



УДК 51(091)

## МАТЕМАТИЧНА ХІМІЯ

Студ. М.Е. Попова, гр. БХФск-16

Науковий керівник доц. О.Б. Нестеренко

Київський національний університет технологій та дизайну

**Мета і завдання.** Мета: Розкрити особливості та тенденції інтеграції наук математики та хімії на основі тісного взаємозв'язку математичного і хімічного знання.

Завдання: Висвітлити можливості використання математичного апарату при вирішенні різних хімічних задач.

**Об'єкт дослідження.** Роль математики як найважливішого інструменту хімічної науки.

**Методи та засоби дослідження.** Огляд та аналіз літературних джерел для визначення ролі математичних методів розв'язання проблем і задач хімії.

**Наукова новизна та практичне значення отриманих результатів.** Висвітлено застосування математичних методів та розвиток нових математичних підходів, які дозволяють проникнути в суть або вирішити проблеми хімії.

### **Результати дослідження.**

Однією з найхарактерніших особливостей сучасної науки є все більша її математизація. Це показник ступеня розвитку науки, глибини і обґрунтованості її законів, переходу від здогадів до наукового передбачення.

Сучасний хімік – технолог у своїй практичній роботі повсякденно використовує величезний апарат всіх розділів вищої математики. Роль математики як найважливішого інструменту хімії особливо зросла з розвитком фізичної хімії, хімічної термодинаміки і кінематики, теорії розрахунків хімічної апаратури та інших нових галузей хімічної науки.

Математика для хіміків - це, в першу чергу, корисний інструмент розв'язання багатьох хімічних задач. Дуже важко знайти розділ математики, який зовсім не використовується в хімії. Функціональний аналіз і теорія груп широко застосовуються в квантовій хімії, теорія ймовірностей становить основу статистичної термодинаміки, теорія графів використовується в органічній хімії для передбачення властивостей складних органічних молекул, диференціальні рівняння - основний інструмент хімічної кінетики, методи топології і диференціальної геометрії застосовуються в хімічній термодинаміці. Вираз «математична хімія» міцно увійшов в лексику хіміків. Багато статей в серйозних хімічних журналах не містять жодної хімічної формули, зате рясніють математичними рівняннями.

Багато фізичних величин, які використовуються для опису хімічних речовин і реакцій, можуть приймати тільки невід'ємні значення: маса, об'єм, концентрація, швидкість реакції та ін. Хімікам часто доводиться вирішувати завдання на розрахунок складу рівноважної суміші. У них виникають поліноміальні рівняння щодо частки перетворення вихідних речовин у продуктах. Згідно з основною теоремою алгебри поліном  $n$ -го степеня має рівно  $n$  коренів, серед яких можуть бути і комплексні. Однак у всіх рівняннях, що виникають в хімії, лише один корінь має хімічний сенс.

Розстановка коефіцієнтів у рівняннях хімічних реакцій завдає чимало клопоту. Якщо ж до вирішення цієї проблеми застосувати математичні знання і скласти алгоритм, заснований на розв'язанні системи рівнянь, то послідовне його виконання дозволить розставляти коефіцієнти в хімічних рівняннях будь-якої складності.

Наведемо цей алгоритм:

- Позначаємо невідомі коефіцієнти через  $x, y, z, \dots$

- Складаємо рівняння, які визначають кількість атомів кожного хімічного елемента, що входить до складу реагуючих речовин до і після реакції. Для цього перемножимо відповідні коефіцієнти і індекси.
- Вибираємо змінну, яка в отриманій системі приймає найменше значення, і прирівнюємо її до одиниці.
- Обчислюємо значення інших змінних. Якщо хоча б одне з отриманих значень виявиться дробовим, необхідно повернутися до попереднього пункту і збільшити значення обраної змінної на одиницю.

Розрахунок буде закінчений, якщо всі отримані значення коефіцієнтів - цілі числа.

Симетрія – одне з основних понять в сучасній науці і є дуже поширеним явищем в хімії: практично всі відомі молекули або самі мають симетрією якого-небудь роду, або містять симетричні фрагменти. У хімії важче виявити несиметричну молекулу, ніж симетричну.

Хімія вивчає властивості речовин та їх залежність від умов – температури, тиску, концентрації. Тому хімікам доводиться досліджувати функції однієї або кількох змінних. Як відомо, основний спосіб дослідження функції – аналіз її похідної. Деякі закони хімії мають справу з похідними та встановлюють правила, за якими можна розрахувати похідні і знайти шукані функції. У першу чергу це стосується хімічної кінетики – науки про швидкості і механізми хімічних реакцій. Швидкість хімічної реакції показує, наскільки швидко збільшується кількість продуктів реакції і зменшується кількість вихідних речовин (реагентів). Вона зазвичай визначається як похідна від концентрації продуктів по часу.

Теорія стійкості диференціальних рівнянь – одна з тих областей математики, на які хімія справила значний вплив. Багато хімічних реакцій виявляють кінетичну нестійкість. При одних умовах – концентрації і температури вони протікають в стійкому режимі, при інших – переходять у коливальний режим, а в деяких випадках демонструють хаотичну поведінку. Досліджуючи механізми подібних реакцій, хіміки, а за ними і математики дізналися про різноманітну поведінку розв'язків диференціальних рівнянь та їх залежності від параметрів рівняння. Всі нестійкі хімічні реакції включають автокатолітичні стадії. У них продукт реакції сам є каталізатором: чим більше утворюється продукту, тим швидше йде реакція.

Вивчення зв'язку властивостей речовин з їх будовою – одна з основних задач хімії. Ідея про те, що порядок з'єднання атомів має ключове значення для властивостей речовини, лягла в основу вистави молекул за допомогою графів, в яких атоми відіграють роль вершин, а хімічні зв'язки між ними – ребер, що з'єднують вершини. У графічному представленні довжини зв'язків та кути між ними ігноруються.

Основна сфера інтересів - математичне моделювання гіпотетично можливих фізико-хімічних і хімічних явищ і процесів, а також їх залежність від властивостей атомів і структури молекул. Критерієм істини в математичній хімії є математичне доведення, обчислювальний експеримент і порівняння результатів з експериментальними даними. У математичній хімії розробляють нові програми математичних методів в хімії. Історія науки свідчить про те, що на границях різних областей знань можуть відбуватися дуже цікаві події. І, хоча хіміки і математики мислять зовсім по-різному, ті випадки, коли їм вдається взаємодіяти, призводять до появи красивих і нетривіальних результатів і сприяють збагаченню обох наук.

**Висновки.** Висвітлено тісний зв'язок математики і хімії. Математика все ширше впроваджується в хімічну практику — математичний аналіз стає невід'ємним засобом хімічної науки і техніки.

**Ключові слова.** Математика і хімія, математичні методи в задачах хімії, математична хімія.