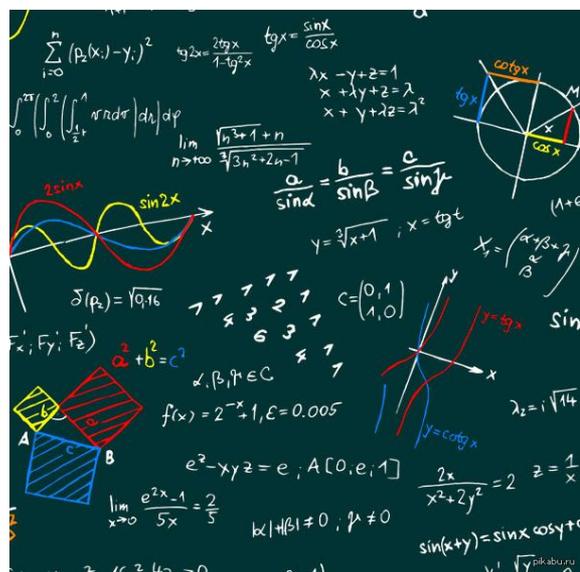
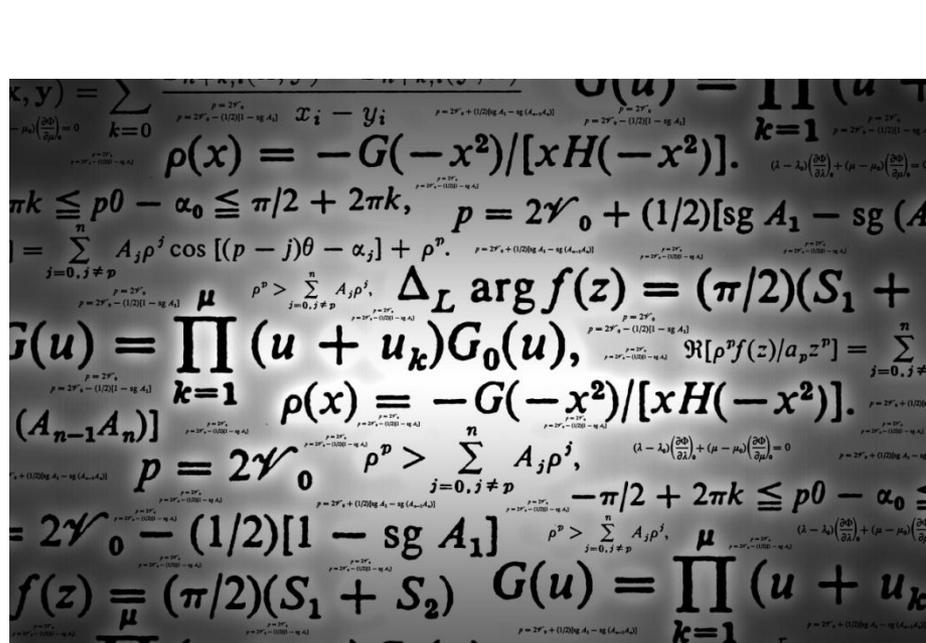


