

## РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ С ПОМОЩЬЮ ПРОГРАММЫ MS EXCEL

Анисова Т. Л.<sup>1</sup>, Салпагаров С. И.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ГОУ ВПО Московский городской педагогический университет, Москва  
(127521, Москва, Шереметьевская улица, дом 29) e-mail: bolashova1@mail.ru

<sup>2</sup>ГОУ ВПО Российский университет дружбы народов, Москва  
(115419, г. Москва, ул. Орджоникидзе, 3) [sismalg@gmail.com](mailto:sismalg@gmail.com)

---

В статье рассмотрен класс задач на определение порядка химической реакции и определения константы скорости, вычислительная часть которых требует больших затрат времени. Показана возможность применения с этой целью электронных таблиц Microsoft Excel, обладающих большими вычислительными возможностями, а также возможностью графической интерпретации полученных результатов. Приведено пошаговое описание решения одной задачи двумя методами – аналитическим и графическим. Применение описанной методики дает возможность студенту, не отвлекаясь на вычислительный процесс, заострить внимание на химическом смысле решаемых задач. Данная методика может быть использована при проведении лабораторных и практических занятий по химии для обработки большого количества экспериментальных данных, а также при проведении занятий по информатике для студентов химических специальностей.

---

Ключевые слова: Microsoft Excel, константа скорости, порядок реакции, физическая химия.

## APPLICATION OF MICROSOFT EXCEL FOR PROBLEMS SOLVING IN PHYSICAL CHEMISTRY

Anisova T. L.<sup>1</sup>, Salpagarov S. I.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Moscow City Pedagogical University, Moscow  
(127521, Moscow, Sheremetevskaya st., 29) e-mail: bolashova1@mail.ru

<sup>2</sup>Peoples' Friendship University of Russia, Moscow  
Moscow, Russia (115419, Moscow, Ordzhonikidze st., 3) [sismalg@gmail.com](mailto:sismalg@gmail.com)

---

The article presents a type of exercises in which order of chemical reaction and reaction rate constant need to be calculated. In general such calculations are very time consuming. The article explains how to facilitate and expedite all required calculations using Microsoft Excel; it's also shows graphical interpretation of the results. A step-by-step example of solving this type of exercises by two methodologies – analytical and graphical – is presented. Application of this methodology would help students to focus on essential nature of problems, not on calculations. The developed methodology could be very helpful when processing of large amount of experimental data is required; it's an important example of computer science application for students who specialize in Chemistry.

---

Key words: Microsoft Excel, rate constant, order of chemical reaction, physical chemistry.

В эпоху информатизации образования невозможно представить изучение химии без использования информационных технологий. Разрабатываются новые методики, сущность которых состоит в том, что наряду с лекциями, семинарами и лабораторными работами осуществляется проведение занятий в компьютерном классе.

Важное место в химическом образовании занимает решение задач по химической кинетике, термодинамике и другим разделам химии, требующих больших затрат времени на вычисления. Представляется актуальным применение для этой цели электронных таблиц Excel, поскольку данная программа обладает рядом вычислительных достоинств:

- Возможность автоматического вычисления значений, заданных рекуррентными соотношениями.

- Возможность автоматического перерасчета значений для всех ячеек, связанных формульными соотношениями (обновление всей таблицы в соответствии с изменившимися данными).
- Процесс вычислений является открытым – все формулы видны, все значения доступны.
- Наличие богатой библиотеки встроенных функций самого различного назначения.
- Возможность осуществлять графическую интерпретацию расчетов.

Покажем вычислительные возможности MS Excel на примере решения задачи химической кинетики.

Задача: Бензоилпероксид (перекись бензоила) разлагается при температуре выше 100 °С. Для данной реакции были получены следующие кинетические данные [1]:

Таблица 1

<i>t, мин</i>	15	30	45	60	75	90	120	150	180
<i>C, моль/л</i>	0,0140	0,0100	0,0070	0,0050	0,0036	0,0025	0,0013	0,0006	0,0003

Исходная концентрация бензоилпероксида составляет 0,02 моль/л.

Построить кинетическую кривую, график зависимости скорости реакции от времени. Определить порядок реакции и усредненную константу скорости.

Рассмотрим аналитический и графический методы решения задач на определение порядка реакции по имеющимся данным об изменении концентрации реагирующих веществ во времени.

