



УДК 544.18

Е.Н. Иващенко, Р.А. Омарова, Х.К. Оспанов
ВКГТУ им. Д. Серикбаева, г. Усть-Каменогорск

**НЕКОТОРЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ СТРОЕНИЯ ХЛОРИДОВ И НИТРАТОВ Cd (II), Hg(II), In(III), Tl(III), Sn(II)
и Pb(II) ПО РЕЗУЛЬТАТАМ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ**

В последнее время возрос интерес к получению геометрических и электронных характеристик комплексных соединений расчетными методами квантовой химии. Это связано с экспериментальными трудностями получения опытных образцов в виде монокристаллов (для рентгеноструктурного анализа), а также с рентгеноаморфностью в ряде случаев самих комплексов. Расчет и анализ электронного и геометрического строения на основе квантово-химических исследований являются зачастую единственными методами выяснения происхождения физических и химических свойств соединений на электронном уровне и лежат в основе возможности предсказания новых свойств молекул.

В связи с этим в настоящее время становятся актуальными модельные квантово-химические исследования, позволяющие расчетным путем получить достаточно корректные параметры геометрического и электронного строения сложных по составу и структуре координационных соединений. Кроме того, весьма важным является определение электронодонорных и электроноакцепторных характеристик органических лигандов и солей металлов соответственно, которые в существенной степени определяют химические, физические и биологически активные свойства, геометрию, реакционную способность и спектральные особенности комплексных соединений.

В данном исследовании, с помощью полуэмпирического метода PM3, входящего в программные пакеты MORAC-7.0 и HyperChem-6.0, были рассчитанные геометрические (длины связей, величины валентных углов), электронные (заряды на атомах, электронные плотности, дипольный момент) и энергетические (теплота образования, энергия ионизации, электронная энергия) характеристики хлоридов и нитратов кадмия (II), ртути (II), индия (III), таллия (III) олова (II), свинца (II) представлены в табл. 1 и 2.

Анализ геометрических параметров показывает следующее. Изменения длин связей $M - Cl$ для хлоридов, а также длин связей $M - O$ для нитратов при последовательном переходе от одного элемента к другому в отдельно взятой группе ионов металлов для исследованных моделей вполне согласуются с положением этих элементов в Периодической системе. Аналогичным образом меняется и порядок соответствующих связей.

Таблица 1

*Геометрические, электронные и энергетические характеристики хлоридов
Cd (II), Hg (II), In (III), Tl (III), Sn (II) и Pb (II)*

Характеристики	Соединения					
	CdCl ₂	HgCl ₂	InCl ₃	TlCl ₃	SnCl ₂	PbCl ₂
Теплота образования, кДж	-203,30	-136,61	-304,47	-271,63	-232,25	-166,23
Потенциал ионизации, эВ	11,30	10,77	10,83	11,06	10,28	9,92
Дипольный момент, Д	0,006	0,016	0,004	0,155	4,860	5,760
M-Cl ₁ , нм	0,222	0,224	0,228	0,257	0,224	0,245
M-Cl ₂ , нм	0,222	0,224	0,228	0,257	0,234	0,246
M-Cl ₃ , нм	-	-	0,228	0,257	-	-
∠Cl ₁ MC ₁ Cl ₂ , градус	179,9	179,83	120,01	119,97	98,92	99,56
Электронная плотность на М	0,64	1,31	2,97	2,51	3,03	3,10
Электронная плотность на Cl ₁	7,68	7,34	7,00	7,16	7,48	7,44
Электронная плотность на Cl ₂	7,68	7,34	7,00	7,16	7,48	7,44
Электронная плотность на Cl ₃	-	-	7,00	7,16	-	-
Порядок связи, M-Cl ₁	0,47	0,94	1,15	1,01	0,84	0,88
Порядок связи, M-Cl ₂	0,47	0,94	1,15	1,01	0,84	0,88
Порядок связи, M-Cl ₃	-	-	1,15	1,01	-	-
Полная энергия, эВ	-658,6	-663,9	-1007,0	-1005,1	-717,3	-710,1
Электронная энергия, эВ	-978,5	-970,7	-1866,5	-1801,9	-1223,7	-1179,3

Таблица 2

*Геометрические, электронные и энергетические характеристики нитратов
Cd (II), In (III), Tl (III), Sn (II) и Pb (II)*

Характеристики	Соединения				
	Cd(NO ₃) ₂	In(NO ₃) ₃	Sn (NO ₃) ₂	Tl (NO ₃) ₃	Pb(NO ₃) ₂
Теплота образования, кДж	-86,36	-337,40	-382,71	-320,78	-301,08
Потенциал ионизации, эВ	12,55	13,13	10,72	12,94	10,92
Дипольный момент, Д	0,03	0,62	4,63	5,56	8,27
M-O ₁ , нм	0,233	0,207	0,212	0,254	0,214
M-O ₂ , нм	0,233	0,207	0,211	0,255	0,214
M-O ₃ , нм	-	0,208	-	0,254	-
∠O ₁ MO ₂ , градус	126,96	113,69	90,70	129,50	111,60
Электронная плотность на М	0,54	2,20	2,83	1,90	2,79
Электронная плотность на O ₁	6,79	6,54	6,76	6,56	6,75
Электронная плотность на O ₂	6,79	6,45	6,77	6,55	6,75
Электронная плотность на O ₃	-	6,53	-	6,56	-
Электронная плотность на N ₁	3,57	3,60	3,57	3,60	3,57
Электронная плотность на N ₂	3,57	3,61	3,56	3,60	3,60
Электронная плотность на N ₃	-	3,61	-	3,60	-
Порядок связи, M-O ₁	0,21	0,68	0,43	0,72	0,49
Порядок связи, M-O ₂	0,21	0,69	0,31	0,75	0,49
Порядок связи, M-O ₃	-	0,69	-	0,73	-
Полная энергия, эВ	-2101,1	-3172,9	-2162,6	-3164,9	-2155,2
Электронная энергия, эВ	-6925,7	-1321,59	-7823,7	-1274,8	-7740,6

Рассмотрение геометрических параметров исходных солей показывает, что хлориды кадмия и ртути имеют линейное строение, что находится в полном соответствии с теори-

ей отталкивания валентных электронных пар Гиллеспи [1], согласно которой две связывающие электронные пары в соединениях кадмия и ртути обеспечивают линейную конфигурацию их соединений. Подтверждением линейности хлоридов Cd (II) и Hg (II) служат величины рассчитанных валентных углов Cl_1MCl_2 , которые равны 179,9 град. Последнее указывает на sp-гибридизацию валентных орбиталей атомов в молекулах этих хлоридов. Полученный результат хорошо согласуется с известными данными для хлоридов кадмия и ртути в газовой фазе [2].