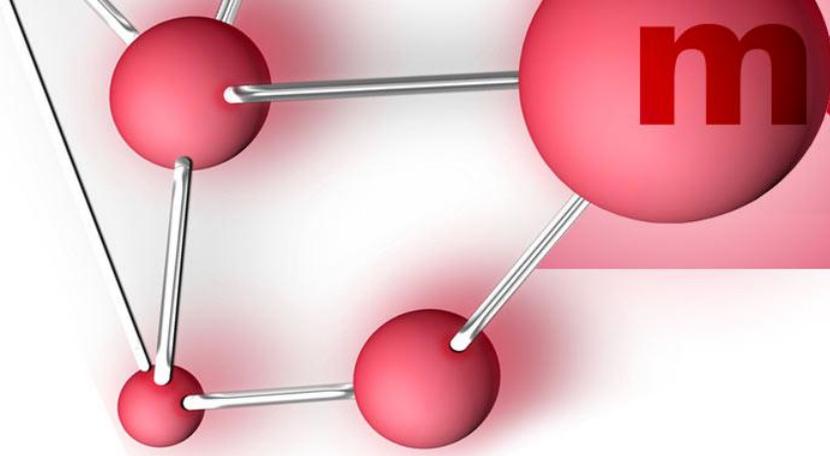


molecule

Связь математики и химии

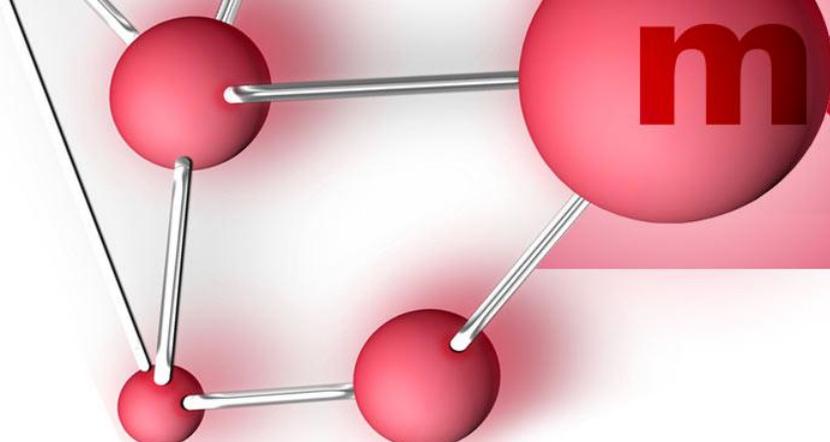






molecule

- Математика разрабатывает новые подходы, которые позволяют проникнуть в суть или решить проблемы химии, развивает новые химические теории.
- Для того, чтобы углубить свои знания по химии, необходимо хорошо понимать математику.



molecule

- Химия – наука, изучающая природу. Основные вопросы, которые решает химия – «Какие бывают вещества и как они устроены?», «Как связано строение веществ с их свойствами?» и «Как из одних веществ получить другие, более полезные или интересные?».
- Химия не имеет собственных законов (закон сохранения массы – следствие общего закона сохранения энергии, а периодический закон подчиняется правилам физики). Три теории химии (квантовая химия, химическая термодинамика и химическая кинетика) образуют специальный раздел науки, который называют физической химией.

Закон химии

В 1748 г. сформулировал важнейший закон химии - закон сохранения массы вещества в химических реакциях. «Масса веществ, вступивших в реакцию, равна массе веществ, получившихся в результате её».



Масса

$$m_1 = m_2$$

ЗАКОН КРАТНЫХ ОТНОШЕНИЙ

Этот закон открыт **Дальтоном** в 1803 году.

«Если два элемента образуют между собой несколько соединений, то весовые количества одного элемента, соединяющиеся с одним и тем же весовым количеством другого элемента, относятся между собой как небольшие целые числа».



Например: N_2O , NO , N_2O_3 , NO_2 , N_2O_5

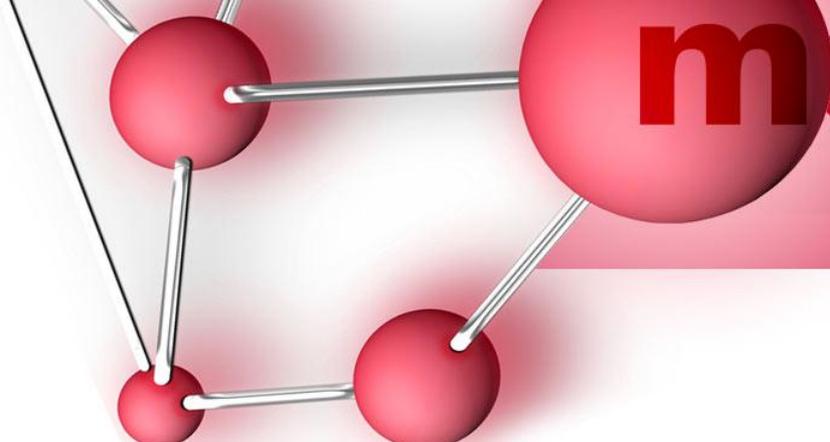
ЗАКОН ПРОСТЫХ ОБЪЕМНЫХ ОТНОШЕНИЙ

Открыл французский химик **Гей-Люссак** в 1805-1808 годах.

«Объемы, вступающих в реакцию газов, относятся друг к другу, а так же к объемам получившихся газообразных продуктов, как небольшие целые числа».

