

УДК 512.644:542.9

В. О. Глаголева,

Химико-технологический институт,

А. П. Графов,

Институт естественных наук и математики,

Уральский федеральный университет им. первого Президента

России Б. Н. Ельцина, Екатеринбург

Научный руководитель: ст. преподаватель А. А. Кныш

Применение метода Гаусса для решения химических задач

Аннотация. В статье рассматриваются примеры практико-ориентированных задач курса высшей математики для студентов, обучающихся по направлениям «Фундаментальная и прикладная химия», «Химическая технология». Показано применение метода Гаусса для решения систем линейных уравнений, возникающих в химических задачах.

Ключевые слова: высшая математика, химия, практико-ориентированные задачи, система линейных уравнений, метод Гаусса.

Метод Гаусса является одним из универсальных способов решения систем линейных уравнений. Его использование актуально в решении задач химии, например уравнивание химической реакции, расчетах энтропии простых веществ при стандартных условиях.

Рассмотрим примеры решения задач из курса химии на составление систем линейных уравнений и их решения методом Гаусса. Алгоритм решения систем линейных уравнений представлен в источнике [2].

Задача 1. Рассмотрим не уравненную реакцию $C_3H_8 + O_2 \rightarrow H_2O$.

Пусть $aC_3H_8 + bO_2 \rightarrow cCO_2 + dH_2O$. Найдите коэффициенты a, b, c, d .

Решение: составим систему уравнений исходя из количества атомов углерода, водорода и кислорода в левой и правой части (табл. 1).

Балансировка химической реакции

Элемент	Левая сторона	Правая сторона
C	$3a$	c
H	$8a$	$2d$
O	$2b$	$2c + d$

Получим систему линейных уравнений:

$$\begin{cases} 3a = c, \\ 8a = 2d, \\ 2b = 2c + d. \end{cases}$$

Перепишем систему в виде:
$$\begin{cases} 3a - c = 0, \\ 8a - 2d = 0, \\ 2b - 2c - d = 0. \end{cases}$$

Решим систему уравнений методом Гаусса:

$$\begin{pmatrix} 3 & 0 & -1 & 0 \\ 8 & 0 & 0 & -2 \\ 0 & 2 & -2 & -1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 3 & 0 & -1 & 0 \\ 4 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & -2 & -1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 3 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & -3 \\ 0 & 2 & -2 & -1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 3 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & -1 \\ 0 & 0 & 4 & -3 \end{pmatrix}$$

Возвращаемся к системе линейных уравнений:

$$\begin{cases} 3a - c = 0, \\ 2b - 2c - d = 0, \\ 4c - 3d = 0. \end{cases}$$

Из последнего уравнения выразим $c = \frac{3}{4}d$,

из второго уравнения найдем $b = \frac{5}{4}d$, из первого

уравнения найдем $a = \frac{1}{4}d$.

Получим общее решение $(a, b, c, d) = \left(\frac{1}{4}d; \frac{5}{4}d; \frac{3}{4}d; d\right)$. Найдём частное решение системы уравнений при $d = 4$. Получим $a = 1, b = 5, c = 3, d = 4$.

Подставим получившиеся значения на место стехиометрических коэффициентов: $C_3H_8 + 5O_2 \rightarrow 3CO_2 + 4H_2O$. Проверяем, верно ли

уровнялось уравнение реакции: количество углерода слева равно 3, справа равно 3; количество водорода слева равно 8, справа равно 8; количество кислорода слева равно 10, справа равно 10. Соответственно реакция уравнена верно.

Задача 2. Найдите значение мольной энтропии при стандартных условиях для веществ: CO , H_2O , CH_4 , имея следующие данные:

$$S_{298}^{\circ}(H_2) = 130,7 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{K)};$$

$$S_{298}^{\circ}(CO_2) = 213,8 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{K)};$$

$$S_{298}^{\circ}(CO_2) = 205 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{K)}.$$

$$1) CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2 \Delta S^{\circ} = -42,1 \text{ Дж/К}$$

$$2) CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O \Delta S^{\circ} = -4,84 \text{ Дж/К}$$

$$3) CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2 \Delta S^{\circ} = 214,46 \text{ Дж/К}$$

Решение: примем искомые величины за x , y и z соответственно. Составим систему уравнений, пользуясь тем, что энтропия — функция состояния. Следовательно, ее изменение находится по формуле: $\Delta S = \sum \nu S_{\text{прод.}} - \sum \nu S_{\text{исх. в-в}}$

