

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ФИО: Смирнов Сергей Николаевич

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Должность: врио ректора

Дата подписания: 09.08.2023 12:27:00

Уникальный программный ключ:

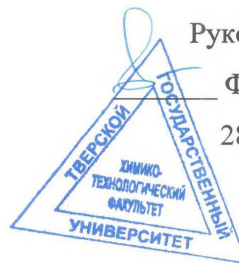
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

28 апреля 2021 г.



Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)

## Математическое моделирование химических равновесий

### Направление подготовки

04.03.01 Химия

### Направленность (профиль)

Перспективные материалы: синтез и анализ

Для студентов 3 курса очной формы обучения

Составитель: к.х.н., доцент Веселов И.Н. \_\_\_\_\_

Тверь, 2021

## **I. Аннотация**

### **1. Цель и задачи дисциплины:**

*Цель* дисциплины: подготовка специалистов, владеющих теоретическими основами и практическими приемами математического моделирования химических равновесий.

Современный уровень развития электронно-вычислительной техники позволяет обрабатывать большой объем результатов физико-химического эксперимента, что создает условия для математического моделирования природы.

Метод математического моделирования стал наиболее фундаментальным методом кибернетики — науки об общих законах переработки информации в сложных системах, например, химических. По своей значимости этот метод сравним с экспериментально-наблюдательным и абстрактно-логическим методами. Построение адекватной модели объекта позволяет выработать рекомендации по управлению процессом и условиям проведения реального эксперимента. Совокупность вычислительных методов, алгоритмов решения этих задач для каждой области науки специфична. Поэтому и выделяется раздел математического моделирования в химии. Метод математического моделирования сложных равновесии на основе законов действующих масс, сохранения вещества и заряда, методов математической статистики и планирования эксперимента, современных вычислительных алгоритмов, является важнейшим разделом образовательной подготовки специалиста-аналитика, в значительной степени определяющим его потенциальные возможности и перспективы роста в избранной области. Кроме этого изучение настоящего курса необходимо в связи с актуальной задачей широкого внедрения ЭВМ в научно-исследовательскую практику химии.

*Задачи* освоения дисциплины: подготовка студентов, умеющими реализовать возможности, заложенные программное обеспечение для метода математического моделирования химических равновесий, умеющих применять этот метод к реальным химическим системам.

### **2. Место дисциплины в структуре ООП**

Учебная дисциплина «Математическое моделирование химических равновесий» входит в Элективные дисциплины 1 Части, формируемой участниками образовательных отношений Блока 1. «Дисциплины» учебного плана.

Дисциплина закладывает знания для подготовки выпускной работы, производственной практики, самостоятельной научной работы. Дисциплина непосредственно связана с дисциплинами «Неорганическая химия», «Аналитическая химия», «Физическая химия» «Математика».

### **3. Объем дисциплины: 3 зачетные единицы, 108 академических часов, в том числе:**

**контактная аудиторная работа:** лекции -18 часов, лабораторные работы - 36 часов;

**контактная внеаудиторная работа:** контроль самостоятельной работы – 10 часов;

**самостоятельная работа:** 44 часа.

**4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы**

<b>Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)</b>	<b>Планируемые результаты обучения по дисциплине</b>
ПК-1 Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации	ПК-1.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР ПК-1.2 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР ПК-1.3 Готовит объекты исследования
ПК-2 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы	ПК-2.1 Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных) ПК-2.2 Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)

**5. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения:**  
зачет в 6-м семестре.

**6. Язык преподавания русский.**

**II. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий**

Учебная программа – наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)		Самостоятельная работа (час.)	Контроль самостоятель ной работы
		Лекции	Практические (лабораторные) работы		
1. Введение	1	1	-	-	
Тема 2. Математическое моделирование химических равновесий	16	2	6	7	1
Тема 3. Компьютерная программа для метода математического моделирования равновесий RSS.XLS	17	3	6	7	1
Тема 4. Моделирование кислотно-основных равновесий	18	3	6	7	2
Тема 5. Моделирование равновесий комплексобразова ния	18	3	6	7	2
Тема 6. Моделирование окислительно- восстановительных равновесий	18	3	6	7	2
Тема 7. Моделирование комбинированных химических равновесий	20	3	6	9	2
<b>Итого</b>	<b>108</b>	<b>18</b>	<b>36</b>	<b>44</b>	<b>10</b>

