

3. Такибзева, С.С. Применение промышленных отходов для получения легкоплавких глазурей / С.С. Такибзева, Ч.Х. Нугманова, С.У. Кулахметова // Строительные материалы на основе различных отходов промышленности Казахстана. – Алма-Ата, 1989 – С.82-85.
4. Тищенко, Г.П. Утилизация промышленных отходов гальванических производств / Г.П. Тищенко, Н.Ю. Мойсеенко, В.С. Журавлев // Обз. инф. Сер. Актуальные вопросы хим. науки и технолог. охраны окруж. среды. НИИТехим. – 1991. – №3. – С.1-84.
5. Мороз, И.И. Справочник по фарфоро-фаянсовой промышленности / И.И. Мороз, М.С. Комская, Л.Л. Олейникова. – Т.2. – М.: Легкая индустрия, 1980. – 352 с.
6. Пищ, И.В. Керамические пигменты / И.В. Пищ, Г.Н. Масленникова. – Мн.: Выш. шк., 1987. – 132 с.
7. Kerstan, W. Keramische Glasuren – Aufbau, Fargebund, Dekortechniken und Rohstoffe / W. Kerstan // Sprechsaal. – 1988. – 121, №8. – С. 636-639.
8. Wakamatsu, M. Effect of firing atmosphere on the color of iron glazes / M. Wakamatsu, T. Nobuyuki, I. Shingo // Asahi Glass Found. Ind. Technol. 1. – 1990. – 56. – P. 243-252.
9. Туманов, С.Г. Синтез керамических красок / С.Г. Туманов // Физико-химические основы керамики. – М.: Промстройиздат, 1956. – С. 237-292.
10. Бельский Е.Ф. Химия и технология пигментов / Е.Ф. Бельский, И.В. Рискин. – Л.: Химия, 1974. – 27 с.

*Приведено результати досліджень по стабілізаційній обробці води перед її баромембранним знесоленням. Показано, що слабкокислотні катіоніти в кислій формі забезпечують повне зниження лужності води з частковим її пом'якшенням, а сильнокислотні катіоніти в натрій-формі забезпечують глибоке пом'якшення води без зниження її лужності. Встановлено, що іоніти в сольовій формі забезпечують ефективну нейтралізацію підкислених водних розчинів, включаючи перміати та фільтрати з переведенням слабкокислотних катіонітів в кислу форму*

*Ключові слова: іонний обмін, катіоніт, демінералізація, нанофільтрація, перміат, концентрат, регенерація*

*Приведены результаты исследований по стабилизационной очистке воды перед ее баромембранным обессоливанием. Показано, что слабкокислотные катиониты в кислой форме обеспечивают полное снижение щелочности воды с частичным ее умягчением, а сильнокислотные катиониты в натрий-форме обеспечивают глубокое умягчение воды без снижения ее щелочности. Установлено, что иониты в солевой форме обеспечивают эффективную нейтраллизацию подкисленных водных растворов, включая пермиаты и фильтраты, с переводом слабкокислотных катионитов в кислую форму*

*Ключевые слова: ионный обмен, катионит, деминерализация, нанофильтрация, пермиат, концентрат, регенерація*

УДК 628.162.4:621.359.7

## ЗАСТОСУВАННЯ КАТІОНІТІВ ДЛЯ КОНДИЦІЮВАННЯ ВОДИ В ПРОЦЕСАХ ЇЇ БАРОМЕМБРАННОГО ЗНЕСОЛЕННЯ

**І. М. Макаренко**

Кандидат технічних наук, науковий співробітник\*

**О. В. Глушко**

Кандидат технічних наук, старший викладач\*

E-mail:alyona\_glushko@ukr.net

**В. В. Рисухін**

Директор

ТОВ «Технології природи»

вул. Московська, 4а, м. Алчевськ, Україна, 94204

E-mail:vvr@vumk.com

**О. М. Терещенко**

Кандидат технічних наук, доцент\*

\*Кафедра екології та технології рослинних

полімерів

Національний технічний університет України

«Київський політехнічний інститут»

пр. Перемоги, 37, м. Київ, Україна, 03056

### 1. Вступ

В сучасному світі гостро стоїть проблема водозабезпечення як населення, так і промислових підприємств. І, зокрема для України, яка відноситься до країн з обмеженими водними ресурсами, головною проблемою є не стільки кількість водних запасів, як якість води. На превеликий жаль, лише дуже незначну кількість водою нашої держави за якістю води можна віднести до водою першої та другої категорії.

