

Специальность / Speciality:
7-07-0531-01 Фундаментальная химия / 7-07-0531-01 Fundamental Chemistry

Учебная дисциплина, модуль / Academic discipline, module:
**Сложные химические равновесия, Математические методы в химии /
Complex chemical equilibria, Mathematical methods in chemistry**

Краткое содержание учебной дисциплины, модуля / Brief summary	Цель учебной дисциплины – систематизировать знания об основных типах ионных и экстракционных равновесий и подходах к их описанию и расчету с помощью систем компьютерной математики, что позволит в будущей профессиональной деятельности химика решать разнообразные задачи теоретического и экспериментального характера, в частности, определять оптимальные условия проведения химического анализа и синтеза. Задачи учебной дисциплины: – развить у студентов навыки расчета ионных и экстракционных равновесий, заключающиеся в использовании условных констант и молярных долей; – ознакомить студентов с системой компьютерной математики Mathematica, онлайн-программами для расчета и графического описания равновесий и показать их возможности для прогнозирования равновесий в сложных многокомпонентных системах.	The purpose of the academic discipline is to systematize knowledge of the main types of ionic and extraction equilibria and approaches to their description and calculation using computer mathematics systems, that will allow chemist to solve various theoretical and experimental problems in the future professional activity, in particular, to determine the optimal conditions for carrying out chemical analysis and synthesis. The objectives of the academic discipline: – to develop students' skills in calculating ionic and extraction equilibria, that consist of using conditional constants and molar fractions; – to acquaint students with the Mathematica computer mathematics system, online programs for equilibria calculating and graphical describing, and to show their opportunities for predicting equilibria in complex multicomponent systems.
--	---	---

Формируемые компетенции / The formed competences	Специализированная компетенция: Применять методы математического анализа, дифференциального исчисления, теории вероятностей, теории статистического оценивания для решения задач химического содержания.	Specialized competence: To apply methods of mathematical analysis, differential calculus, probability theory, and statistical estimation theory for solving problems of chemical subject-matter.
Результаты обучения (знать, уметь, владеть) / Learning outcomes (know, be able to, have skills in)	Знать: – основные понятия и определения, используемые для описания систем с ионными и экстракционными равновесиями; – основные математические приемы и приближения для вывода и решения уравнений, описывающих те или иные равновесия; Уметь: – рассчитывать pH растворов протолитов, а также молярные доли частиц, участвующих в кислотно-основном равновесии; – рассчитывать равновесные концентрации и молярные доли частиц в системах с комплексными соединениями, в том числе при протекании побочных процессов с участием комплексообразователя и лигандов; – рассчитывать растворимость мало-растворимых соединений (МРС) в различных случаях: в чистом растворителе; в присутствии электролита, имеющего или	Know: – the basic concepts and definitions used to describe systems with ionic and extraction equilibria; – the basic mathematical techniques and approximations used to derive and solve equations describing certain equilibria; Be able to: – calculate the pH of protolytes solutions, as well as the molar fractions of particles involved in acid-base equilibrium; – calculate equilibrium concentrations and molar fractions of particles in systems with complexes, including during side processes involving a complexing agent and ligands; – calculate the solubility of sparingly soluble compounds (SSC) in various cases: in a pure solvent; in the presence of an electrolyte that has or does not have ions in common with SSC; during side processes (protolytic reactions, complexation); – describe graphically ionic equilibria using distribution and logarithmic concentration di-

	не имеющего общих с МРС ионов; при протекании побочных процессов (протолитические реакции, комплексообразование); – графически описывать ионные равновесия с помощью распределительных и концентрационно-логарифмических диаграмм, проводить по ним вычисления; – прогнозировать распределение неэлектролитов и псевдоэлектролитов (кислоты, основания, амфолиты в условиях подавленной диссоциации), а также возможность и эффективность разделения смесей веществ в различных экстракционных системах; Иметь навык: – применения полученных знаний при расчете гомогенных равновесий в реальных биологических объектах (кровь, слюна, моча, желудочный сок и т.д.); – расчета растворимости МРС (бетон, минералы) в природных водах различной кислотности и при разных парциальных давлениях газов; – оптимизации экстракционных процессов в различных системах	agrams, and perform calculations based on them; – predict the distribution of non-electrolytes and pseudo-electrolytes (acids, bases, ampholytes under conditions of suppressed dissociation), as well as the possibility and efficiency of separating substances mixtures in various extraction systems; Have skills in: – application the acquired knowledge when calculating homogeneous equilibria in real biological objects (blood, saliva, urine, gastric juice, etc.); – calculation the solubility of SSC (concrete, minerals) in natural waters of varying acidity and at different partial pressures of gases; – optimization of extraction processes in various systems
Семестр изучения учебной дисциплины, модуля / Semester of study	5	5

Препреквизиты / Prerequisites	Высшая математика, Неорганическая химия, Аналитическая химия	Higher Mathematics, Inorganic Chemistry, Analytical Chemistry
Трудоемкость в зачетных единицах (кредитах) / Credits	3	3
Количество аудиторных часов и часов самостоятельной работы / Academic hours of students' class work, hours of self-directed learning	44, 46	44, 46
Требования и формы текущей и промежуточной аттестации / Requirements and forms of current and interim certification	Формы текущей аттестации: устный опрос, домашнее практическое задание, контрольная работа Форма промежуточной аттестации: зачет	Forms of current certification: oral examination, practical homework, assessment Form of interim certification: end-of-term test