

Из нашего исследования вытекает следующий вывод: эмоциональный интеллект играет важную роль в успешности профессиональной деятельности, поэтому целенаправленное формирование различных компонентов эмоционального интеллекта студентов представляется важной задачей профессиональной подготовки.

Литература.

1. Котова И.Б., Канаркевич О.С. Общая психология: Учебное пособие. – М.: Издательско-торговая корпорация «Дашков и К»; Ростов н/Д: Академцентр, 2009.
2. Гоулмен Д. Эмоциональная компетентность / Психология мотиваций и эмоций. / под ред. Л. Б. Гиппенрейтер, М.В. Фаликман. – М.: ЧеРо, 2002.
3. Робертс Р. Д., Метьюс Дж., Зайднер М., Люсин Д. В. Эмоциональный интеллект: проблемы теории, измерения и применения на практике. Журнал высшей школы экономики, 2004, Т. 1. № 4.
4. Деревянко С. П. Роль эмоционального интеллекта в процессе социально-психологической адаптации студентов // Инновационные образовательные технологии, 2007.

ПРИМЕНЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ РАСЧЁТОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ЗАДАЧ

*М.В. Пичугина, студент гр. 317290, Л.Г. Деменкова, ст. преподаватель
Юргинский технологический институт (филиал) Национального исследовательского
Томского политехнического университета
652055, Кемеровская обл., г. Юрга, ул. Ленинградская, 26, тел. 8-913-303-04-70
E-mail: lar-dem@mail.ru*

Современная химия находится в самом тесном взаимодействии с другими областями науки, причём самые впечатляющие открытия в наши дни происходят именно на стыке различных дисциплин – химии, физики, математики, биологии. Химия исследует вещества, их свойства и превращения. Многие свойства веществ выражаются с помощью чисел, которые являются математическими объектами. Бесспорно, химия немислима без математики, которая является полезным инструментом для решения многих химических задач. Приложения математики в химии обширны и разнообразны. Трудно найти какой-либо раздел математики, который совсем не используется в химии. Широко применяются некоторые приемы устного счета и оценок, решение алгебраических уравнений, элементы планиметрии и стереометрии, простейшие понятия математического анализа – производная и интеграл, исследование функций и построение графиков, некоторые понятия комбинаторики. В данной статье мы ограничимся рассмотрением оценки приближительных величин, комбинаторного анализа и геометрическими вычислениями.

Химические задачи, связанные с использованием расчетов, можно разделить на две группы: с точным и приближенным ответом. К первой группе относятся задачи, связанные с перечислением, например: «Сколько различных солей может быть получено при взаимодействии ортофосфорной кислоты и гидроксида натрия?». Приближенный ответ имеют все задачи, связанные с измерениями. Это связано с тем, что любые измерения, которые человек проводит в окружающем мире, имеют конечную точность, в большинстве обычных экспериментов весьма небольшую. Задач с приближенным ответом в химии большинство. К ним относятся все стехиометрические вычисления, связанные с массой или объемом вещества, термодинамические расчеты тепловых эффектов, определение скорости реакции, расчет энергий активации или условий проведения реакции.

Во многих случаях даже приближенный ответ нет необходимости получать с высокой точностью, достаточно иметь лишь некоторое представление о нем с разумной точностью, т.е. оценить порядок величины. Кстати, в подобных расчетах совершенно необязательно пользоваться калькулятором, ведь точное значение числа нас не интересует, поэтому при оценках можно делать довольно грубые приближения (таблица 1).

Таблица 1

Приближенные значения некоторых чисел, используемые
при химических расчетах

Число	π	e	$\sqrt{2}$	$\ln 2$	$\ln 3$	$\ln 10$	$\lg 2$
Приближенное значение	3,14	2,7	1,4	0,7	1,1	2,3	0,3

При расчете оценочных значений при решении химических задач зачастую надо очень хорошо представлять элементарные свойства функции 10^x , например

$$1) 10^x \cdot 10^y = 10^{x+y}; 2) (10^x)^y = 10^{xy}; 3) 10^0 = 1$$

и обратной ей функции – десятичного логарифма, $\lg(x)$, например

$$1) \lg(xy) = \lg(x) + \lg(y); 2) \lg 1 = 0; 3) \lg(10x) = x.$$

Для оценки числа a в представлении $a \cdot 10^x$ используют округление до ближайших целых чисел. В произведении двух чисел одно из них округляют с увеличением, другое – с уменьшением, например $292 \cdot 607 \approx 300 \cdot 600 = 1,8 \cdot 10^5$.

