



#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Павлов, И.П. Рефлекс свободы / И.П. Павлов. – Санкт-Петербург: Питер, 2001. – 432с. (серия « Психология – классика»)
2. База данных Термические константы веществ [Электронный ресурс]. – Химический факультет Московского государственного университета. – Режим доступа: <http://www.chem.msu.ru/rus/tkv/welcome.html>. – Дата доступа: 01.10.2014.
3. База данных Ивтантермо [Электронный ресурс]. – Химический факультет Московского государственного университета. – Режим доступа: <http://www.chem.msu.ru/rus/handbook/ivtan/welcome.html>. – Дата доступа: 01.10.2014.
4. Facility for the Analysis of Chemical Thermodynamics [Electronic resource] / F\*A\*C\*T – Mode of access: <http://www.crct.polymtl.ca/FACT/fact.htm>. – Date of access: 01.10.2014.
5. Очков, В.Ф. Mathcad 12 для студентов и инженеров: учебное пособие / В.Ф. Очков. – Санкт-Петербург: БХВ-Петербург, 2005. – 458 с.
6. Краткий справочник физико-химических величин / Под ред. А.А. Равделя и А.М. Пономаревой. – Санкт-Петербург: Специальная литература, 2002. – 231с.
7. Карапетьянц, М.Х. Методы сравнительного расчета физико-химических свойств / М.Х. Карапетьянц. – М: Наука, 1965. – 404 с.

УДК 335: 378

**Д.Г. Нарышкин, М.А. Осина**

*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский университет «МЭИ» (Московский энергетический институт), г. Москва, Российская Федерация*

#### **ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ ИНТЕРАКТИВНОГО СПРАВОЧНИКА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН**

Рассматриваются расчетные возможности интерактивной сетевой версии справочника физико-химических величин на Mathcad Calculation Server МЭИ.

Изучение физической химии и использование ее расчетного аппарата в профессиональной инженерной деятельности невозможно без информации о свойствах веществ и систем. В настоящее время накоплено огромное количество данных по свойствам веществ. Эти данные обычно опубликованы на бумажных [1, 2], электронных носителях или в Интернете [3, 4] в виде таблиц, графиков, наборов формул. Но таблица – она и в Интернете остается таблицей. Открытие в Интернете Mathcad Calculation Server МЭИ ([www.vpu.ru/mas](http://www.vpu.ru/mas)) позволило по данным [2] создать и внедрить в учебный процесс интерактивную сетевую версию справочника физико-химических величин – базу данных поиска и обработки информации.

Целью работы было создание образовательной версии справочника физико-химических величин, которая позволила бы не только получать массивы чисел, характеризующие свойства веществ и систем, но и позволила бы провести расчет свойства при некотором заданном параметре, генерировала бы графические зависимости, иллюстрирующие поведение исследуемых свойств. Такая база данных должна способствовать преобразованию информации в знание.

В процессе работы студенты (и преподаватели) знакомятся с методологией использования современных ИК - технологий в учебном процессе и исследовательской практике - так называемых облачных вычислений (Cloud Computing). Пользователь получает возможность вводить исходные данные расчетов в элементы интерфейса, передавая свои расчетные данные на сервер, где проводятся вычисления, и получить результаты расчетов в аналитической и графической форме.

Особенностью интерактивной сетевой версии справочника является его образовательная направленность: в каждом Mathcad-документе указано, по каким экспериментальным данным была построена аналитическая зависимость, описывающая изменение исследуемой



функции, по каким соотношениям и как рассчитывается исследуемый параметр системы или свойство системы. Интерактивная версия термодинамической базы данных позволяет в режиме реального времени исследовать температурные зависимости важнейших термодинамических функций простых веществ, неорганических и органических соединений [5]. Графические иллюстрации зависимостей дают наглядное представление о характере их изменения и текущую точку на кривой.

В базе данных представлены температурные зависимости констант равновесия важнейших газовых реакций (рис. 1).