Разом з іншими проблемами забруднення водних об'єктів досить гостро стоїть проблема різкого підвищення рівня мінералізації води в поверхневих водоймах. Ця тенденція досить чітко виражена в промислових густонаселених регіонах. Частіше за все підвищення солевмісту відбувається внаслідок скиду шахтних та промислових стічних вод. Крім того, значну кількість засолених стоків скидають теплоенергетичні об'єкти та підприємства комунальних служб.

Радикальним способом вирішення даної проблеми є масове впровадження замкнених водоциркуляційних систем як на промислових підприємствах, так і в комунальних господарствах. А для цього необхідно вирішити проблему створення маловідходних процесів демінералізації води при її підготовці для промислових підприємств, об'єктів теплоенергетики та комунальних господарств, при очищенні стічних вод [1]. На сьогодні до високоефективних методів знесолення води, які все ширше застосовуються як в промисловості, так і в комунальних господарствах можна віднести баромембранні процеси, такі як зворотній осмос та нанофільтрування. При застосуванні даних методів гостро стоїть проблема стабілізаційної обробки води перед стадією мембранного очищення, для запобігання осадковідкладення на мембранах. Головною причиною осадкоутворення є відкладення карбонату кальцію при перевищенні допустимого вмісту карбонатів та іонів кальцію в концетратах.

Проблему стабілізації можна вирішувати як за рахунок пом'якшення води, так і за рахунок її декарбонізації. При натрій-катионному пом'якшенні води суттєво підвищується її лужність [2], що навіть за невисоких концентрацій кальцію призводить до відкладення осадів. З іншої сторони, повне видалення іонів жорсткості з води на стадії попередньої обробки економічно недоцільне. Тому кращим вирішенням проблеми може бути застосування слабокислотних катионітів в кислій формі перед мембранним очищенням води. При такій обробці буде відбуватись часткове пом'якшення води з повною її декарбонізацією при зниженні рН до 3÷4 [3], що ніяк не впливатиме на роботу мембран.

Відомо, що слабокислотні катионіти при високій обмінній ємності по катіонах кальцію та магнію досить легко регенеруються кислими розчинами [4,5,6] при незначному надлишку кислоти. Проте в технологіях іонообмінного пом'якшення та знесолення води при підготовці її для водогрійних котлів слабокислотні катионіти практично не використовують [1]. Обумовлено це тим, що при використанні катионітів в кислій формі при високій постійній жорсткості їх застосування малоефективне [3], а при використанні іонітів в  $\text{Na}^+$  – формі їх регенерація розчинами хлориду натрію неможлива [4].

Проте для стабілізаційної обробки води використання слабокислотних іонітів є досить перспективним.

Тому метою даної роботи було визначення ефективності катионіту Dowex MAC-3 при стабілізаційній обробці води перед нанофільтраційним очищенням, вивчення процесів їх сольової регенерації для визначення умов повного відновлення ємності катионіту.

## 2. Методи та результати досліджень

При виконанні досліджень використовували водопровідну воду ( $\text{Ж}=4.0\text{-}4.4$  мгеку/дм<sup>3</sup>,  $\text{Л}=3.9\text{-}4.4$  мгеку/дм<sup>3</sup>,  $[\text{Cl}^-]=10\text{-}33$  мг/дм<sup>3</sup>,  $[\text{SO}_4^{2-}]=27\text{-}42$  мг/дм<sup>3</sup>,  $\text{pH}=7.40\text{-}7.63$ ), воду з Ісаківського водосховища (м. Алчевськ) ( $\text{Ж}=7.9$  мгеку/дм<sup>3</sup>,  $\text{Л}=5.9$  мгеку/дм<sup>3</sup>,

