



в лабораторном практикуме уделялось тем темам курса количественного анализа, знание которых наиболее важно для последующего изучения таких предметов, как «Экология», «Оценка воздействия на окружающую среду», «Экологическая экспертиза» и др.

Так, например, в лабораторной работе по теме «Метод кислотно-основного титрования (нейтрализации)» кроме опытов на концентрацию растворов, на стандартизацию растворов, предлагаются опыты, связанные со специализацией студентов, например, определение временной жесткости воды, определение карбонат-ионов и щелочи при совместном присутствии. В теме «Методы комплексообразования» особое внимание уделяется комплексометрическому титрованию. Из экологической составляющей предусмотрены опыты по определению общей жесткости воды, по определению ионов кальция и магния в исследуемом растворе. В тему «Окислительно-восстановительное титрование» включены опыты по определению перманганатной окисляемости в пробах питьевых, природных и сточных вод, по определению содержания остаточного активного хлора в воде. В теме «Фотометрический анализ» изучается практическое применение закона Бугера-Ламберта-Бера. Студентами изучается методика определения концентрации компонента в исследуемой пробе по градуировочному графику зависимости оптической плотности раствора от концентрации компонента. В данной теме предусмотрены опыты на определение мутности воды, на определение содержания в водных растворах (вытяжках) ионов железа (II и III), меди (II), сульфат-ионов и др.

В теме «Потенциометрические методы анализа» рассматривается применение ЭДС гальванических элементов для определения содержания компонентов в водных растворах (водных вытяжках), а так же изучаются потенциометрические кривые при титровании растворов. В тему включены опыты экологической направленности: определение свободной и общей щелочности природных и сточных вод, по определению обменной кислотности водных вытяжек, по определению содержания ионов ионометрическим методом. В теме «Хроматография» – идентификация аминокислот методом тонкослойной хроматографии. В теме «Электрофорез» – теоретические и практические основы метода капиллярного электрофореза, опыты по определению хлорат- перхлорат- и хлорит-ионов в питьевых водах.

Таким образом, выполнение таких лабораторных работ развивает у студентов навыки к проведению экспериментальных научных исследований, планированию и организации эксперимента, приучает к технике обработки результатов опытов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Голуб, Н.М. Лабораторный практикум по химии раздел «Аналитическая химия. Количественный анализ» для студентов технических специальностей / Н.М. Голуб, Л.А. Кобринец. – Брест: БрГТУ, 2014. – 94 с.

УДК 004.372.854

А.Э. Кобельник, К.А. Морозов, А.И. Судариков, Д.Г. Нарышкин

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

ОБЛАЧНАЯ ВЕРСИЯ МЕТОДА СРАВНИТЕЛЬНОГО РАСЧЕТА ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВ И СИСТЕМ

Исследование и моделирование физико-химических процессов невозможно без справочных данных по физико-химическим свойствам веществ и систем.

В настоящее время накоплено огромное количество данных по свойствам веществ. Эти данные опубликованы на бумажных [1], электронных носителях или в Интернете [2, 3] обычно в виде таблиц и набора формул. Электронная база данных [3] позволяет получать



отдельные числа или массивы чисел, характеризующие свойства веществ в зависимости от температуры, однако, не информирует пользователя, как и по каким соотношениям получены результаты расчетов, не генерируют функциональные и графические зависимости - работает по принципу "черного ящика", что существенно снижает ее образовательные возможности.

Есть программы, например [4], расчета термодинамических свойств реакций, но и она работает по принципу "черного ящика", в который "закладываются" исходные и конечные вещества реакции, и после команды "рассчитать" выдается таблица данных изменения термодинамических функций в зависимости от температуры. Но как, по каким формулам проведены расчеты – "тайна сия велика есть". В качестве образовательного ресурса такие программы малоинформативны: образовательные ресурсы должны быть открытыми, т.е. все расчетные формулы должны быть видны, и интерактивными, т.е. пользователь должен иметь возможность изменять параметры вещества или процесса.