Кроме приведенных выше приемов для физико-химических оценок надо представлять себе по порядку величины, обязательно вместе с размерностью, основные константы – число Авогадро ($6,02 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹), универсальную газовую постоянную ($8,314$ Дж/(моль·К)), постоянную Фарадея ($96\,500$ Кл/моль).

Приведем некоторые примеры оценок, полученных без использования вычислительной техники.

Пример 1. Оцените общее число молекул в аудитории размером $6 \times 10 \times 4$ м³ при температуре 25°C и давлении 750 мм рт. ст. [1].

Решение. Выразим давление в системе единиц СИ: $P = 750/760 \cdot 101\,300 \approx 10^5$ Па. Рассчитаем количество вещества по уравнению Менделеева-Клапейрона:

$$n = PV/RT = (10^5 \text{ Па} \cdot 240 \text{ м}^3)/(8,314 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{К)} \cdot 298 \text{ К}) \approx (10^5 \cdot 240)/(8 \cdot 300) = 10^4 \text{ моль.}$$

$$N = n \cdot N_A = 10^4 \text{ моль} \cdot 6,02 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1} \approx 6 \cdot 10^{27}.$$

Пример 2. Оцените, во сколько раз увеличится при 25°C скорость реакции в присутствии катализатора, уменьшающего энергию активации на 20 кДж/моль [2].

Решение. Из уравнения Аррениуса для константы скорости ($k = A e^{-E/RT}$) следует, что при уменьшении энергии активации на ΔE константа скорости увеличивается в $e^{\Delta E/RT}$ раз. Оценим это число: $e^{20000/8,314 \cdot 298} \approx e^{20000/8 \cdot 300} \approx e^8 = e \cdot e^7 \approx 2,7 \cdot 1000 \approx 3000$. Более точный расчет на калькуляторе дает число $3\,205$.

Теперь применим методы оценок к энергетическим проблемам. Сравним энергию ядерных и химических реакций.

Пример 3. Среди всех видов топлива водород H_2 обладает наибольшей удельной теплотой сгорания. Оцените, во сколько раз теплота сгорания 1 г молекулярного водорода меньше энергии, выделяющейся в результате превращения 1 г ядер водорода в ядра гелия. Необходимая информация: 1) теплота образования жидкой воды равна 286 кДж/моль; 2) дефект массы в ядерной реакции $4 \text{ H} \rightarrow \text{He} + 2e^+$ составляет $0,0063$ а. е. м. в расчете на одно ядро H [1].

Решение. Найдем теплоту сгорания водорода. Из 1 моль (2 г) водорода в результате реакции $\text{H}_2 + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}_{(ж)}$ образуется 1 моль жидкой воды и выделяется 286 кДж. Удельная теплота сгорания H_2 составляет 143 кДж/г. Оценим энергию ядерной реакции. Из условия следует, что дефект массы в расчете на 1 г ядер водорода составляет $0,0063$ г. Для расчета энергии, соответствующей этой массе, используем формулу Эйнштейна $E = mc^2$. Все величины представим в системе СИ. $E = 0,0063 \cdot 10^{-3} \text{ кг} \cdot (3 \cdot 10^8 \text{ м/с})^2 \approx 6,3 \cdot 10^{-6} \cdot 9 \cdot 10^{16} \approx 60 \cdot 10^{10} = 6 \cdot 10^{11} \text{ Дж} = 6 \cdot 10^8 \text{ кДж}$. Эта энергия больше удельной энергии сгорания молекулярного водорода в $6 \cdot 10^8 / 143 \approx 600 / 150 \cdot 10^6 = 4 \cdot 10^6$ раз. На основе этих расчётов можно предположить, что энергии ядерных и химических реакций отличаются на 6 порядков.

Геометрические идеи используются в химии при анализе расположения атомов в молекулах или отдельных частиц (молекул, атомов и ионов) в более крупных агрегатах – кристаллах, кластерах, мицеллах, наночастицах. Мы не будем перечислять все геометрические формулы, используемые в химии, а рассмотрим несколько конкретных примеров.

Пример 4. Для определения структуры молекул в газовой фазе используют метод электронографии, который позволяет найти межъядерные расстояния в молекуле по интенсивности упругого рассеяния электронов. По данным одного из экспериментов межъядерные расстояния в молекуле NCl_3 оказались равны: $r(\text{N-Cl}) = 0,176$ нм, $r(\text{Cl-Cl}) = 0,283$ нм. Установите, какую геометрическую фигуру образуют ядра атомов в этой молекуле. Какой тип гибридизации центрального атома позволяет описать данное строение молекулы [2]?

