

Решение расчетных задач по химии с помощью МС Excel

Цели решения расчетных задач ПО ХИМИИ

- Обучение химии
- Развитие химического мышления, формирование химического мировоззрения
- Воспитание
- Математическая культура?

Задачи

1. Классифицировать расчетные задачи по химии и выделить типы задач для решения с помощью Excel
2. Разработать алгоритмы решения выделенных типов задач ???
3. Формализовать алгоритмы решения
4. Разработать примеры решения расчетных задач с помощью Excel

1. Типы расчетных задач вузовского курса химии

- Задачи на основе расчетов стехиометрии и материальных балансов отдельных химических процессов и их комбинаций
- Задачи на основе термодинамических расчетов энергий Гиббса, энтальпий, энтропий веществ и химических процессов, изменения теплоемкости химических систем

- Задачи на основе расчетов окислительно-восстановительных равновесий при различных температурах, концентрациях, кислотности среды в твердой фазе и растворах построение
- Задачи на основе расчетов кислотно-основных равновесий в растворах электролитов: определение рН, растворимости, возможности образования и растворения осадков, образования и растворения осадков в данных условиях

- Расчеты кинетики химических процессов:
 - решение дифференциальных кинетических уравнений;
 - расчеты констант скоростей химических реакций;
 - расчеты и сопоставление энергий активации;
 - расчеты периода полупревращения;
 - расчеты изменения текущих концентраций во времени

2. Уточнение алгоритмов представленных в традиционной форме

- расчет энергии Гиббса вещества и реакции в нестандартных условиях;
- Расчеты равновесий в гетерогенных системах
- Кислотно-основное титрование
- Влияние температуры на скорость хр



Трудозатраты при решении задач химического содержания

- Время на прочтение и понимание условия задачи
- Выбор или конструирование алгоритма решения
- **Время на выполнение математических операций**
- Оформление решения задачи
- **Химическая сторона задачи уходит на задний план**

Преимущества MS Excel

- Установлен на всех ПК
- Одна книга вмещает множество отдельных листов с различными типами задач
- Изучение MS Excel введено в школьный курс
- Применяется для решения математических задач

Примеры задач

Задача 1. Для реакции термического разложения энергия активации равна 103,5 кДж/моль, а предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса равен с-1. Рассчитайте: а) период полураспада реагента при $-10\text{ }^{\circ}\text{C}$; б) время, необходимое для завершения реакции на 90 % при $50\text{ }^{\circ}\text{C}$.

Алгоритм решения

1. Запись условия задачи с помощью общепринятых обозначений.
2. Запись дополнительных данных: формула для расчета константы скорости химической реакции, формула для расчета периода полураспада.
3. Расчет константы скорости химической реакции.
4. Расчет периода полураспада.
5. Расчет времени 90%-го завершения реакции.
6. Запись ответа.

Дано:

$$E_A = 103,5 \text{ кДж/моль}$$

$$A = 4,6 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$$

$$t_1 = -10 \text{ }^\circ\text{C}$$

$$t_2 = -50 \text{ }^\circ\text{C}$$

$$\alpha = 90\%$$

$$\tau_{1/2} - ?$$

1. $k(T) - ?$

$$k_{263} = 4,6 \cdot 10^{13} \cdot \exp\left[\frac{-103500}{8,314 \cdot 263}\right] = 1,28 \cdot 10^{-7} \text{ с}^{-1},$$

$$k_{323} = 4,6 \cdot 10^{13} \cdot \exp\left[\frac{-103500}{8,314 \cdot 323}\right] = 8,40 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}.$$

2. $\tau_{1/2} - ?$

$$\tau_{1/2} = \ln 2 / (1,28 \cdot 10^{-7}) = 5,42 \cdot 10^6 \text{ с} = 62,7 \text{ сут.}$$

3. $t_{90\%} - ?$




$$\tau = \ln 10 / (8,40 \cdot 10^{-4}) = 2740 \text{ с} = 45,7 \text{ мин.}$$

ОТВЕТ: 62,7 сут., 45,7 мин.

Дополнительные данные и расчет:

$$k(T) = A \exp\left[\frac{-E_A}{RT}\right]$$

Алгоритм решения в MS Excel

1. В ячейки В2 –В5 вносятся значения энергии активации, температур и предэкспоненциального множителя. 
2. В ячейках С2 и D2 рассчитываются константы скорости при t_1 и t_2 . 
3. В ячейках Е4 и F5 вычисляются соответственно период полураспада при t_1 и время 90%-ного завершения реакции при t_2 . 

Задача 2. 0,1М раствором NaOH
титруют 0,1М раствор HCl.
Построить кривую титрования.

Алгоритм решения

1. Запись условия задачи с помощью общепринятых обозначений.
2. Запись дополнительных данных: формулы для расчета $[H^+]$, $[OH^-]$, рН.
3. Расчет значений рН при добавлении щёлочи; нахождение точки эквивалентности.
4. Построение по точкам кривой титрования.

Дано:

$$c(\text{HCl}) = 0,1 \text{ M}$$

$$c(\text{NaOH}) = 0,1 \text{ M}$$

Построить кривую
титрования.

Дополнительные данные и расчет:

1. 20мл 0,1М HCl

$$pH = -\lg[\text{HCl}] = -\lg[0,1] = 1$$

2. + 1 мл NaOH

$$[H^+] = \frac{19 \cdot 0,1}{21} = 0,09; pH = -\lg[0,09] = 1,04.$$

3. +5 мл NaOH

$$[H^+] = \frac{15 \cdot 0,1}{25} = 0,06; pH = 1,22.$$

4. +10 мл NaOH

$$[H^+] = \frac{10 \cdot 0,1}{30} = 0,33; pH = 1,48.$$

5. +15 мл NaOH

$$[H^+] = \frac{5 \cdot 0,1}{35} = 0,0143; pH = 1,85.$$

6. +19 мл NaOH

$$[H^+] = \frac{1 \cdot 0,1}{39} = 0,0026; pH = 2,59.$$

7. +19,9 мл NaOH $[H^+] = \frac{1 \cdot 0,1}{39,9} = 0,00025; pH = 3,60.$

8. +19,99 мл NaOH $[H^+] = \frac{0,01 \cdot 0,1}{39,99} = 0,000025; pH = 4,60.$

9. +20мл NaOH. Точка эквивалентности – pH=7,00.

10. +20,1 мл NaOH


$$[OH^-] = \frac{0,1 \cdot 0,1}{40,1} = 0,00025; pOH = -\lg[OH^-] = -\lg[0,00025] = 3,60; pH = 14 - pOH = 10,40.$$

11. +21 мл NaOH $[OH^-] = \frac{1 \cdot 0,1}{41} = 0,0024; pOH = 2,61; pH = 11,39.$

12. +25 мл NaOH $[OH^-] = \frac{5 \cdot 0,1}{45} = 0,0024; pOH = 1,95; pH = 12,05$

Далее по полученным точкам строится график кривой титрования и определяют скачок титрования.

Алгоритм решения в MS Excel

1. Вводятся значения концентраций и объемов кислоты и основания. 
2. Рассчитываются суммарный объём системы и избыток кислоты (основания).
3. Рассчитываются значения $[H^+]$, pH. С помощью Мастера диаграмм строим график кривой титрования.

- Экономия времени затраченного на выполнение математических операций
- Увеличение времени на объяснение химического смысла задачи и осмысление результатов решения задачи
- Исключение ошибок, возникающих при выполнении расчетных действий

- Регулярность решения задач по химии с помощью Excel
- Введение в курсы химических дисциплин обязательного решения задач с помощью Excel

и графическое представление
результатов