

*Останчук Віта,
студентка III курсу, спеціальність «Математика та інформатика».
Науковий керівник – Королук О. М.,
кандидат педагогічних наук, доцент*

МАТЕМАТИЧНІ МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ХІМІЧНИХ ЗАДАЧ

У 1741 р. М. В. Ломоносов, в своєму творі «Елементи математичної хімії», наголошував: «якщо математики із зіставлення небагатьох ліній виводять дуже багато істин, то і для хіміків я не бачу ніякої іншої причини, внаслідок якої вони не могли б вивести більше закономірностей із такої великої кількості наявних дослідів, окрім незнання математики» [1]. Сучасна хімія перестала бути наукою, що лише описує спостереження над перетворенням речовин. Після того, як геніальний Ломоносов увів в хімічну практику терези, знання математики стало необхідним для кожного хіміка.

Математичні рівняння і методи, які використовуються в хімії, повинні враховувати не абстрактні величини, а конкретні властивості атомів і молекул, які підкоряються природним обмеженням. Іноді ці обмеження бувають досить жорсткими і призводять до різкого звуження числа можливих розв'язків математичних рівнянь. Іншими словами, математичні рівняння, які використовуються в хімії, а також їх розв'язки повинні мати хімічний зміст.

Для прикладу [3, с. 15]. **Число атомів у молекулах повинне бути додатним цілим числом.**

Розглянемо рівняння: $12x + y = 16$. Для математика воно задає пряму на площині. Це рівняння задовольняє багато розв'язків. У хімії вираз $12x + y$ описує молекулярну масу вуглеводню C_xH_y (12 – атомна маса вуглецю, 1 – водню). А молекулярну масу 16 має єдиний вуглеводень – метан CH_4 , тому єдиний розв'язок даного рівняння має хімічний сенс: $x = 1, y = 4$.

Одним із ключових понять хімії є валентність, тобто число хімічних зв'язків, якими даний атом з'єднаний з іншими. **Валентність майже завжди є позитивним цілим числом.** Це також накладає обмеження на розв'язування хімічних задач.

Наприклад, знайдемо максимально можливе число атомів водню у вуглеводні, що містить n атомів вуглецю.

Розв'яжемо це завдання за допомогою математичних міркувань.

Загальне число валентностей вуглецю в молекулі $C_n H_x$ дорівнює $4n$, оскільки кожен атом вуглецю чотирьохвалентний. Що входить в це число? Атоми вуглецю пов'язані один з одним і з атомами водню. Мінімально можливе число зв'язків $C-C$ дорівнює $(n - 1)$ – воно необхідне, щоб вуглецевий ланцюг не мав розривів. У кожному такому зв'язку бере участь два атоми вуглецю, тому число валентностей, що витрачаються на зв'язки $C-$

C, дорівнює 2 (N-1). Решта $4n - 2 (N-1) = 2n + 2$ валентностей витрачаються на зв'язки C-H. Водень одновалентний, тому число його атомів дорівнює числу зв'язків. Отже,

$$C-H: X = 2n + 2..$$

Багато фізичних величин (маса, об'єм, концентрація, швидкість реакції та ін.), які використовуються для опису хімічних речовин і реакцій, можуть приймати тільки невід'ємні значення.

Хімікам часто доводиться вирішувати завдання на розрахунок складу суміші. У них виникають поліноміальні рівняння щодо частки перетворення вихідних речовин в продукти. Згідно з основною теоремою алгебри поліном n -го степеня має точно n коренів, серед яких можуть бути і комплексні. Однак у всіх рівняннях, що виникають в хімії, тільки один корінь має хімічний сенс.

Наприклад. Суміш азоту і водню в співвідношенні 1:3 нагріли до встановлення рівноваги. Розрахуємо, яка частка вихідних речовин перетворилася в аміак, якщо константа рівноваги при кінцевій температурі суміші і тиску 100 атм дорівнює $5 \cdot 10^{-6}$.



