

Accent Graphics
Publishing & Communications

Accent Graphics Communications & Publishing, Hamilton, Canada

 **PREMIER**
Publishing

Premier Publishing s.r.o.

Центр научных исследований «Solution»

9th International conference

Science and society

1st February 2019

Hamilton, Canada
2019

The 9th International conference “Science and society” (February 1, 2018) Accent Graphics Communications & Publishing, Hamilton, Canada. 2019. 1359 p.

ISBN 978-1-77192-360-6

The recommended citation for this publication is:

Busch P. (Ed.) (2019). Humanitarian approaches to the Periodic Law // Science and society. Proceedings of the 9th International conference. Accent Graphics Communications & Publishing. Hamilton, Canada. 2019. Pp. 12–17

Editor	Lucas Koenig, Austria	Morozova Natalay Ivanovna, Russia
Editorial board	Abdulkasimov Ali, Uzbekistan	Moskvina Victor Anatolevich, Russia
	Adieva Aynura Abduzhalalovna, Kyrgyzstan	Nagiyev Polad Yusif, Azerbaijan
	Arabaev Cholponkul Isaevich, Kyrgyzstan	Naletova Natalia Yurevna, Russia
	Zagir V. Atayev, Russia	Novikov Alexei, Russia
	Akhmedova Raziya Abdullayevna	Salaev Sanatbek Komiljanovich, Uzbekistan
	Balabiev Kairat Rahimovich, Kazakhstan	Shadiev Rizamat Davranovich, Uzbekistan
	Barlybaeva Saule Hatiyatovna, Kazakhstan	Shhahutova Zarema Zorievna, Russia
	Bestugin Alexander Roaldovich, Russia	Soltanova Nazilya Bagir, Azerbaijan
	Boselin S.R. Prabhu, India	Spasennikov Boris Aristarkhovich, Russia
	Bondarenko Natalia Grigorievna, Russia	Spasennikov Boris Aristarkhovich, Russia
	Bogolib Tatiana Maksimovna, Ukraine	Suleymanov Suleyman Fayzullaevich, Uzbekistan
	Bulatbaeva Aygul Abdimazhitovna, Kazakhstan	Suleymanova Rima, Russia
	Chiladze George Bidzinovich, Georgia	Tereschenko-Kaidan Liliya Vladimirovna, Ukraine
	Dalibor M. Elezović, Serbia	Tsersvadze Mzia Giglaevna, Georgia
	Gurov Valeriy Nikolaevich, Russia	Vijaykumar Muley, India
	Hajiyev Mahammad Shahbaz oglu, Azerbaijan	Yurova Kseniya Igorevna, Russia
	Ibragimova Liliya Ahmatyanovna, Russia	Zhaplova Tatiana Mikhaylovna, Russia
	Blahun Ivan Semenovich, Ukraine	Zhdanovich Alexey Igorevich, Ukraine
	Ivannikov Ivan Andreevich, Russia	Proofreading Andrey Simakov
	Jansarayeva Rima, Kazakhstan	Cover design Andreas Vogel
	Khubaev Georgy Nikolaevich	Contacts Premier Publishing s.r.o.
	Khurtsidze Tamila Shalvovna, Georgia	Praha 8 – Karlín,
	Khoutyz Zaur, Russia	Lyčkovo nám. 508/7, PSČ 18600
	Khoutyz Irina, Russia	1807-150 Charlton st.East,
	Korz Marina Vladimirovna, Russia	Hamilton, Ontario, L8N 3×3 Canada
	Kocherbaeva Aynura Anatolevna, Kyrgyzstan	
	Kushaliyev Kaiser Zhalitovich, Kazakhstan	
	Lekerova Gulsim, Kazakhstan	
	Melnichuk Marina Vladimirovna, Russia	
	Meymanov Bakyt Kattoevich, Kyrgyzstan	
	Moldabek Kulakhmet, Kazakhstan	

Material disclaimer

The opinions expressed in the conference proceedings do not necessarily reflect those of the Premier Publishing s.r.o. or Accent Graphics Communications & Publishing, the editor, the editorial board, or the organization to which the authors are affiliated.

