

ОЧИСТКА ВОДЫ ОТ АММИАЧНОЙ СЕЛИТРЫ

А.Н. Панченко, студент
Волгоградский государственный университет
(Россия, г. Волгоград)

DOI:10.24412/2500-1000-2023-4-4-182-185

Аннотация. В данной статье рассматриваются различные методы очистки воды от аммиачной селитры, распространенного удобрения, которое может загрязнять водные ресурсы и вызывать неблагоприятные последствия для здоровья. Обсуждаемые методы включают ионообменные смолы, обратный осмос и фильтрацию с активированным углем. Представлены теоретические расчеты структур для наночистот. В статье подчеркивается важность профилактики и правильного выбора методов очистки, а также учета потенциального воздействия на окружающую среду.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, бороуглеродные нанотрубки, аммиачная селитра, фильтрация, обратный осмос.

Вода является одним из важнейших ресурсов для выживания человека. Однако с ростом уровня загрязнения водные ресурсы загрязняются различными загрязняющими веществами, в том числе аммиачной селитрой. Аммиачная селитра является распространенным удобрением, которое широко используется в сельском хозяйстве, но при попадании в водоснабжение может оказывать неблагоприятное воздействие на окружающую среду и здоровье человека. Нитрат аммония представляет собой химическое соединение, состоящее из ионов аммония и нитрата. Он растворим в воде и может легко растворяться в почве, что делает его основным источником загрязнения воды. Загрязнение нитратом аммония может вызвать различные проблемы со здоровьем [1-2].

Наиболее распространенным методом очистки воды от аммиачной селитры является использование ионообменных смол. Ионообменные смолы представляют собой небольшие шарики, изготовленные из полимерного материала, который может поглощать или выделять ионы. В этом процессе загрязненная вода проходит через слой смолы, предварительно обработанный раствором соли. Ионы аммония в воде замещаются ионами натрия, которые затем поглощаются смолой. Этот метод эффективен для удаления из воды до 90% ионов аммония.

Еще одним методом очистки воды от аммиачной селитры является обратный осмос. Обратный осмос – это процесс, в котором используется полупроницаемая мембрана для фильтрации примесей из воды. В этом процессе загрязненная вода проталкивается через мембрану под давлением. Мембрана задерживает ионы аммония и другие примеси, пропуская только чистую воду. Этот метод эффективен для удаления из воды до 99% ионов аммония.

Фильтрация с активированным углем – еще один метод очистки воды от аммиачной селитры. Активированный уголь представляет собой высокопористый материал, способный поглощать примеси из воды. В этом процессе загрязненная вода проходит через слой активированного угля. Уголь адсорбирует ионы аммония и другие примеси, оставляя только чистую воду. Этот метод эффективен для удаления из воды до 90% ионов аммония [3-4].

Также важно учитывать потенциальное воздействие методов очистки воды на окружающую среду. Например, ионообменные смолы и обратный осмос могут производить значительное количество отходов рассола, которые могут нанести вред окружающей среде, если их не утилизировать должным образом.

Наука не стоит на месте широко распространяется новый метод очистки – наночистота. Однако эта технология все еще находится на экспериментальной

стадии и не получила широкого применения для очистки воды. Необходимо подобрать наноструктуру, которые будут эффективно адсорбировать аммиачную селитру [5].

Для проведения теоретических расчетов необходимо было построить и выбрать оптимальную модель аммиачной селитры NH_4NO_3 . Для определения оптимальной структуры были выполнены расчеты геометрии системы с использованием полупериодического метода MNDO в программ-

ном пакете Gamess. Расстояние между атомами N-O составляло 1,4 Å, а между N-H выбиралось равным 1,1 Å.

Структурные формулы аммиачной селитры представлены на рис. 1а. В результате расчетов были определены геометрические особенности данной структурной единицы (рис. 1б). Так, установлено, что оптимальные расстояния между атомами N-O равно 1,26 Å, а между атомами N-H 1,03 Å.

