

# РАЗРАБОТКА МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫХ КУРСОВ КАК АСПЕКТ ФОРМИРОВАНИЯ ВЫСОКОТЕХНОЛОГИЧНОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ СРЕДЫ

**Н. А. Дегтяренко, В. И. Яшкин**

---

*Белорусский государственный университет  
Минск, Беларусь  
e-mail: [ndegt@mail.ru](mailto:ndegt@mail.ru), [Yashkin@bsu.by](mailto:Yashkin@bsu.by)*

Обсуждаются вопросы, касающиеся обеспечения посредством математического моделирования физико-химических процессов профессиональной направленности и компьютерной поддержки общего курса математики для студентов химического факультета университета. Рассматривается пример моделирования задачи о титровании слабой одноосновной кислоты сильным основанием и ее решения с помощью универсальной технической компьютерной системы Mathematica.

*Ключевые слова:* математическое моделирование; физико-химические процессы; компьютерная поддержка.

## THE ELABORATION OF INTERDISCIPLINARY COURSES AS ASPECT OF THE FORMATION OF HIGH-TECH EDUCATIONAL ENVIRONMENT

**N. A. Degtiarenko, V. I. Yashkin**

---

*Belarusian State University,  
Minsk, Belarus*

The article is related to ensuring by mathematical modeling of chemical processes of professional orientation and computer support for the general course of mathematics for students of the Faculty of Chemistry of BSU. The particular example concerned to the titration of a weak acid with a strong base is given. Its solution by means of universal technical computing system Mathematica is discussed.

*Keywords:* mathematical modeling; chemical processes; computer support.

Одной из неперенных составляющих качественного фундаментального образования будущих специалистов-химиков является хорошая математическая подготовка. Естественнонаучные дисциплины используют абстракции математического языка, математические модели и методы для описания и изучения законов природы. С развитием вычислительной техники возрастает прикладное значение математических дисциплин, важных для естественных наук. Полнота знаний в любой системе образования

в принципе не может быть достигнута из-за необъятности накопленной к настоящему времени информации, тем более, что часов, отведенных на изучение математических дисциплин на химическом факультете, немного (сравнительный анализ по количеству часов, предусмотренных на изучение математических дисциплин на химических факультетах БГУ и МГУ, кратко изложен в [2]). Поэтому акцент в преподавании нужно делать на восприятие идей, законов, принципов, концепций и обобщений.

Сформулируем основную цель обучения математике на химическом факультете БГУ: дать возможность будущему специалисту-химику творчески и продуктивно использовать в своей работе быстроразвивающиеся математические методы. Современный химик должен иметь представление о принципах построения математической модели с учетом ее физико-химической обоснованности, уметь использовать математические абстракции, а также ориентироваться в возможностях реализации моделирования с помощью компьютерных средств. Это предполагает высокий уровень математической культуры, знание классического курса высшей математики и возможность самостоятельно совершенствовать знания в процессе научных исследований или же в практической работе.

В 2013 г. принята Концепция информатизации БГУ до 2018 г., где четко обозначена актуальность формирования такой информационной среды, которая способствовала бы развитию научно-исследовательской работы студентов, индивидуализации обучения, повышению мотивации к приобретению знаний, формированию личности, способной к деятельности в современных условиях [1]. В качестве основополагающих педагогических аспектов высокотехнологичной образовательной среды следует указать не только создание и использование электронно-образовательных ресурсов, но и разработку междисциплинарных курсов с применением компьютерных и коммуникационных средств, нацеленных на проблемно-ориентированные формы деятельности и формирование системного мышления. Интересны курсы, методически разработанные с учетом трех основных принципов: междисциплинарный подход, применение компьютерных технологий, усиление роли самостоятельной работы студентов в процессе освоения учебного материала.

