

Міністерство освіти та науки України  
Криворізький державний педагогічний університет  
Криворізький економічний інститут КНЕУ  
Національна металургійна академія України  
Національний педагогічний університет  
імені М.П. Драгоманова

# Комп'ютерне моделювання в освіті

*Матеріали III Всеукраїнського  
науково-методичного семінару*

**24 квітня 2008 року**

# КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ РІВНОВАЖНИХ ХІМІЧНИХ СИСТЕМ

Т.О. Шенаєва

м. Кривий Ріг, Криворізький державний педагогічний університет  
ShenaevaTA@mail.ru

Теоретичне та експериментальне вивчення хімічних рівноваг – одна з фундаментальних проблем сучасної хімії. Рівноважні концентрації усіх часток в складних багатокомпонентних системах не можна виміряти через відсутність відповідних датчиків. Рівноважний склад систем розраховують, базуючись на законах рівноваги та стехіометричних обмеженнях [1], [2], [4].

Наочними й легкими в сприйнятті є графічні моделі рівноважних систем. Найбільш часто використовують концентраційно-логарифмічні діаграми (КЛД) у зв'язку з легкістю їх побудови і великими можливостями.

Перелічимо деякі можливості КЛД.

КЛД для протолітичних систем дозволяє визначити кількісний рівноважний склад системи та виділити переважаючий компонент при певному рН, при дослідженні характеристик кислотно-основного титрування і виборі індикатора КЛД дає можливість швидко визначити точку еквівалентності титрування та підібрати придатний індикатор із заданою похибкою індикації точки еквівалентності за КЛД без побудови кривої титрування зі складними і тривалими розрахунками, знайти похибку індикації, якщо умови титрування вже задані.

КЛД для гетерогенних систем дозволяє побудувати графік логарифму розчинності осаду в залежності від логарифму концентрації іону-осаджувача, визначити кількісний склад системи продуктів розчинення осаду, правильно визначити рівняння основної хімічної реакції розчинення осаду при певній концентрації іона-осаджувача.

Розрізняють КЛД для гомогенних протолітичних, окисно-відновних систем, систем комплексоутворення, гетерогенних систем. Віссю ординат КЛД в усіх випадках є логарифм рівноважної концентрації компонентів системи ( $\lg C$ ), а в якості вісі абсцис обирають логарифм концентрації реагенту, від якого залежить склад системи. Так, для протолітичних систем в якості вісі абсцис обирають водневий показник (рН), для систем комплексоутворення – логарифм концентрації реагенту-ліганду, для окисно-відновних систем – окисно-відновний потенціал системи (або  $pe = -\lg a_e$ , показник активності електрону), для гетерогенних систем осад-розчин – логарифм концентрації реагенту іона-осаджувача. В зв'язку з тим, що вісі КЛД – логарифмічні, то графіки КЛД являють собою ламані, які складаються з відрізків з різним кутом нахилу.

КЛД легко розрахувати за допомогою стехіометричних матриць, але при побудові графіків зіштовхуємося з проблемою точного зображення ку-

тів нахилу відрізків. Похибка нахилу відрізка приводить до похибки визначення логарифму рівноважної концентрації компоненту системи ( $\Delta$ ), тоді похибка рівноважної концентрації компоненту складає  $10^{\Delta}$ . Отже, одержані у такий спосіб моделі рівноважного складу системи неадекватні реальним системам. Крім того, виникають похибки при визначенні координат певних точок, які визначають склад системи. Результатом пошуку комп'ютерних програм, здатних вирішити ці проблеми, є використання програми GRAN-2D. Програма GRAN-2D призначена для графічного аналізу систем геометричних об'єктів на площині (Graphic Analysis 2-Dimension), функціонує під управлінням операційної системи Windows [3].

#### Література:

1. Бугаєвський О.А. Наближені оцінки рівноважного складу розчинів. Частина 1. – Харків: Милосердя, 1996. – 224 с.
2. Бугаєвський О.А. Наближені оцінки рівноважного складу розчинів. Частина 2. – Харків: Фоліо, 1998. – 229 с.
3. Жалдак М.І. Комп'ютер на уроках математики: Посібник для вчителів. – К.: Техніка, 1997. – 303 с.
4. Теоретичні основи та способи розв'язання задач з аналітичної хімії: Навчальний посібник / О.А. Бугаєвський, А.В. Дрозд, Л.П. Логінова, О.О. Решетняк, О.І. Юрченко; Заг. ред. О.А.Бугаєвський. – Х.: ХНУ, 2003. – 320 с.