

Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

(повне найменування вищого навчального закладу)

Факультет математики, фізики та інформаційних технологій

(повне найменування інституту/факультету)

Кафедра теоретичної фізики та астрономії

(повна назва кафедри)

## Дипломна робота

магістра

(ступінь вищої освіти)

на тему: «Залежність показника кислотно-лужного балансу  
фізіологічного розчину від температури і концентрації»

«Indicator of acid-alkaline balance for physiological solutions as function of temperature and concentration»

Виконала: студентка денної форми навчання

спеціальність: 104- Фізика та астрономія

Столярик Оксана Дмитрівна

Керівник д.ф.-м.н., проф. Маломуж М.П. \_\_\_\_\_

Рецензент д.ф.-м.н., проф. Гоцульський В.Я.,

д.мед.н., проф. Гріцук О.І.

Рекомендовано до захисту:

Протокол засідання кафедри

№ \_\_ від \_\_.\_\_.2021 р.

Захищено на засіданні ЕК № \_\_

протокол № \_\_ від \_\_.\_\_.2021 р.

Оцінка \_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_  
(за національною шкалою, шкалою ECTS, бали)

Завідувач кафедри

Голова ЕК

\_\_\_\_\_ Адамян В.М.  
(підпис)

\_\_\_\_\_ Ваксман Ю.Ф.  
(підпис)

Одеса – 2021

## ЗМІСТ

Вступ.....	2
1. Означення показника рН водних розчинів та його властивості.....	4
1.1. Аналіз експериментальних часових залежностей показника рН чистої води та сольового розчину хлориду натрію.....	4
1.2. Теоретичний аналіз значень рН у водно-сольових розчинах.....	12
1.3. Постановка задачі.....	13
2. Методи визначення показника рН чистої води та води, контактуючої з повітрям.....	15
2.1 Розрахунок показника рН чистої води.....	16
2.2. Метод розрахунку рН води, контактуючої з атмосферним повітрям...	20
2.3. Мікроскопічний та усереднений потенціали взаємодії молекул води з молекулами вуглекислого газу.....	23
2.4. Розрахунок віріальних коефіцієнтів та хімпотенціалів молекул вуглекислого газу у воді.....	27
2.5. Оцінка концентрації молекул вуглекислого газу в повітрі та воді.....	29
2.6. Порівняння з експериментальними даними.....	30
Висновки.....	32
Список використаних джерел.....	33

## ВСТУП

Робота присвячується дослідженню температурної та концентраційної залежності показника кислотно-лужного балансу води та водних розчинів хлориду натрію. Показник кислотно-лужного балансу визначає кількість іонів водню у розчині. Внаслідок відносно малих розмірів та маси, а також відсутності електронної оболонки, іон водню легко вступає у хімічну взаємодію з іншими молекулами. З тих же причин водень, який знаходиться в складі молекули, здатний утворювати так звані водневі зв'язки з атомами, які мають велику електронегативність та знаходяться в складі сусідніх молекул або тієї ж самої молекули (прикладом можуть слугувати молекули білка, ДНК, тощо). Таким чином, при зміні показника кислотно-лужного балансу розчину змінюються й перебіг хімічної реакції та як наслідок, рівноважні значення термодинамічних величин. Дослідження поведінки показника рН є актуальним, адже показник кислотно-лужного балансу впливає також на електрофізичні властивості білка. Відомо [1], що показник рН крові людини є жорсткою константою і набуває значень в межах 7.36-7.44 одиниць. Вихід за межі вказаного інтервалу веде до змін в процесі гомеостазу, а перевищення нормального показника рН на 0.4-0.5 одиниць веде до незворотних змін у гомеостазі, які не сумісні з життям. Зниження концентрації хлориду натрію в крові є причиною виходу води з русла крові у міжклітинний простір, що є причиною загушення крові, розладів нервової та серцево-судинної систем тощо. Тому важливим є питання про наявність зв'язку між показником кислотно-лужного балансу та концентрацією солі. Внаслідок теплового руху та молекулярних зіткнень у воді також виникають іони водню та встановлюється деяка рівноважна їх концентрація. Рівняння дисоціації молекул води має наступний вигляд:



З даного рівняння видно, що кількість іонів водню дорівнює кількості іонів гідроксидної групи. Розчини, в яких виконується остання умова, називають нейтральними.

Встановлено [2], що показник кислотно-лужного балансу чистої води, що приведена у контакт з хімічно нейтральним газом (аргоном, азотом, тощо), дорівнює 7. Однак експериментальні дослідження [3] показника рН чистої води дають результат значно менший за цю величину. В роботі [4] показано, що при врахуванні всіх ефектів абсолютна похибка у вимірюванні показника рН в інтервалі значень  $\text{pH}=(3,5-7,5)$  складає  $\pm(0,10-0,14)$  одиниць рН. Однією з причин розходження теоретичного значення показника рН з експериментом є наявність у воді домішок. Однак в більшості робіт [3,5,6] головною причиною суттєвого розходження результатів з експериментом вважається розчинення у воді атмосферного вуглекислого газу. При розчиненні вуглекислий газ частково вступає у хімічну реакцію з водою із утворенням вугільної кислоти, яка дисоціює на іони водню та бікарбонату:



після чого бікарбонат розпадається на карбонат та іон водню. Відповідне рівняння реакції має наступний вигляд:



