

ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА

УДК 519.547

ТЕОРЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Хрусталеv А.Ф.

Севастопольский национальный технический университет

Студгородок г. Севастополь, Украина, 99053

E-mail: root@sevgtu.sebastopol.ua

С использованием математических понятий приводятся чёткие формулировки законов Гей-Люссака и кратных отношений, а также некоторых химических закономерностей в виде теорем с демонстрацией их эффективности при решении соответствующих задач.

Если говорить о познании, то наше время характеризуется проникновением математического образа мышления во все сферы знания.

Уже давно стали классическими такие научные и учебные дисциплины как математическая физика и математическая статистика. В XX веке появилось множество новых названий: математическая экономика, математическая лингвистика, математическая психология.. И какую бы науку ни взять, теперь вряд ли кому-нибудь покажется невозможным присоединение к её наименованию эпитета математическая.

Постепенно входит в жизнь и словосочетание математическая химия [1]. И это не удивительно. Ведь математика уже и сегодня применяется не только как средство решения задач, но и, что ещё важнее, как способ формулирования химических законов и закономерностей.

В литературе по химии можно встретить такую формулировку закона Гей-Люссака: “Объёмы вступающих в реакцию газов при одинаковых условиях относятся друг к другу и к объёмам образующихся газообразных соединений как простые целые числа”. Однако, например, при сгорании одного объёма бутана C_4H_{10} образуется четыре объёма оксида углерода CO_2 : $C_4H_{10} \rightarrow 4CO_2$, но ни одно из чисел, входящих в отношение 1 : 4, не является простым: 1 и 4 – это взаимно простые натуральные числа (напомним, что 1 –

это и не простое и не составное число). Поэтому для правильной формулировки этого закона слова “простые целые” следует заменить на “взаимно простые”.

В различных химических изданиях закон кратных отношений формулируется в виде: “Если два элемента образуют между собой несколько соединений, то весовые количества одного элемента, соединяющиеся с одним и тем же весовым количеством другого, относятся между собой как небольшие целые числа”. Но рассмотрим два углеводорода C_nH_{2n} и C_nH_{2n+2} , в которых натуральное число n может быть и большим, а тогда и члены отношений $2n : (2n + 2) = n : (n + 1)$ будут большими. По этой причине и в формулировке закона кратных отношений слова “небольшие целые” лучше заменить на “взаимно простые” [2].

Многие закономерности химии могут быть четко сформулированы в виде теорем.

Теорема 1. Если углеводород – алкан, то массовая доля углерода в нем меньше массовой доли углерода в этилене.

Действительно, записав формулу алкана в виде C_xH_{2x+2} , получим $a_c x / (a_c x + a_H (2x + 2)) < a_c x / (a_c x + 2a_H x) = a_c / (a_c + 2a_H)$, где a_c и a_H – относительные атомные массы элементов С и Н, левая часть неравенства равна массовой доле углерода в алкане, а правая – в этилене.

Справедлива и

Теорема 2. Если массовая доля углерода в углеводороде меньше массовой доли углерода ($\approx 85.7\%$) в этилене, то углеводород – алкан.

Обе формулировки можно объединить в одну:

Теорема 3. Углеводород – алкан, тогда и только тогда, когда массовая доля углерода в углеводороде меньше массовой доли углерода в этилене.

Формулировки теорем 1 – 3 основаны на сравнении массовых долей углерода в углеводороде и этилене. Очевидно, справедлив и аналог теоремы 3, в которой сравниваются массовые доли водорода. И так,

Теорема 4. Для того, чтобы углеводород был алканом, необходимо и достаточно, чтобы массовая доля водорода в углеводороде была бы больше массовой доли водорода в этилене.

Задача. Какова простейшая и молекулярная формула газообразного углеводорода если массовая доля углерода равна 81,82% и водорода – 18,18%, а 10^{-3} м^3 этого углеводорода (н.у.) имеют массу $2,6 \cdot 10^{-3} \text{ кг}$? [3, с. 49].

Сначала будем решать эту задачу в указанной ниже последовательности в предположении, что все данные точные, предположении естественном для математики, но не всегда приемлемом на практике:

1. Количество вещества углеводорода объемом $10^{-3} \text{ м}^3 = 1 \text{ л}$ (н.у.) равно $1 \text{ л} : 22,4 \text{ л/моль} = 0,0446 \text{ моль}$.

2. Так как $2,6 \cdot 10^{-3}$ кг = 2,6 г, то молярная масса углеводорода будет 2,6 г : 0,0446 моль = 58 г/моль, т.е. относительная молекулярная масса его 58.

3. Количество атомов углерода и водорода в молекуле углеводорода соответственно будет $n(C) \approx 58 \cdot 0,8182/12 \approx 3,95$, т.е. $n(C) = 4$, $n(H) = 58 - 12 \cdot 4 = 10$.

Итак, C_4H_{10} — молекулярная формула углеводорода (C_2H_5 — простейшая формула).

Этот вывод неверный, хотя он и совпадает с ответом, приведённым в книге. Дело в том, что в условии задачи величина $10^{-3} \text{ м}^3 = 1 \text{ л}$ содержит всего одну значащую цифру, равную 1, да и ту малозначащую. По этому поводу в [4, с. 379] сказано: “Есть основания не считать значащей цифрой единицу, если она является цифрой старшего разряда приближённого числа, то есть первой слева его цифрой ... Принимая это правило, мы должны, например, число 12,47 считать имеющим не 4, а только 3 значащие цифры”.

Это означает, что самую большую относительную погрешность имеет приближённое число, содержащее одну значащую цифру, когда она равна 1, например, 0,1; 0,01; 0,001 и т. д., да сама 1, как в рассматриваемой задаче. Между тем именно такие числа часто встречаются в формулировках задач. Грубо говоря, эти числа не содержат ни одной значащей цифры!

Именно поэтому найденный выше результат $M_r = 58$ не заслуживает никакого доверия. Ведь “Сколько бы ни было точно математическое решение, оно не может быть точнее тех приближённых предпосылок, на коих оно основано” (А.Н. Крылов).

Самое точное данное рассматриваемой задачи 81,82% имеет четыре значащие цифры, а потому решая задачу, исходя только из этого значения (остальные количественные данные исключаются), получим практически достоверный ответ. Для такого решения воспользуемся теоремой 3.

Учитывая, что массовая доля углерода в этилене составляет 85,7% и $81,82\% < 85,7\%$, на основании теоремы заключаем, что углеводород о котором идёт речь в задаче — алкан. Поэтому его формула имеет вид C_xH_{2x+2} . Теперь для определения x составим уравнение $(12,011x + 1,0080(2x + 2)) \cdot 0,8182 = 12,011x$, из которого получаем $x \approx 3,087$, и так как x — число натуральное, $x = 3$. Следовательно, C_3H_8 — молекулярная формула углеводорода которая совпадает с его простейшей формулой

С целью контроля проверим оба результата C_4H_{10} и C_3H_8 , для чего рассмотрим вспомогательную задачу, обратную данной.

Последняя составляется так, что в её условие включается ответ к исходной задаче, а одно или несколько имеющих высокую точность данных исходной задачи объявляются новыми неизвестными. Если в

результате решения обратной задачи новые неизвестные практически совпадут с соответствующими значениями, которые даны в условии исходной задачи, то приходим к выводу, что задача решена правильно.

В условии нашей задачи самую высокую относительную точность имеет массовая доля углерода 0,8182, содержащая четыре значащие цифры. Итак, пусть C_4H_{10} – формула углеводорода. Тогда массовая доля углерода, формально найденная на основе целочисленных значений атомных масс, будет 0,8276; с помощью табличных значений относительных атомных масс ($a_c = 12,011$, а $a_H = 1,0080$) 0,8266. Оба эти числа довольно сильно отличаются от массовой доли 0,8182, содержащейся в условии исходной задачи. Значит, первый ответ (совпадающий с ответом из книги) должен быть отвергнут. Уже отсюда следует, что проверка ответа – это необходимая составная часть решения задачи.

Что касается второго ответа, то массовая доля углерода в углеводороде C_3H_8 (при целочисленных значениях относительных атомных масс элементов) полностью совпадает с соответствующим значением в условии задачи: $(36/44) \cdot 100\% = 81,82\%$.

