

Документ подписан при помощи электронной подписи

Информация о владельце:

ФИО: Смирнов Сергей Николаевич

Должность: врио ректора

ГБОУ ВО «ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Дата подписания: 16.05.2024 13:02:41

Уникальный программный ключ:

69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

24 апреля 2024 г.



Рабочая программа дисциплины

**Математическое моделирование химических равновесий**

Закреплена за кафедрой:

**Неорганической и аналитической химии**

Направление подготовки:

**04.03.01 Химия**

Направленность (профиль):

**Экспертная и медицинская химия**

Квалификация:

**Бакалавр**

Форма обучения:

**очная**

Семестр:

**6**

Программу составил(и):

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

Тверь, 2024

## 1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

### **Цели освоения дисциплины (модуля):**

Освоение теоретических основ и практических навыков расчета равновесного состава гомогенных химических систем

### **Задачи:**

1. Изучение теоретических основ метода математического моделирования химических равновесий;
2. Освоение использования метода для моделирования систем с различными типами взаимодействий;
3. Формирование умений и навыков использования метода применительно к реальным химическим системам.

## 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ОП: Б1.В

### **Требования к предварительной подготовке обучающегося:**

Математика

Аналитическая химия

Физическая химия

Неорганическая химия

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

Дисциплина закладывает знания для подготовки выпускной квалификационной работы, производственной практики, самостоятельной научной работы.

Преддипломная практика

## 3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

<b>Общая трудоемкость</b>	3 ЗЕТ
Часов по учебному плану	108
<b>в том числе:</b>	
аудиторные занятия	54
самостоятельная работа	44

## **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 технологии)

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	6

### 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	Введение в математическое моделирования химических равновесий	Лек	6	1	Л1.1	
	Раздел 2. Математические основы моделирования химических равновесий					

2.1	Основные законы 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	6	3	Л1.1	
2.2	Составление расширенного базиса и матрицы стехиометрических коэффициентов для равновесных процессов.	Лаб	6	4	Л1.1	
2.3	Составление расширенного базиса и матрицы стехиометрических коэффициентов для равновесных процессов.	Ср	6	3	Л1.1	
	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	6	2	Л1.1	
3.2	Использование программы. Выбор базисных частиц и его влияние на итоговую матрицу стехиометрических коэффициентов.	Лаб	6	4	Л1.1	
3.3	Использование программы.	Ср	6	3	Л1.1	
	Раздел 4. Моделирование кислотно-основных равновесий					
4.1	Выбор базисных частиц. Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе.	Лек	6	3	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	6	6	Л1.1Л2.1 Э3 Э4 Э5	
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	6	9	Л1.1Л2.1 Э2 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	6	3	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	6	6	Л1.1Л2.1 Э3 Э4 Э5	

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 pH, соотношения компонентов и т.д.).	Ср	6	9	Л1.1Л2.1 Э2 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	6	3	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	6	8	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	6	10	Л1.1Л2.1 Э2 Э3 Э4	
	Раздел 7. Моделирование комбинированных химических равновесий					

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	6	3	Л1.1 Э1	
7.2	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 pH, соотношения компонентов, ОВ-потенциала, лигандов и т.д.)	Лаб	6	8	Л1.1Л2.1 Э1 Э3 Э4 Э5	
7.3	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 pH, соотношения компонентов, ОВ-потенциала, лигандов и т.д.)	Ср	6	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
2	Дискуссионные технологии (форум, симпозиум, дебаты, аквариумная дискуссия, панельная дискуссия, круглый стол, фасилитированная и т.д.)

## **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

- Задачи на моделирование кислотно-основных взаимодействий - 10 б.
- Задачи на моделирование процессов комплексообразования - 10 б.
- Модульная контрольная 1 - 20 б.

Итого за 1 модуль - 40 б.

2. Второй модуль

- Задачи на моделирование окислительно-восстановительных равновесий - 10 б.
- Задачи на моделирование комбинированных взаимодействий - 20 б.
- Модульная контрольная 2 - 30 б.

Итого за второй модуль - 60 б.

