

Количественная сорбция стронция наблюдается в интервале $pH=4,9-6,8$. Дальнейшее исследование сорбции стронция полистирол-азо-2,3-диоксинафтолом будет осуществляться в данном диапазоне значений pH .

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ И СТРУКТУРЫ

ПХС С О-АМИНО-О'-ОКСИ-АЗО-ФАГ

Грибанов Е.Н., Оскотская Э.Р.

Орловский государственный университет

Большое количество работ, касающихся проблем синтеза, применения и строения органических полимерных сорбентов, содержащих в своей матрице хелатообразующие функционально-аналитические группы (ФАГ), свидетельствует о высоком уровне внимания исследователей различных направлений науки к этому перспективному классу соединений. Установление зависимости между структурными параметрами полимерных хелатообразующих сорбентов (ПХС) их физико-химическими свойствами и аналитическими параметрами сорбции диктует необходимость теоретического исследования электронного строения и физико-химических свойств, как самих ПХС, так и их комплексов.

В данной работе нами систематически исследовано строение полимерных хелатообразующих сорбентов с о-амино-о'-окси-азо-ФАГ и образуемых ими комплексов с $Cu(II)$, Zn , $Pb(II)$, Cd , $Co(II)$, $Ni(II)$, $Cr(III)$.

На основе результатов расчетов проводимых методами квантовой химии доступными в пакете программы HyperChem v. 7.01, предложен и обоснован наиболее вероятный химизм процесса сорбции и структура образующихся комплексов; установлены теплоты образования последних (ΔH); длины связи (l) между ионом металла и кислородом фенольного гидроксила сорбентов, показано распределение зарядов на атомах ПХС.

Для исследуемых металлов предложена постоянная, учитывающая природу металла-комплексообразователя (χ). Для сорбентов изученного класса установлены корреляционные зависимости между данной постоянной металла-комплексообразователя – теплотой образования его комплекса ($\chi - \Delta H$); константой устойчивости комплексов ($\chi - \lg K_{уст}$); величиной 50% сорбции ($\chi - pH_{50}$); длиной связи металл – кислород фенольного гидроксила сорбента ($\chi - l$).

Полученные корреляционные зависимости показывают, что аналитические и физико-химические свойства изученных сорбентов (pH_{50} сорбции, $\lg K_{уст}$ полихелатов, l , ΔH) находятся в установленной нами количественной зависимости от природы металла - комплексообразова-

теля. С увеличением χ металла закономерно уменьшается прочность образующихся полихелатов, теплота их образования, а pH_{50} сорбции ионов металлов и длина связи между ионом комплексообразователя и лигандом – возрастает. 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.

ВЫДЕЛЕНИЕ И КАЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ КОМПЛЕКСА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ КАЛЕНДУЛЫ

Белякова Н.В.

Тверской государственной университет

Биологически активные растительные соединения могут воздействовать на микроорганизмы, животных и человека, что послужило основой для их использования в медицине и создания из них лекарственных средств. Преимуществами получения лекарств из растений являются широкий спектр их биологической активности и экологическая безопасность изготовления [1].

Препараты календулы обладают широким спектром фармакологической активности: противовоспалительными, бактерицидными, спазмолитическими, желчегонными свойствами. В цветках календулы обнаружены каротиноиды, значительное количество флавоноидов, аскорбиновая кислота, ферменты, эфирное масло, смолы, камедь, яблочная кислота, следы салициловой кислоты. В наземной части этого растения найдено горькое вещество календен, сапонины, дубильные вещества, фитонциды. В корнях обнаружен инулин; в семенах содержится жирное масло, алкалоиды [2].

Целью данной работы является выделение и анализ комплекса биологически активных соединений календулы.

В качестве объектов исследования использовались сухое сырье — цветки календулы, из которого были получены спиртовой и водный экстракты по методикам [2, 3], а также готовый фармацевтический препарат «Настойка календулы».

Качественный анализ, проводимый по методикам [3, 4], визуально показал наличие таких классов веществ, как флавоноиды, сапонины, витамины, дубильные вещества в исследуемых объектах – как в приготовленных извлечениях, так и в фармацевтическом препарате.

В дальнейшем запланировано количественное определение обнаруженных классов веществ, установление соответствия полученных ре-