

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Лельчицкий Игорь Давыдович

Должность: и.о. проректора по образовательной деятельности

Дата подписания: 13.07.2026 14:57:26

Уникальный программный ключ:

aa5b5ee17d97a2e4d94e98e995320af94f043ce2

УП: 04.04.01 Химия

AX 2025.plx

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



Утверждаю:

руководитель ООП

Никольский В.М.

28 мая 2026г.

Рабочая программа дисциплины

Расчет констант равновесий

Закреплена за
кафедрой:

Неорганической и аналитической химии

Направление
подготовки:

04.04.01 Химия

Направленность
(профиль):

Аналитическая химия

Квалификация:

Магистр

Форма обучения:

очная

Семестр:

3

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 термохимические свойства.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ОП: Б1.О

Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Математика

Аналитическая химия

Физическая химия

Неорганическая химия

Математическое моделирование химических равновесий

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

Дисциплина закладывает знания для подготовки выпускной работы, научно-исследовательской работы

Научно-исследовательская работа

Преддипломная практика

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость	6 ЗЕТ
Часов по учебному плану	216
в том числе:	
самостоятельная работа	90
часов на контроль	36

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

ОПК-1.1: Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук

- | | |
|-----------|---|
| 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; Умеет решать обратную задачу, рассчитывая константы равновесия на основе экспериментальных данных

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

ОПК-1.2: Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук

Уровень 1 Основные компьютерные программы для нахождения констант равновесий

Уровень 1 Выбирать наиболее подходящую для решения задачи программу

Уровень 1 Свободной эксплуатацией компьютерной техники и основных компьютерных программ для расчета констант равновесий

ОПК-2.1: Проводит критический анализ результатов собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ, корректно интерпретирует их

Уровень 1 Необходимость учета внешних факторов, а также учет дополнительных равновесий в модели, описывающей исследуемую систему

Уровень 1 Интерпретировать результаты расчета, критически их оценивать и, при необходимости, вносить коррективы в расчетную модель

Уровень 1 Свободной эксплуатацией компьютерной техники и основных компьютерных программ для расчета констант равновесий

ОПК-2.2: Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук

Уровень 1 Методики расчета констант химического равновесия, основы статистической обработки данных

Уровень 1 Сравнивать результаты собственных исследований с данными из литературных источников; оценивать влияние различных факторов на химическое равновесие и делать соответствующие выводы

Уровень 1 Умение проводить комплексный анализ данных, включая статистическую обработку и визуализацию, способность формулировать четкие и обоснованные выводы на основе проведенного анализа

5. ВИДЫ КОНТРОЛЯ

Виды контроля в семестрах:	
экзамены	3

6. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

Язык преподавания: русский.

7. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

№	Наименование разделов и тем	Вид занятия	Сем.	Часов	Примечание
	Раздел 1. Введение				

1.1	Введение в методы расчета констант химических равновесий. Основные понятия, определения. Методы вычисления коэффициентов активности компонентов.	Лек	3	1	
	Раздел 2. Математические основы моделирования химических равновесий				
2.1	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» равновесии в многофазных системах. Решение обратной задачи математического моделирования химических равновесий. Основные понятия математической статистики, применяемые для обработки результатов наблюдений.	Лек	3	1	
	Раздел 3. Компьютерная программа для метода математического моделирования равновесий Solution RSS				
3.1	Знакомство с программами для расчета равновесных концентраций. Правила подготовки и ввода исходных данных для компьютерного расчета. Форма представления результатов расчетов. Интерпретация полученных результатов.	Лек	3	1	
3.2	Использование программы. Выбор базисных частиц и его влияние на итоговую матрицу стехиометрических коэффициентов.	Лаб	3	2	
3.3	Использование программы.	Ср	3	6	
	Раздел 4. Моделирование кислотно-основных равновесий				
4.1	Выбор базисных частиц. Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе.	Лек	3	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	3	1	

4.3	Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Построение долевого распределения кислотно-основных форм в растворе. Построение кривых титрования в различных комбинациях.	Ср	3	3	
	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 рН, соотношения компонентов и т.д.).	Лек	3	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 рН, соотношения компонентов и т.д.)	Лаб	3	1	
5.3	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.)	Ср	3	3	
	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	3	2	
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 рН, соотношения компонентов, ОВ-потенциала и т.д.)	Лаб	3	3	