The Premier Publishing s.r.o. or Accent Graphics Communications & Publishing is not responsible for the stylistic content of the article. The responsibility for the stylistic content lies on an author of an article.

Included to the open access repositories:

eLIBRARY.RU

© Premier Publishing s.r.o.

© Accent Graphics Communications & Publishing

© Центр научных исследований «Solution»

All rights reserved; no part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording, or otherwise, without prior written permission of the Publisher.

Typeset in Berling by Ziegler Buchdruckerei, Linz, Austria.

Printed by Premier Publishing s.r.o., Vienna, Austria on acid-free paper

ВДОСКОНАЛЕННЯ СТЕХІОМЕТРИЧНИХ МЕТОДІВ АНАЛІЗУ СКЛАДНИХ ХІМІЧНИХ СИСТЕМ

КОЗУБ П.А.,

кандидат технічних наук, доцент,

доцент кафедри природничих наук

Харківський національний університет радіоелектроніки

Харків, Україна

КОЗУБ С.М.

кандидат технічних наук, доцент,

доцент кафедри медичної та біоорганічної хімії

Харківський національний медичний університет

Харків, Україна

ПРИСЯЖНИЙ О.В.

кандидат технічних наук,

асистент кафедри медичної та біоорганічної хімії

Харківський національний медичний університет

Харків, Україна

Основою сучасної хімії є відображення речовини навколо нас у вигляді відносно неподільних часток – атомів, комбінація яких призводить до утворення всього різноманіття навколишнього середовища.

Відображенням цього підходу є мова хімії – формули, рівняння, схеми рівнянь, які по своїй суті є символічні моделі реальних фізичних об'єктів. Система індексів, коефіцієнтів та символів взаємозв'язку (символ рівняння, стрілочки) дозволяє надати інформацію щодо кількісних характеристик хімічних систем, за що є відповідальним такий розділ хімії як стехіометрія.

Для більшості професійних хіміків і для всіх тих хто вивчає хімію як не

основну науку, стехіометрія та стехіометричні розрахунки виглядають, як набір правил оснований на суто математичних методах, який є повністю достатніми для проведення будь-яких розрахунків реакційних систем.

Але навіть при першому досвіді дослідження хімічних взаємодій перед будь-яким хіміком виникає безліч запитань, на які сучасна стехіометрія не може дати відповіді.

Так найбільш відома проблема сучасних стехіометричних розрахунків виникає ще при вивченні окиснювально-відновлювальних реакцій за участю декількох реагентів – множинність рішень для одного набору реагентів. При наявності лінійно-залежних рівнянь також виникають проблеми при обчисленні коефіцієнтів реакцій. І це тільки на етапі розрахунку коефіцієнтів, коли вже відомі вихідні реагенти та кінцеві продукти.

В більшості реальних досліджень існують лише дані щодо загального переліку реагентів, а реакції між ними ще не встановлені. Таким чином потрібно не просто вирахувати коефіцієнти хімічних рівнянь, але й визначити такі рівняння. При невеликій кількості реагентів, це можливо зробити з урахуванням практичного досвіду, але більш складні системи вже потребують використання системного підходу. І саме такого підходу на цей час в стехіометрії не існує.

Так, аналіз публікацій за цією темою вказує на те, що останні дослідження в цій сфері зосереджені на вивченні складних хімічних систем (Chemical Reaction Network) в першу чергу для прогнозування кінетики хімічних взаємодій у цих системах [1-2]. Причому в більшості такі дослідження мають в більшості своїй вузькоспеціалізовану спрямованість (біохімічні системи, системи напівпровідникових сполук, кристалохімічні системи). Хоча зустрічаються і інші напрямки публікацій – використання стехіометричних розрахунків у викладанні [3-5] різні методи вдосконалення математичних підходів до пошуку стехіометричних коефіцієнтів [6].