**III. Образовательные технологии**

Учебная программа – наименование разделов и	Вид занятия	Образовательные технологии
--	-------------	----------------------------

тем (в строгом соответствии с разделом II РПД)		
1. Введение	Лекция,	Лекция, дискуссия, активизация творческой деятельности
Тема 2. Математическое моделирование химических равновесий	Лекция, лабораторная работа в химической лаборатории	Лекция, дискуссия, активизация творческой деятельности, метод малых групп, подготовка и реализация лабораторных работ и интерпретация результатов
Тема 3. Компьютерная программа для метода математического моделирования равновесий RSS.XLS	Лекция, лабораторная работа в химической лаборатории	Лекция, дискуссия, активизация творческой деятельности, метод малых групп, подготовка и реализация лабораторных работ и интерпретация результатов
Тема 4. Моделирование кислотно-основных равновесий	Лекция, лабораторная работа в химической лаборатории	Лекция, дискуссия, активизация творческой деятельности, метод малых групп, подготовка и реализация лабораторных работ и интерпретация результатов
Тема 5. Моделирование равновесий комплексообразования	Лекция, лабораторная работа в химической лаборатории	Лекция, дискуссия, активизация творческой деятельности, метод малых групп, подготовка и реализация лабораторных работ и интерпретация результатов
Тема 6. Моделирование окислительно-восстановительных равновесий	Лекция, лабораторная работа в химической лаборатории	Лекция, дискуссия, активизация творческой деятельности, метод малых групп, подготовка и реализация лабораторных работ и интерпретация результатов

Тема 7. Моделирование комбинированных химических равновесий	Лекция, лабораторная работа в химической лаборатории	Лекция, дискуссия, активизация творческой деятельности, метод малых групп, подготовка и реализация лабораторных работ и интерпретация результатов
---	--	---

#### IV. Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации

##### Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции ПК-1

Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации

Этап формирования компетенции, в котором участвует дисциплина	Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков (2-3 примера)	Показатели и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания
ПК-1.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР	<p><b>Кейс</b></p> <p><b>1.</b> Смешали 50,0 мл раствора NaOH, 50,0 мл раствора лимонной кислоты (<math>H_3Cit</math>) и 20,0 мл раствора <math>CaCl_2</math>. Какова величина <math>pCa</math>? Учитывать образование комплексов: <math>CaCit</math>, <math>Ca(Hcit)</math>, <math>CaOH</math> (заряды опущены). <math>C(NaOH) = 0,0563</math> М, <math>C(H_3Cit) = 0,0385</math> М Рассчитать диапазон pH, в котором доминирует комплекс <math>CaCit</math> При решении использовать специализированную программу <b>RSS.EXL</b> все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр. Соотношение <math>Ca : Cit</math></p>	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2 балла; • Имеется верное решение только части задания – 1 балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»</p>