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 рН, соотношения компонентов, ОВ-потенциала и т.д.)	Ср	3	5	
	Раздел 7. Моделирование равновесий с участием малорастворимых соединений				
7.1	Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе.	Лек	3	2	
7.2	Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Прогнозирование поведения системы при различных воздействиях на нее (влияние рН, соотношения компонентов, ОВ-потенциала, лигандов и т.д.)	Лаб	3	4	
7.3	Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Прогнозирование поведения системы при различных воздействиях на нее (влияние рН, соотношения компонентов, ОВ-потенциала, лигандов и т.д.)	Ср	3	11	
	Раздел 8. Учет ионной силы раствора при расчете констант равновесия				
8.1	Ионная сила раствора. Активность и коэффициенты активности. Уравнение Дебая — Хюккеля. Использование уравнения Девиса.	Лек	3	1	
8.2	Ионная сила раствора. Активность и коэффициенты активности. Уравнение Дебая — Хюккеля. Уравнение Девиса. Учет ионной силы раствора при составлении матрицы стехиометрических коэффициентов.	Лаб	3	4	
8.3	Ионная сила раствора. Активность и коэффициенты активности. Уравнение Дебая — Хюккеля. Уравнение Девиса. Учет ионной силы раствора при составлении матрицы стехиометрических коэффициентов.	Ср	3	13	
	Раздел 9. Решение обратной задачи расчета химических равновесий				

9.1	«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.	Лек	3	2	
9.2	Структура командных файлов программ. Использование программного обеспечения для расчета констант равновесия реакций, описываемых матрицей стехиометрических коэффициентов и их пересчет в другие характеристики.	Лаб	3	20	
9.3	Использование программного обеспечения для расчета констант равновесия реакций, описываемых матрицей стехиометрических коэффициентов и их пересчет в другие характеристики.	Ср	3	20	
	Раздел 10. Расчет химических равновесий по экспериментальным наборам данных				
10.1	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.	Лек	3	3	
10.2	Расчет различных характеристик (константы ступенчатой диссоциации, константы нестойкости, произведения растворимости, стандартные электродные потенциалы, энтальпии образования).	Лаб	3	40	
10.3	Расчет различных характеристик (константы ступенчатой диссоциации, константы нестойкости, произведения растворимости, стандартные электродные потенциалы, энтальпии образования).	Ср	3	29	
	Раздел 11. Контроль				
11.1	Расчет констант равновесия на основе имеющихся экспериментальных данных	Экзамен	3	36	

Образовательные технологии

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

Список образовательных технологий

1	Информационные (цифровые) технологии
2	Дискуссионные технологии (форум, симпозиум, дебаты, аквариумная дискуссия,

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

8.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

Задача 1. (ОПК-1.1, ОПК-1.2, ОПК-2.1)

В результате эксперимента была синтезирована органическая кислота (HnL). Было проведено рН-метрическое титрование (шаг титрования 1,0 мл) и получен набор данных.

Требуется определить основность кислоты и рассчитать константы ступенчатой диссоциации.

$$V(\text{HnL}) = 25,0 \text{ мл}$$

$$C(\text{HnL}) = 0.0191 \text{ М}$$

$$C(\text{NaOH}) = 0.0334 \text{ М}$$

Для расчетов использовать программу для решения обратной задачи равновесия.

Вид работы / способ:

вид - самостоятельная лабораторная работа

способ - письменный (матрица и расчет констант) и на компьютере (расчет концентраций и итоговое решение)

Критерии оценивания:

- Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 4 баллов;
- Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2-3 балла;
- Имеется верное решение только части задания – 1 балл.

Задача 2. (ОПК-1.1, ОПК-1.2, ОПК-2.1)

Было проведено потенциометрическое титрование 50,0 мл раствора вновь синтезированного органического соединения (L) раствором FeCl_3 (шаг титрования 1,5 мл). На основании полученной экспериментальной кривой рассчитать константы нестойкости. Учесть возможность образования нескольких типов комплексов.

$$C(\text{L}) = 0.0312 \text{ М}$$

$$C(\text{FeCl}_3) = 0.0281 \text{ М}$$

Для расчетов использовать программу для решения обратной задачи равновесия.

Вид работы / способ:

вид - самостоятельная лабораторная работа

способ - письменный (матрица и расчет констант) и на компьютере (расчет концентраций и итоговое решение)

Критерии оценивания:

- Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 4 баллов;
- Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2-3 балла;
- Имеется верное решение только части задания – 1 балл.