$[\text{Ca}^{2+}]=3.5$  мгеку/дм<sup>3</sup>,  $[\text{Mg}^{2+}]=4.4$  мгеку/дм<sup>3</sup>,  $[\text{Cl}^-]=73$  мг/дм<sup>3</sup>,  $[\text{SO}_4^{2-}]=830$  мг/дм<sup>3</sup>,  $\text{pH}=8.01$ ), модельний розчин ( $\text{Ж}=50$  мгеку/дм<sup>3</sup>,  $\text{Л}=3.2$  мгеку/дм<sup>3</sup>,  $[\text{Ca}^{2+}]=30$  мгеку/дм<sup>3</sup>,  $[\text{Mg}^{2+}]=20$  мгеку/дм<sup>3</sup>,  $[\text{NaCl}]=10$  г/дм<sup>3</sup>,  $[\text{Na}_2\text{SO}_4]=1.2$  г/дм<sup>3</sup>), модельні розчини для переведення іоніту в  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$  форму ( $\text{Ж}=100\text{-}300$  мгеку/дм<sup>3</sup>,  $[\text{Ca}^{2+}]=50\text{-}150$  мгеку/дм<sup>3</sup>,  $[\text{Mg}^{2+}]=50\text{-}150$  мгеку/дм<sup>3</sup>) та морську воду (м. Керч) ( $\text{Ж}=50,4$  мг-екв/дм<sup>3</sup>,  $\text{Л}=3,2$  мг-екв/дм<sup>3</sup>,  $[\text{SO}_4^{2-}]=811$ мг/дм<sup>3</sup>,  $[\text{Cl}^-]=6068$  мг/дм<sup>3</sup>,  $[\text{Na}^+]=3285,0$  мг/дм<sup>3</sup>,  $\text{pH}=8,2$ )

Катионіт Dowex MAC-3 використовували в кислій та  $\text{Na}^+$  формі. Іоніт в кислу форму переводили розчинами соляної кислоти з концентрацією 1-5 %, в  $\text{Na}^+$  форму кислий іоніт переводили 2 %-ним розчином лугу. Сильнокислотний катионіт КУ-2-8 переводили в  $\text{Na}^+$  форму 2 %-ним розчином лугу.

Відомо, що при стабілізаційній обробці води на слабокислотному катионіті в кислій формі відбувається часткове підкислення води та видалення гідрокарбонатів. Це добре щодо запобігання утворенню карбонатних відкладень. Проте слабокислу воду не можна використовувати як питну або в промисловості. Питання її нейтралізації вирішується досить просто. При пропусканні підкисленої води через слабокислотний катионіт в  $\text{Na}^+$ -формі рН середовища збільшується до нейтральних значень при суттєвому підвищенні ефективності пом'якшення води [7].

При послідовному пропусканні морської води через слабокислотний катионіт в кислій формі та через сильнокислотний катионіт КУ-2-8 в  $\text{Na}^+$ -формі були отримані результати, що представлені на рис. 1.

В даному випадку відбувається не лише зниження лужності і підкислення води на першому етапі, але й ефективно її пом'якшення та нейтралізація ( $\text{pH}=6,95\div 7,15$ ) на другому етапі. Не дивлячись на високу концентрацію іонів натрію ( $\approx 143$  мг-екв/дм<sup>3</sup>), ємність катионіту КУ-2-8 по іонах жорсткості сягає 2670 мг-екв/дм<sup>3</sup>. При пом'якшенні морської води на катионіті КУ-2-8 в  $\text{Na}^+$ -формі обмінна ємність сягала 2264 мг-екв/дм<sup>3</sup>. Очевидно, при двохстадійному катионуванні частина іонів жорсткості сорбувалась на першій стадії – на слабокислотному катионіті.

Але сорбційна ємність слабокислотного катионіту в кислій формі визначається не рівнем жорсткості води, а її лужністю. Зниження жорсткості води на слабокислотному катионіті в кислій формі ніколи не перевищує зниження лужності води. При жорсткості води на рівні приблизно 50 мг-екв/дм<sup>3</sup> пом'якшення її на слабокислотному катионіті буде незначним. Проте, незначне пом'якшення води можливе.

В цілому, можна сказати, що катионіт в  $\text{Na}^+$ -формі виступає певним буфером, підвищуючи рН кислих розчинів до нейтральних значень ( $6,5\div 7,5$ ) за рахунок обміну протонів на іони натрію.