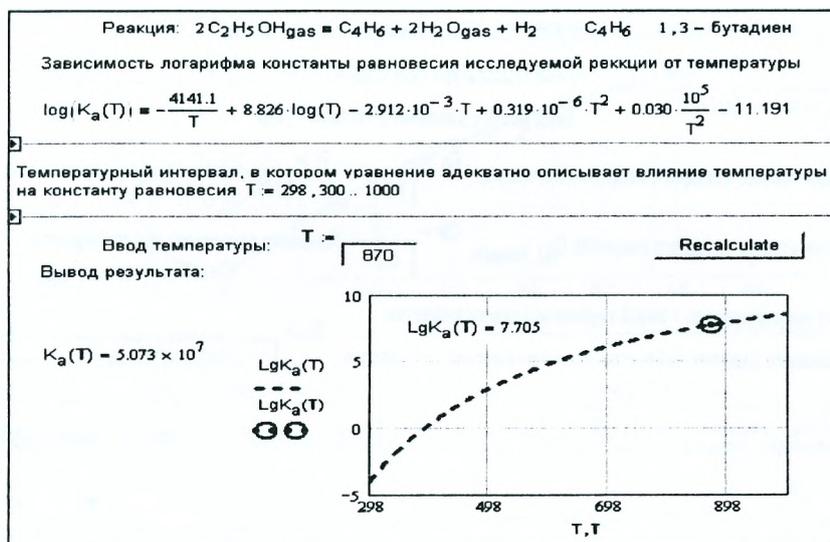


Рисунок 1 – Температурная зависимость константы равновесия реакции по версии справочника

Температурные зависимости констант равновесия реакций образования веществ позволяют (рис. 2) провести расчет константы равновесия  $K_r$  реакции через константы равновесия реакций образования  $K_f$  компонентов, используя матричную форму закона Гесса.

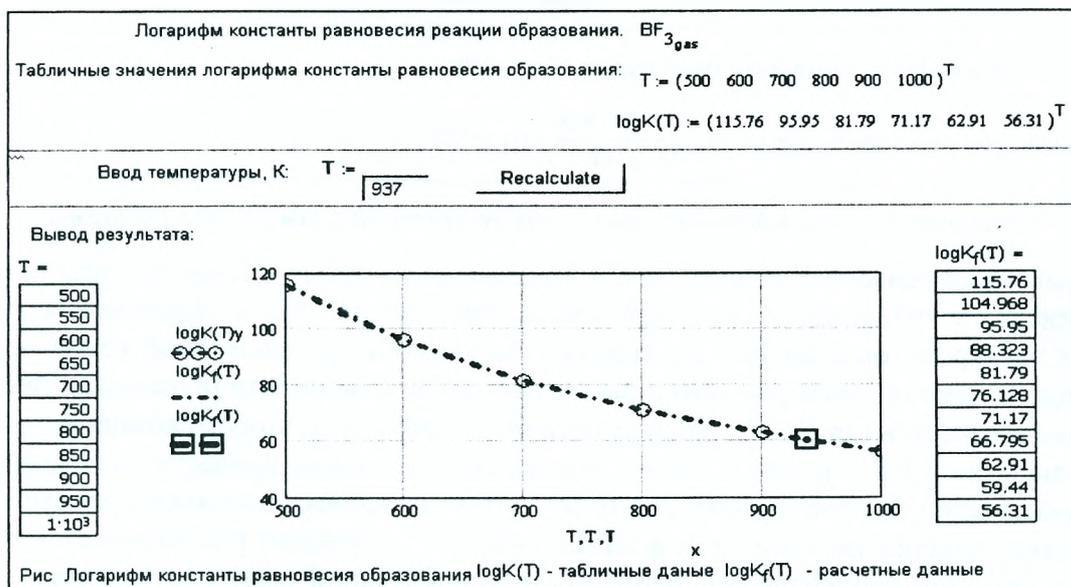


Рисунок 2 – Температурная зависимость логарифма константы равновесия реакции образования  $\text{BF}_3$  по версии справочника



Соотношение, связывающее константу равновесия реакции с константами равновесия реакций образования компонентов, и матричная форма закона Гесса позволили разработать Mathcad- ресурс расчета констант равновесия других реакций и равновесного состава в зависимости от параметров исследуемой реакции (рис.3). Пользователь получает возможность вводить в элементы интерфейса функциональные зависимости, характеризующие связь константы равновесия с равновесным составом, температурой и общим давлением в системе, исследовать поведение таких систем, графически иллюстрировать полученные результаты.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ РАВНОВЕСНОГО СОСТАВА В ИДЕАЛЬНЫХ СИСТЕМАХ

Reaction :=  $\text{CO} + \text{H}_2\text{O}(\text{gas}) \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}_2$  Ввод температуры процесса, K:  $T_m := 800$   
 Ввод общего давления в системе P, атм:  $P := 1.00$  Продукты реакции в начальный момент отсутствуют

Ввод начальной концентрации первого исходного вещества  $C_a$ , моль/л:  $C_a := 1.0$   
 Ввод начальной концентрации второго исходного вещества  $C_{O_2}$ , моль/л:  $C_b := 4.0$  Константа равновесия при температуре T  $K_a := 4.22$

