроме того, в среде 2-(N,N-диметиламино)-этанолa и 3-(N,N-диметиламино)-1-пропанола при взаимодействии смеси полихлорбифенилов Совол с гидроксидом калия кроме гидроксипроизводных были зарегистрированы продукты нуклеофильного замещения атомов хлора на соответствующие алкоксигруппы, сгенерированные из примененных полиалканоламинов. Представленные факты трудно объяснить, не прибегая к расчетным методам. Их можно попытаться интерпретировать с помощью термодинамического моделирования. Понимание механизма нуклеофильного замещения атомов хлора на гидроксид- и алкоксигруппы в среде различных растворителей позволит теоретически подбирать не только исходные параметры (состав, температуру) взаимодействий, но и реакционную среду, обеспечивающую максимально возможную степень конверсии конгенов полихлорбифенилов.



Цель работы — исследование влияния растворителей из ряда полиалканоламинов на поведение исходных конгенов полихлорбифенилов смесей Совол (I) и Трихлорбифенил (II) в реакциях с гидроксидом калия с помощью термодинамического моделирования.

Обсуждение результатов

Для моделирования реакций замещений исследуемых технических смесей использовали известные термодинамические характеристики соединений, участвующих в реакциях замещения [стандартную энтальпию образования (ΔH°_{298}), приращение энтальпии от 0 до 298 К ($H^\circ_{298} - H^\circ_0$), стандартную те-

плоемкость ($C_p^\circ_{298}$) и ее зависимость от температуры $C_p(T)$, энтропию (S°_{298}) и т. д.], взятые из базы данных программного комплекса по термодинамическому моделированию HSC. Термодинамические характеристики для полиалканоламинов и производных полихлорбифенилов (IV) рассчитывали методом групповых составляющих Joback [10] и сравнивали с известными литературными данными из базы данных HSC. Термодинамические характеристики гидроксипроизводных полихлорбифенилов (III), образованных на основе конгенов входящих в состав смесей Совол (I) и Трихлорбифенил (II), рассчитаны нами ранее и представлены в работе [8].

Поскольку основной вклад в смесь Совол (I) вносят пентахлорбифенилы, а в смесь Трихлорбифенил

(II) — трихлорбифенилы [8, 9], расчет термодинамических характеристик продуктов (IV) произведен для производных на основе пента- и трихлорбифенилов соответственно (см. таблицу).

Рассчитанные нами термодинамические характеристики для ДЭА, ТЭА, ДМАЭ, МДЭА (см. таблицу) и приведенные в базе данных программного комплекса HSC удовлетворительно сходятся.

Рассчитанные значения термодинамических характеристик для полиалканоламинов и производных полихлорбифенилов (IV) вводили в базу данных программного комплекса HSC и использовали при термодинамическом моделировании (модуль Equilibrium Composition).

При подборе условий взаимодействий любых реагентов с помощью термодинамического моделирования широко применяются модели идеального раствора и газа. Эти приближения ранее доказали свою эффективность во многих исследованиях [8]. При моделировании не учитывается скорость протекания реакции. В связи с этим определенные по результатам моделирования массы исходных компонентов и показатели температуры следует рассматривать как максимально возможные значения.

В работе [9] для экспериментального осуществления нуклеофильного замещения атомов хлора в конгенерах полихлорбифенилов смесей Трихлорбифенил (II) и Совол (I) в среде полиалканоламинов под действием гидроксида калия рассматривали условия, в которых по результатам моделирования удается достичь 100% конверсии в присутствии растворителя 2-аминоэтанола [8]: 170°C, 6-кратный мольный избыток нуклеофильного агента (гидроксида калия) по отношению к смеси полихлорбифенилов. Для обоснования влияния полиалканоламинов на величину степени конверсии конгенеров полихлорбифенилов представленные выше условия применять для моделирования некорректно. При условии, что полиалканоламины также являются нуклеофилами во взаимодействии смесей полихлорбифенилов со щелочью, мольные доли гидроксида калия и полиалканоламинов необходимо приравнять. Однако в этом случае полиалканоламины не будут относиться к растворителям.

