

例谈作图法在高中化学解题中的应用

吴文中

(越州中学, 浙江绍兴 312075)

摘要:以高中化学中一些常见的定量计算为例, 根据题给条件, 建立相应的函数关系, 利用计算机辅助计算, 用作图的方法解决高中化学中的一些多变量问题。与通常方法相比, 该方法的解题思路更清晰, 说理更有力, 结果更直观。能促进养成良好的学习习惯, 形成严谨的思维品质。

关键词:多变量问题; 计算机辅助; 作图法解题; 化学计算

文章编号: 1005-6629(2015)3-0072-04

中图分类号: G633.8

文献标识码: B

1 问题背景

问题: 稀释 CH_3COONa 溶液过程中, 为什么 CH_3COO^- 的水解平衡往右移动, OH^- 离子浓度却反而减小?

在日常的教学中, 许多教师往往采用“尽管……, 但是因为……, 所以反而……”的方式来解释以上类似问题, 因而有如下如是之说: 稀释时, 尽管 CH_3COO^- 的水解程度增大使 OH^- 离子个数增多, 但是因为加进了水溶液的体积增大了, 所以 OH^- 的浓度反而减小。

以上的回答, 其结论并无错误, 但这种转来转去的解释往往把“糊涂”学生转得更糊涂, 把清醒的学生也转糊涂了: 假如水解的影响比稀释的影响更大呢? 那不就是相反的结论?

学生对上述问题往往理不清思路、无法得出确定的结论, 原因主要就是变量对结果的影响力不同。如何去处理这类多变量的疑难问题? 本文将介绍如何借助计算机辅助计算, 用作图的方法直观解决问题的方法和技巧。

2 定量分析的初步探索

这样算下来, 能发生的反应有 5 个。正确答案是 C。

当然除了本文介绍的几种思维方法外, 创新思维法、类比思维法等思维方法在解题中经常有所运用, 我们在教学中也要注意加以训练。相信只要我们在平时教学中, 有意识地注意思维方法的训练, 就一定能提高学生的解题能力, 进而优化学生的思维品质。

科学的定量思维方法主要是运用数学工具和方法, 对客观事实进行量的描述, 得出数学模型, 按数字描述的条件可以在不同的地方再现^[1]。

对于以上问题, 可假设原 CH_3COONa 溶液为 1L 0.1 mol/L, 加水为 x L 后的 $\text{pH}=y$, 那么, 混合后的体积为 $V=(1+x)\text{L}$ (忽略稀释后溶液总体积的微小变化), 则 CH_3COONa 溶液中一定存在如下关系:

$$c(\text{H}^+) + c(\text{Na}^+) = c(\text{OH}^-) + c(\text{CH}_3\text{COO}^-) \cdots \cdots \text{电荷守恒}$$

$$K = \frac{c(\text{H}^+) \times c(\text{CH}_3\text{COO}^-)}{c(\text{CH}_3\text{COOH})} \cdots \cdots \text{电离平衡}$$

$$c(\text{CH}_3\text{COO}^-) + c(\text{CH}_3\text{COOH}) = \frac{0.1}{V} \cdots \cdots \text{物料守恒}$$

整理得:

$$10^{-y} + \frac{0.1}{1+x} = 10^{-(14-y)} + \frac{0.1K}{(1+x) \times (10^{-y} + K)}, K = 1.76 \times 10^{-5}$$

然后利用数学知识, 得出当 $x > 0$ 时, 以上函数中应变量 y 是增函数还是减函数即可; 或者利用计算机辅助计算^[2]: 打开 Wolfram Mathematica 8 应用平台 (或别的应用软件), 新建一个文件, 输入 ContourPlot[{f₁, f₂}, {x, xmin, xmax}, {y, ymin,

参考文献:

- [1] 王雁 主编. 普通心理学 [M]. 北京: 人民教育出版社, 2003.
- [2] 盛锡铭. 谈学生必须掌握的几种析题方法 [J]. 中学化学教学参考, 2006, (9): 58~59.
- [3] 朱宏卫, 高志鹏. 在化学课堂教学中让学生感受思维之美 [J]. 中学化学教学参考, 2014, (9): 29~30.

y_{max}]], 然后调试运行该程序得到关于上述函数的图像如图 1。

(调试)In[31]=

```
ContourPlot[10^(y-14)+0.1/(1+x)=10^(y-14)+0.1*1.76*10^(-5)/((1+x)((1.76*10^(-5)+10^(y-14))),
```

```
{x, 0, 80}, {y, 7.8, 9.0}]
```

