

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич
Должность: врио ректора
Дата подписания: 14.07.2025 15:28:31
Уникальный программный ключ:
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
ФГБОУ ВО «ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

14 мая 2025г.



Рабочая программа дисциплины

Химическое равновесие

Закреплена за кафедрой:	Неорганической и аналитической химии
Направление подготовки:	04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
Направленность (профиль):	Экспертная и медицинская химия: теория и практика.
Квалификация:	Химик. Преподаватель химии
Форма обучения:	очная
Семестр:	9

Программу составил(и):

канд. хим. наук, доц., Веселов Игорь Николаевич

Тверь, 2025

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели освоения дисциплины (модуля):

Освоение методики расчета констант равновесий химических систем исходя из компьютерной обработки экспериментальных данных

Задачи:

1. Изучение теоретических основ решения «обратной» задачи применительно к химическим равновесиям;
2. Освоение использования метода для моделирования систем с различными типами взаимодействий;
3. Рассмотрение примеров использования для расчетов экспериментальных данных различного вида (потенциометрия, калориметрия, кондуктометрия, ИК и ЯМР-спектроскопия);
4. Формирование умений и навыков использования метода для расчета по кривым титрования различных характеристик равновесной системы, таких как константы нестойкости, произведения растворимости, оптические или термодимические свойства.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ОП: Б1.В

Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Математика

Аналитическая химия

Неорганическая химия

Математическое моделирование химических равновесий

Ионометрия

Спектрофотометрия

Физическая химия

Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:

Преддипломная практика

Научно-исследовательская работа

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость	2 ЗЕТ
Часов по учебному плану	72
в том числе:	
аудиторные занятия	39
самостоятельная работа	23

4. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

ПК-1.1: Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР

- | | |
|-----------|--|
| Уровень 1 | Методы решения "прямой" и "обратной" задачи для моделирование химических равновесий для систем разных типов; Области применимости методов |
| Уровень 1 | Строить по исходным данным матрицу стехиометрических коэффициентов; Рассчитывать константы равновесия на основе справочных и экспериментальных данных; С использованием математических методов рассчитывать равновесные концентрации |

веществ.

- Уровень 1 Методы решения "прямой" и "обратной" задачи для моделирование химических равновесий для систем разных типов

ПК-1.2: Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР

- Уровень 1 Основные компьютерные программы по методу математического моделирования химических равновесий
- Уровень 1 Выбирать наиболее подходящую для решения задачи программу
- Уровень 1 Свободной эксплуатацией компьютерной техники и основных компьютерных программ по методу математического моделирования химических равновесий

ПК-1.3: Готовит объекты исследования

- Уровень 1 Методы вычисления коэффициентов активности компонентов; основные понятия математической статистики, применяемые для обработки результатов наблюдений; правила подготовки и ввода исходных данных для компьютерного расчета
- Уровень 1 Рассчитывать константы равновесия на основе справочных и экспериментальных данных
- Уровень 1 Методы решения "прямой" и "обратной" задачи для моделирование химических равновесий для систем разных типов

ПК-2.1: Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных)

- Уровень 1 Основные базы данных, которые можно использовать в качестве источников информации
- Уровень 1 Осуществляет целенаправленный поиск необходимой информации
- Уровень 1 Владеет методами поиска необходимой информации

ПК-2.2: Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической техно-логии)

- Уровень 1 Основные базы данных, которые можно использовать в качестве источников информации
- Уровень 1 Сопоставляет данные, получаемые из различных источников, определяет их достоверность и применимость для конкретной ситуации
- Уровень 1 Владеет методами поиска необходимой информации

5. ВИДЫ КОНТРОЛЯ

Виды контроля в семестрах:	
зачеты	9

6. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

Язык преподавания: русский.

7. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занят.	Наименование разделов и тем	Вид занятия	Семестр / Курс	Часов	Источники	Примечание
	Раздел 1. Введение					

1.1	Математическое моделирования химических равновесий: прямая и обратная задачи	Лек	9	1	Л1.1	
	Раздел 2. Математические основы моделирования химических равновесий					
2.1	Повторение основных законов химических равновесий. Формулировка «прямой задачи» для гомогенных химических равновесий в растворах. Основные понятия математической статистики, применяемые для обработки результатов наблюдений. Базис и расширенный базис. Матрица стехиометрических коэффициентов.	Лек	9	1	Л1.1	
	Раздел 3. Компьютерная программа для метода математического моделирования равновесий Solution RSS					
3.1	Знакомство с программами для расчета равновесных концентраций, с программами для расчета констант равновесия по экспериментальным данным. Правила подготовки и ввода исходных данных для компьютерного расчета. Форма представления результатов расчетов. Интерпретация полученных результатов.	Лек	9	1	Л1.1	
3.2	Использование программ. Входные и выходные файлы.	Лаб	9	1	Л1.1	
	Раздел 4. Моделирование кислотно-основных равновесий					
4.1	Выбор базисных частиц. Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе.	Лек	9	1	Л1.1	
4.2	Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Построение долевого распределения кислотно-основных форм в растворе. Построение кривых титрования в различных комбинациях.	Лаб	9	1	Л1.1Л2.1 Э3 Э4 Э5	

	Раздел 5. Моделирование равновесий комплексообразования					
5.1	Выбор базисных частиц. Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Прогнозирование поведения системы при различных воздействиях на нее (влияние pH, соотношения компонентов и т.д.).	Лек	9	1	Л1.1	
5.2	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 pH, соотношения компонентов и т.д.).	Лаб	9	1	Л1.1Л2.1 Э3 Э4 Э5	
	Раздел 6. Моделирование окислительно-восстановительных равновесий					
6.1	Выбор базисных частиц. Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Построение кривых кулонометрическим методом (гальваностатический режим).	Лек	9	2	Л1.1	
6.2	Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Построение кривых титрования в различных комбинациях титрантов. Построение кривых кулонометрическим методом (гальваностатический режим). Прогнозирование поведения системы при различных воздействиях на нее (влияние pH, соотношения компонентов, ОВ-потенциала и т.д.)	Лаб	9	3	Л1.1Л2.1 Э3 Э4 Э5	

6.3	Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Построение кривых титрования в различных комбинациях титрантов. Построение кривых кулонометрическим методом (гальваностатический режим). Прогнозирование поведения системы при различных воздействиях на нее (влияние pH, соотношения компонентов, ОВ-потенциала и т.д.)	Ср	9	3	Л1.1Л2.1 Э2 Э3 Э4	
	Раздел 7. Моделирование равновесий с участием малорастворимых соединений					
7.1	Выбор базисных частиц. Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Прогнозирование поведения системы при различных воздействиях на нее (влияние pH, соотношения компонентов, ОВ-потенциала, лигандов и т.д.)	Лек	9	1	Л1.1 Э1	
7.2	Выбор базисных частиц. Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Прогнозирование поведения системы при различных воздействиях на нее (влияние pH, соотношения компонентов, ОВ-потенциала, лигандов и т.д.)	Лаб	9	3	Л1.1Л2.1 Э1 Э3 Э4 Э5	
7.3	Выбор базисных частиц. Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Прогнозирование поведения системы при различных воздействиях на нее (влияние pH, соотношения компонентов, ОВ-потенциала, лигандов и т.д.)	Ср	9	3	Л1.1Л2.1 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5	
	Раздел 8. Решение обратной задачи расчета химических равновесий					

8.1	Обратная задача». Обзор существующего программного обеспечения и используемые алгоритмы для решения обратной задачи. Причина многообразия программного обеспечения и рассчитываемые характеристики. Выбор базисных частиц. Составление расширенного базиса. Структура командных файлов программ	Лек	9	2	Л1.1 Э1	
8.2	Выбор базисных частиц. Составление расширенного базиса. Использование программного обеспечения для расчета констант равновесия реакций, описываемых матрицей стехиометрических коэффициентов и их пересчет в другие характеристики.	Лаб	9	7	Л1.1Л2.1 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5	
8.3	Выбор базисных частиц. Составление расширенного базиса. Использование программного обеспечения для расчета констант равновесия реакций, описываемых матрицей стехиометрических коэффициентов и их пересчет в другие характеристики.	Ср	9	7	Л1.1Л2.1	
	Раздел 9. Расчет химических равновесий по рН-потенциометрическим данным					
9.1	Подготовка экспериментальных данных. Выбор реакций для включения в матрицу стехиометрических коэффициентов. Выбор стартовых констант и проверка адекватности получаемых результатов.	Лек	9	3	Л1.1 Э1	
9.2	Проверка гипотез по типам вероятных комплексных соединений. Выбор стартовых констант и проверка адекватности получаемых результатов. Расчет различных характеристик (константы ступенчатой диссоциации, константы нестойкости, произведения растворимости, стандартные электродные потенциалы, энтальпии образования).	Лаб	9	10	Л1.1Л2.1 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5	