Конечно, некорректно на основании целочисленных значений относительных атомных масс записывать результат в виде, как если бы в нём содержались четыре значащие цифры. В таких случаях следует, как и выше, пользоваться табличными значениями (тогда массовая доля углерода будет 81,71%). Значит, C_3H_8 – молекулярная формула углеводорода.

Теперь укажем, что в химической литературе встречается утверждение: для вывода молекулярной формулы вещества обязательно нужно знать его относительную молекулярную массу.

Однако, решая только что рассмотренную задачу, мы исключили из её условия как раз информацию, на основе которой непосредственно определяется относительная молекулярная масса углеводорода и тем не менее вывели его молекулярную формулу. Уже это означает, что указанное выше утверждение некорректно.

Оно может быть правильно сформулировано как

Теорема 5. Если с достаточной точностью известна относительная молекулярная масса вещества, то по его простейшей формуле молекулярная формула определяется однозначно.

Сформулируем ещё очевидное утверждение.

Теорема 6. Углеводород с простейшей формулой C_pH_q – алкан (C_nH_{2n+2}) в том и только в том случае, если натуральное число n есть корень уравнения $(2n+2)/n = q/p$.

Задача. 8,6 г углеводорода были сожжены и в результате получено 12,6 г воды. На основании этого выведите молекулярную формулу углеводорода.

Если записать формулу углеводорода как C_xH_y и неполное уравнение реакции $2 C_x H_y \rightarrow yH_2O$, то получим: $y : 2 = (12,6/18) : [8,6/(12x + y)]$ или $x : y = 3 : 7$, т.е. C_3H_7 – простейшая формула. На основании теоремы 6 из уравнения $(2n+2)/n = 7/3$ находим натуральное число $n = 6$. Значит, C_6H_{14} – молекулярная формула углеводорода

Если простейшая формула углеводорода – C_3H_4 , то на основании той же теоремы из уравнения $(2n+2)/n = 4/3$ получаем не натуральное число $n = -3$. Это значит, что углеводород – не алкан.

Если простейшая формула углеводорода – CH_2 , то на основании теоремы 6 из уравнения $(2n+2)/n = 2/1$ имеем $2n+2 = 2n$ или $2 = 0$, т.е. указанное уравнение решения не имеет. Значит и натуральное число n не является корнем этого уравнения. По той же теореме заключаем, что рассматриваемый углеводород – не алкан.

Укажем на опубликованные в [5] теоремы химической гомологии и в [6] теоремы о производных углеводородов а также на публикацию о пользе химических теорем [7].

Формулирование химических теорем можно продолжить. Однако афоризм Козьмы Пруtkова “Никто не обнимет необъятного” – следует признать правильным. Поэтому мы ограничились рассмотрением только самых простых и полезных теорем.

Библиографический список

1. Кузьменко Н.Е. Вас приглашает химический факультет МГУ / Н.Е. Кузьменко В.В. Еремин // Химия и жизнь. — 1995. — № 1. — С. 84–85.
2. Хрусталеv А.Ф. И химику нужна математика / А.Ф. Хрусталеv // Химия и жизнь: XXI век. — 1996. — № 1 (пилотный). — С. 78.
3. Романцева Л.М. Сборник задач и упражнений по общей химии / Л.М. Романцева, З.Л. Лещинская, В.А. Суханова — М.: Высш. шк., 1991. — 288 с.
4. Энциклопедия элементарной математики. Т. 1. — М.;Л.: ГИТТЛ, 1951. — 448 с.
5. Хрусталеv А.Ф. Теоремы гомологии / А.Ф. Хрусталеv // Химия и жизнь. — 1982. — № 5. — С. 72.
6. Хрусталеv А.Ф. Теоремы о производных / А.Ф. Хрусталеv // Химия и жизнь. — 1992. — № 3. — С. 75.
7. Хрусталеv А.Ф. О пользе теорем / А.Ф. Хрусталеv // Химия и жизнь. — 1983. — № 3. — С. 76.

Поступила в редакцию 29.01.2002 г.