Открытие в Интернете «Расчетного сервера НИУ МЭИ» [5] позволило, используя инженерный пакет Mathcad, по данным [1] создать и внедрить в учебный процесс интерактивную сетевую версию базы данных поиска и обработки информации, которая позволяет не только получать массивы чисел, характеризующие свойства веществ и систем, но и проводить расчет свойств при некотором заданном параметре, генерировать графические зависимости, иллюстрирующие поведение исследуемых свойств.

Разумеется, базы данных [1-4] содержат сведения не обо всех известных соединениях, например, в [3] представлены всего 300 веществ, а, значит, возможна ситуация, когда проблематично провести расчет теплового эффекта реакции и/или рассчитать равновесные степени превращения. Чтобы студент осознал важность проблемы, в расчетные задания по определению равновесного состава, "вкрадываются" некоторые варианты, в которых участвуют вещества, для некоторых из которых, термодинамические свойства не известны. Однако будущий специалист должен знать о возможности такой ситуации в профессиональной деятельности и быть знаком с расчетными методами прогнозирования свойств, в частности, методами сравнительного расчета [6], которые позволяют прогнозировать свойства неизученных веществ и систем, сопоставляя свойства в ряду сходных веществ.

На базе «Расчетного сервера НИУ МЭИ» [5] нам удалось создать и внедрить в учебный процесс интерактивную сетевую версию прогнозирования свойств, основанную на методе сравнительного расчета [6]. Эффективная версия прогнозирования данных должна содержать комбинацию текста, таблиц, формул, графиков, призванная максимально повысить ее способность передачи различных типов информации, являться для пользователя и источником информации, и инструментом для исследования и анализа. Интерактивная сетевая версия прогнозирования свойств состоит из введения, характеризующего проблему прогнозирования, краткого изложения сущности каждого из рассмотренных методов, работоспособность которых иллюстрируется расчетом свойств, значение которых приведены в [2], их сравнения и собственно расчетной части.

Прогнозирующую возможность первого метода сравнительного расчета, в котором сравниваются одинаковые свойства в ряду сходных веществ, и работоспособность сайта иллюстрирует рис. 1-2, в котором рассчитывается теплоемкость астатида лития, значение которой отсутствует в [1-4]. Пользователь может вначале проверить соблюдение линейности и затем, включив режим расчета, найти прогнозируемое значение неизвестного свойства (рис. 1).

