

## **Впровадження комп'ютерної програми Origin у навчально-виховний процес ВНЗ**

Знайомство з найпростішими можливостями пакету Origin проведемо на прикладі конкретної лабораторної роботи, яку виконують студенти в рамках практикуму з фізичної та колоїдної хімії. В порівнянні з оригінальною лабораторною роботою наведений нижче текст скорочений в частині теорії. Наведені експериментальні дані отримані на реальній лабораторній роботі.

### ***Лабораторна робота: Адсорбція оцтової кислоти на вугіллі***

*Мета роботи:* вивчення адсорбційної рівноваги на межі поділу твердий адсорбент—розчин.

#### *Порядок роботи*

Для вивчення адсорбції оцтової кислоти на активованому вугіллі з вихідного розчину  $\text{CH}_3\text{COOH}$  методом послідовного розведення приготують шість розчинів кислоти (по 100 мл, концентрації вказує викладач). Активоване вугілля ретельно розтирають у ступці, а потім зважують шість порцій по 1,0 г.

До 50 мл кожного з приготованих розчинів оцтової кислоти додають по 1,0 г вугілля, після чого закриті колби із вмістом збовтують на механічній мішалці протягом 30 хв. Потім розчини відфільтровують, а в отриманому фільтраті визначають концентрацію кислоти після адсорбції.

Концентрацію вихідного розчину оцтової кислоти і розчинів після адсорбції та фільтрації визначають титруванням розчином NaOH з відомою концентрацією (0,1н) в присутності фенолфталеїну до появи стійкого блідо-рожевого забарвлення розчину, що аналізується. Концентрацію кислоти розраховують за співвідношенням:

$$c_k V_k = c_l V_l$$

де  $c_k$  і  $c_l$  — концентрації розчинів оцтової кислоти і лугу (моль/л);  $V_k$  — об'єм кислоти, що був взятий для титрування;  $V_l$  — об'єм лугу, що пішов на титрування.

Величина адсорбції  $A$  визначається за різницею концентрацій розчину оцтової кислоти до ( $c_0$ ) і після ( $c$ ) адсорбції:

$$A = \frac{c_0 - c}{m} V,$$

де  $m$  — маса вугілля;  $V$  — об'єм розчину кислоти, що був взятий для дослідження.

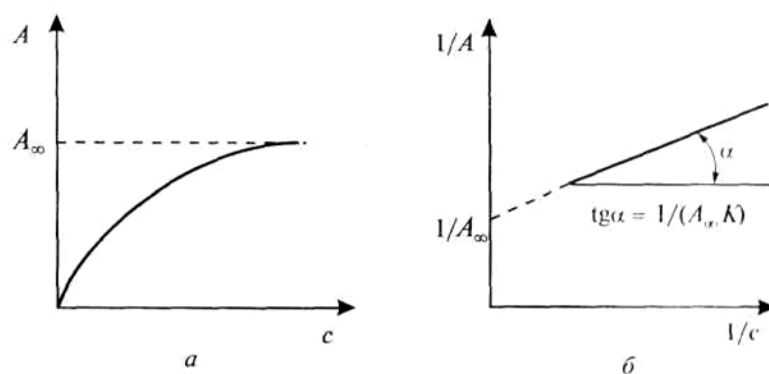


Рис. 1.1. Ізотерми адсорбції Ленгмюра а) в координатах  $A - c$ ; б) лінійна форма в координатах  $1/A - 1/c$   
 Будують ізотерму адсорбції в координатах  $1/A$  від  $1/c$  (див. рис. 1.1, б) і визначають  $A_\infty$  і  $K$  з лінійної форми рівняння ізотерми адсорбції Ленгмюра

$$\frac{1}{A} = \frac{1}{A_\infty} + \frac{1}{A_\infty K} \cdot \frac{1}{c}.$$

Усі результати заносять до таблиці:

№ колби	$(V_0)_k$	$(V_0)_l$	$c_0$	$V_k$	$V_l$	$c$	$\Delta c = c_0 - c$	$A$	$1/C$	$1/A$

Для визначення питомої поверхні адсорбентів використовуються рівняння Ленгмюра і рівняння БЕТ.

$$s_{num} = A_\infty N_A s_M,$$

де  $N_A$  - число Авогадро;  $s_M$  — площа, яку займає одна молекула адсорбату в насиченому адсорбційному шарі.