9.3	Проверка гипотез по типам вероятных комплексных соединений. Выбор стартовых констант и проверка адекватности получаемых результатов. Расчет различных характеристик (константы ступенчатой диссоциации, константы нестойкости, произведения растворимости, стандартные электродные потенциалы, энтальпии образования).	Ср	9	10	Л1.1Л2.1 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5	
-----	--	----	---	----	-------------------------------	--

Образовательные технологии

1. Традиционные (лекция, решение упражнений),
2. Цифровые (показ презентаций, выполнение практических работ),
3. Групповая работа

Список образовательных технологий

1	Информационные (цифровые) технологии
---	--------------------------------------

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

8.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

Оценочные материалы для проведения текущей аттестации приведены в приложении 2

8.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации

Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации приведены в приложении 2

8.3. Требования к рейтинг-контролю

Структура рейтинговых баллов:

1. Первый модуль
 - Решение задач на моделирование гомогенных химических систем - 5 б.
 - Решение задач на моделирование равновесий с участием малорастворимых соединений - 10 б.
 - Расчет констант равновесий по рН-потенциометрическим данным (простые задачи) - 15 б.
 - Расчет констант равновесий по рН-потенциометрическим данным (усложненные задачи) - 20 б.
 - Модульная контрольная 1 - 50 б.
- Итого за 1 модуль - 100 б.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

9.1. Рекомендуемая литература

9.1.1. Основная литература

Шифр	Литература
------	------------

9.1.1. Основная литература

Шифр	Литература
Л1.1	Рясенский, Учебно-методический комплекс по дисциплине "Математическое моделирование химических равновесий", Тверь, 2012, ISBN: , URL: http://texts.lib.tversu.ru/texts2/04421umk.pdf

9.1.2. Дополнительная литература

Шифр	Литература
Л2.1	Мовчан, Романова, Горбунова, Евгеньева, Гармонов, Сопин, Аналитическая химия, Москва: ООО "Научно-издательский центр ИНФРА-М", 2024, ISBN: 978-5-16-019473-8, URL: https://znanium.com/catalog/document?id=437096

9.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"

Э1	eLIBRARY.RU : науч. электрон. б-ка : сайт. Москва, 2000. URL: https://elibrary.ru (дата обращения: 14.02.2024). Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.: https://elibrary.ru
Э2	LMS : Система управления обучением : сайт. Тверь, 2024. URL: https://lms.tversu.ru (дата обращения: 14.02.2024). Режим доступа: для студентов ТвГУ: https://lms.tversu.ru
Э3	Расчет химических равновесий в растворах : сайт. Москва. URL https://chemequ.ru (дата обращения: 14.02.2024).: https://chemequ.ru
Э4	Электронная библиотека учебных материалов по химии : сайт. Москва. URL: https://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/welcome.html (дата обращения: 14.02.2024).: https://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/welcome.html
Э5	Учебные материалы : Аналитическая химия: сайт. Москва. URL: https://chembaby.ru/predmety/analiticheskaya-ximiya/materials (дата обращения: 14.02.2024).: https://chembaby.ru/predmety/analiticheskaya-ximiya/materials

9.3.1 Перечень программного обеспечения

1	Google Chrome
2	Kaspersky Endpoint Security 10 для Windows
3	Многофункциональный редактор ONLYOFFICE
4	ОС Linux Ubuntu
5	Adobe Acrobat Reader
6	Foxit Reader

9.3.2 Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1	Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU (подписка на журналы)
2	ЭБС ТвГУ
3	ЭБС BOOK.ru
4	ЭБС IPRbooks
5	ЭБС «Университетская библиотека онлайн»
6	ЭБС «ZNANIUM.COM»

7	ЭБС «Лань»
---	------------

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Аудит-я	Оборудование
3-243	комплект учебной мебели, компьютеры

11. МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Методические материалы и указания приведены в приложении 1

Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины

Программа дисциплины

Тема 1. Введение.

Основные понятия, определения. Методы вычисления коэффициентов активности компонентов.

Тема 2. Математические основы моделирования химических равновесий.

