

# МАТЕМАТИКА В ХИМИИ<sup>1</sup>

**В.В. Еремин**

*Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Российская Федерация*

Никто не сделал так много для улучшения условий жизни людей, как химики.

*Г. Крото, Нобелевский лауреат по химии 1996 года*

Химия – одна из наук, изучающих природу. Многие химики, проявляя свойственный профессионалам снобизм, считают ее основой естествознания. Впрочем, точно так же думают физики и биологи. И каждый имеет на то свои основания. Физика рассматривает наиболее общие законы Вселенной, биология исследует самое интересное явление во Вселенной – жизнь, а химия изучает то, из чего построены объекты окружающего мира, – вещества. Все многообразие проблем, которые решает химия, можно свести к следующим основным вопросам:

- Какие бывают вещества?
- Как они устроены?
- Как связано строение веществ с их свойствами?
- Как из одних веществ получить другие, более полезные или интересные?

Химия как наука и как способ познания природы обладает необычными свойствами. У нее нет собственных законов. Все законы химии, включая Периодический закон, служат лишь частными проявлениями общих законов, которыми занимается физика. Поэтому недалекие научные работники считают химию частью физики. Разумеется, это глубоко ошибочная точка зрения. А что же есть в химии своего? В первую очередь, колоссальное многообразие изучаемых объектов. Одних только чистых индивидуальных веществ в химии охарактеризовано около 20 миллионов<sup>2</sup>, не считая многочисленных смесей. А ведь есть еще и химические реакции между веществами. Из всех известных химии веществ лишь очень небольшая доля – всего несколько процентов – имеется в природе, остальные вещества – продукт деятельности учёных. По мнению выдающего американского химика Роальда Хоффмана (род. 1937), химики отличаются от любых других ученых тем, что собственноручно творят те объекты, которые потом воспринимают и изучают. В точности то же самое делают писатели, художники и композиторы. Это роднит химию с искусством. Другие естественные науки – физика и биология – изучают то, что создано природой, а химия – главным образом то, что сделала сама.

---

<sup>1</sup> Статья написана по мотивам лекции для математиков на «Малом мехмате» МГУ.

<sup>2</sup> Самая большая из всех известных к концу прошлого века молекул – ДНК одного из бактериофагов – содержит 199013 атомов.

Химия сродни не только искусству, но и волшебству. Многие химические опыты, сопровождающиеся неожиданным изменением цвета, объема или агрегатного состояния, производят на непосвященных людей магическое впечатление. Во все времена химики отличались большим искусством трансформации веществ. Именно поэтому специалистов по какому-нибудь делу, ловких людей и даже мошенников на Руси шуточно называли «химиками». Д.И. Менделеев вспоминал о таком случае: «Еду я в Москве как-то на извозчике, а навстречу нам полицейские ведут кучку каких-то жуликов. Извозчик мой поворачивается и говорит: «Ишь, химиков повели» [1, с. 180].

Химикам присущ уникальный, характерный только для них, взгляд на окружающий мир. Нобелевский лауреат, один из первооткрывателей фуллеренов Гарольд Крото (род. 1939) писал [2]: «Химики, по-моему, страдают особой формой «шизофрениии». В самом деле, их мышление – это причудливая смесь самых абстрактных и совсем наглядных представлений. Они знают о тонких квантово-механических закономерностях, определяющих свойства молекул, которые, в свою очередь, ответственны за все многообразие окружающего нас мира. Эта взаимосвязь микро- и макромира остается скрытой от ученых других специальностей. Кроме того, никто не сделал так много для улучшения условий жизни людей, как химики, но их заслуги в должной мере не оценены».

Настоящий химик всегда «чувствует вещество». Это проявляется и в лаборатории, где создаются рецепты синтеза новых веществ, и в быту, где, например, бывает нужно подобрать подходящий клей или растворитель. Современные химики умеют работать не только с большими количествами веществ, но и с отдельными атомами и молекулами. Техника манипулирования атомами достигла такой высокой степени развития, что химики могут синтезировать любую наперед заданную молекулу или надмолекулярную структуру со сложной архитектурой. Теперь главное – понять, что именно надо синтезировать. На первый план в химии выходит прикладной аспект: основная задача состоит в поиске новых веществ, обладающих полезными свойствами – катализаторов, лекарственных средств, строительных материалов, аккумуляторов энергии.

### **Роль математики в химии**

«Кто не понимает ничего, кроме химии, тот и ее понимает недостаточно».

*Г.К. Лихтенберг (1742-1799), немецкий ученый и писатель.*

«В любой науке столько истины, сколько в ней математики».