Для кращого розуміння можливостей розвитку стехіометричних методів аналізу та стехіометричних розрахунків було зібрано воедино основні

положення стехіометрії які використовуються зараз.

Так основою стехіометрії є наявність у природі фізичної неділимої частки – атому, який у хімії відображається як елемент. Сукупність таких елементів є основою хімічних рівнянь і відображається у вигляді формул.

Таким чином, формула речовини є символічним відображенням кількості найбільш елементарних часток у деякій їх постійній сукупності – речовині. Звідси випливає, що хімічна формула може бути однакою для різних речовин, якщо їх кількість однакою, але взаємне розташування відрізняється.

Розділення комбінацій атомів на менші частини, або навпаки їх укрупнення не призводять до зміни загальної кількості атомів (елементів), але змінюють склад усталених комбінацій – речовин - реагентів.

Таким чином, якщо існують комбінації елементів які відрізняються реагентами, але не відрізняються кількістю елементів, то такі дві комбінації називаються реакцією.

З цього випливає, що в реакції не можуть знаходитись однакові реагенти у лівій та правій частинах одночасно. Крім того, як і для формул реагентів, це означає, що в математичному плані ліва та права частина формули є рівноцінними – тобто визначення вихідних реагентів та кінцевих продуктів відображає інші – нестехіометричні фактори (наприклад кінетичні, термодинамічні).

З цього також випливає, що може існувати не одна комбінація реагентів з однією і тією ж кількістю атомів. Тому реакцій з участю однієї речовини може бути декілька. Крім того, можливі такі випадки в яких частини реакції з однаковою кількістю реагентів будуть входити в декілька реакцій, або не будуть мати зовсім відповідних комбінацій інших реагентів. Таким чином комбінації реагентів можуть утворювати реакційну комбінацію, або утворювати просту комбінацію реагентів, яка не призводить до реакції.

Комбінація всіх реакцій у суміші реагентів визначає всі можливі шляхи перетворень між реагентами, але в більшості випадків вони є надлишковими. Тому для розрахунків використовують тільки найбільш необхідні реакції, які

обирають із списку можливих за певними умовами. При існує найменша кількість рівнянь, які пов'язують між собою всі реагенти. Перший випадок важливий для проведення кінетичних, другий для термодинамічних розрахунків.

Таким чином підсумовуючи можна сформулювати можливі шляхи вдосконалення сучасної методики стехіометричних розрахунків.

1. Представлення всіх сполук у вигляді комбінацій елементів. Спосіб відображення – цілочисельні багатовимірні вектори.

2. Визначення реагентів як комбінацію елементів, реакційної суміші - як комбінації реагентів, реакції - як комбінації двох реакційних сумішей з відповідними умовами, реакційних систем – як комбінації реакцій.

3. Використання для визначення можливих хімічних взаємодій методів комбінаторного аналізу, з обмеженнями, які впливають з особливостей хімічних процесів.

4. Використання для кількісних розрахунків методів рішення цілочисельних лінійних рівнянь з умовами, які впливають з особливостей хімічних процесів.

Запропоновані підходи було реалізовано на практиці для вирішення конкретних завдань.

Так було запропоновано використання представлення хімічних сполук у векторному вигляді для вивчення хімії. Такий підхід дозволив відобразити як сутність хімічних реакцій, так і надати наочні пояснення множинності маршрутів хімічних реакцій. В якості прикладу на рис. 1 наведено векторне відображення взаємодій у системі кисень-карбон.

