

Пашкевич Светлана Витальевна

Муниципальное автономное общеобразовательное учреждение

Лицей №130

город Екатеринбург

МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК ИНСТРУМЕНТ НАУЧНОГО ПОИСКА РЕШЕНИЯ ОТКРЫТОЙ ХИМИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ

Освоение химического предметного содержания химии предполагает обязательное решение задач. Принципиально разных типов химических задач в школьном курсе сравнительно немного, они четко классифицированы по содержанию и способам решения [1], поэтому научить школьников решать стандартные задачи не представляется проблемным.

Однако, задачи открытого типа составляются таким образом, что невозможно найти решение напрямую в источниках, нужно изменить, улучшить что-то уже существующее или даже предложить нечто принципиально новое. Процесс поиска решения задачи формирует умение выдвигать гипотезы и требует от школьников навыков работы с большими объемами информации, способности выйти за пределы предметной области и креативного подхода к решению задачи [2]. Этому научить сложнее, но дать школьнику инструмент (прием) научного поиска для нахождения решения открытой задачи нужно и полезно.

Одним из таких инструментов научного поиска решения открытых задач является моделирование. Известно, что решение задачи человеком есть процесс ее переформулирования. При этом в процессе мышления объект включается во все новые связи и в силу этого выступает во все новых качествах [2]. Главным средством переформулирования является моделирование. Реальные объекты и процессы столь многогранны, что лучшим способом их изучения является

построение и исследование модели, отображающей лишь какую-то грань реальности и потому более простую, чем эта реальность. Прием моделирования заключается в том, что для исследования какого-либо объекта (в нашем случае это: молекулы, атомы, коллоидные частицы, кристаллы, растворы и т.п.) выбирают другой объект, в каком-то отношении подобный тому, который исследуют. Выбранный объект изучают, с его помощью решают задачу, а затем результат переносят на первоначальный объект. Таким образом, модель – это идеализированное представление объекта, которое отражает некоторые существенные его свойства и пренебрегает всеми остальными. Правильность модели подтверждается сравнением с экспериментальными данными. При этом важно выбрать главное в модели и пренебречь несущественным, то есть построить модель с разумными упрощениями (допущениями).

Рассмотрим пример решения открытой задачи с использованием инструмента моделирования. Условие задачи: радиус наночастицы золота, используемой в качестве гетерогенного катализатора, равен 1,5 нм, а радиус атома – 0,15 нм. Оценить по порядку величины, сколько атомов входит в состав наночастицы, и какая их доля находится на поверхности [3].

Первое допущение в модели решения задачи: атомы и наночастицы имеют шарообразную форму. При такой формулировке наночастица золота представляет собой большой шар, внутри заполненный маленькими шарами – атомами золота. Поверхность наночастицы проходит по внешним точкам атомов-шаров. Объем шара равен: $V_{\text{шара}} = 4/3 \pi r^3$.

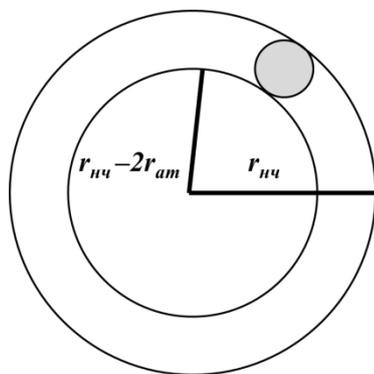


Рис. 1. Модель строения наночастицы

Второе допущение: поскольку предлагается определить число атомов по порядку величины, то можно пренебречь свободным объемом между атомами в наночастице и считать, что шары-атомы заполняют всё пространство внутри наночастицы (при этом ошибка составит около 20% [3]). Сделанные допущения позволяют рассчитать общее число N атомов золота в составе наночастицы, которое равно отношению объема наночастицы $V_{нч}$ к объему атома $V_{ат}$:

$$N = V_{нч} / V_{ат} = 4/3 \pi r_{нч}^3 / 4/3 \pi r_{ат}^3 = (1,5 / 0,15)^3 = 1000$$

Чтобы вычислить долю атомов золота на поверхности (для оценки каталитических возможностей наночастиц), нужно найти объем поверхностного слоя $V_{пов}$ и разделить его на объем наночастицы $V_{нч}$. Объем поверхностного слоя равен разности между объемами самой наночастицы и «внутреннего» шара, радиус которого меньше радиуса наночастицы на величину диаметра атома. Доля атомов золота на поверхности:

$$\begin{aligned} V_{пов} &= 4/3 \pi r_{нч}^3 - 4/3 \pi (r_{нч} - 2r_{ат})^3 & V_{нч} &= 4/3 \pi r_{нч}^3 \\ V_{пов} / V_{нч} &= 4/3 \pi r_{нч}^3 - 4/3 \pi (r_{нч} - 2r_{ат})^3 / 4/3 \pi r_{нч}^3 = 1 - (1 - 2r_{ат} / r_{нч})^3 = \\ &= 1 - (1 - 2 \cdot 0,15 / 1,5)^3 = 0,49 \text{ или } 49\% \end{aligned}$$

Таким образом, число атомов в составе наночастицы золота – 1000, их доля на поверхности – 49%.

Некоторые химические задачи для школьников, которые решаются с помощью инструмента моделирования, приведены в Приложении 1.

Моделирование – один из нескольких известных инструментов научного поиска решения открытых задач. Подобные инструменты не являются универсальными: подходят для решения одних задач и непригодны для других, требующих иных, может быть, еще неизвестных приемов. Вот потому в науке всегда остается место творчеству.

Ссылки на источники:

1. Еремин В. В., Дроздов А. А. Методика решения задач в школьном курсе химии. Материалы дистанционного курса повышения квалификации. Лекции 1-4. М.: Педагогический университет «Первое сентября», 2012. – 80 с.

2. Гин А., Баркан М. Фактор успеха: учим нестандартно мыслить. М.: ВИТА-ПРЕСС, 2016. – 80 с.

3. Еремин В. В. Нанохимия и нанотехнология. Материалы дистанционного курса повышения квалификации. Лекции 5-8. М.: Педагогический университет «Первое сентября», 2009. – 96 с.