*Иммануил Кант (1724-1804)*

Химия широко использует в своих целях достижения других наук, в первую очередь, физики и математики. Химики обычно определяют математику упрощенно – как науку о числах. Числами выражаются многие свойства веществ и характеристики химических реакций. Для описания веществ и реакций используют физические

теории, в которых роль математики настолько велика, что иногда трудно понять, где физика, а где математика. Отсюда следует, что и химия немислима без математики.

Математика для химиков – это, в первую очередь, полезный инструмент решения многих химических задач. Очень трудно найти какой-либо раздел математики, который совсем не используется в химии. Функциональный анализ и теория групп широко применяются в квантовой химии, теория вероятностей составляет основу статистической термодинамики, теория графов используется в органической химии для предсказания свойств сложных органических молекул, дифференциальные уравнения – основной инструмент химической кинетики, методы топологии и дифференциальной геометрии применяются в химической термодинамике. Выражение «математическая химия» прочно вошло в лексикон химиков. Многие статьи в серьезных химических журналах не содержат ни одной химической формулы, зато изобилуют математическими уравнениями.

Приложения математики в химии обширны и разнообразны. Ниже мы постараемся вам это показать.

### **Какие ограничения накладывает химия на решение математических задач?**

Как-то раз Гаусс спорил с Авогадро (1776-1856) о сущности научных законов. Гаусс утверждал, что законы существуют только в математике, а потому химия почитаться за науку не может. В ответ Авогадро сжег 2 л водорода в литре кислорода и, получив два литра водяного пара, торжественно воскликнул: «Вот видите! Если химия захочет, то два плюс один окажутся равны двум. А что скажет на это ваша математика?» ([1], с. 95).

Математические уравнения и методы, используемые в химии, имеют дело не с абстрактными величинами, а с конкретными свойствами атомов и молекул, которые подчиняются естественным природным ограничениям. Иногда эти ограничения бывают довольно жесткими и приводят к резкому сужению числа возможных решений математических уравнений. Говоря другим языком, математические уравнения, применяемые в химии, а также их решения должны иметь химический смысл. Рассмотрим конкретные примеры.

#### **1) Число атомов в молекулах должно быть положительным целым числом.**

Рассмотрим уравнение  $12x + y = 16$ . Для математика это уравнение описывает прямую линию на плоскости. Оно имеет бесконечно много решений, в том числе и целочисленных. А для химика выражение  $12x + y$  описывает молекулярную массу углеводорода  $C_xH_y$  (12 – атомная масса углерода, 1 – водорода). Молекулярную массу 16 имеет единственный углеводород – метан  $CH_4$ , поэтому только одно решение данного уравнения обладает химическим смыслом:  $x = 1, y = 4$ .

2) Одно из ключевых понятий химии – валентность, то есть число химических связей, которыми данный атом соединен с другими. **Валентность почти всегда является положительным целым числом**<sup>3</sup>. Например, углерод в органических соеди-

---

<sup>3</sup> В некоторых приложениях квантовой химии фигурируют дробные значения валентности.

нениях почти всегда четырехвалентен. Это накладывает некоторые ограничения на химические формулы. Например, число атомов водорода во всех углеводородах четно. Кроме того, оно всегда имеет верхнюю границу.

Найдем максимально возможное число атомов водорода в углеводороде, содержащем  $n$  атомов углерода. Любой химик, будь то школьник, студент или научный сотрудник, сразу скажет, что это число равно  $2n + 2$ . Оно соответствует предельным углеводородам – алканам. Решим эту задачу с помощью математических рассуждений.

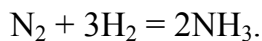
Общее число валентностей углерода в молекуле  $C_nH_x$  равно  $4n$ , так как каждый атом углерода четырехвалентен. Что входит это число? Атомы углерода связаны друг с другом и с атомами водорода. Минимально возможное число связей С–С равно  $(n-1)$  – оно необходимо, чтобы углеродный скелет не имел разрывов. В каждой такой связи участвует два атома углерода, поэтому число валентностей, расходуемых на связи С–С, равно  $2(n-1)$ . Остальные  $4n - 2(n-1) = 2n + 2$  валентностей расходуются на связи С–Н. Водород одновалентен, поэтому число его атомов равно числу связей С–Н:  $x = 2n + 2$ . Доказательство закончено.

**3) Многие физические величины**, используемые для описания химических веществ и реакций, **могут принимать только неотрицательные значения**: масса, объем, концентрация, скорость реакции и др.

Химикам часто приходится решать задачи на расчет состава равновесной смеси. В них возникают полиномиальные уравнения относительно доли превращения исходных веществ в продукты. Согласно основной теореме алгебры полином  $n$ -ой степени имеет ровно  $n$  корней, среди которых могут быть и комплексные. Однако во всех уравнениях, возникающих в химии, только один корень имеет химический смысл.

