

Термины, обозначения, уравнения

В литературе по вопросам адсорбции металлов в почвах и горных породах встречаются весьма разнообразные обозначения и названия одних и тех же величин и понятий. С целью унификации изложения во всех рефератах для каждой величины выбрано единственное обозначение (или аббревиатура), независимо от использованных в рассмотренных источниках (но оригинальные обозначения приводятся). Единицы измерения, а также номера использованных таблиц и рисунков даются по оригиналу. В {} – комментарии и дополнения составителя.

В представленной ниже **таблице величин** приводятся принятое в системе обозначение, русское название, английское название, тип единицы измерения (например, масса объем⁻¹), а также некоторые другие обозначения, встречающиеся в литературе. В **таблице терминов** приведены выбранное наименование (аббревиатура), русское название, английская аббревиатура и английское название. Отдельно представлены **классификация форм изотерм** по Джайлсу, **уравнения изотерм** адсорбции и формулы **расчета коэффициента распределения** по данным о концентрации или радиоактивности металла в растворе или по относительной скорости миграции. Соответствующие обозначения величин и терминов, названия типов форм и номера уравнений используются в рефератах без дополнительных пояснений.

Обозначения и названия величин

Обозначение	Название	Английское название	Тип единицы измерения	Другие обозначения
<i>Переменные и параметры уравнений адсорбции</i>				
c	Равновесная концентрация компонента в жидкой фазе	concentration in liquid	(масса компонента) \times (объем раствора) ⁻¹	$C, C_e, C_f, C_L, C_m, C_w, m, [Me]_w$
q	Равновесное содержание компонента в твердой фазе	concentration in solid	(масса компонента) \times (масса сорбента) ⁻¹	$C_s, C_{\text{полн}}, [Me]_s, Q, S, x/m, X/m, x$
K_d	Коэффициент распределения	distribution coefficient, partition coefficient	(объем раствора) \times (масса сорбента) ⁻¹	K, K_D, κ
Q_{max}	Максимум адсорбции, емкость монослоя Ленгмюра, сорбционная емкость	adsorption maximum, Langmuir monolayer capacity	(масса компонента) \times (масса сорбента) ⁻¹	$a, a_{\text{max}}, b, C_s^m, C_{\infty}, d, (x/m)_{\text{max}}, K_m, Q_m, q_m, \Gamma_m, \Gamma_{\text{max}}$
K_L	Коэффициент связывания Ленгмюра	Langmuir coefficient, bonding constant	(объем раствора) \times (масса компонента) ⁻¹	b, B_L, K, k, L
K_F	Коэффициент адсорбции Фрейндлиха		(объем раствора) ^{1/n} \times (масса сорбента) ⁻¹ \times (масса компонента) ^{1-1/n}	K, K_d
$1/n$	Показатель степени в уравнении Фрейндлиха	power, exponent	–	α, b, n, β
<i>Характеристики водной и твердой фаз</i>				
I	Ионная сила	ionic strength	моль л ⁻¹	
ЕКО	Емкость катионного обмена	CEC, cation exchange capacity	(моль или экв катиона) \times (масса сорбента) ⁻¹	
ПП	Потери при прокаливании	Loss on ignition	масса \times (масса породы) ⁻¹	
ПЭ	Проводимость электролита	EC, electrical conductivity	См м ⁻¹	
УПП	Удельная площадь поверхности	SSA, specific surface area	(длина) ² \times (масса сорбента) ⁻¹	
ВЕТ	(Удельная) площадь только внешней поверхности	Brunauer-Emmett-Teller surface area	(длина) ² \times (масса сорбента) ⁻¹	
<i>Индексы для содержания металла (Me)</i>				
$Me_{d, \text{CVD}}$	Дитионит-растворимый металл (Fe_d, Mn_d, Al_d) в твердой фазе	dithionite-soluble metal	(масса металла) \times (масса твердой фазы) ⁻¹	
Me_o	Оксалат-растворимый металл (Fe_o, Mn_o) в твердой фазе	oxalate-soluble metal	"	
$Me_{\text{общ}}$	Общее содержание металла в твердой фазе	total metal concentration	"	

Термины статистики (анализ корреляций, уравнения регрессии)