Аналитический метод (метод «подбора уравнений», метод «проб и ошибок») основан на подстановке экспериментальных данных по концентрации веществ для каждого момента времени (из кинетической кривой) в кинетические уравнения реакций различных (нулевого, первого, второго и третьего) порядков [2-5].

$$a) k_0 = \frac{1}{t}(C_0 - C), \quad б) k_1 = \frac{1}{t} \ln \frac{C_0}{C}, \quad в) k_2 = \frac{1}{t} \left( \frac{1}{C} - \frac{1}{C_0} \right), \quad г) k_3 = \frac{1}{2t} \left( \frac{1}{C^2} - \frac{1}{C_0^2} \right).$$

Определяемый порядок реакции соответствует тому уравнению, для которого в различные моменты времени при заданной температуре константа скорости реакции  $k$  будет оставаться постоянной величиной.

Графический метод основан на том, что определяют такую функцию от концентрации, которая на графике зависимости ее от времени дает прямую линию. В соответствии с кинетическими уравнениями (а–г) такими функциями являются: для реакции нулевого порядка –  $C$ ; реакций первого порядка –  $\ln C$ ; реакций второго порядка –  $1/C$ .

Порядок выполнения вычислений в программе Excel:

Исходные данные из таблицы 1 заносятся в столбцы А и В. По этим данным с помощью Мастера диаграмм строится точечная диаграмма зависимости концентрации от времени – кинетическая кривая (рис. 1).

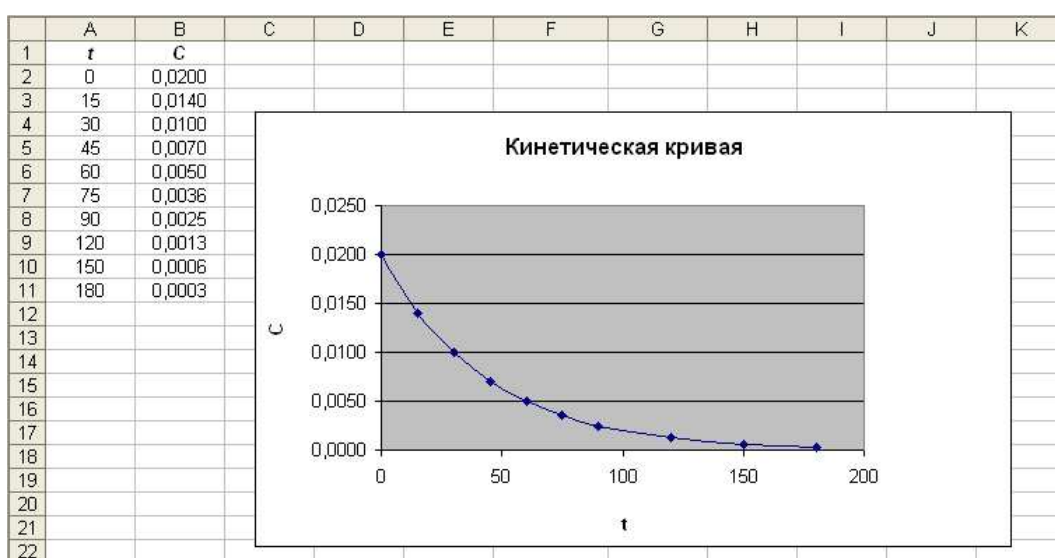


Рис. 1. Кинетическая кривая

Для определения порядка реакции аналитическим методом в ячейку C3 заносится формула а) для вычисления  $k_0$  при  $t = 15$ . В Excel она принимает вид  $=(B2-B3)/A3$ . Далее в этой формуле закрепляется адрес значения исходной концентрации  $C_0$  – ячейки B2. Для этого необходимо дважды щелкнуть мышью в строке формул на адресе B2, чтобы выделить его, и нажать клавишу F4. После этого адрес ячейки B2 станет абсолютным, на что указывает символ \$ перед буквой столбца и номером строки адреса. Формула принимает вид  $=(B$2-B3)/A3$ . В дальнейшем, при переносе формулы адрес B2, в отличие от адреса B3, меняться не будет. Необходимо перенести формулу ячейки C3 вниз до одиннадцатой строки с помощью маркера заполнения. После выполнения этого действия столбец C таблицы будет заполнен значениями  $k_0$  для всех значений времени  $t$ .

