

УДК 378.14:544.34

**МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ЭВМ ПРОЦЕССОВ ДИССОЦИАЦИИ  
СЛАБЫХ КИСЛОТ В ЛАБОРАТОРНОМ ПРАКТИКУМЕ  
ПО ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ**

**Поляченко О.Г., Дудкина Е.Н.**

Учреждение образования

«Могилевский государственный университет продовольствия»

**Поляченко Л.Д.**

Учреждение образования «Могилевский государственный университет им.

А.А. Кулешова»

г. Могилев, Республика Беларусь

Компьютерное моделирование лабораторных работ в лабораторном практикуме по физической химии можно считать одним из важных направлений развития современных образовательных технологий в области преподавания этой химической дисциплины. Оно решает четыре основные задачи: 1) дает студентам уникальную возможность проработать значительную часть программы практикума у себя дома. Это особенно актуально для студентов заочной (дистанционной) формы обучения, а также

для студентов нехимических специальностей, для которых химическая подготовка носит общеобразовательный характер и практически не требует приобретения навыков экспериментальных химических исследований. 2) При работе в лаборатории позволяет существенно экономить учебное время за счет более быстрого и эффективного получения «экспериментальных» результатов и устранения необходимости длительных и трудоемких рутинных химических работ. Большинство операций физико-химических измерений требуют наладки и калибровки измерительных приборов, установления и достаточно длительного поддержания постоянной температуры, достижения равновесного состояния системы и многократного повторения измерений. Все это практически не может быть реализовано в общих химических практикумах из-за недостатка времени. Современные персональные ЭВМ дают возможность получить быстро и практически без материальных затрат «экспериментальные» данные, а их математическая и физико-химическая обработка производится точно так же, как и в условиях реального эксперимента. 3) Очень многие физико-химические измерения вообще не могут быть организованы в лабораторных практикумах вследствие сложности и громоздкости оборудования, его высокой стоимости, необходимости высокой научной квалификации для работы на современных приборах и оборудовании. Это существенно обедняет такие практикумы и снижает их научно-образовательный уровень. Использование ЭВМ открывает новые широкие возможности для совершенствования практикума по физической химии и включения в учебный процесс результатов, полученных новыми, самыми современными методами. Это особенно важно в условиях быстрого роста объема научных знаний и постоянного сокращения времени, отводимого на изучение фундаментальных химических дисциплин. 4) Важно, что каждый студент получает индивидуальное задание и работает самостоятельно, т.е. организация практикума не зависит от количества имеющихся по данной теме лабораторных установок. Поэтому может быть реализован фронтальный метод изучения материала, наиболее эффективный для общих химических практикумов на младших курсах. Наконец, легко и удобно решается вопрос об отработке пропущенных лабораторных работ.

Единственная серьезная проблема этого научно-методического направления – необходимость разработки собственных программ для ЭВМ. К настоящему времени нами разработаны программы по нескольким лабораторным работам, и они уже в течение многих лет успешно используются в практикуме по физической химии. Одна из таких работ – «Потенциометрическое изучение равновесия диссоциации слабых электролитов» [1]. Ниже рассмотрены некоторые методические аспекты использования этой лабораторной работы.

Такая лабораторная работа имеется в программах физико-химических практикумов многих вузов. При ее экспериментальном выполнении студенты готовят разбавленным раствором какой-либо слабой кислоты заданной концентрации (как правило, это уксусная кислота), а затем определяют ее

точную концентрацию титрованием стандартным раствором NaOH. Сами измерения pH раствора очень просты – в стаканчик с исследуемым раствором погружаются 2 электрода (индикаторный – стеклянный и сравнения – хлорсеребряный), и после выдержки в течение нескольких минут снимается показание pH-метра. Далее из полученного с точностью  $\pm 0,02 - 0,05$  единицы значения pH рассчитывается константа равновесия кислоты и ее степень диссоциации.

Вся подготовительная химико-аналитическая часть занимает 70-80% всего времени при продолжительности занятия 4 часа. И это при том, что студенты не выполняют, за неимением времени, ряд обязательных операций, которым их учат в лабораторном практикуме по аналитической химии – не калибруют мерную посуду, не проводят стандартизацию используемого раствора щелочи, не настраивают pH-метр по стандартным буферным растворам. В итоге результаты измерений очень часто оказываются весьма неточными, а найденная константа равновесия может сильно отличаться от табличной. Познавательная ценность такой работы минимальна, тем более, что подобная работа (ее аналитическая часть) выполняется в практикуме по аналитической химии на значительно более высоком научно-методическом уровне.

В то же время эта работа является очень важной с той точки зрения, что она обеспечивает постепенный переход от материала, который изучается в курсе аналитической химии, к центральной теме курса физической химии – химическому равновесию. Поэтому моделирование этой лабораторной работы на ЭВМ снимает отмеченные выше недостатки в организации эксперимента и, в то же время, сохраняет ее теоретическую и практическую ценность. Более того, появляется возможность усложнить эту работу, дополнив определение pH раствора чистой кислоты «измерением» pH смесей с сильной кислотой и со щелочью. Тем самым в процессе работы и при обработке результатов студенты знакомятся со значительно более широким кругом вопросов химического равновесия, чем это происходит при традиционном, экспериментальном ее выполнении.