Складемо таблицю, в якій вказані кількості речовин до реакції, що вступили в реакцію і після реакції. Частку прореагувавшего азоту позначимо x .

Кількості речовин, моль	N_2	H_2	NH_3	Всього
Початковий склад	1	3	0	
Вступило в реакцію	x	$3x$	$2x$	
Кінцевий (рівноважний) склад	$1 - x$	$3 - 3x$	$2x$	$4 - 2x$

Невідоме x можна визначити з рівняння, що виражає константу рівноваги

через тиск, що знаходиться в суміші газів:

$$K = \frac{P_{NH_3}^2}{P_{N_2} P_{H_2}^3} = \frac{\left(\frac{2x}{4-2x} P\right)^2}{\frac{1-x}{4-2x} P \cdot \left(\frac{3-3x}{4-2x} P\right)^3} = 5.0 \cdot 10^{-4}$$

При $P = 100$ атм дане рівняння має чотири дійсних кореня:

$$x_1 = -0,187, x_2 = 0,120, x_3 = 1,880, x_4 = 2,187,$$

з яких тільки один (x_2) задовольняє умові позитивності концентрацій. Отже, вихід реакції, тобто частка прореагувавших речовин, становить 12 %.

У хімії немає ірраціональних чисел

Хімія – наука експериментальна, вона оперує результатами вимірювань, які виражаються або цілими числами, або дробовими, але отриманими з певною точністю, як правило, не більше 4 значущих цифр. Наприклад, показник заломлення речовини може дорівнювати 1,414, але його не записують у вигляді $2^{1/2}$. Тому числа π і e , які іноді виникають у хімічних розрахунках, округлюють до 3,14 і 2,72, відповідно.

У хімії немає поняття «нескінченність»

Число атомів у частині Всесвіту, за якою ми спостерігаємо дуже велике. Які ж найбільші числа використовують хіміки? Так, число атомів у Всесвіті оцінюється як 10^{80} , на Землі – 10^{50} , а в людському організмі їх приблизно 10^{27} .

Для порівняння, математик Харді стверджував, що найбільше число, яке коли-небудь використовувалося в математиці дорівнює: $10^{10^{10^{34}}}$ [3].

Аналогічно, в хімії немає і нескінченно малих величин. Кожна величина має своє найменше значення, якій властивий хімічний сенс. Наприклад, час у хімії обмежено знизу значенням 10^{-14} с, яке характеризує найшвидшу реакцію серед усіх можливих: $H + H = H_2$.

Нижня межа для відстаней – це 10^{-10} м, тобто характерний розмір атомів. Менші значення з точки зору хімії вже не мають сенсу.

Взаємодія хіміків і математиків не обмежується лише розв'язуванням хімічних задач. Є приклади, коли розвиток хімічного знання приводить до появи нових задач математики. Так, математики й досі працюють над доведенням другого закону термодинаміки – одного з основних законів хімії, справедливості якого для самих хіміків очевидно впливає з усіх відомих досі експериментальних даних про хімічні речовини і хімічні реакції.

Історія науки говорить про те, що на кордонах різних областей завдяки знанням можуть відбуватися дуже цікаві події. І хоча хіміки та математики мислять зовсім по-різному, ті випадки, коли їм вдається взаємодіяти, призводять до появи красивих і нетривіальних результатів і сприяють збагаченню обох наук.

Література

1. Воронков М. Г. Про хімію з посмішкою, або основи пегніохімії / М. Г. Воронков. – Л. : Наука, 1999. – 213 с.
2. Кучерук В. С. Хімія і життя – ХХІ століття / Кучерук В. С. // Хімія. – 1997. – № 2.
3. Лабий Ю. М. Розв'язування задач з хімії за допомогою рівнянь і нерівностей / Ю. М. Лабий. – К. : [Освіта](#), 1987 р. – 304 с.