С использованием термодинамического моделирования и программного комплекса HSC проведено моделирование процессов, протекающих в среде 0.3 моль полиалканоламинов (ДЭА, ТЭА, ДМАЭ, МДЭА) между 0.05 моль смеси полихлорбифенилов Трихлорбифенил (II), Совол (I) и 0.1 моль гидроксида калия. Учитывали температурный интервал 100–200°C, поскольку температура кипения некоторых растворителей низкая [$T_{\text{кип}}(\text{ДМАЭ}) = 134^\circ\text{C}$,

$T_{\text{кип}}(\text{ДМАП}) = 162\text{--}164^\circ\text{C}$], а также при температуре процесса более 200°C возможно образование высокотоксичных полихлорированных дибензо-*n*-диоксинов и дибензофуранов.

Учитываемый исходный состав (0.1 моль гидроксида калия и 0.3 моль полиалканоламина) не является оптимальным, поскольку в продуктах остаются непрореагировавшие исходные конгенеры, входящие в состав смесей полихлорбифенилов.

При исследовании влияния диэтанолamina, триэтанолamina, 2-(N,N-диметиламино)этанола, 3-(N,N-диметиламино)-1-пропанола, N-метилдиэтанолamina на поведение конгенеров полихлорбифенилов смесей Совол (I) и Трихлорбифенил (II) во взаимодействии с гидроксидом калия необходимо оценить результаты моделирования [реакционную способность конгенеров, входящих в состав исходных смесей полихлорбифенилов, влияние температуры на конверсию исходных конгенеров смесей Трихлорбифенил (II), Совол (I)] и выявить наиболее эффективный растворитель из ряда полиалканоламинов (рис. 1, а, б).

Реакционная способность конгенеров смесей полихлорбифенилов Трихлорбифенил (II) и Совол (I). При моделировании процессов, протекающих в среде полиалканоламинов между Трихлорбифенилом (II) и гидроксидом калия, в продуктах реакции концентрация исходных конгенеров в разы выше по сравнению с аналогичным взаимодействием Совола (I). Данные моделирования согласуются с ранее сделанными выводами о меньшей реакционной способности групп конгенеров полихлорбифенилов, входящих в состав смеси Трихлорбифенила (II), в сравнении с группами конгенеров из Совола (I) [9]. Экспериментальные исследования процессов замещения между конгенерами смесей полихлорбифенилов и гидроксидом калия в присутствии полиалканоламинов также показали меньшую степень конверсии из смеси Трихлорбифенил (II), чем из смеси Совол (I) [9].

Основными продуктами при моделировании взаимодействия смесей полихлорбифенилов Трихлорбифенил (II) и Совол (I) с гидроксидом калия являются производные (III), а производные (IV) зарегистрированы в смеси продуктов в концентрации менее 10^{-20} мол. доли. Это позволяет сделать вывод о термодинамической нестабильности производных (IV) и отнести их к промежуточным продуктам, из которых далее образуются производные (III) в результате нуклеофильного обмена алкокси- на гидроксигруппы. Отметим, что моделирование не учитывает скорость протекания реакции и соответственно не дает количественных рекомендаций о времени осуществления взаимодействия. С этим связаны отличия результатов

Расчитанные термодинамические характеристики полиалканолминов и производных полихлорбифенилов

