

СЕКЦІЯ ІХ. ХІМІЯ, ХІМІЧНА ТА БІОІНЖЕНЕРІЯ

ОРГАНІЗАЦІЯ ВВЕДЕННЯ ДАНИХ ДЛЯ ПРОВЕДЕННЯ СТЕХІОМЕТРИЧНИХ РОЗРАХУНКІВ

Козуб Павло Анатолійович

ORCID ID: 0000-0002-7162-027X

канд. техн. наук, доцент кафедри медіасистем та технологій
Харківський національний медичний університет, Україна

Козуб Світлана Миколаївна

ORCID ID: 0000-0002-3049-1555

канд. техн. наук, доцент кафедри медичної та біоорганічної хімії
Харківський національний медичний університет, Україна

Балансування хімічних реакцій є основною і невід'ємною частиною стехіометричних розрахунків у хімії. Будь-які інші розрахунки так чи інакше приводять до необхідності проведення саме цієї стадії. Для більшості людей вона здається здається лише математичною задачею, яка вирішується різними математичними методами слабо пов'язаними з хімією, і для її рішення необхідні лише математичні прикладні пакети.

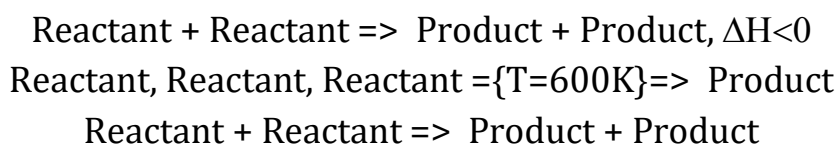
Насправді, не менше значення є методи формування даних для розрахунків та їх представлення для людини, тобто обмін інформацією з людиною у традиційний для неї спосіб – у вигляді хімічних рівнянь та схем хімічних перетворень. Для управління процесом дослідження необхідною умовою є використання єдиного, зручного та інформаційно повного інтерфейсу для представлення даних як для людини (дослідник) так і для математичної обробки (програма, алгоритм).

Правила та алгоритми такого інтерфейсу повинні забезпечувати використання традиційного запису формул, рівнянь, схем перетворень, але враховувати обмеження на умови введення формул такі як відсутність спеціального форматування для браузерів та мобільних додатків.

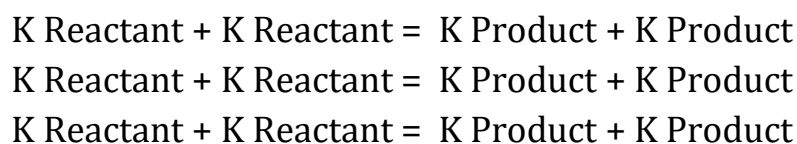
Вони повинні передбачати можливість різних варіантів форматування результатів за чіткими правилами та передбачати можливість додавання нових можливостей у майбутньому.

Результатом обробки повинна бути математична структура зручна для подальшої математичної обробки з чіткою структурою даних, повним збереженням вихідної інформації та можливість повного відтворення інформації у початковому стані.

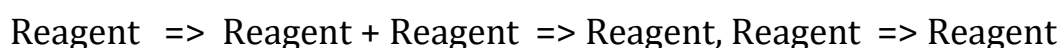
Узагальнений аналіз літературних джерел та мережевих ресурсів показав що для аналізу хімічних перетворень в більшості випадків вони представлені у вигляді переліку схем перетворень



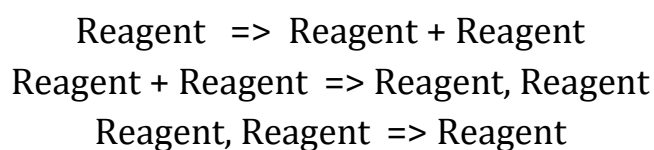
або переліку хімічних рівнянь



Але дуже часто в хімічній літературі схеми перетворень мають декілька символів перетворення, що означає поєднання декількох схем в яких реагенти можуть бути одночасно як реактантами, так і продуктами. Це особливо часто зустрічається для літературних джерел з органічної хімії



В цьому випадку такий шлях перетворень є не чим іншим як згорнутим записом попереднього стандартного запису



В цьому записі Reagent є будь яка речовина, яка вважається реактантом (Reactant) якщо знаходиться зліва від знаку поділу груп реагентів (=, =>, ...) або продуктом (Product) якщо знаходиться праворуч від нього.

Таким чином, в загальному вигляді відображення шляху хімічного перетворення у символному вигляді складається з переліку реагентів та додаткових елементів, розподілених спеціальними розділовими символами.

Символ перетворення ($=$, \Rightarrow , \Leftrightarrow ...) – розподіляє рівняння на групи реагентів. Для хімічної реакції використовується виключно символ рівняння, для схеми перетворення можуть використовуватись інші символи.