В разі, коли відбувається підготовка питної води, і залишкова жорсткість води після нанофільтрації чи зворотнього осмосу зменшується нижче допустимого рівня, то для корекції рН води її доцільно пропускати через іоніт в  $\text{Ca}^{2+}$  ( $\text{Mg}^{2+}$ )-формі (рис. 2). В даному випадку жорсткість води було підвищено до  $1,25\div 2,5$  мг-екв/дм<sup>3</sup> при рН середовища  $6,97\div 7,30$  та ступені десорбції кальцію 11,6 %.

При використанні модельного розчину із рівнем мінералізації, близьким до морської води (рис. 3), при

двохстадійному фільтруванні її послідовно через катіоніт Dowex MAC-3 в кислій та  $Ca^{2+}$ -формі було отримано воду з нейтральним середовищем із високим рівнем жорсткості в перших пробах. Очевидно, що в даному випадку в значній мірі десорбція іонів кальцію відбувалась за рахунок сорбції іонів натрію.

Не дивлячись на те, що слабкокислотні катіоніти погано регенеруються розчинами солей натрію [8], в слабкокислих розчинах хлориду натрію ефективність десорбції іонів жорсткості зростає. В даному випадку ступінь десорбції іонів кальцію сягав 84 %. Правда, витрата води складала 10  $дм^3$  на 20  $см^3$  іоніту.

Даний варіант регенерації іоніту може бути цікавим лише в тому випадку, коли весь підкислений концентрат або перміат при нанофільтруванні буде пропускати через відпрацьований іоніт. Тоді можливі не лише вивільнення рН середовища та концентрації іонів жорсткості у воді, а й часткова регенерація катіоніту.

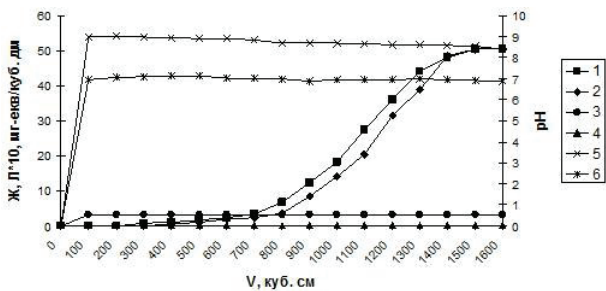


Рис. 1. Залежність залишкової жорсткості (1, 2), лужності (3, 4), та рН (5, 6) морської води (м. Керч) ( $Ж=50,4$  мг-екв/ $дм^3$ ,  $Л=3,2$  мг-екв/ $дм^3$ ,  $[SO_4^{2-}]=811$  мг/ $дм^3$ ,  $[Cl^-]=6068$  мг/ $дм^3$ ,  $[Na^+]=3285,0$  мг/ $дм^3$ ,  $pH=8,2$ ) від пропущеного об'єму через катіоніт КУ-2-8 в  $Na^+$ -формі (1, 3, 5) ( $V_i=20$   $см^3$ ) та послідовно через катіоніт Dowex MAC-3 в кислій формі ( $V_i=20$   $см^3$ ) та катіоніт КУ-2-8 в  $Na^+$ -формі ( $V_i=20$   $см^3$ ) (2, 4, 6) (ПОДЕ $_1=2264$  мг-екв/ $дм^3$ , ПОДЕ $_2=2670$  мг-екв/ $дм^3$ ) (ПОДЕ визначали по КУ-2-8 в  $Na^+$ -формі)

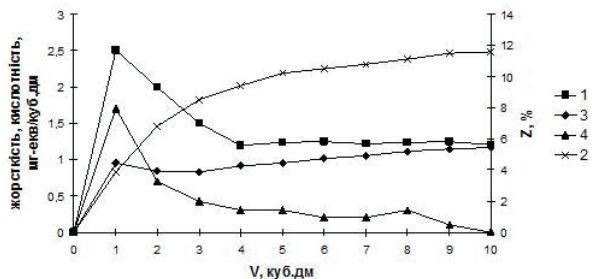


Рис. 2. Залежність жорсткості (1) та ступеню десорбції іонів кальцію (2) із катіоніту Dowex MAC-3 в  $Ca^{2+}$ -формі (ПОДЕ $_{Ca}=3970$  мг-екв/ $дм^3$ ) ( $V_i=10$   $см^3$ ) від витрати водопровідної води ( $Ж=4,4$  мг-екв/ $дм^3$ ,  $Л=4,4$  мг-екв/ $дм^3$ ,  $[Ca^{2+}]=3,4$  мг-екв/ $дм^3$ ,  $[Mg^{2+}]=1,0$  мг-екв/ $дм^3$ ), попередньо пропущеної через катіоніт Dowex MAC-3 в  $H^+$ -формі ( $V_i=60$   $см^3$ ), її жорсткості (3) та кислотності (4) перед іонітом в  $Ca^{2+}$ -формі