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

### **9.1. Рекомендуемая литература**

#### **9.1.1. Основная литература**

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

#### **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: <a href="https://znanium.com/catalog/document?id=437096">https://znanium.com/catalog/document?id=437096</a>

### **9.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"**

Э1	eLIBRARY.RU : науч. электрон. б-ка : сайт. Москва, 2000. URL: <a href="https://elibrary.ru">https://elibrary.ru</a> (дата обращения: 14.02.2024). Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.: <a href="https://elibrary.ru">https://elibrary.ru</a>
Э2	LMS : Система управления обучением : сайт. Тверь, 2024. URL: <a href="https://lms.tversu.ru">https://lms.tversu.ru</a> (дата обращения: 14.02.2024). Режим доступа: для студентов ТвГУ: <a href="https://lms.tversu.ru">https://lms.tversu.ru</a>

Э3	Расчет химических равновесий в растворах : сайт. Москва. URL <a href="https://chemequ.ru">https://chemequ.ru</a> (дата обращения: 14.02.2024).: <a href="https://chemequ.ru">https://chemequ.ru</a>
Э4	Электронная библиотека учебных материалов по химии : сайт. Москва. URL: <a href="https://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/welcome.html">https://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/welcome.html</a> (дата обращения: 14.02.2024).: <a href="https://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/welcome.html">https://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/welcome.html</a>
Э5	Учебные материалы : Аналитическая химия: сайт. Москва. URL: <a href="https://chembaby.ru/predmety/analiticheskaya-ximiya/materials">https://chembaby.ru/predmety/analiticheskaya-ximiya/materials</a> (дата обращения: 14.02.2024).: <a href="https://chembaby.ru/predmety/analiticheskaya-ximiya/materials">https://chembaby.ru/predmety/analiticheskaya-ximiya/materials</a>

### 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 равновесии. 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.

#### **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 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 pH, 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 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.

**Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации**

<b>№</b>	<b>Результат (индикатор)</b>	<b>Формулировка задания</b>	<b>Вид работы / способ</b>	<b>Критерии оценивания</b>
<b>МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ АТТЕСТАЦИИ</b>				
	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3	В мерную колбу на 100 мл внесли 20,0 мл раствора $\text{H}_3\text{PO}_4$ и 20,0 мл раствора $\text{NaOH}$ . После перемешивания довели водой до метки. Какова величина $\text{pH}$ получившегося раствора? $\text{C}(\text{NaOH}) = 0,0731 \text{ M}$ , $\text{C}(\text{H}_3\text{PO}_4) = 0,0302 \text{ M}$ . При решении использовать специализированную программу Solution RSS все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр	вид: Лабораторные работы способ: письменный (матрица и расчет констант) и с использованием компьютера (расчет концентраций и итоговое решение)	Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не исказжающие общего смысла – 2 балла; Имеется верное решение только части задания – 1 балл.
	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3	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. $\text{C}(\text{HCl}) = 0,0484 \text{ M}$ , $\text{C}(\text{Na}_3\text{PO}_4) = 0,0240 \text{ M}$ . При решении использовать специализированную программу Solution RSS все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр	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 – 4 баллов; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не исказжающие общего смысла – 2-3 балла; Имеется верное решение только части задания – 1 балл.
	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-2.1	Смешали 50,0 мл раствора $\text{NaOH}$ , 50,0 мл раствора лимонной кислоты ( $\text{H}_3\text{Cit}$ ) и 20,0 мл раствора $\text{CaCl}_2$ . Какова величина $\text{pCa}$ ? Учитывать образование комплексов: $[\text{CaCit}]$ , $[\text{Ca}(\text{HCit})]$ , $[\text{CaOH}]$ (заряды опущены). $\text{C}(\text{NaOH}) = 0,0563 \text{ M}$ , $\text{C}(\text{H}_3\text{Cit}) = 0,0385 \text{ M}$ .	вид: самостоятельная лабораторная работа способ: письменный (матрица и расчет	Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 4 баллов; Дано верное решение, но допущены