Соединение	Стандартная энтальпия образования ΔH_{298}° , кДж·моль ⁻¹	Стандартная энергия Гиббса ΔG_{298}° , кДж·моль ⁻¹	Стандартная энтропия S_{298}° , Дж·моль ⁻¹ ·К ⁻¹	Приращение энтальпии от 0 до 298 К $H_{298}^{\circ} - H_{0}^{\circ}$, кДж·моль ⁻¹	Теплоемкость $C_p = a + b \cdot 10^{-3}T + d \cdot 10^{-6}T^2 + c \cdot 10^5 T^{-2}$, Дж·моль ⁻¹ ·К ⁻¹			Стандартная теплоемкость C_p^{298} , Дж·моль ⁻¹ ·К ⁻¹	
					a	b	c		d
Растворители									
3-(N,N-Диметиламино)-1-пропанол C ₅ H ₁₃ NO	-231.23	-20.75	415.61	22.56	34.873	523.21	-7.86	-208.4	151.34
N-метилдизэтанолмин C ₅ H ₁₃ NO ₂	-383.46	-171.64	466.39	24.38	101.18	364.88	-35.38	-111.38	163.51
	-379.91*		469.00*						160.26 [15]
2-(N,N-Диметиламино)этанол C ₄ H ₁₁ NO	-210.59	-43.24	377.05	19.04	55.64	342.81	-19.50	-113.77	127.72
	-201.95*		383.99*						125.79 [15]
Триэтанолмин C ₆ H ₁₅ NO ₃	-556.33	-300.04	555.74	29.76	115.46	460.32	-38.31	-148.16	199.61
	-561.95*		537.77*						196.44 [15]
Диэтанолмин C ₄ H ₁₁ NO ₂	-376.88	-201.45	452.44	21.01	65.47	351.83	-17.55	-118.11	140.96
	-364.91*		446.00*						140.14 [16]
Производные полихлорбифенилов									
(N,N-Диметиламиноэтокси)дихлорбифенил	-31.09	261.69	635.59	47.28	58.33	1041.35	-11.65	-434.24	317.13
C ₁₂ H ₇ Cl ₂ [O(CH ₂) ₂ N(CH ₃) ₂]									
(N,N-Диметиламиноэтокси)тетрахлорбифенил	-85.51	218.57	687.87	52.11	101.65	982.29	-9.28	-405.34	349.55
C ₁₂ H ₅ Cl ₄ [O(CH ₂) ₂ N(CH ₃) ₂]									
(N,N-Диметиламинопропокси)тетрахлорбифенил	-106.15	226.99	728.42	55.54	104.86	934.39	-10.16	-435.67	372.57
C ₁₂ H ₅ Cl ₄ [O(CH ₂) ₃ N(CH ₃) ₂]									
(N,N-Диметиламинопропокси)дихлорбифенил	-57.13	270.11	674.14	51.02	61.56	1121.48	-12.54	-464.55	342.23
C ₁₂ H ₇ Cl ₂ [O(CH ₂) ₃ N(CH ₃) ₂]									
[2-(N-Метилэтаноламино)этокси]дихлорбифенил	-203.96	133.29	724.93	52.74	73.71	1127.88	-14.01	-455.06	353.81
C ₁₂ H ₇ Cl ₂ [O(CH ₂) ₂ N(CH ₃)(CH ₂) ₂ OH]									
[2-(N-Метилэтаноламино)этокси]тетрахлорбифенил	-258.38	90.17	779.21	57.24	113.58	1080.89	-10.90	-446.21	383.95
C ₁₂ H ₅ Cl ₄ [O(CH ₂) ₂ N(CH ₃)(CH ₂) ₂ OH]									
[2-(N,N-Диэтаноламино)этокси]тетрахлорбифенил	-431.25	-38.23	868.55	62.35	125.51	1176.54	-12.52	-487.07	418.25
C ₁₂ H ₅ Cl ₄ [O(CH ₂) ₂ N((CH ₂) ₂ OH) ₂]									
[2-(N,N-Диэтаноламино)этокси]дихлорбифенил	-376.83	4.89	814.27	58.05	82.20	1240.36	-14.89	-515.97	389.43
C ₁₂ H ₇ Cl ₂ [O(CH ₂) ₂ N((CH ₂) ₂ OH) ₂]									
[2-(N-Этаноламино)этокси]дихлорбифенил	-197.38	103.48	710.97	49.33	67.15	1053.40	-10.37	-435.26	330.89
C ₁₂ H ₇ Cl ₂ [O(CH ₂) ₂ NH(CH ₂) ₂ OH]									
[2-(N-Этаноламино)этокси]тетрахлорбифенил	-251.80	60.36	765.25	43.94	110.47	992.54	-8.00	-406.36	294.77
C ₁₂ H ₅ Cl ₄ [O(CH ₂) ₂ NH(CH ₂) ₂ OH]									

* База данных программного комплекса HSC.