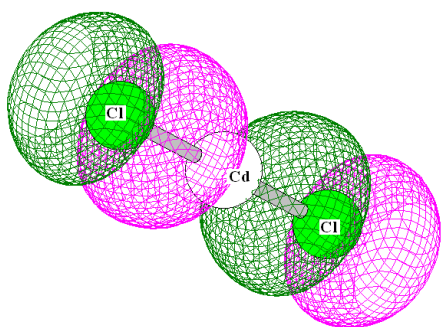
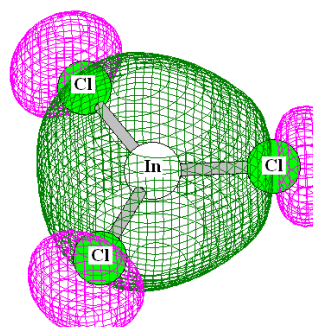
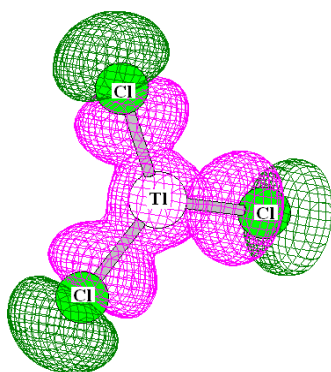
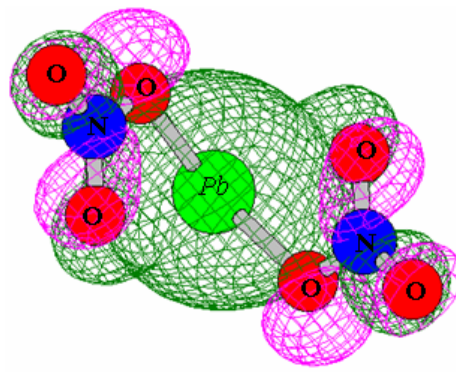
Хлориды и нитраты других, взятых для исследования, металлов, а также нитрат кадмия имеют нелинейное строение: для солей свинца, олова и нитрата кадмия характерно угловое строение, а для солей индия и таллия – треугольное. Это связано с тем, что молекулы типа AX_2E , к которым относятся соли олова, ртути и нитрат кадмия, имеют изогнутую форму. Три электронные связывающие пары в соединениях индия и таллия направлены к вершинам правильного треугольника. Величины соответствующих валентных углов в этих соединениях подтверждают сказанное. Ион NO_3^- в нитратах всех перечисленных металлов имеет плоское треугольное строение. В нем делокализованные π -связи распределяются равномерно между всеми атомами кислорода. Убедительным свидетельством предполагаемой геометрии являются значения дипольных моментов: линейные молекулы хлоридов кадмия и ртути обладают минимальными дипольными моментами. Наибольшими значениями дипольных моментов обладают модельные молекулы хлоридов и нитратов олова, свинца и нитрата таллия. Малые значения дипольных моментов модельных форм молекул $InCl_3$, $TlCl_3$, а также $Cd(NO_3)_2$ и $In(NO_3)_3$ обусловлены, по-видимому, большей их валентной насыщенностью. Наибольшая электронная плотность в случае хлоридов сосредоточена на хлор-анионах, в случае нитратов – на атомах азота и кислорода, входящих в кислотный остаток.

Стабильность хлоридов и нитратов исследованных элементов при переходе сверху вниз по группе падает. Такой закономерности при переходе справа налево по периоду не наблюдается, что связано с неодинаковой степенью валентной насыщенности взятых для исследования модельных форм. Вполне закономерно с положением M^{+2} в Периодической системе изменяются и потенциалы ионизации: при переходе сверху вниз потенциалы ионизации уменьшаются. Такой закономерности не наблюдается, когда в качестве металла-комплексобразователя выступает M^{+3} .

Таким образом, анализ геометрических и энергетических характеристик, рассчитанных методом РМЗ, указывает в целом на их адекватность с общеизвестными в литературе закономерностями.

Рассчитанные электронные характеристики для взятых модельных хлоридов и нитратов металлов позволили получить ряд пиктограмм, иллюстрирующих перенос спиновой электронной плотности в этих соединениях при наиболее максимальном перекрытии соответствующих АО. В качестве примера приведены пиктограммы для $CdCl_2$, $InCl_3$, $TlCl_3$ и $Pb(NO_3)_2$ (рис. 1-4).

Строгое определение спиновой плотности заключается в том, что она представляет собой разность плотностей электронов с $m_s = 1/2$ (α -спин) и $m_s = -1/2$ (β -спин). Отрицательная спиновая плотность возникает в случае, когда последняя величина больше первой и наоборот, положительная спиновая плотность возникает, когда первая величина больше второй.

Рисунок 1 - Пиктограмма четвертой МО в модельной молекуле CdCl_2 Рисунок 2 - Пиктограмма четвертой МО в модельной молекуле InCl_3 Рисунок 3 - Пиктограмма десятой МО в модельной молекуле TlCl_3 Рисунок 4 - Пиктограмма пятнадцатой МО в модельной молекуле $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$

Из рисунков видно, что отрицательная спиновая электронная плотность во всех модельных молекулах концентрируется на атомах хлора и азота, а положительная – на атомах металла. Это свидетельствует о некотором избытке положительного заряда на атомах металла и указывает на их электроноакцепторные свойства, и тем самым обуславливает их способность к дальнейшему донорно-акцепторному взаимодействию с электронодонорными центрами. Подтверждением сказанному может служить сравнительный анализ различных индексов реакционной способности исследованных модельных молекул, в качестве которых нами выбраны энергии высшей занятой молекулярной орбитали (ВЗМО) и низшей свободной молекулярной орбитали (НСМО) иона металла-комплексобразователя. Эти орбитали называют также граничными молекулярными орбиталями (МО). Вид и энергетические характеристики ВЗМО и НСМО во многом определяют свойства молекулярной системы, включая её стерическое поведение при замещении лигандов и химическую реакционную способность [3, 4].