Получим:

$$\Delta S^{\circ}(1): -42,1 = (213,8 + 130,7) - (x + y),$$

$$\Delta S^{\circ}(2): -4,84 = (213,8 + 2y) - (z + 2 \cdot 205),$$

$$\Delta S^{\circ}(3): 214,46 = (x + 3 \cdot 130,7) - (z + y).$$

Составим систему уравнений:

$$\begin{cases} x + y = 386,6, \\ 2y - z = 191,36, \\ x - y - z = -177,64. \end{cases}$$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 0 & 386,6 \\ 0 & 2 & -1 & 191,36 \\ 1 & -1 & -1 & -177,64 \end{array} \right) \sim \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 0 & 386,6 \\ 0 & 2 & -1 & 191,36 \\ 0 & -2 & -1 & -564,34 \end{array} \right) \sim$$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 0 & 386,6 \\ 0 & 2 & -1 & 191,36 \\ 0 & 0 & -2 & -372,88 \end{array} \right).$$

Возвращаемся к системе линейных уравнений:

$$\begin{cases} x + y = 386,6, \\ 2y - z = 191,36, \\ -2z = -372,88. \end{cases}$$

$$\text{Находим } z = 186,44; y = 188,9; x = 197,7.$$

$$\text{Ответ: } S_{298}^{\circ}(CO) = 197,7 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{K)};$$

$$S_{298}^{\circ}(H_2O) = 188,9 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{K)};$$

$$S_{298}^{\circ}(CH_4) = 186,4 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{K)}.$$

Задача 3. Найдите значение мольной энтропии при стандартных условиях для веществ: $C_4H_{10}(n)$, CH_3COOH , O_2 , имея следующие данные:

$$S_{298}^{\circ}(H_2O) = 188,9 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{K)};$$

$$S_{298}^{\circ}(CO_2) = 213,8 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{K)};$$

$$S_{298}^{\circ}(CH_3CHO) = 250,3 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{K)}.$$

$$1) 2C_4H_{10}(n) + 5O_2 \rightarrow 4CH_3COOH + 2H_2O$$

$$\Delta S^{\circ} = -137,66 \text{ Дж/К}$$

$$2) 2C_4H_{10}(n) + 13O_2 \rightarrow 8CO_2 + 10H_2O$$

$$\Delta S^{\circ} = 313,94 \text{ Дж/К}$$

$$3) 2CH_3CHO + O_2 \rightarrow 2CH_3COOH$$

$$\Delta S^{\circ} = -140,6 \text{ Дж/К}$$

Решение: примем искомые величины за x , y и z соответственно.

Составим систему уравнений:

$$\Delta S^{\circ}(1): -137,6 = (4y + 2 \cdot 188,9) - (2x + 5z),$$

$$\Delta S^{\circ}(2): 313,94 = (8 \cdot 213,8 + 10 \cdot 188,9) - (2x + 13z),$$

$$\Delta S^{\circ}(3): -140,6 = 2y - (2 \cdot 250,3 + z)$$

Составим систему уравнений:

$$\begin{cases} -2x + 4y - 5z = -515,46, \\ -2y - 13z = -3285,46, \\ 2y - z = 360. \end{cases}$$

$$\text{Находим } x = 310,23; y = 282,5; z = 205.$$

$$\text{Ответ: } S_{298}^{\circ}(C_4H_{10}(n)) = 310,23 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{K)};$$

$$S_{298}^{\circ}(CH_3COOH) = 282,5 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{K)};$$

$$S_{298}^{\circ}(O_2) = 205 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{K)}.$$

Составление систем линейных уравнений и их решение методом Гаусса обеспечивает решение многих практических задач из курса химии. Рассмотренные задачи, составленные с использованием таблицы «Термодинамические константы некоторых веществ» [1, с. 9], хорошо демонстрируют связь математики и химии, являются практико-ориентированными. Данные задачи можно использовать в курсе математики для студентов, обучающихся по направлениям «Фундаментальная и прикладная химия», «Химическая технология».

1. Общая и неорганическая химия: учеб. справочник / сост. А. Ф. Гусева и др. ; под общ. ред. С. С. Нохрина. — Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2012. — 80 с.

2. *Письменный Д. Т.* Конспект лекций по высшей математике: полный курс. — М. : Айрис-пресс, 2021. — 602 с.