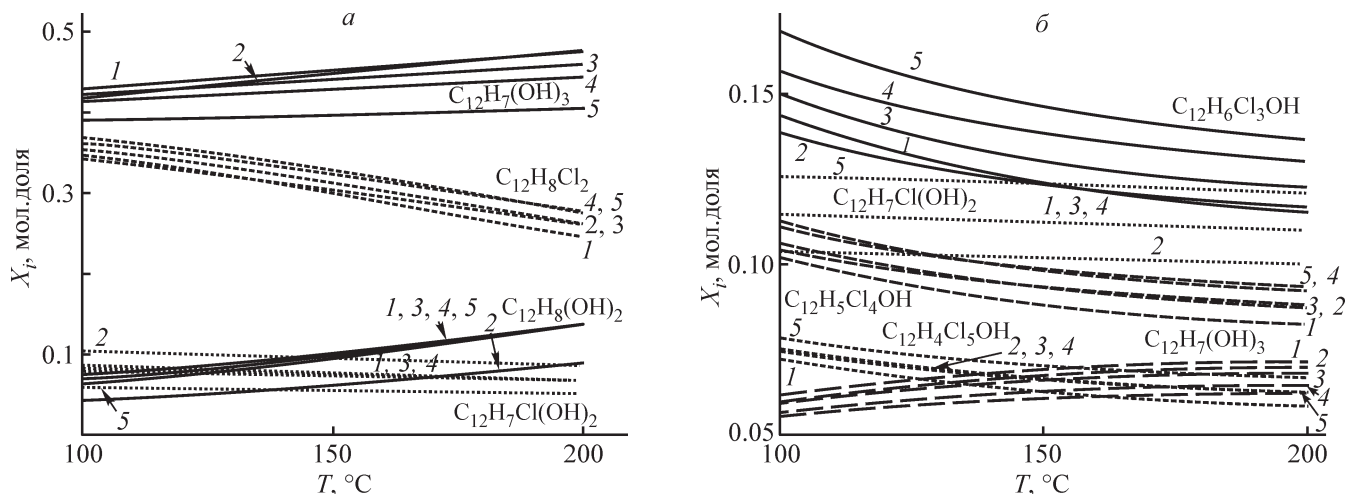


Рис. 1. Зависимость равновесного состава конгенов и производных полихлорбифенилов от температуры. Исходный состав: 0.05 моль смеси полихлорбифенилов, 0.1 моль гидроксида калия, 0.3 моль растворителя, $P = 1$ атм. a — Трихлорбифенил (II), b — Совол (I). Полиалканоламин: 1 — триэтаноламин, 2 — диэтаноламин, 3 — 2-(N,N-диметиламино)этанол, 4 — N-метилдиэтаноламин, 5 — 3-(N,N-диметиламино)-1-пропанол. На зависимостях представлены соединения, концентрация которых более 0.05 мол. доли. Сумма мольных долей всех конгенов и производных полихлорбифенилов равна 1.

термодинамического моделирования от экспериментальных.

С учетом полученных данных моделирования можно спрогнозировать, что производные полихлорбифенилов (IV) будут отсутствовать в смесях продуктов реакции при осуществлении нуклеофильного замещения в среде 2-(N,N-диметиламино)этанола и 3-(N,N-диметиламино)-1-пропанола, если время взаимодействия будет увеличено относительно учитываемого в работе [9].

Влияние температуры на конверсию конгенов полихлорбифенилов смесей Трихлорбифенил (II) и Совол (I). С увеличением температуры возрастает конверсия исходных конгенов полихлорбифенилов смесей Трихлорбифенил (II) и Совол (I) в реакции с гидроксидом калия при использовании в качестве среды диэтанолamina, триэтанолamina, 2-(N,N-диметиламино)этанола, 3-(N,N-диметиламино)-1-пропанола, N-метилдиэтанолamina. В продуктах реакций концентрация исходных конгенов полихлорбифенилов, а также их гидроксипроизводных (III) как продуктов неполного замещения падает. При этом возрастает концентрация производных, представляющих собой продукты исчерпывающего замещения атомов хлора. Следовательно, процесс целесообразно осуществлять при максимальной возможной температуре 200°C. Поскольку для некоторых растворителей температура кипения менее 200°C [$T_{\text{кип}}(\text{ДМАЭ}) = 134^\circ\text{C}$, $T_{\text{кип}}(\text{ДМАП}) = 162\text{--}164^\circ\text{C}$], взаимодействие необходимо реализовывать при температуре кипения

реакционной массы, что было осуществлено экспериментально в случае с 2-(N,N-диметиламино)этанолом и 3-(N,N-диметиламино)-1-пропанолом в работе [9].

