

# ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ, 2014 ГОД

## Методика и педагогическая практика

*Тикменова Вера Николаевна*

*Государственное бюджетное образовательное учреждение*

*среднего профессионального образования*

*«Невинномысский химический колледж»,*

*Ставропольский край, г. Невинномысск*

### МЕТОДИЧЕСКАЯ РАЗРАБОТКА ПРАКТИЧЕСКОГО ЗАНЯТИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ «ИНФОРМАТИКА И ИКТ». ТЕМА: «ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОРЯДКА ПРЯМОЙ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ С ПОМОЩЬЮ MICROSOFT EXCEL ПО ОДНОМУ ИЗ РЕАГЕНТОВ»

**Специальность:** 240107, химическая технология неорганических веществ, 1 курс.

**Цель занятия:** получить практические навыки представления прямой химической реакции в табличном виде с таблицами в MicroSoft Excel.

**Задание №1:** Определение порядка прямой химической реакции по одному из реагентов.

Для определения неизвестного порядка прямой реакции по одному из реагентов при условии постоянства концентрации остальных реагентов можно использовать соотношение, получаемое путем логарифмирования уравнения:

$$\ln(v)=\ln(k)+n_1 \ln(C_1)+n_2 \ln(C_2)+\dots+ n_m \ln(C_m)$$

Пусть нужно определить, например, порядок по первому реагенту. Тогда, исходя из зависимости скорости реакции  $v$  от концентрации  $C_1$  в логарифмических координатах, получим:

$$\ln(v)=\ln(k)+n_2 \ln(C_2)+\dots+ n_m \ln(C_m) +n_1 \ln(C_1)=a+ n_1 \ln(C_1)$$

Таким образом, для определения порядка реакции можно построить графическую зависимость  $\ln(v)$  от  $\ln(C1)$  и определить угол наклона прямой, наилучшим образом аппроксимирующей экспериментальные данные. Тангенс угла наклона и представляет собой искомый порядок. Помимо значительного объема работы при решении данной задачи вручную, с помощью карандаша и линейки, на практике возникают трудности как с выбором «наилучшей» прямой, так и с оценкой точности получаемых результатов. Эти трудности обусловлены, в основном, тем, что реальные измерения всегда выполняются с погрешностью. Следовательно, экспериментальные точки не ложатся на прямую точно, а имеют некоторый разброс. Использование табличного процессора MS Excel позволяет существенно упростить работу исследователя и повысить статистическую надежность результатов.

Решение: В приведенной ниже реакции

$2 \text{NO}_2 = 2 \text{NO} + \text{O}_2$  единственным реагентом прямой реакции является диоксид азота. Из литературы известно, что это реакция второго порядка, что позволяет проверить точность результатов вычислений. Сначала сформируем таблицу промежуточных результатов.

Определение порядка химической реакции по одному из реагентов				
$2 \text{NO}_2 = 2 \text{NO} + \text{O}_2$				
Время, с	Концентрация реагента C, моль/м <sup>3</sup>	Скорость реакции v, (моль/ м <sup>3</sup> с)	Логарифм концентрации	Логарифм скорости реакции
0	0.290	1,72E-02	0,537	-1,765
100	0.068	7,40E-04	-1,167	-3,131
200	0.038	2,30E-04	-1,425	-3,638
300	0.026	1,11E-04	-1,590	-3,956
400	0.020	6,49E-05	-1,698	-4,188

Введем в ячейку A1 заголовок «Определение порядка химической реакции по одному из реагентов» аналогично предыдущей работе. В ячейку B3 введем текст, описывающий уравнение реакции « $2\text{NO}_2=2\text{NO}+\text{O}_2$ ». Способ ввода нижних индексов также описан ранее.

Сформируем заголовки столбцов таблицы: «Время,с», «Концентрация реагента С, моль/м<sup>3</sup>» и «Скорость реакции v, моль/(м<sup>3</sup> с)» (столбцы экспериментальных измерений), а также «Логарифм концентрации» и «Логарифм скорости реакции» для промежуточных результатов. В ячейки А6-А10 введем отсчеты по времени, в ячейки В6-В10 значения концентрации реагента, а в ячейки С6-С10 – скорости химической реакции для соответствующих отсчетов.