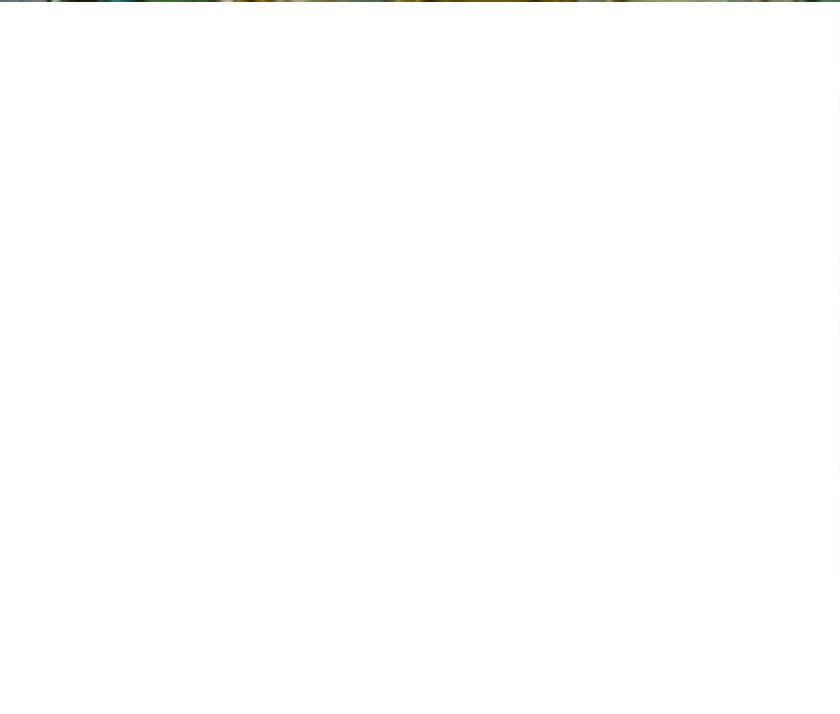


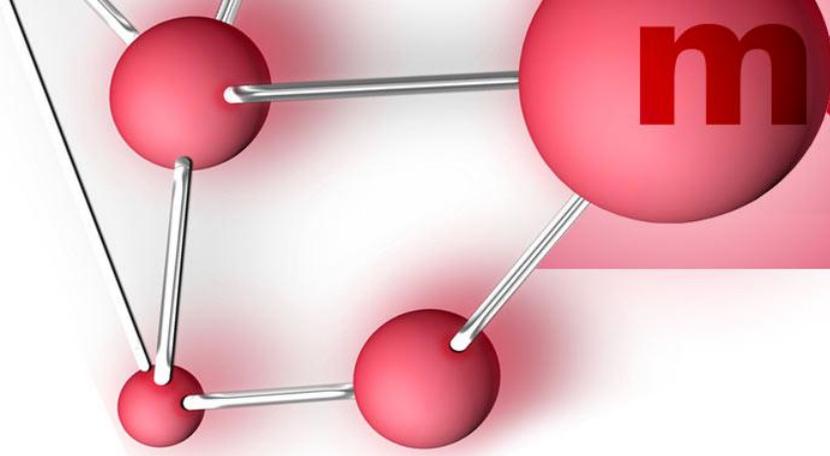
Например: $H_{2(l)} + Cl_{2(l)} = 2HCl_{(g)}$
1л 1л 2л



molecule

- *«Математика для химиков – это, в первую очередь, полезный инструмент решения многих химических задач. Очень трудно найти какой-либо раздел математики, который совсем не используется в химии».* Функциональный анализ и теория групп широко применяются в квантовой химии, теория вероятностей, методы топологии и дифференциальной геометрии составляет основу термодинамики, теория графов используется в органической химии для предсказания свойств органических молекул, дифференциальные уравнения – основа химической кинетики.





