

XVII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 20-23 травня 2019 р.

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДНІПРОВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ОЛЕСЯ ГОНЧАРА**

**Інститут органічної хімії
НАН України**

XVII ВСЕУКРАЇНСЬКА КОНФЕРЕНЦІЯ
молодих вчених та студентів
з актуальних питань сучасної хімії



МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ

Дніпро
20-23 травня 2019 р.

XVII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 20-23 травня 2019 р.

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДНІПРОВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ОЛЕСЯ ГОНЧАРА**

**Інститут органічної хімії
НАН України**

XVII ВСЕУКРАЇНСЬКА КОНФЕРЕНЦІЯ
МОЛОДИХ ВЧЕНИХ ТА СТУДЕНТІВ
З АКТУАЛЬНИХ ПИТАНЬ СУЧАСНОЇ ХІМІЇ



Дніпро
20-23 травня 2019 р.

XVII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії, Дніпро, 20-23 травня 2019 р.

УДК 54(063)

ББК 24я431

Т 67

ISBN

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара
Інститут органічної хімії НАН України

Голова оргкомітету

Варгалюк Віктор Федорович, декан хімічного факультету ДНУ, д.х.н., професор, заслужений діяч науки і техніки України

Т67 «XVII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії» Дніпро, 2019. - 164 с.

ISBN

УДК 54(063)

ББК 24я431

Т 67

КВАНТОВО-ХІМІЧНІ РОЗРАХУНКИ СОРБЦІЇ ФЕРУМУ НА КЛИНОПТИЛОЛІТІ

Фізер М.М., Мільович С.С., Гомонай В.І.

Ужгородський національний університет

вул. Підгірна, 46, м. Ужгород, 88000

Однією з проблем промислового та індивідуального водокористування є наявність у воді надлишкових кількостей Феруму. Хоча Ферум і є важливим мікроелементом для організму людини, високий вміст сполук Феруму у водах значно погіршує їх органолептичні характеристики, та може призводити до захворювань при споживанні такої води.

Серед способів вилучення Феруму з вод, можна виділити використання іонообмінників. Перевагою іонного обміну, у порівнянні з реагентними способами знезалізнення - є більш повне вилучення Феруму. Проблемою синтетичних іонообмінників є їх висока вартість, тому дослідження природних аналогів є актуальним питанням.

Клиноптилоліт Сокирницького родовища (Закарпатська область, Україна) володіє хорошими сорбційними та іонообмінними властивостями, високою термостабільністю та кислотостійкістю. Раніше проведені дослідження [1] показують можливість пониження концентрації Феруму у воді за допомогою клиноптилоліту. Метою даної роботи було провести квантово-хімічні розрахунки процесу іонообмінної сорбції Феруму на клиноптилоліті.

Для моделювання було обрано фрагмент більшої порожнини, із локалізацією Алюмінію у положенні T1, так як було показано, що саме це положення є енергетично більш вигідним у клиноптилолітах та гайлендитах [2]. Обмінні катіони Кальцію або Натрію розміщували

поблизу тетраедру $[AlO_4]$ у більшій порожнині, таким чином, щоб забезпечити координацію по трьом атомам Оксигену (рис. 1).

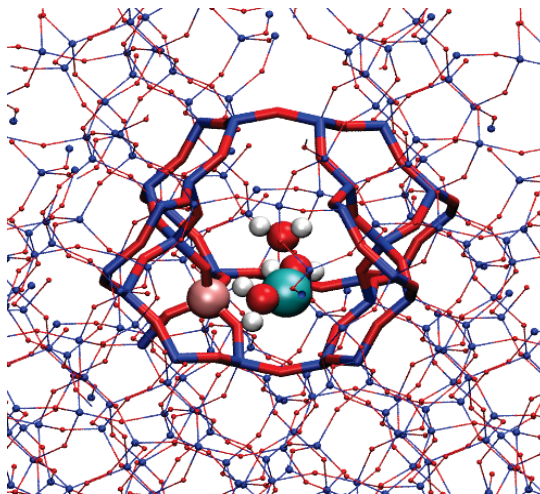
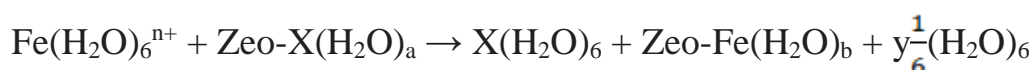


Рис 1. Фрагмент клиноптилоліту з обмінним іоном Натрію додатково координованим трьома молекулами води.

Ферум розглядався у ступені окиснення 2 та 3, крім того розглянуто можливі електронні стани кожного із іонів та продуктів сорбції (низькоспіновий стан – мультиплетність 1 у випадку Fe^{2+} та мультиплетність 2 у випадку Fe^{3+} ; високоспіновий стан – мультиплетність 5 у випадку Fe^{2+} та мультиплетність 6 у випадку Fe^{3+}).

В якості обмінних катіонів цеоліту розглядалися Na^+ та Ca^{2+} . Іони металів не зв'язаних з цеолітом розглядалися як шести гідратовані. Вода, яка може додатково сорбуватися або виділятися у процесі іонного обміну розглядалась у вигляді гексамеру. Такий вибір обумовлений необхідністю врахування кластерної структури рідкої води за звичайних умов.

Реакцію іонного обміну розглянуту в даній роботі можна представити рівнянням:



де $n = 2$ або 3 , $X = Na^+$ або Ca^{2+} , Zeo – комірка цеоліту, $a = 3$ або 4 , $b = 3$ або 4 , $y = -1, 0$ або 1 .

Результати розрахунків свідчать, що у випадку іонів Na^+ , іонний обмін можливий як у випадку Fe^{2+} так і у випадку Fe^{3+} . Тоді як у випадку обміну Ca^{2+} , енергетично вигідною є лише реакція за участю Fe^{3+} . Також, у обох випадках іонний обмін за участю Fe^{3+} є набагато більш вигідним у порівнянні із Fe^{2+} .

Розрахунки проведено з використанням програми xTB (Version 6.0.1 SAW181210) [3, 4]. Застосовано напівемпіричний метод GFN2-xTB, який базується на модифікованій теорії функціоналу густини, а саме на DFTB (Density Functional based Tight Binding) підході, що обумовлює його перевагу для моделювання систем за участю перехідних металів у порівнянні, наприклад, із методами Стюарта PM7 та PM6.

Література

1. Мільович С.С., Гомонай В.І. Макаренко К.М. Сорбція іонів феруму на сокирницькому клиноптилоліті. Науковий вісник УжНУ. Сер. Хімія, 2007, 17, 99-104.
2. A. Rabdel Ruiz-Salvador, Ariel Gomez, Dewi W. Lewis, C. Richard A. Catlow, L. Marleny Rodriguez-Albelo, Luis Montero, Gerardo Rodriguez-Fuentes. Clinoptilolite-heulandite polymorphism: structural features from computer simulation. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2000, 2, 1803–1813.
3. S. Grimme, C. Bannwarth, P. Shushkov, J. Comput. A robust and accurate tight-binding quantum chemical method for structures, vibrational frequencies, and noncovalent interactions of large molecular systems parametrized for all spd-block elements ($Z = 1-86$). *Theory Chem.*, 2017, 13, 1989–2009.
C. Bannwarth, S. Ehlert, S. Grimme. GFN2-xTB – an accurate and broadly parametrized self-consistent tight-binding quantum chemical method with multipole electrostatics and density-dependent dispersion contributions. *J. Chem. Theory Comput.*, 2019, 15, 1652–1671.