Именно на таких принципах строится программа учебной дисциплины «Математическое моделирование химических процессов», которая разработана для студентов второго курса химического факультета БГУ. Подробное описание указанной программы содержится в [4]. Программа ориентирована на самостоятельную работу студентов в достаточном объеме, что требует от преподавателей-разработчиков создания электронно-образовательных ресурсов, позволяющих сформировать базу для такой работы. Лекционные учебно-методические материалы предоставляются студентам в электронном виде в формате PDF. Иногда, прежде чем сформулировать постановку задачи, в них излагаются общие сведения из некоторых разделов химии или высшей математики, необходимые для понимания теоретического материала и дальнейшего выполнения лабораторных работ. Электронные учебно-методические материалы для выполнения лабораторных работ детально проработаны, так как составлены с ориентацией на самостоятельную работу студентов – каждый студент работает за компьютером над заданием своего варианта индивидуально. Образцы решения лекционных математических моделей и оформления отчета по лабораторной работе представляют собой цельные программные коды рассмотренных лекционных задач по соответствующей теме, снабженные необходимыми краткими комментариями. Эти материалы даются студентам в формате PDF. Каждому студенту в

течение семестра может быть по желанию предоставлена тема для индивидуального проекта, который он выполняет, следуя определенному формату, предложенному преподавателем, но при этом располагает достаточной свободой, как в выборе темы, так и в средствах реализации проекта.

В качестве иллюстрации приведем фрагмент учебного материала – пример задания, связанного с моделированием и решением задачи о титровании слабой одноосновной кислоты сильным основанием. Остановимся подробно на постановке задачи и построении математической модели и кратко – на рекомендациях по реализации решения компьютерными средствами (здесь предполагается использование универсальной технической системы Mathematica, разработанной компанией Wolfram Research Inc.) и анализе полученных результатов. Образцы решения моделей и оформления отчета по лабораторной работе даются студентам с необходимыми комментариями, пояснениями, методическими рекомендациями [3, 5], а предполагаемый анализ результатов моделирования должен быть выполнен студентом в отчете в достаточно полном объеме и с химической точки зрения.

## 1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

К водному раствору слабой одноосновной кислоты  $\text{HA}$  с константой диссоциации  $K_\alpha$  добавляют одноосновное сильное основание – щелочь. Титрование проводят при  $T \approx 25$  °С. Введем обозначения:  $V_1$  (л) и  $C_1$  (М) – соответственно объем и концентрация добавляемого раствора щелочи,  $V_2$  (л) и  $C_2$  (М) – соответственно изначальные объем и концентрация раствора слабой кислоты  $\text{HA}$ . Плотности всех растворов считаем неизменными, приближенно равными  $1 \text{ г/см}^3$ , что справедливо для концентраций, не больших  $0,01 \text{ М}$  всех рассматриваемых растворов. Пренебрежем влиянием ионной силы на константу диссоциации кислоты. Будем так же считать, что раствор не содержит ионов и анионов, влияющих на рН раствора (присутствием карбоната и растворением углекислого газа в воде пренебрежем) и вступающих в конкурирующие реакции с кислотой или основанием (их катионами, анионами). Выведите уравнение зависимости между объемом добавляемой щелочи  $V_1$  (л) и концентрацией  $[\text{H}^+]$  (М) ионов  $\text{H}^+$  и уравнение зависимости буферной емкости раствора от  $V_1$  и  $[\text{H}^+]$  (для обозначения концентрации будем использовать квадратные скобки). Выполните ряд заданий, изложенных в пункте 2, при следующих значениях констант:  $K_\alpha = 1,75 \cdot 10^{-5}$ ;  $C_1 = 0,01 \text{ М}$ ;  $C_2 = 0,0075 \text{ М}$ ;  $V_2 = 1 \text{ л}$ ;  $K_w = 10^{-14}$ . Проанализируйте результаты.