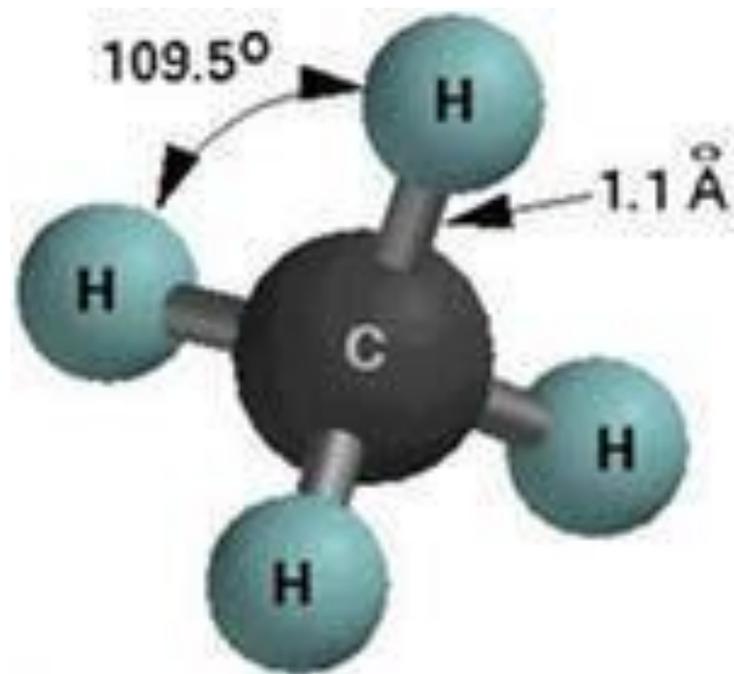
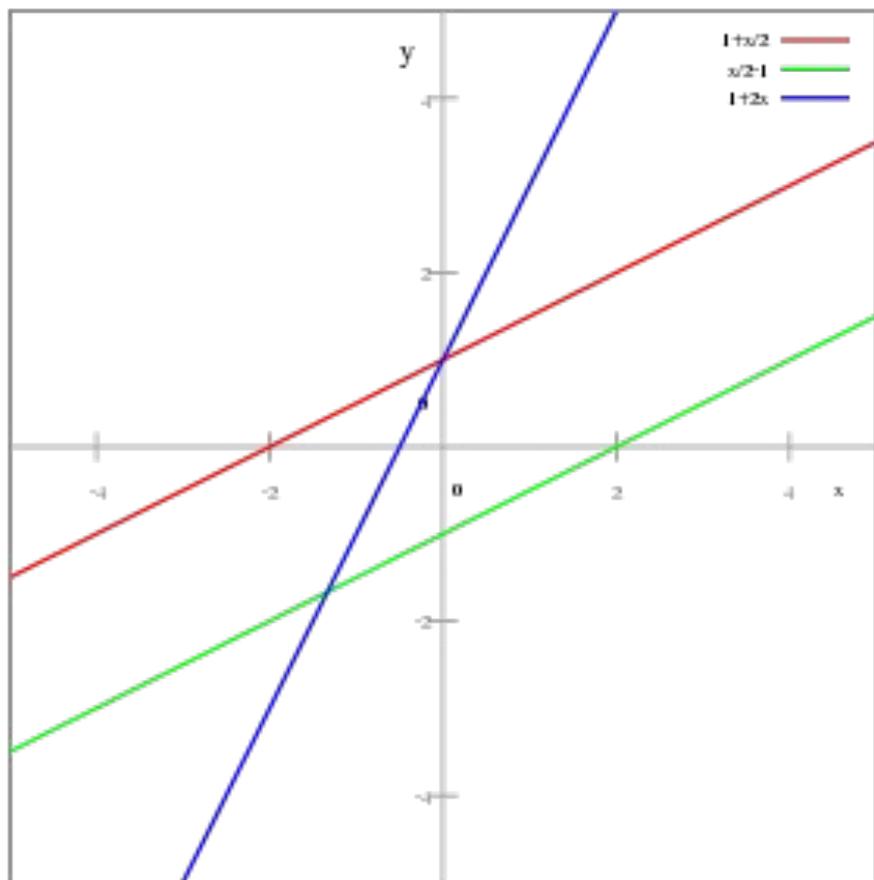
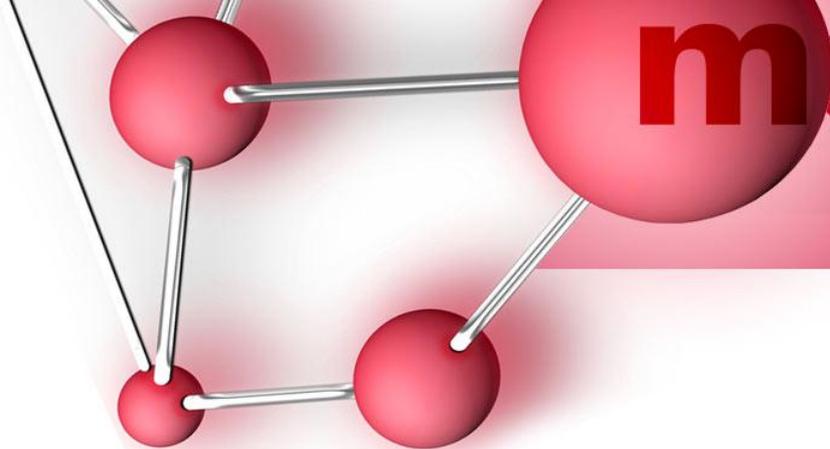
molecule

- Математические уравнения и методы, используемые в химии, имеют дело с конкретными свойствами атомов и молекул. Поэтому, математические уравнения, применяемые в химии, а также их решения должны иметь химический смысл. Рассмотрим конкретные примеры:

Пример №1

- **Число атомов в молекулах должно быть положительным целым числом.** Рассмотрим уравнение $12x+y=16$. Для математика это уравнение описывает прямую. Оно имеет бесконечно много решений. Для химика выражение $12x+y$ описывает молекулярную массу углеводорода C_xH_y ($A_r(C) = 12$ г/моль; $A_r(H) = 1$ г/моль). Молекулярную массу 16 имеет единственный углеводород, первый член гомологического ряда алканов – метан (CH_4), поэтому только одно решение данного уравнения обладает химическим смыслом: $x=1, y=4$.