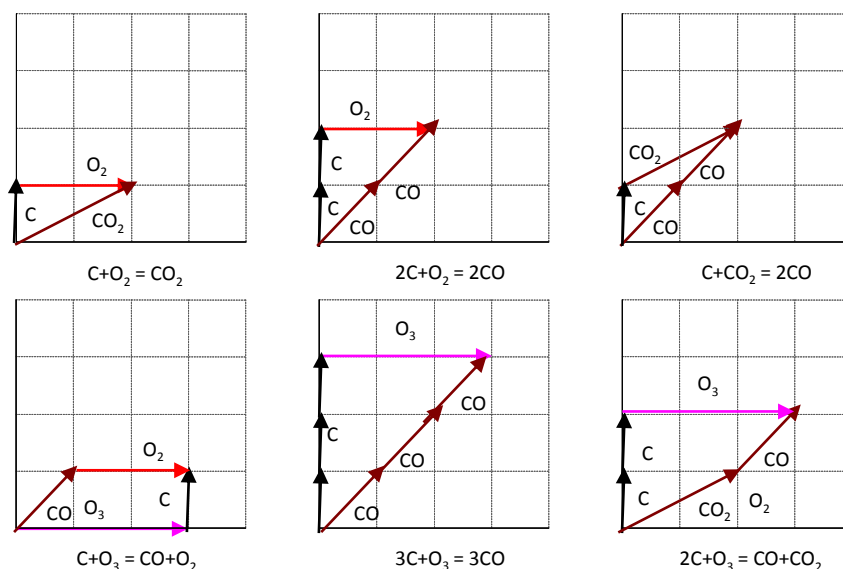


Рис.1 Можливі взаємодії в системі кисень-вуглець

Значною перевагою цього методу є можливість візуального контролю рішення хімічного рівняння, оскільки головною умовою такого рішення є зведення векторів – реагентів та векторів продуктів до однієї точки.

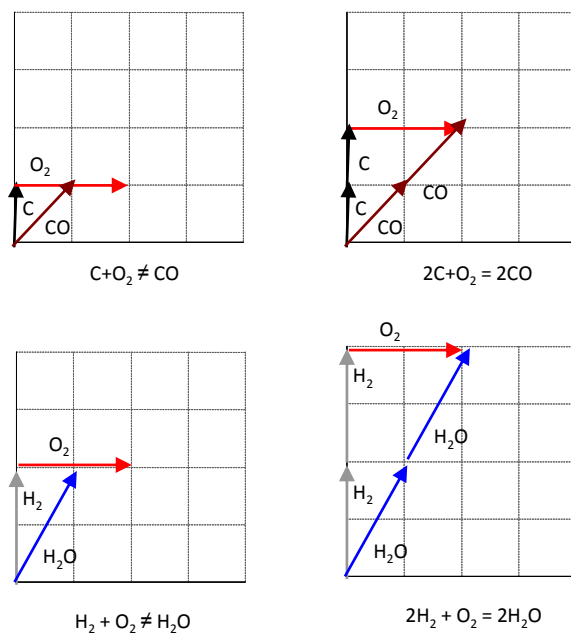


Рис. 2. Можливі і неможливі взаємодії між реагентами

Конструювання реакцій з векторів дозволяє також знаходити всі можливі реакції за участю обраних реагентів. Для цього достатньо, присутності вектору цього реагенту у загальній сумі векторів (реакції).

