

УДК 51

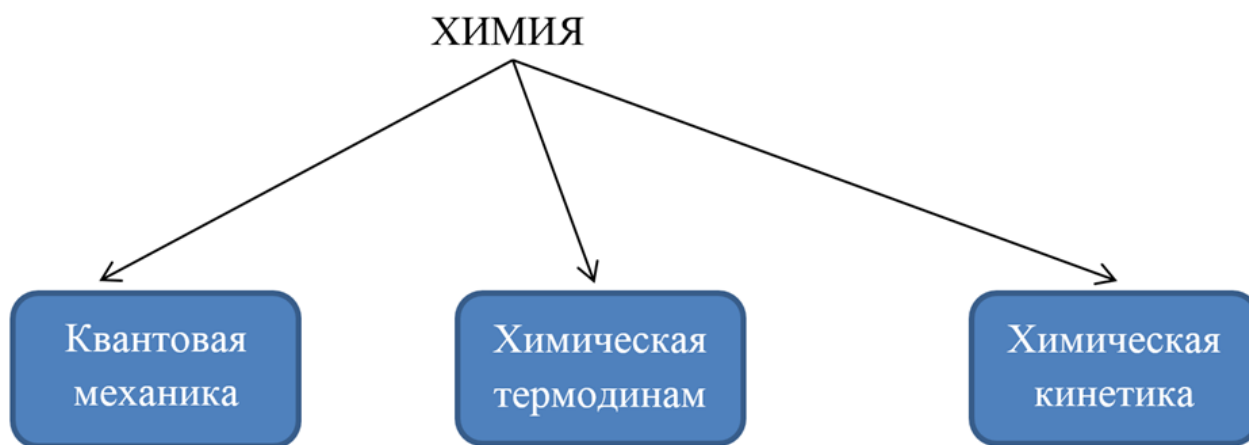
## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДВУХ НАУК

Бирюкова Д.А., студентка гр. ХОб-191, I курс  
Гутова Е.В., ст. преподаватель кафедры математики  
Кузбасский государственный технический университет  
имени Т.Ф. Горбачева  
г. Кемерово

Химия – наука об элементах, соединениях, веществах. Она изучает то, из чего состоят объекты, которые окружают нас, и определяет: существующие вещества и создание новых, их состав, взаимосвязь строения от его определенных свойств, получение веществ, полезных для человека. В целом химия охватывает основные направления: неорганическая и органическая химии, биохимия.

Нестандартные особенности имеет химия как область науки и как метод познания окружающего мира. У нее нет своих правил.

Три основные раздела химии, определяющие структуру и особенность вещества и их возможность трансформироваться в другие, показаны на схеме:

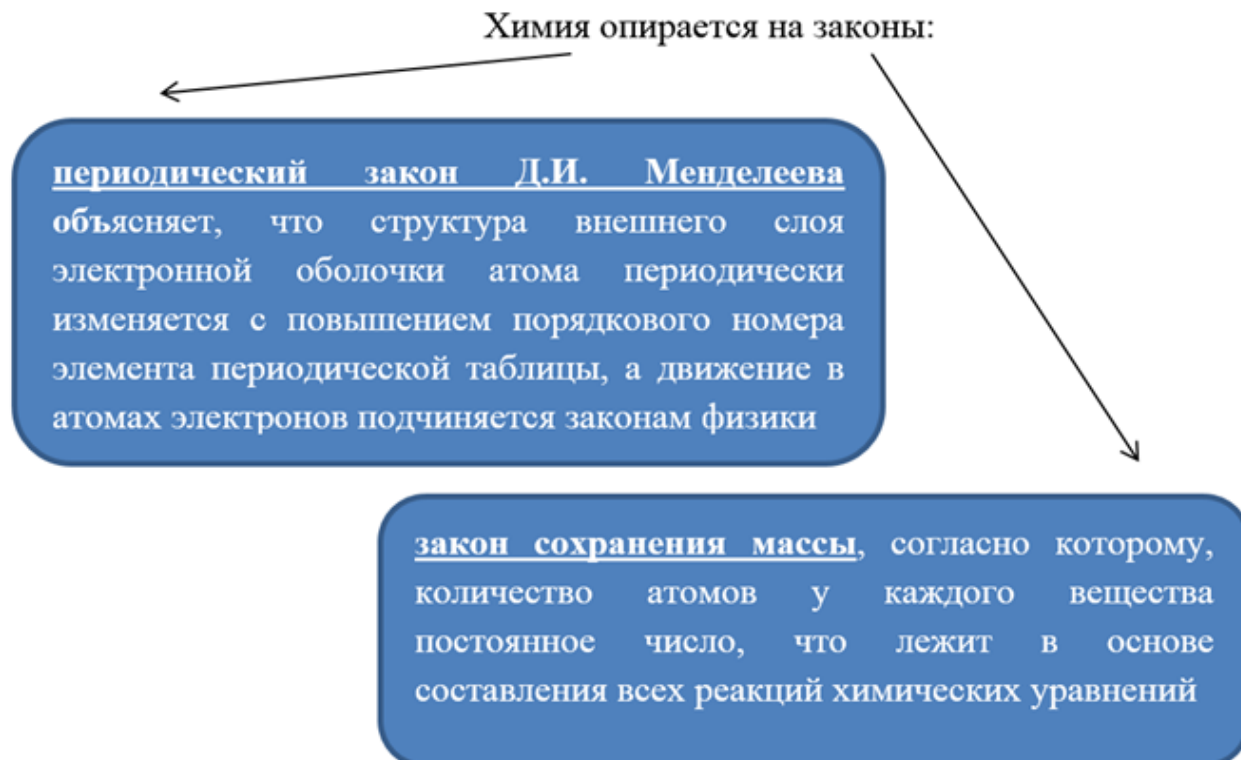


Квантовая механика – с ее помощью выполняются расчет энергии таких частиц, как электроны, атомы, молекулы и ионы, и на основе этого моделируется пространственная структура молекул и позиции атомов и ионов в кристаллах. Квантовая механика, связанная с химическими системами, есть квантовая химия.

Имеет смысл реакция или нет в принципе определяет химическая термодинамика, но она не может гарантировать положительный результат реакции.

Химическая кинетика изучает скорости и механизмы химических реакций.

Все три «кита» создают специальную область химии – физическую химию. Это указывает на то, что у химии нет своих собственных, присущих только ей, законов и теорий.



Для инженера-химика математика – полезный инструмент для решения задач в химии. Его деятельность сопряжена с постоянной необходимостью проведения расчетов различной степени сложности и различного назначения. Практически все дисциплины математики применяются в химии. Например, приближенное решение нелинейных уравнений позволяет с достаточной точностью определять выход химических продуктов, приближенное дифференцирование и интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений важны при получении данных по кинетике химических процессов.

Реальные свойства атомов и молекул тесно связаны с уравнениями и методами математики, которые подчиняются определенным запретам. Т.е. всегда имеют смысл для химии решения математических уравнений:

1. *количество атомов в молекулах – целое, положительное число.* Так, уравнение  $32x + 16y = 64$ , отражает для оксида серы  $S_xO_y$  молекулярную массу (32 – атомная масса серы, 16 – кислорода). Число 64 – молекулярная масса для сернистого газа, поэтому  $x = 1, y = 2$ .

2. *валентность – почти всегда целое, положительное число.* Возьмем кислород. Он двухвалентен во всех соединениях, что вводит некоторые ограничения на химические уравнения.

3. *многие физические величины, которые используют для описания химических реакций и веществ могут принимать только положительные значения* (например, число частиц (молекул), масса вещества, объем

вещества, скорость химической реакции, относительная молекулярная масса и др.).