## 2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ЕЕ РЕШЕНИЕ СРЕДСТВАМИ КОМПЬЮТЕРНОЙ СИСТЕМЫ МАТНЕМАТИСА

Основание в условиях данной задачи диссоциирует нацело по схеме (для наглядности возьмем основание  $\text{KOH}$ ):  $\text{KOH} \rightarrow \text{K}^+ + \text{OH}^-$ . Слабая кислота диссоциирует по схеме  $\text{HA} \leftrightarrow \text{H}^+ + \text{A}^-$ . Запишем формулы:

- 1) уравнение электронеutrальности  $[\text{K}^+] + [\text{H}^+] = [\text{A}^-] + [\text{OH}^-]$ ;
- 2) уравнение материального баланса по кислоте  $C_k = [\text{HA}] + [\text{A}^-]$ ;

3) константа диссоциации кислоты  $K_{\alpha} = \frac{[H^+][A^-]}{[HA]}$ ;

4) ионное произведение воды  $K_w = [H^+][OH^-]$ .

Здесь символом  $C_k$  условимся обозначать концентрацию кислоты в текущий момент времени, соответствующий определенному значению добавленного объема раствора щелочи. Используя четыре указанных формулы, получите одно алгебраическое уравнение, связывающее значения переменных  $[H^+]$  и  $V_1$ . Для этого проведите ряд математических выкладок. Выразите концентрацию  $[HA]$  из третьей формулы и подставьте во второе уравнение. Затем выразите из полученного уравнения концентрацию  $[A^-]$ . Подставьте выражения для концентраций  $[A^-]$  и  $[OH^-]$  (последнюю концентрацию выразите из четвертого уравнения) в первое уравнение. Проверьте полученный результат:

$$[K^+] + [H^+] = \frac{K_{\alpha} C_k}{[H^+] + K_{\alpha}} + \frac{K_w}{[H^+]}. \quad (1)$$

Перенесите все слагаемые в левую часть уравнения, предварительно умножив обе части уравнения на  $[H^+]^2 + K_{\alpha}[H^+]$ , и получите уравнение:

$$[K^+][H^+]^2 + [K^+]K_{\alpha}[H^+] + [H^+]^3 + [H^+]^2 K_{\alpha} - K_{\alpha}[H^+]C_k - K_w[H^+] - K_w K_{\alpha} = 0.$$

Получено кубическое уравнение третьей степени относительно значения концентрации  $[H^+]$ , в котором символом  $[K^+]$  обозначена концентрация ионов калия. Так как щелочь распадается полностью, химическое количество добавленной щелочи будет равным химическому количеству ионов  $K^+$ , где химическое количество ионов  $K^+$  равняется объему добавленной щелочи, умноженному на ее концентрацию  $V_1 C_1$ . Так как плотности растворов одинаковы и приближенно равны  $1 \text{ г/см}^3$ , имеем право записать общий объем как  $V_1 + V_2$ , тогда выражение для концентрации ионов калия будет следующим:

$$[K^+] = \frac{V_1 C_1}{V_1 + V_2}. \text{ Концентрация } C_k \text{ кислоты соответственно выражается как отношение ее}$$

химического количества к объему раствора:  $C_k = \frac{C_2 V_2}{V_1 + V_2}$ , откуда получается итоговое

уравнение:

$$[H^+]^3 + [H^+]^2 \left( \frac{V_1 C_1}{V_1 + V_2} + K_{\alpha} \right) + [H^+] \left( K_{\alpha} \frac{V_1 C_1}{V_1 + V_2} - K_w - K_{\alpha} \frac{V_2 C_2}{V_1 + V_2} \right) - K_w K_{\alpha} = 0. \quad (2)$$

Итак, получено уравнение зависимости между объемом добавляемой щелочи  $V_1$  (л) и концентрацией  $[H^+]$  (М) ионов  $H^+$  раствора. Формула  $pH = -\lg[H^+]$  позволяет вычислить значение pH раствора.