	<p>принять в соответствии с условием задачи.</p> <p><b>2.</b>  Построить кривую титрования (в координатах <math>V(\text{CaCl}_2)</math>-<math>p\text{Ca}</math>) 50,0 мл раствора тетранатриевой соли этилендиаминтетрауксусной кислоты (<math>\text{Na}_4\text{L}</math>) и 10,0 мл раствора <math>\text{HCl}</math> - раствором <math>\text{CaCl}_2</math>. Дискретность добавления титранта – 1,0 мл. Всего на кривой не менее 100 точек. Учитывать увеличение объема титруемой смеси вследствие добавления титранта. Учитывать образование комплексов: <math>\text{CaL}</math>, <math>\text{Ca}(\text{HL})</math>, <math>\text{CaOH}</math> (заряды опущены). <math>C(\text{CaCl}_2) = 0,0270 \text{ M}</math>, <math>C(\text{Na}_4\text{L}) = 0,0302 \text{ M}</math>  Рассчитать диапазон <math>p\text{H}</math>, в котором доминирует комплекс <math>\text{CaL}</math>  При решении использовать специализированную программу <code>RSS.EXL</code> все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр. Соотношение <math>\text{Ca} : \text{L}</math> принять в соответствии с условием задачи.</p>	
<p>ПК-1.2 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР</p>	<p><b>1.</b>  Смешали 50,0 мл раствора <math>\text{NaOH}</math>, 50,0 мл раствора лимонной кислоты (<math>\text{H}_3\text{Cit}</math>) и 20,0 мл раствора <math>\text{CaCl}_2</math>. Какова величина <math>p\text{Ca}</math>? Учитывать образование комплексов: <math>\text{CaCit}</math>, <math>\text{Ca}(\text{Hcit})</math>, <math>\text{CaOH}</math> (заряды опущены). <math>C(\text{NaOH}) = 0,0563 \text{ M}</math>, <math>C(\text{H}_3\text{Cit}) = 0,0385 \text{ M}</math>  Рассчитать диапазон <math>p\text{H}</math>, в котором доминирует комплекс <math>\text{CaCit}</math></p>	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2 балла; • Имеется верное решение только части задания – 1 балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»</p>

	<p>При решении использовать специализированную программу RSS.EXL все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр. Соотношение <math>Ca : Cit</math> принять в соответствии с условием задачи.</p> <p><b>2.</b>  Построить кривую титрования (в координатах <math>V(CaCl_2) - pCa</math>) 50,0 мл раствора тетранатриевой соли этилендиаминтетрауксусной кислоты (<math>Na_4L</math>) и 10,0 мл раствора <math>HCl</math> - раствором <math>CaCl_2</math>. Дискретность добавления титранта – 1,0 мл. Всего на кривой не менее 100 точек. Учитывать увеличение объема титруемой смеси вследствие добавления титранта. Учитывать образование комплексов: <math>CaL</math>, <math>Ca(HL)</math>, <math>CaOH</math> (заряды опущены). <math>C(CaCl_2) = 0,0270 M</math>, <math>C(Na_4L) = 0,0302 M</math>  Рассчитать диапазон <math>pH</math>, в котором доминирует комплекс <math>CaL</math></p> <p>При решении использовать специализированную программу RSS.EXL все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр. Соотношение <math>Ca : L</math> принять в соответствии с условием задачи.</p>	
<p>ПК-1.3 Готовит объекты исследования</p>	<p><b>1.</b>  В мерную колбу на 100 мл внесли 20,0 мл раствора <math>H_3PO_4</math> и 20,0 мл раствора <math>NaOH</math>. После перемешивания довели водой до метки. Какова величина <math>pH</math> получившегося</p>	<p>Правильно выбран вариант ответа – 1 балл  Тест из 3 заданий: 1 балл – «3», 2 балла – «4», 3 балла – «5»</p>



раствора?  $C(\text{NaOH}) = 0,0731 \text{ M}$ ,  $C(\text{H}_3\text{PO}_4) = 0,0302$

При решении использовать специализированную программу RSS.EXL все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр

## 2.

Построить кривую титрования 100,0 мл раствора  $\text{Na}_3\text{PO}_4$  раствором  $\text{HCl}$ . Дискретность добавления титранта – 1,0 мл. Всего на кривой не менее 100 точек. Учитывать увеличение объема титруемой смеси вследствие добавления титранта.  $C(\text{HCl}) = 0,0484 \text{ M}$ ,  $C(\text{Na}_3\text{PO}_4) = 0,0240 \text{ M}$ .

При решении использовать специализированную программу RSS.EXL все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр

## 3.

В мерную колбу на 100 мл внесли навеску безводной соли  $\text{Na}_3\text{Cit}$  (где Cit – кислотный остаток лимонной кислоты) и добавили 10,0 мл раствора  $\text{HCl}$  заданной концентрации. После перемешивания довели водой до метки. Какова величина pH получившегося раствора?