В зв'язку з останнім були проведені дослідження сольової регенерації сильнокислотного катіонату КУ-

2-8 в  $Ca^{2+}$  та  $Mg^{2+}$ -формі та слабкокислотного катіоніту Dowex MAC-3 в  $Ca^{2+}$ -формі. При вивченні процесів регенерації для переведення іоніту в  $Ca^{2+}$ -,  $Mg^{2+}$ -форму використовували розчини суміші хлоридів кальцію та магнію з концентраціями по кальцію  $50+200$  мг-екв/ $дм^3$ , концентраціями по магнію  $25+150$  мг-екв/ $дм^3$ . Для регенерації іонітів використовували розчини хлориду натрію в концентраціях 5 та 10 % та підкислений розчин 5 %-го хлориду натрію (кислотність складала 5 мг-екв/ $дм^3$ ) При переведенні іоніту в  $Ca^{2+}$ ,  $Mg^{2+}$ -форму модельними розчинами його попередньо переводили в  $Na^+$ -форму з допомогою 2 % розчину лугу.

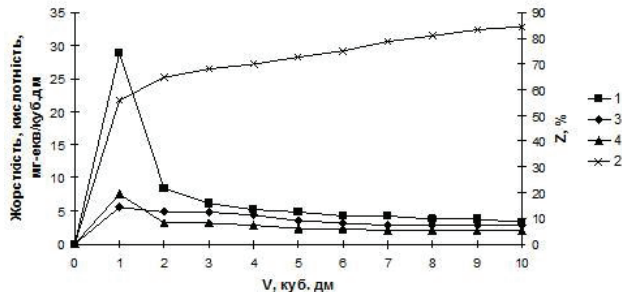


Рис. 3. Залежність вихідних жорсткості води (1) та ступеню десорбції іонів кальцію (2) з катіоніту Dowex MAC-3 в  $Ca^{2+}$ -формі ( $V_i=10$   $см^3$ ) (ПОДЕ $_{Ca}=41600$  мг-екв/ $дм^3$ ) від витрати модельного розчину ( $Ж=4,2$  мг-екв/ $дм^3$ ,  $Л=4,2$  мг-екв/ $дм^3$ ,  $[SO_4^{2-}]=1600$  мг/ $дм^3$ ,  $[Cl^-]=1200$  мг/ $дм^3$ ,  $[Na^+]=371,4$  мг-екв/ $дм^3$ ,  $pH=7,53$ ), попередньо пропущеного через катіоніт Dowex MAC-3 в  $H^+$ -формі ( $V_i=60$   $см^3$ ), його жорсткості (3) та кислотності (4) перед іонітом в  $Ca^{2+}$ -формі

Відомо, що сильнокислотні катіоніти, включаючи КУ-2-8, легко регенеруються розчинами хлориду натрію [9]. Це підтверджують результати, приведені на рис. 4. та 5.

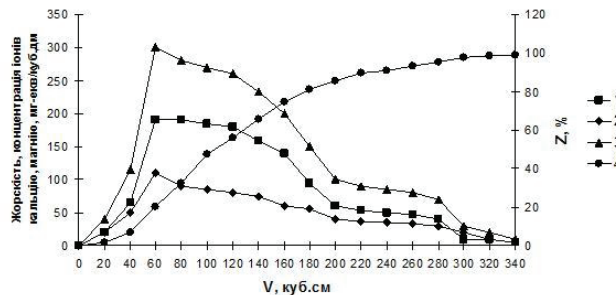


Рис. 4. Залежність вихідних концентрацій кальцію (1), магнію (2), жорсткості (3) та ступеню регенерації (4) катіоніту КУ-2-8 ( $V_i=10$   $см^3$ ) в  $Ca^{2+}$ -,  $Mg^{2+}$ -формі від об'єму пропущеного 5 % розчину хлориду натрію

Як видно з рис. 4 та 5, при використанні розчину хлориду натрію концентрацією 5 % було досягнуто високих значень ступеню десорбції іонів жорсткості при питомій витраті регенераційного розчину 20  $см^3/см^3$ . При концентрації хлориду натрію 10 % ступінь регенерації досяг 87 % при питомій витраті регенераційного розчину 10  $см^3/см^3$  та 100 % при питомій витраті регенераційного розчину 16  $см^3/см^3$ .



