

РІВНОВАГА В СИСТЕМІ $\text{WO}_4^{2-} - \text{H}^+$ – ФІЗІОЛОГІЧНИЙ РОЗЧИН «ТРИСОЛЬ»*Фіткаленко Г. В.,* Кальна К. В., Марійчак О. Ю., Розанцев Г. М., Радіо С. В.

Навчально-науковий інститут хімії Донецького національного університету

імені Василя Стуса, Вінниця, Україна

radio@donnu.edu.ua

У доповіді представлено результати дослідження рівноваги утворення ізополівольфрамат-аніонів (ІПВА) у фізіологічному розчині «Трисоль» з різною кислотністю та встановлення залежності між формами ІПВА та величиною рН фізіологічного розчину.

Методом рН–потенціометричного титрування та математичного моделювання досліджено стан індивідуальних ІПВА у системі $\text{WO}_4^{2-} - \text{H}^+$ – фізіологічний розчин «Трисоль» за вихідної концентрації $C(\text{WO}_4^{2-}) = 0,01$ моль/л та різної кислотності $Z = v(\text{H}^+)/v(\text{WO}_4^{2-})$ за $T = 25^\circ\text{C}$.

Для побудови математичної моделі рівноважних хімічних процесів у системі $\text{WO}_4^{2-} - \text{H}^+$ – фізіологічний розчин «Трисоль» послідовним пошуком адекватної моделі у формі закону дії мас і рівнянь матеріального балансу використано метод Ньютона (quasi-Newton), реалізований у програмі CLINP 2.1. До складу моделі, яка дозволила відтворити експериментально одержані значення рН (рис. 1) входили реакції утворення ІПВА $\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2^{10-}$, $\text{HW}_7\text{O}_{24}^{5-}$, $\text{W}_{12}\text{O}_{38}(\text{OH})_2^{6-}$ та реакції протонування/депротонування HCO_3^- , для яких під час моделювання з довірчою ймовірністю 95 % було розраховано логарифми концентраційних констант рівноваги. В результаті отримано значення $\lg K_C$ рівноваги реакцій утворення ІПВА $\text{HW}_7\text{O}_{24}^{5-}$ ($\lg K_C = 69,49$), $\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2^{10-}$ ($\lg K_C = 116,44$), $\text{W}_{12}\text{O}_{38}(\text{OH})_2^{6-}$ ($\lg K_C = 129,41$) у фізіологічному розчині «Трисоль» та побудовано діаграми розподілу аніонних форм у фізіологічному розчині «Трисоль». Показано, що за рН 5–6 домінуючими частинками є гідрогептавольфрамат-аніон $\text{HW}_7\text{O}_{24}^{5-}$ та аніон паравольфрамату Б $\text{W}_{12}\text{O}_{40}(\text{OH})_2^{10-}$, а за рН 2–5 – метавольфрамат-аніон зі структурою Кеггіна $\text{W}_{12}\text{O}_{38}(\text{OH})_2^{6-}$ (рис. 1).

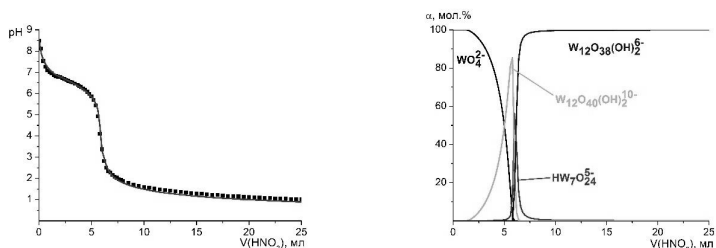


Рис. 1. *Ліворуч* – Співставлення експериментально одержаної (точки) та уточненої (лінія) залежності $\text{pH} = f(V)$ в системі $\text{Na}_2\text{WO}_4 - \text{HNO}_3$ – розчин «Трисоль»; *праворуч* – діаграми розподілу частинок у системі $\text{Na}_2\text{WO}_4 - \text{HNO}_3$ – розчин «Трисоль» ($C(\text{HNO}_3) = 0,5087$ моль/л) за $T = 25^\circ\text{C}$

Правильність моделі побічно підтверджено збіжністю розрахованих pK_C для реакцій дисоціації карбонатної кислоти з довідковими даними ($\text{pK}_1 = 6,57\text{--}6,72$ ($\text{pK}^0 = 6,37$) та $\text{pK}_2 = 9,77\text{--}10,51$ ($\text{pK}^0 = 10,33$)), а також величин $\lg K_C$ (ІПВА), одержаних для підкислених водних розчинів натрію вольфрамату.

*Роботу виконано за підтримки Міністерства освіти і науки України
(проекти № 0116U002521, 0119U100025).*