Выявление наиболее эффективных растворителей диэтанолamina, триэтанолamina, 2-(N,N-диметиламино)этанола, 3-(N,N-диметиламино)-1-пропанола, N-метилдиэтанолamina. При моделировании взаимодействия в среде полиалканоламинов Трихлорбифенила (II), Совола (I) с гидроксидом калия конверсия конгенов смесей полихлорбифенилов имеет разные значения. В продуктах реакции концентрация производных полихлорбифенилов (III) уменьшается в ряду ТЭА → ДЭА → МДЭА → ДМЭА → ДМАП. Отметим, что результаты моделирования и эксперимент [9] относительно эффективности полиалканоламинов в реакциях замещения конгенов полихлорбифенилов смеси Трихлорбифенил (II) и Совол (I) с гидроксидом калия удовлетворительно согласуются (рис. 2).

Различия в результатах моделирования при использовании диэтанолamina и триэтанолamina наблюдаются в температурном интервале 100–150°C (рис. 1). При более высокой температуре осуществления взаимодействия концентрации получаемых производных полихлорбифенилов (III) идентичны.

Наименьшая степень конверсии в применяемых условиях замещения получена в среде 2-(N,N-диметиламино)этанола и 3-(N,N-диметиламино)-1-пропанола (рис. 1, 2). При температуре кипения