Принять  $M(\text{Na}_3\text{Cit}) = 261$ .  $C(\text{HCl}) = 0,1406 \text{ M}$ ,  $m(\text{Na}_3\text{Cit}) = 0,1423 \text{ г}$ .

При решении использовать специализированную программу RSS.EXL все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр

## Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции ПК-2

Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы

Этап формирования компетенции, в котором участвует дисциплина	Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков (2-3 примера)	Показатели и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания
<p>ПК-2.1 Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных)</p>	<p><b>Кейс</b></p> <p><b>1.</b> Составить расширенный базис для указанной ниже системы. Смешали 50,0 мл раствора NaOH, 50,0 мл раствора лимонной кислоты (<math>H_3Cit</math>) и 20,0 мл раствора <math>CaCl_2</math>. Какова величина <math>pCa</math>? Учитывать образование комплексов: <math>CaCit</math>, <math>Ca(Hcit)</math>, <math>CaOH</math> (заряды опущены). <math>C(NaOH) = 0,0563</math> М, <math>C(H_3Cit) = 0,0385</math> М Рассчитать диапазон pH, в котором доминирует комплекс <math>CaCit</math> При решении использовать специализированную программу RSS.EXL все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр. Соотношение <math>Ca : Cit</math> принять в соответствии с условием задачи.</p> <p><b>2.</b> Составить расширенный базис для указанной ниже системы. Построить кривую титрования (в координатах <math>V(CaCl_2)-pCa</math>) 50,0 мл раствора тетранатриевой соли этилендиаминтетрауксусной кислоты (<math>Na_4L</math>) и 10,0 мл раствора HCl - раствором <math>CaCl_2</math>. Дискретность добавления титранта – 1,0 мл. Всего на кривой не менее 100</p>	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2 балла; • Имеется верное решение только части задания – 1 балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»</p>

	<p>точек. Учитывать увеличение объема титруемой смеси вследствие добавления титранта. Учитывать образование комплексов: <math>\text{CaL}</math>, <math>\text{Ca(HL)}</math>, <math>\text{CaOH}</math> (заряды опущены). <math>C(\text{CaCl}_2) = 0,0270 \text{ M}</math>, <math>C(\text{Na}_4\text{L}) = 0,0302 \text{ M}</math></p> <p>Рассчитать диапазон pH, в котором доминирует комплекс <math>\text{CaL}</math></p> <p>При решении использовать специализированную программу <math>\text{RSS.EXL}</math> все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр. Соотношение <math>\text{Ca} : \text{L}</math> принять в соответствии с условием задачи.</p>	
<p>ПК-2.2 Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)</p>	<p><b>1.</b> Составить расширенный базис для указанной ниже системы. Смешали 50,0 мл раствора <math>\text{NaOH}</math>, 50,0 мл раствора лимонной кислоты (<math>\text{H}_3\text{Cit}</math>) и 20,0 мл раствора <math>\text{CaCl}_2</math>. Какова величина <math>p\text{Ca}</math>? Учитывать образование комплексов: <math>\text{CaCit}</math>, <math>\text{Ca(Hcit)}</math>, <math>\text{CaOH}</math> (заряды опущены). <math>C(\text{NaOH}) = 0,0563 \text{ M}</math>, <math>C(\text{H}_3\text{Cit}) = 0,0385 \text{ M}</math></p> <p>Рассчитать диапазон pH, в котором доминирует комплекс <math>\text{CaCit}</math></p> <p>При решении использовать специализированную программу <math>\text{RSS.EXL}</math> все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр. Соотношение <math>\text{Ca} : \text{Cit}</math> принять в соответствии с условием задачи.</p> <p><b>2.</b> Составить расширенный базис для указанной ниже системы.</p>	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены незначительные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2 балла; • Имеется верное решение только части задания – 1 балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»</p>