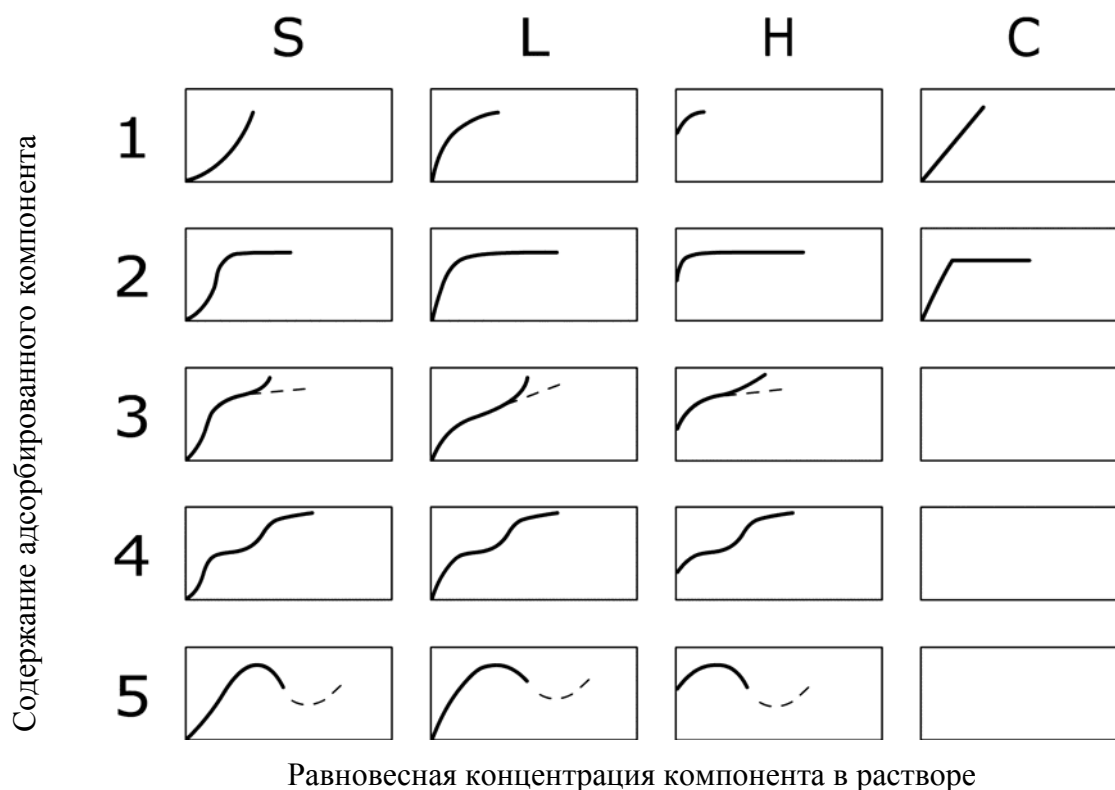
Обозначение	Названия, пояснения
<i>N</i>	Объем выборки (набора данных); число значений независимой переменной
<i>r</i>	Коэффициент корреляции; $0 \leq r \leq 1$; мера линейной зависимости переменных между собой: $r = 1$ – полная зависимость, $r = 0$ – нет зависимости (корреляции)
<i>R</i>	Коэффициент множественной корреляции; $0 \leq R \leq 1$; характеризует точность подгонки уравнения регрессии к имеющимся данным: уравнение объясняет долю R^2 изменчивости переменных
<i>p</i>	Уровень значимости; $0 \leq p \leq 1$; мера ненадежности корреляции (возможности ошибки ложной связи); характеризует репрезентативность выборки, т.е. правомерность переноса результата на другие объекты $p = 1$ – отсутствие значимости; $p = 0$ – абсолютная значимость
*	При значении коэффициента корреляции обозначает уровень значимости $p < 0.05$
**	Уровень значимости $p < 0.01$
***	Уровень значимости $p < 0.001$
н.з.	Незначимо
SE	Стандартная ошибка
Сокращения	
н.о.	Не определялось