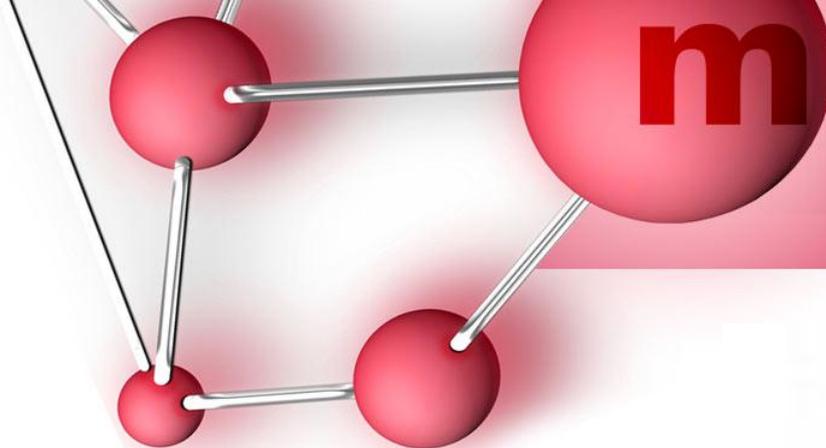
molecule



Пример №2

- *Физические величины, используемые для описания химических веществ и реакций, могут принимать только неотрицательные значения: масса, объём, концентрация, скорость реакции др.*
- Часто химикам приходится решать задачи на расчет состава равновесной смеси. В них возникают полиномиальные уравнения относительно доли превращения исходных веществ в продукты реакции. Согласно основной теореме алгебры полином n -ой степени имеет ровно n корней, среди которых могут быть и комплексные. Между тем, во всех уравнениях, возникающих в химии, только один корень имеет смысл.

molecule

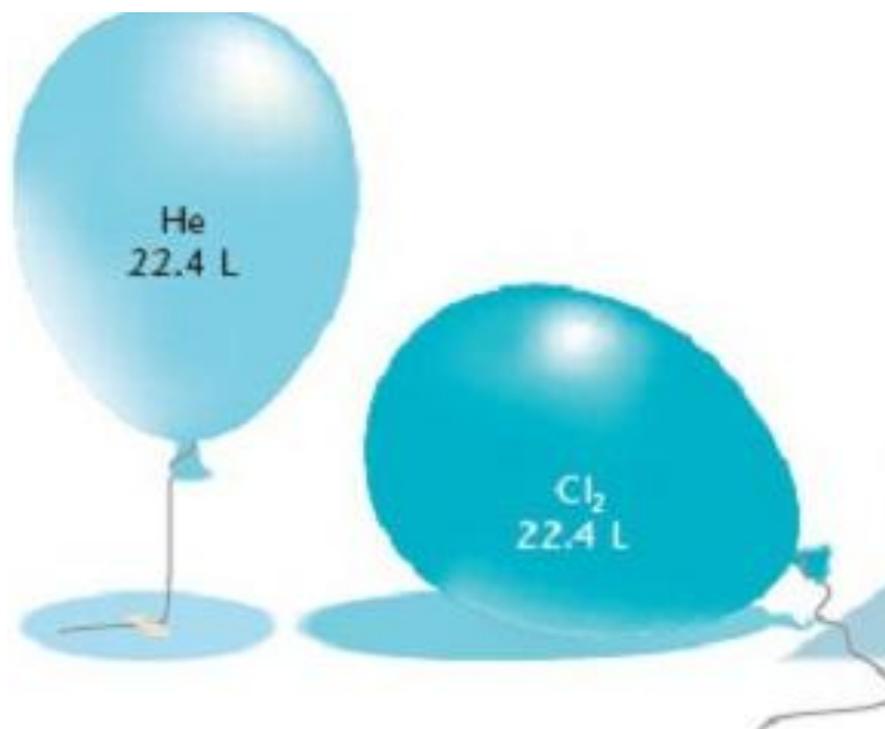


Смесь веществ чем-то напоминает эту тарелку с овощами. Только если овощи, которые здесь находятся мы можем определить на запах, цвет, вкус, то реагенты таким образом определять довольно сложно и опасно. Посредством химических опытов необходимо установить точный качественный и количественный состав данной смеси. Но перед проведением опыта необходимо написать уравнения химических реакций, по которым можно точно определить необходимое количество реагентов для опознания составляющих смеси.