Решение. Все три связи N-Cl в молекуле NCl_3 одинаковы. Молекула может иметь форму правильного треугольника, если атом азота находится в плоскости, образованной тремя атомами хлора. Если же атом азота лежит вне этой плоскости, то молекула имеет форму треугольной пирамиды. В первом случае угол между связями равен 120° , во втором случае – нет. Для нахождения этого угла

рассмотрим равнобедренный треугольник C1-N-C1. По теореме косинусов $r(C1-C1)^2 = r(N-C1)^2 + r(N-C1)^2 - 2r(N-C1)^2 \cos \angle C1-N-C1$, откуда получаем $\cos \angle C1-N-C1 = 1 - 0,283^2 / (2 \cdot 0,176^2) = -0,293$; $\angle C1-N-C1 = 107^\circ$. Это означает, что молекула представляет собой треугольную пирамиду. Центральный атом азота находится в состоянии sp^3 -гибридизации.

Пример 5. Наночастицы золота – очень перспективный объект для исследований. Во-первых, их свойства сильно отличаются от свойств объемных образцов металла: так, если обычное золото является диамагнетиком, т. е. совсем не проявляет магнитных свойств, то наночастицы золота ведут себя как ферромагнитные частицы. Во-вторых, оказалось, что наночастицы золота можно использовать для диагностики рака, так как они во много раз легче связываются с больными клетками, чем со здоровыми. Связанные наночастицы хорошо рассеивают и отражают свет, поэтому место локализации опухолевых клеток легко увидеть с помощью обычного микроскопа. Оцените число атомов в наночастице золота диаметром 3 нм. Радиус атома Au составляет 0,144 нм. Свободным объемом между атомами можно пренебречь [2].

Решение. Предлагаем дать оценку числа атомов по порядку величины. Общее число атомов равно отношению объема наночастицы к объему атома. По условию предполагается, что обе частицы имеют форму шара, тогда $N = (4/3 \pi r_{нч}^3) / (4/3 \pi r_{ат}^3) = (1,5/0,144)^3 \approx 10^3$.

Комбинаторика, или комбинаторный анализ – это раздел математики, в котором рассматриваются задачи, связанные с выбором элементов множества по определенным правилам. В химии комбинаторика используется для оценки вероятности той или иной конфигурации частиц, числа изомеров, определения числа микросостояний по формуле Больцмана. Для этого студент должен владеть такими вопросами комбинаторики, как перестановки, сочетания, размещения.

Пример 6. Сколько существует различных галогенпроизводных метана вида CH_2XY , где X и Y – атомы галогенов [3]?

Решение. Порядок размещения галогенов в этом случае роли не играет, т.к. у молекул этого вида нет изомеров. Число различных веществ определяется сочетанием из четырёх галогенов (фтор, хлор, бром, йод) по два положения в молекуле. В комбинаторике доказано, что число сочетаний из n по k равно биномиальному коэффициенту C_n^k .

$$C_n^k = n! / (k!(n-k)!) = 4! / (2!2!) = 6, \text{ т.е. существует шесть веществ.}$$

Пример 7. Сколько трипептидов, содержащих три различных аминокислотных остатка, можно составить из 20 аминокислот?

Решение. Пептиды – несимметричные молекулы, для них важен порядок расположения аминокислот. Поэтому число трипептидов равно числу размещений 20 аминокислот по трём позициям в трипептиде:

$$A_{20}^3 = 20! / (20-3)! = 20 \cdot 19 \cdot 18 = 6840.$$

Приведённые примеры являются только малой частью из огромного многообразия химических задач, решение которых невозможно без использования математических методов и приёмов. Разумеется, известно много хороших химиков, которые признаются в том, что не в ладах с математикой. Однако тот, кто хорошо владеет математическим инструментарием, имеет гораздо больше возможностей для познания мира веществ.

Литература.

1. Ерёмин, В.В. Теоретическая и математическая химия для школьников. Подготовка к химическим олимпиадам. – М.: МЦНМО, 2007. – 392 с.
2. Общая химия: методические указания к самостоятельной работе для студентов I курса всех специальностей, изучающих химию / сост. Л. Е. Незаментимова. – Хабаровск : Изд-во Тихоокеан. гос. ун-та, 2007. – 27 с.
3. Сборник практических работ по химии: методические указания к практическим работам по химии для студентов всех специальностей и форм обучения. Часть 3 / сост.: Е.Н. Калюкова, Н. Н. Иванская, В. Т. Письменко. – Ульяновск: УлГТУ, 2009. – 60 с.