

КВАНТОВО-ХІМІЧНИЙ РОЗРАХУНОК СЕЛЕКТИВНОСТІ ВИЛУЧЕННЯ КАТІОНІВ МЕТАЛІВ АЗА-18-КРАУН-6-ЕТЕРОМ

Зайцева І.С., Булавіна Д.А., Пилипенко О.І.
*Харківській національний університет міського
господарства ім. О. М. Бекетова, м. Харків*

Стічні води, які утворюються в результаті діяльності людини, містять значну кількість органічних та неорганічних речовин, які мають негативний вплив на довкілля і тому є забрудниками. Зокрема, до них відносяться важкі метали, які потрапляють у воду у іонному вигляді з різноманітних промислових джерел. Вміст іонів важких металів суворо контролюється та для видалення запропонований ряд методів. Серед них слід відзначити хімічне осадження, електроліз, екстракцію. На жаль, вони не дозволяють знизити концентрацію забрудників нижче гранично допустимого рівня або є занадто дорогими, що обмежує їх широке впровадження.

Найбільш прогресивним методом видалення іонів важких металів використання іонного обміну, заснованого на використанні полімерних матеріалів, які містять функціональні групи, що можуть обмінювати свої іони на іони з розчину [1]. Багатообіцяючими речовинами для створення нових типів іонообмінних сорбентів є краун-естери – циклічні сполуки, що можуть утворювати з іонами металів комплексні сполуки [2]. Особливістю молекул краун-естерів є наявність електронодonorної порожнини, яка має визначені розміри та геометрію. Виконаний квантово-хімічний розрахунок дозволив визначити вплив замісника на атомі Нітрогену молекули етеру на просторову структуру аза-18-краун-6-етеру [3].

Встановлено, що зміна стеричної навантаженості замісника у молекулі етеру дозволяє регулювати селективність комплексоутворення. Збільшення об'єму замісника у молекулі аза-18-краун-6-етеру обумовлює протікання реакцій комплексоутворення з іонами з малими значеннями радіусів Ван-дер-ваальса. Це дає можливість регулювати селективність вилучення катіонів металів.

Література:

1. Pylypenko O., Zaitseva I., Panayotova T. "Smart" sorbents based on iminodiacetic acid for selective sorption of heavy metal ions. In: Arsenyeva, O., Romanova, T., Sukhonos, M., Biletskyi, I., Tsegelnyk, Y. (eds.) STUE-2023, LNNS, vol. 808, pp. 382–390. Springer, Heidelberg, 2023.
2. Зайцева И.С., Ефимов П.В., Холодова В.Ю., Жолновач А.М. Количественная оценка макроциклического эффекта // Вісник Харківського національного університету. Серія Хімія, 2008. Вип. 16. № 39. С. 307–310.
3. Цесарчук Н.С., Зайцева І.С. Теоретичне вивчення циклічних водних кластерів $(\text{H}_2\text{O})_n$ ($n = 1-6$), а також кластерів каркасної будови // Materialy VIII mezinarodni vedecko-prakticka konference. – Praha. – 2012. – Dil 20. – P. 46–51.