Обозначим буферную емкость раствора  $\beta$  и определим ее с помощью формулы  $\beta = \frac{dC_{\text{основания}}}{d \text{pH}} = -\frac{dC_{\text{кислоты}}}{d \text{pH}}$ , т. е. как величину  $\left( \frac{d \text{pH}}{dC_{\text{основания}}} \right)^{-1}$ . Используя химический смысл производной, поясните, почему повышение буферной емкости влечет повышение

буферных свойств раствора: способность практически сохранять значение рН при добавлении небольших количеств кислоты или щелочи. Примените формулу (1) (откуда выразите  $C_{\text{основания}} = [K^+]$ ) и формулу производной сложной функции

$$\beta = \frac{dC_{\text{основания}}}{d\text{pH}} = \frac{d[K^+]}{d[H^+]} \cdot \frac{d[H^+]}{d\text{pH}} = \frac{d[K^+]}{d[H^+]} \cdot (-[H^+] \ln 10).$$

Выразите производную функции  $V_1$  по  $[H^+]$ , используя методику дифференцирования неявной функции и уравнение (2). Используйте для этого команды Dt, Reduce. Затем найдите  $\frac{d[K^+]}{d[H^+]}$ , используя дифференцирование неявной функции, уравнение (1) и предыдущий результат – производную функции  $V_1$  по  $[H^+]$ .

Получите формулу для выражения буферной емкости  $\beta$  через  $V_1$  и  $[H^+]$ , упростите ее (команды Simplify (FullSimplify)).

При заданных в условии значениях констант постройте следующие таблицы значений: таблицу значений объемов  $V_1$  и соответствующих им значений концентраций  $[H^+]$ , таблицу значений объемов  $V_1$  и соответствующих им значений рН раствора, таблицу значений объемов  $V_1$  и соответствующих им значений буферной емкости. Во всех требуемых таблицах используйте диапазон для изменения объема  $V_1$  от нуля до числа  $\frac{2V_2C_2}{C_1}$  с шагом 0,001.

Здесь предполагается использование команды Table, команд для работы со списками, написание простейших циклов.

Изобразите графически данные двух последних таблиц с использованием команды ListPlot. Постройте интерполяционные функции по данным двух последних таблиц (команда Interpolation). Изобразите графики скорости изменения буферной емкости и ускорения изменения уровня рН раствора в зависимости от объема добавленной щелочи (команды Plot, Show), оформите подписи графиков и осей, отобразите легенду к каждому графику.

Рассчитайте все точки экстремума для функции буферной емкости (команды D, Reduce). Укажите для этих точек соответствующие значения  $V_1$  и  $[H^+]$ .

### 3. АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Проанализируйте полученные результаты с химической точки зрения. Установите связь между точками экстремума буферной емкости раствора и точками перегиба кривой титрования.

В заключение отметим, что формирование междисциплинарных курсов – это значительная работа, направленная на взаимное обогащение общих курсов математики и информатики и ряда дисциплин, отвечающих специализации обучения.

### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Университет в современном обществе: БГУ в стране и мире / С. В. Абламейко [и др.] ; под общ. ред. акад. С. В. Абламейко. Минск : БГУ, 2015.

2. Дегтяренко Н. А., Тимохович О. В. Об учебных программах дисциплин компьютерно-математического цикла, преподаваемых на химическом факультете БГУ // Методология и философия преподавания математики и информатики: к 50-летию основания кафедры общей математики и информатики БГУ : материалы Междунар. науч.-практ. конф., Минск, 24–25 апр. 2015 г. / редкол.: В. А. Ерошенко (отв. ред.) [и др.]. Минск : Издат. центр БГУ, 2015. С. 225–230.

3. Жебентяев А. И., Жерносек А. К., Талуть И. Е. Аналитическая химия. Химические методы анализа. Минск : ИНФРА-М, Новое знание. 2011.

4. Коваленко Н. С., Дегтяренко Н. А., Шмат Л. А. Математическое моделирование химических процессов: учебная программа учреждения высшего образования по учебной дисциплине для специальностей: 1-31 05 01 «Химия (по направлениям)», 1-31 05 03 «Химия высоких энергий» // Учебная программа располагается в коллекциях: Высшая математика (Специальность «Химия»). [Электронный ресурс]. 2015. Режим доступа: <http://elib.bsu.by/handle/123456789/109505> (дата доступа: 04.03.2015.).

5. Скатецкий В. Г., Свиридов Д. В., Яшкин В. И. Математические методы в химии. Минск : ТетраСистемс, 2006.