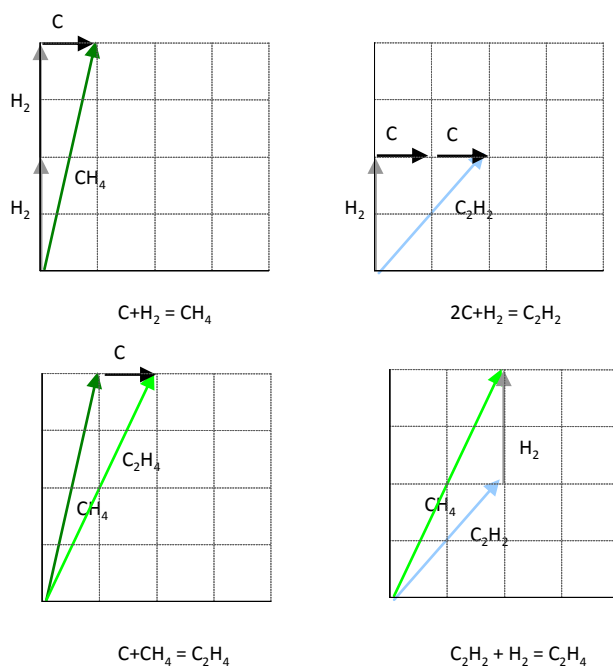


Рис. 3. Можливі шляхи утворення етену з вуглецю та водню

За допомогою такого підходу було запропоновано новий графічний підхід до зрівнювання хімічних реакцій, який виявився досить дієвим на початкових стадіях вивчення хімії.

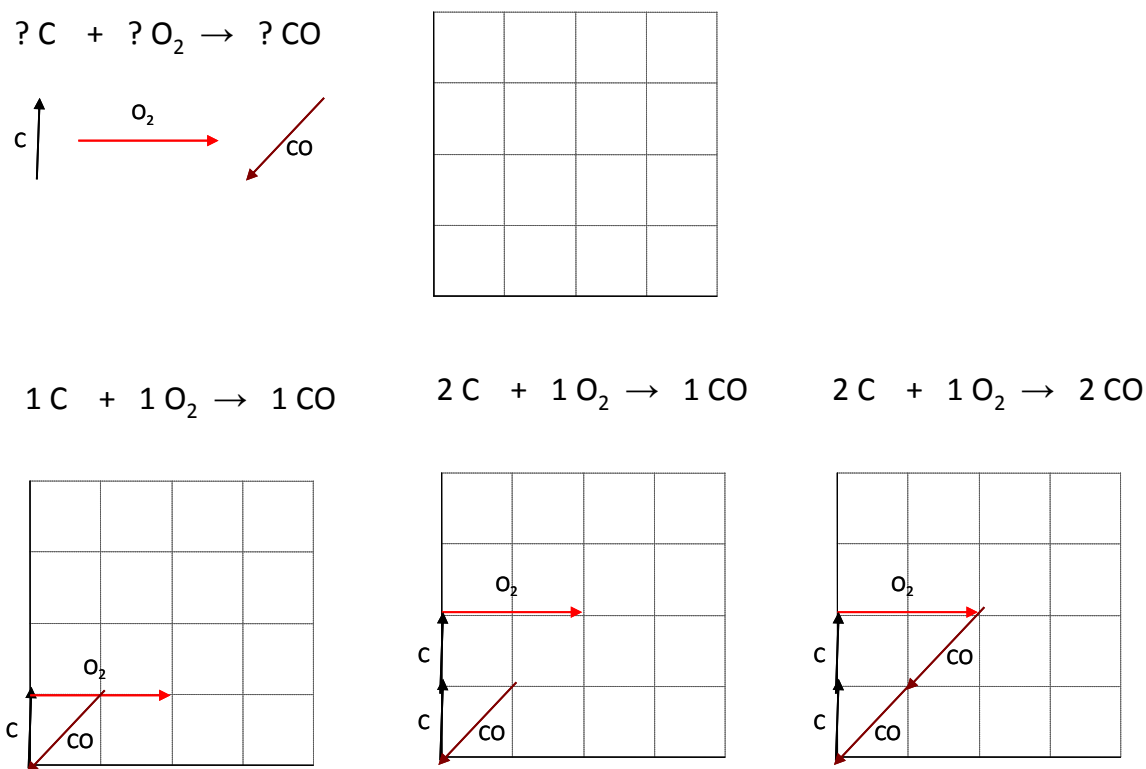
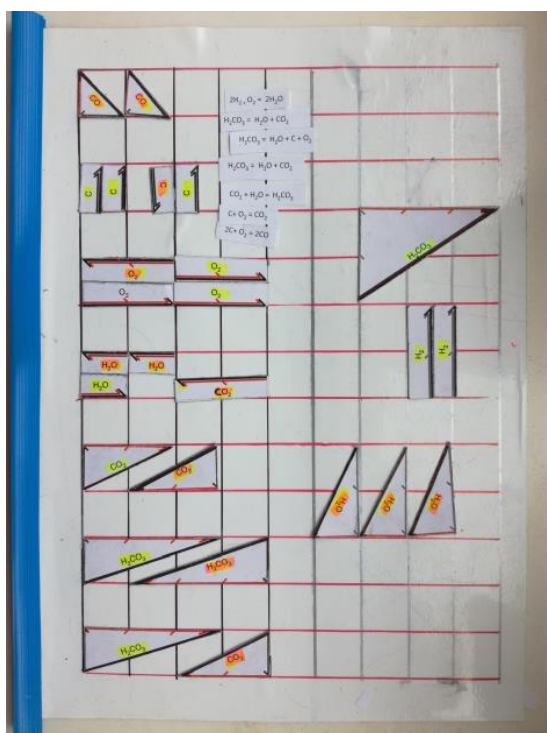