Значно гірше проходить регенерація слабокислотних іонів в  $\text{Ca}^{2+}$ -,  $\text{Mg}^{2+}$ -формі розчинами хлориду натрію [10]. Проте при пропусканні води, обробленої на слабокислотному катіоніті Dowex MAC-3 в кислій формі, через даний катіоніт в  $\text{Ca}^{2+}$ -,  $\text{Mg}^{2+}$ -формі спостерігалась певна десорбція іонів жорсткості (рис. 3), як уже було відмічено раніше. Обумовлено це великим значенням витрати води ( $10 \text{ дм}^3$  на  $10 \text{ см}^3$  іоніту) і підкисленням води ( $K=2\div 7 \text{ мг-екв/дм}^3$ ). Проте іони жорсткості вимивались в більшій кількості, в порівнянні із кислотністю води. Очевидно, що надеквівалентна десорбція іонів жорсткості обумовлена також витісненням із іоніту іонів кальцію та магнію іонами натрію, що присутні в значній концентрації у воді. При пропусканні водопровідної води, попередньо обробленої на слабокислотному катіоніті в кислій формі (рис. 2.), десорбція іонів жорсткості відбувалась значно гірше.

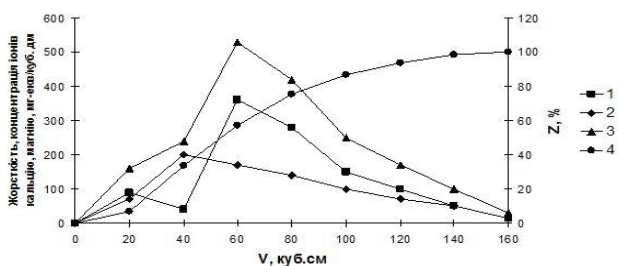


Рис. 5. Залежність вихідних концентрацій кальцію (1), магнію (2), жорсткості (3) та ступеню регенерації (4) катіоніту КУ-2-8 ( $V_i=10 \text{ см}^3$ ) в  $\text{Ca}^{2+}$ -,  $\text{Mg}^{2+}$ -формі від об'єму пропущеного 10 % розчину хлориду натрію

Для уточнення взаємного впливу кислоти та хлориду натрію на ефективність десорбції іонів жорсткості через катіоніт Dowex MAC-3 в  $\text{Ca}^{2+}$ -формі пропускали модельний розчин, що містив 5 % хлориду натрію при кислотності  $5 \text{ мг-екв/дм}^3$  (рис. 6.).

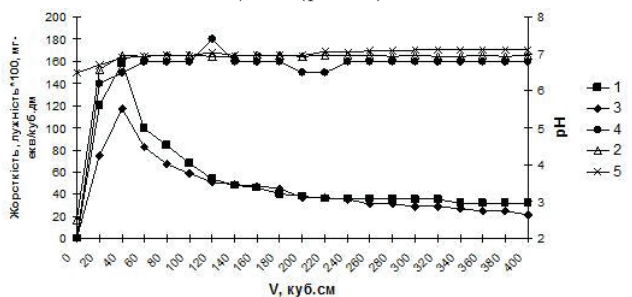


Рис. 6. Вплив витрати розчинів хлориду натрію ( $[\text{NaCl}]=50 \text{ г/дм}^3$ ) (1, 2) та кислого розчину хлориду натрію ( $[\text{NaCl}]=50 \text{ г/дм}^3$ ,  $[\text{HCl}]=5 \text{ мг-екв/дм}^3$ ) (3, 4, 5) через катіоніт Dowex MAC-3 в  $\text{Ca}^{2+}$ -формі ( $V_i=10 \text{ см}^3$ ) на вихідні значення жорсткості (1, 3), лужності (4) та pH (2, 5)

Як видно з рис. 6, в даному випадку кислотність розчину після катіонування знижувалась до нуля, а десорбція іонів кальцію дещо перевищувала значення, яких можна було досягти лише за рахунок обміну іонів кальцію на протони. Частково десорбція відбувалась і за рахунок обміну іонів кальцію на іони натрію. Проте, певного синергізму не спостерігалось. Так, при пропусканні через іоніт Dowex MAC-3 в  $\text{Ca}^{2+}$ -формі

5 % розчину хлориду натрію спостерігалась також часткова регенерація іоніту (рис. 6). При цьому ступінь регенерації мало відрізнявся від отриманої в разі використання підкисленого розчину хлориду натрію (рис. 7).