За рівнянням розраховують питому поверхню адсорбенту,  $s_{num}$ , вважаючи, що площа, яку займає одна молекула,  $s_M$ , для багатьох одноосновних жирних кислот становить  $0,2 \text{ nm}^2$ .

Для обробки та візуалізації експериментальних даних, отриманих в ході виконання лабораторної роботи, скористаємося пакетом Origin.

Запускаємо програму Origin Pro 7.5, з'явиться вікно **Data 1** з таблицею для заповнення даними (рис. 1.2). Заповнюємо таблицю отриманими при виконанні експерименту значеннями (рис. 1.3).

	A[X]	B[Y]
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		

Рис. 1.2. Зовнішній вигляд вікна з таблицею даних

	A[X]	B[Y]
1	10	12,66
2	10	22,3
3	10	33
4	10	39,6
5	10	48,2
6	10	56
7		
8		
9		

Рис. 1.3. Приклад таблиці з експериментальними даними

**Підписуємо колонки.** Для цього по заголовку колонки А (заголовок виділений сірим кольором) клацнути правою кнопкою миші. У вікні, що з'явилося, вибрати пункт меню **Properties** (властивості). З'явиться діалогове вікно **Worksheet Column Format** (рис. 1.4) і в нижньому вікні **Column Label** (підпис колонки) задати підпис  $(V_0)_k$ , натиснути Next (наступний), аналогічно змінити підпис колонки В  $(V_0)_l$ , натиснути ОК.

**Визначення концентрації кислоти** за співвідношенням:  $c_k = c_l V_l / V_k$ . Для цього необхідно додати нову колонку до наявної таблиці, клацнувши на порожньому місці таблиці правою кнопкою миші і вибравши в контекстному меню пункт **Add New Column** (дати нову колонку). Підписати її  $C_0$ . Оскільки шукана величина  $C_0$  є відношенням помноженого на 0,1(концентрація луку) об'єму луку  $V_l$  (колонка В в таблиці) до об'єму

кислоти  $V_k$  (колонка А в таблиці), то для заповнення колонки її необхідно виділити і в контекстному меню вибрати пункт **Set Column Values** (встановити значення колонки) (рис. 1.5); у вікні Col (C) = записати вираз Col (B)\*0,1/ Col (A), натиснути ОК. У тому випадку, коли для проведення обчислень необхідно користуватися якою-небудь іншою функцією, можна додати їх з наявного списку кнопкою **Add Function** (дати функцію).