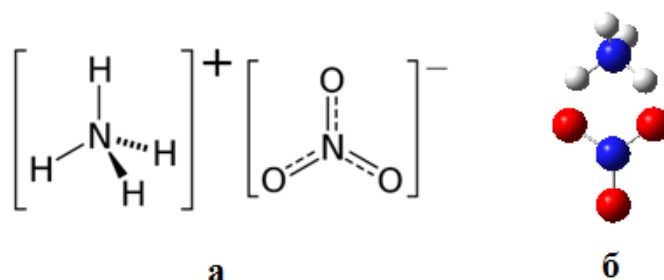
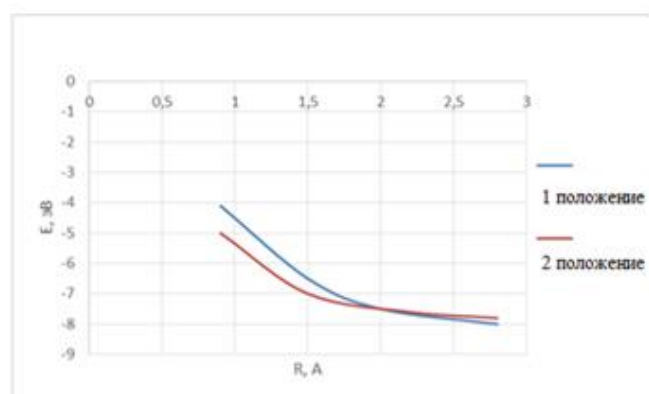


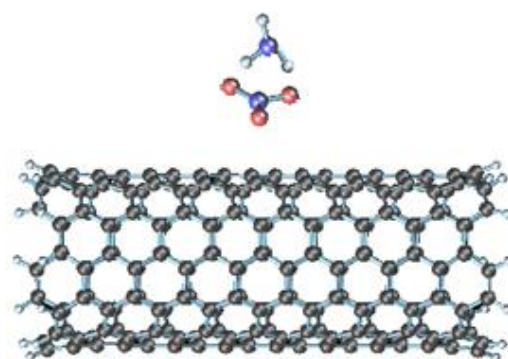
Рис. 1. Молекула аммиачной селитры: а) структурная формула; б) молекула построенная и рассчитанная в программном пакете Gamess.

В качестве адсорбирующих структур для аммиачной селитры были предложены углеродная и бороуглеродные нанотрубки (УНТ и БУНТ) типа (6,6). Рассмотрены два положения молекулы аммиачной селитры относительно поверхностей углеродного тулуена: 1) атом кислорода селитры ориен-

тирован на атом углерода; 2) атом кислорода селитры ориентирован на центр углеродного гексагона трубки. Расчет энергии взаимодействия рассчитывался в определенных точках движения с интервалом 0,1 Å, наглядно этот процесс представлен на рисунке 2а.



а



б

Рис. 2. Взаимодействие аммиачной селитры с УНТ: а) зависимость энергии взаимодействия от расстояния; б) устойчивое положение селитры над поверхностью УНТ.

Анализ энергетических кривых установил, что селитра не адсорбируется на поверхности трубки (рис. 2б), что подтвер-

ждается отсутствием минимума на энергетических кривых.

Далее был рассмотрен процесс присоединения селитры к поверхности БУНТ.

Рассмотрены три положения молекулы селитры относительно поверхности БУНТ:

- 1) атом кислорода селитры ориентирован на центр углеродного гексагона трубки;
- 2) атом кислорода селитры ориентирован на атом бора;

3) атом кислорода селитры ориентирован на атом углерода.

Пошаговое приближение молекулы к трубке позволило построить профиль потенциальной энергии (рис. 3а). Установлено, что молекула селитры адсорбируется на поверхности БУНТ (рис. 3б).