ВЗМО в хлоридах кадмия и ртути являются восьмыми МО, где $E = -11,329$ и $E = -10,897$ эВ, соответственно. В молекулах хлоридов индия и таллия ВЗМО являются двенадцатыми МО с энергией $-11,309$ и $-11,353$ эВ, соответственно. ВЗМО для хлоридов олова и свинца – это девятые МО с энергией $-11,568$ и $-10,925$ эВ, соответственно. Для нитратов найдены следующие ВЗМО: кадмий – 24 МО, $E = -12,554$ эВ; индий и таллий –

36 МО с энергиями -13,139 и -12,941 эВ, соответственно; олово и свинец – 25 МО с энергиями -10,727 и -10,928 эВ, соответственно. Сравнение энергий ВЗМО, рассчитанных для исследованных модельных объектов, с известными литературными данными для хлоридов и нитратов других металлов [5, 6] подтверждает, что они обладают определенными, однако невысокими электронодонорными свойствами. При этом в ряду исследованных ионов металлов в степени окисления +2 наблюдается следующая закономерность: электронодонорная способность возрастает по группе сверху вниз, а для In (III) и Tl (III) она практически равноценна.

НСМО в модельных молекулах хлоридов кадмия и ртути являются девятыми МО с энергиями -0,883 и 2,281 эВ, соответственно, в молекулах хлоридов индия и таллия – тринадцатые МО с энергиями -2,935 и -5,508 эВ, соответственно; для модельных хлоридов олова и свинца – десятые МО с энергиями -1,325 и -2,432 эВ, соответственно. НСМО в молекулах нитратов являются: 25 МО с энергией -1,244 эВ для нитрата кадмия; 37 МО с энергиями -6,273 и -3,453 эВ для нитратов таллия и индия, соответственно; 26 МО с энергиями -2,534 и -2,882 эВ для нитратов олова и свинца, соответственно. Сравнение энергий НСМО указывает на то, что ионы всех рассмотренных металлов обладают достаточно высокой электроноакцепторной способностью, наличие которой позволяет им вступать в процессы комплексообразования с электронодонорными молекулами.

Таким образом, анализ результатов квантовохимических расчетов позволил установить геометрическое строение выбранных для исследования солей и оценить донорно-акцепторную способность иона металла, входящего в их состав.

Список литературы

1. Гиллеспи Р. Геометрия молекул. – М.: Мир, 1975. – 215 с.
2. Уэллс А. Структурная неорганическая химия. – М.: Мир, 1988. – Т.3. – 564 с.
3. Фудзинага С. Метод молекулярных орбиталей. – М.: Мир, 1983. – 462 с.
4. Пирсон Р. Правила симметрии в химических реакциях. – М.: Мир, 1979. – 592 с.
5. Костромина Н.А. Химия координационных соединений / Н.А. Костромина, В.Н. Кумок, Н.А. Скорик. – М.: Высшая школа, 1990. – 432 с.
6. Юсупова А.Т. Геометрические и энергетические характеристики Sb (III) / А.Т. Юсупова, Г.П. Полатбекова, А.С. Тусупбекова // Вестник КазНУ. Сер. химическая. – 2002. – № 3 (27). – С. 310-313.

Получено 21.04.11

УДК 004.4:378

О.В. Насс, Г.А. Камалова

Западно-Казахстанский аграрно-технический университет им. Жангир хана, г. Уральск

ПРИМЕНЕНИЕ СВОБОДНОГО ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ В РАЗРАБОТКЕ ИНФОРМАЦИОННЫХ СИСТЕМ НА ПРИМЕРЕ ЭЛЕКТРОННОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО РЕСУРСА ДЛЯ ДИСТАНЦИОННОГО ОБУЧЕНИЯ

В современных условиях перехода на позиции вариативности образовательных программ и многообразия типов учебных заведений необходима оперативность в разработке и мобильность в изменении электронных образовательных ресурсов (ЭОР), в том числе для дистанционного обучения. При этом для дистанционного обучения необходимо предусмотреть ряд специфических свойств [10, С. 160]. Сформулируем данные свойства на

примере ЭОР [1, 2, 3, 8], демонстрирующихся на международной выставке-конференции достижений дистанционного обучения «eLearnExpo Moscow» (Москва, 2004).

В ЭОР для дистанционного обучения целесообразно:

- использовать различные каналы восприятия обучающихся, следовательно, ЭОР будет содержать мультимедийные эффекты;
- обеспечивать управление познавательной деятельностью обучающихся, то есть ЭОР содержит: характеристику изучаемых разделов и тем; минимально необходимые и формируемые знания и умения; перечень практических и лабораторных занятий; временные параметры изучения; требования к знаниям и умениям обучающихся; формы текущего и итогового контроля;
- содержать всю необходимую информацию, следовательно, включать в ЭОР комплект учебно-методических материалов, в том числе: теоретический конспект, практическое пособие, методические указания к лабораторно-практическим работам;
- создавать условия для включения обучающихся в деятельность, например посредством характеристики предметной области изучения, анализа возможностей организации межпредметных связей, формулировки цели и задач дисциплины, формирования схемы названий его модулей;
- побуждать обучающихся не к запоминанию, а к мышлению, рассуждению, анализу, применению знаний в своей деятельности, в частности подбором соответствующего перечня рекомендуемой литературы, дополнительных информационных источников;
- инициировать обучающихся к взаимодействию с педагогами и другими обучающимися, то есть ЭОР содержит инструменты для оперативного дистанционного общения, например контактную информацию в виде адресов электронной почты обучающихся и педагогов, ссылки Интернет;
- побуждать обучающихся к созданию собственных образовательных продуктов, например указанием возможных заданий для включения в курсовые и дипломные проекты;
- обеспечивать рефлексию образовательной деятельности обучающихся, следовательно, ЭОР должны содержать материалы для самоконтроля обучающихся;
- предоставлять обратную связь, значит, помимо названия курса, ЭОР должны содержать сведения об авторах, их контактную информацию;
- кроме того, ЭОР в своем составе должны иметь базу данных, позволяющую хранить «траектории» обучения.

Таким образом, было выявлено целесообразное содержание ЭОР для дистанционного обучения, которое можно разделить:

- на презентацию курса, включающую название, сведения об авторах, контактную информацию, например адреса электронной почты;
- характеристику предметной области, возможности организации межпредметных связей;
- формулировку целей и задач ЭОР; схему компьютерных модулей;
- минимально необходимые и формируемые знания и умения;
- характеристику и временные параметры изучения разделов и тем;
- формы текущего и итогового контроля;
- задания для включения в курсовые и дипломные работы;

- образовательный контент, содержащий лекционный комплекс: темы, цели и задачи, краткий конспект учебного материала, выводы, список дополнительной литературы и контрольные вопросы по каждой лекции;
- практическую часть, включающую в себя: темы практических и лабораторных занятий; варианты семинарских заданий, их цели и задачи, планы, комплект учебно-методических и справочных материалов, например учебное пособие для семинаров, методические указания к лабораторным и практическим работам;
- материалы для самоконтроля обучающихся, такие, как: письменные контрольные задания, перечень вопросов и заданий для самоподготовки, тесты по каждому модулю и тесты итогового контроля; блок оценки компетентности обучающихся;
- дополнительные материалы, например тезаурус, формирующий понятийную базу, глоссарий, персоналий, подобранный соответствующий перечень дополнительной литературы, информационных источников.