Обозначения и переводы терминов

Русское		Английское	
Сокращение	Название	Сокращение	Название
–	Цитрат-бикарбонат-дитионит	CBD	Citrate-bicarbonate-dithionite
ДТПА	Диэтиленстриаминпентауксусная кислота	ДТПА	Diethylenetriaminepentaacetic acid
ЭДТА	Этилендиаминтетрауксусная кислота	EDTA	Ethylenediaminetetraacetic acid
НТА	Нитрилотриуксусная кислота	NTA	Nitrilotriacetic acid
ГК	Гуминовая кислота	HA	Humic acid
ФК	Фульвокислота	FA	Fulvic acid
ТНЗ	Точка нулевого заряда	PZC, ZPC	Point of zero charge, zero point charge
ОВ	Органическое вещество	OM	Organic matter
РОВ	Растворенное органическое вещество	DOM	Dissolved organic matter
ОУ	Органический углерод	OC	Organic carbon
ООУ	Общий органический углерод	TOC	Total organic carbon
РОУ	Растворенный органический углерод	DOC	Dissolved organic carbon
ОСВ	Осадок сточных вод, отстой	SS	Sewage sludge

Классификация форм изотермы адсорбции

Классификация форм изотермы адсорбции предложена в 1960 г. Ч. Джайлсом¹ и используется многими авторами вплоть до настоящего времени. Это феноменологическая классификация для описания данных, которая не объясняет, какие процессы ведут к различным формам изотермы.



Классификация форм изотерм адсорбции (q от c) по Джайлсу

Тип S назван по форме кривой: вогнутая, потом выпуклая. **Тип L** (Ленгмюра) – наиболее распространен, эта кривая выпукла, может асимптотически стремиться к максимуму (кривая насыщения). **Тип H** (high) – сорбция с высоким сродством, на начальном участке кривая почти вертикальна. **Тип C** (constant) – линейная изотерма (с постоянным распределением). **Номер** в типе (например, L-4) связан с последующим изменением формы кривой при более высоких концентрациях (обусловленным «включением» новых механизмов адсорбции). Тип с номером 5 обычно называют **Max**.

Уравнения изотерм адсорбции

В принятых обозначениях изотермы адсорбции представляются следующими уравнениями.

Линейная, или изотерма Генри (тип C):

$$q = K_d c . \tag{1}$$

¹ См. например: Адсорбция из растворов на поверхностях твердых тел / Ч. Джайлс, Б. Инграм, Дж. Клуни и др.; Ред. Г. Парфит, К. Рочестер: Пер. с англ. – М.: Мир, 1986. – 488 с.

Изотерма Ленгмюра (тип L, асимптотически стремится к максимуму):

$$q = Q_{\max} \frac{K_L c}{1 + K_L c} = Q_{\max} \left(1 - \frac{1}{1 + K_L c}\right) \quad (2)$$

или в линейных формах

$$\frac{c}{q} = \frac{c}{Q_{\max}} + \frac{1}{Q_{\max} K_L} \quad (3)$$

или

$$\frac{q}{c} = K_L (Q_{\max} - q) \quad (4)$$

Изотерма Фрейндлиха (тип Н или S, возрастает неограниченно):

$$q = K_F c^{1/n} \quad (5)$$

или в линейной форме

$$\log q = \log K_F + 1/n \log c \quad (6)$$

Расчет сорбированного количества и коэффициента распределения

Коэффициент распределения можно рассчитать по данным измерений концентрации или радиоактивности в растворе:

$$K_d = \frac{c_0 - c}{c} \cdot \frac{V}{m} = \frac{a_0 - a}{a} \cdot \frac{V}{m}, \quad (7)$$

где c_0 (a_0) – исходная концентрация (активность), c (a) – равновесная концентрация (активность), V – объем водной фазы, m – масса сорбента.

Аналогично, сорбированное количество, q , можно получить по формулам:

$$q = (c_0 - c) \cdot \frac{V}{m} = \frac{a_0 - a}{a} \cdot c \cdot \frac{V}{m} = \frac{a_0 - a}{a_0} \cdot c_0 \cdot \frac{V}{m} \quad (8)$$

Коэффициент распределения в водовмещающих породах можно также рассчитать по *уравнению замедления*:

$$R = 1 + \rho K_d / \theta, \quad (9)$$

где ρ – объемная плотность породы, θ – эффективная пористость породы (безразмерная), R – коэффициент замедления (безразмерный), равный отношению скорости движения воды к скорости миграции компонента ($R \geq 1$). В ненасыщенной зоне вместо пористости породы используется объемное содержание влаги.