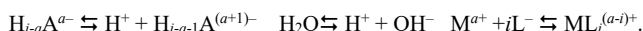


## ЛЕКЦІЙНИЙ КУРС МОДЕЛЮВАННЯ РІВНОВАГ У РОЗЧИНІ НА НАВЧАЛЬНІЙ ПЛАТФОРМІ MOODLE

*Горбачик Н. А.*, Опанасюк Л. Ф., Ютілова К. С., Швед О. М., Розанцев Г. М.  
Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, Україна  
horbachyk.n@donnu.edu.ua

Іонні рівноваги у водних і водно-органічних середовищах є важливим розділом рівноважної термодинаміки розчинів. Їх знання дозволяє визначати термодинамічні характеристики процесів, що відбуваються між іонами при зміні кислотності (рН) середовища. Останні можна далі використовувати для побудови діаграм розподілу іонів, визначення зон їх домінування та створення оптимальних умов синтезу солей з цими іонами. Враховуючи, що вивчення іонних рівноваг у вищій школі приділяється мало уваги, а розгляд окремих її моментів, в результаті часто необгрунтованих наближень, викладається з суттєвими помилками, моделювання рівноваг у розчині є актуальною задачею.

У курсі «Хемоінформатика та моделювання в хімії» представлено теоретичні основи моделювання іонних кислотно-основних рівноваг та рівноваг комплексоутворення. Розглянуто хімічні моделі, що включають рівноваги процесів дисоціації кислот, основ, їх сумішей, поведінку амфолітів, реакції нейтралізації та комплексоутворення. Показано основні прийоми при створенні хімічної моделі:



Математична модель у вигляді закону діючих мас, матеріального балансу та балансу зарядів використана для виконання розрахунків рівноважних концентрацій та термодинамічних характеристик хімічної моделі:

$$K_a = \frac{[H^+] \cdot [H_{i-a-1}A^{(a+)-}]}{[H_{i-a}A^{a-}]} \quad K_w = [H^+] \cdot [OH^-]$$

$$C = [H_iA] + [H_{i-1}A^-] + \dots + i[A^{i-}] \quad [H^+] = [OH^-] + [H_{i-1}A^-] + \dots + [A^{i-}]$$

$$\beta = \frac{[ML_i^{(a-i)+}]}{([M^{a+}] \cdot [L^-]^i)}$$

$$C_M = [M^{a+}] + [ML^{(a-1)+}] + [ML_2^{(a-2)+}] + \dots + [ML_i^{(a-i)+}]$$

$$[L^-] = [M^{a+}] + [ML^{(a-1)+}] + \dots + (a-i) [ML_i^{(a-i)+}]$$

Проілюстровано можливості функцій утворення Б'єрума при моделюванні та їх використання при розрахунках констант дисоціації, констант утворення та при побудові діаграм розподілу:

$$\alpha_{n^{i-1}A^-} = K_1[H^+]^{(i-1)} / ([H^+]^i + K_1[H^+]^{(i-1)} + K_1K_2[H^+]^{(i-2)} + \dots + K_1K_2 \dots K_i)$$

$$\alpha_{MA^+} = 1 / (1 + \beta_1[L^-] + \beta_2[L^-]^2 + \dots + \beta_i[L^-]^i)$$

Такого типу рівноваги зазвичай розглядають при викладанні розділів низки хімічних дисциплін, тому використання розроблених прийомів моделювання там буде корисним.

Однією з найбільш поширених платформ для дистанційного навчання є програма MOODLE (Modular Object Oriented Distance Learning Environment), яка містить зручні інструменти для створення лекційних курсів і перевірки знань здобувачів. Створений курс включає елементи «Сторінка», «Урок», «Завдання». Курс розділено на секції згідно з кількістю тем навчальної дисципліни: Термодинамічні аспекти процесу рівноваги. Основні принципи створення хімічних та математичних моделей. Кислотно-основні рівноваги. Рівноваги процесу комплексоутворення. Моделювання стану іонів на базі рН-потенціометричних даних. Гетерогенні рівноваги. Структурна ідентифікація моделі. Алгоритм розрахунку констант утворення. Кожна тема передбачає виконання самостійної роботи з використанням комп'ютерних програм для вирішення систем нелінійних рівнянь типу та використання комп'ютерної графіки для побудови діаграм розподілу та розрахунку констант комплексоутворення через криві утворення  $n = f(\alpha)$ .