

ность и константы А и В в растворе сульфата магния значительно выше, чем в растворах солей 3d-металлов (таблица). Очевидно, что высокий заряд иона алюминия и структура его соли, а не только малый радиус катиона, определяют максимальное значение величин λ , А и В в растворе сульфата алюминия.

УДК 541.121

МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ РАВНОВЕСИЙ В СРЕДЕ WINDOWS

Ю.В. Янковский, Е.Н. Дудкина, Л.Д. Поляченко, О.Г. Поляченко

Могилевский государственный университет продовольствия, Беларусь

Компьютерное моделирование химических равновесий является необходимым элементом современных научных исследований. Оно оказалось особенно эффективным при рассмотрении сложных химических равновесий, как в растворах, так и в газовой фазе. Его можно рассматривать также как одно из важных направлений развития современных образовательных технологий в области преподавания химических дисциплин.

До настоящего времени все создаваемые нами программы для расчета химических равновесий работали в приложениях DOS и разрабатывались на базе языка программирования Turbo Basic. Однако при переходе к современной вычислительной технике и среде Windows в работе таких программ часто появляется ряд трудностей, связанных с проблемами совместимости и корректности работы DOS-приложений в среде Windows, а также с неудобствами при работе с этими приложениями в силу их консольной структуры. В настоящем сообщении нами представлены две первые программы, полученные путем переработки некоторых наших Basic-программ для их использования в среде Windows. Обе они имеют двойное назначение – могут использоваться для обработки и прогнозирования результатов экспериментальных научных исследований, а также для самостоятельной работы студентов и их обучения в химических практикумах. Программы составлены таким образом, чтобы в последнем случае могли быть использованы разработанные на кафедре химии методические указания для выполнения лабораторных работ на ЭВМ старых поколений.

Эти программы, написанные в среде программирования Delphi, используют свою базу необходимых для работы библиотек, соответственно, возникает меньше проблем при запуске программы в других версиях Windows и на других машинах. При разработке пользовательского интерфейса появляются возможности организации более удобного, чем в DOS-приложениях, ввода и вывода данных, а также более понятного пользователю принципа работы с программой; возникает возможность просмотра графиков наряду с результатами выполненных расчетов.

Первая программа рассматривает химические равновесия в растворах слабых кислот или оснований и их смесей с сильными кислотами и щелочами. Она предусматривает возможность моделирования работы рН-метра с различной точностью – обычной ($\pm 0,01$ рН), или повышенной ($\pm 0,001$ рН), которая не может быть реализована экспериментально. Она может быть использована для теоретического расчета кривых кислотно-щелочного титрования, а также легко модифицирована для рассмотрения других равновесий в растворах – с участием мало растворимых солей и комплексных соединений.

Вторая программа рассматривает химические равновесия с участием газовой фазы – процессы парообразования веществ и процессы термического разложения гидратов или других комплексов с переходом летучего лиганда в газовую фазу. При обработке экспериментальных тензиметрических результатов используется уравнение $\ln P = A - B/T$, строятся графики в координатах $P - T$ и $\ln P - 1/T$. Имеется возможность расчета давления по стандартным термодинамическим таблицам, а также интерполяции имеющихся табличных данных $P - T$ различных веществ.

УДК 541.183.26

КОМПЬЮТЕРНАЯ ОБРАБОТКА СИГНАЛА ПРИ ОПРЕДЕЛЕНИИ УДЕЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТИ МЕТОДОМ ТЕПЛОВОЙ ДЕСОРБЦИИ АРГОНА

В.А. Чуськов, А.А. Иорбалиди, А.Н. Пахоменко, О.Г. Поляченко

Могилевский государственный университет продовольствия, Беларусь

Для определения удельной поверхности дисперсных объектов на кафедре химии создана установка, основанная на использовании метода тепловой десорбции аргона. Газ-носитель гелий и аргон подаются из баллонов с определенной скоростью в смеситель, и полученная смесь заданного состава пропускается при комнатной температуре через сосуд с исследуемым веществом. В этих условиях адсорбция аргона на поверхности исследуемого образца практически не происходит, и сигнал катарометра соответствует горизонтальной нулевой линии на ленте самописца. Затем вещество охлаждается жидким азотом, и аргон из смеси с гелием сорбируется на его поверхности. При нагревании сосуда с веществом до комнатной температуры аргон десорбируется, и самописец фиксирует десорбционный пик. Площадь этого пика пропорциональна количеству аргона в газе, то есть поверхности образца.

Площадь десорбционного пика может быть определена с использованием различных методов, однако для целей нашей работы наиболее удобным и точным оказался метод, основанный на компьютерной обработке сигнала катарометра. С этой целью нами разработана специальная программа на языке Delphi.

Экспериментальные данные (величины напряжения U) получают вручную путем записи через каждые 5 с показаний цифрового вольтметра В7-21 (диапазон 1 В, точность отсчетов $\pm 0,1$ мВ). Входными данными для