4. *отсутствуют иррациональные числа.* Такие числа представляются в виде бесконечной непериодической десятичной дроби. Результаты в химии выражаются целыми или дробными числами, полученные с конечной точностью не более 4 знаков (число может быть 3,162, но не может быть  $10^{\frac{1}{2}}$ ).

5. *в химии нет понятия «бесконечность».* Во Вселенной число атомов достигает  $10^{80}$ , на Земле –  $10^{50}$ , человеческое тело содержит примерно  $10^{27}$ . Физическая величина в химии имеет наименьшее конечное значение и химический смысл. Образцом для этого утверждения служит время, которое ограничено значением  $10^{-14}$ , и расстояние, нижняя граница которого равна  $10^{-10}$ . Рассматривать меньшие значения в химии нет смысла.

**ПРИМЕР.** Пусть требуется определить массу каждого из компонентов от металлургического производства ЗАО «Металлург», если общий выход отходов составляет 6450кг следующего химического состава:

Ca( $b_1$ ) – 25%, MgO( $b_2$ ) – 17%, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>( $b_3$ ) – 58%;

при этом от шлама мокрых газоочисток выход состава:

Ca( $a_{11}$ ) – 10%, MgO( $a_{21}$ ) – 75%, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>( $a_{31}$ ) – 15%;

от шлама сухой газоочистки состава:

Ca( $a_{12}$ ) – 0%, MgO( $a_{22}$ ) – 0%, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>( $a_{32}$ ) – 100%;

от окалины прокатного производства состава:

Ca( $a_{13}$ ) – 35%, MgO( $a_{23}$ ) – 0%, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>( $a_{33}$ ) – 65%

Составим определитель системы и вычислим его:

$$|A| = \begin{vmatrix} 10 & 0 & 35 \\ 75 & 0 & 0 \\ 15 & 100 & 65 \end{vmatrix} = 35 \cdot 75 \cdot 100 = 262500$$

$$\Delta x_1 = \begin{vmatrix} 25 & 0 & 35 \\ 17 & 0 & 0 \\ 58 & 100 & 65 \end{vmatrix} = 35 \cdot 17 \cdot 100 = 59500$$

$$\Delta x_2 = \begin{vmatrix} 10 & 25 & 35 \\ 75 & 17 & 0 \\ 15 & 58 & 65 \end{vmatrix} = 32500$$

$$\Delta x_3 = \begin{vmatrix} 10 & 0 & 25 \\ 75 & 0 & 17 \\ 15 & 100 & 58 \end{vmatrix} = 170500$$

$$\text{Тогда } \Delta x_1 = \frac{59500}{262500}, \Delta x_2 = \frac{32500}{262500}, \Delta x_3 = \frac{170500}{262500}.$$

$$\text{Т.е. Ca: } 6450 \cdot \Delta x_1 = 6450 \cdot \frac{59500}{262500} = 1462 \text{ кг;}$$

$$\text{MgO: } 6450 \cdot \Delta x_2 = 6450 \cdot \frac{32500}{262500} = 799 \text{ кг;}$$

$$\text{Fe}_2\text{O}_3: 6450 \cdot \Delta x_3 = 6450 \cdot \frac{3170500}{262500} = 4189 \text{ кг.}$$

#### Список литературы:

1. Еремин В.В. Математика в химии. М: Московский центр непрерывного математического образования, 2016.
2. Скатецкий В.Г., Свиридов Д.В., Яшкин В.И. Математические методы в химии. Минск: ТетраСистемс, 2006.
3. Репкин Н.М., Леванова С.В., Дружинина Ю.А. Методы обработки результатов химического эксперимента. Самара: Самар.гос.техн.ун-т, 2012.
4. Брановицкая С.В., Медведев Р.Б., Фиалков Ю.Я. Вычислительная математика в химии и химической технологии. Киев: Вища школа, 1986.