«Математика в химии»

Выполнили:

ученицы 11 А класса

Школы №59

Феоктистова София,

Коновалова Мария

Учитель химии: Бичевая Вера Васильевна,

учитель математики: Полянская Лариса Николаевна.

Цели и задачи

- определить математические методы решения химических задач;
- научиться решать химические задачи математическим способом;
- показать задачи разного уровня сложности

Посредством уравнений, теорем
Он уйму всяких разрешал проблем…
Д.Чосер,XIVв.

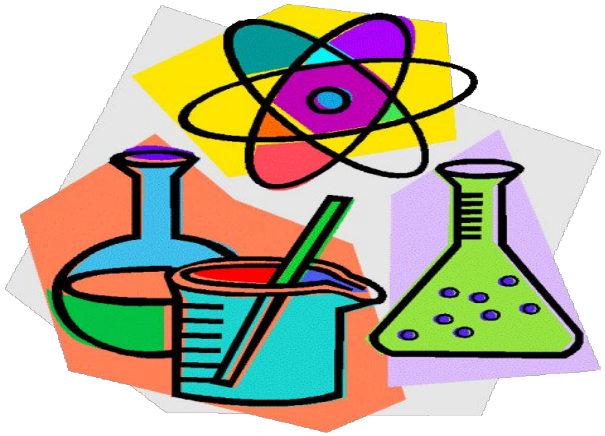
Введение

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 также их зависимость от свойств атомов и структуры молекул.

В отличие от чисто математических наук, в математической химии исследуются химические задачи и проблемы методами современной математики.

Среди задач по химии, предлагаемых учащимся на олимпиадах, а выпускникам на вступительных экзаменах встречаются такие расчетные задачи, для решения которых необходимо владеть определенными логическими приемами. Практически все эти задачи требуют введения одного или нескольких неизвестных, составления уравнения, либо системы уравнений и его решения.

На уроках химии и математики учителя предлагают нам проявлять творчество и решать задачи удобными для себя способами.



История

Первая попытка по математизации химии была сделана М.В. Ломономовым. Его рукопись Elementa Chimiae Mathematicae («Элементы математической химии», на латыни), была найдена после смерти среди его бумаг. Книга была ориентировочно написана в сентябре 1741 года. Видимо, Ломоносов, вдохновленный работой Principia И. Ньютона , намеревался написать подобный химический трактат, в котором он хотел изложить все существующее на тот момент химическое знание в аксиоматической манере.

Интересный факт

Интересную связь математики и химии можно продемонстрировать на интересном примере формулы идеальной чашки чая:

ЧП + H_2O (100 °С, 2 мин. ВЗ) + М (10 мл, 6 мин. ВЗ) = = ИЧ (60 °С).

ЧП – ***это чайный пакетик*, ВЗ** – ***время заварки*, М** – ***молоко*,**

ИЧ – ***идеальный чай*.**

Школьная химия отличается от школьной физики меньшим количеством формул. Несколько из них связаны с расчетами количества вещества n , измеряемого в молях :

$$n = \frac{m}{M} = \frac{N}{N_A} = \frac{V}{V_m}$$

Где m – масса (г); M – молярная масса (г/Моль); V – объем ($м^3$); Vм – молярный объем ($м^3$,/Моль) ; N - количество частиц (молекул, атомов, электронов и т. д.) ; Na – число Авогадро ($6{,}02 \cdot 10^{23}$).

$$C_M = \frac{\nu}{V}$$

Где См – молярная концентрация (л/Моль)

Существует 3 формулы, связанные с расчетом массовой доли

1)Массовая : $\omega = m_ч / m$ (см)

Где $m_ч$ - масса частная или чистая (индивидуального вещества в смеси или элемента в веществе); m (см) - масса общая или смеси.

2)Объемная : $\varphi = V_ч / V$(см)

Где Vч – объем частный, V(см) - объем общий.

3) Мольная : $X = \upsilon_ч / \upsilon_{об}$

Где $\upsilon_ч$ - частное количество вещества, $\upsilon_{об}$ - общее.

Все три вида можно выражать в процентах (%). Для перевода в проценты значение доли от единицы надо умножить на 100. Если обратная операция, то разделить на 100. Где $m_ч$ - масса частная или чистая (индивидуального вещества в смеси или элемента в веществе); m (см) - масса общая или смеси.

К описанным формулам следует добавить уравнение, необходимое для расчета количества электричества:

$$Q = I\,t$$

Где I – сила тока (Ампер) и t – время (сек).

