

# *РОЛЬ МАТЕМАТИКИ В ХИМИИ*





510784.36  
2.719372  
9 ÷ 1

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 составляет основу статистической термодинамики, теория графов используется в органической химии для предсказания свойств сложных органических молекул, дифференциальные уравнения – основной инструмент химической кинетики, методы топологии и дифференциальной геометрии применяются в химической термодинамике.



## Какие ограничения накладывает химия на решение математических задач?

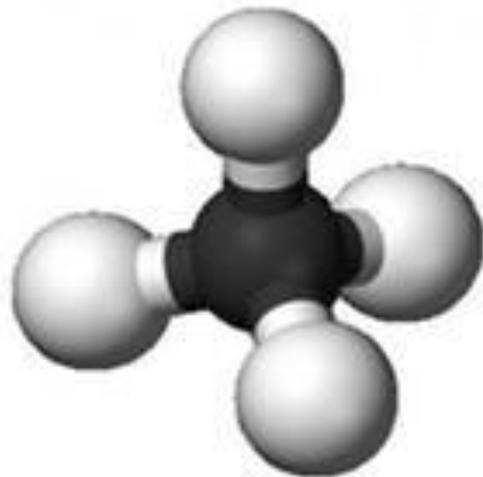
Как-то раз Гаусс спорил с Авогадро (1776-1856) о сущности научных законов. Гаусс утверждал, что законы существуют только в математике, а потому химия почитаться за науку не может. В ответ Авогадро сжег 2 л водорода в литре кислорода и, получив два литра водяного пара, торжествующе воскликнул: «Вот видите! Если химия захочет, то два плюс один окажутся равны двум. А что скажет на это ваша математика?»

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. Математические уравнения, применяемые в химии, а также их решения должны иметь химический смысл.

Какие ограничения накладывает химия на решение математических задач?

**Число атомов в молекулах должно быть положительным целым числом**

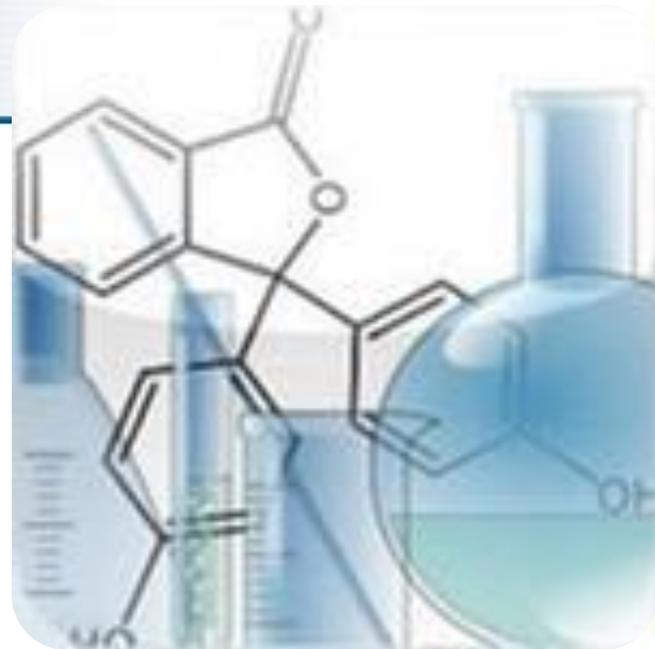
Рассмотрим уравнение  $12x + y = 16$ . Для математика это уравнение описывает прямую линию на плоскости. Оно имеет бесконечно много решений, в том числе и целочисленных. А для химика выражение  $12x + y$  описывает молекулярную массу углеводорода  $C_xH_y$  (12 – атомная масса углерода, 1 – водорода).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



## Какие ограничения накладывает химия на решение математических задач?

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  $\sqrt{2}$ .

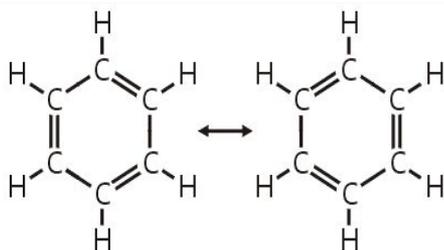
Поэтому числа  $\pi$  и  $e$ , часто возникающие в химических расчетах, обычно округляют до 3.14 и 2.72, соответственно.