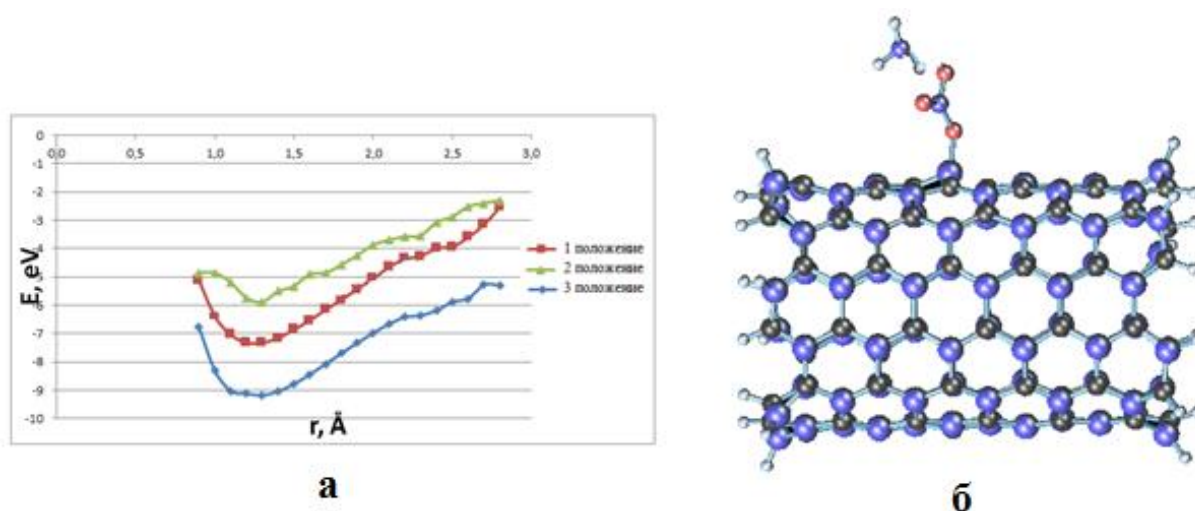


Рис. 3. Взаимодействие аммиачной селитры с БУНТ: а) зависимость энергии взаимодействия от расстояния; б) адсорбция селитры на поверхности трубки.

Заключение: очистка воды от аммиачной селитры является важным шагом в поддержании безопасного и здорового водоснабжения. Методы, обсуждаемые в этой статье, включая ионообменные смолы, обратный осмос и фильтрацию с активированным углем, эффективны для уда-

ления ионов аммония из воды. Показано, что бороуглеродная нанотрубка (6,6) является эффективным адсорбентом по отношению к аммиачной селитре, что позволяет данную структуру использовать в нанофильтрации.

Библиографический список

1. Аммиачная селитра: свойства, производство, применение / А.К. Чернышев [и др.]; под ред. Б.В. Левина, А.В. Туголукова. – М.: ЗАО «Инфохим», 2009. – ISBN 978-5-98801-019-7.
2. Рушманова, А.Ю. Применение аммиачной селитры в сфере производства и потребления / А.Ю. Рушманова // Решение. – 2018. – Т. 1. – С. 368-369.
3. Патент № 2176622 С2 Российская Федерация, МПК C02F 3/02, C02F 103/32. Способ биохимической очистки сточных вод: № 2000104731/12: заявл. 28.02.2000: опубл. 10.12.2001 / В.И. Гончаров, В.Н. Смолин, С.М. Кальной, Ю.М. Евченко.
4. Кудряшова, Е.Н. Очистка карьерных вод горнодобывающих предприятий от нитрат-ионов / Е.Н. Кудряшова, И.С. Глушанкова, Е.Н. Бессонова // Химия. Экология. Урбанистика. – 2021. – Т. 1. – С. 116-120.
5. Какорина, О.А. Выявление примесей в воде с помощью наноструктур / О.А. Какорина, И.А. Какорин, А.Н. Панченко // НБИ технологии. – 2020. – Т. 14, № 4. – С. 39-47. – DOI 10.15688/NBIT.jvolsu.2020.4.6.

PURIFICATION OF WATER FROM AMMONIUM NITRATE

A.N. Panchenko, *Student*
Volgograd State University
(Russia, Volgograd)

***Abstract.** This article discusses various methods of purifying water from ammonium nitrate, a common fertilizer that can contaminate water resources and cause adverse health effects. Methods discussed include ion exchange resins, reverse osmosis, and activated carbon filtration. Theoretical calculations of structures for nanofilters are presented. The article emphasizes the importance of prevention and the correct choice of cleaning methods, as well as taking into account the potential impact on the environment.*

***Keywords:** carbon nanotubes, borocarbon nanotubes, ammonium nitrate, filtration, reverse osmosis.*