На основе выявленного содержания ЭОР сформируем примерную архитектуру информационной системы (ИС) (рис. 1).



Рисунок 1 - Примерная архитектура информационной системы электронного образовательного ресурса для дистанционного обучения

Рассмотрим инструментальные средства реализации данной ИС.

В настоящее время для разработки используется следующее программное обеспечение (ПО):

- Коробочный программный продукт – это ПО, являющееся объектом интеллектуальной собственности, где исходный код программы рассматривается как произведение, объект применения авторского права, владение и использование которого охраняется законодательно. Его производители используют лицензии – договора между обладателем авторских прав и пользователем (покупателем) инструментального средства для разработки ИС.
- Условно-бесплатное программное обеспечение – это ПО, которое предоставляется во временное безвозмездное использование для ознакомления (без извлечения прибыли) и предполагает его последующую покупку. Оно, как правило, имеет или ограниченное время использования, или недостаточный набор опций для разработки ИС.

- Пиратские копии – обходятся дешево. При их использовании нет необходимости (для разработки информационных систем) покупать лицензионную программную продукцию или разрабатывать более дешевые отечественные аналоги инструментальных средств. Однако невозможность получения оплаты разработчиками компьютерных программ, упущенная ими выгода, переводит разработку ПО для компьютеров в академическое занятие, что препятствует развитию данной отрасли в Республике Казахстан.
- Свободное программное обеспечение [6] – это ПО, распространяемое без оплаты. Его применение похоже на существующую практику использования научных публикаций, которая позволяет не только использовать без согласия авторов саму компьютерную программу (как бы читать публикацию), но и делает доступным ее исходный код, то есть программу можно копировать с обязательным указанием источника (цитирование статьи), модифицировать, дополнять.

Большие корпорации, например Intel или IBM, находят необходимым сегодня поддерживать проекты по разработке свободного ПО, оплачивая сотрудников, которые работают в рамках этих проектов [4].

На денежные средства от ЮНЕСКО подготовлен каталог (поисковая система) свободного ПО (Free Software Directory) [4], где каждая запись содержит 47 полей, включающих такую информацию, как Web-сайт проекта, имена разработчиков, используемый язык программирования.

Выгоды применения свободного ПО для разработки информационных систем в Республике Казахстан очевидны. Однако данное ПО распространяется по лицензиям (free software licenses) [9], где оговариваются определенные требования его использования, которые необходимо учитывать.

Одним из существенных требований при разработке ИС является то, что производные произведения становятся свободным ПО с открытым программным кодом (open source), который доступен для просмотра, изучения и изменения, что в большинстве случаев совершенно неприемлемо.

Например, при разработке блока защиты компьютерной информации для ЭОР дистанционного обучения недопустимо изучение структур данных и разработанных алгоритмов шифрования вариантов ответов и результатов тестирования.

Сравнительная характеристика лицензий на свободное ПО

Лицензия на свободное ПО	GPL	LGPL	BSD	MIT	Mozilla public license	Apache software license
Существенное требование при разработке ИС						
Производные произведения должны распространяться на условиях первоначальной лицензии	Да	Нет	Нет	Нет	Да	Нет

Lazarus [5] – это бесплатная среда с открытым кодом для разработки форм графических и консольных приложений, интегрированная с бесплатным компилятором с открытым кодом Free Pascal (object pascal). Lazarus распространяется на условиях GNU General Public License (GPL), а значительная часть библиотек – на условиях GNU Lesser General Public License (LGPL). То есть может применяться в разработке ИС лишь частично.

Рассмотрим в качестве примера разработку блока самооценки компетентности в сво-

бодно распространяемой среде разработки Lazarus (рис. 2). Это будет отдельная программа для самооценки обучающихся.

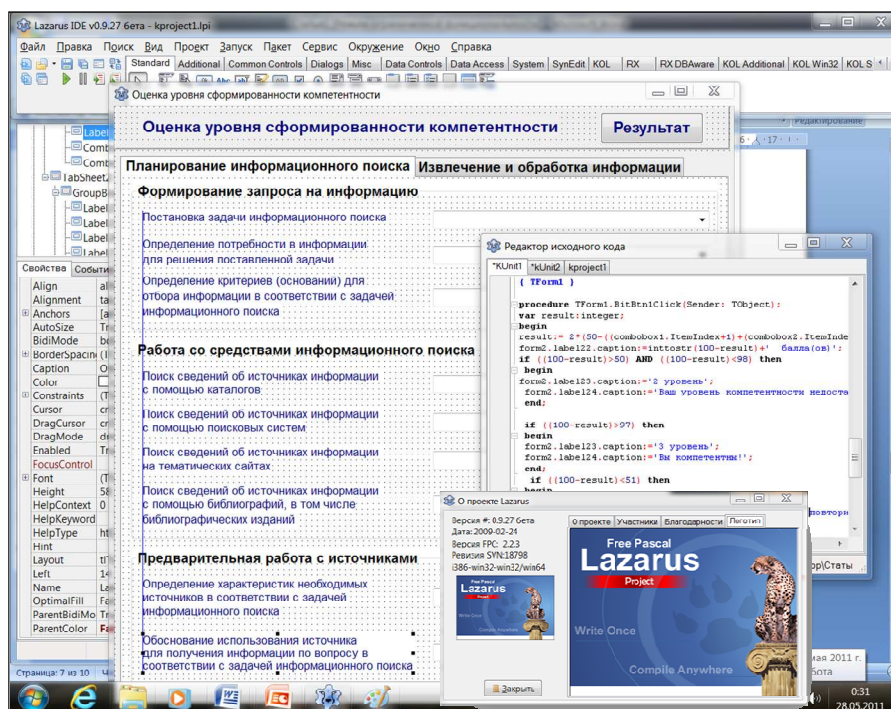


Рисунок 2 - Размещение компонентов на форме свободно распространяемой визуальной среды разработки Lazarus

Приведем фрагмент листинга для кнопки «Результат» (рис. 3), реализующий алгоритм расчета компетентности средствами Lazarus. Педагогический алгоритм расчета соотносился с материалами, размещенными на сайте [7].

