

Information about the authors

V.A.Filatov – postgraduate student

O.Yu.Kulyak - Candidate of Science (Pharmacy), associate professor

E.I.Kalenikova – Doctor of Science (Pharmacy), professor

УДК: 546.226-325

ФАКТОРЫ, ВЛИЯЮЩИЕ НА ТОЧНОСТЬ РАСЧЕТОВ В ХИМИИ

Юлия Дмитриевна Фомина¹, Дарья Олеговна Петрова², Татьяна Анатольевна Афанасьева³

¹⁻³ФГБОУ ВО «Уральский государственный медицинский университет»

Минздрава России, Екатеринбург, Россия

¹Klain2002@mail.ru

Аннотация

Введение. Точность расчета водородного показателя имеет большое значение для химии, медицины и фармации. Разные источники дают несколько вариантов расчета значения рН для серной кислоты. **Цель исследования** - анализ вычислений водородного показателя серной кислоты с учетом различных факторов. **Материалы и методы.** Для расчетов использовались основные теории водных растворов электролитов. **Результаты.** С помощью метода расчета были получены различные значения рН. **Обсуждение.** Полученные результаты показали, что в зависимости от различных факторов, расчетное значение рН может сильно отличаться. **Выводы.** Авторы считают, что необходимо учесть диссоциацию серной кислоты по двум ступеням, ионную силу раствора и расчетную величину коэффициента активности.

Ключевые слова: аналитические расчеты, химия

FACTORS AFFECTING THE ACCURACY OF CALCULATIONS IN CHEMISTRY

Yulia D. Fomina¹, Daria O. Petrova², Tatyana A. Afanasyeva³

¹⁻³Ural State Medical University, Yekaterinburg, Russia

¹Klain2002@mail.ru

Abstract

Introduction. The accuracy of the calculation of the hydrogen index is of great importance for chemistry, medicine and pharmacy. Different sources give several options for calculating the pH value for sulfuric acid. **The aim of the study** - to analyze the calculations of the hydrogen index of sulfuric acid taking into account various factors. **Materials and methods.** The basic theories of aqueous solutions of electrolytes were used for calculations. **Results.** Various pH values were obtained using the calculation method. **Discussion.** The results showed that, depending on various factors, the calculated pH value may vary greatly. **Conclusions.** The authors believe that it is necessary to take into account the dissociation of sulfuric acid in two stages, the ionic strength of the solution and the calculated value of the activity coefficient.

Keywords: analytical calculations, chemistry

Введение. Водородный показатель (рН) это величина, характеризующая активность или концентрацию ионов водорода в водных растворах [1]. Величина рН имеет большое значение для различных производственных процессов, при изучении свойств природных вод и возможности их применения, а также для биохимических процессов, к примеру, таких как поддержание водородного показателя крови в норме (рН=7,36 7,40) [2]. Величина водородного показателя очень важна при химическом анализе, в том числе при анализе фармацевтических препаратов. Расчет рН должен быть точным и теоретически объяснимым, чтобы снизить количество отклонений от закономерностей, которые были выведены для растворов [3].

Анализ литературы и интернет источников показал, что для такого широко применяемого вещества, как серная кислота, нет единого мнения о способах расчёта водородного показателя. Так, некоторые источники [4] предлагают считать серную кислоту электролитом, который сразу, по двум ступеням, распадается на ионы. Другие [5] учитывают распад кислоты только по первой ступени. Авторы считают, что серная кислота сильный электролит, полностью распадается на ионы по первой ступени, но по второй ступени ведет себя как электролит средней силы, что подтверждает величина её константы диссоциации $K_{дис.} = 1,15 \times 10^{-2}$.

Цель исследования - провести вычисления водородного показателя на примере серной кислоты с учетом различных факторов, проанализировать полученные результаты.

Материалы и методы. В работе использовались положения теории электролитической диссоциации, теории сильных электролитов, закон разведения Оствальда. Авторы применяли разные способы расчета водородного показателя 0,05М серной кислоты.

