9. Shchokin V. The example of application of the developed method of Neuro-Fuzzy rationing of power consumption at JSC "YuGOK" mining enrichment plants / V.Shchokin, O. Shchokina, S. Berezhniy// Metallurgical and Mining Industry. – 2015. – №2. – P. 19–26.

10. Morkun V. Distributed closed-loop control formation for technological line of iron ore raw materials beneficiation / V.Morkun, N. Morkun, V. Tron// Metallurgical and Mining Industry. – 2015. – №7. – P. 16–19.

11. Kondratets V. Adaptive control of ore pulp thinning in ball mills with the increase of their productivity / V. Kondratets// Metallurgical and Mining Industry. – 2014. – №6. – P. 12–15.

12. Porkuian O. Adaptive control of ore pulp thinning in ball mills with the increase of their productivity / O. Porkuian// Metallurgical and Mining Industry. – 2014. – №6. – P. 29–31.

13. Дик И. Г. Управление характеристиками гидроциклона дополнительным инжектированием воды / И. Г. Дик, А. В. Крохина, Л. Л. Миньков // Теоретические основы химической технологии. – 2012. – том 46. – №3. – С. 342–352.

14. Бастан П. П. Теория и практика усреднения руд / П. П. Бастан, Е. И. Азбель, Е. И. Ключкин. – М. : Недра, 1979. – 255 с.

15. Хан Г. А. Автоматизация обогатительных фабрик / Г. А. Хан, В. П. Картушин, Л. В. Сорокер, Д. А. Скрипчак. – М. : Недра, 1974. – 280 с.

Рукопис подано до редакції 18.04.2018

УДК 504(075.8)

Е. В. ЧАСОВА, канд. хім. наук, доц., О. В. ДЕМЧИШИНА, канд. хім. наук, асист.,
В.В. БОРИСЕНКО, В.І. ЛИСЕНКО, студенти, Криворізький національний університет

ФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ АНІОННИХ ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНИХ РЕЧОВИН

Постановка завдання. Поверхнево-активні речовини відносяться до особливої групи органічних забруднювачів навколишнього середовища. Тому контроль змісту ПАР у стічних водах Кривбасу є актуальним. Визначення аніонних поверхнево-активних речовин в природних водах м. Кривого Рогу проводилось з використанням акридінового жовтого в якості реагента в екстракційно-фотометричному методі.

Методи дослідження. Для фотометричного визначення аПАР готували розчин акридінового жовтого (концентрація $0,1 \text{ г/дм}^3$) розчиненням точної наважки в дистильованій воді. Для побудови градувального графіку готували розчини аПАР (натрію додецилсульфату) щоденно з вихідного розчину аПАР (концентрація $0,1 \text{ г/дм}^3$). Всі реактиви мали марку «х.ч» або «ч.д.а.». Рівень рН розчинів контролювали і необхідним чином підбирали, використовуючи рН-метр-мілівольтметр. Оптичну густину водних розчинів, органічних екстрактів градувальних розчинів та проби води вимірювали на фотоколориметрі КФК-2, у кюветах з товщиною поглинаючого шару 1 см. Квантово-хімічне моделювання проводилось за допомогою неемпіричних методів програми WinGAMES. В якості розрахункового метода був обраний необмежений метод Хартрі-Фока, з використанням DFT – теорії. Для врахування сольватації використовувалася модель поляризаційного континууму.

Наукова новизна. Актуальним є використання акридінового жовтого, в якості нового реагента в екстракційно-фотометричному методі. Дослідження властивостей акридінового жовтого. Підтвердження квантово-хімічними розрахунками запропонований хімізм процесу іонізації молекули акридінового жовтого.

Практична значимість. Запропонована методика дозволить контролювати вміст аПАР у стічних водах заводськими лабораторіями або лабораторіями очисних споруд.

Результати. Підбрано оптимальні умови та визначено вміст аніонних поверхнево-активних речовин в природних водах з акридіновим барвником. Встановлено вплив рН на водні розчини акридінового жовтого. Виміряна оптична густина органічних екстрактів та водних розчинів органічного барвника при довжині хвилі, яка відповідала максимальному значенню оптичної густини, $\lambda = 440 \text{ нм}$. За допомогою градувального графіка визначено концентрацію, яка знаходиться в межах ГДК, аПАР у досліджуваній воді.