(调试)Out[31]=

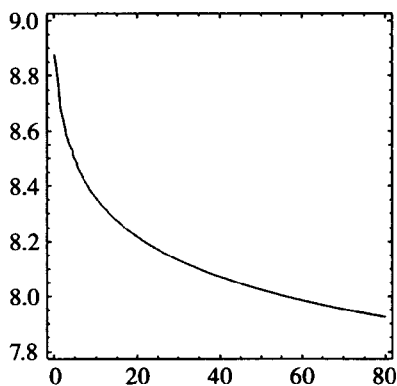


图 1 稀释 0.1 mol/L 的醋酸钠溶液的 pH 变化

上述计算机辅助作图过程虽然多用了点课时, 但可以让学生在解决具体问题中更深刻体会电荷守恒等重要的定量关系, 有助于严谨思维品质的养成。

3 建立函数关系的可行性

上述的函数关系是建立在电荷守恒、电离平衡常数表达式以及物料守恒的基础上, 这些定量关系对于高中学生来说并不陌生。在教师的引导下, 学生完全能理解甚至自行找到自变量 (x) 以及应变量 $f(x)$ 或 y , 并利用定量关系进行消元, 得到解决问题所需要的函数关系。而计算机辅助软件的使用是简单的, 因此, 指导学生从高中化学中的定量关系出发, 建立相应的函数关系, 并通过计算机辅助计算^[3], 最后用作图的方法直观地解决许多类似的疑难问题。

4 计算机辅助计算的优越性

理论上讲, 化学中的问题, 都能找到其一定的等量关系, 但有些问题依靠一个等量关系无法解决, 往往需要建立联立方程组来解决。

例如, 假设 NaHCO_3 溶液的浓度为 0.100 mol/L, 则 $c(\text{Na}^+)$ 为 0.100 mol/L, 则该溶液中存在如下 5 个等量关系:

$$2c(\text{CO}_3^{2-})+c(\text{OH}^-)=c(\text{H}^+)+0.1 \cdots \cdots \text{电荷守恒}$$

$$\frac{c(\text{H}^+) \times c(\text{HCO}_3^-)}{c(\text{H}_2\text{CO}_3)}=K_{a1} \cdots \cdots \text{碳酸一级电离平衡}$$

(其中 $K_{a1}=4.3 \times 10^{-7}$)

$$\frac{c(\text{H}^+) \times c(\text{CO}_3^{2-})}{c(\text{HCO}_3^-)}=K_{a2} \cdots \cdots \text{碳酸二级电离平衡}$$

(其中 $K_{a2}=5.61 \times 10^{-11}$)

$$c(\text{OH}^-) \times c(\text{H}^+)=K_w \cdots \cdots \text{水的电离平衡}$$

(其中 $K_w=1.0 \times 10^{-14}$)

$$c(\text{CO}_3^{2-})+c(\text{HCO}_3^-)+c(\text{H}_2\text{CO}_3)=0.1 \cdots \cdots \text{物料守恒}$$

(碳元素守恒)

设: $x=c(\text{CO}_3^{2-})$, $a=c(\text{H}^+)$, $b=c(\text{OH}^-)$, $y=c(\text{HCO}_3^-)$, $z=c(\text{H}_2\text{CO}_3)$, 并把这 5 个未知数带入上述 5 个等量关系便可建立由 5 个方程联立方程组, 利用 Wolfram Mathematica 8 计算如下:

```
In[1]: Solve[{2x+b+y=a+0.1, (a*y)/z=4.3*10^(-7), a*b=10^(-14), (a*x)/y=5.61*10^(-11), 0.1-x-y=z}, {x, b, y, a, z}]
```

```
Out[1]: {x=0.00111569, b=2.03418*10^(-6), y=0.0977666, a=4.91598*10^(-9), z=0.00111772}
```

求得: $\text{pH}=-\lg c(\text{H}^+)=-\lg 4.9 \times 10^{-9}=8.31$

同理, 假设 NaHCO_3 溶液的浓度为 x mol/L, 溶液的 $\text{pH}=y$, 利用上述等量关系建立函数关系, 同样方法作图, 可说明 NaHCO_3 溶液的在一定浓度范围内, 随着浓度变化, pH 基本不变的事实 (见图 2)。