Пусть к моменту равновесия прореагировало x молей первого исходного вещества  
 Ввод соотношения, связывающего равновесный состав и константу равновесия реакции  $f(x) := \frac{x^2}{(C_a - x) \cdot (C_b - x)} - K_a$  Recalculate

Expression Compiler

Вывод соотношения, связывающего равновесный состав и константу равновесия реакции Reaction = "CO + H2O(gas) <====> CO2+H2"

$f(x) := \text{Maple}(f(x)) \rightarrow \frac{x^2}{(C_a - x) \cdot (C_b - x)} - K_a$   $f(x) \text{ float, 3} \rightarrow \frac{x^2}{(1. - 1. \cdot x) \cdot (4. - 1. \cdot x)} - 4.22$   $\frac{x^2}{(C_a - x) \cdot (C_b - x)} - K_a \left| \begin{array}{l} \text{solve, x} \\ \text{float, 3} \end{array} \right. \rightarrow \begin{pmatrix} 933 \\ 5.62 \end{pmatrix}$

$x := 0.932$  Равновесная концентрация первого исходного соединения:  $C_{a,e} = C_a - x$   $C_{a,e} = 0.068$  Recalculate

Тогда степень превращения первого исходного вещества:  $\chi_{C_{a,e}} = \frac{C_a - C_{a,e}}{C_a}$   $\chi_{C_{a,e}} = 0.932$

Равновесная концентрация второго исходного соединения:  $C_{b,e}(x) := \frac{C_b - x}{C_b - x}$

Вывод значения равновесной концентрации второго исходного вещества:  $C_{b,e}(x) = 3.068$

Степень превращения второго исходного вещества:  $\chi_{C_{b,e}} = \frac{C_b - C_{b,e}(x)}{C_b}$   $\chi_{C_{b,e}} = 0.233$

Рисунок 3 – Исследование равновесного состава в идеальных системах

Справочник позволяет исследовать и рассчитывать интегральные теплоты растворения солей, кислот и оснований в воде при 298 К, средние ионные коэффициенты активности сильных электролитов в водных растворах в зависимости от моляльной концентрации при 298 К, произведение растворимости и растворимость в зависимости от температуры, теплоты смешения жидкостей при 25°C в зависимости от мольной доли второго компонента (рис. 4).

Технология MCS в режиме удаленного доступа позволяет провести исследование поведения химической системы во времени (рис. 5). По задаваемым пользователем кинетическим уравнениям, константам скоростей и начальным концентрациям рассчитывается время достижения заданной концентрации, зависимость концентрации реагирующих веществ от времени проведения процесса. Пользователь может изменять начальные условия - значения констант скоростей и начальных концентраций реагентов и исследовать эволюцию изучаемой системы при изменении этих параметров.

