

**Практическая часть предпрофессионального экзамена на базе РХТУ им.
Д.И. Менделеева**
Направление практической части экзамена: химико-технологическое
**Направление подготовки: моделирование, прототипирование,
прикладная математика**

Перечень тем для подготовки к сдаче практической части
предпрофессионального экзамена
в рамках проекта «Инженерные классы»

1. Моделирование химической задачи с использованием элементов алгебры – составление и решение системы уравнений.
2. Моделирование химической задачи с использованием элементов векторной алгебры – скалярное произведение векторов.
3. Моделирование химической задачи с использованием комбинаторики, элементов ТВ и МС.
4. Моделирование химической задачи с использованием основ математического анализа.
5. Моделирование задач химической кинетики (с использованием свойств показательных и логарифмических функций).

**Критерии оценивания демоверсии практической части
предпрофессионального экзамена
в рамках проекта «Инженерные классы»**

№ п/п	Критерии оценивания	Баллы
1	Выполнение пункта 1	25
2	Выполнение пункта 2	15
3	Выполнение пункта 3	20
Итого:		60

Определение состава смеси по данным спектрофотометрических измерений

Оптическое поглощение растворов химических веществ характеризуют величиной оптической плотности

$$D = \lg \left(\frac{I_0}{I} \right),$$

где I_0, I – интенсивности светового потока соответственно до и после прохождения через исследуемый раствор.

Известно, что оптическая плотность связана с концентрацией поглощающего вещества и толщиной слоя l , в котором происходит поглощение, следующим образом:

$$D = \varepsilon c l,$$

где $\varepsilon = \varepsilon(\lambda)$ – молекулярный коэффициент поглощения, являющийся индивидуальной характеристикой поглощающего вещества и зависящий от длины волны λ .

Для смеси из *н* невзаимодействующих (и, следовательно, поглощающих независимо друг от друга) веществ оптическая плотность $D = D(\lambda)$ раствора равна сумме оптических плотностей веществ, входящих в данную смесь, т.е.

$$D(\lambda) = \varepsilon_1(\lambda)c_1l + \dots + \varepsilon_n(\lambda)c_nl.$$

Так как оптическая плотность $D(\lambda)$ зависит от выбора длины волны λ , то последнее равенство можно записать в виде

$$D(\lambda_i) = l \sum_{j=1}^n \varepsilon_j(\lambda_i) c_j,$$

где λ_i – фиксированное i -е значение длины волны, $i = 1, \dots, n$.

Таким образом, для определения концентрации n компонентов необходимо построить систему минимум из n уравнений, т.е. необходимо выполнить *n* измерений оптической плотности на разных длинах волн.

Рассмотренный подход к определению состава смеси накладывает определенные требования на выбор длин волн, при которых проводятся измерения оптической плотности. Действительно, для смеси аддитивно

поглощающих веществ A и B , характеризующихся молярными коэффициентами поглощения $\varepsilon_A(\lambda)$ и $\varepsilon_B(\lambda)$, концентрация каждого из компонентов может быть найдена из данных о величине оптической плотности смеси на длинах волн λ_1 и λ_2 путем совместного решения следующих двух уравнений

$$D(\lambda_1) = \varepsilon_A(\lambda_1)c_A l + \dots + \varepsilon_B(\lambda_1)c_B l;$$

$$D(\lambda_2) = \varepsilon_A(\lambda_2)c_A l + \dots + \varepsilon_B(\lambda_2)c_B l$$

только в том случае, если определитель этой системы не равен нулю т.е.

$$l(\varepsilon_A(\lambda_1)\varepsilon_B(\lambda_2) - \varepsilon_A(\lambda_2)\varepsilon_B(\lambda_1)) = l\varepsilon_B(\lambda_1)\varepsilon_B(\lambda_2) \left(\frac{\varepsilon_A(\lambda_1)}{\varepsilon_B(\lambda_1)} - \frac{\varepsilon_A(\lambda_2)}{\varepsilon_B(\lambda_2)} \right) \neq 0.$$

Задача 1. Пусть имеется смесь n -ксилола, m -ксилола и этилбензола, для которых известны значения молярных коэффициентов поглощения на соответствующих длинах волн λ_1 , λ_2 и λ_3 (таблица 1). Толщина спектрофотометрической кюветы 1 см.

Таблица 1

λ	Молярный коэффициент поглощения на длине волны $\lambda, \text{л}/(\text{моль} \cdot \text{см}) \cdot 10^{-2}$			Оптическая плотность, 10^{-2}
	n -ксилола	m -ксилола	этилбензол	
λ_1	137	5,4	4,9	9,72
λ_2	3,2	121	8,7	10,9
λ_3	3,7	6,8	38	3,65

Вопросы:

- 1) Исходя из данных об оптической плотности для смеси на указанных длинах волн (см. последнюю колонку табл.1), найти концентрации компонентов смеси (соответственно c_1 , c_2 и c_3)
- 2) Какие участки спектров не подходят для определения концентраций? (показать на примере смеси двух веществ)
- 3) Измените исходные данные для смеси трех веществ (табл. 1) на такие, при которых невозможно определение состава смеси и докажите этот факт