И уравнение для расчета плотности (*p):*

$$P = m / V\,.$$

При использовании уравнений необходимо все значения подставлять в величинах, используемых в рамках одной системы единиц (система СИ).

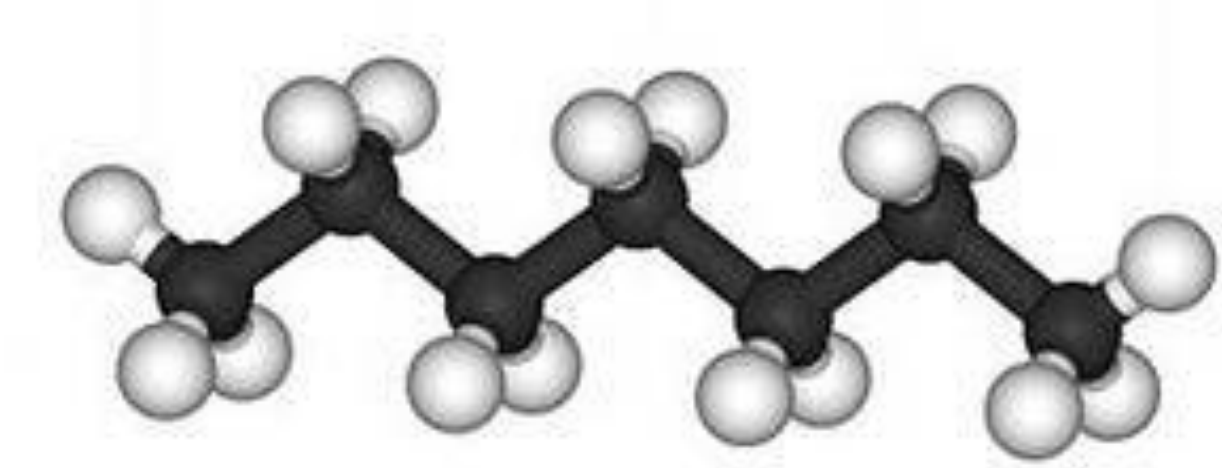
Основные единицы СИ и измеряемые ими величины

Наименование единицы	Обозначение		Измеряемая величина
	международное	русское	
Килограмм	*kg*	*кг*	Масса
Метр	*m*	*м*	Длина
Секунда	*s*	*с*	Время
Ампер	*A*	*А*	Сила электрического тока
Кельвин	K	K	Термодинамическая температура*
Моль	*mol*	*моль*	Количество вещества

Килограмм на моль	kg/mol	кг/моль	Молярная масса вещества
Кубический метр	m^3	$м^3$	Объем, вместимость
Кубический метр в секунду	m^3/s	$м^3/с$	Объемный расход
Кубический метр на килограмм	m^3/kg	$м^3/кг$	Удельный объем
Кубический метр на моль	m^3/mol	$м^3/моль$	Молярный объем вещества
Моль в секунду на кубический метр	$mol/(s \times m^3)$	$моль/(с \times м^3)$	Скорость химической реакции
Моль на килограмм	mol/kg	моль/кг	Молярность раствора компонента
Моль на кубический метр	mol/m^3	$моль/м^3$	Молярная концентрация компонента

Метод двух неизвестных

Задача №1. Определить формулу углеводорода, если его молярная масса равна 96.



Решение.

Любой углеводород имеет общую формулу Cx Hy. Составим выражение для молярной массы данного углеводорода 12x+ y = 96. Выразим y через x. Единственно верное число атомов углерода равно 7. Так как при значении x=8 на углерод (8*12=96) придется вся масса углеводорода. При значениях x=6, y=24мы получим недействительную пару корней уравнения, в связи с тем, что 6 атомов углерода в углеводороде могут связать только 14 атомов водорода (C_nH_{2n+2}). Следовательно, единственно возможный вариант C_7H_{12}.

Ответ: C_7H_{12}.

Задача №2. Определите формулу соединения, если известно, что массовая доля металла составляет 28%, серы 24%, кислорода 48%.

Решение.

Определим соотношение между серой и кислородом. В 100 г вещества $n(S)= 24:32=0,75$, а $n(O)= 48:16=3$. Значит на 1 атом серы приходится 4 атома кислорода. Вероятнее всего, что искомая соль сульфат. Приняв валентность металла за x, запишем общую формулу сульфата: $Me_2(SO_4)_x$. Обозначив молярную массу металла за y, получим: $28:2y=(24+48):96x$. Упростим и выразим y через x: $y=18,67x$. При значении $x=3$ получаем $y=56$. Значит формула соединения $Fe_2(SO_4)_3$.

