

ИММОБИЛИЗОВАННЫЕ АЗОПРОИЗВОДНЫЕ КАК АНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕАГЕНТЫ НА ИОНЫ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Рахимов С.Б., Сманова З.А., Исакулов Ф.Б., Самандарова Н.Э.

*Национальный университет Узбекистана им. Мирзо Улугбека,
700174, Узбекистан, Ташкент, ул. Университетская 4,
e-mail: smanova.chem@mail.ru*

Обобщены результаты квантово-химических расчетов и экспериментальных исследований характеристик комплексов меди, марганца, кобальта и кадмия, иммобилизованных на полимерные сорбенты синтетического (полиакрилонитрил) и природного (целлюлоза) типа. Эффективным инструментом исследования механизма взаимодействия и прогнозирования новых систем с практически ценными свойствами является теоретико-экспериментальный подход, опирающийся на системное применение квантово-химических методов, который дает количественную оценку реакционной способности исходных и иммобилизованных лигандов и их комплексов с ионами металлов.

Методом МОРАС 2016 рассчитаны структуры органических соединений производных антипирина: 1-(1-(4-антипирилазо)-2,3-оксинафтольная кислота (ААОНК) и 4-(4-антипирилазо)-2,4-диаминобензол (ААДАБ). Для определения возможных конфигурационных (геометрических) состояний были проведены вращения двух циклических фрагментов вокруг одинарной связи C-N и N-C. Получены результаты расчетов потенциальной поверхности вокруг одинарных связей для соединения ААОНК потенциальная поверхность которой представлена в виде трёхмерной (3D) и двухмерной (2D) контурных карт. Исследование расположения реагентов в пространстве показало, что наибольший глубокий минимум рассчитанных реагентов характеризует вероятное пространственное расположение.

Данные варьирования двугранных углов, показывают наличие 4 минимумов. Наибольший глубокий минимум обнаруживается при $175^\circ/77^\circ$, показывающий возможность наиболее вероятной структуры реагента.

Данные полуэмперических квантово-химических методов показали возможность предсказания предпочтительной координации металлов с ИМОП. При этом расчетные данные адекватны результатам химического и ИК-спектроскопического исследований.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда фундаментальных исследований РУз (гранты Ф3-20171024243).