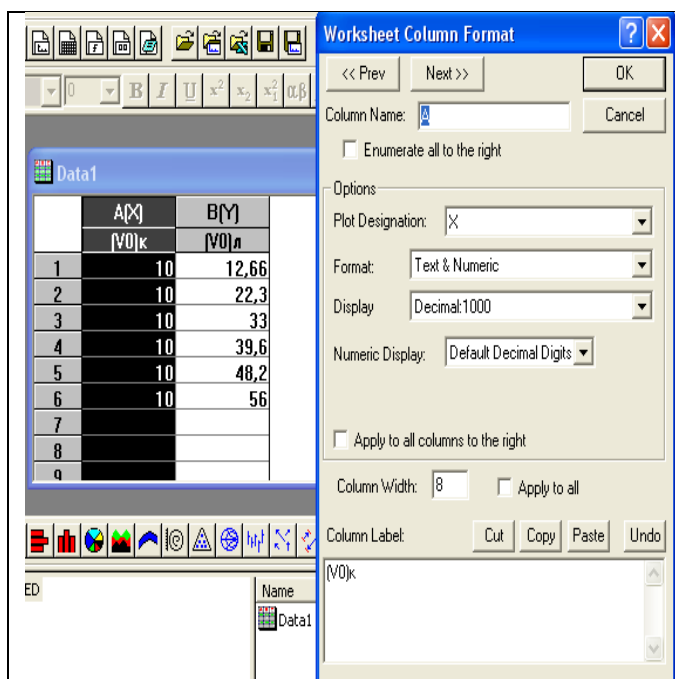


Рис. 1.4. Опції налаштування властивостей колонки

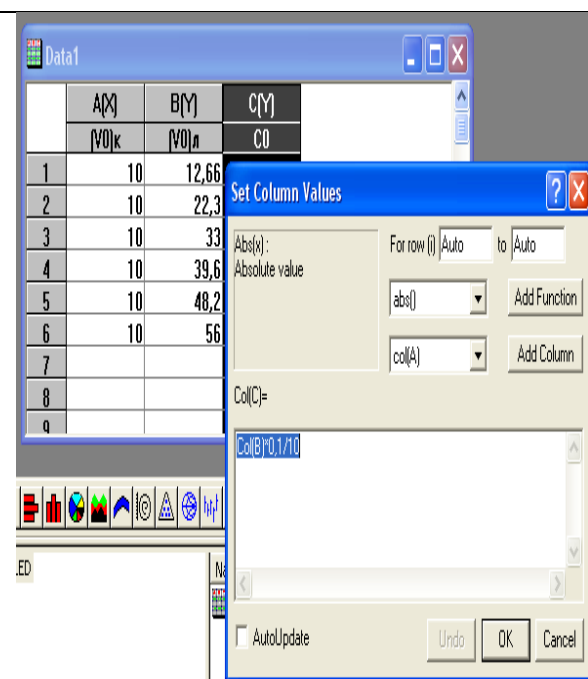


Рис. 1.5. Вікно для визначення завдання колонки

Додати до таблиці ще 3 колонки (**D, E, F**), підписавши їх відповідно  $V_k$ ,  $V_n$ , та  $C$ . Заповнити **D, E** колонки експериментальними даними, а колонку **F** розрахувати за формулою: Col (E)\*0,1/ Col (D), натиснути ОК.

Додати до таблиці ще 4 колонки, підписавши їх відповідно  $C_0-C$ ,  $A$ ,  $1/C$  та  $1/A$ . Заповнити колонку **G**, розрахувавши за формулою:  $\Delta c = c_0 - c$  (Col (C)-Col (F)).

Маса активованого вугілля, що використовувалася у роботі – 1 грам, об'єм розчину оцтової кислоти для збовтування – 50 мл (0,05 л), тому для знаходження величини адсорбції (колонка **H**) за формулою:  $A = \frac{c_0 - c}{m} V$  значення попередньої колонки необхідно помножити на 0,05 (Col(G)\*0,05).

Значення останніх двох колонок **I**, **J** знаходимо за формулами:  $1/C$  та  $1/A$  ( $1/Col(F)$ ), ( $1/Col(H)$ ).

У нас вийшла така таблиця.

	A(X) [V0] <sub>к</sub>	B(Y) [V0] <sub>л</sub>	C(Y) C0	D(Y) V <sub>к</sub>	E(Y) V <sub>л</sub>	F(Y) C	G(Y) C0-C	H(Y) A	I(Y) 1/A	J(Y) 1/C
1	10	12,66	0,1266	10	9	0,09	0,0366	0,00183	546,44809	11,11111
2	10	22,3	0,223	10	18	0,18	0,043	0,00215	465,11628	5,55556
3	10	33	0,33	10	28	0,28	0,05	0,0025	400	3,57143
4	10	39,6	0,396	10	34,4	0,344	0,052	0,0026	384,61538	2,90698
5	10	48,2	0,482	10	42,7	0,427	0,055	0,00275	363,63636	2,34192
6	10	56	0,56	10	50,4	0,504	0,056	0,0028	357,14286	1,98413
7										
8										
9										

**Побудова графіка.** Для визначення  $A_{\infty}$  і  $K$  будують ізотерму адсорбції Ленгмюра в координатах  $1/A$  від  $1/c$ . Для цього по заголовку колонки **I** клацнути правою кнопкою миші. У вікні, що з'явилося, вибрати пункт меню **Properties** (властивості). З'явиться діалогове вікно **Worksheet Column Format** (рис. 1.4). У вікні **Plot Designation** (призначення для графіка) вказати роль колонки (X), натиснути Next, аналогічно змінити підпис колонки **J**, вказавши її роль (Y), натиснути ОК.

Для побудови графіка виділити колонки **I** та **J**, в меню **Plot** (графік) вибрати символ **Scatter** (точки), з'явиться графік (рис. 1.6).