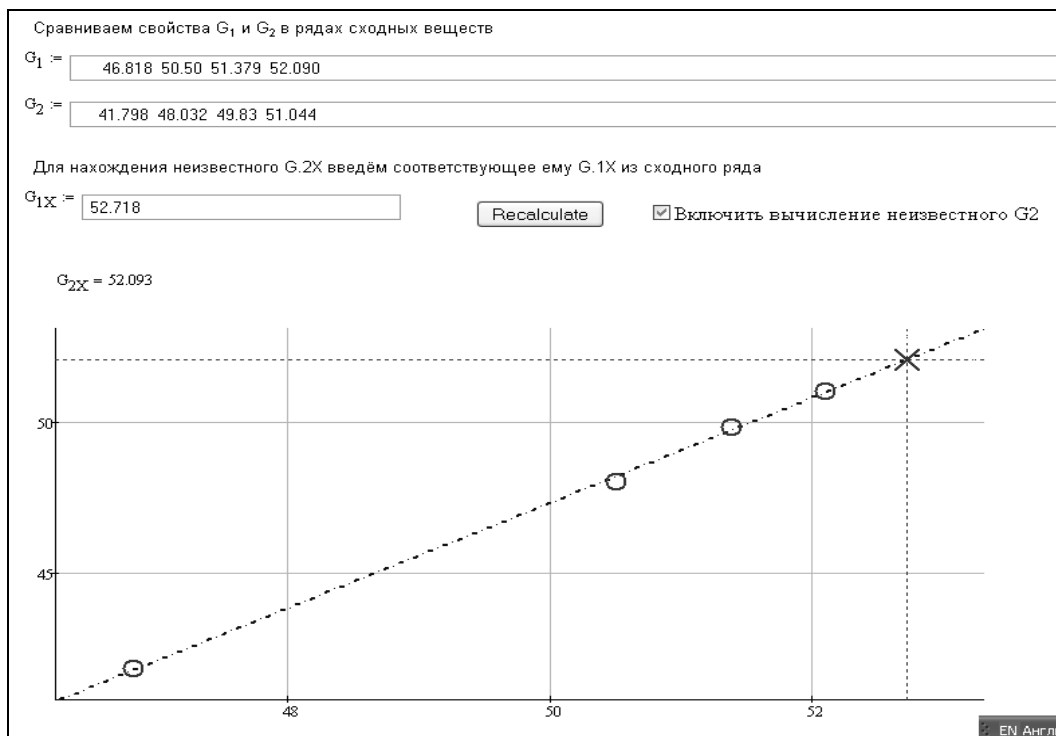


Рисунок 1 – Расчет теплоемкости LiAt по значениям теплоемкостей галогенидов натрия G_1 и лития G_2

Прогнозирующую возможность второго метода сравнительного расчета и работоспособность сайта иллюстрирует рис. 2, в котором рассчитывается теплота образования ацатида лития, значение которой так же отсутствует в [1-4].

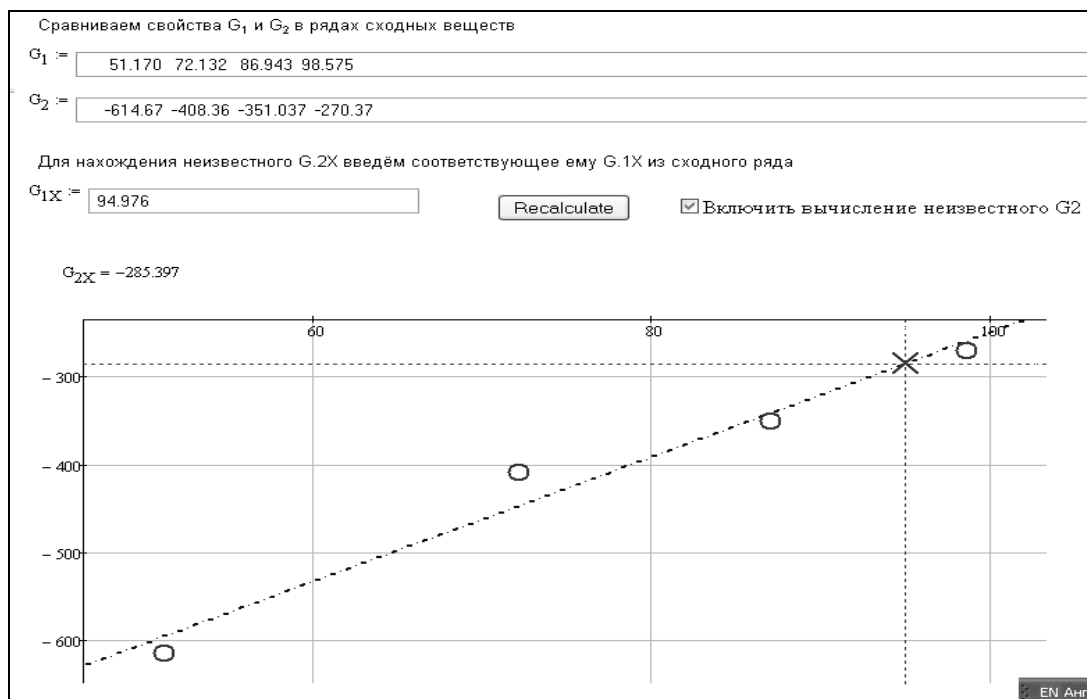


Рисунок 2 – Расчет теплоты образования LiAt по данным об энтропии галогенидов натрия G_1 и теплот образования галогенидов лития G_2



Аналогично, по данным о значении энтропий галогенидов натрия и лития рассчитывается – прогнозируется – значение энтропии астагида лития.