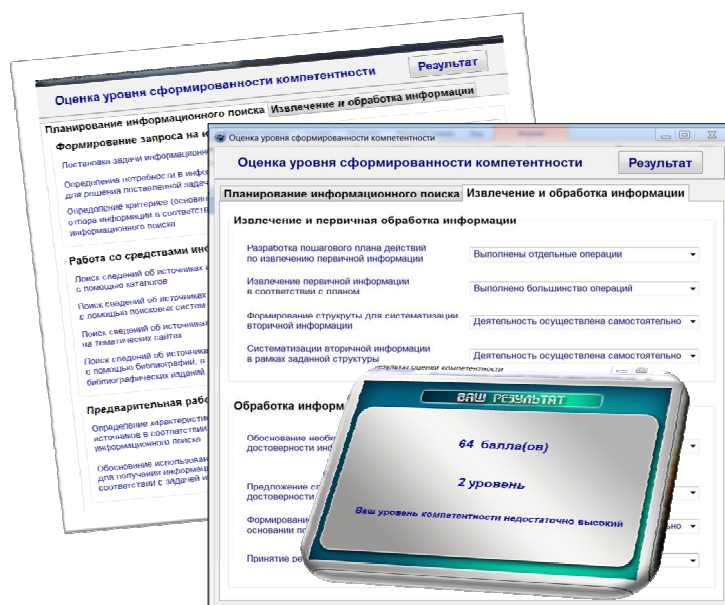


Рисунок 3 - Вид экрана при работе с блоком «Самооценки компетентности», разработанным средствами свободного программного обеспечения Lazarus

Листинг 1

```

procedure TForm1.BitBtn1Click(Sender: TObject);
var result:integer;
begin
result:=2*((combobox1.ItemIndex+1)+(combobox2.ItemIndex+1)+
box3.ItemIndex+1)+(combobox4.ItemIndex+1)+
box5.ItemIndex+1)+(combobox6.ItemIndex+1)+
box7.ItemIndex+1)+(combobox8.ItemIndex+1)+
box9.ItemIndex+1)+(combobox10.ItemIndex+1)+
box11.ItemIndex+1)+(combobox12.ItemIndex+1)+
Box14.ItemIndex+1)+(combobox14.ItemIndex+1)+
box15.ItemIndex+1)+(combobox16.ItemIndex+1)+
(combobox17.ItemIndex+1));
form2.label22.caption:=inttostr(100-result)+' балла(ов)';
if ((100-result)>50) AND ((100-result)<98) then
begin form2.label23.caption:='2 уровень';
form2.label24.caption:='Ваш уровень компетентности недостаточно высокий';
end; if ((100-result)>97) then begin
form2.label23.caption:='3 уровень';
form2.label24.caption:='Вы компетентны!'; end;
if ((100-result)<51) then begin
form2.label23.caption:='1 уровень';
form2.label24.caption:='Вы не компетентны. Следует повторить обучение.';
end;
Form2.show;
end;

```

combo-
combo-
combo-
combo-
Combo-
combo-

Итак, разработка информационной системы ЭОР для дистанционного обучения может

частично осуществляться с применением свободного ПО.

На основании вышеизложенного можно сделать следующие выводы: для разработки ИС уже недостаточно условно-бесплатного программного обеспечения или покупки лицензионного программного продукта, целесообразно частичное применение свободного ПО.

Список литературы

1. Илларионова Е.В. Отечественная история // Центр проектир. контента МЭСИ, 2004. - (<http://cpk@mesi.ru>).
2. Ильенкова С.Д. Управление инновационным проектом / С.Д. Ильенкова, Л.М. Гохберг // Центр проектир. контента МЭСИ, 2004 (<http://cpk@mesi.ru>).
3. Лукашенко М.А. Public Relations // Центр проектир. контента МЭСИ, 2004. - (<http://cpk@mesi.ru>).
4. Материал из свободной энциклопедии Википедии (http://ru.wikipedia.org/wiki/Free_Software_Foundation).
5. Официальный сайт свободно распространяемой среды разработки Lazarus (<http://lazarus.freepascal.org/>).
6. Пожарина Г.Ю. Стратегия внедрения свободного программного обеспечения в учреждениях образования / Г.Ю. Пожарина, А.М. Поносов. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2008. - 152 с.
7. Сайт Лаборатории модернизации образовательных ресурсов г. Самары (<http://www.mega.educat.samara.ru>).
8. Тихомирова Е.В. Инновационные технологии в образовании / Е.В. Тихомирова, В.В. Бовт // Центр проектир. контента МЭСИ, 2004. - (<http://cpk@mesi.ru>).
9. Тяпкина Е. Сравнительный анализ основных лицензий Open Source: GPL, LGPL, BSD, MIT, Mozilla public license, Apache software license / Тезисы доклада на семинаре «Открытые системы: философия, технология, бизнес». - М.: Институт Логики и ALT Linux, 2002. - (<http://www.libertarium.ru/18586>).
10. Шенников С.А. Основы деятельности тьютора в системе дистанционного образования: Спец. учебный курс / С.А. Шенников, А.Г. Теслинов, А.Г. Чернявская и др. - М.: Дрофа, 2006.- 591 с.

Получено 16.05.11

УДК 54 (574)

М.Б. Усманова, А.А. Тастанбекова, В.К. Манашева
Д. Серікбаев атындағы ШҚМТУ, Өскемен қ.

ЕРІТІНДІЛЕР ДАЯРЛАУ КЕЗІНДЕ ҚАЖЕТТІ ФОРМУЛАЛАРДЫ ҚОРЫТЫП ШЫҒАРУ ЖӘНЕ ОЛАРДЫ ҚОЛДАНУ

Бұл мақалада үш типті есептің шығарылу әдістемесіне тоқталамыз.

1. Формула бойынша ерітіндіні сұйылтуға арналған есептерді мына формуламен шығаруға болады:

$$a) \quad \omega_2 = \frac{m_1(ер.зат)}{m_1(ер - di) + m(H_2O)}, \omega_2 < \omega_1. \quad (1)$$

Ерітіндіні сұйылтуға қосылған су массасы бөлшектің бөліміне қосылып, ерітінді массасын арттырады. (1)-формуланы түрлендірсек:

$$\omega_2(m_1(ер-ді) + m(H_2O)) = m_1(ер.зат), m(ер.зат) = \omega \cdot m(ер-ді)$$

$$\omega_2(m_1(ер-ді) + \omega_2 m(H_2O)) = m_1(ер-ді) \omega_1, m_1(ер-ді)(\omega_1 - \omega_2) = \omega_2 m(H_2O)$$

$$\frac{\omega_1 - \omega_2}{\omega_2} = \frac{m(H_2O)}{m_1(ер - di)}; \quad (2)$$