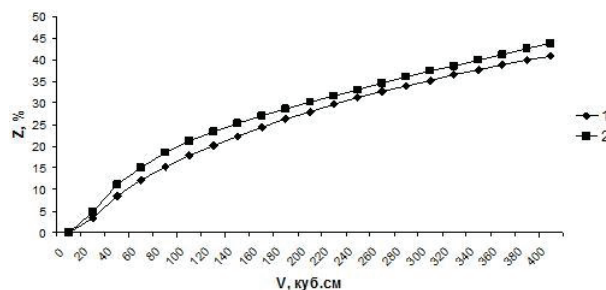


Рис. 7. Залежність ступеню десорбції іонів кальцію (Z) (1, 2) від витрати розчину хлориду натрію ( $[\text{NaCl}]=50 \text{ г/дм}^3$ ) (1) та кислого розчину хлориду натрію ( $[\text{NaCl}]=50 \text{ г/дм}^3$ ,  $[\text{HCl}]=5 \text{ мг-екв/дм}^3$ ) (2) через катіоніт Dowex MAC-3 в  $\text{Ca}^{2+}$ -формі ( $V_i=10 \text{ см}^3$ ) ( $m_{\text{Ca}^C}=50 \text{ мг-екв}$  (1);  $m_{\text{Ca}^C}=45 \text{ мг-екв}$  (2))

Тому, як видно з приведених досліджень слабокислотні катіоніти в сольовій формі можна використовувати для нейтралізації підкислених перміатів та фільтратів іонообмінного знеослення води. При цьому вміст інших мінеральних солей у воді мало впливає на ефективність десорбції іонів жорсткості з іоніту.

### 3. Висновки

1. Показано, що ефективність стабілізаційної обробки води та її пом'якшення залежить від форми, типу іоніту та лужності води. Слабокислотний іоніт в кислій формі забезпечує повне зниження карбонатної лужності води, проте ефективність пом'якшення (зниження жорсткості води) ніколи не перевищує її карбонатну лужність. Застосування сильнокислотного катіоніту в  $\text{Na}^+$ -формі призводить до підвищення pH середовища, практично не впливає на лужність води та забезпечує її ефективне пом'якшення.

2. Встановлено, що при пропусканні підкислених розчинів, через катіоніт Dowex MAC-3 в  $\text{Ca}^{2+}$ -формі можлива нейтралізація цих розчинів та часткова регенерація катіоніту від іонів жорсткості.

### Література

- Беличенко, Ю.П. Замкнутые системы водообеспечения химических производств [Текст] / Ю.П. Беличенко. – М.: Химия, 1990. – 208 с.
- Гомеля, И. Н. Оценка эффективности катионитов КУ-2-8 и Aqualite R-100 FC при умягчении воды в присутствии ионов железа [Текст] / И. Н. Гомеля, Ю. А. Омельчук, В. М. Радовенчик // Экотехнологии и ресурсосбережение. – 2008. – № 3. – С. 62-65.
- Голтвяницкая, Е.В. Оценка эффективности использования слабокислотного катионита Dawex MAC-3 в катионном умягчении воды [Текст] / Е.В. Голтвяницкая,