Аналогичным образом с помощью формул б), в), г) заполняются ячейки столбцов D, E, F. Соответствующие формулы Excel принимают вид: в ячейке D3:  $=LN((B$2)/B3)/A3$ ; в ячейке E3:  $=(1/B3-1/B$2)/A3$ ; в ячейке F3:  $=(1/B3^2-1/B$2^2)/A3$ .

	A	B	C	D	E	F
1	$t$	$C$	$k_0$	$k_1$	$k_2$	$k_3$
2	0	0,0200				
3	15	0,0140	0,0004	0,023778	1,42857	173,46939
4	30	0,0100	0,0003	0,023105	1,66667	250,00000
5	45	0,0070	0,0003	0,023329	2,06349	397,95918
6	60	0,0050	0,0003	0,023105	2,50000	625,00000
7	75	0,0036	0,0002	0,022864	3,03704	995,47325
8	90	0,0025	0,0002	0,023105	3,88889	1750,00000
9	120	0,0013	0,0002	0,022778	5,99359	4910,13314
10	150	0,0006	0,0001	0,023377	10,77778	18501,85185
11	180	0,0003	0,0001	0,023332	18,24074	61714,50617
12				<b>0,023197</b>		
13						

Рис. 2. Таблица вычислений для определения порядка реакции аналитическим методом

Результаты вычислений показаны на рис. 2. Как видим, данная реакция является реакцией первого порядка, поскольку в различные моменты времени константа скорости реакции  $k_1$  остается постоянной величиной. В ячейке D12 вычисляются усредненная константа скорости. Для этого необходимо воспользоваться статистической функцией СРЗНАЧ из встроенной библиотеки функций. Формула Excel в ячейке D12 примет вид: =СРЗНАЧ(D3:D11), а результат вычислений – усредненная константа скорости равна 0,023197.

Для определения порядка реакции графическим методом в столбцах G, H, I вычислим значения  $\ln C$ ,  $1/C$ ,  $1/C^2$ . Соответствующие формулы Excel примут вид: в ячейке G3: =LN(B3), функция LN содержится в библиотеке функций в категории «математические»; в ячейке H3: =1/B3; в ячейке I3: =1/B3^2. Все остальные ячейки столбцов G, H, I заполняются с помощью маркера заполнения.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	$t$	$C$	$k_0$	$k_1$	$k_2$	$k_3$	$\ln C$	$1/C$	$1/C^2$
2	0	0,0200							
3	15	0,0140	0,0004	0,023778	1,42857	173,46939	-4,2686979	71,42857	5102,041
4	30	0,0100	0,0003	0,023105	1,66667	250,00000	-4,6051702	100	10000
5	45	0,0070	0,0003	0,023329	2,06349	397,95918	-4,9618451	142,8571	20408,16
6	60	0,0050	0,0003	0,023105	2,50000	625,00000	-5,2983174	200	40000
7	75	0,0036	0,0002	0,022864	3,03704	995,47325	-5,6268214	277,7778	77160,49
8	90	0,0025	0,0002	0,023105	3,88889	1750,00000	-5,9914645	400	160000
9	120	0,0013	0,0002	0,022778	5,99359	4910,13314	-6,6453910	769,2308	591716
10	150	0,0006	0,0001	0,023377	10,77778	18501,85185	-7,4185809	1666,667	2777778
11	180	0,0003	0,0001	0,023332	18,24074	61714,50617	-8,1117281	3333,333	11111111
12				<b>0,023197</b>					

Рис. 3. Таблица вычислений для определения порядка реакции графическим методом

Таблица вычислений для определения порядка реакции графическим методом.

По результатам вычислений, представленным на рис. 3, с помощью мастера диаграмм строятся графики зависимости  $C$ ,  $\ln C$ ,  $1/C$ ,  $1/C^2$  от времени  $t$  (рис. 4). Замечание: график зависимости  $C$  от  $t$  – построенная ранее кинетическая кривая.

Как видим, данная реакция имеет первый порядок, поскольку именно график зависимости  $\ln C$  от  $t$  представляет собой прямую линию.

