

Gymnázium Christiana Dopplera, Zborovská 45, Praha

5

ROČNÍKOVÁ PRÁCE

Vyčíslování chemických rovnic

Vypracoval: Václav Stupka

Třída: 8.M

Školní rok: 2021/2022

Seminář: Seminář z programování

Prohlašuji, že jsem svou ročníkovou práci napsal samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím s využíváním práce na Gymnáziu Christiana Dopplera pro studijní účely.

V Praze dne Datum

Václav Stupka

Obsah

1	Úvod	3
2	Chemické rovnice	4
2.1	Zápis chemické rovnice	4
2.2	Vyčíslování chemických rovnic	5
2.3	Postup při vyčíslování chemické rovnice	5
2.4	Kontrola platnosti chemické rovnice	6
3	Řešení soustav lineárních rovnic pomocí matic	8
3.1	Vyjádření chemické rovnice maticí	8
3.2	Zpracování matice	9
3.3	Získání stechiometrických koeficientů	9
4	Závěr	11
	Literatura	12
	Přílohy	13

1. Úvod

Tématem mojí ročníkové práce je naprogramovat aplikaci, která vyčísluje chemické rovnice. Spolu s tím bylo nutné navrhnout příslušný algoritmus. Tento dokument obsahuje tři kapitoly. V první z nich se zabývám obecnými informacemi o chemických rovnicích a základními principy jejich vyčíslování. Druhá kapitola je zameraná na práci s maticemi při hledání řešení soustav lineárních rovnic – na této metodě je založený algoritmus tohoto programu. Poslední kapitola slouží jako jednoduchá dokumentace vytvořené aplikace. Příloha k dokumentu obsahuje ukázkou několika vzorových vstupů s příslušnými výstupy.

2. Chemické rovnice

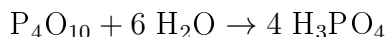
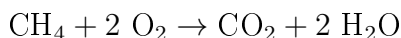
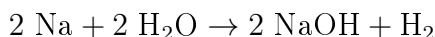
Chemická rovnice se používá jako zápis chemických reakcí. Udává seznam látek, které se reakce účastní a poměr jejich látkových množství (jinými slovy poměr počtu molekul jednotlivých sloučenin). Látky, které do rovnice vstupují, se nazývají reaktanty, které se zapasují na levou stranu rovnice. Pravá strana rovnice vyjadřuje, které látky danou reakcí vznikají (tzv. produkty).

2.1 Zápis chemické rovnice

Všechny reaktanty i produkty se zapisují svými chemickými vzorci. Před každou sloučeninou musí být uveden stechiometrický koeficient, tj. přirozené číslo vyjadřující relativní množství této látky vůči ostatním sloučeninám (číslo 1 se zpravidla vynechává). Obě strany rovnice se oddělují nejčastěji symbolem \rightarrow . Mezi jednotlivými reaktanty na levé a produkty na pravé straně rovnice se píše znaménko $+$.

V případě, že v zápisu chemické reakce nejsou uvedeny stechiometrické koeficienty, nazývá se tento zápis reakčním schématem. Vyjadřuje pouze, které látky se reakce účastní, nikoli však jejich množství. Z toho důvodu se zpravidla nepoužívá.

Příklady zápisu chemických rovnic:



Rovnice kromě toho může obsahovat i další údaje o vlastnostech chemických látek nebo průběhu reakce (např. skupenství látek, energie, další látky, které se účastní reakce, ale jejich množství se nemění – tzv. katalyzátory). Tyto informace však nejsou podstané pro potřeby této ročníkové práce.

2.2 Vyčíslování chemických rovnic

Proces, při kterém jsou do reakčního schématu doplňovány stechiometrické koeficienty, čímž vzniká chemická rovnice, se nazývá vyčíslování. Při něm se využívá několika chemických a fyzikálních zákonů, které musí každá chemická reakce splňovat.

Jedním z nich je zákon zachování hmotnosti. Z chemického pohledu je možné ho vyjádřit v následujícím znění: při reakci se zachovává počet a druh všech atomů. Pro chemickou rovnici to znamená, že celkový počet atomů jednoho prvku ve všech sloučeninách je stejný na obou stranách rovnice. Tento zákon je hlavní pomůckou při vyčíslování.

Dále je možné použít také zákon zachování elektrického náboje, podle kterého platí, že celkový součet elektrických nábohů je stejný na obou stranách rovnice. Tím se zde ale nebudu zabývat, protože ho můj program nepoužívá.