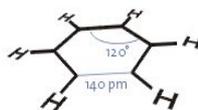
## Симметрия в химии



Benzol  
Summenformel



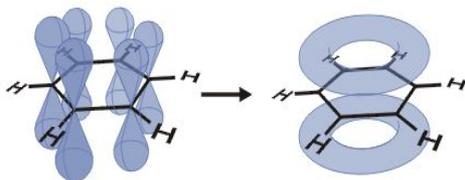
Benzol  
Kekulé-Strukturformel  
(Mesomerie)



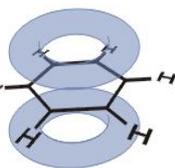
Benzol  
planares Hexagon  
Kantenlänge 140 pm



Benzol  
 $\sigma$ -Bindungen mit hybridisierten  $sp^2$ -Orbitalen



Benzol  
6  $p_z$ -Orbitale



Benzol  
delokalisierte  
 $\pi$ -Orbitalwolke



Benzolring,  
vereinfachte  
Darstellung

Симметрия – одно из основных понятий в современной науке. Она лежит в основе фундаментальных законов природы, таких как закон сохранения энергии. Симметрия – очень распространенное явление в химии: практически все известные молекулы либо сами обладают симметрией какого-либо рода, либо содержат симметричные фрагменты. В химии труднее обнаружить несимметричную молекулу, чем симметричную.

## Дифференциальные уравнения в химии



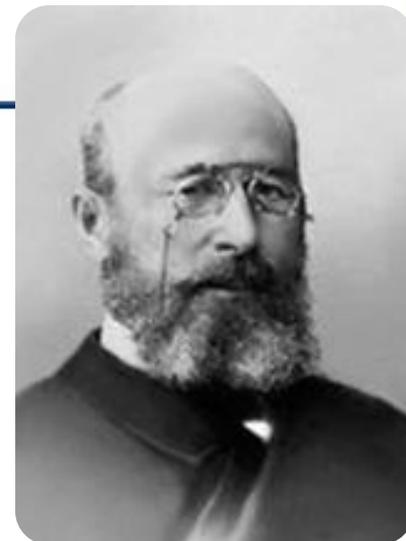
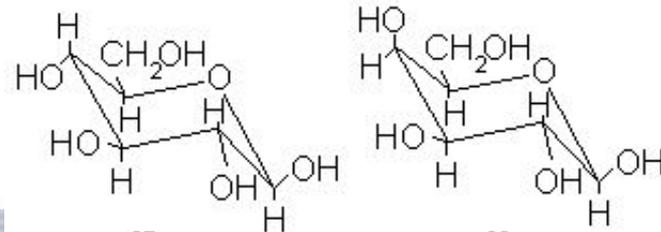
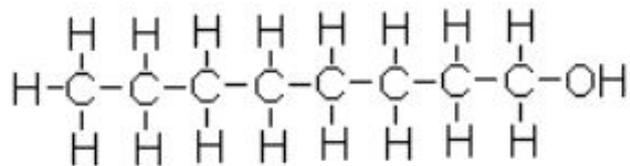
Химия изучает свойства веществ и их зависимость от условий – температуры, давления, концентрации.

Поэтому химикам часто приходится исследовать функции одной или нескольких переменных. Как известно, основной способ исследования функции – анализ ее производной. Некоторые законы химии имеют дело с производными и устанавливают правила, по которым можно рассчитать производные и найти искомые функции.

В первую очередь это касается химической кинетики – науки о скоростях и механизмах химических реакций. Скорость химической реакции показывает, насколько быстро увеличивается количество продуктов реакции и уменьшается количество исходных веществ (реагентов). Она обычно определяется как производная от концентрации продуктов по времени.

## Графическое представление молекул и их свойств – теория графов в химии

Изучение связи свойств веществ с их строением – одна из основных задач химии. Большой вклад в ее решение внесла структурная теория органических соединений, в число создателей которой входит великий российский химик Александр Михайлович Бутлеров (1828-1886). Именно он первым установил, что свойства вещества зависят не только от его состава, но и от того, в каком порядке связаны между собой атомы в молекуле. Идея о том, что порядок соединения атомов имеет ключевое значение для свойств вещества, легла в основу представления молекул с помощью графов, в которых атомы играют роль вершин, а химические связи между ними – ребер, соединяющих вершины. Молекулы изображаются следующими графами:



Бутлеров А.М.

**Математическая химия** — раздел теоретической химии, область исследований, посвящённая новым применениям математики к химическим задачам



Основная область интересов - это математическое моделирование гипотетически возможных физико-химических и химических явлений и процессов, а так же их зависимость от свойств атомов и структуры молекул. Математическая химия допускает построение моделей без привлечения квантовой механики. Критерием истины в *математической химии* являются математическое доказательство, вычислительный эксперимент и сравнение результатов с экспериментальными данными .

В *математической химии* разрабатывают новые приложения математических методов в химии. Новизна обычно выражается одним из двух способов: развитие новой химической теории; развитие новых математических подходов, которые позволяют проникнуть в суть или решить проблемы химии.

Модели математической химии— это закон действующих масс, созданный математиком К. Гульдбергом и химиком-экспериментатором П. Вааге, граф механизма химических превращений и дифференциальные уравнения химической кинетики. Один из создателей «химической динамики» Вант -Гофф писал о себе: «Двойное стремление: к математике, с одной стороны, и к химии — с другой, проявилось во всех моих научных устремлениях».