Ключові слова: аніонні поверхнево-активні речовини, акридіновий жовтий, екстракти.

doi: 10.31721/2306-5435-2018-1-103-36-39

Проблема та її зв'язок з науковими та практичними завданнями. Гірничозбагачувальні комбінати – це великі промислові підприємства інтенсивного видобутку та переробки корисних копалин. В результаті технологічних процесів, пов'язаних з переробкою та збагаченням корисних копалин, крім отримання корисних продуктів відбувається забруднення навколишнього середовища. Одним із джерел попадання небезпечних речовин у навколишнє середовище є стічні води. Такими забруднюючими речовинами стічних вод є важкі метали та поверхнево-активні речовини. Можливість потрапляння таких речовин у природні води з промисловими та побутовими стічними водами є однією з суттєвих загроз екологічного стану навколишнього середовища.

Аналіз досліджень і публікацій. Стічні води – це використані промисловими й комунальними підприємствами води, що забруднені різними домішками. Одними з найбільш розповсюдженими хімічними забруднювачами є поверхнево-активні речовини (ПАР) [1, 2].

Поверхнево-активні речовини – органічні речовини різної хімічної будови, адсорбуються на поверхні твердих і рідких тіл, що об'єднуються за специфічними властивостями. ПАР знижують поверхневий натяг на поверхні розділу фаз (рідина-рідина, газ-рідина, тверда речовина-рідина), сприяють розчиненню у воді речовин, в звичайних умовах в ній нерозчинні.

У зв'язку з цим для ПАР характерні наступні практично важливі властивості (проявляються не однаковою мірою у різних ПАР): здатність до змочування, піноутворення, утворення і стабілізація емульсій та суспензій, миючу і захисну колоїдну дію. ПАР поділяють на чотири групи: аніоноактивні, катіоноактивні, неіоногенні та амфолітні (амфотерні) [3, 4].

Аніонні поверхнево-активні речовини (аПАР) – сполуки, які у водному розчині в результаті дисоціації утворюють поверхневі (адсорбційні) активні аніони та (адсорбційно) неактивні катіони.

До них відносяться:

алкілсульфати $C_nH_{2n+1}OSO_3Me$, де $n = 8 \div 18$ атомів Карбону в молекулі, Me – атоми металів Na, K;

алкілсульфонати $C_nH_{2n+1}SO_3Me$, де $n = 12 \div 18$ атомів Карбону в молекулі;

алкіларилсульфонати, а саме моно- і -диалкілбензолсульфонати $C_nH_{2n+1}C_6H_4SO_3Na$, де $n = 12 \div 18$ атомів Карбону в молекулі.

Будова молекул аПАР може містити різноманітні іоногенні та неіоногенні полярні групи, наприклад сополімери акрилового ряду, ефіри целюлози [5].

Застосовують аніонні поверхнево-активні речовини в промисловості, в якості флотореагентів при флотаційному збагаченні корисних копалин; для обробки металів і матеріалів; покращення процесів диспергування рідин і твердих тіл, як стабілізатори дисперсних систем-паст, пін, емульсій [6].

Збільшення виробництва і використання, поверхнево-активних речовин в різноманітних миючих засобах призвело до їх потрапляння зі стічними водами у природні водойми. АПАР можуть погіршувати якість води, самоочисну здатність водойм, тому потрібно контролювати їх вміст у воді [7].

Серед фізико-хімічних методів аналізу екстракційно-фотометричний метод відрізняється від інших надійністю, чутливістю, відтворюваністю та доступністю. Тому нами був запропонований метод фотометричного визначення аПАР. Він базується на екстракції хлороформом іонних асоціатів, які утворюються при взаємодії аПАР з катіонним барвником.

Частіше всього в даному методі використовують органічний барвник: метиленовий синій, метиленовий зелений, кристалічний фіолетовий, родамін [8, 9, 10].

Велику зацікавленість, з хімічної точки зору, представляють барвники акридінового ряду, а саме, акридіновий жовтий та його використання для визначення аніонних поверхнево-активних речовин в природних водах.