(调试)In[61]=

```
ContourPlot[{x+10^(y-14)=10^(y-14)+
```

```
(4.3*10^(-7)*10^(y-14)+2*4.3*10^(-7)*5.61*10^(-11))*x/(10^(y-14)+4.3*10^(-7)*10^(y-14)+4.3*10^(-7)*5.61*10^(-11)),
```

```
y=8.32, x=0.0025], {x, 0, 0.02}, {y, 6.9, 8.5}]
```

(调试)Out[61]=

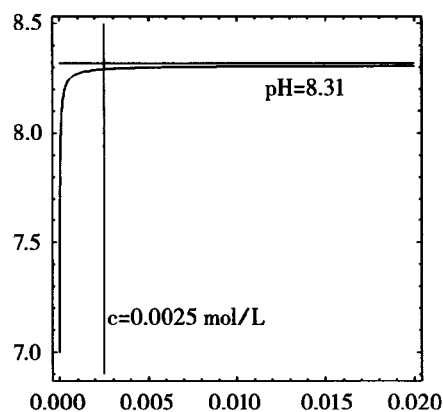


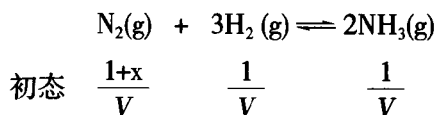
图 2 碳酸氢钠溶液浓度与其 pH 之间的关系

上述这种现象, 教师不管用如何生动通俗的语言去解释都将是徒劳的。但利用定量关系, 建立相应的函数关系, 使用计算机工具作图, 结论就可以一目了然。

5 用作图法直观解决多变量问题的几个典型案例

例1 恒温恒压下,某容积可变的密闭的容器中发生反应, $N_2(g)+3H_2(g) \rightleftharpoons 2NH_3(g)$, 到达平衡时,测得 N_2 、 H_2 、 NH_3 分别为 1mol、1mol、1mol, 体积为 1L, 平衡后,若往容器中通入 N_2 x mol, 问该化学平衡将如何移动?

解: 设加入的氮气的物质的量为 x , 则充入氮气那一瞬间的容器体积为 $V=(3+x)/3$



则浓度商 $Q_c = \frac{(1+x)^2}{9+9x}$, 计算机辅助作图图像如图

3 (其中 K 为常数, 等于 1)

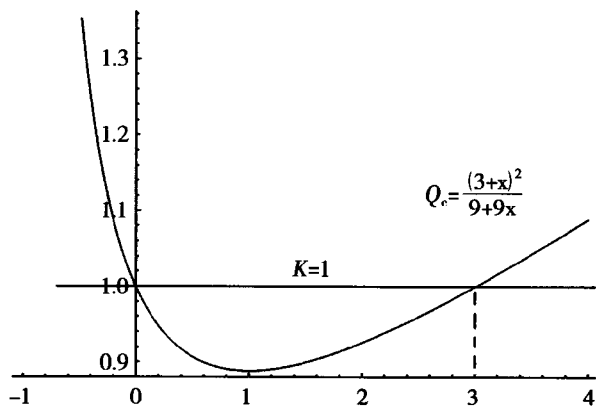


图3 Q_c 的变化及与常数 K 的关系

从图3中看出, 当 $x=3$ 或 $x=0$ 时, $Q_c=1$, 即与直线 $K=1$ 有交点, 得出以下结论:

当 $x > 3$ 时, $Q_c > K$, 平衡逆反应方向移动

当 $0 < x < 3$ 时, $Q_c < K$, 平衡正反应方向移动

当 $x=0$ 或 $x=3$ 时, $Q_c=K$, 平衡不移动

当 $-1 < x < 0$, $Q_c > K$, 平衡逆反应方向移动 (相当于取走氮气)

例2 恒温恒压下, 在可变的密闭容器中, 充入 2mol 二氧化硫和 1mol 氧气, 达到平衡时, 体积为 1L, 二氧化硫的转化率为 50%。首先计算得常数 K 为 2, 设通入 O_2 x mol 时, 则存在如下函数关系:

$$Q_c = \frac{2.5+x}{1.25+2.5x}$$

计算机辅助作图如图4, 可以很直观地说明:

$x > 0$ 时, 函数是单调递减的, $Q_c < 2$, 即在以上情

况下, 只要加氧气, 平衡一定向正反应方向移动, 而 $-0.5 < x < 0$ 时 (移走氧气), $Q_c > 2$, 平衡往逆反应方向移动。

ContourPlot[$Q_c = \frac{2.5+x}{1.25+2.5x}$, $Q_c=2$, $x=0$], $\{x, -0.5, 1\}$, $\{Q_c, 0, 6\}$

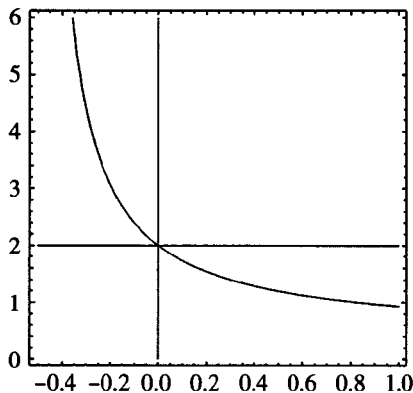


图4 Q_c 的变化及与常数 K 的关系

例3 某化学科研小组研究在其他条件不变时 (恒温恒压), 改变某一条件对 $N_2(g)+3H_2(g) \rightleftharpoons 2NH_3(g)$ 化学平衡状态的影响, 得到如下图所示的变化规律 (图5中 T 表示温度, n 表示物质的量), 根据如图可得出的判断结论正确的是 ()

- A. 反应速率 $a > b > c$
- B. 达到平衡时 A_2 的转化率大小为: $b > a > c$
- C. 若 $T_2 > T_1$, 则正反应一定是放热反应
- D. b 点时, 平衡体系中 N、H 原子数之比 1:3

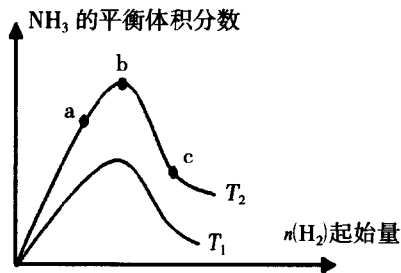
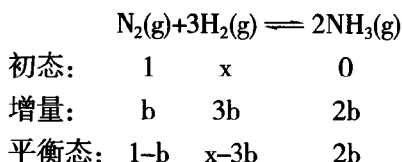


图5 H_2 的物质质量与 $NH_3\%$ 的关系

参考答案为 D。

现在利用本文提到的方法, 来精确回答: 为什么 D 选项的参考答案是正确的。

设合成氨反应在 T 温度下的平衡常数为 K , 加入 $n(N_2)=1\text{mol}$, $n(H_2)=x\text{mol}$, 生成物 NH_3 的平衡体积分数为 y ($NH_3\%$), 平衡时容器的体积为 V L。则:



$$\text{依据题意得: } K = \frac{\left(\frac{2b}{V}\right)^2}{\frac{1-b}{V} \times \left(\frac{x-3b}{V}\right)^3}, y = \frac{2b}{1-2b+x},$$

$$\text{则 } b = \frac{xy+y}{1+y}$$

消元得函数:

$$\frac{V \times y^2(1+x)^2}{(1+y)^2} = K \left(1 - \frac{y(1+x)}{2(1+y)}\right) \times \left(x - \frac{1.5y(1+x)}{(1+y)}\right)^3 \quad \text{①}$$

若假设温度不变、压强(恒压)不变,平衡时

容器的体积为 $(1+x - \frac{xy+y}{1+y})$, 函数①通过变形, 得函数②

$$\begin{aligned} \left(1+x - \frac{xy+y}{1+y}\right)^2 \times \frac{y^2(1+x)^2}{(1+y)^2} &= K \left[1 - \frac{y(1+x)}{2(1+y)}\right] \times \\ &\left(x - \frac{1.5y(1+x)}{(1+y)}\right)^3 \quad \text{②} \end{aligned}$$

处理 1: 令 $K=10$, 利用 Wolfram Mathematica 8 软件对函数②作如图 6。

$$\text{ContourPlot}\left[\left(1 - \frac{xy+y}{1+y}\right)^2 \times \frac{y^2(1+x)^2}{(1+y)^2} = 10 \left(1 - \frac{y(1+x)}{2(1+y)}\right) \left(x - \frac{1.5y(1+x)}{(1+y)}\right)^3, \{x, 0, 15\}, \{y, 0, 0.45\}\right]$$