Математическое моделирование химических равновесий. Прямая задача. Основные законы химических равновесий. Формулировка «прямой задачи» равновесия. 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 Solution RSS

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 pH, 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 pH, соотношения компонентов, ОВ-потенциала и т.д.)

Тема 7. Моделирование равновесий с участием малорастворимых соединений.

Выбор базисных частиц. Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Прогнозирование поведения системы при различных воздействиях на нее (влияние pH, соотношения компонентов, ОВ-потенциала, лигандов и т.д.)

Тема 8 Решение обратной задачи расчета химических равновесий

«Обратная задача». Обзор существующего программного обеспечения и используемые алгоритмы для решения обратной задачи. Причина многообразия программного обеспечения и рассчитываемые характеристики. Выбор базисных частиц. Составление расширенного базиса. Структура командных файлов программ. Использование программного обеспечения для расчета констант равновесия реакций, описываемых матрицей стехиометрических коэффициентов и их пересчет в другие характеристики.

Тема 9. Расчет химических равновесий по pH-потенциометрическим данным

Подготовка экспериментальных данных. Выбор реакций для включения в матрицу стехиометрических коэффициентов. Проверка гипотез по типам вероятных комплексных соединений. Выбор стартовых констант и проверка адекватности получаемых результатов. Расчет различных характеристик (константы ступенчатой диссоциации, константы нестойкости, произведения растворимости, стандартные электродные потенциалы, энтальпии образования).

Программа для самоконтроля и контроля преподавателем результативности изучения дисциплины

Математическое моделирование химических равновесий. Прямая задача. Основные законы химических равновесии. Формулировка «прямой задачи» равновесии. Формулировка «прямой задачи» для гомогенных химических равновесий в растворах. Общая формулировка «прямой задачи» химических равновесий в газовой среде при постоянном давлении. Формулировка «прямой задачи» равновесии в многофазных системах. Решение обратной задачи математического моделирования химических равновесий.

Компьютерная программа для метода математического моделирования равновесий. Сущность метода Бринкли. Базисные частицы, продукты реакций.

Тривиальные равновесия. Базис 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.

Математическое моделирование химических равновесий - обратная задача. Компьютерная программа для метода математического моделирования равновесий. Сущность метода Бринкли для обратной задачи. Расчет различных характеристик систем (константы ступенчатой диссоциации, константы нестойкости, произведения растворимости, стандартные электродные потенциалы, энтальпии образования).

Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине: Химическое равновесие

	Результат (индикатор)	Формулировка задания	Вид работы / способ	Критерии оценивания
МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ АТТЕСТАЦИИ				
	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-2.1	Построить кривую титрования (в координатах $V(\text{CaCl}_2) - p\text{Ca}$) 50,0 мл раствора тетранатриевой соли этилендиаминтетрауксусной кислоты (Na_4L) и 10,0 мл раствора HCl - раствором CaCl_2. Дискретность добавления титранта – 1,0 мл. Всего на кривой не менее 100 точек. Учитывать увеличение объема титруемой смеси вследствие добавления титранта. Учитывать образование комплексов: $[\text{CaL}]$, $[\text{Ca}(\text{HL})]$, $[\text{CaOH}]$ (заряды опущены). $C(\text{CaCl}_2) = 0,0270 \text{ M}$, $C(\text{Na}_4\text{L}) = 0,0302 \text{ M}$. Рассчитать диапазон $p\text{H}$, в котором доминирует комплекс $[\text{CaL}]$. При решении использовать специализированную программу Solution RSS все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр. Соотношение $\text{Ca} : \text{L}$ принять в соответствии с условием задачи.	вид: самостоятельная лабораторная работа способ: письменный (матрица и расчет констант) и на компьютере (расчет концентраций и итоговое решение)	• 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.
	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-2.1 ПК-2.2	Имеется набор данных (кривая титрования), полученных в ходе $p\text{H}$-метрического титрования 20,0 мл синтезированной органической кислоты, содержащей две карбоксильные группы, раствором гидроксида натрия (NaOH), шаг титрования 1,0 мл. $C(\text{кислота}) = 0,0315 \text{ M}$, $C(\text{NaOH}) = 0,0112 \text{ M}$. Используя программу для решения обратной задачи равновесия рассчитать константы ступенчатой диссоциации данной кислоты. Возможным использованием индикатора – пренебречь.	вид: самостоятельная лабораторная работа способ: письменный (матрица и расчет констант) и на компьютере (расчет концентраций и итоговое решение)	• 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.
	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-2.1	Построить кривую титрования 50,0 мл раствора FeSO_4 и 50,0 мл 0,25М раствора H_2SO_4, раствором $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ в координатах ОВ потенциал $E - V(\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7)$. Дискретность добавления титранта – 1,0мл, всего на кривой 100 точек. Учитывать увеличение объема смеси. Возможное образование гидроксокомплексов не учитывать. $C(\text{FeSO}_4) = 0,0479 \text{ M}$ $C(\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7) = 0,0125 \text{ M}$ При решении использовать специализированную программу Solution RSS.	вид: самостоятельная лабораторная работа способ: письменный (матрица и расчет констант) и на компьютере (расчет концентраций и итоговое решение)	• Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 5 баллов; • Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2-4 баллов; • Имеется верное решение только части задания – 1 балл.
	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-2.1	Было проведено потенциометрическое титрование 30,0 мл раствора AgNO_3 в присутствии NaOH исследуемым органическим соединением (L). Получены данные зависимости E от объема титранта, шаг титрования 1,0 мл. Предполагается возможность образования комплексного соединения $[\text{AgL}]$. $C(\text{AgNO}_3) = 0,0240 \text{ M}$, $C(\text{NaOH}) = 0,1241 \text{ M}$. $C(\text{L}) = 0,0212 \text{ M}$. Используя программу для решения обратной задачи равновесия необходимо рассчитать для $[\text{AgL}]$ константу нестойкости.	вид: самостоятельная лабораторная работа способ: письменный (матрица и расчет констант) и на компьютере (расчет концентраций и итоговое решение)	• Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 5 баллов; • Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2-4 баллов; • Имеется верное решение только части задания – 1 балл.
	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-2.1 ПК-2.2	Смешали 20,0 мл раствора FeCl_2, 40,0 мл раствора цитрата натрия (Na_3Cit) и 50 мл HCl. Постройте кривые титрования этой смеси раствором CuCl_2 в координатах $V(\text{CuCl}_2) - p\text{Cu}$ и $V(\text{CuCl}_2) - p\text{Fe}$. Дискретность добавления титранта – 1,0 мл, всего на кривой 100 точек. $C(\text{FeCl}_2) = 0,0173 \text{ M}$ $C(\text{Na}_3\text{Cit}) = 0,0280 \text{ M}$ $C(\text{HCl}) = 0,0100 \text{ M}$ $C(\text{CuCl}_2) = 0,0125 \text{ M}$ Используя базы данных по химии сети Интернет составьте перечень	вид: самостоятельная лабораторная работа способ: письменный (матрица и расчет констант) и на компьютере (расчет концентраций и итоговое решение)	• Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 5 баллов; • Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла

		образующихся в данной системе частиц, постройте матрицу стехиометрических коэффициентов и рассчитайте константы равновесия. Данную матрицу используйте для расчета кривых титрования в программе Solution RSS.		– 2-4 баллов; • Имеется верное решение только части задания – 1 балл.
	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-2.1 ПК-2.2	В результате эксперимента была синтезирована органическая кислота (H_nL). Было проведено рН-метрическое титрование (шаг титрования 1,0 мл) и получен набор данных. На основании анализа кривой титрования предположить основность кислоты и рассчитать константы ступенчатой диссоциации. $V(H_nL) = 25,0$ мл $C(H_nL) = 0.0191$ М $C(NaOH) = 0.0334$ М Для расчетов использовать программу для решения обратной задачи равновесия.	вид: самостоятельная лабораторная работа способ: письменный (матрица и расчет констант) и на компьютере (расчет концентраций и итоговое решение)	• Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 5 баллов; • Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2-4 баллов; • Имеется верное решение только части задания – 1 балл.

МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-2.1 ПК-2.2	Имеется набор данных, полученных в ходе потенциометрического титрования смеси из 40,0 мл раствора соли неизвестного металла MCl_2 и 10,0 мл раствора HCl – раствором динатриевой соли ЭДТА (Na_2H_2L) в присутствии сульфосалициловой кислоты (индикатор), шаг титрования 0,5 мл. Известно, что возможно образование двух комплексов: $[ML]$ и $[MHL]$ (заряды опущены) $C(MCl_2) = 0,0243$ М, $C(Na_2H_2L) = 0,0314$ М. $C(HCl) = 0,05$ М. Используя программу для решения обратной задачи равновесия рассчитать константы нестойкости комплексных соединений. Участием индикатора – пренебречь. Зная константы нестойкости, сравнить результаты с данными по комплексам металлов с ЭДТА и	вид: самостоятельная лабораторная работа способ: письменный (матрица и расчет констант) и на компьютере (расчет концентраций и итоговое решение)	• Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 6 баллов; • Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 3-5 баллов; • Имеется верное решение только части задания – 1-2 балла.
--	--	---	---	---

		определить металл.		
ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-2.1 ПК-2.2		Смешали 25,0 мл раствора FeCl_2, 5,0 мл раствора $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ и 20,0 мл HCl. Постройте кривые титрования этой смеси раствором Трилон Б. $C(\text{FeCl}_2) = 0,0315 \text{ M}$ $C(\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7) = 0,0272 \text{ M}$ $C(\text{HCl}) = 0,5 \text{ M}$ $C(\text{Трилон Б}) = 0,0182 \text{ M}$ Используя базы данных по химии сети Интернет определите продукты ОВР, составьте перечень образующихся в данной системе частиц, определите расширенный базис, постройте матрицу стехиометрических коэффициентов и рассчитайте константы равновесия. Данную матрицу используйте для расчета кривых титрования в программе Solution RSS.	вид: самостоятельная лабораторная работа способ: письменный (матрица и расчет констант) и на компьютере (расчет концентраций и итоговое решение)	• Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 6 баллов; • Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 3-5 баллов; • Имеется верное решение только части задания – 1-2 балла.

Вопросы для зачета

Билет № 1

1. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы:
 комплексон; CaCl_2 ; CuCl_2 ; HCl .
 В качестве базисных частиц возьмите: H^+ ; Ca^{2+} ; Cu^{2+} ; анион (полностью ионизированный) комплексона.
2. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы:
 комплексон; Янтарная кислота; CuCl_2 ; HCl .
 В качестве базисных частиц возьмите: H^+ ; Cu^{2+} ; анионы (полностью ионизированные) комплексонов.
3. Откройте файл, содержащий данные эксперимента по потенциометрическому титрованию («experiment_1sp.xlsx»). В нем представлены данные рН-потенциометрического титрования некой трехосновной органической кислоты (100,0 мл, 0.0243 M) раствором NaOH (шаг титрования 1,0 мл, 0.0153 M). Рассчитайте константы ступенчатой диссоциации неизвестной кислоты и, с помощью справочника, определите эту кислоту.

Примечание: Для заданий 1-2 в качестве комплексона используйте Этилендиаминтетрауксусную кислоту.

Билет № 2

1. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы:
 комплексон; CaCl_2 ; CuCl_2 ; HCl .
 В качестве базисных частиц возьмите: H^+ ; Ca^{2+} ; Cu^{2+} ; анион (полностью ионизированный) комплексона.

2. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы:
комплексон; Янтарная кислота; CuCl_2 ; HCl .
В качестве базисных частиц возьмите: H^+ ; Cu^{2+} ; анионы (полностью ионизированные) комплексонов.
3. Откройте файл, содержащий данные эксперимента по потенциометрическому титрованию («experiment_2sp.xlsx»). В нем представлены данные рН-потенциометрического титрования некой трехосновной органической кислоты (100,0 мл, 0.0243 М) раствором NaOH (шаг титрования 1,0 мл, 0.0153 М). Рассчитайте константы ступенчатой диссоциации неизвестной кислоты и, с помощью справочника, определите эту кислоту.

Примечание: Для заданий 1-2 в качестве комплексона используйте Нитрилотриуксусную кислоту.

Билет № 3

1. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы:
комплексон; CaCl_2 ; CuCl_2 ; HCl .
В качестве базисных частиц возьмите: H^+ ; Ca^{2+} ; Cu^{2+} ; анион (полностью ионизированный) комплексона.
2. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы:
комплексон; Янтарная кислота; CuCl_2 ; HCl .
В качестве базисных частиц возьмите: H^+ ; Cu^{2+} ; анионы (полностью ионизированные) комплексонов.
3. Откройте файл, содержащий данные эксперимента по потенциометрическому титрованию («experiment_3sp.xlsx»). В нем представлены данные рН-потенциометрического титрования некой трехосновной органической кислоты (100,0 мл, 0.0243 М) раствором NaOH (шаг титрования 1,0 мл, 0.0153 М). Рассчитайте константы ступенчатой диссоциации неизвестной кислоты и, с помощью справочника, определите эту кислоту.

