Міністерство освіти і науки України
Київський національний університет ім. Тараса Шевченка
Хімічний факультет, кафедра аналітичної хімії

Київська Конференція
з Аналітичної Хімії
Сучасні Тенденції
2017

Тези доповідей
Київської Конференції з аналітичної хімії
Сучасні Тенденції
2017

Book of Abstracts
Kyiv Conference on analytical chemistry
Modern Trends
2017

18-21 жовтня 2017, Київ

Міністерство освіти і науки України
Київський національний університет імені Тараса Шевченка
Хімічний факультет, кафедра аналітичної хімії

Тези доповідей
Київської Конференції з аналітичної хімії
Сучасні Тенденції
2017

Book of Abstracts
Kyiv Conference on analytical chemistry
Modern Trends
2017

18–21 жовтня 2017, Київ

БУФЕРНІ РОЗЧИНИ НА ОСНОВІ ГЛІЦИНУ

Р.Є. Хома[1,2], Л.С. Будько[1], Чеботарьов О.М.[1]

[1]Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, вул. Дворянська, 2, 65082, Одеса; email: rek@onu.edu.ua
[2]Фізико-хімічний інститут захисту навколишнього середовища і людини МОН України та НАН України, вул. Преображенська 3, 65082, Одеса

Амінометанкарбонова кислота (гліцин, Gly), її похідні широко використовується в хімічному аналізі, біохімічних дослідженнях у складі буферних розчинів для підтримки pH [1, 2], а також Gly застосовується як добавка, що поліпшує кінетичні та захисні властивості хемосорбентів кислих газів (CO_2 та SO_2) [3]. Однак, в літературі не знайдені дані про буферну ємність зазначених розчинів та її залежність від температури. Дана робота виконана з метою встановлення буферної ємності розчинів Gly – NaOH – H_2O, Gly – $HOCH_2CH_2NH_2$ (MEA) – H_2O.

Для розчинів Gly – NaOH – H_2O та Gly – $HOCH_2CH_2NH_2$ – H_2O експериментально встановлено границі pH буферної дії, зроблена оцінка буферної ємності вказаних систем при 293 – 313 K.

На основі даних pH-метричного титрування, з використанням математичної моделі, що враховує закон діючих мас (1), (2), матеріальний баланс за Gly (3) і умову електронейтральності (4), розрахований іон-молекулярний склад системи Gly – NaOH – H_2O.

Згідно з отриманими даними Gly у водних розчинах існує при

$$H_3\overset{+}{N}CH_2COO^- \rightleftarrows NH_2CH_2COO^-.- + H^+, \quad (1)$$

$$H_2O \rightleftarrows H^+ + OH^- \quad (2)$$

$$Q_{Gly} = [\overset{+}{N}H_3CH_2COO^-] + [NH_2CH_2COO^-] \quad (3)$$

$$[NH_2CH_2COO^-] + [OH^-] = [H^+] + [Na^+] \quad (4)$$

$C_{NaOH}/Q_{Gly} < 0,5$ переважно у вигляді цвіттер-іону. Вміст аніону $NH_2CH_2COO^-$ (N_1) прямо пропорційний відношенню C_{NaOH}/Q_{Gly} відповідно до рівняння (5):

$$N_1 = A_i \cdot C_{NaOH}/Q_{Gly} \quad (5)$$

Для порівняння кислотно-основних властивостей Gly при різних температурах були обрані значення їх pK_a в ізоелектричній точці при $\frac{[NH_2CH_2COO^-]}{[\overset{+}{N}H_3CH_2COO^-]} = 1$ ($m = 4,94\times10^{-3}$ M). З підвищенням температури кислотно-основна дисоціація Gly (рівняння 1) в ізоелектричній точці підвищується.

На основі оцінки границь pH буферної дії систем Gly – NaOH – H_2O та Gly – $HOCH_2CH_2NH_2$ – H_2O (таблиця) виявлено, що за допомогою Gly можна підтримувати кислотність середовища в області фізіологічних значень pH (6,8 ¸ 7,8) при 308 – 313 K.

