

ТИПОЛОГИЯ РАСЧЕТОВ В ТЕОРИИ ИОННЫХ РАВНОВЕСИЙ*В.С. Кондрев**Минск, Белорусский государственный университет*

Построение курса аналитической химии, как и курса общей химии, ведется на основных количественных соотношениях: закон постоянства состава, закон сохранения массы, закон действующих масс. В силу этого, математический аппарат в аналитической химии является едва ли не самым мощным среди всех разделов в химии. Соответственно, в методике преподавания аналитической химии обучение количественным расчетам играет очень важную роль.

Раздел «Теория ионных равновесий», на котором строится весь дальнейший курс, традиционно считается весьма тяжелым для восприятия студентами. Исторически сложилось, что построение данного раздела велось на основе типовых задач, классификация которых является общеупотребительной (посмотреть ее можно, например, в [1; 2]). Однако подобная методика обучения имеет и свои минусы. Так, наблюдается сильнейшая однотипность задач («рассчитайте pH 0,1 М уксусной кислоты», «чему равна растворимость хлорида серебра в чистой воде?» и т.д.), классификация расчетов на сегодняшний момент совершенно недостаточна, соответственно, страдает представление о месте аналитической химии и о ее взаимосвязи с другими дисциплинами. Предлагается значительно расширить систематизацию типовых задач, что, несомненно, поможет в дальнейшем составителям сборников упражнений и задач по аналитической химии.

Так, историческую классификацию задач по кислотно-основным равновесиям можно расширить и частично исправить, исходя из использования универсального метода расчета pH, молярных долей в расчетах и т.д. Такая типизация, конечно, условна, однако позволяет оценить широту круга проблем, возникающих в аналитической химии.

Выглядеть она может следующим образом:

1. Расчет pH растворов индивидуальных сильных одноосновных кислот и одноосновных оснований с учетом и без учета диссоциации растворителя.
2. Расчет pH растворов индивидуальных слабых одноосновных нейтральных кислот и слабых одноосновных нейтральных оснований с учетом и без учета диссоциации растворителя.
3. Расчет pH растворов индивидуальных слабых одноосновных катионных кислот и слабых одноосновных анионных оснований с учетом и без учета диссоциации растворителя.
4. Расчет pH и дополнительных характеристик (например, буферной емкости) растворов смесей слабого одноосновного основания со слабой одноосновной кислотой с учетом и без учета диссоциации растворителя.
5. Расчет pH растворов нейтральных, катионных и анионных одноосновных и одноосновных амфолитов.
6. Расчет pH смесей двух и более одноосновных кислот или одноосновных оснований с учетом и без учета диссоциации растворителя:
 - 6.1. Расчет pH смесей двух и более сильных одноосновных кислот (одноосновных оснований).
 - 6.2. Расчет pH смесей сильной и слабой одноосновных кислот (одноосновных оснований).
 - 6.3. Расчет pH смесей двух и более слабых одноосновных кислот (одноосновных оснований).
7. Расчет pH растворов индивидуальных двух- и более основных кислот (двух- и более кислотных оснований).
8. Расчет pH смесей двух- и более основных кислот (двух- и более кислотных оснований).
9. Комбинированные расчеты.

Типизация задач, связанных с равновесиями комплексообразования, более сложна в силу большего разнообразия побочных процессов, однако довольно четко выделяются следующие расчеты:

1) равновесной концентрации комплексообразователя, комплексов, лиганда при заданных общих концентрациях комплексообразователя и лиганда и известных ступенчатых или полных константах устойчивости (нестойкости) и при отсутствии (или пренебрежении) побочных процессов:

1.1) крайний случай: общая концентрация лиганда значительно больше общей концентрации комплексообразователя;

1.2) крайний случай: общая концентрация комплексообразователя значительно больше общей концентрации лиганда;

2) равновесной концентрации комплексообразователей, комплексов, лиганда при заданных общих концентрациях 1-го и 2-го комплексообразователя, лиганда и известных ступенчатых (полных) константах устойчивости (нестойкости), исходя из предположения конкуренции двух комплексообразователей за один лиганд и образования только одноядерных комплексов:

2.1) крайний случай: полное замещение одного комплексообразователя в комплексах на другой;

3) равновесной концентрации комплексообразователя, комплексов, лигандов при заданных начальных концентрациях 1-го и 2-го лигандов, комплексообразователя и известных ступенчатых (полных) константах устойчивости (нестойкости), исходя из предположения конкуренции двух лигандов за один комплексообразователь и образования только одноядерных комплексов:

3.1) крайний случай: образование смешаннолигандных комплексов;

3.2) крайний случай: полное перекомплексообразование;

4) расчеты, осложненные кислотно-основными равновесиями.