Рис. 4. Ілюстрація вирішення хімічного рівняння окиснення карбону

Для практичного використання цієї методики було створено набір векторів, який було використано для викладання хімії на підготовчих курсах до вступу до ВНЗ та на кружках з хімії для учнів 10-11 класів.

Набір речовин



Рівняння реакцій

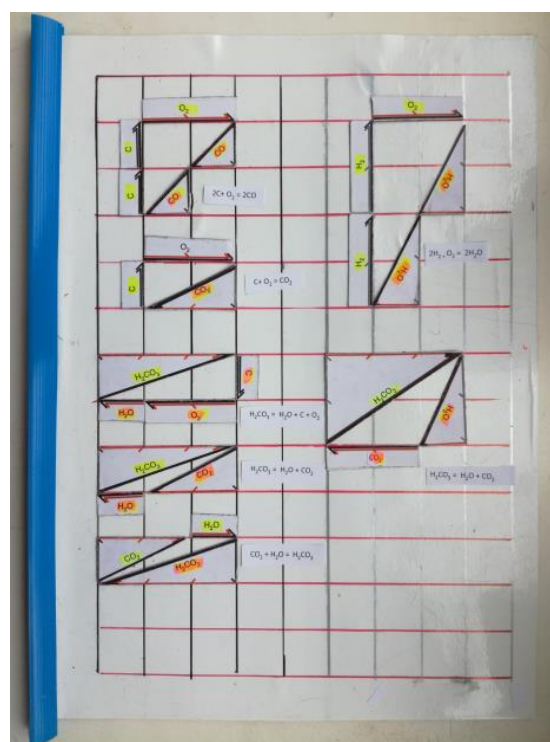


Рис. 5. Набір для вивчення стехіометричних розрахунків на заняттях по хімії.

Використання методів комбінаторного аналізу дозволило по іншому підійти до моделювання та аналізу систем хімічних рівнянь.

Так було проведено оцінку та математично обґрунтовано найменшу та найбільшу кількість рівнянь для реакційних систем з заданою кількістю реагентів. Запропоновано алгоритм розрахунку комбінацій реагентів та відбору можливих хімічних реакцій. Як видно з таб.1. максимальна кількість рівнянь різко підвищується в залежності від загальної кількості реагентів, але при виборі тільки послідовних реакцій, кількість рівнянь зменшується в 10-100 разів. А при відборі тільки базових реакцій, кількість взаємодій стає

пропорційним кількості реагентів.