	<p>Построить кривую титрования (в координатах <math>V(\text{CaCl}_2)</math>-<math>p\text{Ca}</math>) 50,0 мл раствора тетранатриевой соли этилендиаминтетрауксусной кислоты (<math>\text{Na}_4\text{L}</math>) и 10,0 мл раствора <math>\text{HCl}</math> - раствором <math>\text{CaCl}_2</math>. Дискретность добавления титранта – 1,0 мл. Всего на кривой не менее 100 точек. Учитывать увеличение объема титруемой смеси вследствие добавления титранта. Учитывать образование комплексов: <math>\text{CaL}</math>, <math>\text{Ca}(\text{HL})</math>, <math>\text{CaOH}</math> (заряды опущены). <math>C(\text{CaCl}_2) = 0,0270 \text{ M}</math>, <math>C(\text{Na}_4\text{L}) = 0,0302 \text{ M}</math></p> <p>Рассчитать диапазон <math>p\text{H}</math>, в котором доминирует комплекс <math>\text{CaL}</math></p> <p>При решении использовать специализированную программу <math>\text{RSS.EXL}</math> все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр. Соотношение <math>\text{Ca} : \text{L}</math> принять в соответствии с условием задачи.</p>	
	<p><b>1.</b></p> <p>В мерную колбу на 100 мл внесли 20,0 мл раствора <math>\text{H}_3\text{PO}_4</math> и 20,0 мл раствора <math>\text{NaOH}</math>. После перемешивания довели водой до метки. Какова величина <math>p\text{H}</math> получившегося раствора? <math>C(\text{NaOH}) = 0,0731 \text{ M}</math>, <math>C(\text{H}_3\text{PO}_4) = 0,0302 \text{ M}</math></p> <p>При решении использовать специализированную программу <math>\text{RSS.EXL}</math> все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр</p>	<p>Правильно вычислен результат – 1 балл Тест из 3 заданий: 1 балл – «3», 2 балла – «4», 3 балла – «5»</p>

	<p><b>2.</b>  Построить кривую титрования 100,0 мл раствора <math>\text{Na}_3\text{PO}_4</math> раствором <math>\text{HCl}</math>. Дискретность добавления титранта – 1,0 мл. Всего на кривой не менее 100 точек. Учитывать увеличение объема титруемой смеси вследствие добавления титранта. <math>C(\text{HCl}) = 0,0484 \text{ M}</math>, <math>C(\text{Na}_3\text{PO}_4) = 0,0240 \text{ M}</math>.  При решении использовать специализированную программу <math>\text{RSS.EXL}</math> все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр</p> <p><b>3.</b>  В мерную колбу на 100 мл внесли навеску безводной соли <math>\text{Na}_3\text{Cit}</math> (где Cit – кислотный остаток лимонной кислоты) и добавили 10,0 мл раствора <math>\text{HCl}</math> заданной концентрации. После перемешивания довели водой до метки. Какова величина pH получившегося раствора?  Принять <math>M(\text{Na}_3\text{Cit}) = 261</math>. <math>C(\text{HCl}) = 0,1406 \text{ M}</math>, <math>m(\text{Na}_3\text{Cit}) = 0,1423 \text{ г}</math>.  При решении использовать специализированную программу <math>\text{RSS.EXL}</math> все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр</p>	
--	--	--

## V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### а) Основная литература:

1. Рясенский С.С. Математическое моделирование гомогенных химических равновесий Тверь, ТвГУ. 2011. 106 с.

### б) Дополнительная литература:

1. Аналитическая химия : учебник [Электронный ресурс]/ Н.И. Мовчан, Р.Г. Романова, Т.С. Горбунова [и др.]. — М. : ИНФРА-М, 2017. — 394 с. — (Высшее образование). — Режим доступа: <http://znanium.com/go.php?id=770791>

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

1. <http://www.xumuk.ru/>
2. <http://nehudlit.ru/books/subcat283.html>
3. [http://www.krugosvet.ru/enc/nauka\\_i\\_tehnika/himiya/BIOHIMIYA.html](http://www.krugosvet.ru/enc/nauka_i_tehnika/himiya/BIOHIMIYA.html)
4. <http://elibrary.ru/>
5. <http://www.medbook.net.ru/23.shtml>  
<http://www.chem.msu.su/rus/teaching/kolman/index.htm>

## **VI. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины**

### **Программа дисциплины**

Тема 1. Введение.

