

**Квантово-химический метод «атомы в молекулах» и проблемы
дизайна комплексообразующих реагентов (экстрагентов и
ионофоров)**

Петрухин О.М.^{1,2}, Моргалюков В.П.³, Малофеева Г.И.¹, Спиваков Б.Я.¹

¹Институт геохимии и аналитической химии

им. В. И. Вернадского РАН, г. Москва

²Российский химико-технологический университет

им. Д. И. Менделеев, г. Москва

³Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова, г. Москва

opetrushin@muctr.ru

Экстракция металлов органическими комплексообразующими экстрагентами широко используется в аналитической химии. К настоящему времени синтезированы, исследованы и используются огромное количество соответствующих органических реагентов. Поэтому в настоящее время при необходимости решить ту или иную практическую задачу ограничиваются выбором из уже синтезированных и доступных реагентов или из имеющихся выбирают оптимальный реагент и стараются модифицировать его в надежде получить еще лучший: повышение эффективности экстрагента того стоит.

В данной работе в качестве стартового реагента был выбран N-бензоилфенилгидроксиламин (БФГА). Константу экстракции в этом случае можно записать в следующей форме

$$\lg K_{\text{ex}} = \lg (\beta_{M_{\text{A}_n}} P_{M_{\text{A}_n}}) - n \lg (P_{\text{HA}} K_{\text{HA}}^{-1}).$$

Здесь M^{n+} – n-зарядный катион металла, HA – бидентатный моноосновный хелатообразующий экстрагент, $\beta_{M_{\text{A}_n}}$ – константа устойчивости и P – константы распределения соответствующих соединений. Таким образом, для того чтобы изменить эффективность и селективность извлечения, необходимо соответствующим образом изменить константы устойчивости или константы распределения или значения обеих констант. Самый распространенный подход модификации экстрагента основан на введении соответствующих заместителей в матрицу выбранного реагента. В качестве заместителей в о-положении фенильного кольца БФГА использовались следующие радикалы $\text{CH}_3\cdot$, $\text{Ph}\cdot$, $\text{F}\cdot$, $\text{Cl}\cdot$, $\text{NO}_2\cdot$, различающиеся между собой по электроотрицательности и гидрофобности. Известно большое число параметров катиона металла, реагентов и среды которые определяют устойчивость и липофильность комплексов. Эти параметры получены на основе обработки тех или иных экспериментальных данных. Сравнительно недавно для оценки таких параметров стали привлекаться различные теоретические методы, в том числе методы квантовой химии.

В данной работе проблемы дизайна реагентов обсуждаются в рамках квантово-химического метода «атомы в молекулах». В рамках этой теории молекула представляет собой ядра химических соединений погруженных в море электронного облака. По аналогии с химической системой вводится понятие электронного химического потенциала как дифференциала: $\{\delta E / c\} / \delta N \}_{T, V(r)}$. Функция Фукуи в рамках ТФП определяется как производная электронной энергии по числу электронов. То есть жесткость является величиной переменной, зависящей от характера связи между соответствующими атомами. Априорные характеристики все модельно условны.