Ответ: $Fe_2(SO_4)_3$.

Расчет состава смесей по уравнениям химических реакций

Задача.

В результате полного восстановления 30,4 г смеси монооксида железа FeO и триоксида Fe_2O_3 избытком CO было получено 11,2 л (н. у.) углекислого газа. Определите массовую долю монооксида железа в смеси.

Решение. Я приведу простой способ решения данной задачи, т. к. он связан с более легкими расчетами. Но надо отметить, что способов существует несколько.

В данном способе решения количество продуктов выражаем двумя неизвестными, например, y_1 и y_2.

$$\overset{x\text{г}}{1)\ FeO} + CO \square \overset{y_1}{Fe} + CO_2$$

1 Моль 1Моль

$$\overset{(30,4 - x)\text{г}}{2)\ Fe_2O_3} + 3CO \square \overset{y_2}{2Fe} + 3CO_2$$

1Моль 3Моль

Нам известно, что $y_1+y_2=0,5$ Моль (11,2 л). Молярные массы FeO и Fe_2O_3 равны 72г/Моль и 160 г/Моль соответственно. Из пропорций выразим y_1 и y_2, подставив полученные значения в предыдущее уравнение, получим: $x:72+3(30,4 - x):160 = 0,5$. Решив это уравнение получим $x=14,4$. Таким образом, массовая доля монооксида железа будет равна ω (FeO) = 14,4/ 30,4=0,4737 или 47,37 %.

Ответ: ω (FeO) = 47,37 %.

Метод вычитания масс

Задача.

Медную пластину опустили в раствор трихлорида золота. Через некоторое время ее вынули, высушили и взвесили. Оказалось, что масса пластины увеличилась на 0,02 г. Определите массу золота, осевшего на пластине.

Решение.

Наиболее простым способом решения данной задачи является метод вычитания масс:

m(Cu) m (Au)

$2AuCl_3 + 3Cu \rightarrow 3\ CuCl_2 + 2Au$

3*64 2*197

В случае выделения 394г золота масса пластины увеличилась бы на 394-192=202 г

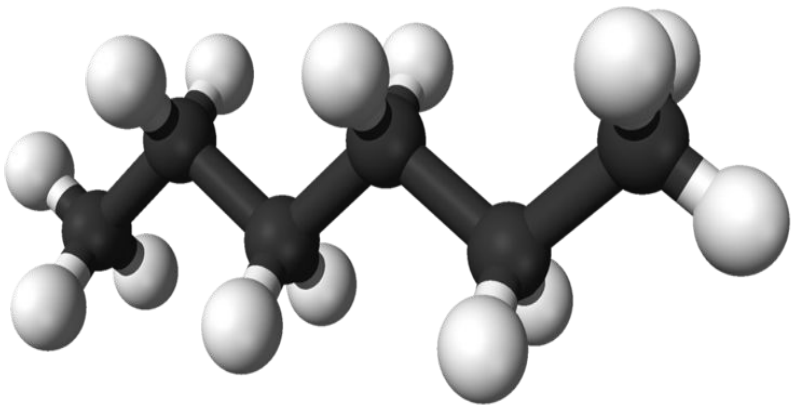
xг 2,02

x = 3,94 г.

Ответ: 3,94 г.

Метод молекулярной формулы

Молекулярная формула углеводорода заданного (известного) гомологического ряда однозначно определяется его относительной молекулярной массой.



Задача.

При сгорании алкана массой 5 г образовалось 15,35 г углекислого газа и 7,33 г воды. Найдите формулу вещества, если плотность его паров по водороду составляет 43.

Решение.

Этот способ решения задачи методом молекулярной формулы является наиболее легким и коротким.

Найдем формулу алкана , если плотность его паров по водороду составляет 43.

Записав общую формулу алкана в виде C_xH_{2x+2},находим x из уравнения:

$$12x+2x+2=86$$

$$x=6$$

Формула вещества C_6H_{14}.

Ответ : C_6H_{14}.

Заключение

При решении задач на уроках химии необходимы математические умения. К ним относятся использование и выведение формул, составление и решения пропорций.

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 результатов, способствующих обогащению обеих наук.

Спасибо за внимание! ☺️