**Лекція 2** ХНС

 Хемодинаміка Тінслі

Існує певна можливість того, що речовина, яка потрапила в н.с. переміститься від місця викиду/скиду. Шляхи розподілу речовин у н.с. наведені на рис.2.1.

Введення речовини

Рис. 2.1. Шляхи поширення речовин у навколишньому природному середовищі

(за Тінслі)

Речовини можуть мігрувати:

* У межах окремої сфери. Міграція речовини в межах однієї сфери визначається тільки характеристиками процесу в одній сфері.
* Між сферами. Роль хімічних властивостей речовини значно зростає, оскільки саме при цьому частіше відбуваються хімічні перетворення.

Індивідуальні фізико-хімічні властивості речовини мають величезне значення під час їх переміщення через різноманітні поверхні розподілу фаз.

**ВОДА ↔ПОВІТРЯ**. На цій межі поділу має значення насамперед тиск парів та її розчинність у воді.

**ВОДА ↔ГРУНТ**. Переміщення речовини через цю межує за суттю процес адсорбції-десорбції, який залежить від розчинності речовини у воді, і від чинників, що визначають її адсорбцію на твердій фазі. При цьому важливу роль відіграють розчинність, коефіцієнт розподілу і теплота розчинення даної речовини.

**Сорбція** – від латинського Sorbeo – це поглинання газів, парів або твердих речовин з розчинів твердими тілами або рідинами. **Адсорбцією** називається поглинання газів або розчинених речовин з розчину *поверхнею* твердого тіла або рідини під впливом молекулярних сил поверхневого шару адсорбенту.. **Адсорбентом** називають високодисперсні природні або штучні матеріали з великою поверхнею, на якій відбувається адсорбція речовин з газів або рідин, що контактують з нею. Компонент, що поглинається, який вміщується в суцільному середовищі ([газі](https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%93%D0%B0%D0%B7), [рідині](https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%A0%D1%96%D0%B4%D0%B8%D0%BD%D0%B0)), називають [адсорбтивом](https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%90%D0%B4%D1%81%D0%BE%D1%80%D0%B1%D1%82%D0%B8%D0%B2), а той що вміщується в [адсорбенті](https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%90%D0%B4%D1%81%D0%BE%D1%80%D0%B1%D0%B5%D0%BD%D1%82) — [адсорбатом](https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%90%D0%B4%D1%81%D0%BE%D1%80%D0%B1%D0%B0%D1%82). **Абсорбція** - це поглинання речовини *усім об’ємом* газу або рідини. **Десорбція** – це процес, обернений до сорбції.

**ГРУНТ↔ПОВІТРЯ**. Найбільш складна система, оскільки в ній необхідно враховувати адсорбцію речовини на поверхні ґрунту, тиск її парів. А також присутність води, що впливає на переміщення речовини до межі розподілу фаз.

**ФІЗИЧНА СИСИТЕМА ↔ БІОЛОГІЧНА СИСТЕМА**

Межа розподілу відрізняється від попередніх тим, що речовина проходить через мембрану на поверхні клітини.

Адсорбція

 Межа розподілу ВОДА↔ГРУНТ

Міграція через грунт

Випаровування

 Міграція з грунту або води в повітря

Десорбція

***Хемодинаміка*** – визначає розподіл речовини в навколишньому природному середовищі на основі її хімічних властивостей.

Розглянемо основні **фізико-хімічні властивості речовин**

1) РОЗЧИННІСТЬ - це здатність [речовини](https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%A0%D0%B5%D1%87%D0%BE%D0%B2%D0%B8%D0%BD%D0%B0) утворювати з іншими речовинами гомогенні системи — [розчини](https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%A0%D0%BE%D0%B7%D1%87%D0%B8%D0%BD), в яких речовина знаходиться у вигляді окремих атомів, іонів, молекул або часток. Розрізняють водні і неводні розчини. Для систем у н.п.с. характерні водні розчини. Характерною властивістю розчинів є ***сольватація*** – електростатична взаємодія між частками (іонами, молекулами) розчиненої речовини і розчинником. У випадку водних розчинів – взаємодія з диполями води – ***гідратація***. Утворені в результаті сольватації (гідратації) молекулярні агрегати називаються ***сольватами*** (***гідратами*** у випадку водних розчинів). Процес розчинення залежить від співвідношення між силами, що утворюють молекули або іони в твердому тілі, а також від сольватуючої спроможності (здатності утворювати сольвати) конкретного розчинника.

2) РІВНОВАЖНИЙ ТИСК ПАРІВ або газу

Його можна уявити як розчинність речовини в повітрі. Тиск парів рідини або твердої речовини є тиском газу, що знаходиться в повітрі при даній температурі в рівновазі з рідиною або твердою речовиною.