		<p>Рассчитать диапазон pH, в котором доминирует комплекс [CaCit]. При решении использовать специализированную программу Solution RSS все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр. Соотношение Ca : Cit принять в соответствии с условием задачи.</p>	констант) и на компьютере (расчет концентраций и итоговое решение)	несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2-3 баллов; Имеется верное решение только части задания – 1 балл.
	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-2.1	<p>Построить кривую титрования (в координатах V(CaCl<sub>2</sub>) – pH) 50,0 мл раствора тетранатриевой соли этилендиаминтетрауксусной кислоты (Na<sub>4</sub>L) и 10,0 мл раствора HCl – раствором CaCl<sub>2</sub>. Дискретность добавления титранта – 1,0 мл. Всего на кривой не менее 100 точек. Учитывать увеличение объема титруемой смеси вследствие добавления титранта. Учитывать образование комплексов: [CaL], [Ca(HL)], [CaOH] (заряды опущены). C(CaCl<sub>2</sub>) = 0,0270 М, C(Na<sub>4</sub>L) = 0,0302 М.</p> <p>Рассчитать диапазон pH, в котором доминирует комплекс [CaL]. При решении использовать специализированную программу Solution RSS все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр. Соотношение Ca : L принять в соответствии с условием задачи.</p>	вид: самостоятельная лабораторная работа способ: письменный (матрица и расчет констант) и на компьютере (расчет концентраций и итоговое решение)	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 5 баллов;</p> <p>Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2-4 баллов;</p> <p>Имеется верное решение только части задания – 1 балл.</p>
	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-2.1 ПК-2.2	<p>Смешали 50,0 мл раствора FeCl<sub>3</sub>, и 50,0 мл раствора лимонной кислоты (H<sub>3</sub>Cit). Постройте кривую титрования этой смеси раствором Трилон Б в координатах V(Трилон Б)-pH. Дискретность добавления титранта – 1,0 мл, всего на кривой 100 точек. C(FeCl<sub>3</sub>) = 0,0180 М C(H<sub>3</sub>Cit) = 0,0259 М C(Трилон Б) = 0,0295 М</p> <p>Используя базы данных по химии сети Интернет составьте перечень образующихся в данной системе частиц, постройте матрицу стехиометрических коэффициентов и рассчитайте константы равновесия. Данную матрицу используйте для расчета</p>	вид: самостоятельная лабораторная работа способ: письменный (матрица и расчет констант) и на компьютере (расчет концентраций и итоговое решение)	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 5 баллов;</p> <p>Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2-4 баллов;</p> <p>Имеется верное решение только части задания – 1 балл.</p>

		кривых титрования в программе Solution RSS.		балл.
	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-2.1	Смешали 10,0 мл раствора $\text{SnCl}_2$ , 25,0 мл раствора $\text{FeCl}_3$ и 20,0 мл раствора $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ . Какова величина ОВ потенциала смеси ( $E$ )? Возможное образование гидроксокомплексов не учитывать. $C(\text{SnCl}_2) = 0,0202 \text{ M}$ $C(\text{FeCl}_3) = 0,0114 \text{ M}$ $C(\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7) = 0,0259 \text{ M}$ При решении использовать специализированную программу Solution RSS все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр.	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 исказывающие 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	Построить кривую титрования 50,0 мл раствора $\text{FeSO}_4$ и 50,0 мл 0,25M раствора $\text{H}_2\text{SO}_4$ , 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 все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр.	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 исказывающие общего смысла – 3-5 баллов; Имеется верное решение только части задания – 1-2 балла.
	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-2.1 ПК-2.2	Смешали 15,0 мл раствора $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$ и 20,0 мл раствора $\text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3$ . Рассчитайте величину ОВ потенциала смеси. $C((\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8) = 0,0125 \text{ M}$ $C(\text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3) = 0,0115 \text{ M}$ При решении использовать специализированную программу Solution RSS все предварительные вычисления рекомендуется проводить с точностью до 4-х значащих цифр.	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 исказывающие общего смысла – 2-4

