

ОБ ОБЛАСТИ ДОПУСТИМЫХ ЗНАЧЕНИЙ В МАТЕМАТИКЕ, ЗАДАВАЕМОЙ ХИМИЕЙ

М.В. Пичугина, студент гр. 3-17290, Л.Г. Деменкова, ст. преподаватель

*Юргинский технологический институт (филиал) Национального исследовательского
Томского политехнического университета*

652055, Кемеровская обл., г. Юрга, ул. Ленинградская, 26, тел. 8(384-51) 6-44-32

«В любой науке столько истины, сколько в ней математики».

И. Кант

Химия очень широко использует в своих целях достижения других наук, в первую очередь, физики и математики. Выражение «математическая химия» прочно вошло в лексикон химиков. Многие статьи в серьезных химических журналах не содержат ни одной химической формулы, зато изобилуют математическими уравнениями.

Однако, изучаемые химией объекты накладывают определённые ограничения применение математических методов для решения химических задач. Как-то раз Гаусс спорил с Авогадро (1776-1856) о сущности научных законов. Гаусс утверждал, что законы существуют только в математике, а потому химия почитаться за науку не может. В ответ Авогадро сжег 2 л водорода в литре кислорода и, получив два литра водяного пара, торжествуя воскликнул: «Вот видите! Если химия захочет, то два плюс один окажутся равны двум. А что скажет на это ваша математика?» [1]. Математические уравнения и методы, используемые в химии, имеют дело не с абстрактными величинами, а с конкретными свойствами атомов и молекул, которые подчиняются естественным природным ограничениям. Иногда эти ограничения бывают довольно жесткими и приводят к резкому сужению числа возможных решений математических уравнений. Говоря другим языком, математические уравнения, применяемые в химии, должны иметь химический смысл. Рассмотрим конкретные примеры, помогающие понять это утверждение.

1) Число атомов в молекулах должно быть положительным целым числом.

Рассмотрим уравнение $12x + y = 16$. Для математика это уравнение описывает прямую линию на плоскости. Оно имеет бесконечно много решений, в том числе и целочисленных. А для химика выражение $12x + y$ описывает молекулярную массу углеводорода C_xH_y (12 – атомная масса углерода, 1 – водорода). Молекулярную массу 16 имеет единственный углеводород – метан, CH_4 , поэтому только одно решение данного уравнения обладает химическим смыслом: $x = 1, y = 4$.

2) Одно из ключевых понятий химии – валентность, то есть число химических связей, которыми данный атом соединен с другими. **Валентность в общей химии, изучаемой студентами первого курса, является положительным целым числом.** Например, углерод в органических соединениях всегда четырехвалентен. Это накладывает некоторые ограничения на химические формулы. Например, число атомов водорода во всех углеводородах четно. Кроме того, оно всегда имеет верхнюю границу.

Найдем максимально возможное число атомов водорода в углеводороде, содержащем n атомов углерода. Любой химик, будь то школьник, студент или научный сотрудник, сразу скажет, что это число равно $2n + 2$. Оно соответствует предельным углеводородам алканам. Решим эту задачу с помощью математических рассуждений.

1 способ. Используем метод математической индукции. При $n = 1$ существует только один углеводород – CH_4 . Число атомов водорода равно $2 \cdot 1 + 2 = 4$. Формула верна. Далее, пусть углеводород с n атомами углерода содержит максимально $2n + 2$ атомов водорода. Увеличим число атомов углерода на 1. Новый атом углерода можно добавить к молекуле C_nH_{2n+2} только вместо атома водорода, при этом из четырех валентностей нового атома одна будет занята связью C–C, а три другие – связями C–H. Таким образом, число атомов водорода в новом углеводороде равно: $2n + 2 - 1 + 3 = 2(n+1) + 2$. Доказательство закончено.

2 способ. Общее число валентностей углерода в молекуле C_nH_x равно $4n$, так как каждый атом углерода четырехвалентен. Что входит это число? Атомы углерода связаны друг с другом и с атомами водорода. Минимально возможное число связей C–C равно $(n-1)$ – оно необходимо, чтобы углеродный скелет был связным. В каждой такой связи участвует два атома углерода, поэтому число валентностей, расходуемых на связи C–C, равно $2(n-1)$. Остальные $4n - 2(n-1) = 2n + 2$ валентностей расходуются на связи C–H. Водород одновалентен, поэтому число его атомов равно числу связей C–H: $x = 2n + 2$.