2.3 Postup při vyčíslování chemické rovnice

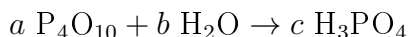
Existuje několik metod, které lze při vyčíslování použít. Můj program používá postup založený výhradně na zákonu zachování hmotnosti. Chemickou rovnici je možné převést na soustavu lineárních rovnic jejichž počet odpovídá počtu prvků ve sloučeninách. Neznámé této rovnice odpovídají stechiometrickým koeficientům jednotlivých sloučenin. Způsobem, jak tuto soustavu vyřešit, se budu zabývat v následující kapitole.

Protože se v těchto rovnicích nevyskytují absolutní členy (resp. jejich hodnota je vždy rovna 0), nebude mít tato soustava jednoznačné řešení. Jinými slovy pokud je řešením uspořádaná n -tice $[a_1, a_2, \dots, a_n]$, je řešením i $[ka_1, ka_2, \dots, ka_n]$, $k \in \mathbb{N}$. To je možné dokázat pomocí substituce $\forall i \leq n \wedge i \in \mathbb{N} : b_i = ka_i, k \in \mathbb{N}$. Po dosazení do soustavy a vynásobení všech rovnic číslem k získáme stejnou rovnici jako napočátku, ale místo kořenů a_i zaujmají kořeny b_i , přičemž $a_i \neq b_i$. Jako stechiometrické koeficienty se proto použije taková n -tice, jejíž členy jsou vzájemně nesoudělná přirozená čísla.

Příklad

Při vyčíslení chemické rovnice $\text{P}_4\text{O}_{10} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_3\text{PO}_4$ lze postupovat následovně:

Nejprve do rovnice doplníme neznámé na místo stechiometrických koeficientů:



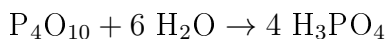
Chemickou rovnici je možné rozdělit na soustavu lineárních rovnic, jejichž počet odpovídá počtu prvků ve sloučeninách. Neznámými jsou potom stechiometrické koeficienty. V tomto případě bude soustava vypadat následovně:

$$4a + 0b = c \quad (\text{pro počty P})$$

$$10a + b = 4c \quad (\text{pro počty O})$$

$$0a + 2b = 3c \quad (\text{pro počty H})$$

Řešením je každá uspořádaná trojice $[a, 6a, 4a]$, $a \in \mathbb{N}$. Tato trojice je nesoudělná, pokud $a = 1$. Tudíž $[a, b, c] = [1, 6, 4]$. Chemická rovnice tak bude mít podobu:



2.4 Kontrola platnosti chemické rovnice

Obecně je velice těžké posoudit, zda rovnice znázorňuje reálnou chemickou reakci. Přesto existuje jednoduchý způsob, jak některé rovnice snadno vyloučit. Jsou to ty, ve kterých není možné zajistit platnost zákona zachování hmoty. To se projeví tím, že stechiometrický koeficient alespoň jedné sloučeniny vyjde rovný 0.

Příklad:



Soustava rovnic vypadá následovně:

$$a = c \quad (\text{pro prvek Na})$$

$$2b = c + 2d \quad (\text{pro prvek H})$$

$$b = c \quad (\text{pro prvek O})$$

$$0 = e \quad (\text{pro prvek Fe})$$

Nesoudělným řešením je $[a, b, c, d, e] = [2, 2, 2, 1, 0]$. Chemická rovnice má podobu:



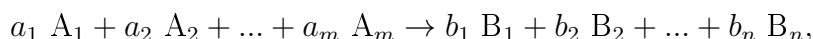
Taková rovnice však nedává smysl. Můžeme ji proto vyloučit čistě na základě jejího vyčíslení. Toto je jediná kontrola, kterou můj program provádí.

3. Řešení soustav lineárních rovnic pomocí matic

Jako postup pro řešení soustavy popsané v předchozí kapitole jsem se rozhodl použít matici, kterou převedu pomocí elementárních úprav na specifický tvar, který je popsáný v další části této kapitoly.

3.1 Vyjádření chemické rovnice maticí

Mějme obecnou chemickou rovnici:



kde $A_1, A_2, \dots, A_m, B_1, B_2, \dots, B_n$ jsou různé chemické sloučeniny. Lze ji převést na soustavu lineárních rovnic:

$$c_{11}a_1 + c_{12}a_2 + \dots + c_{1m}a_m = d_{11}b_1 + d_{12}b_2 + \dots + d_{1n}b_n$$

$$c_{21}a_1 + c_{22}a_2 + \dots + c_{2m}a_m = d_{21}b_1 + d_{22}b_2 + \dots + d_{2n}b_n$$

$$c_{31}a_1 + c_{32}a_2 + \dots + c_{3m}a_m = d_{31}b_1 + d_{32}b_2 + \dots + d_{3n}b_n$$

...

