

го компонента на рабочем электроде (толсто пленочный модифицированный графитовый электрод) с помощью различных электрохимических или химических реакций, в том числе и за счет адсорбции, с последующей регистрацией вольтамперограммы концентрата.

КВАНТОВО – ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ЗАВИСИМОСТИ pK_{OH} ПХС И ЭНЕРГИИ ДЕПРОТОНИРОВАНИЯ ГИДРОКСОГРУППЫ

Грибанов Е.Н., Головина А.А., Оскотская Э.Р.

Орловский государственный университет

Исследование кислотно – основных свойств сорбентов с о, о'- диокси – азо – функциональной аналитической группировкой (ФАГ) представляет значительный интерес, в виду того что $pK_{ион}$ и закономерности изменения кислотности в рядах этих соединений крайне важны для прогнозирования их реакционной способности и их потенциала как сорбционных агентов.

Задачей настоящей работы явился расчет энергии отрыва протона от гидроксогруппы находящейся в пара – положении к введенному заместителю для ряда сорбентов с о,о' - диокси – азо – ФАГ (схема 1) и выявление корреляционной зависимости $pK_{ион}$ от этой величины.

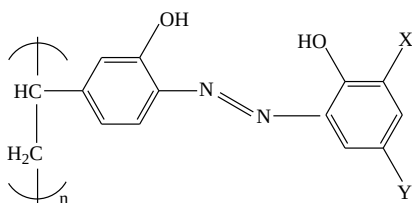


Схема 1

где X и Y – различные заместители.

№ сор- бента	1	2	3	4	5	6	7	8	9
X	H	H	H	H	SO ₃ H	SO ₃ H	SO ₃ H	NO 2	COO H
Y	H	C l	SO ₃ H	NO 2	Cl	SO ₃ H	NO ₂	NO 2	SO ₃ H

Расчеты модельных сорбентов проведены при помощи одного из квантово – химических методов *ab initio* с базисным набором орбиталей 3-21G без учета сольватационной сферы. Значения полных энергий молекул и соответствующих им анионов рассчитаны методом RHF/3-21G с

полной оптимизацией геометрии доступным в пакете программы GAMESS – US. Все оптимизированные нами структуры соответствуют минимумам на поверхности потенциальной энергии. Энергию депротонирования оценивали как разность между рассчитанной полной энергией молекулы и соответствующего ей аниона.

Для прогнозирования значения $pK_{\text{ион}}$ была установлена корреляционная зависимость между энергией отрыва иона водорода от атома кислорода фенольного гидроксила сорбентов и их $pK_{\text{ион}}$: для монозамещенных $pK_{\text{ион}}' = 0,0276 \cdot E_{\text{депр.}} - 1,5527$ ($r = 0,996$) и для дизамещенных $pK_{\text{ион}}'' = 0,0252 \cdot E_{\text{депр.}} - 0,1141$ ($r = 0,983$).

Полученные корреляционные зависимости показывают, что кислотность в исследуемом ряду соединений возрастает с уменьшением энергии необходимой для отрыва протона от атома кислорода фенольного гидроксила сорбентов. Полученные корреляции позволяют проводить количественный прогноз физико-химических свойств сорбентов, а на его основе осуществлять целенаправленный синтез и выбор наиболее перспективных ПХС с заранее заданными свойствами.

АНАЛИТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА КАЧЕСТВА ВОДЫ В РОДНИКОВЫХ ИСТОЧНИКАХ ТВЕРСКОЙ ОБЛАСТИ

Грищенкова О.В., Никольский В.М.

Тверской государственный университет

В качестве объектов исследования были выбраны нисходящие родники, приуроченные к долинам рек. Время отбора проб – осень 2008 года. Для сравнительной оценки дополнительно использована вода реки Обша в районе г. Белый Тверской области.

Расположение водного источника	рН	Кальций, мг/л	Магний, мг/л	Общая жесткость, мг-экв/л
Родник д.Савватьево	7,20	36,0	13,4	1,6
Родник г.Белый	7,03	114,0	104,5	13,7
Родник д.Гришкино	7,03	74,0	19,4	3,0
Река Обша	7,59	50	48,6	6,5
ПДК [1]	6,50–9,00	-	-	Не более 7,00

Из таблицы следует, что в роднике г. Белого содержится наибольшее количество солей кальция и магния, в результате чего общая жесткость воды этого источника достигает 13,7 мг-экв/л и может быть класси-