

ОБРАБОТКА РЕЗУЛЬТАТОВ КОМПЛЕКСОНОМЕТРИЧЕСКОГО ТИТРОВАНИЯ С ПОМОЩЬЮ *Wolfram Mathematica 8*

Замалютин В. В., Осипов Р. А., Рукк Н. С., Грамма В. А., Скрябина А. Ю.

Московский государственный университет тонких химических технологий
им. М. В. Ломоносова (МИТХТ им. М. В. Ломоносова),
Естественнонаучный факультет (ЕНФ), каф. Неорганической химии,
Россия, 119571, Москва, проспект Вернадского, д. 86, тел. (495) 936-89-12
e-mail: roukkn@inbox.ru, r.a.osipov@gmail.com

Равновесия в сложных химических системах с участием растворителя часто рассматривают, для простоты расчетов, с различными приближениями и допущениями [1]. Такой подход иногда затрудняет как понимание сути процессов, внося существенные погрешности при нахождении различных физико-химических величин (константы равновесия, равновесные концентрации частиц, точка эквивалентности), так и интерпретацию полученных результатов. Детальное изучение сложных равновесий, а также обработка результатов исследований и визуализация полученных зависимостей становятся возможными при использовании математического пакета *Wolfram Mathematica* [2].

В данной работе приведены обработанные с помощью системы *Mathematica 8* результаты трилонометрического определения содержания неодима (меди) в среде ацетатного (аммиачного) буферного раствора с учетом образования комплексов различного состава $[\text{Nd}(\text{H}_2\text{O})_5(\text{OH})]^{2+}$, $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_{6-n}(\text{NH}_3)_n]^{2+}$, $n = 1 - 6$; $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_{4-k}(\text{OH})_k]^{2-k}$, $k = 1 - 4$, а также с учетом автопротолиза воды и протолиза этилендиаминтетрауксусной кислоты (ЭДТА, Трилона Б). Для описания равновесных концентраций частиц различного состава были составлены две системы уравнений, характеризующих комплексометрическое титрование растворов меди(II) и неодима(III) при каждом добавлении Трилона Б и базирующихся на уравнениях электронейтральности и материального баланса.

С помощью *Mathematica* было получено описывающее кривую титрования аналитическое выражение, учитывающее все множество различных параметров (константы образования различных комплексов, рН раствора и т.д.) и позволяющее определять аналитически точку эквивалентности, с помощью исследования его первой и второй производных. Получить данное выражение, являющееся решением рассматриваемой системы алгебраических уравнений, без применения системы *Mathematica* было бы крайне затруднительно из-за необходимости преобразований огромного числа крайне громоздких выражений. Таким образом, разработан систематический подход к процедуре обработки экспериментальных данных, позволяющий оптимизировать методику аналитического определения некоторых элементов, а также учитывать, при необходимости, и другие факторы.

Литература.

1. Хартли Ф., Бёргес К., Оллок Р. Равновесия в растворах. – М.: Мир, 1983. 360 стр.
2. <http://www.wolfram.com/mathematica>