Пример № 3, 4

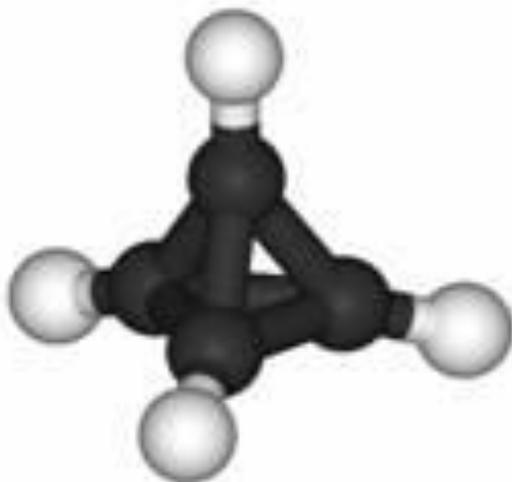
- ***В химии нет иррациональных чисел.*** При математических расчетах в химии используют целые числа или дробные, но полученные с конечной точностью (как правило, не более 4 значащих цифр: числа π и e в расчетах округляют до 3,14 и 2,72 соответственно).
- ***В химии нет понятия «бесконечность».*** Конечно, число атомов в наблюдаемой части Вселенной очень велико, но в природе нет бесконечно больших и бесконечно малых величин. Так общее число атомов различных химических элементов во Вселенной оценивается как 10^{80} , на Земле – 10^{50} , а в человеческом организме на четыре порядка больше, чем значение постоянной Авогадро ($6,02 \cdot 10^{23}$ частиц/моль) – 10^{27} .

$$N_A = \frac{12 \frac{\text{г}}{\text{моль}}}{1,99 \cdot 10^{-23} \text{ г}} = 6,02 \cdot 10^{23} \frac{1}{\text{моль}}$$



Геометрия в химии

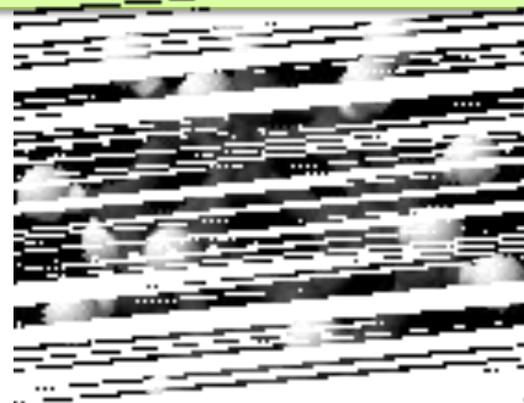
- В современной химии для определения структуры молекул (их геометрического строения) используют разнообразные физические методы, наиболее распространённые из которых – инфракрасная спектроскопия (ИК), спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР) и масс-спектропия (МС). Сочетание данных методов позволяет определить структуру даже очень сложных молекул.



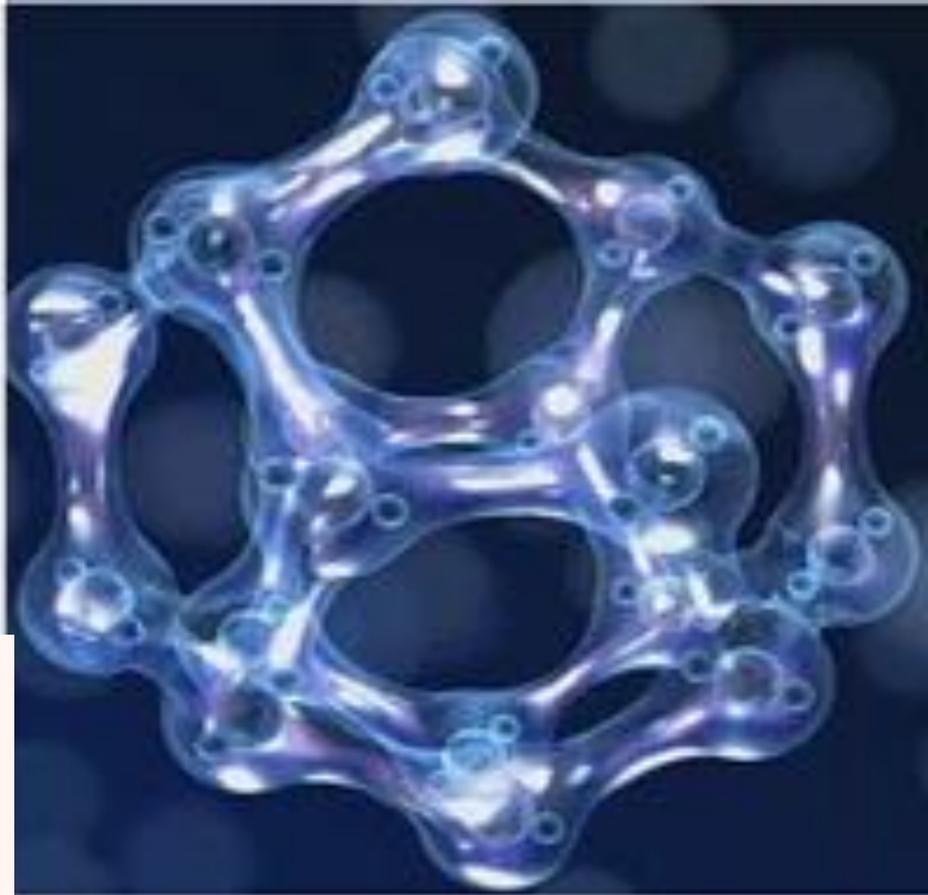
Тетраэдрическая структура молекулы метана (CH_4)



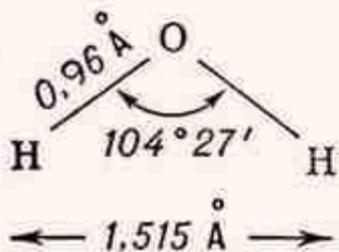
Углеводород в форме куба (формула C_8H_8) называется кубан.



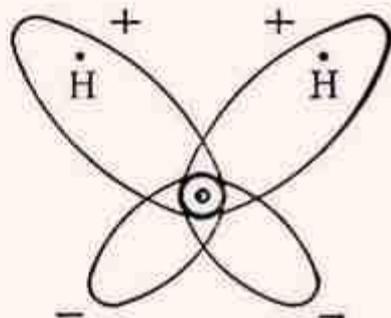
Углеводород с геометрической формой додекаэдра (додекаэдр – самый сложный из правильных многогранников) – додекаэдран ($\text{C}_{20}\text{H}_{20}$). В этой молекуле два додекаэдра.



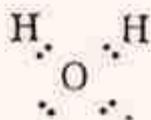
www.alcala.ru



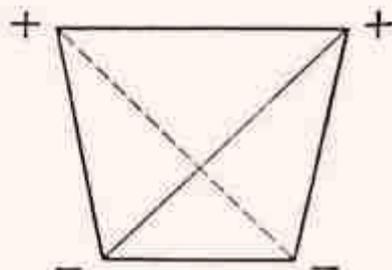
a



b

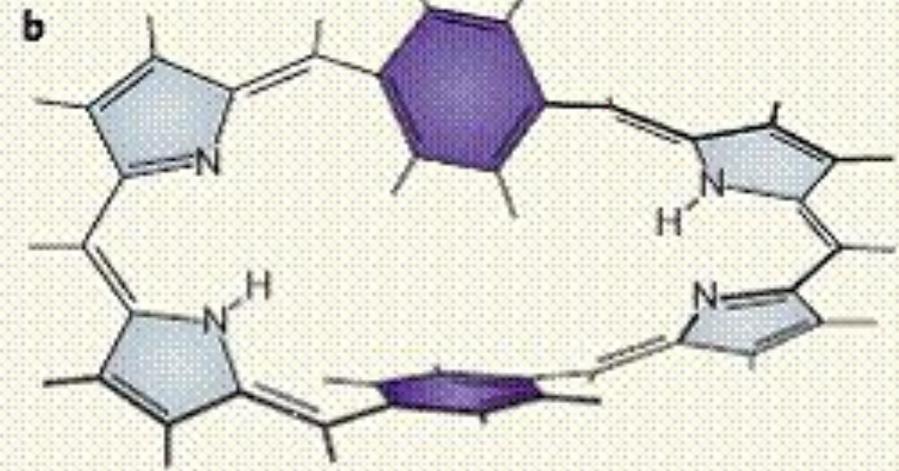
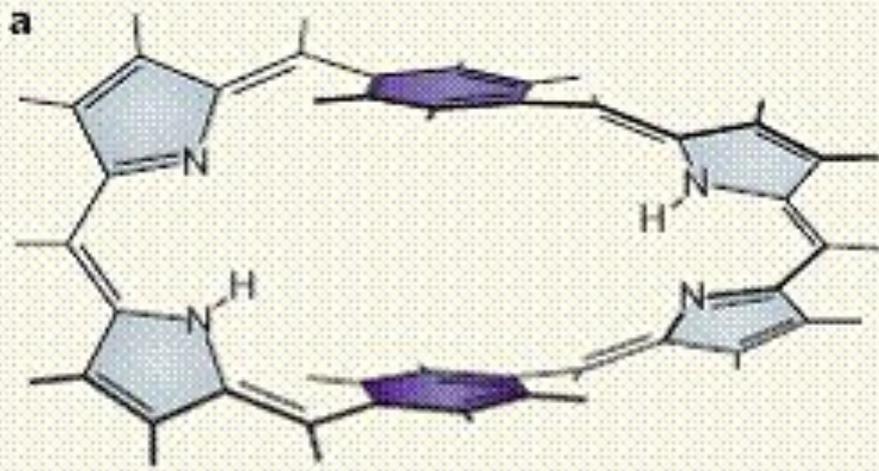