Таблиця 1. Залежність кількості можливих хімічних реакцій від кількості реагентів у реакційній суміші та максимальної кількості реагентів у реакції

Реагентів	Систем 3-реагенти	Реакцій можливих	Тільки послідовні	Систем 2-реагенти	Реакцій можливих	Тільки послідовні
3	7	6	1	6	6	1
4	14	25	5	10	21	4
5	25	85	15	15	55	9
6	41	250	46	21	120	16
7	63	651	131	28	231	25
8	92	1526	321	36	406	36
9	129	3270	685	45	666	49
10	175	6495	1310	55	1035	64
11	231	12100	2301	66	1540	81
12	298	21351	3781	78	2211	100
13	377	35971	5877	91	3081	121
14	469	58240	8790	105	4186	144

В якості прикладу на рис 6. наведено основні реакції між оксидами нітрогену та киснем, отримані таким чином.

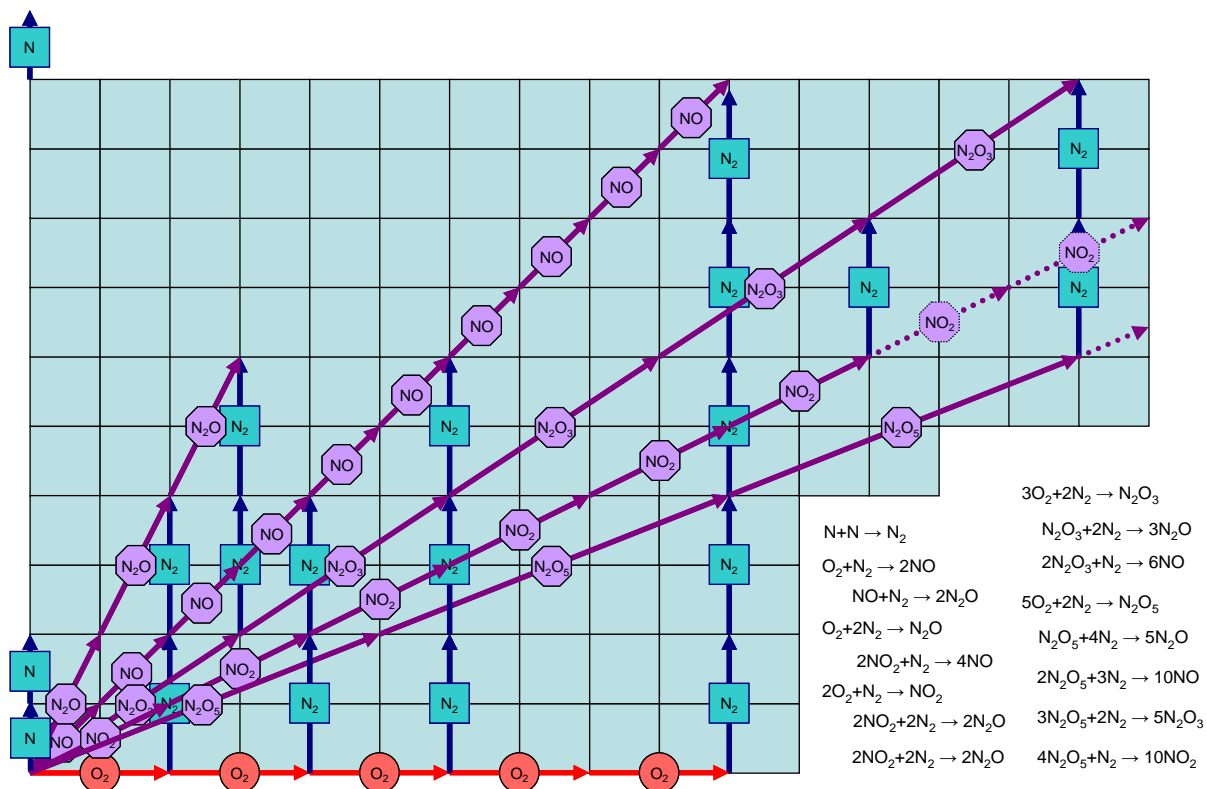


Рис. 5. Взаємодії у системі оксиди - кисень

Використання замість методів лінійної алгебри методів аналізу цілочисельних решіток дозволило по новому підійти до проблеми обчислення коефіцієнтів хімічних рівнянь. Встановити, що для деяких випадків існує безкінечний набір коефіцієнтів, які не повторюються. Отримати такі набори стехіометричних коефіцієнтів існуючими методами є дуже складно.