Згідно отриманим даним залежності $C_{NaOH} = f$ (pH) та $C_{MEA} = f$ (pH) описуються рівнянням виду (6) і (7), відповідно.

$$C_{NaOH} = A_i + B_i \times pH + C_i \times pH^2 \quad (6)$$

$$C_{MEA} = A_i + B_i \cdot pH + C_i \cdot pH^2 \quad (7)$$

Таблиця. Кислотно-основні характеристики водних розчинів амінометанкарбонової кислоти при 293 – 313 К

Т, К	pK_a^*	$pH_{буф}^{**}$	
		Gly – NaOH – H_2O	Gly – $HOCH_2CH_2NH_2$ – H_2O
293	10,15	9,25 ¸ 10,60	8,85 ¸ 9,95
298	9,94	8,90 ¸ 10,42	8,95 ¸ 9,90
303	9,58	9,10 ¸ 10,55	8,50 ¸ 9,65
308	8,75	7,40 ¸ 8,94	7,20 ¸ 7,85
313	7,92	7,10 ¸ 8,30	6,65 ¸ 6,90

*значення pK_a розраховано в ізоелектричній точці

** $pH_{буф.}$ – інтервал pH буферної дії.

Слід зазначити, що для вивчених систем константи рівнянь (6) та (7) A_i, B_i та C_i пов'язані між собою залежностями (8) – (14).

$$\mathbf{C_{NaOH}/Q_{Gly} \le 1{,}0}$$

$$B_i = -(4{,}16 \pm 0{,}48)\times 10^3 - (2{,}32 \pm 0{,}39)\times 10 \times A_i;\ r^2 = 0{,}999 \quad (8)$$

$$\mathbf{1{,}0 \le C_{NaOH}/Q_{Gly} \le 4{,}2}$$

$$B_i = -(2{,}89 \pm 1{,}09)\times 10^2 - (1{,}60 \pm 0{,}79)\times 10 \times A_i;\ r^2 = 0{,}999 \quad (9)$$

$$C_i = (3{,}03 \pm 1{,}11)\times 10^3 + (6{,}19 \pm 0{,}79)\times 10^3 \times A_i;\ r^2 = 0{,}953 \quad (10)$$

$$\mathbf{C_{MEA}/Q_{Gly} \le 1{,}0}$$

$$B_i = (5{,}36 \pm 1{,}31)\times 10^2 - (3{,}13 \pm 0{,}06)\times 10 \times A_i;\ r^2 = 0{,}999 \quad (11)$$

$$C_i = -(7{,}13 \pm 1{,}73)\times 10^3 + (2{,}42 \pm 0{,}08)\times 10^2 \times A_i;\ r^2 = 0{,}996 \quad (12)$$

$$\mathbf{1{,}0 \le C_{MEA}/Q_{Gly} \le 4{,}2}$$

$$B_i = (2{,}49 \pm 0{,}34)\times 10 - (3{,}03 \pm 0{,}04)\times 10 \times A_i;\ r^2 = 0{,}999 \quad (13)$$

$$C_i = -(1{,}27 \pm 0{,}13)\times 10^2 - (7{,}48 \pm 0{,}05)\times 10^2 \times A_i;\ r^2 = 0{,}999 \quad (14)$$

Показано, що буферну ємність систем Gly – NaOH – H_2O та Gly – $HOCH_2CH_2NH_2$ – H_2O можна варіювати в межах 1×10^{-3} ¸ 4×10^{-2} М та 5×10^{-4} ¸ 5×10^{-2} М, відповідно, змінюючи співвідношення C_{NaOH}/Q_{Gly} (C_{NaOH}/Q_{MEA}) та температуру.

Отримані дані щодо буферної ємності систем Gly – NaOH – H_2O та Gly – $HOCH_2CH_2NH_2$ – H_2O рекомендується використовувати у хімічному аналізі, мікробіологічних та біохімічних досліджень; дані щодо кислотності досліджених розчинів – при моделюванні хемосорбційних процесів уловлювання кислих газів (наприклад, SO_2).

1. *Goldberg R.N., Kishore N., Lennen R.M.*, J. Phys. Chem. Ref. Data, 2002, 31 (2), P. 231-370.
2. *Ruan J., Sun C.J., Chen F., Li Y.Q., Liu Y.P., Li Y.X.* Chromatographia, 2015, 78 (17-18), P. 1191-1199.
3. Патент України на корисну модель UA 113021, МПК B01D 39/00, *Еннан А.А., Хома Р.Є., Длубовський Р.М., Абрамова Н.М.* № u201606322, заявл. 10.06.2016, опубл. 10.01.2017, Бюл. № 1.