Благодаря ограничениям, накладываемым валентностями атомов, часто по молекулярной массе можно однозначно установить формулу вещества. Например, молекулярной массе 78 формально

соответствуют 6 формул углеводородов: C_2H_6 , C_2H_4 , C_3H_4 , C_4H_6 , C_5H_8 , C_6H_6 . Из них только последняя имеет химический смысл, так как во всех остальных число атомов водорода заведомо превышает то, которое возможно при четырехвалентном углероде.

3) **Многие физические величины**, используемые для описания химических веществ и реакций, **могут принимать только неотрицательные значения**: масса, объем, концентрация, скорость реакции и др.

Химикам часто приходится решать задачи на расчет состава равновесной смеси. В них возникают полиномиальные уравнения относительно доли превращения исходных веществ в продукты. Согласно основной теореме алгебры полином n -ой степени имеет ровно n корней, среди которых могут быть и комплексные. Однако во всех уравнениях, возникающих в химии, всегда только один корень имеет химический смысл.

Рассмотрим такой пример. Смесь азота и водорода в соотношении 1:3 нагрели до установления равновесия. Рассчитаем, какая доля исходных веществ превратилась в аммиак, если константа равновесия при конечной температуре смеси и давлении 100 атм равна $5 \cdot 10^{-6}$.

Запишем уравнение реакции: $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 = 2\text{NH}_3$.

Составим таблицу, в которой указаны количества веществ до реакции, вступивших в реакцию и после реакции. Долю прореагировавшего азота обозначим x .

Количества веществ (моль)	N_2	H_2	NH_3	Всего
Исходный состав	1	3	0	
Вступило в реакцию	x	$3x$	$2x$	
Конечный (равновесный) состав	$1 - x$	$3 - 3x$	$2x$	$4 - 2x$

Неизвестное x можно определить из уравнения, выражающего константу равновесия через давления находящихся в смеси газов:

$$K = \frac{P_{\text{NH}_3}^2}{P_{\text{N}_2} P_{\text{H}_2}^3} = \frac{\left(\frac{2x}{4-2x} P\right)^2}{\frac{1-x}{4-2x} P \cdot \left(\frac{3-3x}{4-2x} P\right)^3} = 5.0 \cdot 10^{-6}$$

При $P = 100$ атм данное уравнение 4-й степени относительно x имеет 4 действительных корня: $x_1 = -0,187$; $x_2 = 0,120$; $x_3 = 1,880$; $x_4 = 2,187$; из которых только один (x_2) удовлетворяет условию положительности концентраций. Такой результат абсолютно типичен для расчетов химических равновесий: каким бы сложным ни было уравнение относительно степени превращения реагентов в продукты и сколько бы корней оно ни имело, всегда только один корень будет иметь химический смысл, то есть приводить к положительным равновесным концентрациям веществ. В данном примере выход реакции, то есть доля прореагировавших веществ, составил 12%.

4) **В химии нет иррациональных чисел**. Иррациональное число содержит бесконечное число знаков в десятичной записи. Химия – наука экспериментальная, она оперирует с результатами измерений, которые выражаются или целыми числами, или дробными, но полученными с конечной точностью, как правило не более 4 значащих цифр. Например, показатель преломления вещества может быть равен 1,414, но не бывает равным $2^{1/2}$. Поэтому числа π и e , часто возникающие в химических расчетах, обычно округляют до 3,14 и 2,72, соответственно.