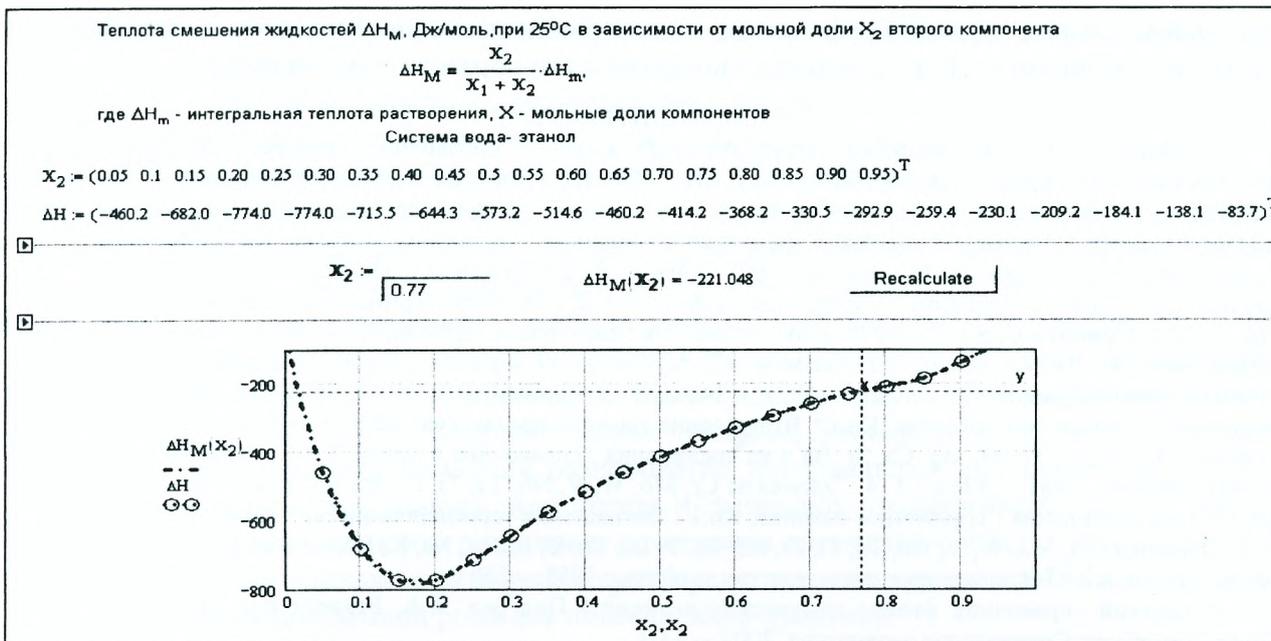


Рисунок 4 – Теплота смешения при 25 °C в зависимости от мольной доли второго компонента в системе вода- этанол

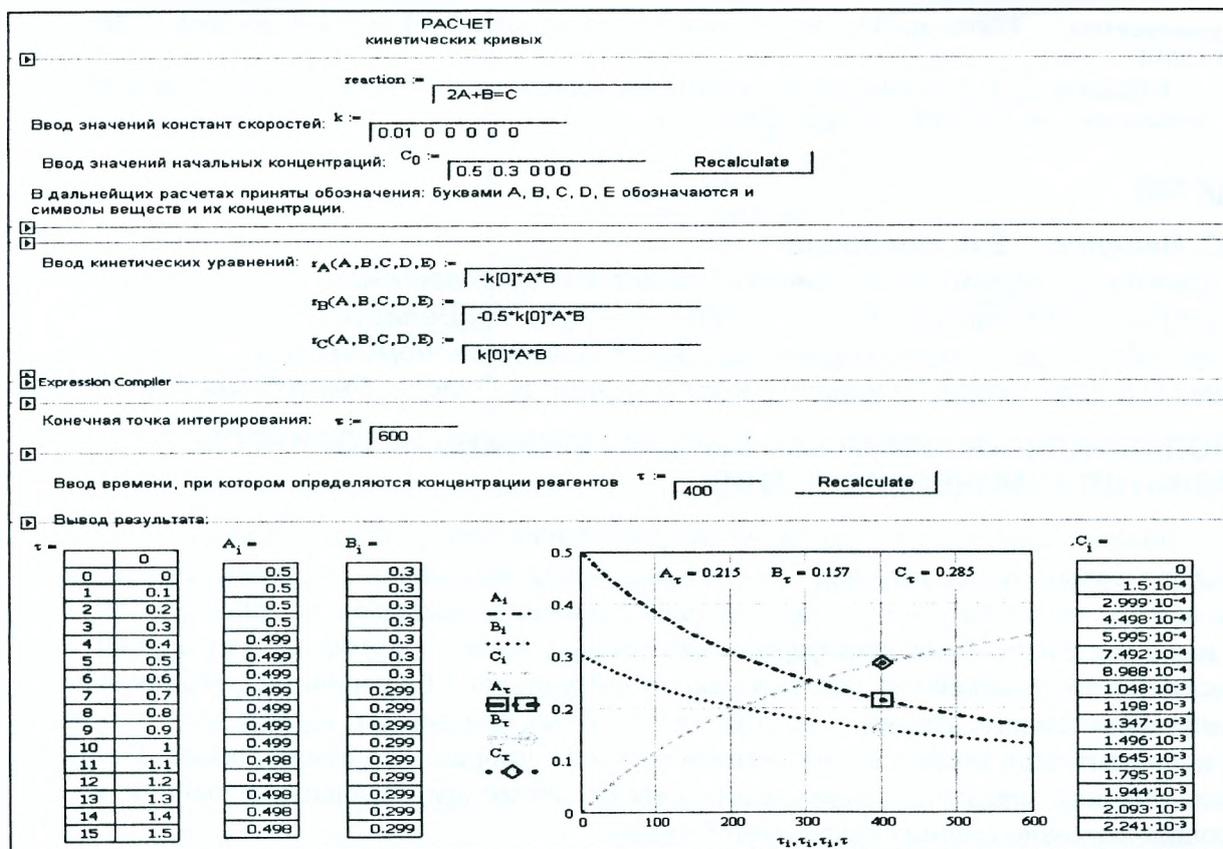


Рисунок 5 – Расчет кинетических кривых необратимых реакций n-го порядка

Применяемые технологии делают интерактивный справочник, инструментом познания, позволяя избавиться от рутинных и громоздких расчетов, сосредоточив внимание на содер-



