

ються в стоках. З органічних комплексоутворювачів металів виділяють ароматичні і амінокислоти, які входять до складу розчинних органічних речовин природного походження.

Ступінь токсичності важких металів знаходиться в прямій залежності від міцності зв'язування їх в комплекси, що характеризується величиною константи стійкості: чим більше значення константи стійкості комплексної сполуки, тим нижче токсичність досліджуваного металу.

У незабруднених, слабомінералізованих природних водах розчиненими формами металів є:  $Me_{aq}^{n+}$ ,  $MeL$  (де лігандом  $L$  є розчинена органічна речовина), гідроксокомплекси. При цьому, на кількісне співвідношення форм металу вирішальне значення має рН середовища і концентрація розчинених органічних речовин.

## **АМІНОДІОЦТОВА КИСЛОТА ЯК КОРИСНИЙ ЛІГАНД У ВИРОБНИЦТВІ СОРБЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ**

**Шаповал В.М.**

*Науковий керівник – Зайцева І.С., канд. хім. наук, доцент*

Швидкий розвиток виробництва породжує низку техногенних проблем. Однією з таких проблем є необхідність очистки стічних вод промислових підприємств від домішок важких металів. В епоху розвитку ядерної енергетики все більше стає актуальною необхідність економічного та ефективного видалення радіонуклідів з і стічних вод атомних електростанцій. Методи вирішення даної проблеми, що використовують: екстракція, осадження і т.і., не мають достатньої економічної ефективності, тому що важкі метали в стічних водах присутні в надзвичайно низьких концентраціях і виникає потреба в дорогому концентруванні, яке супроводжується значною кількістю супутніх відходів, які також потребують утилізації.

Найсучаснішим методом очистки стічних вод від важких металів є використання йонообмінних смол – полімерів, що містять функціональні групи, здатні ефективно зв'язувати потрібні катіони, і не переходять в розчин. Дані матеріали складаються з полімерної основи з прищепленою на неї функціональною групою, здатною до реакції комплексоутворення з катіоном металу.

Значна кількість найсучасніших методів очистки стічних вод від важких металів ґрунтуються на сорбції катіонів синтетичними або напівсинтетичними полімерними матеріалами, які містять хімічно активні функціональні групи, що здатні утворювати з катіонами важких металів міцні комплексні сполуки. Розробка функціональних матеріалів з такими властивостями – це та галузь матеріалознавства, яка швидко

розвивається в наш час. Одержано велику кількість хелатоутворюючих смол на основі штучних (полістирол і його сополімери, поліакрилати) й природних (хітозан) полімерів, що містять хелатуючі групи різної природи, які дають можливість селективно регулювати процеси сорбції різних катіонів.

Серед таких функціональних груп присутні, зокрема, залишки амінодіоцтової кислоти (аналога ЕДТА), гідроксипіноліну, дитизону та інших поширених комплексоутворювачів (рис. 1).

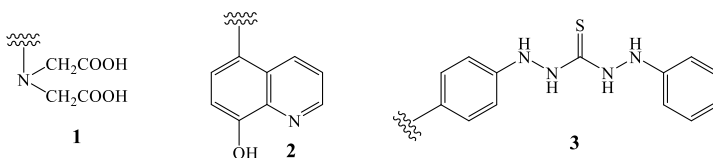


Рисунок 1 – Хелатуючі функціональні групи:  
1 – залишок амінодіоцтової кислоти; 2 – залишок гідроксипіноліну;  
3 – залишок дитизону

З великої кількості різноманітних функціональних груп, які використано у розробці полімерних комплексоутворювачів, фрагмент амінодіоцтової кислоти є одним з найбільш простих. Матеріали на її основі – так звані Chelex 100 та Chelex 20 від Bio-Rad Laboratories, Inc. є поширеним засобом для очистки речовин за допомогою йонного обміну. Таким чином, амінодіоцтова кислота є досить простою модельною сполукою для теоретичного вивчення рівноваги комплексоутворення.

При цьому однією з центральних проблем є забезпечення селективності екстракції конкретного катіона йонообмінною смолою.

Дана робота є частиною досліджень із розробки подібних матеріалів, і присвячена теоретичному дослідженню ефективності комплексоутворення амінодіоцтової кислоти з важкими металами. Дсліджено можливість теоретичної оцінки селективності комплексоутворення амінодіоцтової кислоти з металами на основі квантовохімічних розрахунків енергій відповідних комплексних сполук. Виявлено тенденцію до кореляції між розрахованими енергіями комплексоутворення у ряді комплексних сполук та експериментальними даними з селективності екстракції катіонів полімерним матеріалом на основі амінодіоцтової кислоти.

## КРАУН-ЕФІРИ ЯК КОМПЛЕКСОУТВОРЮВАЧІ ДЛЯ ЕКСТРАКЦІЇ ВАЖКИХ МЕТАЛІВ

*Максаков А.Д.*

*Науковий керівник – Зайцева І.С., канд. хім. наук, доцент*