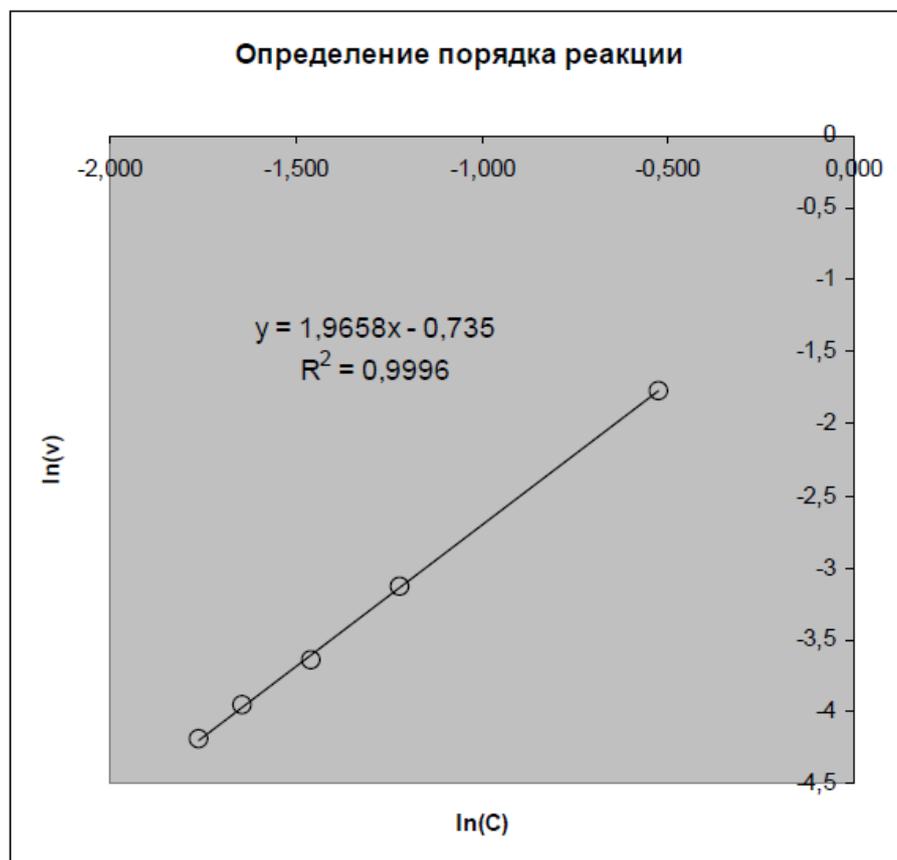
Для аппроксимации по формуле нам нужны логарифмы скорости и концентрации. Для их расчета воспользуемся следующим приемом: введем в ячейку D6 формулу для расчета логарифма концентрации «=LOG(B6)». Затем пометим эту ячейку целиком с помощью мыши. При этом вокруг ячейки рисуется жирная рамка, в правом нижнем углу которой имеется маленький закрашенный квадрат. При наведении на него указатель мыши меняет свою форму с жирного на тонкий крестик. Если в этот момент нажать левую клавишу мыши и двигать указатель вниз до ячейки D10, то введенная формула будет перенесена во все выделенные ячейки с учетом номера строки, т.е. в ячейке D7 окажется формула «=LOG(B7)», D8 - «=LOG(B8)» и т.д. Такой прием называется **автозаполнением** и позволяет избежать многократного ввода одних и тех же по сути формул в табличных расчетах. Заметим, что если бы мы перемещали указатель мыши с нажатой клавишей не вниз -вверх, а влево - вправо, то в результате автозаполнения в формулах изменялся бы номер столбца, а не строки.

Аналогичным образом вычисляем логарифм скорости реакции, вводя в ячейку E6 формулу «=LOG(ABS(C6))» и применяя автозаполнение. Обратите внимание, что в данной формуле используется функция ABS(), в результате выполнения которой возвращается абсолютное значение числа. Это необходимо в том случае, если скорость реакции отрицательна, ибо величина логарифма от отрицательных чисел не определена и MS Excel выдаст сообщение об ошибке вычислений.



Теперь таблица сформирована и остается выделить ее строки и столбцы с помощью рамки, как описано в предыдущей работе. Для определения порядка реакции необходимо проанализировать зависимость вычисленных логарифмов. Наиболее наглядный способ заключается в построении графика данной зависимости. В MS Excel такое представление данных называется *диаграммой*. Для этого необходимо: выполнить следующие действия:

Пометить с помощью мыши столбцы данных, по которым будет строиться диаграмма, (т.е. ячейки D5-E10). В меню «Вставка» выбрать пункт «Диаграмма»



В появившейся диалоговой панели выбрать тип диаграммы «Точечная», а из вариантов «Вид» выбрать тот, в котором отсутствуют соединяющие линии. Затем нажать кнопку «Далее» Во вновь открывшейся панели приведен приблизительный вид будущей диаграммы. Если Вы правильно поместили

диапазон ячеек с данными, Вы увидите точки, лежащие примерно на одной прямой. Если нет, обратите внимание на переключатель «Ряды в строках/столбцах». В нашем примере данные расположены в столбцах. Если зависимость выглядит правильно, нажимаем кнопку «Далее» На следующей панели имеется несколько вкладок, позволяющих настроить внешний вид будущей диаграммы. В частности, можно ввести заголовок диаграммы, подписи осей координат, и т.д. Следующая панель спрашивает пользователя, размещать ли диаграмму на отдельном листе книги или на текущем. В нашем случае целесообразно разместить диаграмму на текущем листе, сразу под таблицей данных.

Наконец, нам необходимо провести аппроксимацию зависимости прямой линией. Для этого наводим на нее указатель мыши и выполняем двойной щелчок. Затем наведем указатель на одну из экспериментальных точек и нажимаем **правую клавишу** мыши. При этом появляется так называемое контекстное меню, в котором следует выбрать пункт «Добавить линию тренда». В результате появляется очередная панель, в которой нужно определить тип аппроксимирующей линии. В нашем случае следует выбрать тип «Линейная», а на вкладке параметров включить мышью переключатели «Показывать уравнение на диаграмме» и «Поместить на диаграмму величину достоверности аппроксимации». Результат выполненных действий приведен на рисунке 1.

Рисунок 1. Определение порядка реакции.

Из полученного уравнения аппроксимирующей прямой можно заключить, что порядок реакции равен 2 с высокой степенью достоверности.

