

УДК 519.547

К.А. Веселков, А.Ф. Хрусталеv

Севастопольский национальный технический университет

Студгородок, г. Севастополь, Украина, 99053

e-mail: root@sevgtu.sebastopol.ua

НЕКОТОРЫЕ ТЕОРЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Приводятся формулировки и доказательства некоторых математических теорем химии углеводов и их галогенопроизводных с демонстрацией эффективности при решении конкретных задач.

В наше время математика проникла во все области знаний, с ее помощью формулируются законы и закономерности других наук, в частности, химии. Так, простейшую формулу химического соединения можно определить в таком виде, где индексы при элементах являются взаимно простыми числами, при этом химические утверждения могут быть сформулированы с помощью теорем.

Теорема 1: Если C_pH_q (p и q – взаимно простые числа) – простейшая формула углеводорода, и натуральное число k есть корень уравнения: $qk = 2 \cdot pk + 2$ (1), то молекулярная формула этого углеводорода может быть представлена в виде $C_{kp}H_{kq}$.

Действительно существует углеводород, молекулярная формула которого $C_{kp}H_{2kp+2}$, и этот углеводород – алкан, что непосредственно следует из определения (при $p=pk$): "...алканами называются соединения, состав которых выражается общей формулой C_nH_{2n+2} , где n – число атомов углерода" [1, с.347]. Так как k из уравнения (1) определяется однозначно, то $C_{kp}H_{kq}$ – единственная молекулярная формула, удовлетворяющая условию теоремы.

Теорема 2: Если $C_pH_q\Gamma_s$ ($p \geq 1$; $q \geq 0$, $s \geq 1$, Γ – галоген) – простейшая формула галогенпроизводного углеводорода и натуральное число k есть корень уравнения:

$$qk + sk = 2pk + 2, \quad (2)$$

то $C_{pk}H_{qk}\Gamma_{sk}$ – молекулярная формула этого производного.

Из формулы $C_{pk}H_{qk}\Gamma_{sk}$ следует, что это соединение является галогенпроизводным углеводорода $C_{pk}H_{qk+sk}$ (3), индексы при С и Н которого связаны уравнением (2), имеющим только один корень k , поэтому $C_{pk}H_{qk}\Gamma_{sk}$ – единственная молекулярная формула, определяемая теоремой 2.

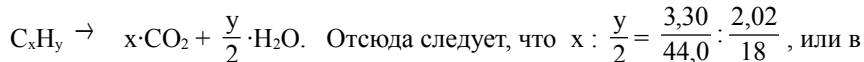
Рассмотрим примеры применения теорем 1 и 2 при решении некоторых химических задач.

Задача 1. При определении формулы углеводорода была найдена простейшая формула C_2H_5 . Найдите молекулярную формулу этого углеводорода, если известно, что его относительная молекулярная масса равна 58 [2, с.22].

Решение. В соответствии с теоремой 1 составим кратную формулу $C_{pk}H_{qk} = C_{2k}H_{5k}$. Для определения неизвестного k запишем уравнение: $qk = 2 \cdot pk + 2$ при $q=5$ и $p=2$, то есть $5k = 2 \cdot 2k + 2$, единственным решением которого будет натуральное число $k=2$. Записав молекулярную формулу углеводорода C_4H_{10} , мы находим, что его относительная молекулярная масса $M_r=58$, информация о которой, как лишняя, может быть из задачи исключена.

Задача 2. При сжигании некоторого количества газообразного углеводорода получено 3,30г CO_2 и 2,02г H_2O . Плотность углеводорода по отношению к воздуху равна 1,035. Составить его структурную формулу. К какому гомологическому ряду он относится? [2,с.212].

Решение. Исключив из условия задачи информацию о том, что “плотность углеводорода по отношению к воздуху равна 1,035” и записав формулу сжигаемого углеводорода в виде C_xH_y , составим неполное уравнение реакции его горения:



наименьших целых числах $x : y = 1 : 3$. Следовательно, CH_3 - простейшая формула углеводорода, а C_kH_{3k} - кратная ей. В соответствии с теоремой 1, имеем уравнение: $3k=2k+2$, решение которого $k=2$. Следовательно, C_2H_6 - молекулярная формула сжигаемого углеводорода, а $CH_3 - CH_3$ - его структурная формула. Этот углеводород относится к гомологическому ряду алканов.

Задача3. Фторпроизводное предельного углеводорода имеет плотность по отношению к воздуху 33. Процентный состав данного соединения следующий: 36,36% C и 57,57% F. Определить молекулярную формулу соединения [3, с.293].

$$\text{Решение. } n(C) : n(H) : n(F) = \frac{36,36}{12,0} : \frac{100 - 36,36 - 57,57}{1,01} : \frac{57,57}{19,0} \text{ или в}$$

наименьших целых числах $n(C) : n(H) : n(F) = 1:2:1$. Простейшая формула этого соединения CH_2F и $C_kH_{2k}F_k$ - кратная ей. Теперь в соответствии с теоремой 2 запишем уравнение $2k+k=2k+2$, единственное решение которого $k=2$. Следовательно, $C_2H_4F_2$ - молекулярная формула искомого соединения.

