

для низьких температур (10-40 K), які були взяті з додаткових літературних джерел [3,4], оскільки були відсутні в досліджуваних базах даних. Різниця між розрахованими та експериментальними даними становила не більше 2%.

Перелік використаних джерел.

1. Духанин Г. П. Термодинамические расчеты химических реакций: учеб, пособие/ Г. П. Духанин, В. А. Козловцев / Волг-ГТУ. - Волгоград, 2010. – 96 с.
2. Ходаковский И. Л. О новых полуэмпирических уравнениях температурной зависимости теплоемкости и объемного коэффициента термического расширения минералов / И. Л. Ходаковский; ВЕСТНИК ОНЗ РАН, ТОМ4, NZ9001, doi:10.2205/2012NZ_ASEMPG, 2012.
3. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание: В 4-х т. / Гурвич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. – М.: Наука, 1981. – 400 с.
4. Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion with Updates from Active Thermochemical Tables .A. Burcat, Israel Institute of Technology, 2005. – 400 с.

*Козуб П.А., Козуб С.М., Бердо Р.В., Печерська В.І., Романов М.Д.
Харківський національний медичний університет*

**ВИКОРИСТАННЯ ВЕКТОРІВ ДЛЯ ПРОВЕДЕННЯ ТА НАГЛЯДНОГО ПРЕДСТАВЛЕННЯ
СТЕХІОМЕТРИЧНИХ РОЗРАХУНКІВ У ХІМІЇ**

Стехіометричні розрахунки є одним із наріжних каменів сучасної хімії. Розрахунки стехіометричних коефіцієнтів та метод зрівнювання реакцій відображають саму суть хімії – закон збереження речовини.

Традиційний запис хімічної взаємодії у символічній формі дуже просто сприймається при викладанні і простих розрахунках, наглядний та швидкий у записі. Але цей метод не є ефективним при виконанні розрахунків з великою кількістю реагентів, складних послідовних взаємодій, наявності комплексних сполук, кристалогідратів та ін.

Алгебраїчні методи, засновані на використанні матричних підходів, занадто абстрактні, ненаглядні і при наявності проблем у розрахунках їх майже нереально відшукати та виправити, а результати розрахунків у вигляді матриць дуже ненаглядні і дуже важко сприймаються людьми.

Поєднання обох підходів – законів стехіометрії та векторного підходу до відображення та розрахунків призводить до нового підходу для стехіометричних розрахунків, дозволяє спростити їх розуміння, а також створити прозорий алгоритм розрахунків для будь-якої за розмірами реакційної системи, що дозволить перейти на новий рівень прогнозних розрахунків у хімії.

Згідно з формою запису хімічної реакції та реагентів, кожен реагент може бути записаний у вигляді векторів у багатовимірній системі координат. Причому координатними осями для них є кількості атомів відповідного типу, або інші структурні одиниці (іони, лігандні частини та ін.). Згідно закону кратних відношень координатні осі мають цілочисельні значення, що вказує на кінцеву чисельність векторів для кожного набору атомів.

Особливістю векторів є їх невід'ємний зв'язок з законом збереження маси – довжина векторів від однієї точки до іншої є величиною сталою і не залежить від форми векторів, які вибрані в якості шляху до цієї точки. Таким чином, складання векторів на площині (у просторі) відповідає процесу утворення суміші речовин, що наглядно ілюструє рисунок. Сума векторів – реагентів мають ту ж кінцеву точку, що і сума векторів – продуктів.

Такий підхід дозволяє досить наглядно відображати будь-яку хімічну реакцію при заданому наборі реагентів (векторів), встановити мінімальну кількість реагентів та принципову можливість (неможливість їх взаємодії).

Так при неможливості взаємодії сума векторів реагентів не має точки перетину з сумою векторів реагентів продуктів незалежно від кількості кожного з них.

Використання векторів для візуалізації хімічних взаємодій дозволяє відобразити множинність можливих реакційних шляхів отримання однієї і тієї хімічної речовини. При цьому стає легко помітною складність реакції. Одна і та ж речовина може бути отримана в результаті участі двох, трьох або більше похідних речовин.

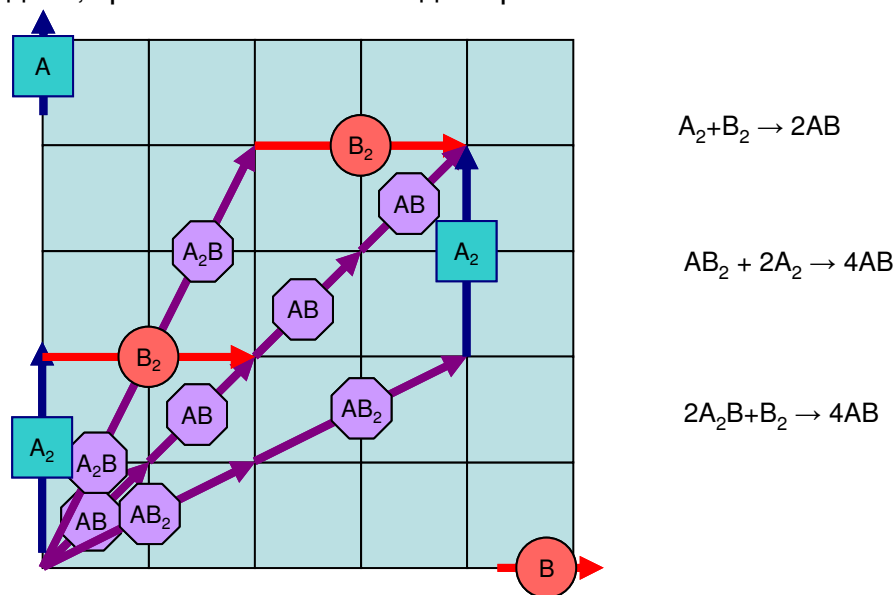


Рис. Векторна схема відображення хімічних реакцій.

Враховуючи більш велику вірогідність перебігу реакцій з меншою кількістю молекул – реагентів це спрощує вибір кращої схеми багатоступінчастих хімічних взаємодій.

Перевірка ефективності використання векторів при виборі стехіометричних коефіцієнтів та виявлення особливостей використання цього методу на практиці було вибрано хімічну систему всього з двох елементів – нітрогену та кисню. Така система характеризується великою кількістю оксидів, що відповідають різним ступеням окиснення нітрогену, а також має додаткову алотропічну форму кисню. Це дозволило в повній мірі виявити основні можливості методу векторної стехіометрії.

Виконання аналізу хімічної системи школярами 9 класу показало, що використання векторної математики для стехіометричних розрахунків дозволило значно спростити сприйняття учнями хімічних реакцій, що може бути використано при викладанні хімії у школі та вищих навчальних закладах.

Перелік використаних джерел.

1. Берг Л. Г. Способы подбора коэффициентов в химических уравнениях / Берг Л. Г., Громаков С. Д., Зороацкая И. В., Аверко-Антонович И. Н. Казань: Изд-во Казанского ун-та, 1959. -148 с.
2. Степанов Н. Ф. Методы линейной алгебры в физической химии / Степанов Н. Ф., Ерлыкина М. Е., Филиппов Г. Г. М.: Изд-во МГУ, 1976. -362с.