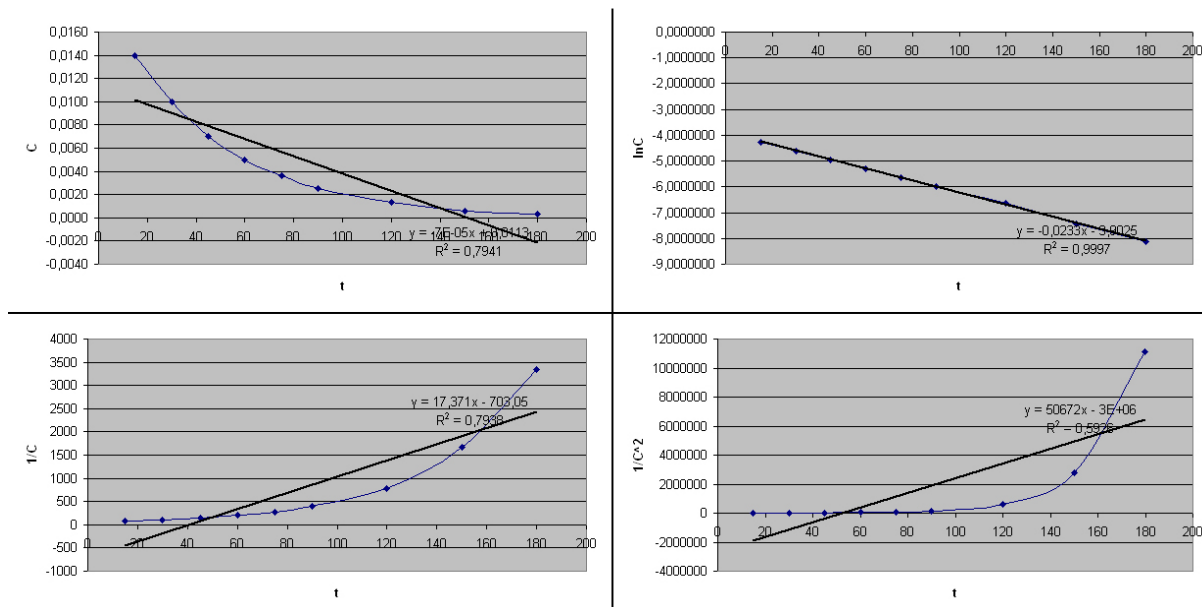


Рис. 4. Иллюстрация графического метода определения порядка реакции

К каждому графику добавлена линия тренда – аппроксимирующая прямая, ее уравнение и величина достоверности аппроксимации. Например, на втором графике линия тренда полностью совпадает с построенным графиком, а величина достоверности аппроксимации примерно равна единице. Определив уравнение этой прямой  $y = -0,0233x - 3,9025$ , по углу наклона можно оценить значение  $k = 0,0233$ .

Решение задач посредством электронных таблиц Excel может быть реализовано как на занятиях по информатике, так и на интегрированных занятиях, которые проводятся в компьютерном классе и внедряются в программу обучения химическим дисциплинам. Такой подход способствует углубленному изучению теоретических основ химии, интеграции химических и математических знаний, формированию информационной культуры, а также дает большие возможности для реализации междисциплинарных связей (химия, информатика, математика).

### Список литературы

1. Байрамов В. М. Химическая кинетика и катализ: Примеры и задачи с решениями: Учеб. пособие для студ. высш. учеб.заведений. – М.: Издат. центр «Академия», 2003. – 320 с.
2. Задачи по физической химии: Учебное пособие / В. В. Еремин, С. И. Каргов и др. – М.: Изд-во «Экзамен», 2005. – 320 с.
3. Таланов, В. М. Сборник вопросов и задач по Периодическому закону: учеб. пособ. для студентов химических специальностей высших технических учебных заведений / В. М.

Таланов, Г. М. Житный; под ред. проф. В. М. Таланова. – М.: Издательство «Академия Естествознания», 2007. – 103 с.

4. Хаускрофт К., Констебл Э. Современный курс общей химии. Задачник. – М.: Мир, 2002. – 250 с.

5. Хаускрофт К., Констебл Э. Современный курс общей химии. Т.1. – М.: Мир, 2002. – 540 с.

**Рецензенты:**

Соколов Иван Павлович, доктор химических наук, профессор, профессор кафедры химии и экологии ГОУ ВПО «Московский государственный вечерний металлургический институт», г. Москва.

Тимонин Виктор Алексеевич, доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой химии и экологии ГОУ ВПО «Московский государственный вечерний металлургический институт», г. Москва.