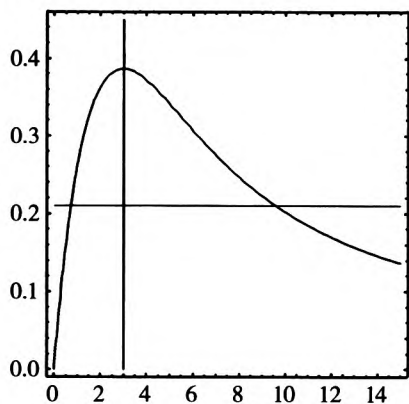


图 6 恒压条件下, $n(\text{H}_2)$ 与 $\text{NH}_3\%$ 的关系

显然, 当体系压强不变时, 当投入的 H_2 为 3mol 时, 体系中 NH_3 的体积分数有最大值, 此时, 投料比恰好为合成氨中反应物的化学计量系数比。

处理 2: 若把函数①平衡常数 K 作为变量, 则

$$x = \frac{n(\text{N}_2)}{n(\text{H}_2)}$$

就是 $n(\text{N}_2)$ 和 $n(\text{H}_2)$ 的投料比, y 为体系中

NH_3 的体积分数, 则可以得到一个三个变量的三维图像。

然后利用 Wolfram Mathematica 8 中的 Contour-Plot3D 的三维作图语句, 作如图 7。

$$\text{ContourPlot}\left[\left(1 - \frac{xy+y}{1+y}\right)^2 \times \frac{y^2(1+x)^2}{(1+y)^2} = a \left(1 - \frac{y(1+x)}{2(1+y)}\right) \left(x - \frac{1.5y(1+x)}{(1+y)}\right)^3, \{x, 0, 16\}, \{y, 0, 0.4\}, \{a, 0, 1\}\right]$$

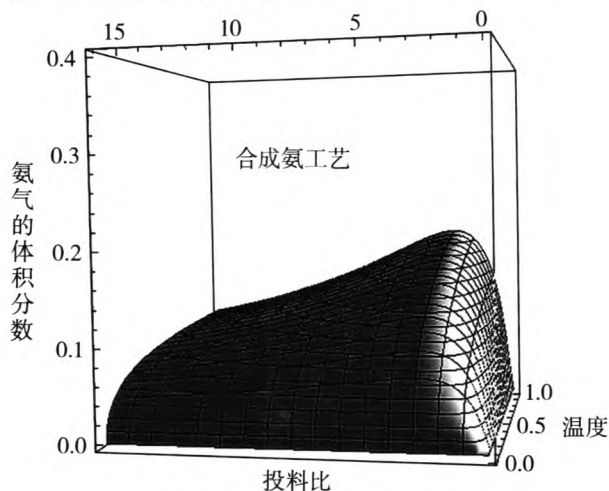


图 7 温度、压强、氮气和氢气的投料比与氮气体积分数的多维关系

该图直观显示了一定压强下、温度和投料比对合成氨产物的不同影响, 事实上, 工业上也就是采用投料比 1:2.8 来完成的, 之所以不采用 1:3, 原因是后续的合成氨工艺中, 还需要充入 H_2 (冷激气), 用来降温并提高转化率。

6 结束语

化学过程往往受制于多变量, 这些变量的影响力大多不是线性的, 单用语言描述很难解决问题。在这种情况下, 教师可以和学生一起研究、讨论, 指导建立函数关系, 通过计算机辅助计算、作图等手段直观地去解决一些疑难问题^[3]。在课程改革提倡学生扬长发展的今天, 这一教学思路和方法有助于开辟出一片化学教学的新天地, 引导一批学生科学研习化学、正确理解化学, 为他们未来投身于化学事业积累科学的素养与奠定良好的基础。

作为教师, 把一些多变量化学问题亲自验证一遍, 彻底理解其中各因素的不同影响是必要的。教师严密思考和定量分析的习惯终将影响学生的学习习惯和思维品质, 值得努力去尝试和提高。

参考文献:

- [1] 马长华, 曾元儿主编, 分析化学 [M]. 北京: 科学出版社, 2006, 1(1).
- [2] 胡国栋. 函数图像在解析平衡移动问题中的应用 [J]. 化学教学, 2014, (8): 78~79.
- [3] 林树城. 计算机在高中化学教学中的应用 [J]. 中学课程辅导(教学研究), 2014, (4).