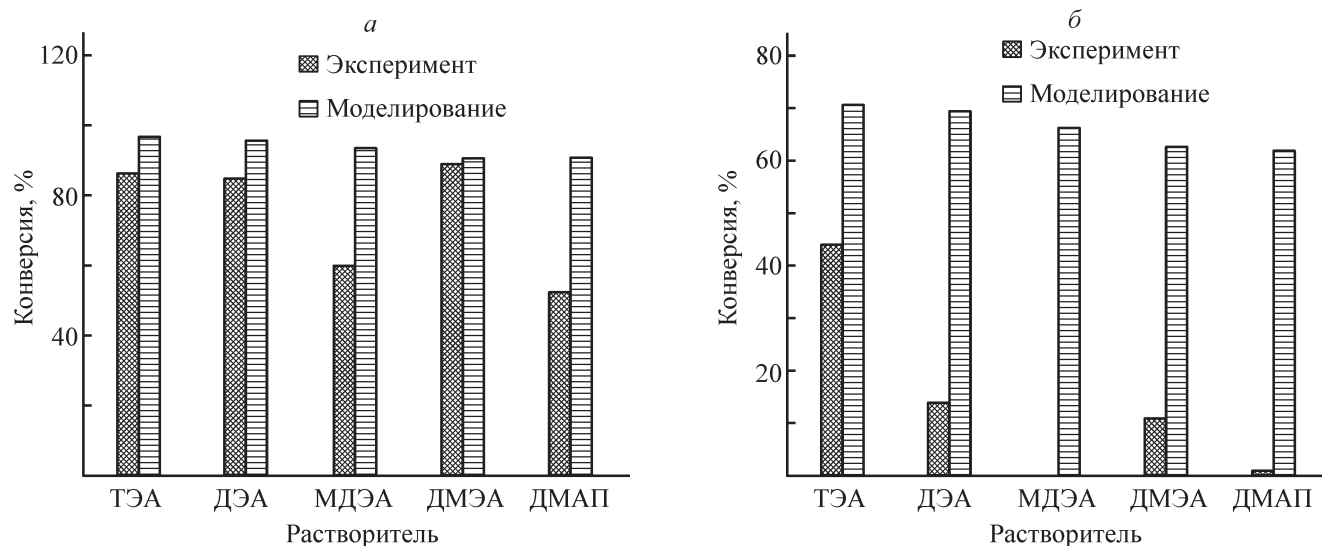


Рис. 2. Конверсия исходных конгенов полихлорбифенилов смесей Совол (I) (а) и Трихлорбифенил (II) (б) в реакции с гидроксидом калия в среде диэтанолamina (ДЭА), триэтанолamina (ТЭА), 2-(N,N-диметиламино)-этанолa (ДМАЭ), 3-(N,N-диметиламино)-1-пропанолa (ДМАП), N-метилдиэтанолamina (МДЭА) по результатам моделирования ($T = 150^{\circ}\text{C}$) и экспериментальных исследований [13 ч, $T = 170^{\circ}\text{C}$; для 2-(N,N-диметиламино)-этанолa $T = 134^{\circ}\text{C}$, для 3-(N,N-диметиламино)-1-пропанолa $T = 162^{\circ}\text{C}$] [10].

реакционной массы (не более 160°C) содержание в продуктах реакции исходных малореакционных конгенов полихлорбифенилов (дихлор-, трихлор-) значительно выше, чем при 200°C . Из-за низкой величины температуры кипения 2-(N,N-диметиламино)-этанолa и 3-(N,N-диметиламино)-1-пропанолa без автоклава невозможно осуществить процесс замещения при более высоких температурах. Однако в случае с полихлорбифенилами применение закрытых сосудов для осуществления химических взаимодействий обоснованно запрещено.

Наблюдается четкая закономерность при сравнении стандартной энергии Гиббса (ΔG°_{298}) в ряду ТЭА \rightarrow ДЭА \rightarrow МДЭА \rightarrow ДМЭА \rightarrow ДМАП (см. таблицу). Значения ΔG°_{298} наиболее эффективных (реакционноспособных), по результатам термодинамического моделирования, растворителей триэтанолamina и диэтанолamina меньше в сравнении с менее эффективными 2-(N,N-диметиламино)этанолom и 3-(N,N-диметиламино)-1-пропанолom, что полностью согласуется с экспериментальными данными [9]. Эффективность полиалканоламинов в изучаемом процессе связана с протеканием процесса алкоголиза, где растворители одновременно выступают также нуклеофильными агентами. Обнаружение в работе [9] в продуктах производных полихлорбифенилов (IV) при использовании 2-(N,N-диметиламино)этанолa и 3-(N,N-диметиламино)-1-пропанолa является следствием процесса алкоголиза.

Использование наиболее реакционноспособных растворителей приводит к уменьшению ΔG°_{298} реакции и увеличению скорости прямой реакции замещения по сравнению с менее реакционноспособными растворителями.

В продуктах реакции смесей полихлорбифенилов Совол (I), Трихлорбифенил (II) с гидроксидом калия в среде растворителей триэтанолamina и диэтанолamina отсутствуют производные полихлорбифенилов (IV), а в среде 2-(N,N-диметиламино)этанолa, 3-(N,N-диметиламино)-1-пропанолa присутствуют [9]. Вероятно, в случае применения триэтанолamina и диэтанолamina также могут быть получены производные (IV), если существенно снизить время осуществления процесса по сравнению с аналогичным параметром из работы [9], но тогда и конверсия исходных конгенов полихлорбифенилов будет минимальна.

Выводы

По результатам моделирования установлено, что замещение атомов хлора в структуре полихлорбифенилов в реакции с гидроксидом калия в среде полиалканоламинов является сложным многостадийным процессом, который характеризуется образованием как термодинамически неустойчивых производных (IV), так и стабильных продуктов (III). Увеличение степени конверсии конгенов полихлорбифенилов коммерческих смесей Совол (I) или Трихлорбифенил

(II) при взаимодействии со щелочью в среде полиалканаминов по сравнению с данными из работы [9] возможно только при условии повышения температуры в зоне реакции.

Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-29-24126).

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.

