лаборатории, где создаются рецепты синтеза новых веществ, и в быту, где, например, бывает нужно подобрать подходящий клей или растворитель. Современные креативные химики при изучении химических процессов используют законы математики.

Для описания веществ и реакций используют теории, в которых роль математики настолько велика, что иногда трудно понять, где химия, а где математика. Отсюда следует, что и химия немыслима без математики.

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 составляет основу статистической термодинамики, теория графов используется в органической химии для предсказания свойств сложных органических молекул, дифференциальные уравнения – основной инструмент химической кинетики, методы топологии и дифференциальной геометрии применяются в химической термодинамике. Выражение «математическая химия» прочно вошло в лексикон химиков. Многие статьи в серьезных химических журналах не содержат ни одной химической формулы, зато изобилуют математическими уравнениями.

Приложения математики в химии обширны и разнообразны. Ограниченности объема нашей статьи не позволяет нам показать много примеров, покажем это на двух примерах.

Пример 1. Простое уравнение $12x + y = 16$ в математике описывает прямую линию на плоскости. Оно имеет бесконечно много решений, в том числе и целочисленных. А для химика выражение $12x + y$ описывает молекулярную массу углеводорода CxHy (12 – атомная масса углерода, 1 – водорода). Молекулярную массу 16 имеет единственный углеводород – метан CH4, поэтому только одно решение данного уравнения обладает химическим смыслом: $x = 1$, $y = 4$.

Пример 2.Скорость химической реакции – это изменение количества вещества в единицу времени: для гомогенных процессов – в единице объема, для гетерогенных процессов – на единице поверхности раздела фаз. Математическая запись этого определения может быть записана: в виде

$$\upsilon_r = \pm\frac{dN}{Vdt} \text{ или } \upsilon_r = \pm\frac{dN}{sdt}$$

где N – количество вещества; t – время; V – объем; s – поверхность раздела фаз.

Пример 3. В радиоволновом распад можно использовать дифференциального уравнения. Если N(t) – число не распавшихся частиц, то в соответствии с законом радиоактивного распада скорость распада пропорциональна числу не распавшихся частиц и следовательно можно найти период полураспада ($\tau_{1/2}$), т.е. время, за которое распадается половина вещества, с помощью дифференциального уравнения:

$$\frac{dN}{dt} = -\beta N(\beta > 0) \Rightarrow \frac{dN}{V} = -\beta dt \Rightarrow \ln N = -\beta t + C_1 \Rightarrow N = Ce^{-\beta t};$$

$$N(0) = C = N_0 \Rightarrow N = N_0 e^{-\beta t}.$$

$$\frac{N_0}{2} = N_0 e^{-\beta\tau_{1/2}} \Rightarrow \tau_{1/2} = \frac{1}{\beta}\ln 2.$$

Вот лишь несколько примеров многогранности математике в химии. Они дают определенное, хотя, конечно, неполное представление о задачах, решаемых химиками с помощью математики, и ограничениях, которые химия накладывает на применяемую в ней математику.

Список литературы

1. Кузьмин, С.Ю. Креативность как личностная характеристика студента / С.Ю. Кузьмин // Качество. Инновации. Образование. – 2012. – № 5. – С. 20-26.

2. Химия и жизнь – XXI век, 1997, № 2, с. 5.

АДСОРБЦИЯ ДИОКСИДА СЕРЫ

Савинков И.И., Дейнекин М.А., Антипина С.Г., Матвеева Т.А.

Волжский политехнический институт, филиал Волгоградского государственного технического университета, Волжский, e-mail: podval4eg@mail.ru

Адсорбция – увеличение концентрации растворенного вещества у поверхности раздела двух фаз (твердая фаза-жидкость, конденсированная фаза – газ) вследствие нескомпенсированности сил межмолекулярного взаимодействия на разделе фаз. Адсорбция – всеобщее и повсеместное явление, имеющее место всегда и везде, где есть поверхность раздела между фазами. Наибольшее практическое значение имеет адсорбция поверхностно-активных веществ и адсорбция примесей из газа либо жидкости специальными высокоэффективными адсорбентами. В качестве адсорбентов могут выступать разнообразные материалы с высокой удельной поверхностью: пористый углерод (наиболее распространённая форма – активированный уголь), силикагели, цеолиты, а также некоторые другие группы природных минералов и синтетических веществ.

Силикагéль представляет собой высушенный гель, образующийся из перенасыщенных растворов кремниевых кислот ($n SiO_2 \cdot m H_2O$) при pH >5–6. Твёрдый гидрофильный сорбент.

Рассмотрим процесс адсорбции диоксида серы силикагелем. x – содержание SO_2 в исходном газе, в объемных %, y – количество адсорбированного SO_2, в % от веса силикагеля.

x	2	4	6	8	10
y	8,8	13,7	17	18,9	20,4

Определим вид зависимости, соответствующей этим данным. Диаграмма данных представляет собой некоторую кривую (рис. 1). Для ее выпрямления воспользуемся формулой

$$\frac{1}{y} = a + \frac{b}{x}.$$

Точки с координатами $\left(\frac{1}{x_i}; \frac{1}{y_i}\right)$ лежат вдоль некоторой прямой (рис. 2), что отражает их линейную связь. Сделав замену переменных $Y = \frac{1}{y}$, $X = \frac{1}{x}$, приходим к линейной функции $Y = a + b \cdot X$.