Основные понятия, определения. Методы вычисления коэффициентов активности компонентов.

Тема 2. Математическое моделирование химических равновесий.

Математическое моделирование химических равновесий. Прямая задача. Основные законы химических равновесий. Формулировка

«прямой задачи» равновесий. Формулировка «прямой задачи» для гомогенных химических равновесий в растворах. Общая формулировка «прямой задачи» химических равновесий в газовой среде при постоянном давлении. Формулировка «прямой задачи» равновесий в многофазных системах. Решение обратной задачи математического моделирования химических равновесий. Основные понятия математической статистики, применяемые для обработки результатов наблюдений.

Тема 3. Компьютерная программа для метода математического моделирования равновесий RSS.XLS

Сущность метода Бринкли. Базисные частицы, продукты реакций.

Тривиальные равновесия. Базис системы. Смена базиса системы. Матрица стехиометрических коэффициентов. Правила подготовки и ввода исходных данных для компьютерного расчета. Форма представления результатов расчетов. Интерпретация полученных результатов.

Тема 4. Моделирование кислотно-основных равновесий

Выбор базисных частиц. Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Построение долевого распределения кислотно-основных форм в растворе. Построение кривых титрования в различных комбинациях.

Тема 5. Моделирование равновесий комплексообразования

Выбор базисных частиц. Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Построение долевого распределения комплексных форм в растворе. Построение кривых титрования в различных комбинациях. Прогнозирование поведения системы при различных воздействиях на нее (влияние рН, соотношения компонентов и т.д.)

Тема 6. Моделирование окислительно-восстановительных равновесий

Выбор базисных частиц. Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Построение долевого распределения окислительно-восстановительных форм в растворе.

Построение кривых титрования в различных комбинациях титрантов.

Построение кривых кулонометрическим методом (гальваностатический режим). Прогнозирование поведения системы при различных воздействиях на нее (влияние рН, соотношения компонентов, ОВ-потенциала и т.д.)

Тема 7. Моделирование комбинированных химических равновесий.

Выбор базисных частиц. Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Построение долевого распределения окислительно-восстановительных, кислотно-основных, комплексных форм в растворе. Построение кривых титрования в различных комбинациях титрантов, включая кулонометрическое титрование в гальваностатическом режиме. Прогнозирование поведения системы при различных воздействиях на нее (влияние рН, соотношения компонентов, ОВ-потенциала, лигандов и т.д.)

### ***Программа для самоконтроля и контроля преподавателем результативности изучения дисциплины***

Математическое моделирование химических равновесий. Прямая задача. Основные законы химических равновесий. Формулировка «прямой задачи» равновесий. Формулировка «прямой задачи» для гомогенных химических равновесий в растворах. Общая формулировка «прямой задачи» химических равновесий в газовой среде при постоянном давлении. Формулировка «прямой задачи» равновесий в многофазных системах. Решение обратной задачи математического моделирования химических равновесий. Основные понятия математической статистики, применяемые для обработки результатов наблюдений.

Компьютерная программа для метода математического моделирования равновесий. Сущность метода Бринкли. Базисные частицы, продукты реакций. Тривиальные равновесия. Базис системы. Смена базиса системы. Матрица стехиометрических коэффициентов. Правила подготовки и ввода исходных данных для компьютерного расчета. Форма

представления результатов расчетов. Интерпретация полученных результатов.

Свободная эксплуатация компьютерной техники и основных компьютерных программ по методу математического моделирования химических равновесий.

### Вопросы для зачета

#### Билет № 1

1. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы: комплексон;  $\text{CuSO}_4$ ;  $\text{H}_2\text{SO}_4$ .

В качестве базисных частиц возьмите: Н; Cu; анион(полностью ионизированный) комплексона.

2. См п.1.

В качестве базисных частиц возьмите: OH; Cu; анион(полностью ионизированный) комплексона.