			решение)	баллов; Имеется верное решение только части задания – 1 балл.
<b>МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ</b>				
	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-2.1 ПК-2.2	Смешали 20,0 мл раствора $\text{FeCl}_2$ , 40,0 мл раствора цитрата натрия ( $\text{Na}_3\text{Cit}$ ) и 50 мл $\text{HCl}$ . Постройте кривые титрования этой смеси раствором $\text{CuCl}_2$ 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 образующихся в данной системе частиц, 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.
	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-2.1 ПК-2.2	Смешали 25,0 мл раствора $\text{FeCl}_2$ , 5,0 мл раствора $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ и 20,0 мл $\text{HCl}$ . 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

- 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:  $\text{H}$ ;  $\text{Cu}$ ; анион (полностью ионизированный) комплексона.

2. См п.1.

В качестве базисных частиц возьмите:  $\text{OH}$ ;  $\text{Cu}$ ; анион (полностью ионизированный) комплексона.

3. Постройте кривую титрования 50.0 мл р-ра с концентрацией  $\text{CuSO}_4$  0,01М и  $\text{H}_2\text{SO}_4$  0,001М, р-ром комплексона с концентрацией 0,1М.

4. Раствор содержит комплексон и  $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2$  в мольном соотношении 3:1.

Найдите величину pH 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:  $\text{H}$ ;  $\text{Cu}$ ; анион (полностью ионизированный) комплексона.

2. См п.1.

В качестве базисных частиц возьмите:  $\text{OH}$ ;  $\text{Cu}$ ; анион (полностью ионизированный) комплексона.

3. Постройте кривую титрования 50.0 мл р-ра с концентрацией  $\text{CuSO}_4$  0,01М и  $\text{H}_2\text{SO}_4$  0,001М, р-ром комплексона с концентрацией 0,1М.

4. Раствор содержит комплексон и  $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2$  в мольном соотношении 3:1.

Найдите величину pH 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:  $\text{H}$ ;  $\text{Cu}$ ; анион (полностью ионизированный) комплексона.

2. См п.1.

В качестве базисных частиц возьмите:  $\text{OH}$ ;  $\text{Cu}$ ; анион (полностью ионизированный) комплексона.

3. Постройте кривую титрования 50.0 мл р-ра с концентрацией  $\text{CuSO}_4$  0,01М и  $\text{H}_2\text{SO}_4$  0,001М, р-ром комплексона с концентрацией 0,1М.

4. Раствор содержит комплексон и  $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2$  в мольном соотношении 3:1.

Найдите величину pH 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; CuSO<sub>4</sub>; H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>.  
В качестве базисных частиц возьмите: H; 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 CuSO<sub>4</sub> 0,01М и H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 0,001М, р-ром комплексона с концентрацией 0,1М.
4. Раствор содержит комплексон и Mg(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> в мольном соотношении 3:1.  
Найдите величину pH 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; CuSO<sub>4</sub>; H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>.  
В качестве базисных частиц возьмите: H; 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 CuSO<sub>4</sub> 0,01М и H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 0,001М, р-ром комплексона с концентрацией 0,1М.
4. Раствор содержит комплексон и Mg(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> в мольном соотношении 3:1.  
Найдите величину pH при котором закомплексованность ионов магния составит 85%.

---

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

#### Билет № 6

1. Составьте матрицу стехиометрических коэффициентов и приведите константы возможных равновесий для системы:  
комплексон; CuSO<sub>4</sub>; H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>.  
В качестве базисных частиц возьмите: H; 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 CuSO<sub>4</sub> 0,01М и H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 0,001М, р-ром комплексона с концентрацией 0,1М.
4. Раствор содержит комплексон и Mg(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> в мольном соотношении 3:1.  
Найдите величину pH при котором закомплексованность ионов магния составит 85%.

---

Примечание: Для заданий 1-4 в качестве комплексона используйте Этилендиаминдинянтарную 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: H; 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  $\text{CuSO}_4$  0,01М и  $\text{H}_2\text{SO}_4$  0,001М, р-ром комплексона с концентрацией 0,1М.
4. Раствор содержит комплексон и  $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2$  в мольном соотношении 3:1.  
Найдите величину pH при котором закомплексованность ионов магния составит 85%.

---

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