Однак механізм і кінетика зміни показника рН води та водних розчинів при розчиненні вуглекислого газу є мало дослідженими. Як спостерігається в роботах [7,8], у водних розчинах хлориду натрію, насичених вуглекислим газом, показник кислотно-основного балансу зростає зі зменшенням концентрації солі, коли температура і парціальний тиск вуглекислого газу підтримуються сталими. Експериментальні результати роботи [8] вказують також на залежність показника рН від часу. Подібну залежність було виявлено для розчинів натрій хлориду. Розчинність вуглекислого газу буде залежати від концентрації солі та від температури розчину. При збільшенні температури

розчинність вуглекислого газу зменшується, однак водночас збільшується кількість вуглекислого газу, що вступає в реакцію з водою, утворюючи вугільну кислоту. У роботі [7] показано, що ці два ефекти в сумі дають незначне зменшення показника рН у порівнянні з чистою водою. У роботі [5] було розраховано показник рН фізіологічного розчину при температурі 20 °С. Було зроблено висновок, що показник рН фізіологічного розчину, що перебуває у контакті з вуглекислим газом менший на 0.01 одиницю рН у порівнянні з чистою водою, що контактує з вуглекислим газом. Результати, отримані в роботах [5,6] із використанням емпіричних констант (константа Генрі, константа дисоціації, тощо), значення яких залежить від температури, тиску, тощо. Однак останній метод не дає змогу отримати загальний вигляд величини показника рН як функції температури, часу та концентрації, а також виявити механізми, що формують величину показника рН у розчинах. Використання методів рівноважної термодинаміки дає змогу вирішити останні проблеми. Для того щоб віднайти явний вигляд залежності показника рН фізіологічного розчину від температури та концентрації, перш за все необхідно виконати розрахунок показника рН чистої води у термінах термодинамічної теорії, адже основу фізіологічного розчину складає вода.

Метою даної роботи є розрахунок у рамках рівноважної термодинаміки та класичної електродинаміки показника рН чистої води, рівноважної концентрації вуглекислого газу у воді та знаходження показника кислотно-лужного балансу дистильованої води, контактуючої з вуглекислим газом, порівняння отриманих результатів з експериментом.

## ВИСНОВКИ

У роботі запропоновано:

1) метод розрахунку рівноважного значення показника кислотно-лужного балансу чистої води та води, контактуючої з атмосферним вуглекислим газом та метод знаходження рівноважної концентрації вуглекислого газу у воді в термінах термодинаміки та класичної електродинаміки.

2) Розраховано концентрацію вуглекислого газу при встановленні термодинамічної рівноваги між чистою водою та атмосферним вуглекислим газом. Отримано показник рН чистої води, за температури  $25^{\circ}\text{C}$  він досягає 7 одиниць рН.

3) Показано, що зміна показника рН води, що знаходиться у контакті з вуглекислим газом, при температурі  $25^{\circ}\text{C}$  дорівнює 1.5, що співпадає з експериментальним результатом, отриманим Хорольським. Отримані цими методами значення показника рН добре узгоджуються з результатом експериментальних вимірювань показника рН води при температурі  $35^{\circ}\text{C}$ .

\_\_\_\_\_Столярик О. Д.  
(Підпис автора роботи)

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Волькенштейн, М. В. "Биофизика." (2012): Учебн. руководство, перераб. и доп. «Наука» - 592 стр.
2. Бейтс, Р. "Определение рН. Теория и практика." Изд. 2-е, испр. Изд. «Химия» (1968), - 400 стр.
3. T.R. Harbinson, W. Davison. Performance of flowing and quiescent free-diffusion junctions in potentiometric measurements at low ionic strength. *Analytical Chemistry*; **59**, 2450-2456 (1987). (doi: 10.1021/ac00147a002)
4. V. Souza, A. Pires Ordine, I. C. S. Fraga, M. A. Getrouw, P. P. Borges, J. C. Damasceno and P. R. G. Couto. Effect of NaCl and HCl concentrations on primary pH measurement for the certification of standard materials. *Braz. Arch. Biol. Technol.* 49(Special), 79 (2006). (10.1590/S1516-89132006000200013)
5. D.A. Story, P. Thistlethwaite, R. Bellomo. The Effect of PVC Packaging on the Acidity of 0.9 % Saline. *Anaesthesia and Intensive Care*, 28(3), 287–292 (2000). (doi: 10.1177/0310057x0002800306)
6. B. A. Reddi. Why Is Saline So Acidic (and Does It Really Matter?) *Int. J. Med. Sci.* 10(6), 747-750 (2013). (doi: 10.7150/ijms.5868)
7. G. Hinds, P. Cooling, A. Wain, S. Zhou, A. Turnbull. Technical Note: Measurement of pH in concentrated brines. *Corrosion* 65, 635 (2009). (doi: 10.5006/1.3319089)
8. J. Crolet, M. Bonis. pH measurements in aqueous CO<sub>2</sub> solutions under high pressure and temperature. *Corrosion* 39, 39 (1983). (doi: 10.5006/1.3580813)
9. P. Debye, E. Huckel. The theory of electrolytes. I. The lowering of the freezing point and related occurrences. *Phys Z.* 24: 185-206 (1923).
10. Ландау, Л. Д., Питаевский, Л. П., & Лифшиц, Е. М. (1976). *Статистическая физика*. Наука.ФИЗМАТЛИТ:616 стр.
11. Никольский, Борис Петрович. *Справочник химика*. Рипол Классик, 2014.
12. Эйзенберг, Д., и В. Кауфман. "Структура и свойства воды/Под ред." *ВВ Богородского: Пер. с англ. Л.: Гидрометеиздат* (1975).