Результаты. При расчётах водородного показателя были использованы:

Определение водородного показателя: $pH = -\lg[H^+]$,

в том числе для сильных электролитов: $pH = -\lg a_{H^+}$

Положения теории электролитической диссоциации:

Выражение константы ионизации: $K_{иониз.} = \frac{[H^+][An^-]}{[HAn]}$,

Закон разведения Оствальда: $[H^+] = \sqrt{K^a \times C_{кислоты}}$

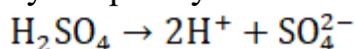
Положения теории сильных электролитов:

ионная сила раствора : $I = \frac{1}{2} \sum (C_i Z_i^2)$,

коэффициент активности: $\lg \gamma = -\frac{1}{2} Z^2 \sqrt{I}$,

активность ионов: $a = C \times \gamma$.

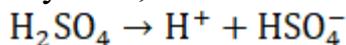
Вариант1. Расчет водородного показателя серной кислоты по суммарному уравнению диссоциации.



$$[\text{H}^+] = 2 \times C_{(\text{H}_2\text{SO}_4)} = 2 \times 0,05 = 0,1 \frac{\text{МОЛЬ}}{\text{Л}}$$

$$\text{pH} = -\lg 0,1 = 1$$

Вариант 2. Расчет водородного показателя серной кислоты по одной ступени, с учетом ионной силы раствора.



Ионная сила:

$$I = \frac{1}{2} (0,05 \times 1^2 + 0,05 \times 1^2) = 0,05$$

Коэффициент активности:

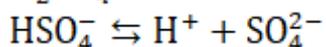
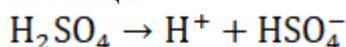
$$\gamma_{\text{табличная}} = 0,84$$

Активность иона водорода:

$$a = 0,84 \times 0,05 = 0,042 \text{ моль/л}$$

$$\text{pH} = -\lg 0,042 = 1,38$$

Вариант 3. Расчет водородного показателя серной кислоты по двум ступеням, как смесь сильной и слабой кислот, с учетом ионной силы раствора. Для определения активности использовали коэффициент активности из таблицы.



Ионная сила:

$$I = \frac{1}{2} (0,05 \times 1^2 + 0,05 \times 1^2) = 0,05$$

$$\gamma_{\text{табличная}} = 0,84$$

$$a = 0,84 \times 0,05 = 0,042 \text{ моль/л}$$

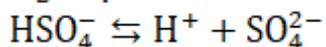
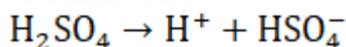
Константа ионизации:

$$K_{\text{иониз.}} = \frac{[\text{H}^+][\text{SO}_4^{2-}]}{[\text{HSO}_4^-]}$$

$$[\text{H}^+] = \sqrt{1,15 \times 10^{-2} \times 0,05} = 0,024 \frac{\text{МОЛЬ}}{\text{Л}}$$

$$\text{pH} = -\lg(0,042 + 0,024) = 1,18$$

Вариант 4. Расчет водородного показателя серной кислоты по двум ступеням, как смесь сильной и слабой кислот, с учетом ионной силы раствора. Для определения активности использовали формулу для расчета коэффициента активности.



$$I = \frac{1}{2} (0,05 \times 1^2 + 0,05 \times 1^2) = 0,05$$

$$\lg \gamma = -\frac{1}{2} \times 1^2 \times \sqrt{0,05} = -0,112$$

$$\gamma = 10^{-0,112} = 0,7727 \approx 0,77$$

$$a = 0,77 \times 0,05 = 0,038 \text{ моль/л}$$

Константа ионизации

$$K_{\text{иониз.}} = \frac{[\text{H}^+][\text{SO}_4^{2-}]}{[\text{HSO}_4^-]}$$

$$[\text{H}^+] = \sqrt{1,15 \times 10^{-2} \times 0,05} = 0,024 \frac{\text{МОЛЬ}}{\text{Л}}$$

$$\text{pH} = -\lg(0,038 + 0,024) = 1,21$$

Обсуждение. Результаты работы представлены на рис. 1.