Задача 3. (ОПК-1.1, ОПК-1.2, ОПК-2.1)

В результате исследования вновь синтезированного соединения (HnL) на возможность образования комплексов с ионом цинка была проведена серия исследований:

1) рН-метрическое титрование 40, мл раствора HnL раствором NaOH (шаг титрования 1,0 мл);

2) потенциометрическое титрование 50,0 мл раствора HnL раствором ZnCl_2 (шаг

титрования 0,75 мл).

$C(\text{HnL}) = 0.0457 \text{ M}$

$C(\text{NaOH}) = 0.0204 \text{ M}$

$C(\text{ZnCl}_2) = 0.372 \text{ M}$

Анализируя экспериментальные данные с использованием программы для решения обратной задачи равновесия необходимо определить:

1) Основность HnL и рассчитать константы ступенчатой диссоциации по каждой ступени;

2) Предложить варианты состава комплексов и, в случае подтверждения их существования, рассчитать для них константы нестойкости (ZnL , ZnHL , ZnL_2 и т.п.)

Вид работы / способ:

вид: самостоятельная лабораторная работа

способ: письменный (матрица и расчет констант) и на компьютере (расчет концентраций и итоговое решение)

Критерии оценивания:

- 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.

Задача 4. (ОПК-1.1, ОПК-1.2, ОПК-2.1)

На основании экспериментальных данных по окислению исследуемого органического соединения (Z) в присутствии $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$, в виде кривых потенциометрического титрования, необходимо определить количество электронов, участвующих в процессе, а также стандартный электродный потенциал данной полуреакции.

Было сделано 3 набора измерений со следующими условиями (шаг титрования везде равен 1,0 мл):

1 исследование

Z – 25,0 мл, 0,0433 M

$\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ – 0,0246 M

2 исследование

Z – 25,0 мл, 0,0314 M

$\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ – 0,0246 M

3 исследование

Z – 20,0 мл, 0,0241 M

$\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ – 0,0123 M

Для расчетов использовать программу для решения обратной задачи равновесия.

Вид работы / способ:

вид - самостоятельная лабораторная работа

способ - письменный (матрица и расчет констант) и на компьютере (расчет концентраций и итоговое решение)

Критерии оценивания:

- 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.

Задача 5. (ОПК-1.1, ОПК-1.2, ОПК-2.1, ОПК-2.2)

Имеется набор данных, полученных в ходе рН-метрического титрования 20,0 мл

синтезированной органической кислоты, содержащей две карбоксильные группы, раствором гидроксида натрия (NaOH), шаг титрования 1,0 мл.

$C(\text{кислота}) = 0,0315 \text{ М}$,

$C(\text{NaOH}) = 0,0112 \text{ М}$.

Используя программу для решения обратной задачи равновесия рассчитать константы ступенчатой диссоциации данной кислоты.

Возможным использованием индикатора – пренебречь.

Вид работы / способ:

вид: самостоятельная лабораторная работа

способ: письменный (матрица и расчет констант) и на компьютере (расчет концентраций и итоговое решение)

Критерии оценивания:

- 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.

Задача 6. (ОПК-1.1, ОПК-1.2, ОПК-2.1, ОПК-2.2)

Было проведено потенциметрическое 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 AgL .

$C(\text{AgNO}_3) = 0,0240 \text{ М}$,

$C(\text{NaOH}) = 0,1241 \text{ М}$.

$C(\text{L}) = 0,0212 \text{ М}$.

Используя программу для решения обратной задачи равновесия необходимо проверить гипотезу о существовании AgL . В случае существования комплексного соединения, требуется рассчитать его константу нестойкости.

Вид работы / способ:

вид: самостоятельная лабораторная работа

способ: письменный (матрица и расчет констант) и на компьютере (расчет концентраций и итоговое решение)

Критерии оценивания:

- 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.

8.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации

Задача 1. (ОПК-1.1, ОПК-1.2, ОПК-2.1, ОПК-2.2)

Имеется набор данных, полученных в ходе потенциметрического титрования смеси из 50,0 мл раствора FeCl_3 и 10,0 мл раствора HCl – раствором тетранатриевой соли ЭДТА (Na_4L) в присутствии сульфосалициловой кислоты (индикатор), шаг титрования 0,5 мл. Известно, что возможно образование двух комплексов: $[\text{FeL}]$ и $[\text{FeHL}]$ (заряды опущены)

$C(\text{FeCl}_3) = 0,0563 \text{ М}$,

$C(\text{Na}_4\text{L}) = 0,0385 \text{ М}$.