Расчеты равновесий в гетерогенных системах обычно рассматриваются только на примере равновесия «осадок-раствор» (экстракционные, сорбционные равновесия рассматриваются довольно поверхностно и часто являются предметом изучения на соответствующих спецкурсах, поэтому тут не приводятся). Основными расчетами в таких равновесиях являются расчет растворимости или определение условий выпадения осадка; их можно типировать следующим образом:

1) расчет растворимости в гипотетическом индифферентном растворителе (необходимо объяснить, в каких случаях воду можно рассмотреть в качестве индифферентного растворителя, а в каких – нет);

2) расчет растворимости в присутствии стороннего электролита;

3) расчет растворимости в присутствии одноименного иона:

3.1) учет влияния ионной силы, создаваемой электролитом, содержащей одноименный ион;

3.2) крайний случай: концентрация иона, общего с ионом в осадке, значительно больше, чем концентрация иона, образовавшегося за счет растворения осадка;

4) расчет растворимости при наличии побочных реакций:

4.1) расчет растворимости при определенном pH, равновесной концентрации лиганда;

4.2) рекурсивный расчет (расчет pH раствора, создаваемого ионами осадка, затем исправленный расчет растворимости с учетом побочных процессов);

4.3) расчет растворимости в присутствии избытка осадителя-комплексанта (крайний случай: расчет минимальной растворимости);

5) расчет условий выпадения осадка в заданных условиях.

Расчеты, связанные с окислительно-восстановительными равновесиями, типизируют в курсе общей и неорганической химии, поэтому лишь кратко перечислим их здесь. Это расчеты потенциала (разности потенциалов), условий протекания окислительно-восстановительной реакции при заданных условиях. В подавляющем большинстве все эти расчеты типизируются по протекающим реакциям.

Список литературы

1. Дорохова, Е.Н. Задачи и вопросы по аналитической химии / Е.Н. Дорохова, Г.Н. Прохорова. – М.: Мир, 2001. – 267 с.
2. Основы аналитической химии. Задачи и вопросы: учеб. пособие для вузов / В.И. Фадеева, Ю.А. Барбалат, А.В. Гармаш [и др.]; под ред. Ю.А. Золотова. – М.: Высшая школа, 2002. – 412 с.

УДК 372.854

О ПОСТРОЕНИИ И ПРОВЕДЕНИИ АДАПТИВНЫХ ЗАНЯТИЙ ПО АНАЛИТИЧЕСКОЙ ХИМИИ НА ПРИМЕРЕ ПРЕПОДАВАНИЯ ТЕОРИИ ИОННЫХ РАВНОВЕСИЙ

*В.С. Кондрев, А.В. Онишук, К.А. Андрончик, И.В. Мельситова
Минск, Белорусский государственный университет*

Аналитическая химия является одним из самых математизированных разделов химии, соответственно, в изучении курса огромную роль играет изучение различных количественных закономерностей (вычисление концентраций по величине аналитического сигнала, количественное предсказание возможности протекания того или иного процесса, нахождение корреляционных зависимостей, построение и анализ графиков и т.д.). Очевидно, при этом студенты сталкиваются с огромным количеством расчетных задач; к тому же умение проводить количественные расчеты прямым образом указывает на усвоение пройденного раздела аналитической химии. Соответственно, построение домашних заданий и контрольных работ целесообразно проводить, используя задачи в качестве основного инструмента наработки знаний.

Например, в разделе аналитической химии, посвященном изучению химических методов анализа, особое место уделяется теории ионных и экстракционных равновесий. Основные задачи, решаемые в рамках данной теории, сводятся к расчету равновесных концентраций частиц при известных константах равновесия и общих концентрациях веществ (так называемая прямая задача аналитической химии). Выделим основные математические операции, которые выполняют студенты при решении таких задач:

- сложение и вычитание дробей;
- умножение и деление дробей;
- возведение дробей в степень, извлечение корня и логарифмирование;
- приведение «многоэтажных» дробей к «двухэтажным»;
- расчет простейших производных;
- пренебрежение слагаемыми в сумме.

Все эти операции внесены в школьную программу по математике и дополнительно оттачиваются при решении задач по алгебре и физике в старших классах средней школы. Однако большинство студентов, обучающихся на химическом факультете БГУ, поступает после окончания классов химико-биологического профиля, математическая подготовка в которых, на наш взгляд, совершенно недостаточна для изучения аналитической химии. Об это также свидетельствует многолетний опыт проведения семинарских занятий и контрольных работ. Поэтому коллективом авторов было принято решение дополнительно с основным курсом аналитической химии проводить адаптивные занятия, способствующие значительному укреплению межпредметных связей «химия–физика–математика», повышению уровня знаний студентов, созданию ситуации успеха, нивелированию боязни перед изучением таких разделов химии, как термодинамика, метрология, электрохимия, строение вещества, квантовая химия.

Ниже приведены примеры подобных задач:

1. Найдите сумму дробей:

$$\frac{K_{a1}}{K_{a1} + [H^+]} + \frac{K_{a2}}{K_{a2} + [H^+]} ; \frac{K_{a1} [H^+]}{K_{a1} K_{a2} + K_{a1} [H^+] + [H^+]^2} + \frac{K'_a}{K'_a + [H^+]}$$

2. Решите следующие уравнения: