Первая часть

Математика разрабатывает новые подходы, которые позволяют проникнуть в суть или решить проблемы химии, развивает новые химические теории. В книге Вадима Владимировича Ерёмина, профессора химического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова, доктора физико-математических наук, «Математика в химии» (М.: МЦНМО, 2011) говориться об ограничениях, накладываемых на математические уравнения химией. Для того, чтобы углубить свои знания по химии, необходимо хорошо понимать математику. А эта книга на элементарных примерах помогает увидеть связь между двумя науками. Она предназначена для людей разного возраста, стремящихся пополнить свои знания о точных науках.

Цель моей работы состояла в изучениисвязихимиииматематики*.*

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 сохранение 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.

У химии вместо своих собственных законов и теорий есть колоссальное многообразие изучаемых объектов: одних только индивидуальных веществ в химии охарактеризовано около 60 миллионов (не считая многочисленных смесей). А ведь есть ещё химические реакции между веществами... Лишь очень небольшая доля известных химии веществ (всего несколько процентов) имеется в природе, остальные вещества – продукты деятельности человека. Выдающийся американский химик Роальд Хоффман считает, что химики отличаются от других учёных тем, что собственноручно творят те объекты, которые потом воспринимают и изучают. Другие естественные науки изучают природные объекты, а химия – главным образом то, что сделала сама.

Химикам присущ характерный только для них, уникальный, взгляд на окружающий мир, они «чувствуют вещество». Современные учённые умеют работать даже с отдельными атомами и молекулами. Первостепенные задачи химии – поиск новых веществ, обладающих полезными свойствами, катализаторов, лекарственных средств, строительных материалов, аккумуляторов энергии.

*«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.

Остановимся подробнее на применении математики в химии.

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 *CxHy* (A(C) = 12 г/моль; А(Н) = 1 г/моль). Молекулярную массу 16 имеет единственный углеводород, первый член гомологического ряда алканов – метан (*CH4*), поэтому только одно решение данного уравнения обладает химическим смыслом: x=1, y=4.

**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.

**Задача.** Смесь азота и водорода в соотношении 1:3 нагрели до установления равновесия. Рассчитайте, какая доля исходных веществ превратилась в аммиак, если константа равновесия при конечной температуре смеси и давлении 100 атм. равна 5∙10-6.

**Решение:** Запишем уравнения реакции: *N2+3H2=2NH3.* Составим таблицу, в которой указаны количества веществ до взаимодействия, количество вступивших в реакцию, и образовавшихся в ходе нее. Пусть *х* – доля прореагировавшего азота. Тогда неизвестное *х* можно определить из уравнения, выражающего константу равновесия через давления, находящихся в смеси:

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Количество веществ (моль) | *N2* | *H2* | *NH3* | Всего |
| Исходный состав | 1 | 3 | 0 | 4 |
| Вступило в реакцию | x | 3x | 2x |  |
| Конечный (равновесный) состав | 1-x | 3-3x | 2x | 4-2x |



При р=100 атм. данное уравнение четвертой степени относительно *х* имеет 4 действительных корня:

х1= -0.187; х2 = 0,120;х3=1,880;  х4=2,187.

Условию положительности концентраций удовлетворяет только *х*2 (только один корень обладает химическим смыслом). Выход реакции, то есть доля прореагировавших веществ, составил – 12%.

**Пример 3**

*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 *е* в расчетах округляют до 3,14 и 2,72 соответственно).

**Пример 4**

*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 1080, на Земле – 1050, а в человеческом организме на четыре порядка больше, чем значение постоянной Авогадро (6,02∙1023 частиц/моль) – 1027.

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