Викладення матеріалу та результати. Акридінові барвники – це похідні гетероциклічної сполуки акридину або 9-фенілакридину. Ці барвники містять в положенні 3 та 6 різні групи – OH, – NH₂, –SH та інші. Атом Нітрогену гетероциклу, відіграє роль другого замісника, підвищує колір акридінових барвників, в порівнянні з арилметановими барвниками.

Основним представником акридінового ряду є акридіновий жовтий.

Акридіновий жовтий (3,6-діаміно-2,7-диметилакридіна дигідрохлорид) – жовтий кристалічний порошок, розчинний у воді. Розчин його забарвлений в помаранчевий колір та має зелену флуоресценцію (рис.1).

Рис. 1. Структурна формула акридінового жовтого

Акридіновий жовтий є слабкою основою, тому його молекули в лужному розчині не іонізовані. Іонізація настає тільки при зменшенні рН розчину шляхом додавання хлоридної кислоти.

Квантово-хімічне моделювання показало утворення іону акридину, в якого протон приєднується до

кільцевого атому Нітрогену (рис.2).

Рис.2. Оптимізовані структури акридінового жовтого

Таблиця 1
Між'ядерні відстані (Å) між атомом Нітрогену та Гідрогеном

№ атома	Між'ядерна відстань, Å
N ₂₇ -H ₂₈	1,0342
N ₂₇ -H ₂₉	1,0209
N ₃₀ -H ₃₁	1,0175
N ₃₀ -H ₃₂	1,0138
N ₃₃ -H ₃₄	1,0218

Про утворення хімічного зв'язку можна стверджувати на підставі між'ядерних відстаней (табл.1).

Як видно з наведеної таблиці відстані між атомом Нітрогену та атомом Гідрогену мають значення до 2Å, що вказує на утворенню міцного хімічного зв'язку між ними.

Вивчення впливу рН на водні розчини акридінового жовтого (рис. 3, 4) показало, що перехід від лужного до кислого середовища супроводжується зміною форми і розташуванням спектрів поглинання в сторону довгих хвиль (рис.5).

Враховуючи підібрані оптимальні умови, екстракційно-фотометричне дослідження аніонних поверхнево-активних речовин з акридіновим жовтим, проводили при рН 5,7-5,9 та $\lambda=440$ нм. Для вилучення утворених іонних асоціатів використовували хлороформ.

Для побудови градувального графіку в ділильну лійку (50 см³) вносять натрію додецилсульфату (1см³, 2....30 см³), 4 см³ дистильованої води, 1,0 см³ розчину хлороводню, 1 см³ акридінового жовтого та 5 см³ хлороформу і екстрагують протягом 1 хв. шляхом перевертання ділильної лійки. Екстракти зливають в кювету та вимірюють оптичну густина. Дослідження повторюють три рази і використовують середні значення оптичної густини (рис. 6).

Рис. 3. Залежність оптичної густини від λ в лужному розчині акридінового жовтого: 1 – рН 11; 2 – рН 10; 3 – рН 9; 4 – рН 8

Рис. 4. Залежність оптичної густини від λ в кислому розчині акридінового жовтого: 1 – рН 4; 2 – рН 5; 3 – рН 7; 4 – рН 6

Рис. 5. Спектри поглинання акридінового жовтого при різних рН розчину: 1, 2 – лужне середовище; 3 – нейтральне середовище; 4 – кисле середовище

Рис. 6. Градувальний графік для визначення аПАР з акридіновим жовтим

Даний метод був використаний для визначення аПАР в природних водах. Аналіз досліджуваної води: поміщають в ділильну ліжку 5 см³ проби води та продовжують визначення, як вказано вище.

Як видно з рис. 6 градувальний графік для визначення аПАР має лінійну залежність та величина достовірності апроксимації дорівнює 0,9967. Визначена концентрація аПАР, за градувальним графіком, знаходиться в межах гранично допустимої концентрації аПАР у воді.

Таким чином, нами було встановлено, вплив рН на водні розчини акридінового жовтого. Підібрано оптимальні умови та визначено вміст аніонних поверхнево-активних речовин в природних водах з акридіновим барвником. Отримані результати дозволяють рекомендувати використання акридінового жовтого в якості нового реагента в екстракційно-фотометричному методі.