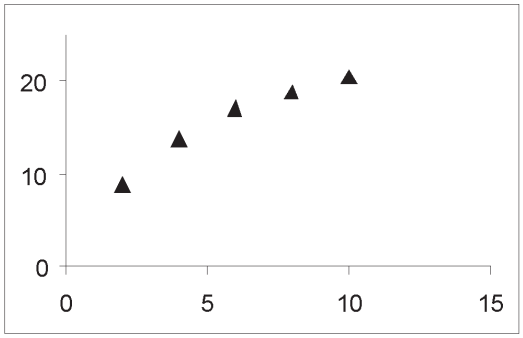

Рис. 1

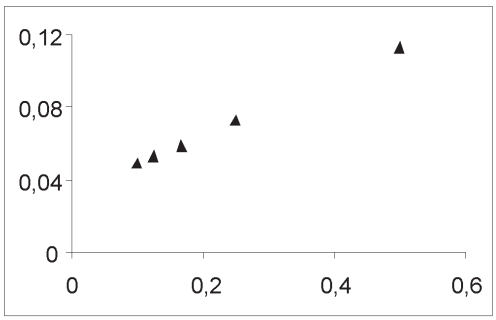

Рис. 2

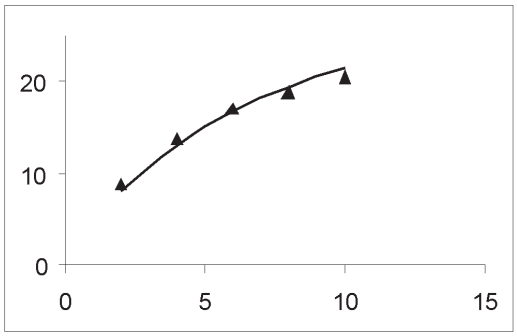

Рис. 3

По формулам парной линейной регрессии найдем значения коэффициентов a=0,026 и b=0,199. Тогда уравнение искомой зависимости имеет вид

$$\frac{1}{y} = 0,026 + \frac{0,199}{x}.$$

Выражая y, получим

$$y = \frac{x}{0,026x + 0,199}.$$

На рис. 3 представлена диаграмма рассеяния опытных данных и выравнивающая линия регрессии, построенная по найденной функции.

Полученная регрессионная модель отражает зависимость количества адсорбированного диоксида серы от его содержания в исходном газе.

Список литературы

1. Антипина С.Г. Основы хемометрики. Часть 1. Прикладная статистика для химиков-технологов: учебное пособие / С.Г. Антипина, В.Ф. Каблов; ВПИ (филиал) ВолГТУ. – Волгоград: ИУНЛ ВолГТУ, 2013. – 140 с.

2. Ануров, С.А. Физико-химические аспекты адсорбции диоксида серы углеродными адсорбентами [Текст] / С.А. Ануров // Успехи химии. – 1996. – 65 (8). – С. 718–731.

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ХРОМА ВБЛИЗИ УЧАСТКА РАЗМЕЩЕНИЯ ПРОМЫШЛЕННЫХ ОТХОДОВ

Сандо В.Д., Фёдорова А.А., Антипина С.Г.

Волжский политехнический институт, филиал Волгоградского государственного технического университета, Волжский, e-mail: vlada050695@gmail.com

Тема загрязнения окружающей среды особо актуальна в наше время. Промышленные отходы, не прошедшие переработку оказывают разрушительное воздействие на окружающую среду в целом, а так же здоровье и жизнедеятельность человека в частности. Хотя опасные отходы составляют только примерно 15% всех промышленных отходов, крайняя степень наносимого некоторыми из них вреда требует, чтобы они удалялись правильно и тщательно. Опасные отходы – отходы, которые в силу их реакционной способности или токсичности представляют непосредственную или потенциальную опасность для здоровья человека или состояния окружающей среды самостоятельно, или при вступлении в контакт с другими отходами и окружающей средой.

К первому классу опасности принадлежат Сулема, KCN, хром (VI), тяжелые металлы (ртуть, свинец, хром). Эти соединения относятся к числу распространенных и весьма токсичных загрязняющих веществ. Они широко применяются в различных промышленных производствах, поэтому, несмотря на очистные мероприятия, содержание соединений тяжелых металлов в промышленных сточных водах довольно высокое. Большие массы этих соединений поступают в океан через атмосферу. Для морских биоценозов наиболее опасны ртуть, свинец и хром.

Около половины годового промышленного производства хрома различными путями попадает в океан, хром активно рассеивается в окружающую среду в процессе хозяйственной деятельности человека (с промышленными и бытовыми стоками, с дымом и пылью промышленных предприятий, с выхлопными газами двигателей внутреннего сгорания).

В ходе проведения экологического эксперимента была измерена концентрация хрома вблизи участка размещения промышленных отходов. При этом был взят ряд проб почвы на глубине от 0 до 1 м и на расстоянии от участка с отходами от 1 до 4 км. Полученные результаты анализов представлены в таблице.

Глубина, м	Расстояние от участка, км							
	1		2		3		4	
0	47	53	30	31	20	20,4	10	10,6
0,5	44	48	29	31,8	16	20	8	8
1	44	46	27	28	14	16	5	7

Определим, влияют ли на результаты анализов глубина и местоположения взятия пробы, и существует ли перекрестное влияние этих факторов. Воспользуемся методом двухфакторного дисперсионного анализа. Факторные дисперсии, характеризующие влияние глубины взятия пробы, расстояния от участка промышленных отходов и взаимодействия этих факторов соответственно равны S^2_A = 38,285, S^2_B = 1682,086, S^2_{AB} = 1,469. Остаточная дисперсия, отражающая случайную ошибку измерений, и не связанная с влиянием факторов получилась равной S^2_0 = 3,765. Сравним остаточную дисперсию с каждой из факторных по критерию Фишера. Значения статистик для проверки значимости каждого из факторов и их перекрестного влияния дают следующие результаты: F_A=10,169, F_B=446,77, F_{AB}=0,39. Примем уровень значимости проверки гипотез α=0,05, тогда критиче-