

ПОШУК ОПТИМАЛЬНОГО КОМПЛЕКСОУТВОРЮВАЧА НА ОСНОВІ ОРГАНІЧНИХ ЛІГАНДІВ ДЛЯ ЕКСТРАКЦІЇ ВАЖКИХ МЕТАЛІВ

І.С. Зайцева¹, канд. хім. наук, доцент, **С.О. Комихов**^{2,3}, канд. хім. наук, доцент

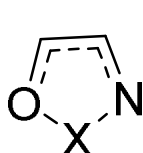
¹Харківський національний університет міського господарства імені О.М. Бекетова
61002 Харків, вул. Маршала Бажанова, 17

²НТК «Інститут монокристалів» НАН України,
61072 Харків, пр. Науки, 60

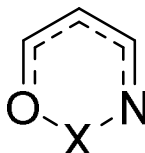
³Харківський національний університет ім. В. Н. Каразіна
61022 Харків, пл. Свободи, 4
Inna.Zayceva@kname.edu.ua

Для екстракції важких металів зі стічних вод перспективною є розробка нових типів сорбентів – матеріалів на основі синтетичних (полістирен) або природних (хітозан) полімерів з привитими ковалентно лігандами різноманітної природи [1], серед яких поліфункціональні аліфатичні (імінодіоцтова кислота [2]), ароматичні (гідроксихінолін [3]) та гетероароматичні [4], макроциклічні та інші фрагменти. Протягом певного часу накоплено досить велику кількість емпіричного матеріалу стосовно екстракційних характеристик розроблених матеріалів. Тим не менше, слід звернути увагу на стихійний характер розробки матеріалу, необхідність систематизації даних і розробки ефективного підходу, який дозволить створити матеріал з певними екстракційними характеристиками (ступінь екстракції та селективність екстракції).

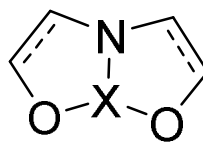
Запропоновано метод, який передбачає квантовохімічні розрахунки енергій комплексоутворення. Методом ROHF у базисі 3-21G(d,p) розраховано енергії комплексоутворення обраних катіонів (Cu^{2+} , Cd^{2+}) з серією модельних лігандів – аналогів імінодіоцтової кислоти – як різниця між повними енергіями комплексів з сумою енергій катіону і ліганду.



1



2



3

Встановлено, що ліганди типу **3** (з трьома координаційними центрами) є більш ефективними комплексоутворювачами (різниця в енергіях комплексоутворення складає 35-55 ккал/моль порівняно з лігандами типів **1** і **2**), більш висока селективність, імовірно, може бути забезпечена лігандами типів **1** і **2** (з двома центрами координації): енергія комплексоутворення є більш чутливою до змін залежно від структурних факторів, зумовлених природою ліганду.

Література

1. Oshita K., Motomizu S. *Bunseki Kagaku* 2008, **57**, (5), 291.
2. Lee S.-T., Mi F.-L., Shen Y.-J., Shyu S.-S. *Polymer*, 2000, **42**, 1879.
3. Baba Y., Hirakawa H., Kawano Y. *Chem. Lett.* **1994**, 117.
4. Peng C., Wang Y., Tang Y. *J. Appl. Polym. Sci.*, 1998, **70**, 501.