- Т.А. Шаблій, Н.Д. Гомеля, С.С. Ставская // Вісник НТУУ «КПІ» Серія « Хімічна інженерія , екологія та ресурсозбереження». – 2011. – № 2(8). – С. 87-92
4. Гомеля, Н.Д. Кондиционирование воды для ресурсосберегающих систем водопользования [Текст] / Н.Д. Гомеля, Т.А. Шаблій, Ю.В. Носачева // Экотехнологии и ресурсосбережение. – 2004. – №4. – С.55-58.
  5. Шаблій, Т.А. Разработка эффективной технологии умягчения воды для промышленного водопотребления [Текст] / Т.А. Шаблій, И.Н. Макаренко, Е.В. Голтвяницкая // Энерготехнологии и ресурсосбережение. – 2010– №1. – С.53-58.
  6. Рисухін , В.В. Вплив концентрації розчинів сірчаної кислоти, форми катіоніту DOWEX-МАС-3 на ефективність його регенерації [Текст] / В.В. Рисухін, О.В. Глушко, І.М. Макаренко // Вісник Національного технічного університету «ХПІ». – 2012 – № 34. – С. 137-145
  7. Макаренко, І.М. Застосування слабокислотного катіоніту Dowex МАС-3 для стабілізаційної обробки води [Текст] / І. М. Макаренко, О.В. Глушко, В.В. Рисухін, В.П. Малін // Східно- Європейський журнал передових технологій. – 2012. – №3/6(57). –С.16-21.
  8. Спосіб відновлення регенераційних розчинів натрій-катіонного пом'якшення води [Текст] : пат. 43183 Україна, МПК9 В 01 Д 33/04 / Згуровський М.З., Гомеля І.М., Рисухін В.В., Ільченко М.Ю., Радовенчик В.М., Камаєв В.С., Черноволов Г.Ю.; заявитель и патентообладатель НТУУ «КПІ». – № 200901203; заявл. 16.02.2009; опубл. 10.08.2009. Бюл. №15. – 3 с.
  9. Андрияш, С.В. Регенерация катионита КУ-2-8 при создании малоотходных технологий умягчения и обессоливания воды [Текст] / С.В. Андрияш, И.Н. Гомеля, Т.А. Шаблій // Экотехнологии и ресурсосбережение. – 2007. – №2. – С. 34-39.
  10. Гомеля, Н.Д. Разработка доступных ионитов для ресурсосберегающих процессов умягчения воды [Текст] / Н.Д. Гомеля, Ю.В. Носачева // Экотехнологии и ресурсосбережение. – 2004. – №6. – С. 51-54.

УДК 544.7:544.18

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ЯМР СПЕКТРОВ ФРАГМЕНТОВ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОЙ ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНЕЗЕМА

*На основі квантово-хімічних розрахунків ЯМР спектрів (DFT(GIAO/V3LYP /6-311++G(d,p))) фрагментів функціоналізованої поверхні кремнезему виконано коректне співставлення основних резонансних частот у теоретичних та експериментальних ЯМР спектрах синтезованих сорбентів. Показано величини хімічних зсувів констант екранування на ядрах  $^{13}\text{C}$  та  $^{31}\text{P}$  при утворенні водневого зв'язку як за наявності, так і за відсутності молекули води*

*Ключові слова: квантово-хімічний розрахунок, ЯМР спектр, константи екранування, ІЧ спектр, функціоналізована поверхня кремнезему, водневий зв'язок*

*На основе квантово-химических расчетов ЯМР спектров (DFT(GIAO/V3LYP /6-311++G(d,p))) фрагментов функционализированной поверхности кремнезема проведено корректное отнесение резонансных частот в теоретических и экспериментальных ЯМР спектрах синтезированных сорбентов. Определены величины химических сдвигов констант экранирования на ядрах  $^{13}\text{C}$  и  $^{31}\text{P}$  при образовании водородной связи как при наличии, так и в случае отсутствия молекулы воды*

*Ключевые слова: квантово-химические расчеты, ЯМР спектр, константы экранирования, ИК спектр, функционализированная поверхность кремнезема, водородная связь*

Ю. А. Мирошниченко\*

E-mail: Ju1ianna@ukr.net

Ю. А. Безносик

Кандидат технических наук, доцент\*

E-mail: yu\_beznosyk@ukr.net

О. В. Смирнова

Кандидат химических наук, младший научный сотрудник\*

E-mail: osmirnova@isc.gov.ua

Ю. Л. Зуб

Доктор химических наук, профессор\*\*

E-mail: zub\_yuriy@isc.gov.ua

\*Кафедра кибернетики химико-технологических процессов

Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт» пр. Победы, 37, Киев, Украина, 03056

\*\*Отдел «Химии поверхности гибридных материалов»

Институт химии поверхности

им. А.А. Чуйко НАН Украины

ул. Генерала Наумова, 17, Киев, Украина, 03164