Рассмотрим такой пример. Смесь азота и водорода в соотношении 1 : 3 нагрели до установления равновесия. Рассчитаем, какая доля исходных веществ превратилась в аммиак, если константа равновесия при конечной температуре смеси и давлении 100 атм равна  $5 \cdot 10^{-6}$ .

Запишем уравнение реакции:



Составим таблицу, в которой указаны количества веществ до реакции, вступивших в реакцию и после реакции. Долю прореагировавшего азота обозначим  $x$ .

Количества веществ, моль	$N_2$	$H_2$	$NH_3$	Всего
Исходный состав	1	3	0	
Вступило в реакцию	$x$	$3x$	$2x$	
Конечный (равновесный) состав	$1 - x$	$3 - 3x$	$2x$	$4 - 2x$

Неизвестное  $x$  можно определить из уравнения, выражающего константу равновесия через давления находящихся в смеси газов:

$$K = \frac{P_{\text{NH}_3}^2}{P_{\text{N}_2} P_{\text{H}_2}^3} = \frac{\left(\frac{2x}{4-2x} P\right)^2}{\frac{1-x}{4-2x} P \cdot \left(\frac{3-3x}{4-2x} P\right)^3} = 5.0 \cdot 10^{-6}$$

При  $P = 100$  атм данное уравнение 4-й степени относительно  $x$  имеет четыре действительных корня:

$$x_1 = -0.187, x_2 = 0.120, x_3 = 1.880, x_4 = 2.187,$$

из которых только один ( $x_2$ ) удовлетворяет условию положительности концентраций. Такой результат совершенно типичен для расчетов химических равновесий: каким бы сложным ни было уравнение относительно степени превращения реагентов в продукты и сколько бы корней (в том числе и положительных) оно ни имело, всегда только один корень будет обладать химическим смыслом, то есть приводить к положительным равновесным концентрациям всех веществ.

В данном примере выход реакции, то есть доля прореагировавших веществ, составил 12%.

4) **В химии нет иррациональных чисел.** Иррациональное число содержит бесконечное число знаков в десятичной записи. Химия – наука экспериментальная, она оперирует с результатами измерений, которые выражаются или целыми числами, или дробными, но полученными с конечной точностью, как правило, не более 4 значащих цифр. Например, показатель преломления вещества может быть равен 1.414, но не бывает равным  $2^{1/2}$ . Поэтому числа  $\pi$  и  $e$ , часто возникающие в химических расчетах, обычно округляют до 3.14 и 2.72, соответственно.

5) **В химии нет понятия «бесконечность».** Число атомов в наблюдаемой части Вселенной очень велико, но конечно, поэтому в природе нет бесконечно больших величин. Каковы же самые большие числа, используемые химиками? Число атомов во Вселенной оценивается как  $10^{80}$ , на Земле –  $10^{50}$  атомов, в человеческом организме их примерно  $10^{27}$ . В статистической термодинамике возникает число способов перестановки одинаковых молекул в порции жидкого вещества, которое равно  $N!$ , где  $N \sim 10^{23}$ . Для оценки этого числа используем формулу Стирлинга:

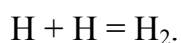
$$\ln(10^{23}!) \approx 10^{23} \ln(10^{23}) - 10^{23} \approx 5 \cdot 10^{24}$$

$$10^{23}! \approx \exp(5 \cdot 10^{24}) \approx 10^{2 \cdot 10^{24}}$$

Для сравнения, математик Харди утверждал [3], что самое большое число, которое когда-либо служило какой-либо цели в математике, равно

$$10^{10^{10^{34}}}.$$

Аналогично, в химии нет и бесконечно малых величин. Каждая физическая величина – время, энергия, масса, расстояние – имеет конечное наименьшее значение, которому присущ химический смысл. Например, время в химии ограничено снизу значением  $10^{-14}$  с, которое характеризует самую быструю реакцию среди всех возможных:



Нижняя граница для расстояний – это  $10^{-10}$  м, то есть характерный размер атомов. Меньшие значения с точки зрения химии уже не имеют смысла.