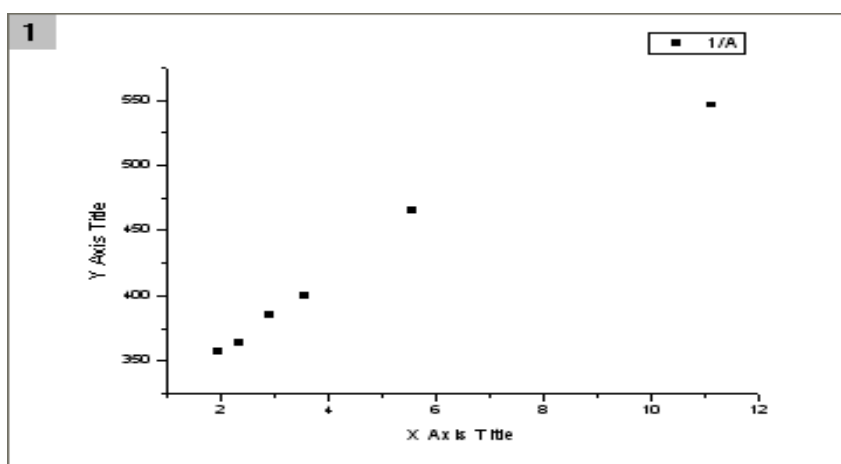
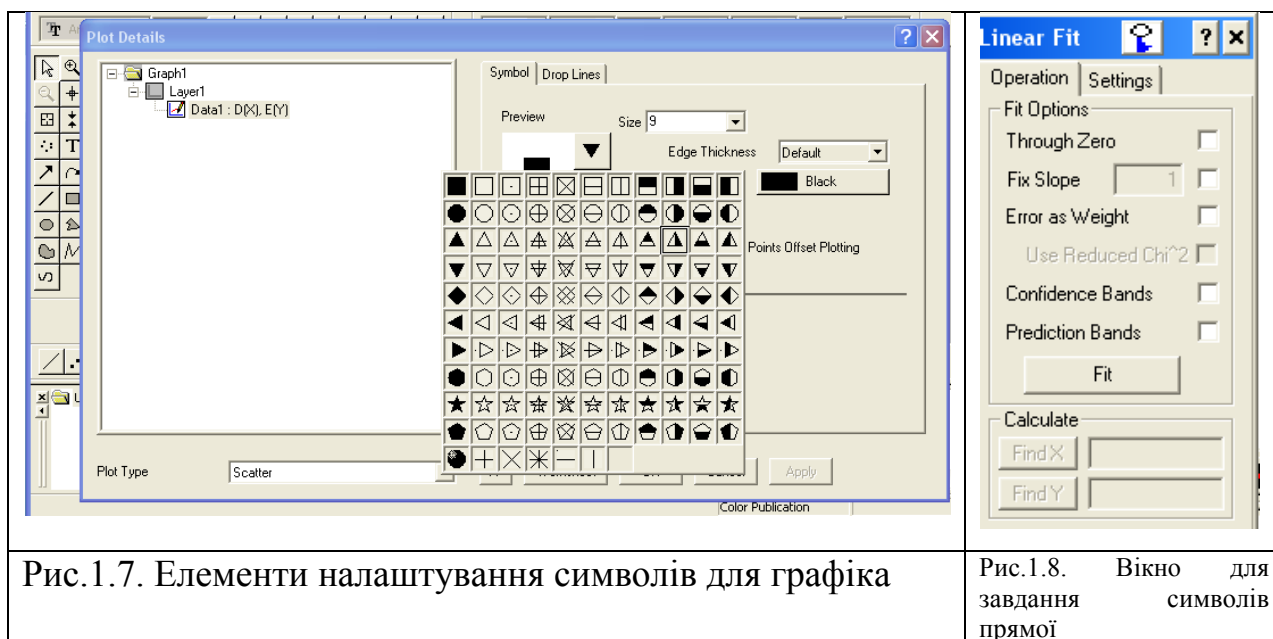


Рис. 1.6. Графік ізотерми адсорбції Ленгмюра в координатах  $1/A-1/C$

Клацнувши двічі по одній з точок прямої, викликаємо вікно **Plot Details** (параметри графіка) (рис. 1.7). На закладці **Symbol** (символ) ми можемо

вибрати зовнішній вигляд символів (в даному випадку прямокутники), список яких відкривається при натисканні на кнопку **Preview** (попередній перегляд) з чорною трикутною стрілкою; вказати розмір символів у списку **Size** (розмір), колір - у списку **Color** (колір), товщину ліній - у списку **Edge Thickness** (товщина ліній).