5) **В химии нет понятия «бесконечность»**. Число атомов в наблюдаемой части Вселенной очень велико, но конечно, поэтому в природе нет бесконечно больших величин. Каковы же самые большие числа, используемые химиками? Число атомов во Вселенной оценивается как 10^{80} , на Земле – 10^{50} атомов, в человеческом организме их примерно 10^{27} . В статистической термодинамике возникает число способов перестановки одинаковых молекул в порции жидкого вещества, которое равно $N!$, где $N \sim 10^{23}$. Для оценки этого числа используем формулу Стирлинга:

$$\ln(10^{23}!) \approx 10^{23} \ln(10^{23}) - 10^{23} \approx 5 \cdot 10^{24}$$

$$10^{23}! \approx \exp(5 \cdot 10^{24}) \approx 10^{2 \cdot 10^{24}}$$

Для сравнения, математик Харди утверждал, что самое большое число, которое когда-либо служило какой-либо цели в математике, равно $10^{10^{34}}$ [3].

Аналогично, в химии нет и бесконечно малых величин. Каждая физическая величина – время, энергия, масса, расстояние – имеет конечное наименьшее значение, которому присущ химический смысл. Например, время в химии ограничено снизу значением 10^{-14} с, которое характеризует самую быструю реакцию среди всех возможных: $H + H = H_2$. Нижняя граница для расстояний – это 10^{-10} м, то есть характерный размер атомов. Меньшие значения с точки зрения химии уже не имеют смысла.

Раз нет бесконечно малых величин, то, строго говоря, теряет смысл понятие «производной в точке», которое равно отношению бесконечно малых приращений функции и аргумента. Тем не менее, в химии производная играет очень большую роль: производные по температуре, давлению и объему составляют основу математического аппарата химической термодинамики, а производные по времени – химической кинетики. Это связано с тем, что при той точности измерений, которая принята в химии, точное значение производной практически равно отношению конечных приращений:

$$f'(t) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\Delta f}{\Delta t} \approx \frac{\Delta f}{\Delta t}.$$

Мы рассмотрели всего несколько примеров, показывающих, как математика используется в химии. Они дают определенное, хотя, конечно, неполное представление о задачах, решаемых химиками с помощью математики, и ограничениях, которые химия накладывает на применяемую в ней математику. Взаимодействие химиков и математиков не ограничивается решением только химических задач. Иногда и в химии возникают абстрактные задачи, которые приводят даже к появлению новых областей математики. Так, математики до сих пор работают над доказательством второго закона термодинамики – одного из основных законов химии, справедливость которого для самих химиков очевидно вытекает из всех известных до сих пор экспериментальных данных о химических веществах и химических реакциях.

История науки говорит о том, что на границах различных областей знания могут происходить очень интересные события. И хотя химики и математики мыслят совсем по-разному, те случаи, когда им удается взаимодействовать, приводят к появлению красивых и нетривиальных результатов и способствуют обогащению обеих наук.

Литература.

1. М.Г.Воронков, А.Ю.Рулев. О химии с улыбкой, или основы пегниохимии. – СПб: Наука, 1999.
2. Химия и жизнь-XXI век. 1997, № 2, с. 5.
3. С.Сингх. Великая теорема Ферма. М.: МЦНМО, 2000.
4. М.М.Левицкий. О химии серьезно и с улыбкой. – М.: Академкнига, 2005.

ДВОЙНОЕ ОТНОШЕНИЕ И ГАРМОНИЧЕСКИЕ ИНТЕРВАЛЫ

*А.П. Степанов, ст. преподаватель, Ю.В. Сотокина, инж. А.Г. Филимоненко, студент Юргинский технологический институт (филиал) Национального исследовательского Томского политехнического университета
652055, Кемеровская обл., г. Юрга, ул. Ленинградская, 26
E-mail: apsuti@rambler.ru*

Рассмотрим четвёрку точек, расположенных на одной прямой особым образом. Пусть точка C принадлежит отрезку AB . Она делит его в отношении AC/CB . Найдём на прямой AB точку D такую, что она делит этот отрезок в таком же отношении, но снаружи (рис. 1), то есть

$$\frac{AD}{DB} = \frac{AC}{CB}. \quad (1)$$

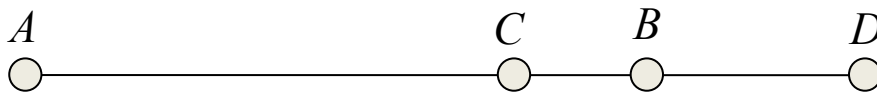


Рис. 1. Гармоническая четверка точек