Рис. 1 Зависимость pH от способа расчета

Полученные результаты показывают отличия величины водородного показателя, в зависимости от варианта решения. Разность значений составила 0,38 единицы. По мнению авторов, первый способ даёт завышенную величину концентрации ионов водорода, так как не учтены ионная сила раствора и неполный распад гидросульфат ионов. Второй способ расчета даёт заниженную величину концентрации ионов водорода, так как не учтена их концентрация, которая образуется при распаде по второй ступени. Коэффициент активности это отношение активности вещества в данном растворе к его концентрации. Табличное значение коэффициента активности определяется по ближайшему значению ионной силы, поэтому авторы предлагают вести расчеты по уравнению в соответствии с теорией Дебая-Хюккеля.

Выводы. Точность расчетов значения водородного показателя зависит от различных факторов: от разной трактовки процессов диссоциации серной кислоты, учета ионной силы раствора и применения значения коэффициента активности табличного или расчетного. Авторы считают, что наиболее точное значение можно получить, если считать, что диссоциация серной кислоты идёт по двум ступеням, полный распад по первой ступени, неполный по второй. Для расчета активности использовать не табличное, а расчетное значение коэффициента активности.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Т.А. Афанасьева, В.Д. Тхай. Растворы электролитов // Екатеринбург, УГМУ, 2018 г. С. 17.
2. Е.С. Северин. Биохимия: Учебник.– М.: ГЭОТАР-Медиа, 2008.
3. Кузнецов В.В. Определение pH // Соросовский образовательный журнал, 2001, №4 – С. 45.

4. В.В. Вайтнер, Е.А. Никоненко, учебное пособие по химии // Екатеринбург, УрФУ, 2016 г. – С. 61-62.
5. Зайцев, О. С. Химия. Современный краткий курс. Учебное пособие.//М.:Агар, 1997.– С. 312-319.

Сведения об авторах

Ю.Д. Фомина – студент

Д.О. Петрова – студент

Т.А. Афанасьева - старший преподаватель

Information about the authors

Yu.D. Fomina - student

D.O. Petrova - student

T.A. Afanasyeva - Senior Lecturer

УДК: 615.12

ОЦЕНКА ВНЕДРЕНИЯ ЦИФРОВЫХ ИНСТРУМЕНТОВ БРЕНД-МЕНЕДЖМЕНТА ДЛЯ ОТДЕЛЬНЫХ ГРУПП ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ

Виктория Сергеевна Шабалдина¹, Елена Сергеевна Топорова², Елена Сергеевна Ершова³, Алексей Львович Петров⁴, Галина Николаевна Андрианова⁵

¹⁻⁵ФГБОУ ВО «Уральский государственный медицинский университет» Минздрава России, Екатеринбург, Россия

¹v.s.shabaldina@mail.ru

Аннотация

Введение. Цифровые инструменты бренд-менеджмента - одна из рутинных технологий продвижения товаров на современных потребительских рынках.

Цель исследования - оценить степень проникновения цифровых инструментов бренд-менеджмента в программы продвижения отдельных групп ЛП.

Материалы и методы. Проводился скрининг ассортиментных групп, имеющих специфику технологий продвижения. Для выявления индикаторных групп проводили интервьюирование 5 специалистов провизоров и фармацевтов, осуществляющих практическую профессиональную деятельность. **Результаты.**

Проводили контент-анализ и структурный анализ ассортимента исследуемых групп с использованием ФИС ГРЛС, ФИС «Абонент». По итогам анализа исследуемых групп была сформирована эмпирическая сводная ассортиментная матрица. **Обсуждение.**

Нами показано, что цифровой бренд-менеджмент ЛП из разных ФТГ характеризуется специфическим набором инструментов и площадок продвижения, при этом используются сквозные площадки маркетинга (Видадь, РЛС) и специфические ресурсы (собственный сайт продукта). **Выводы.** В статье представлен анализ используемых инструментов цифрового брендинга с учетом ассортиментной и нозологической специфики, показана различная степень влияния формализованной технологии фармацевтического консультирования в исследуемых ассортиментных группах.