Примечание: Для заданий 1-2 в качестве комплексона используйте Иминодиуксусную кислоту.

Билет № 4

1. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы:
комплексон; CaCl_2 ; CuCl_2 ; HCl .
В качестве базисных частиц возьмите: H^+ ; Ca^{2+} ; Cu^{2+} ; анион (полностью ионизированный) комплексона.
2. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы:
комплексон; Янтарная кислота; CuCl_2 ; HCl .
В качестве базисных частиц возьмите: H^+ ; Cu^{2+} ; анионы (полностью ионизированные) комплексонов.
3. Откройте файл, содержащий данные эксперимента по потенциометрическому титрованию («experiment_4sp.xlsx»). В нем представлены данные рН-потенциометрического титрования некой трехосновной органической кислоты

(100,0 мл, 0.0243 М) раствором NaOH (шаг титрования 1,0 мл, 0.0153 М). Рассчитайте константы ступенчатой диссоциации неизвестной кислоты и, с помощью справочника, определите эту кислоту.

Примечание: Для заданий 1-2 в качестве комплексона используйте Иминодиянтарную кислоту.

Билет № 5

1. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы:
комплексон; CaCl_2 ; CuCl_2 ; HCl .
В качестве базисных частиц возьмите: Н; Са; Cu; анион (полностью ионизированный) комплексона.
 2. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы:
комплексон; Янтарная кислота; CuCl_2 ; HCl .
В качестве базисных частиц возьмите: Н; Cu; анионы (полностью ионизированные) комплексонов.
 3. Откройте файл, содержащий данные эксперимента по потенциометрическому титрованию («experiment_5sp.xlsx»). В нем представлены данные рН-потенциометрического титрования некой трехосновной органической кислоты (100,0 мл, 0.0243 М) раствором NaOH (шаг титрования 1,0 мл, 0.0153 М). Рассчитайте константы ступенчатой диссоциации неизвестной кислоты и, с помощью справочника, определите эту кислоту.
-

Примечание: Для заданий 1-2 в качестве комплексона используйте Оксиэтилиминодиуксусную кислоту.

Билет № 6

1. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы:
комплексон; CaCl_2 ; CuCl_2 ; HCl .
В качестве базисных частиц возьмите: Н; Са; Cu; анион (полностью ионизированный) комплексона.
 2. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы:
комплексон; Янтарная кислота; CuCl_2 ; HCl .
В качестве базисных частиц возьмите: Н; Cu; анионы (полностью ионизированные) комплексонов.
 3. Откройте файл, содержащий данные эксперимента по потенциометрическому титрованию («experiment_6sp.xlsx»). В нем представлены данные рН-потенциометрического титрования некой трехосновной органической кислоты (100,0 мл, 0.0243 М) раствором NaOH (шаг титрования 1,0 мл, 0.0153 М). Рассчитайте константы ступенчатой диссоциации неизвестной кислоты и, с помощью справочника, определите эту кислоту.
-

Примечание: Для заданий 1-2 в качестве комплексона используйте Этилендиаминдиянтарную кислоту.

Билет № 7

1. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы:
комплексон; CaCl_2 ; CuCl_2 ; HCl .
В качестве базисных частиц возьмите: H^+ ; Ca^{2+} ; Cu^{2+} ; анион (полностью ионизированный) комплексона.
2. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы:
комплексон; Янтарная кислота; CuCl_2 ; HCl .
В качестве базисных частиц возьмите: H^+ ; Cu^{2+} ; анионы (полностью ионизированные) комплексонов.
3. Откройте файл, содержащий данные эксперимента по потенциометрическому титрованию («experiment_7sp.xlsx»). В нем представлены данные рН-потенциометрического титрования некой трехосновной органической кислоты (100,0 мл, 0.0243 М) раствором NaOH (шаг титрования 1,0 мл, 0.0153 М). Рассчитайте константы ступенчатой диссоциации неизвестной кислоты и, с помощью справочника, определите эту кислоту.

Примечание: Для заданий 1-2 в качестве комплексона используйте Лимонную кислоту.