## Вдох – выдох –вдох!



## Пример математического моделирования

« При каждом вдохе вы захватываете столько молекул, что если бы все они после выдоха равномерно распределились в атмосфере Земли, то каждый житель планеты при вдохе получил бы две-три молекулы, побывавшие в ваших легких»,

Для данного расчета не надо учитывать все население Земли, достаточно одного единственного человека.

Вы делаете обычный вдох – выдох, задержав дыхание дожидаетесь, когда порция выдохнутого воздуха перемещается со всей атмосферой планеты, и снова делаете вдох.

Проверим алгеброй дыхательную гармонию.

При каком объеме вдоха –выдоха выполняется «утверждение о двух молекулах»

**Вдох – выдох –вдох!**



Общее число молекул земной атмосферы  $N$ , а вдох и выдох содержат по  $*N$  молекул. После вдоха –выдоха доля меченных молекул в земной атмосфере\*. Таким же должно быть отношение и во втором вдохе («вдохе каждого жителя планеты»), которое по условию равно  $2/*N$ . Отсюда следует:  $*N/N = 2/*N$  или

$*N =$  (нахождение среднего геометрического)

масса земной атмосферы =  $5,2 \cdot 10^{21}$  г

молярная масса воздуха  $M = 29$  г/моль

постоянная Авогадро  $N_A = 6 \cdot 10^{23}$  моль<sup>-1</sup>

объем спокойного вдоха (выдоха)  $V = 400 - 600$  мл

молярный объем газа  $V_m = 24$  л/моль

$n$  – количество вещества атмосферы

$$N = nN_A = \frac{m}{M} \cdot N_A$$

$$N = \sqrt{2 \frac{m}{M} N_A}$$

**Вдох – выдох –вдох!**



Пересчитаем число молекул на соответствующий объем вдоха –выдоха .  $*V$  при обычных условиях(нормальное давление и комнатная температура)

$$*V = *nV_{m,t} = (*N/N_A)V_{m,t} = \frac{\sqrt{2 \frac{m}{M} N_A}}{N_A} \cdot V_{m,t}$$

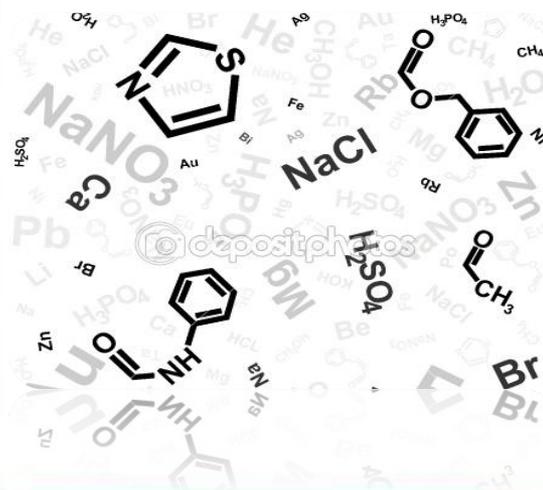
$$*V = \frac{\sqrt{2 \cdot 5,2 \cdot 10^{21}}}{\sqrt{29 \cdot 6 \cdot 10^{23}}} \cdot 24 = 5,9 \cdot 10^{-1} \text{ (л)}$$

Сравнивая значения  $V$  и  $*V$  видим, что «утверждение о двух молекулах» справедливо для верхней границы спокойного дыхательного объёма. Однако для большей надежности лучше говорить не о двух –трех, а об одной возвратной молекуле воздуха.

## Роль математики в химии



Рассмотрено 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.



$$\Delta R/R = [1/(1-AB)] \Delta A/A$$
$$f_0 = 1/2 \sigma R_c C$$
$$P = \frac{h}{\lambda} \quad L = -mc^2 \sqrt{1-v^2/c^2}$$
$$\frac{dP}{dt}$$
$$6^3 = 3^3 + 4^3 + 5^3$$
$$BW = 1/2 \sigma$$
$$G = R_a/R_c$$
$$RC = 1/2 \sigma$$
$$\sqrt{1-v^2/c^2} = 1$$
$$K_u = g_n X_c$$
$$P = \sum \frac{m_i \vec{v}_i}{\sqrt{1-v_i^2/c^2}}$$
$$y = \ln(x) + \sin v$$
$$\vec{P} = \frac{h}{2\pi} \vec{k} = \hbar \vec{k}$$
$$X^2 + Y^2 = 3\alpha xy$$
$$y = L - P$$
$$P = \sum m_i \vec{v}_i$$
$$X_p + d_p = 3\sigma x$$
$$\lambda = \Gamma - 6$$

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.

**Спасибо  
за  
внимание!!!**