3. Постройте кривую титрования 50.0 мл р-ра с концентрацией  $\text{CuSO}_4$  0.01M и  $\text{H}_2\text{SO}_4$  0.001M, р-ром комплексона с концентрацией 0.1M.

4. Раствор содержит комплексон и  $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2$  в мольном соотношении 3:1. Найдите величину рН при котором закомплексованность ионов магния составит 85%.

---

Примечание: Для заданий 1-4 в качестве комплексона используйте Этилендиаминтетрауксусную кислоту.

#### Билет № 2

1. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы: комплексон;  $\text{CuSO}_4$ ;  $\text{H}_2\text{SO}_4$ .

В качестве базисных частиц возьмите: Н; Cu; анион(полностью ионизированный) комплексона.

2. См п.1.

В качестве базисных частиц возьмите: OH; Cu; анион(полностью ионизированный) комплексона.

3. Постройте кривую титрования 50.0 мл р-ра с концентрацией  $\text{CuSO}_4$  0.01M и  $\text{H}_2\text{SO}_4$  0.001M, р-ром комплексона с концентрацией 0.1M.

4. Раствор содержит комплексон и  $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2$  в мольном соотношении 3:1. Найдите величину рН при котором закомплексованность ионов магния составит 85%.

---

Примечание: Для заданий 1-4 в качестве комплексона используйте Нитрилотриуксусную кислоту.



### Билет № 3

1. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы:

комплексон;  $\text{CuSO}_4$ ;  $\text{H}_2\text{SO}_4$ .

В качестве базисных частиц возьмите: Н; Cu; анион(полностью ионизированный) комплексона.

2. См п. 1.

В качестве базисных частиц возьмите: OH; Cu; анион(полностью ионизированный) комплексона.

3. Постройте кривую титрования 50.0 мл р-ра с концентрацией  $\text{CuSO}_4$  0.01M и  $\text{H}_2\text{SO}_4$  0.001M, р-ром комплексона с концентрацией 0.1M.

4. Раствор содержит комплексон и  $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2$  в мольном соотношении 3:1. Найдите величину рН при котором закомплексованность ионов магния составит 85%.

---

Примечание: Для заданий 1-4 в качестве комплексона используйте Иминодиуксусную кислоту.

### Билет № 4

1. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы:

комплексон;  $\text{CuSO}_4$ ;  $\text{H}_2\text{SO}_4$ .

В качестве базисных частиц возьмите: Н; Cu; анион(полностью ионизированный) комплексона.

2. См п. 1.

В качестве базисных частиц возьмите: OH; Cu; анион(полностью ионизированный) комплексона.

3. Постройте кривую титрования 50.0 мл р-ра с концентрацией  $\text{CuSO}_4$  0.01M и  $\text{H}_2\text{SO}_4$  0.001M, р-ром комплексона с концентрацией 0.1M.

4. Раствор содержит комплексон и  $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2$  в мольном соотношении 3:1. Найдите величину рН при котором закомплексованность ионов магния составит 85%.

---

Примечание: Для заданий 1-4 в качестве комплексона используйте Иминодиянтарную кислоту.

### Билет № 5

1. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы:

комплексон;  $\text{CuSO}_4$ ;  $\text{H}_2\text{SO}_4$ .

В качестве базисных частиц возьмите: Н; Cu; анион(полностью ионизированный) комплексона.

2. См п. 1.

В качестве базисных частиц возьмите: OH; Cu; анион(полностью ионизированный) комплексона.

3. Постройте кривую титрования 50.0 мл р-ра с концентрацией  $\text{CuSO}_4$  0.01M и  $\text{H}_2\text{SO}_4$  0.001M, р-ром комплексона с концентрацией 0.1M.

4. Раствор содержит комплексон и  $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2$  в мольном соотношении 3:1. Найдите величину рН при котором закомплексованность ионов магния составит 85%.

---

Примечание: Для заданий 1-4 в качестве комплексона используйте Оксиэтилиминодиуксусную кислоту.

