

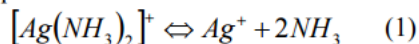
6. Розрахунок рівноважної концентрації йонів в системі метал - ліганд з використанням математичного пакету MathCAD.

Лаура Овакімян, Віра Іщенко, Ольга Сєдих, Світлана Маковецька
Національний університет харчових технологій

Вступ. Математичні методи дослідження завжди мали велике значення в хімії. Математика дає змогу будувати логічні моделі для дослідження будь-якого хімічного явища, що допомагає краще зрозуміти хімічні процеси, знайти якісні та кількісні співвідношення між ними. Більшість хімічних розрахунків можна провести, використовуючи математичну систему MathCad, яка є одним із найкращих і найпопулярніших програмних продуктів для науково-технічних обчислень.

Матеріали і методи. На MathCad використовується жива мова математики: усі одержані вирази мають такий вигляд, начебто використовується тільки папір та олівець. В роботі розглянуто використання математичного пакету MathCad для проведення розрахунку рівноважної концентрації йонів в системі метал – ліганд. Як приклад комплексу взято амоніачний комплекс Аргентуму з концентрацією сполуки 0,01 моль/л.

Результати. Завдання було наступне: розрахувати концентрацію йонів Ag^+ в 0,01 М розчині амоніачного комплексу $[Ag(NH_3)_2]^+$, який характеризується константою нестійкості $K=6,8 \cdot 10^{-8}$. В результаті дисоціації комплексу $[Ag(NH_3)_2]^+$ в розчині встановлюється рівновага:



В цьому випадку константа нестійкості комплексу K виразиться таким чином:

$$K = \frac{[Ag^+][NH_3]^2}{[Ag(NH_3)_2]^+} \quad (2)$$

Позначивши через x концентрацію йонів Аргентуму, отримаємо:

$$\frac{x \cdot (2x)^2}{0,01 - x} = 6,8 \cdot 10^{-8} \quad (3)$$

Співвідношення (3) може бути зведене до нелінійного рівняння:

$$4x^3 + 6,8 \cdot 10^{-8}x - 6,8 \cdot 10^{-10} = 0 \quad (4)$$

Процес наближеного знаходження дійсних коренів складається з двох етапів:

1. Відокремлення, тобто знаходження досить малих відрізків, на кожному з яких міститься один і тільки один дійсний корінь;

2. Уточнення коренів – знаходження кореня рівняння з наперед заданою точністю.

Знаходження кореня нелінійного рівняння (4) будемо виконувати в середовищі математичного пакету MathCAD.

Корінь рівняння (4) $x=5,441 \cdot 10^{-4}$ знайдений з точністю 10^{-6} .

Висновки. Наведений розв'язок даної задачі у середовищі MathCAD показує, що застосування обчислювальних систем при вирішенні задач з хімії прискорює процес обчислень та дає високу точність.