Термодинамічний вираз, що описує цю рівновагу – це рівняння Клаузіса- Клапейрона:

*р –* тиск пари;

*T* – абсолютна температура, ⁰К;

*ΔH –* теплота випаровування речовини

*R –* універсальна газова стала.

В інтегральній формі рівняння можна записати як:

*A* – константа інтегрування, а , ΔH вважають постійною.

Оскільки співвідношення (2.2) є лінійним лише у відносно вузькому інтервалі температур, пропонувалися і інші рівняння, наприклад рівняння Антіона:

де *А*,*В*,*С* – постійні характеристики конкретної речовини і даного температурного інтервалу, а *t* – температура в ⁰C.

Під час опису властивостей пароподібної фази часто користуються терміном *густина парів.* Густина парів пов’язана з їх рівноважним тиском рівнянням стану газу:

де *р*0 -рівноважний тиск парів; *V* – об’єм; *n* – число молей, причому *m* – маса речовини; *M* – молекулярна маса. Тоді можна рівняння (2.4) записати як

Якщо об’єм *V*=1л, то густина парів

*d*0 – густина парів; *R*=0.082 універсальна газова стала

3)КОЕФІЦІЄНТ РОЗПОДІЛУ

Це відношення концентрацій якоїсь речовини, що складається з простих молекул, у двох фазах, що знаходяться в рівновазі; має постійне значення:

Співвідношення (2.7) отримане в припущенні, що в системі немає помітних взаємодій між молекулами розчиненої речовини і розчинником або сильних специфічних взаємодій між розчиненою речовиною і розчинником. Концентрацію виражають в одиницях маси на одиницю об’єму; зазвичай С1 відноситься до водної фази, а С2 – до неводної.

«*Р*» називається коефіцієнтом розподілу або розподільним відношенням. Визначення коефіцієнта ускладняється наявністю інших рівноважних процесів. В цьому випадку говорять про уявний коефіцієнт розподілу «π».

Коефіцієнт розподілу «π» є *адитивним*, тобто для даної молекули його можна розглядати як суму її складових.

З урахуванням цієї закономірності величина π для різноманітних радикалів або груп визначається за формулою

Розглянемо як приклад визначення коефіцієнтів розподілу для бензолу, толуолу, бензойної кислоти та їх хлорпохідних. Спостерігається збільшення коефіцієнтів на 0,67 – 0,78; в середньому на 0,71. Тобто можна зробити висновок, що уявний коефіцієнт розподілення для хлору дорівнює 0,71. Основні показники наведені на рис.2.2.

 Бензол толуол бензойна кислота

 СН3 СООН

 

lg PН 2,13 2,69 1,87

 Хлорбензол хлортолуол хлорбензойна кислота

 СН3 СООН

 

 Cl Cl Cl

lg PX 2,84 3,33 2,65

πCl +0.71 +0.64 +0.78

πCl=(0.71+0.64+0.78)/3=0.71

рис.2.2

октанол-вода рідше гексан-вода

4) КОНСТАНТА КИСЛОТНОСТІ. Поведінка слабких кислот і лугів залежить від ступеня дисоціації їх молекул. Кількість молекул, що дисоціюють, є функцією константи кислотності рК конкретної сполуки і рН середовища, в якому вони знаходяться.

Розглянемо дисоціацію карбонової кислоти RCOOH

RCOOH↔RCOO⁻ + H+

Константа дисоціації дорівнює відношенню добутку рівноважних концентрацій іонів, на які продисоціював електроліт, до рівноважної концентрації молекул, що не продисоціювали

Константа кислотності дорівнює від’ємному десятковому логарифму константи дисоціації

Для визначення рН розглянемо дисоціацію молекул води

Н2О↔Н+ +ОН⁻

Концентрація іонів Н+ і ОН⁻ в нейтральному середовищі дорівнює

[H+]=[OH⁻]=10-7

Перемножимо концентрації і візьмемо від’ємний логарифм

10-7·10-7=10-14; -lg10-14=14 0<pH<14

рН – це від’ємний логарифм концентрації іонів водню

рН=-lg[H+]

pH=7 для нейтрального середовища; рН<7 – кисле середовище; рН>7 – лужне середовище;

Поведінку речовин в природному середовищі в залежності від співвідношення рК і рН можна узагальнити таким чином: (табл.2.1)

Таблиця 2.1

Узагальнення поведінки речовин в навколишньому середовищі

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Співвідношення параметрів | Форма | Переважна речовина |
| рН>рК | КислотаЛуг  | RCOO⁻RNH2 |
| рН<рК | КислотаЛуг  | RCOOHRNH3+ |

Перехід однієї форми в іншу в основному відбувається в діапазоні зміни рН на 3 одиниці від значення рН=рК