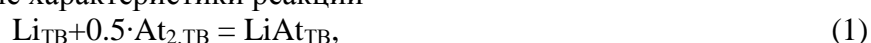
Нам удалось определить аналитические зависимости энтропии галогенидов лития и натрия от молекулярной массы:

$$S_{\text{Li}\Gamma}(M_{\text{Li}\Gamma}) := 1.541 \times 10^{-3} \cdot M_{\text{Li}\Gamma}^2 - 0.111 \cdot M_{\text{Li}\Gamma} - 2.551 \times 10^4 \cdot \frac{1}{M_{\text{Li}\Gamma}^2} + 75.42$$

$$S_{\text{Na}\Gamma}(M_{\text{Na}\Gamma}) := 2.362 \times 10^{-3} \cdot M_{\text{Na}\Gamma}^2 - 0.444 \cdot M_{\text{Na}\Gamma} - 8.878 \times 10^4 \cdot \frac{1}{M_{\text{Na}\Gamma}^2} + 116.006$$

и тем самым показать, почему реализуется линейная зависимость между исследованными свойствами, каким образом эта линейная зависимость связана с Периодическим законом.

Найденные значения теплоемкости, теплоты образования и энтропии $\text{LiAt}_{\text{ТВ}}$ позволяют определить термодинамические характеристики реакций



оценить их температурную зависимость, разумеется, в приближении $\Delta c_p = \text{const}$.

Так создается "коллекция" прогнозируемых свойств и пополняется база данных "Химическая термодинамика" [5].

Таблица 1 – Прогнозируемые характеристики астагида лития и реакций 1-3

Вещество	$c_{p,298}$, Дж/моль·К	$\Delta H_{f,298}^{\circ}$, Дж/моль	S_{298}° , Дж/моль·К	$\Delta c_{p,298}$, Дж/моль·К	$\Delta H_{r,298}^{\circ}$, Дж/моль
$\text{At}_{\text{газ}}$ [2]	20.786	97 734	186.982		
$\text{At}_{2,\text{ТВ}}$ [2]	54.392	0	121.336		
$\text{At}_{2,\text{газ}}$ [2]	37.070	83 680	276.144		
LiAt	52.09	-285 400	82.97		
Реакция					
$\text{Li}_{\text{ТВ}} + 0.5 \cdot \text{At}_{2,\text{ТВ}} = \text{LiAt}_{\text{ТВ}}$				0.045	-285 400
$\text{Li}_{\text{ТВ}} + \text{At}_{\text{газ}} = \text{LiAt}_{\text{ТВ}}$				6.45	-383 200
$\text{Li}_{\text{ТВ}} + 0.5 \cdot \text{At}_{2,\text{газ}} = \text{LiAt}_{\text{ТВ}}$				8.7	-327 800

Структурированная таким образом информация стимулирует – на основе этой информации – создание новой. Такая база данных способствует преобразованию информации в знание.

Облачный ресурс "Интерактивная сетевая версия прогнозирования свойств" имеет прогностическую и образовательную направленность, поскольку иллюстрирует связь между свойствами веществ и физико-химических систем, определяемую периодическим законом Д.И. Менделеева. Отметим, что разработка ресурса стала естественным продолжением и результатом работы [7].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Краткий справочник физико-химических величин / Под ред. А.А. Равделя и А.М. Пономаревой. – Санкт-Петербург: Специальная литература, 2002. – 231с.
2. База данных Термические константы веществ [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.chem.msu.ru/rus/tkv/welcome.html>. – Дата доступа: 01.10.2015.
3. База данных Ивтантермо [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.chem.msu.ru/rus/handbook/ivtan/welcome.html>. – Дата доступа: 01.10.2015.
4. База термодинамических свойств и программы расчета равновесного состава многокомпонентных и многофазных систем F*A*C*T [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.crct.polymtl.ca/FACT/fact.htm>. – Дата доступа: 01.10.2015.
5. Расчетный сервер Московского энергетического института. [Электронный ресурс] – Режим доступа: www.vpi.ru/mas. – Дата доступа: 01.10.2015.