$C(\text{HCl}) = 0,05 \text{ М}$.

Используя программу для решения обратной задачи равновесия рассчитать константы нестойкости комплексных соединений.

Участием индикатора – пренебречь.

Вид работы / способ:

вид: самостоятельная лабораторная работа
способ: письменный (матрица и расчет констант) и на компьютере (расчет концентраций и итоговое решение)

Критерии оценивания:

- 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.

Задача 2. (ОПК-1.1, ОПК-1.2, ОПК-2.1, ОПК-2.2)

Было проведено УФ-спектрофотометрическое титрование 50,0 мл раствора CuCl_2 синтезированным органическим соединением (L). Получен набор данных поглощения на заданной длине волны в зависимости от объема добавленного титранта, шаг титрования 1,0 мл. Согласно предварительному анализу известно, что возможно образование двух комплексов CuL и CuL_2 .

$C(\text{CuCl}_2) = 0,0326 \text{ M}$,

$C(\text{L}) = 0,0213 \text{ M}$.

Используя программу для решения обратной задачи равновесия рассчитать константы нестойкости комплексных соединений.

Вид работы / способ:

вид: самостоятельная лабораторная работа
способ: письменный (матрица и расчет констант) и на компьютере (расчет концентраций и итоговое решение)

Критерии оценивания:

- 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 итогового экзамена (примерные)

Билет № 1

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

комплексон; $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$; CuSO_4 ; H_2SO_4 .

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

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

комплексон; Янтарная кислота; CuSO_4 ; H_2SO_4 .

В качестве базисных частиц возьмите: H; Cu; анионы (полностью ионизированные) комплексонов.

3. Откройте файл, содержащий данные эксперимента по потенциометрическому титрованию («experiment_1.xlsx»). В нем представлены данные титрования некоего органического соединения Z (50,0 мл, 0.0294 M) раствором FeCl_3 (шаг титрования 0,75 мл, 0.0175 M). Предполагается наличие комплексов состава $[\text{FeZ}]$ и $[\text{FeHZ}]$. Определите для этих комплексов константы нестойкости. Возможное образование гидроксокомплексов не учитывать.

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; $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$; CuSO_4 ; H_2SO_4 .

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

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

комплексон; Янтарная кислота; CuSO_4 ; H_2SO_4 .

В качестве базисных частиц возьмите: H; Cu; анионы (полностью ионизированные) комплексонов.

3. Откройте файл, содержащий данные эксперимента по потенциометрическому титрованию («experiment_2.xlsx»). В нем представлены данные титрования некоего органического соединения Z (50,0 мл, 0.0314 M) раствором FeCl_3 (шаг титрования 0,75 мл, 0.0245 M). Предполагается наличие комплексов состава $[\text{FeZ}]$ и $[\text{FeHZ}]$. Определите для этих комплексов константы нестойкости. Возможное образование гидроксокомплексов не учитывать.

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; $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$; CuSO_4 ; H_2SO_4 .

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

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

комплексон; Янтарная кислота; CuSO_4 ; H_2SO_4 .

В качестве базисных частиц возьмите: H; Cu; анионы (полностью ионизированные) комплексонов.

3. Откройте файл, содержащий данные эксперимента по потенциометрическому титрованию («experiment_3.xlsx»). В нем представлены данные титрования некоего органического соединения Z (50,0 мл, 0.0290 M) раствором FeCl_3 (шаг титрования 0,75 мл, 0.0151 M). Предполагается наличие комплексов состава $[\text{FeZ}]$ и $[\text{FeHZ}]$. Определите для этих комплексов константы нестойкости. Возможное образование гидроксокомплексов не учитывать.

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; $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$; CuSO_4 ; H_2SO_4 .

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

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

комплексон; Янтарная кислота; CuSO_4 ; H_2SO_4 .

В качестве базисных частиц возьмите: H; Cu; анионы (полностью ионизированные)

комплексон.

3. Откройте файл, содержащий данные эксперимента по потенциометрическому титрованию («experiment_4.xlsx»). В нем представлены данные титрования некоего органического соединения Z (50,0 мл, 0.0240 M) раствором FeCl₃ (шаг титрования 0,75 мл, 0.0290 M). Предполагается наличие комплексов состава [FeZ] и [FeHZ]. Определите для этих комплексов константы нестойкости. Возможное образование гидроксокомплексов не учитывать.

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; Fe₂(SO₄)₃; CuSO₄; H₂SO₄.

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

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

комплексон; Янтарная кислота; CuSO₄; H₂SO₄.