Теорема 3: Если массовая доля углерода в галогенпроизводном углеводороде C_xG_z (не содержащем водород) меньше массовой доли углерода в соединении с простейшей формулой CG_2 , то C_xG_z – производное алкана.

Действительно, полностью замещенное галогенопроизводное алкана имеет общую формулу C_nG_{2n+2} и характеризуется тем, что с n атомами углерода в такой молекуле связано максимальное число атомов галогена, равное $2n+2$. Очевидно, с n атомами углерода в молекуле полностью замещенного галогенпроизводного углеводорода может быть связано число атомов галогена меньше $(2n+2)$, но обязательно четное.

Теоретически формулу любого производного C_nG_{2m} можно получить из соединения C_nG_{2n+2} , путем отщепления четного числа $(2, 4, \dots)$ атомов галогена. Но если из соединения C_nG_{2n+2} отщепить 2 атома галогена, то формула примет вид C_nG_{2n} и массовая доля углерода в соединении C_nG_{2n+2} , очевидно, будет меньше, чем в C_nG_{2n} или, что тоже самое, в соединении с простейшей формулой CG_2 , поскольку указанная доля не зависит от n . Это утверждение справедливо для любого соединения C_nG_{2m} , что является доказательством теоремы 3. Учитывая, что сумма массовых долей углерода и галогена галогенпроизводного равна 1, из теоремы 3 следует

Теорема 4: Если массовая доля галогена в галогенпроизводном углеводороде C_xG_z больше массовой доли галогена в соединении с простейшей формулой CG_2 , то C_xG_z – производное алкана.

Рассмотрим пример применения теорем 3 и 4.

Хлорпроизводное предельного углеводорода имеет относительную молекулярную массу 237. Массовый состав этого соединения: Cl-89.9%, C-10.1%. Найдите его молекулярную формулу [4, с. 78].

Решение. Исключим из условия данной задачи сведения о том, что относительная молекулярная масса хлорпроизводного равна 237 и углеводород, о котором идет речь - предельный. Тогда на основании исходных данных приходим к выводу, что производное состоит из углерода и хлора, т.к. $89.9\% + 10.1\% = 100\%$. Поскольку массовая доля углерода с простейшей формулой CCl_2 равна $12/83 \approx 0.145$ и $0.101 < 0.145$, то по теореме 3 получаем, что искомое соединение - производное алкана, формула которого C_xCl_{2x+2} . Теперь для определения x достаточно составить уравнение $[12x + 35.5(2x+2)] \cdot 0.101 = 12x$. Откуда $x=2$ и C_2Cl_6 - молекулярная формула производного.

Если воспользоваться теоремой 4, получим тот же результат. Очевидно, для углеводородов имеют место утверждения, аналогичные теоремам 3 и 4 [6, с.96].

Теорема 5: Если массовая доля углерода в углеводороде меньше массовой доли углерода (85.7%) в этилене, то углеводород - алкан.

Теорема 6: Если массовая водорода в углеводороде больше массовой доли водорода в этилене, то углеводород – алкан.

В качестве примера применения теоремы 5 рассмотрим следующую задачу.

Углеводород содержит 81, 82% углерода. Масса 1л этого углеводорода составляет 1.964 г. Найдите молекулярную формулу углеводорода, составьте его структурную формулу и назовите [5, с.23].

Решение. Учитывая, что массовая доля углерода в этилене $85,7\% > 81,82\%$, на основании теоремы 5 заключаем, что углеводород – алкан. Запишем его формулу в виде C_xH_{2x+2} и для определения x составим уравнение $(12x + (2x+2) \cdot 1.01) \cdot 0.8182 = 12x$, откуда получаем $x=3$.

Следовательно, C_3H_8 – молекулярная формула углеводорода, его структурная формула $CH_3-CH_2-CH_3$, а сам углеводород – пропан. Отметим, что в этом решении не используется информация о массе 1л углеводорода и оно по числу исходных данных – оптимально.

В заключение подчеркнем, что во многих случаях необходимые данные для химических задач получают опытным путем, при этом на проведение химических реакций затрачиваются средства и время. Предложенные здесь теоремы позволяют оптимизировать условия задач, использовать для их решения меньшее количество экспериментальных данных.

Библиографический список

1. Хомченко Г.П. Пособие по химии для поступающих в вузы / Г.П. Хомченко. — М.: Новая волна, 2002. — 480 с.
2. Абкин Г.Л. Задачи и упражнения по общей химии / Г.Л. Абкин. — М.: Высш. шк., 1971. — 264 с.
3. Оганесян Э.Т. Руководство по химии поступающим в вузы / Э.Т. Оганесян. — М.: Высш. шк., 1987. — 399 с.
4. Хрусталеv А.Ф. И химику нужна математика / А.Ф. Хрусталеv // Химия и жизнь, XXI век. — 1996. — №1. — С. 78.
5. Рудзитис Г.Е. Химия. Органическая химия / Г.Е.Рудзитис, Ф.Г. Фельдман. — М.: Просвещение, 1993. — 223 с.
6. Хрусталеv А.Ф. Теоремы математической химии / А.Ф.Хрусталеv // Вестн. СевГУ. Сер. Физика и математика: Сб. науч. тр. — Севастополь, 2003. — Вып. 43. — С. 96 – 100.

Поступила в редакцию 20.07.2003 г.