6. Карапетьянц, М.Х. Методы сравнительного расчета физико-химических свойств/ М.Х. Карапетьянц.– М: Наука, 1965. – 404 с.

7. Нарышкин, Д.Г. Прогнозирование свойств физико-химических систем как элемент подготовки инженера – исследователя / Д.Г. Нарышкин // Методика преподавания химических и экологических дисциплин: сборник научных статей Международной научно-методической конференции; Брест, 13-14 ноября 2014 г. / БрГТУ; БГУ им. А.С. Пушкина; редкол.: А.А. Волчек [и др.]. – Брест: БрГТУ, 2014. – С. 100-104.

УДК 372.8:54

В.В. Коваленко, Н.С. Ступень

Учреждение образования «Брестский государственный университет имени А.С. Пушкина», г. Брест, Республика Беларусь

КОНЦЕПТУАЛЬНЫЕ АСПЕКТЫ СОДЕРЖАНИЯ ШКОЛЬНОГО КУРСА ХИМИИ (НА ПРИМЕРЕ ТЕМ «ПЕРИОДИЧЕСКИЙ ЗАКОН И ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА» И «ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ»)

В содержании учебного материала, в том числе школьного курса химии, можно выделить концептуальные аспекты, которые представляют собой своеобразные «ключевые точки» [1]. Именно они в процессе обучения должны быть усвоены учащимися. Без осмысленного усвоения и понимания этих «ключевых точек» нельзя говорить об успешности процесса обучения.

В данной работе нами проанализированы две темы школьного курса химии: «Периодический закон и периодическая система элементов Д.И. Менделеева» и «Химическая связь», которые являются теоретическими платформами химической науки. Периодический закон, который является одним из фундаментальных законов всего естествознания, является основой изучения химии элементов. В процессе изучения темы «Химическая связь» у учащихся формируются знания о природе химической связи, видах связи в различных соединениях, строится целостная система знаний о строении вещества, которая является фундаментальной теорией всего современного естествознания. Убеждены, что каждому грамотному человеку необходимо иметь представления о теории строения вещества. Согласимся с мнением, что «возросший объем наших знаний по химии диктует необходимость углубления представлений о свойствах материи, а также систематизации фактов, которые могут быть полезны для понимания новых открытий в химии, для создания веществ и материалов с новыми, ранее неизвестными свойствами» [2, с. 3].

Следует отметить, что сложность восприятия учебного материала данных тем школьного курса химии обусловлена значительной степенью абстракции. Поэтому целесообразно использовать дедуктивный метод познания, т.е. изучая общее переходить к частному. Это облегчит усвоение материала учащимися. Кроме того, для закрепления материала указанных тем школьного курса химии необходима система упражнений, которые могут представлять собой ситуационные задачи, предусматривающие тщательный анализ теоретических данных. Таким образом, предметный материал данных тем в значительной мере способствует реализации развивающих задач процесса обучения.

В теме «Периодический закон и периодическая система элементов Д.И. Менделеева» мы выделили следующие «ключевые точки»:

- 1) периодический закон, его физический смысл;
- 2) физический смысл номера периода, номера группы, атомного номера элемента;
- 3) периодичность изменения свойств атомов химических элементов и их соединений (оксидов и гидроксидов).

При изучении периодического закона «ключевой точкой» является понимание причины периодичности в изменении свойств атомов, которой является периодическое повторение структуры внешней электронной оболочки.