

ВПЛИВ ГІДРАТАЦІЇ ЕЛЕКТРОЛІТІВ НА СЕЛЕКТИВНІСТЬ ЙОННОГО ОБМІНУ

Т.Д. Панайотова, канд. хім. наук, доцент, І.С. Зайцева, канд. хім. наук, доцент

*Харківський національний університет міського господарства імені О.М. Бекетова
61002 Харків, вул. Маршала Бажанова, 17
Inna.Zayceva@kname.edu.ua*

Проведення ряду промислових технологічних процесів вимагає використання повністю знесолоної води. Заключна стадія підготовки води, пов'язана зі зміною її іонного складу аж до повного видалення розчинених домішок, реалізується за допомогою йонообмінної технології. При обробці багатокомпонентного розчину, яким є природна вода, велике значення має переважна адсорбція іонами одних йонів у порівнянні з іншими. Причиною, що викликає селективність йонного обміну, є відмінність енергій тяжіння йонів твердою фазою, обумовлена величинами радіусів адсорбованих йонів та їх зарядів. Це випливає із закону Кулона, якщо прийняти, що йон, який адсорбується, безпосередньо взаємодіє з протилежно зарядженими потенціалутворюючими йонами, фіксованими на матриці. Зі зменшенням радіусу повинна зростати енергія тяжіння, але при цьому необхідно враховувати, що йони, які взаємодіють з іонами, знаходяться в розчині в гідратованому стані, тобто оточені міцно пов'язаною з ними оболонкою з дипольних молекул води. Відомо, що в межах групи (головної підгрупи) періодичної системи елементів радіуси йонів зростають зі збільшенням заряду ядра атома. Зі зміною радіуса йонів змінюється і ступінь їх гідратації: зменшується зі зростанням радіуса.

Важливість хімії води при вивченні багатьох хімічних і біологічних процесів викликало безліч експериментальних, а також розрахункових досліджень. Квантово-хімічні розрахунки допомагають глибше зрозуміти явища, що відбуваються при адсорбції, і визначити стан, в якому перебувають йони [1,2].

Здійснено квантовохімічне моделювання йонів $Me^+(H_2O)_n$, $Me^+ = Na^+, K^+$, $n=0...8$, методом RHF у базисі 6-31G(d,p). Наслідком збільшення ван-дер-ваальсового радіусу катіону при переході від Na^+ до K^+ є підвищення енергії гідратів (~27 ккал/моль для $n = 6$). Це має означати зменшення числа молекул води та зменшення гідратації зі збільшенням радіуса катіона, що корелює з рядом селективності (переважної адсорбції на іонітах) найбільш важливих в практиці водопідготовки йонів:



Література

1. Alex A. Granovsky, Firefly version 7.1.G, <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>.
2. Цесарчук Н.С., Зайцева І.С. Теоретичне вивчення циклічних водних кластерів $(H_2O)_n$ ($n = 1-6$), а також кластерів каркасної будови//Materialy VIII mezinarodni vedecko-prakticka konference.- Praha. - 2012. - Dil 20. - P. 46-51.