В качестве базисных частиц возьмите: H; Cu; анионы (полностью ионизированные) комплексонов.

3. Откройте файл, содержащий данные эксперимента по потенциометрическому титрованию («experiment_5.xlsx»). В нем представлены данные титрования некоего органического соединения Z (50,0 мл, 0.0149 M) раствором FeCl₃ (шаг титрования 0,75 мл, 0.0177 M). Предполагается наличие комплексов состава [FeZ] и [FeHZ]. Определите для этих комплексов константы нестойкости. Возможное образование гидроксокомплексов не учитывать.

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

Билет № 6

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

комплексон; Fe₂(SO₄)₃; CuSO₄; H₂SO₄.

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

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

комплексон; Янтарная кислота; CuSO₄; H₂SO₄.

В качестве базисных частиц возьмите: H; Cu; анионы (полностью ионизированные) комплексонов.

3. Откройте файл, содержащий данные эксперимента по потенциометрическому титрованию («experiment_6.xlsx»). В нем представлены данные титрования некоего органического соединения Z (50,0 мл, 0.0304 M) раствором FeCl₃ (шаг титрования 0,75 мл, 0.0272 M). Предполагается наличие комплексов состава [FeZ] и [FeHZ]. Определите для этих комплексов константы нестойкости. Возможное образование гидроксокомплексов не учитывать.

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; $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$; CuSO_4 ; H_2SO_4 .

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

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

комплексон; Янтарная кислота; CuSO_4 ; H_2SO_4 .

В качестве базисных частиц возьмите: Н; Cu; анионы (полностью ионизированные) комплексонов.

3. Откройте файл, содержащий данные эксперимента по потенциометрическому титрованию («experiment_7.xlsx»). В нем представлены данные титрования некоего органического соединения Z (50,0 мл, 0.0282 М) раствором FeCl_3 (шаг титрования 0,75 мл, 0.0162 М). Предполагается наличие комплексов состава $[\text{FeZ}]$ и $[\text{FeHZ}]$. Определите для этих комплексов константы нестойкости. Возможное образование гидроксокомплексов не учитывать.

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

8.3. Требования к рейтинг-контролю

Рейтинг-контроль не предусмотрен

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

Рекомендуемая литература

Основная

Шифр	Литература
Л.1.1	Апарнев, Лупенко, Александрова, Казакова, Аналитическая химия, Москва: Юрайт, 2024, ISBN: 978-5-534-07838-1, URL: https://urait.ru/bcode/539188
Л.1.2	Рясенский, Учебно-методический комплекс по дисциплине "Математическое моделирование химических равновесий", Тверь, 2012, ISBN: , URL: http://texts.lib.tversu.ru/texts2/04421umk.pdf
Л.1.3	Рясенский, Феофанова, Крылов, Сравнительная характеристика компьютерных программ для расчета констант равновесий в растворах, Тверь: Тверской государственный университет, , ISBN: , URL: http://eprints.tversu.ru/9446/

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"

Э1	eLIBRARY.RU : науч. электрон. б-ка : сайт. Москва, 2000. URL: https://elibrary.ru (дата обращения: 16.06.2025). Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.: https://elibrary.ru
Э2	LMS : Система управления обучением : сайт. Тверь, 2024. URL: https://lms.tversu.ru (дата обращения: 16.06.2025). Режим доступа: для студентов ТвГУ: https://lms.tversu.ru
Э3	Расчет химических равновесий в растворах : сайт. Москва. URL https://chemequ.ru (дата обращения: 16.06.2025).: https://chemequ.ru
Э4	Электронная библиотека учебных материалов по химии : сайт. Москва. URL: https://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/welcome.html (дата обращения: 16.06.2025).: 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: 16.06.2025): https://chembaby.ru/predmety/analiticheskaya-ximiya/materials
----	---

Перечень программного обеспечения

1	Kaspersky Endpoint Security 10 для Windows
2	Adobe Acrobat Reader
3	Google Chrome
4	OpenOffice
5	Foxit Reader
6	Notepad++

Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

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

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

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

11. 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» равновесия 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. Учет ионной силы раствора при расчете констант равновесия.

Ионная сила раствора. Активность и коэффициенты активности. Уравнение Дебая — Хюккеля. Уравнение Девиса. Учет ионной силы раствора при составлении матрицы стехиометрических коэффициентов.

Тема 9. 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 10. Расчет химических равновесий по экспериментальным наборам данных

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 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.

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).