В настоящее время в работе, выполняемой на ЭВМ, рассматриваются 8 слабых органических кислот. Каждый студент проводит 3 типа «экспериментов» – на основании «измерения» pH определяется константа диссоциации и степень диссоциации: 1) растворов чистой кислоты; 2) раствора кислоты, к которому добавлено небольшое количество сильной соляной кислоты; 3) раствора кислоты, к которому добавлено небольшое количество щелочи.

1) «Измерения» pH разбавленных растворов своей кислоты производятся каждым студентом при 3-х концентрациях, последовательно уменьшающихся в 3–5 раз. В результате обработки этих результатов студенты «открывают» для себя важнейший закон физической химии – константа равновесия не зависит от концентрации реагирующих веществ, для всех 3-х концентраций она оказывается одинаковой. В случае правильного и точного выполнения всех вычислений полученная величина константы

практически совпадает с табличным значением. В то же время степень диссоциации  $\alpha$  возрастает при разбавлении раствора, и студенту предлагается способ теоретических расчетов, пользуясь которым он может убедиться, что это является не случайностью, а общим законом (закон разбавления Оствальда).

2) При добавлении к определенному объему слабой кислоты  $\text{HA}$  небольшого объема  $\text{HCl}$  известной концентрации в большинстве случаев степень диссоциации  $\alpha$  уменьшается, и здесь студенты должны вспомнить и применить при обсуждении этих результатов известный им по курсу общей химии принцип Ле-Шателье:



при увеличении концентрации ионов  $\text{H}^+$  в растворе ( $x \rightarrow x + C_1$ , где  $C_1$  – концентрация добавленной соляной кислоты) равновесие реакции диссоциации (1) смещается влево, и степень диссоциации  $\text{HA}$  уменьшается (а константа равновесия опять не изменяется). При расчетах студенты сталкиваются с необходимостью более четкого понимания физического смысла понятия «степень диссоциации  $\alpha$  (доля продиссоциировавших молекул)» – у очень многих студентов с 1-го курса укоренилось неправильное представление о том, что величина  $\alpha$  рассчитывается через концентрацию ионов  $\text{H}^+$  – в этом опыте такой расчет дает совершенно неправильный результат. Здесь студенты, по-видимому, впервые начинают понимать, что 3 икса в уравнении (1) хотя и равны по величине, но имеют разный химический смысл и их нельзя путать – это концентрация продиссоциировавших молекул  $\text{HA}$ , концентрация образовавшихся ионов  $\text{H}^+$  и концентрация образовавшихся при диссоциации анионов  $\text{A}^-$ .

К нашему общему удивлению, в некоторых «опытах» был получен противоположный результат – при добавлении соляной кислоты степень диссоциации не уменьшалась, а возрастала. Более детальное рассмотрение равновесия реакции (1) и анализ условий «опытов» показал, что в данном случае, при добавлении сильной кислоты к слабой, имеются 2 фактора, влияющих на результаты: во-первых, принцип Ле-Шателье, в соответствии с которым степень диссоциации  $\alpha$  должна уменьшаться; во-вторых, при смешивании растворов слабой кислоты и сильной происходит уменьшение концентрации этих кислот, и тогда, в соответствии с законом разбавления Оствальда, степень диссоциации  $\alpha$  должна возрастать. Поэтому конечный результат зависит от соотношения величин константы диссоциации  $\text{HA}$ , концентраций и объемов растворов смешиваемых кислот.

3) При добавлении к определенному объему слабой кислоты  $\text{HA}$  небольшого объема щелочи известной концентрации происходит реакция частичной нейтрализации слабой кислоты



при этом равновесие реакции диссоциации



смещается влево за счет увеличения концентрации анионов  $\text{A}^-$  в растворе. Поэтому степень диссоциации  $\alpha$  слабой кислоты, как правило, уменьшается. Впрочем, учитывая результаты опыта 2, можно, по-видимому, подобрать такие условия, когда она будет возрастать за счет уменьшения концентрации кислоты  $\text{HA}$ . В этом опыте студенты еще раз убеждаются, что, независимо от характера происходящих превращений, константа диссоциации  $\text{HA}$  не изменяется.

Итак, изложенный «машинный эксперимент» дает возможность студентам наблюдать такие интересные особенности химического равновесия в растворах, которые практически невозможно уловить при экспериментальном выполнении такой работы. На рассмотренных примерах видно, что компьютерное моделирование работ в лабораторном практикуме по физической химии позволяет, благодаря широким возможностям варьирования исходных параметров изучаемых реакций, превратить эти работы в настоящие учебно-исследовательские, когда студенты вновь «открывают» для себя известные научные законы и закономерности.

#### Список литературы

1 Поляченко, О.Г. Потенциометрическое изучение равновесия диссоциации слабых электролитов. Методические указания для выполнения лабораторной работы на ЭВМ в практикуме по физической и коллоидной химии / О.Г. Поляченко, Л.Д. Поляченко – Могилев: МГУП, 2004. – 12 с.