Koeficient c_{ij} vyjadřuje počet atomů i -tého prvku ve sloučenině A_j a d_{ij} vyjadřuje počet atomů i -tého prvku ve sloučenině B_j .

Po převedení pravých stran rovnic na levé je možné k soustavě vytvořit její matici, která má podobu:

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \dots & c_{1m} & -d_{11} & -d_{12} & \dots & -d_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & \dots & c_{2m} & -d_{21} & -d_{22} & \dots & -d_{2n} \\ c_{31} & c_{32} & \dots & c_{3m} & -d_{31} & -d_{32} & \dots & -d_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \end{pmatrix}$$

Rozšířená matice soustavy je potom:

$$\mathbb{A}|b = \left(\begin{array}{cccccccc|c} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1m} & -d_{11} & -d_{12} & \cdots & -d_{1n} & 0 \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2m} & -d_{21} & -d_{22} & \cdots & -d_{2n} & 0 \\ c_{31} & c_{32} & \cdots & c_{3m} & -d_{31} & -d_{32} & \cdots & -d_{3n} & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \end{array} \right)$$

Protože na pravé straně všech rovnic je 0, nebudu dále pravou stranu v matici uvažovat, tj. pracovat budu pouze s maticí \mathbb{A} .

3.2 Zpracování matice

Pro úpravu matice použiji všechny řádkové úpravy uvedené ve zdroji [3], tedy prohození dvou řádků, vynásobení řádku nenulovým číslem, přičtení jednoho řádku k jinému a vynechání nulového řádku. Poslední jmenovanou úpravu zdroj nepovažuje za elementární, protože se při ní nezachovává typ matice, pro účely této práce však bude vhodné ji taktéž použít.

Cílem úprav je matice ve tvaru

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} k & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & l \\ 0 & k & 0 & 0 & \cdots & 0 & m \\ 0 & 0 & k & 0 & \cdots & 0 & n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & k & z \end{pmatrix}$$

kde $k \in \mathbb{N}$ a $l, m, n, \dots, z \in \mathbb{Z}^+$. Počet sloupců matice nadále odpovídá počtu sloučenin a je o jedna vyšší než počet řádků (ten se mohl snížit vzhledem k odstraňování nulových řádků a nemusí tak odpovídat počtu prvků).

3.3 Získání stechiometrických koeficientů

V případě, že se podaří matici upravit do tvaru popsaného v předchozí části, lze již tvrdit, že chemická rovnice bude vždy vyčíslitelná. Zároveň je také možné přímo získat nejjednodušší možný výsledek tvořený nesoudělnými stechiometrickými koeficienty.

V případě, že se nepodaří upravit matici do tohoto tvaru, mohou nastat dvě možnosti. Je-li počet sloupců roven počtu řádků, pak alespoň jeden z kořenů soustavy má nulovou hodnotu. Chemická rovnice je potom neplatná. Pokud je počet sloupců vyšší než počet řádků o více než jedna, pak by bylo nutné provést další kroky ke zjištění, zda existuje platné řešení a jakou má podobu. Můj program však tento postup neobsahuje a proto se jím nebudu zabývat.

4. Závěr

Vytvořil jsem program, jehož cílem je vyčíslovat chemické rovnice. Vysvětlil jsem, co to je a jakým způsobem ji lze vyčíslit. Základem aplikace je algoritmus pro řešení soustav lineárních matic, jehož popis je hlavní součástí této ročníkové práce. Jedná se o můj vlastní návrh, který je vhodný pouze pro tento účel – pro obecné řešení soustav rovnic se nehodí. Na závěr jsem také ukázal, jakým způsobem se program používá a jakou podobu má mít vstup. Součástí této práce je také příloha s několika ukázkovými vstupy a příslušnými výstupy.

Literatura

- [1] Aleš Mareček, Jaroslav Honza. (1998): *Chemie pro čtyřletá gymnázia*.
Třetí opravené vydání. Olomouc: Nakladatelství Olomouc.
ISBN: 80-7182-055-5.

- [2] Wikipedie. Chemická rovnice.
https://cs.wikipedia.org/wiki/Chemick%C3%A1_rovnice
(30. ledna 2022)

- [3] Soustavy lineárních rovnic
<http://dimatia.fav.zcu.cz/2005/vyuka/zm1/soustavy.pdf>
(30. ledna 2022)

Přílohy

Příloha 1 - cílový tvar matice

ddddddddddddd

Příloha 2

ddddddddddddd

Příloha 3

dddddddddddddd

Příloha 4

ddddddddddddd