в



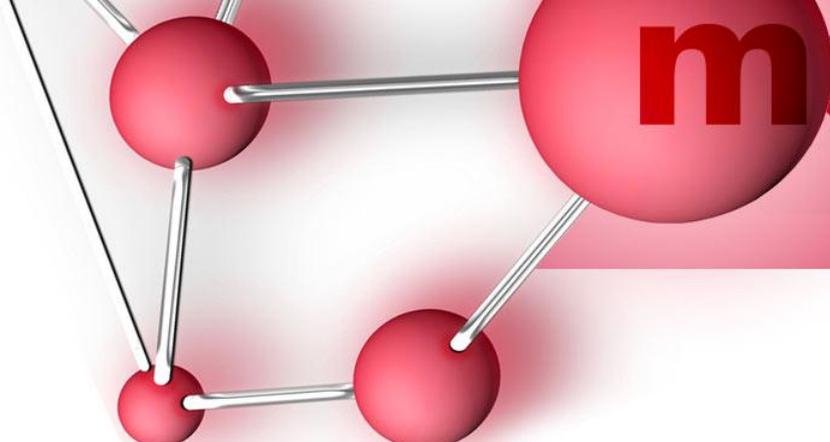
г

**Молекулярная
формула, строение и
структура кластера
ВОДЫ**



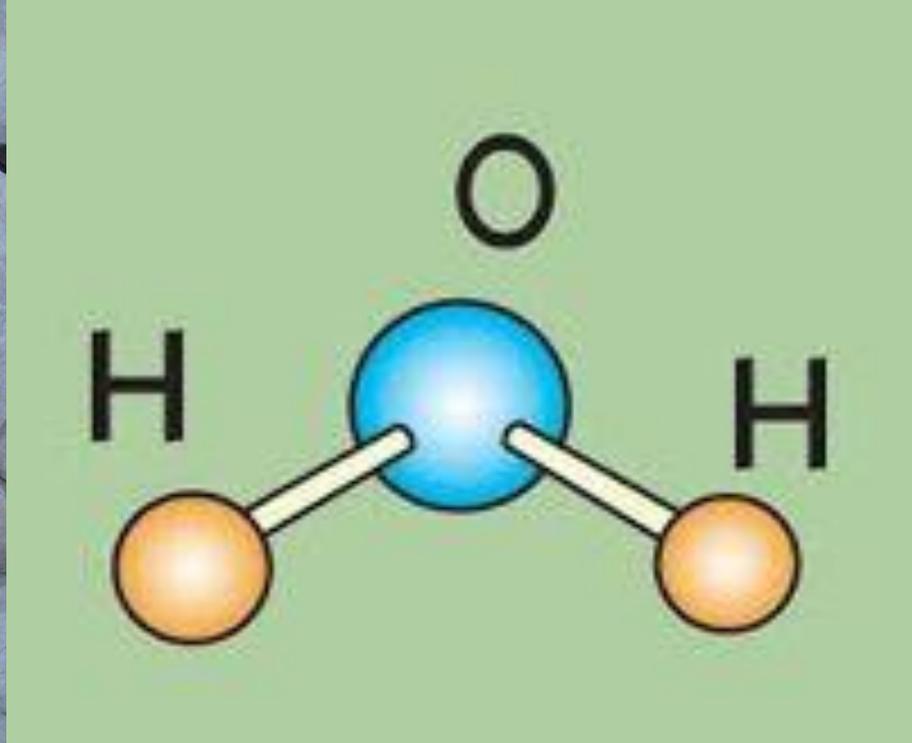
Лист Мёбиуса – объект, который имеет только одностороннюю поверхность.

а) нормальная топология; б) мебиусовская топология



molecule

- Крайне важными в химии является точный расчет химических реакций, т.к. даже при небольшом несоблюдении пропорций некоторые реакции не получаются. К таким реакциям относится получение карбоната кальция (CaCO_3). Реакция весьма важна в органическом синтезе, т.к. на её основе получают ацетилен в лабораторных условиях.
- Получение данного карбоната происходит при добавлении углекислого газа в гашёную известь ($\text{Ca}(\text{OH})_2$).
- $\text{Ca}(\text{OH})_2 + \text{CO}_2 \rightarrow \text{CaCO}_3 \downarrow + \text{H}_2\text{O}$
- Отношение коэффициентов в уравнении 1:1:1:1. Если добавить углекислого газа больше, чем требуется по уравнению реакции, то необходимый осадок не выпадет.





- **Вывод:** *роль математики в химии велика (многие математические законы и формулы используются для решения химических задач, но в то же время, химия накладывает ограничения на решение математических уравнений, так как они должны иметь химический смысл).*



**СПАСИБО ЗА
ПРОСМОТР!!!**