жательном анализе задачи. Графические иллюстрации наглядно показывают поведение исследуемых зависимостей и значительно повышают его образовательный ресурс.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: справочное издание в 4-х тт. / Редкол.: В.П. Глушко, Л.В. Гурвич, Г.А. Бергман [и др.]; АН СССР, Ин-т высоких температур, Гос. ин-т прикл. химии. – Л.Н. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев [и др.] – М.: Наука. – 3-е изд., перераб. и доп. – Т. 1 : Элементы O, H(D,T), F, Cl, Br, I, He, Ar, Kr, Xe, Rn, S, N, P и их соединения : справочное издание, Кн. 1 : Методы расчета. Вычисление термодинамических свойств – 1978. – 495 с.; Т. 1 : Элементы O, H(D,T), F, Cl, Br, I, He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn, S, N, P и их соединения : справочное издание, Кн. 2 : Таблицы термодинамических свойств – 1978. – 326 с.; Т.2 : Элементы C, Si, Ge, Sn, Pb и их соединения : справочное издание, Кн.1 : Вычисление термодинамических свойств – 1979. – 439 с.; Т.2 : Элементы C, Si, Ge, Sn, Pb и их соединения : справочное издание, Кн.2 : Таблицы термодинамических свойств – 1979. – 340 с.; Т. 3 : Элементы B, Al, Ga, In, Tl, Be, Mg, Ca, Sr, Ba и их соединения : справочное издание, Кн.1 : Вычисление термодинамических свойств – 1981. – 471 с.; Т. 3 : Элементы B, Al, Ga, In, Tl, Be, Mg, Ca, Sr, Ba и их соединения : справочное издание, Кн.2 : Таблицы термодинамических свойств – 1981. – 396 с.; Т. 4 : Элементы Cr, Mo, W, V, Nb, Ta, Ti, Zr, Hf, Sc, Y, La, Th, U, Pu, Li, Na, K, Rb, Sr и их соединения : справочное издание, Кн.1 : Вычисление термодинамических свойств – 1982. – 622 с.; Т. 4 : Элементы Cr, Mo, W, V, Nb, Ta, Ti, Zr, Hf, Sc, Y, La, Th, U, Pu, Li, Na, K, Rb, Sr и их соединения : справочное издание, Кн.2 : Таблицы термодинамических свойств – 1982. – 559 с.
2. Краткий справочник физико-химических величин / Под ред. А.А. Равделя и А.М. Пономаревой. – Санкт-Петербург: Специальная литература, 2002. – 231с.
3. База данных Термические константы веществ [Электронный ресурс]. – Химический факультет Московского государственного университета. – Режим доступа: <http://www.chem.msu.ru/rus/tkv/welcome.html>. – Дата доступа: 01.10.2014.
4. База данных Ивтантермо [Электронный ресурс]. – Химический факультет Московского государственного университета. – Режим доступа: <http://www.chem.msu.ru/rus/handbook/ivtan/welcome.html>. – Дата доступа: 01.10.2014.
5. Нарышкин, Д. Г. Облачные физико-химические расчеты на MATHCAD Calculation Server НИУ МЭИ / Д.Г. Нарышкин – М.: Изд. НИУ «МЭИ», 2014. – 96 с.

УДК 546

**А.С. Неверов<sup>1</sup>, З.А. Неверова<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Учреждение образования «Белорусский государственный университет транспорта», г. Гомель, Республика Беларусь,

<sup>2</sup> Учреждение образования «Белорусский торгово-экономический университет потребительской кооперации», г. Гомель, Республика Беларусь

### **ЭВОЛЮЦИОННАЯ ХИМИЯ КАК ВЫСШИЙ УРОВЕНЬ ИСТОРИЧЕСКОГО РАЗВИТИЯ ХИМИЧЕСКИХ ЗНАНИЙ**

Эволюционная химия – раздел химической науки, который для основной массы химиков является новым. Более того для многих преподавателей является откровением его существование и то, что совокупность теоретических воззрений, лежащая в ее основе, рассматривается ныне как учение о высших формах химизма [1]. Видимо в этом одна из причин того, что до сих пор этот важнейший раздел химии не фигурирует в большинстве учебников по общей химии. Естественно, что он отсутствует и в учебных программах. На наш взгляд, пришла пора исправить этот пробел в организации учебного процесса по общей химии. Студент высшего учебного заведения должен иметь хотя бы общее представление о знаниях, характеризующих верхнюю границу современной химии.

Эволюционная химия как наука о самоорганизации и саморазвитии химических систем развивается с середины XX века. В ее рамках изучаются процессы самопроизвольного синтеза новых химических соединений, являющихся более сложными и высокоорганизованными продуктами по сравнению с исходными веществами. Возникновение учения о химической