Символ переліку реагентів (+ або ,) – розділяє їх у групі реагентів між символами перетворення. Для хімічної реакції використовується виключно символ суми, для схем перетворень дуже часто використовується кома, щоб підкреслити невизначеність кількості реагента.

Для хімічних рівнянь обов'язковою частиною є наявність числового значення коефіцієнту реакції, яке може бути відсутнім якщо має значення 1, може мати раціональне або дробове значення, але не може бути від'ємним.

У розширених рівняннях частини рівняння можуть містити енергію перетворення, зміни об'єму, маси, умови реакції (над чи під знаком розподілу), напрямки реакції (направлені стрілки, перекреслене =)

Хоча кожен з реагентів може бути представлений у тексті через його тривіальну назву, що особливо часто зустрічається для органічних сполук, для балансування хімічних рівнянь кожен з реагентів повинен перед проведенням розрахунків мати хімічну формулу з якої можна визначити кількість часток, для яких використовується закон збереження – хімічні елементи, зарядове число для іонів, функціональні групи.

Найпростіший вид хімічної формули це перелік назв елементарних частин (елементів, радикалів, функціональних частин) з визначенням їх кількостей - CO_2 , N_2O_3 , H_2SO_4 , $\text{FeO}_{0.8}$, NO_x тощо.

Особливістю хімічного запису є відсутність кількості при значенні 1, та можливість використання нецілих значень, або невизначених, що ускладнює процес машинної розшифровки формул.

Традиційно у хімічній літературі кількість записують у вигляді чисел у нижньому реєстрі, але при роботі із звичайним неформатованим текстом це є неможливим, тому як загальне правило - кількість елемента є число, яке знаходиться за елементом.

Для означення відносно незалежних груп елементів використовуються дужки та символи множення - $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$, $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$.

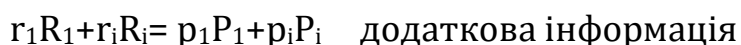
Для позначення заряду іону, ступеню окиснення та валентності використовують надстрокові символи Na^+ , Ca^{2+} , NO_3^- , SO_3^{2-} , $\text{V}^{+5}\text{O}_2^{-2}$. Оскільки як і значення індексу в неформатованому тексті вони будуть мати однаковий формат, це призводить до необхідності або введення

нових елементів розмітки тексту (наприклад NO_3^{-1}) або запису їх як окремого елемента заряду (наприклад NO_3Z^{-1} , Z^{-1}NO_3).

Також потрібно враховувати різні модифікатори, атрибути та визначники: знак радикалу, агрегатний стан, тип кристалічних ґраток, збуджений стан, тощо. Хоча вони і мають якісь усталені принципи, але не уніфіковані та не стандартизовані.

Саме тому, для однозначного перетворення текстового представлення хімічного перетворення було визначено ряд правил, які дозволяють однозначно розшифровувати схеми хімічних перетворень з усіма переліченими особливостями.

За основу прийнято традиційний запис хімічного рівняння



Реагенти ($R_i P_i$) – це формула речовини у текстовому значенні.

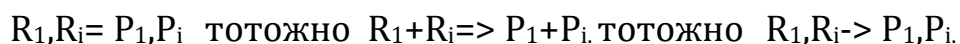
Коефіцієнти ($r_i p_i$) – це числові значення кількості реагентів, що обов'язково є раціональним невід'ємним числом.

Якщо коефіцієнти відсутні, то їх значення дорівнює 1.

Якщо реагент або продукт реакції відсутній то, значення коефіцієнта дорівнює 0.

Реакція без коефіцієнтів означає можливу незбалансованість рівняння.

Для визначення переліку речовин одночасно з '+' можливо використання коми, а одночасно з '=' інші варіанти символів перетворення – '<=>', '-->', '<—', тощо.



При відсутності правої частини рівняння передбачається, що кожен с реагентів може бути як реагентом так і продуктом, тому це є еквівалентним реакційній схемі в якій продукти співпадають з реагентами



Основним форматом відображення складу реагентів є брутто формула - строкова величина, що визначає склад реагенту у форматі



де E_i – строкове значення для елементарної частини, для якої діє закон збереження маси речовини,

a,b,n та i – індекси у формулі, які відображають кількості елементів у реагенті.

При відсутності елемента у формулі, індекс елемента приймається рівним 0, що дозволяє представити будь яку формулу у єдиному форматі для подальшої математичної обробки.

Для однозначної розшифровки формули дуже зручно (але не обов'язково) введення обмеження на назви елементів як послідовність латинських літер з першою у верхньому реєстрі.

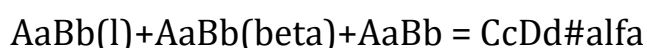
Слід зауважити, що на відміну від коефіцієнтів перед реагентами, індекси елементів можуть мати від'ємні значення, що дозволяє їх використовувати для роботи з зарядженими частками або радикалами.

