

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), гідроксипіколіну, дитизону та інших поширених комплексоутворювачів (рис. 1).

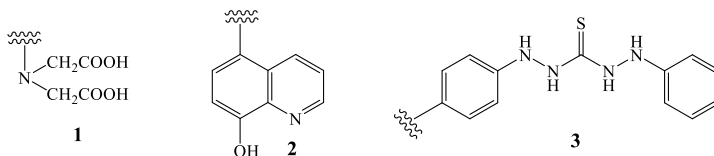


Рисунок 1 – Хелатуючі функціональні групи:  
1 – залишок амінодіоцтової кислоти; 2 – залишок гідроксипіколіну;  
3 – залишок дитизону

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*

Краун-ефіри є представниками величезного класу сполук, молекули котрих мають циклічну форму й здатні утворювати комплекси з йонами металів в ряді випадків з високим ступенем селективності, завдяки чому їх використовують в аналітичній хімії (хроматографічне розділення), в органічному синтезі, при моделюванні процесів у ферментах, вивченні трансмембранного переносу йонів (створення синтетичних йонофорів), в процесах молекулярного розпізнавання як синтетичні рецептори (розробка хемосенсорів). Відомо, що такі сполуки є досить токсичними, тому їх використання для промислової очистки стічних вод вимагає особливих заходів, зокрема, одним з напрямків створення нових функціональних матеріалів для очистки стічних вод є розробка йонообмінних смол на основі природних або синтетичних полімерів з прищепленими фрагментами краун-ефіру на поверхні полімеру, що дає можливість ефективно очищувати стічні води від важких металів й не вносити додаткових забруднень.

Незважаючи на велику кількість даних з комплексоутворення за участю краун-ефірів, при створенні функціональних матеріалів на їх основі основною проблемою є забезпечення достатнього рівня селективності комплексоутворення. Одним з найбільш вдалих підходів, які описано в літературі, до розв'язання даної проблеми є вивчення ряду похідних краун-ефірів, молекули яких містять деяку структурну різницю, що впливає на розмір порожнини й, відповідно, на енергію комплексоутворення.

Дана робота є частиною досліджень із розробки подібних матеріалів, і присвячена теоретичному дослідженню ефективності комплексоутворення заміщених 18-краун-6 ефірів в якості функціональної групи з катіонами металів з різними ван-дер-ваальсовими радіусами методами квантової хімії.

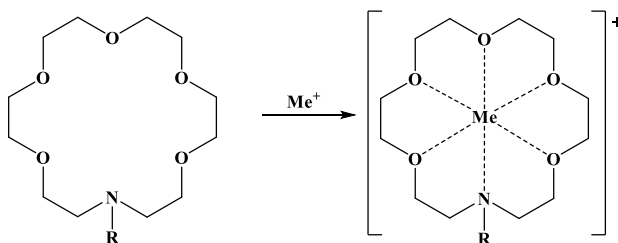


Рисунок 1 – Схема процесу комплексоутворення заміщених аза-18-краун-6 ефірів з катіонами металів

Методами квантової хімії досліджено вплив замісника на просторову будову аза-18-краун-6-ефіру й на енергію комплексоутворення. Виявлено, що збільшення стеричної навантаженості спричиняє якісну

зміну конформації макроциклу. Встановлено, що збільшення об'єму замісника у аза-18-краун-6-ефірі призводить до більш ефективного комплексоутворення з атомами, що мають менший ван-дер ваальсовий радіус, що надає можливість регулювати селективність комплексоутворення.

## НАПРЯМКИ РОЗВИТКУ НАНОТЕХНОЛОГІЙ. АНТРОПОМОРФНІ МОЛЕКУЛИ

**Коробкіна О.Ю.**

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

У сучасному світі нанотехнології – створення матеріалів з винятковими, наперед заданими властивостями шляхом оперування окремими молекулами розвиваються в усіх сферах діяльності людини: медицина та нанобіотехнології, електроніка, енеогетика, екологія і т.і.

Речовина може мати зовсім нові властивості, якщо взяти дуже маленьку частинку цієї речовини. Так, наприклад, виявилось, що наночастинки деяких матеріалів, мають дуже добрі каталітичні і **адсорбційні** властивості. Інші матеріали показують дивовижні **оптичні** якості, наприклад, надтонкі плівки **органічних матеріалів** застосовують для виробництва **сонячних батарей**. Вдається домогтися взаємодії штучних наночастинок з природними нанорозмірними об'єктами — білками, **нуклеїновими кислотами** й іншими. Ретельно очищені наночастинки можуть самоорганізуватися у певні структури. Така структура містить суворо впорядковані наночастинки і також, часто проявляє незвичайні властивості.

У 2003 році вченими-хіміками з Техасу були синтезовані молекули, розміром 2 нм, що нагадували силует людини – антропоморфні молекули. Автори за аналогією з ліліпутами Джонатана Свіфта назвали новий клас хімічних сполук нанопутами (Nanoputians) (рис. 1).

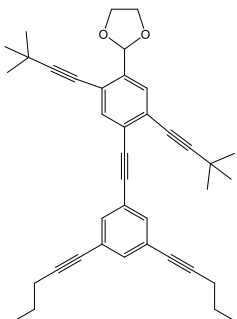


Рисунок 1 – 2-(4-{2-[3,5-біс(пент-1-ин-1-іл)]феніл}етиніл)-