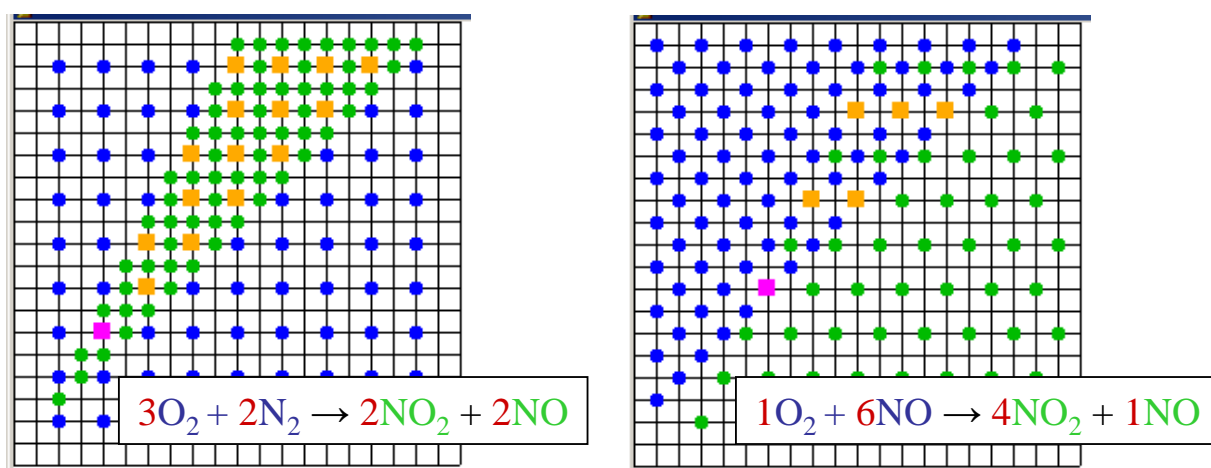


Рис. 3.4 Графічне вирішення хімічних рівнянь. Червоним позначено рішення системи з мінімальними значеннями коефіцієнтів. Помаранчевими – інші можливі рішення.

Таким чином, проведені наукові дослідження показали, що використання нових підходів до стехіометрії є дуже необхідним, а їх вдосконалення дає новий потужний інструмент для хімії, який є особливо важливим для систем з великою кількістю реагентів (або інших складових частин) таких як біохімічні системи, органічний синтез, фармакологічна хімія, хімія навколишнього середовища.

Література

1. H. G. Othmer, Analysis of Complex Reaction Networks, Lecture Notes, School of Mathematics, University of Minnesota, December 9, 2003.

2. D. Angeli, A tutorial on chemical reaction network dynamics/ *European Journal of Control*, , 2009, 15 (3-4), pp. 398–406.
3. Gabriel, C.I. and Onwuka, G.I. (2015) Balancing of Chemical Equations Using Matrix Algebra/ *Journal of Natural Sciences Research* , 3, pp.29-36.
4. W. L. Yaroch, Student understanding of chemical equation balancing, *J. Res. Sci. Teach.*, 22 (1985), pp. 449-459.
5. Rao, C. N. R. *University general chemistry: An introduction to chemistry science*: Rajiv Beri for Macmillan India Ltd., 2007.
6. Risteski, I. B., 2009. "A new singular matrix method for balancing chemical equations and their stability." *Journal of the Chinese Chemical Society*, vol. 56, pp. 65-79.