Так наприклад заряд частинок в брутто формулі зручно представляти у вигляді частки (наприклад Z) із знаковим значенням: $A_a B_b Z_{+z}$ (іони), $C_6 H_6 N_{-1}$ (феніл). Для користувача в текстовому форматі заряд може для зручності представлятись у вигляді $A_a B_b^{-z}$ або $A_a B_b\{-z\}$.

Для зручності науковці використовують згорнуту формулу – це формула, в якій повторювані частки записані у дужках: $(A_a B_b)_i (A_a B_b)_j$. Тип дужок обумовлюється лише зручністю для користувачів тому дужки [] є ідентичними дужкам (). Так в неорганічній хімії дуже часто можна побачити $K_3[Fe(CN)_6]$, а в органічній $CH_3(CH_2)_{17}COOH$.

Повна формула складається із згорнутих формул з коефіцієнтами перед ними та знаком поєднання частин \cdot або $*$, наприклад $CuSO_4 \cdot 5H_2O$, $CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 3SiO_2$, $nA_a B_b E_i \cdot mA_d C_c$. Такий запис поширений для запису формул кристалогідратів, змішаних солей та оксидів.

Додаткова інформація у формулі не впливає на розрахунки, але може бути використана для визначення особливостей регенту, наприклад, його фазовий стан: (l),(g),(s),(aq),(a),(i),(vit),(cr)..., тип кристалічних ґраток, спосіб отримання чи чистота. Вона завжди знаходиться за останнім індексом формули, і не містить символів елементів, але наразі вона також не уніфікована і тому може містити будь-які символи.



При такому підході після розшифровки утворюється структура розшифрованих даних, яка буде достатньою як для математичної обробки даних, так і для відновлення зашифрованого тексту до вигляду, зрозумілого людині.

Структура розшифрованих даних в цьому випадку буде багатовимірним вкладеним масивом який має структуру у вигляді

Масив перелік схем хімічних перетворень (розмір кількість реакцій)

[0] – додаткова інформація щодо переліку перетворень

[1]-[n] – розшифровані дані для кожної схеми

Цей масив дозволяє однозначно описати послідовність хімічних перетворень і містить вже розшифровану інформацію для кожної схеми (реакції) та додаткову інформацію для всіх перетворень у [0] елементі.

[i] схема хімічних перетворень (розмір – кількість реагентів)

[0] – додаткова інформація

[1]-[n] – розшифровані дані для кожного реагента

Цей масив дозволяє однозначно розрахувати матеріальний баланс для кожного з перетворень і також в [0] елементі містить додаткову інформацію але для кожного з перетворень

[i] реагенти (розмір – кількість елементів)

[0] – додаткові дані щодо реагенту

[1]-[n] – s

Цей масив дозволяє однозначно розрахувати поведінку та властивості кожного з реагентів, стан перетворень, властивості загальної реакційної суміші, оскільки в [i] елементах містить кількості елементів а в [0] елементі додаткові дані для реагента в цілому.

Список використаних джерел:

1. M. M. Shaikh, M. Yousaf On mathematical methods to balance equations of chemical reactions – a comparison and way forward // Journal of mechanics of continua and mathematical sciences. Vol.-18, No.-01, January (2023) pp 1-20 <https://doi.org/10.26782/jmcms.2023.01.00001>
2. J. Aleksejeva, S. Guseynov To the issue of finding the stoichiometric coefficients in the chemical reactions // Integration. education Proceedings of the International Scientific Conference. Volume II, May 28th-29th, 2021. pp. 19-48 // <https://doi.org/10.17770/sie2021vol2.6457>
3. Козуб П. А., Мірошніченко Н. М., Лук'янова В. А., Козуб С. М., Мігунов В. Л. Використання векторного підходу для балансування хімічних рівнянь // Modern directions of scientific research development. Proceedings of the 15th International scientific and practical conference. BoScience Publisher. Chicago, USA. 2022. Pp. 65-73.
4. Козуб П. А., Мірошніченко Н. М., Лук'янова В. А., Козуб С. М., Гуріна Г. І. Використання векторного підходу для задач хімічної стехіометрії // Modern scientific research: achievements, innovations and development prospects. Proceedings of the 15th International scientific and practical conference. MDPC Publishing. Berlin, Germany. 2022. Pp. 80-87.
5. Козуб П. А., Мірошніченко Н. М., Лук'янова В. А., Козуб С. М., Мартинюк М. М. Математичні аспекти використання векторного підходу для балансування хімічних реакцій. // Modern science: innovations and prospects. Proceedings of the 12th International scientific and practical conference. SSPG Publish. Stockholm, Sweden. 2022. Pp. 65-74.