Для визначення параметрів адсорбції необхідно з'єднати отримані точки прямою за методом найменших квадратів. При проведенні лінійної апроксимації, потрібно щоб пряма доходила до осей. Для цього в пункті меню **Tools** (інструменти) виберіть **Linear Fit** (підбір лінії), на закладці **Settings** потрібно поставити одну галочку в пункті **Span X Axis** (рис 1.8). Потім на вкладці **Operation** (операція) натиснути кнопку **Fit** (підбір лінії), на графіку відобразиться пряма (рис. 1.9).



Автоматично в правому нижньому куті вікна в протоколі результатів **Results Log** (у разі відсутності вікна, його можна викликати натисканням комбінації клавіш Alt+2 або натисканням кнопки **Results Log** (колонка результатів на стандартній панелі інструментів) відображаються значення параметрів апроксимації і їх похибок.

Проводиться обробка експериментальних даних за методом найменших квадратів (лінійна регресія) з використанням рівняння  $Y = A + B * X$ .

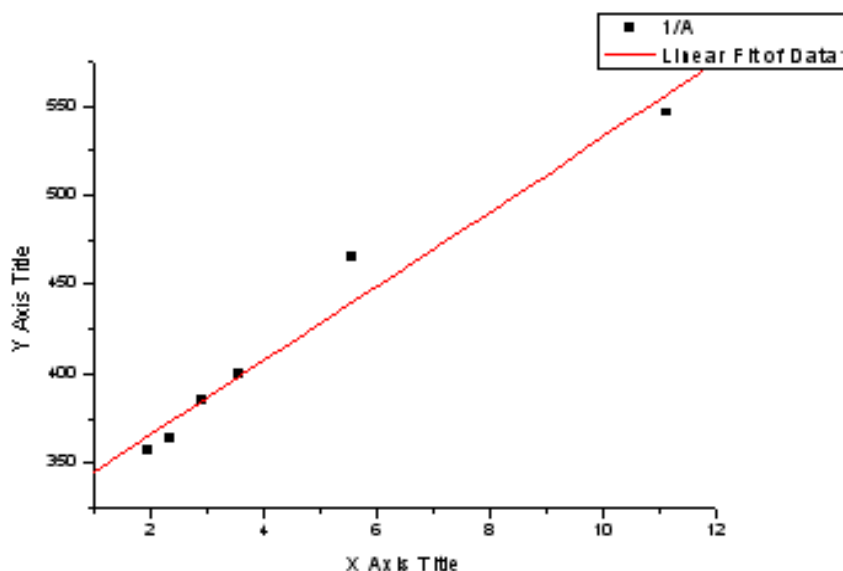


Рис 1.9. Ізотерма адсорбції оцтової кислоти на вугіллі

У нашій лабораторній роботі отримані такі результати  $1/A_{\infty}=323,66$ ;  $1/A_{\infty}K=10,695$ . Тоді  $A_{\infty}=3,09 \cdot 10^{-3}$  моль/г;  $K=30,26$ .

Розраховуємо питому поверхню активованого вугілля за формулою:  
 $s_{num} = A_{\infty} N_A s_M = 372 \text{ м}^2$ .

**Висновок.** Погортавши якийсь солідний журнал з фізичної хімії, наприклад, *Physics and Chemistry of Liquids*, фахівець, знайомий з пакетом Origin, без зусиль визначить, що багато ілюстрації створювалися саме за допомогою цього пакета. Власний багаторічний досвід використання пакета при підготовці наукових публікацій дозволяє стверджувати, що пакет здатний полегшити життя фізико-хіміка при обробці даних та підготовці ілюстрацій у найскладніших випадках, а саме форматування графіків; побудова складних графіків, шарів; формування листа звіту; розрив осі, вставка збільшеного фрагмента графіка; імпортування даних та диференціювання графіків; Фур'є-фільтрація експериментальних даних; апроксимація нелінійними функціями та ін.

Перспективою ми вважаємо подальше впровадження комп'ютерної програми Origin у навчально-виховний процес ВНЗ.