

УДК 51

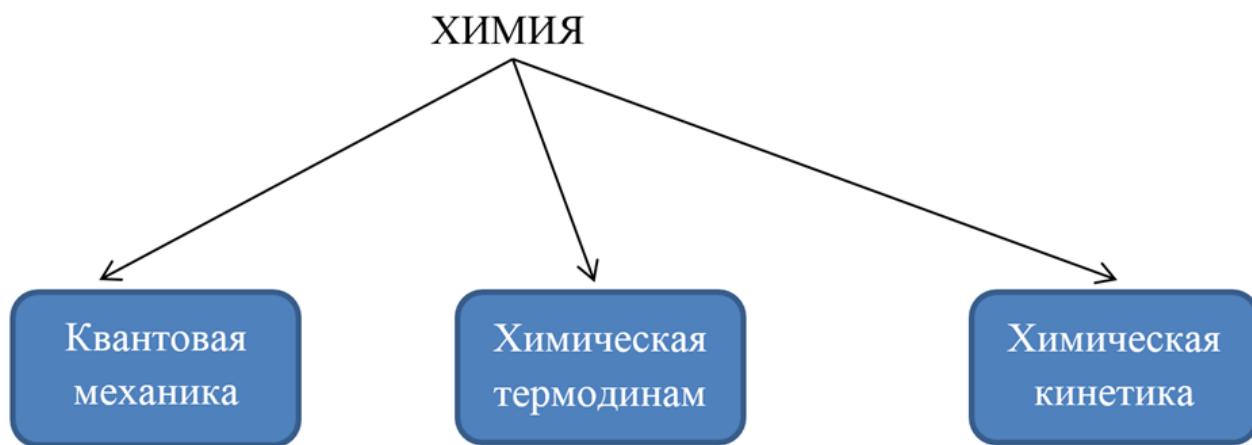
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДВУХ НАУК

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:

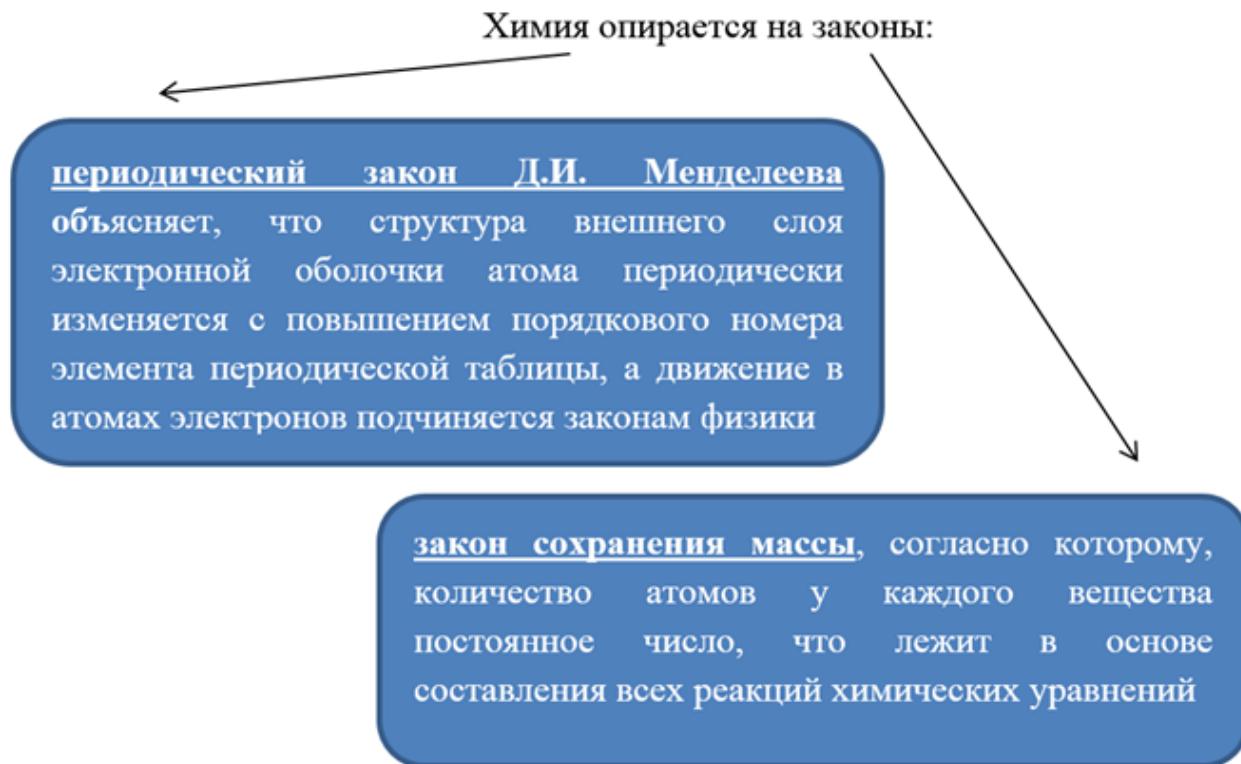


Квантовая механика – с ее помощью выполняются расчет энергии таких частиц, как электроны, атомы, молекулы и ионы, и на основе этого моделируется пространственная структура молекул и позиции атомов и ионов в кристаллах. Квантовая механика, связанная с химическими системами, есть квантовая химия.

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 6450 кг следующего химического состава:

$\text{Ca}(b_1) - 25\%$, $\text{MgO}(b_2) - 17\%$, $\text{Fe}_2\text{O}_3(b_3) - 58\%$;

при этом от шлама мокрых газоочисток выход состава:

$\text{Ca}(a_{11}) - 10\%$, $\text{MgO}(a_{21}) - 75\%$, $\text{Fe}_2\text{O}_3(a_{31}) - 15\%$;

от шлама сухой газоочистки состава:

$\text{Ca}(a_{12}) - 0\%$, $\text{MgO}(a_{22}) - 0\%$, $\text{Fe}_2\text{O}_3(a_{32}) - 100\%$;

от окалины прокатного производства состава:

$\text{Ca}(a_{13}) - 35\%$, $\text{MgO}(a_{23}) - 0\%$, $\text{Fe}_2\text{O}_3(a_{33}) - 65\%$

Составим определитель системы и вычислим его:

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

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

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

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

Тогда $\Delta x_1 = \frac{59500}{262500}$, $\Delta x_2 = \frac{32500}{262500}$, $\Delta x_3 = \frac{3170500}{262500}$.

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

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