#### Билет № 6

1. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы:

комплексон;  $\text{CuSO}_4$ ;  $\text{H}_2\text{SO}_4$ .

В качестве базисных частиц возьмите: Н; Cu; анион(полностью ионизированный) комплексона.

2. См п. 1.

В качестве базисных частиц возьмите: OH; Cu; анион(полностью ионизированный) комплексона.

3. Постройте кривую титрования 50.0 мл р-ра с концентрацией  $\text{CuSO}_4$  0.01M и  $\text{H}_2\text{SO}_4$  0.001M, р-ром комплексона с концентрацией 0.1M.

4. Раствор содержит комплексон и  $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2$  в мольном соотношении 3:1. Найдите величину рН при котором закомплексованность ионов магния составит 85%.

---

Примечание: Для заданий 1-4 в качестве комплексона используйте Этилендиаминдиантарную кислоту.

#### Билет № 7

1. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы:

комплексон;  $\text{CuSO}_4$ ;  $\text{H}_2\text{SO}_4$ .

В качестве базисных частиц возьмите: Н; Cu; анион(полностью ионизированный) комплексона.

2. См п. 1.

В качестве базисных частиц возьмите: OH; Cu; анион(полностью ионизированный) комплексона.

3. Постройте кривую титрования 50.0 мл р-ра с концентрацией  $\text{CuSO}_4$  0.01M и  $\text{H}_2\text{SO}_4$  0.001M, р-ром комплексона с концентрацией 0.1M.

### Рейтинг-контроль

#### 1 МОДУЛЬ

##### Лабораторная работа №1

Выполнение практической (экспериментальной) задачи – **7 балла**

Объяснение теоретических основ данной работы – **3 балла**

Собеседование по одному из заданий для самостоятельной работы - **3 балл**

Решение задачи на тему данной лабораторной работы – 2 балл  
Премияльный баллы за качество и творческий подход при выполнении лабораторной работы – 2 балл

Лабораторная работа №2

Выполнение практической (экспериментальной) задачи – 7 балла  
Объяснение теоретических основ данной работы – 3 балла  
Собеседование по одному из заданий для самостоятельной работы -3 балл  
Решение задачи на тему данной лабораторной работы – 2 балл  
Премияльный баллы за качество и творческий подход при выполнении лабораторной работы – 1 балл

Лабораторная работа №3

Выполнение практической (экспериментальной) задачи – 7 балла  
Объяснение теоретических основ данной работы – 3 балла  
Собеседование по одному из заданий для самостоятельной работы -3 балл  
Решение задачи на тему данной лабораторной работы – 2 балл  
Премияльный баллы за качество и творческий подход при выполнении лабораторной работы – 2 балл

**Первая контрольная точка**

..... 50 баллов

**2 МОДУЛЬ**

Лабораторная работа №4

Выполнение практической (экспериментальной) задачи – 8 балла  
Объяснение теоретических основ данной работы – 5 балла  
Собеседование по одному из заданий для самостоятельной работы -7 балл  
Решение задачи на тему данной лабораторной работы – 3 балл  
Премияльный баллы за качество и творческий подход при выполнении лабораторной работы – 2 балл

Лабораторная работа №5

Выполнение практической (экспериментальной) задачи – 8 балла  
Объяснение теоретических основ данной работы – 5 балла  
Собеседование по одному из заданий для самостоятельной работы -7 балл  
Решение задачи на тему данной лабораторной работы – 3 балл  
Премияльный баллы за качество и творческий подход при выполнении лабораторной работы – 2 балл

**Вторая контрольная точка**

..... 50 баллов

**Итого**

**100 баллов**

Примечание: если не выполнена экспериментальная часть лабораторной работы, то лабораторная работа не может быть зачтена и зачет по данной дисциплине за триместр не выставляется.

**VII. Материально-техническое обеспечение**

1. Компьютеры, ПО для моделирования химических равновесий.

### **VIII. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины**

№п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
1.	Раздел V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	Дополнен список основной и дополнительной литературы	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета
2.			