ә) егер ерітіндідегі зат ыдыс түбіне шөксе (температура айырмашылығына

байланысты) онда ерітінді және еріген зат массалары азаяды.

$$\omega_2 = \frac{m(ep.zat) - m(zat)}{m_1(ep - \partial i) - m(zat)} \cdot \omega_1 < \omega_1 \quad (3)$$

$$\omega_2 (m_1(ep - \partial i) - m(zat)) = m(ep.zat) - m(zat), m(ep.zat) = \omega \cdot m(ep - \partial i)$$

$$\omega_2 (m_1(ep - \partial i) - m(zat)) = m(ep.zat) - m(zat); \omega_2 m_1(ep - \partial i) - \omega_2 m(zat) = \omega_1 \cdot m_1(ep - \partial i) - m(zat)$$

$$\omega_2 m_1(ep - \partial i) - \omega_1 m_1(ep - \partial i) = \omega_2 \cdot m(zat) - m(zat), m_1(ep - \partial i)(\omega_2 - \omega_1) = m(zat) (\omega_2 - 1)$$

$$\frac{\omega_2 - \omega_1}{\omega_2 - 1} = \frac{m(zat)}{m_1(ep - \partial i)} \cdot \quad (4)$$

2. Сұйық ерітіндіні концентрлеудің (қойылтудың) екі жолы бар:

а) суды буландыру;

ә) ерітіндіге сондағы бар затты (аттас) салу.

Ерітіндіні буландырғанда ондағы зат массасы өзгеріссіз қалады да, ал ерітінді массасы буланған су массасының есесінен кемиді; сонда формуланы былай жазуға болады:

$$\omega_2 = \frac{m_1(ep.zat)}{m_1(ep - \partial i) - m(H_2O)} \cdot \quad (5)$$

(5) формуланы түрлендіреміз:

$$\omega_2 (m_1(ep - \partial i) - m(H_2O)) = m_1(ep.zat)$$

$$\omega_2 (m_1(ep - \partial i) - m(H_2O)) = m_1(ep - \partial i) \omega_1$$

$$\omega_2 m_1(ep - \partial i) - m_1(ep - \partial i) \omega_1 = \omega_2 m(H_2O)$$

$$m_1(ep - \partial i)(\omega_2 - \omega_1) = \omega_2 m(H_2O)$$

$$\frac{\omega_2 - \omega_1}{\omega_2} = \frac{m(H_2O)}{m_1(ep - \partial i)}, \quad \omega_2 > \omega_1 \cdot \quad (6)$$

Ерітіндіге өзінде бар затты қосымша салғанда еріген зат массасы және ерітінді массасы да артады, сондықтан есеп шығару үшін мына формула ұсынылады:

$$\omega_2 = \frac{m_1(ep.zat) + m(zat)}{m_1(ep - \partial i) + m(zat)} \cdot \quad (7)$$

Осы формуланы жоғарыдағыдай түрлендірсек:

$$\omega_2 (m_1(ep - \partial i) + m(zat)) = m_1(ep.zat) + m(zat)$$

$$\omega_2 (m_1(ep - \partial i) + \omega_2 m(zat)) = m_1(ep.zat) + m(zat)$$

$$\omega_2 (m_1(ep - \partial i) - \omega_2 m(zat)) = \omega_1 m_1(ep - \partial i) + m(zat)$$

$$\omega_2 (m_1(ep - \partial i) - \omega_2 m_1(ep - \partial i)) = m(zat) - \omega_2 m(zat)$$

$$m_1(ep - \partial i)(\omega_2 - \omega_1) = m(zat)(1 - \omega_2)$$

$$\frac{m(zat)}{m_1(ep - \partial i)} = \frac{\omega_2 - \omega_1}{1 - \omega_2}, \quad \omega_2 > \omega_1 \quad (8)$$

3. Екі ерітіндіні араластыру арқылы үшінші ерітінді алуға арналған есептің екі түрі болады:

а) пайда болатын үшінші ерітіндідегі заттың массалық үлесін анықтауға;

ә) үшінші ерітіндіде еріген заттың массалық үлесі беріліп, оған қажетті ерітінділер

массасын немесе көлемін есептеуге арналған есептер

$$\omega_3 = \frac{m_1(ep.zam) + m_2(ep.zam)}{m_1(ep - di) + m_2(ep - di)} \quad (9)$$

Ерітінділерді ($\omega_2 < \omega_1$) араластырып болатын, концентрациясы ω_3 $\omega_2 < \omega_3 < \omega_1$ болатын ерітінді әзірлеу барысында оған қажетті ерітінді массаларының қатынасын анықтау үшін крест ережесін (Пирсон квадраты) пайдалануға болады. Оның математикалық өрнегін шығару үшін формуланы түрлендіреміз:

$$\omega_3 (m_1(ep - di) + m_2(ep - di)) = m_1(ep.zam) + m_2(ep.zam)$$

$$\omega_3 m_1(ep - di) + \omega_3 m_2(ep - di) = \omega_1 m_1(ep - di) + \omega_2 m_2(ep - di)$$

$$\omega_3 m_1(ep - di) - \omega_1 m_1(ep - di) = \omega_2 m_2(ep - di) - \omega_3 m_2(ep - di)$$

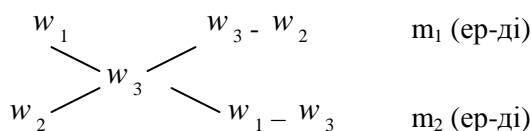
Теңдіктің екі жағын да (-1)-ге көбейтеміз:

$$m_1(ep - di)\omega_1 - \omega_3 m_1(ep - di) = \omega_3 m_2(ep - di) - \omega_2 m_2(ep - di)$$

$$m_1(ep - di)(\omega_1 - \omega_3) = m_2(ep - di)(\omega_3 - \omega_2)$$

$$\frac{m_1 ep - di}{m_2 ep - di} = \frac{\omega_3 - \omega_2}{\omega_1 - \omega_3} \quad (10)$$

Крест ережесін пайдалану үшін Пирсон квадратының сұлбасын келтіріп, диагональ бойымен үлкенінен кішісін алып, ерітінді массаларының арақатынасын анықтауға болады:



Пирсон квадратының алғашқы төрт жағдайдағы байланысын пайдалануға болады, ол келесі кестеде келтірілген.