Информация об авторах

Майорова Анна Владимировна, к.х.н.,
ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1143-9209>
Куликова Татьяна Владимировна, к.х.н.,
ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-3855-3984>
Горбунова Татьяна Ивановна, д.х.н.,
ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4288-1988>
Первова Марина Геннадьевна, к.х.н.,
ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4620-5418>

Список литературы

- [1] *Porta M., Zumeta E.* Implementing the Stockholm treaty on persistent organic pollutants // *Environ. Med.* 2002. V. 59. P. 651–652.
<https://doi.org/10.1136/oem.59.10.6512>
- [2] *Майстеренко В. Н., Ключев Н. А.* Эколого-аналитический мониторинг стойких органических загрязнителей. М.: БИНОМ, 2004. С. 2–30.
- [3] *Занавескин Л. Н., Аверьянов В. А., Трегер Ю. А.* Перспективы развития методов переработки галогенорганических отходов. Закономерности каталитического гидрогенолиза галогенсодержащих соединений // *Успехи химии.* 1996. Т. 65. № 7. С. 667–675 [*Zanaveskin L. N., Averyanov V. A., Treger Yu. A.* Prospects for the development of methods for the processing of organohalogen waste. Characteristic features of the catalytic hydrogenolysis of halogen-containing compounds // *Russ. Chem. Rev.* 1996. V. 65. N 7. P. 617–624.
<https://doi.org/10.1070/RC1996v065n07ABEH000271>].
- [4] *Горбунова Т. И., Первова М. Г., Салоутин В. И., Чупахин О. Н.* Химическая функционализация полихлорированных бифенилов: новые достижения. Екатеринбург: Урал. ун-т, 2018. С. 96–99.
- [5] *Kawamoto K., Mabuchi K.* Formation characteristics of polychlorinated dibenzo-p-dioxins, polychlorinated dibenzofurans, and coplanar PCBs in fly ash from a gasification–melting process of municipal solid waste // *J. Mater. Cycles Waste Manag.* 2001. V. 3. P. 38–47. <https://doi.org/10.1007/s10163-000-0039-2>
- [6] *Vermeulen I., Caneghem J.V., Vandecasteele C.* Indication of PCDD/F formation through precursor condensation in a full-scale hazardous waste incinerator // *J. Mater. Cycles Waste Manag.* 2014. V. 16. P. 167–171.
<https://doi.org/10.1007/s10163-013-0160-7>
- [7] *Kamarehie B., Jafari A. J., Mahabadi H. A.* Dechlorination and decomposition of Aroclor 1242 in real wastetransformer oil using a nucleophilic material with a modified domestic microwave oven // *J. Mater. Cycles Waste Manag.* 2014. V. 16. P. 711–720.
<https://doi.org/10.1007/s10163-013-0185-y>
- [8] *Майорова А. В., Куликова Т. В., Шуняев К. Ю., Горбунова Т. И., Первова М. Г., Плотникова К. А.* Оптимизация взаимодействия полихлорбифенилов с бинуклеофилом с помощью термодинамического моделирования // *ЖПХ.* 2017. Т. 90. № 6. С. 761–769 [*Maierova A. V., Kulikova T. V., Shunyaev K. Y., Gorbunova T. I., Pervova M. G., Plotnikova K. A.* Optimization of the reaction of polychlorobiphenyls with a binucleophile by thermodynamic modeling // *Russ. J. Appl. Chem.* 2017. V. 90. N 6. P. 915–922.
<https://doi.org/10.1134/S107042721706012X>].
- [9] *Горбунова Т. И., Первова М. Г., Салоутин В. И., Чупахин О. Н.* Реагентная подготовка полихлорбифенилов к уничтожению // *ЖПХ.* 2019. Т. 92. № 7. С. 947–952.
<https://doi.org/10.1134/S004446181907017X>
[*Gorbunova T. I., Pervova M. G., Saloutin V. I., Chupakhin O. N.* Reagent pretreatment of polychlorobiphenyls prior to breakdown // *Russ. J. Appl. Chem.* 2019. V. 92. N 7. P. 1039–1044.
<https://doi.org/10.1134/S1070427219070218>].
- [10] *Joback K. G., Reid R. C.* Estimation of pure component properties from group-contributions // *Chem. Eng. Commun.* 1987. V. 57. P. 233–243.
<https://doi.org/10.1080/00986448708960487>