Список літератури

1. Часова Е.В. Характеристика влияния выбросов промышленных предприятий Кривого Рога на рабочих и население города / **Е.В. Часова, Л.Д. Ермак, В.В. Івчук** // Вісник Криворізького технічного університету, зб. Наукових праць. – вип. №20. – Кривий Ріг, 2008. – С.209-213.
2. Часова Е.В. Некоторые проблемы использования синтетических поверхностно-активных веществ и основные пути их решения / **Е. В. Часова, В.В. Івчук** // Качество минерального сырья. – 2014. – С. 198-205.
3. Часова Е.В. Влияние промышленных эмиссий предприятий Кривбасса на экологию региона // **Е.В. Часова, Л.Д. Ермак, В.В. Івчук** // Всероссийская научно-практическая конференция с международным участием «Экологические проблемы промышленных городов». – Саратов, 12-14 апреля 2011. – Ч.1. – С. 328-331.
4. Часова Е. В. Экологические проблемы Кривбасса – состояние и перспективы / **Е. В. Часова, В.В. Івчук** // Вісник Криворізького технічного університету, зб. Наукових праць. – вип. №30. – Кривий Ріг, 2012. – С.215-219
5. Яцик А.В. Водні ресурси: використання, охорона, відтворення, управління: підручник для студентів вищих навч. закладів / **А.В. Яцик**. – К. : Генеза. – 2007. –360 с.
6. Алыков Н. М. Поверхностно-активные вещества и флокулянты в объектах окружающей среды. Методы концентрирования, определения и удаления : монография / **Н. М. Алыков, Т. В. Алыкова, Е. Ю. Шачнева**. – Астрахань, 2011. – 107с
7. Лугова Л.Р. Сучасний стан методів контролю вмісту поверхнево-активних речовин у стічних водах // Розвідка і розробка нафтових і газових родовищ. – Івано-Франківськ, 2000. – С.182-186.
8. Перевощикова Н.Б. Количественное определение поверхностно-активных веществ различной природы в водных растворах / **Н.Б. Перевощикова, Ю.А. Азиатцев** // Вестник Удмуртского университета. Физика. Химия. – 2010. – Вып.2. – С. 54-65
9. Лурье Ю. Ю. Аналитическая химия промышленных сточных вод / **Ю.Ю. Лурье** – М. : Химия, 1984. – 447с.
10. Часова Е. В. Кількісне визначення аніонних поверхнево-активних речовин у стічних водах / **Е. В. Часова, О. В. Демчишина** // Науковий журнал «Молодий вчений». – 2017. – №10(50). – С. 10-12.
11. **M.W.Schmidt**. General Atomic and Molecular Electronic Structure System / **M.W.Schmidt, K.K. Baldridge, J.A. Boatz, S.T. Elbert, M.S. Gordon** and others // J.Comput.Chem. – 1993. – Т. 14. – С. 1347-1363.

Рукопис подано до редакції 07.05.2018

УДК 622.016.52:622.34

В.О. КАЛІНІЧЕНКО, д-р техн.наук, проф., С.В. ПИСЬМЕННИЙ,
Д.В. БРОВКО, кандидати техн.наук, доценти, О.В. КАЛІНІЧЕНКО, канд.екон.наук, доц.
Криворізький національний університет

МОДЕЛЮВАННЯ СТІЙКОСТІ ШТУЧНИХ СПОРУД ПРИ РОЗРОБЦІ ЗАЛІЗНИХ РУД

Мета. Метою даної роботи є моделювання очисних камер різної форми на еквівалентних матеріалах при підземній розробці залізних руд Криворізького залізрудного басейну. З пониженням гірничих робіт навколо очисних камер зростає гірський тиск, який призводить до їх часткового обвалення, а як наслідок зниження вмісту корисного компоненту в видобутій рудній масі. Теоретичними дослідженнями доведено, що очисні камери параболічної форми є більш стійкими у порівнянні з камерами прямокутної форми, але лабораторним дослідженням приділено не було достатньої уваги, щоб підтвердити дану теорію.

Методи дослідження. В процесі моделювання застосовували комплексний метод досліджень, який полягав з аналітичного визначення параметрів очисних камер та лабораторне моделювання з застосуванням еквівалентних матеріалів. Суттєвою відмінністю даних досліджень є те, що при виготовленні еквівалентного матеріалу враховували масштаб фактору часу.