1-кесте

Пирсон квадратының алғашқы төрт жағдайдағы байланысы

№	Есеп шарты	Крест ережесі	Формулалар
1	+m(H_2O) $w_1 > w_2$		$\frac{w_2}{w_1 - w_2} = \frac{m(ep - di)}{m(H_2O)} \quad (1)$
2	-m(зат) $w_1 > w_2$		$\frac{w_2 - w_1}{w_2 - 1} = \frac{m(zam)}{m_1(ep - di)} \quad (2)$
3	-m(H_2O) $w_1 < w_2$		$\frac{w_2}{w_2 - w_1} = \frac{m_1(ep - di)}{m(H_2O)} \quad (3)$
4	+m(зат) $w_1 < w_2$		$\frac{w_2 - w_1}{1 - w_2} = \frac{m(zam)}{m_1(ep - di)} \quad (4)$

5	$w_1 > w_3 > w_2$	$ \begin{array}{c} w_1 \quad w_3 - w_2 \\ \diagdown \quad \diagup \\ w_2 \quad w_3 \\ \diagup \quad \diagdown \\ w_1 - w_3 \end{array} $	$ \frac{w_3 - w_2}{w_1 - w_3} = \frac{m_1(ep - di)}{m_2(ep - di)} \quad (5) $
---	-------------------	--	---

Бұл формулаларды ерітінді даярлау кезінде химия кабинеттерінде жұмыс істейтін лаборанттар немесе кіші ғылыми қызметкерлер, аспиранттар пайдалануына болады (уақытты үнемдеу мақсатында). Ал оқушылар, студенттер қауымы істің мән-жайын толық ұғыну үшін басқа жолдарын қарастыруы тиіс. Сондықтан осы мақалада келтірілген есептердің әрқайсысының шығарылуын екі тәсілмен келтіреміз.

1.1 Массасы 500 г 30 %-дық ерітіндіге 300 мл су қосқанда қанша пайыздық ерітінді әзірлеуге болады?

Берілгені:

$m_1(ep - di) = 500$ г.

$w_1 = 30\%$

$+m(H_2O) = 300$ г.

Т/к: $w_2 = ?$

Шешуі:

1- тәсіл

(1) – формуланы пайдаланып шығаруға болады

$$\frac{w_2}{w_1 - w_2} = \frac{m(ep - di)}{m(H_2O)} \quad (1) \quad w_2 = x \text{ - деп белгілейміз}$$

$$\frac{x}{0,3 - x} = \frac{500}{300} \quad x = 0,1875.$$

2-тәсіл

$$w_2 = \frac{m(zam)}{m(ep - di) + m(H_2O)}; \quad w_2 = \frac{500 \cdot 0,3}{500 + 300} = 0,1875$$

Жауабы: 18,75 %

1.2 Еріген заттың массалық үлесі 0,4 болатын 300г ерітіндіге су қосқанда 0,3 болатын қанша ерітінді әзірлеуге болады?

Берілгені:

$m_1(ep - di) = 300$ г

$w_1 = 0,4$

$w_2 = 0,3$

Шешуі:

1- тәсіл

$$\frac{w_2}{w_1 - w_2} = \frac{m_1(ep - di)}{m(H_2O)}; \quad \frac{0,3}{0,4 - 0,3} = \frac{300}{x};$$

$$x = 100 \text{ г } H_2O.$$

$$m_2(ep - di) = m_1(ep - di) + m(H_2O) = 300 + 100 = 400 \text{ г.}$$

Т/к: $+m(H_2O) = ?$

$m_2(ep - di) = ?$

2-тәсіл

$$w_2 = \frac{m(zam)}{m_1(ep - di) + m(H_2O)}; \quad m(H_2O) = x$$

$$0,3 = \frac{0,4 \cdot 300}{300 + x}; \quad x = 100 \text{ г}; \quad m_2(ep - di) = 400 \text{ г.}$$

Жауабы: 100 г H_2O 400 г ерітінді

2.1 Массасы 500 г еріген заттың массалық үлесі 0,4 болатын ерітіндінің температурасы төмендеткенде 25 г зат кристалданса, пайда болған ерітіндідегі заттың массалық үлесі қандай?

Берілгені:

Шешуі:

$$\begin{aligned}
 m_1(\text{ер-ді}) &= 500 \text{ г} & 1\text{-тәсіл} \\
 \omega_1 &= 0,4 - m(\text{зат}) = 25 \text{ г.} & \frac{w_2 - w_1}{w_2 - 1} = \frac{m(\text{зат})}{m(\text{ер} - \text{ді})}; \quad w_2 - x \text{ - деп белгілейміз} \\
 \text{Т/к: } w_2 &= ? & \frac{x - 0,4}{x - 1} = \frac{25}{500}; \quad x = 0,3684 \\
 & & 2\text{-тәсіл} \\
 & & w_2 = \frac{m_1(\text{зат}) - m(\text{зат})}{m_1(\text{ер} - \text{ді}) - m(\text{зат})}; \quad w_2 = \frac{500 \cdot 0,4 - 25}{500 - 25} = 0,3684
 \end{aligned}$$

Жауабы: 0,3684.

2.2 Массасы 860 г ерітіндідегі еріген заттың массалық үлесі 0,7 ерітіндіден қанша зат кристалданғанда заттың массалық үлесі 0,45 болады?

$$\begin{aligned}
 \text{Берілгені:} & & \text{Шешуі:} \\
 w_2 &= 0,45 & 1\text{-тәсіл} \\
 w_1 &= 0,7 & (2)\text{-формула бойынша:} \\
 m_1(\text{ер-ді}) &= 860 \text{ г} & \frac{0,45 - 0,7}{0,45 - 1} = \frac{x}{860}; \quad \frac{-0,25}{-0,55} = \frac{x}{860}; \quad x = 390,9 \text{ г.} \\
 & & 2\text{-тәсіл} \\
 \text{Т/к: } - m(\text{зат}) &= ? & 0,45 = \frac{860 \cdot 0,7 - x}{860 - x}; \quad x = 390,9 \text{ г.}
 \end{aligned}$$

Жауабы: 390,9 г.

3.1 Көлемі 500 мл $\rho = 1,2$ г/мл 30 %-дық ерітіндіден 100 мл су буланса, пайда болған ерітіндідегі заттың массасының үлесі қандай?

$$\begin{aligned}
 \text{Берілгені:} & & \text{Шешуі:} \\
 \omega_1 &= 30 \% & 1\text{-тәсіл} \\
 -m(\text{H}_2\text{O}) &= 100 \text{ г} & \frac{\omega_2}{\omega_2 - \omega_1} = \frac{m(\text{ер} - \text{ді})}{m(\text{H}_2\text{O})} \quad (3); \quad \frac{x}{x - 0,3} = \frac{500 \cdot 1,2}{100}; \quad x = 0,36. \\
 \rho &= 1,2 \text{ г/мл} & 2\text{-тәсіл} \\
 V_1(\text{ер-ді}) &= 500 \text{ мл} & \omega_2 = \frac{m(\text{зат})}{m(\text{ер} - \text{ді}) - m(\text{H}_2\text{O})}; \quad \omega_2 = \frac{180}{600 - 100} = 0,36. \\
 \text{Т/к: } \omega_2 &= ? &
 \end{aligned}$$

Жауабы: 0,36.

3.2 Массасы 430 г 20 %-дық ерітіндіні 35 %-қа айналдыру үшін қанша суды буландыру қажет?

$$\begin{aligned}
 \text{Берілгені:} & & \text{Шешуі:} \\
 m(\text{ер-ді}) &= 430 \text{ г} & 1\text{-тәсіл} \\
 \omega_1 &= 20 \% & (3)\text{-формула бойынша} \\
 \omega_2 &= 35 \% &
 \end{aligned}$$

Т/к: - $m(\text{H}_2\text{O})$ - ?

$$\frac{0,35}{0,35 - 0,2} = \frac{430}{x}; \quad x = 184,29 \text{ г.}$$

2-тәсіл

$$0,35 = \frac{430 \cdot 0,2}{430 - x}.$$

Жауабы: 184,29 г.

4.1 Еріген заттың массалық үлесі 30 %-дық 150 г ерітіндіге 50 г зат салғанда пайда болған ерітіндідегі еріген заттың массалық үлесін есептеңдер.

Берілгені: $\omega_1 = 30\%$
 $m_1(\text{ер} - \text{ді}) = 150 \text{ г}$
 $+ m(\text{зат}) = 50 \text{ г}$

Шешуі:

1- тәсіл

$$\frac{\omega_2 - \omega_1}{1 - \omega_2} = \frac{m(\text{зат})}{m(\text{ер} - \text{ді})} \quad (4); \quad \frac{x - 0,3}{1 - x} = \frac{50}{150}; \quad x = 0,475.$$

2-тәсіл

Т/к: ω_2 - ?

$$\omega_2 = \frac{m_1(\text{зат}) + m(\text{зат})}{m_1(\text{ер} - \text{ді}) + m(\text{зат})}; \quad \omega_2 = \frac{150 \cdot 0,3 + 50}{150 + 50} = 0,475.$$

Жауабы: 0,475.

4.2 Массасы 500 г 45 %-дық ерітінді алу үшін 30 %-дық және 60 %-дық ерітіндіден қанша алу керек?

Берілгені: $\omega_3 = 45\%$
 $\omega_3 = 30\%$
 $\omega_2 = 60\%$

Шешуі:

1-тәсіл

$$m_1(\text{ер} - \text{ді}) = x; \quad \frac{0,45 - 0,60}{0,3 - 0,45} = \frac{x}{500 - x}; \quad \frac{-0,15}{-0,15} = \frac{x}{500 - x};$$

$x = 250 \text{ г.}$

2-тәсіл

$$m_2(\text{ер-ді}) = 500 - 250 = 250 \text{ г} \quad 0,45 = \frac{0,3x + 0,6(500 - x)}{500}$$

Жауабы: 250 г.

5.1 Массасы 200 г 60 %-дық ерітіндіге қанша 20 %-дық ерітінді қосқанда 30 %-дық ерітінді алуға болады?

Берілгені: $m_1(\text{ер} - \text{ді}) = 200 \text{ г}$
 $\omega_1 = 60\%$
 $\omega_2 = 20\%$
 $\omega_3 = 30\%$

Шешуі:

1-тәсіл

$$\frac{\omega_3 - \omega_2}{\omega_1 - \omega_3} = \frac{m_1(\text{ер} - \text{ді})}{m_2(\text{ер} - \text{ді})}; \quad \frac{0,3 - 0,2}{0,6 - 0,3} = \frac{200}{x}; \quad x = 600 \text{ г}$$

2-тәсіл

Т/к: $m_2(\text{ер-ді})$ - ?

$$\omega_3 = \frac{m_1(\text{зат}) + m_2(\text{зат})}{m_2(\text{ер} - \text{ді}) + m_2(\text{ер} - \text{ді})}; \quad m_2(\text{ер-ді}) = x$$

$$\frac{200 \cdot 0,6 + 0,2 \cdot x}{x + 200} = 0,3$$

Жауабы: 600 г.

5.2 Массасы 350 г 20 %-дық ерітіндіге қанша зат салғанда ондағы заттың массалық үлесі 25 %-дық болады?

Берілгені:	Шешуі:
$m_1(ep - \partial i) = 350 \text{ г}$	1- тәсіл
$\omega_1 = 20 \%$	(4)-формула бойынша:
$\omega_2 = 25 \%$	$\frac{0,25 - 0,2}{1 - 0,25} = \frac{x}{350}; x = 23,33 \text{ г}$
	2-тәсіл
Т/к: +m(зат) - ?	$0,25 = \omega_2 = \frac{350 \cdot 0,2 + x}{350 + x};$

Жауабы: $x = 23,33 \text{ г}$.

Қорыта келе айтарымыз осы типтес есептерді оңай шығара білу дағдысын қалыптастыру оқушының ойлау қабілетін арттыруға көмегі болары хақ.

Әдебиеттер тізімі

1. Усманова М.Б. Химия есептері мен жаттығуларының жинағы / М.Б.Усманова, А.А. Тастанбекова: Әдістемелік құралы. – Өскемен: ШҚМТУ, 2000. – 120 б.
2. Усманова М.Б. Сборник тестовых вопросов по химии / М.Б. Усманова, А.А. Тастанбекова, Т.А. Умаров. – Усть-Каменогорск: ВКГТК, 2003. – 77 с.
3. Усманова М.Б. Химиядан сандық есептер шығару әдістемесі / М.Б. Усманова, К.Н. Сакарьянова. – Алматы: Атамұра, 2004. – 245 б.
4. Усманова М.Б. Барлық мамандықтар бойынша оқитын студенттерге зертханалық және өзіндік жұмыстарды жасауға арналған оқу-әдістемелік құрал / М.Б. Усманова, А.А. Тастанбекова: Оқу-әдістемелік құралы. – Өскемен, ШҚМТУ, 2007. – 135 б.
5. Усманова М.Б. Химия кестеде болса, есте де болады / М.Б. Усманова, К.Н. Сакарьянова, Е.А. Мамбетқазиев. – Алматы: Мектеп-Болашақ, 2003. – 333 б.
6. Усманова М.Б. Химия в таблицах / М.Б. Усманова, К.Н. Сакарьянова. – Алматы: Атамұра, 2005. – 333 б.

Получено 17.05.11