Раз нет бесконечно малых величин, то, строго говоря, теряет смысл понятие «производной в точке», которое равно отношению бесконечно малых приращений функции и аргумента. Тем не менее, в химии производная играет очень большую роль: производные по температуре, давлению и объему составляют основу математического аппарата химической термодинамики, а производные по времени – химической кинетики. Это связано с тем, что при той точности измерений, которая принята в химии, отличие производной от отношения конечных приращений экспериментально ненаблюдаемо, то есть равно нулю практически:

$$f'(t) - \frac{\Delta f}{\Delta t} \approx 0.$$

### **Симметрия в химии. Как она помогает устанавливать структуру**

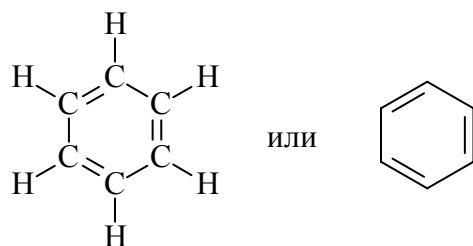
Симметрия – одно из основных понятий в современной науке. Она лежит в основе фундаментальных законов природы, таких как закон сохранения энергии. Симметрия – очень распространенное явление в химии: практически все известные молекулы либо сами обладают симметрией какого-либо рода, либо содержат симметричные фрагменты [4]. Так что, пожалуй, в химии труднее обнаружить несимметричную молекулу, чем симметричную.

Из всех многочисленных применений теории симметрии в химии мы рассмотрим только одно – довольно красивое, хотя и несколько устаревшее: как с помощью симметрии определить структуру вещества, если известна его молекулярная формула?

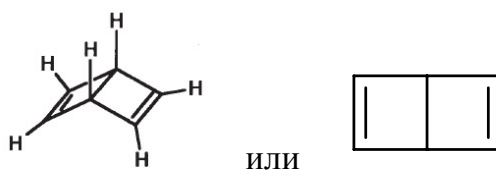
Одно из самых популярных в химии веществ – бензол. Он был выделен знаменитым ученым Майклом Фарадеем в 1825 г. из светильной жидкости, которая в то время применялась для освещения улиц. В те же годы была установлена молекулярная формула бензола  $C_6H_6$ . Однако его строение долгое время оставалось загадкой: даже после того, как было установлено, что углерод имеет валентность IV и может образовывать двойные  $C=C$  и тройные  $C\equiv C$  связи, было непонятно, как и в какой последовательности соединены между собой атомы углерода.

Определить число возможных изомеров состава  $C_6H_6$ , в которых углерод имеет валентность IV, а водород – I, – это отдельная математическая задача. Ее решение дает число 217 – именно столько существует топологически различных структур, отвечающих формуле  $C_6H_6$ . Большинство из них не представляет интереса для химии, так как из-за пространственных ограничений они могут существовать только на бумаге. Однако задачу о числе изомеров можно поставить более узко: сколько существует структур, составленных только из фрагментов  $CH$ ? Этот фрагмент имеет валентность III. Скомбинировать шесть таких фрагментов друг с другом можно всего шестью способами. Перечислим возможные структуры:

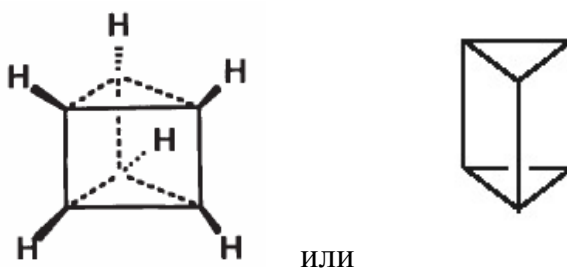
1) Основу кекулевского бензола составляет правильный шестиугольник из атомов углерода, связанных между собой чередующимися одинарными и двойными связями:



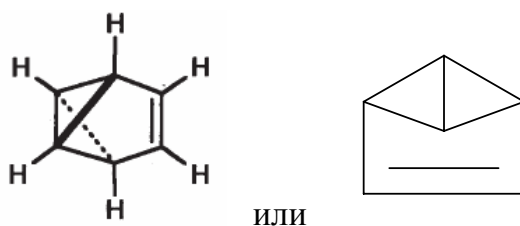
2) Дьюаровский бензол имеет бициклическую структуру и две двойные связи C=C:



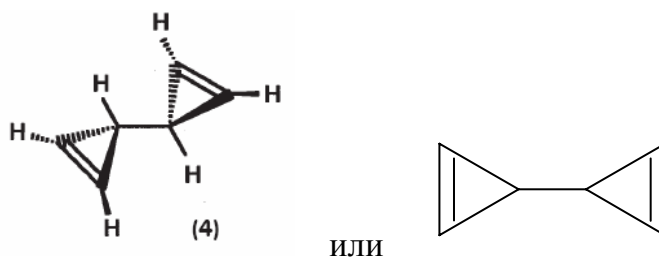
3) В призме (бензоле Ладенбурга) углеродный каркас имеет форму треугольной призмы, а все связи в молекуле – одинарные:



4) Бензвален содержит несколько углеродных циклов – один пятичленный и два трехчленных:



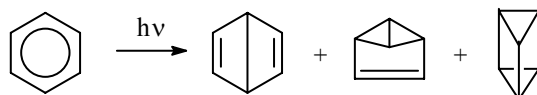
5) Бициклопропенил составлен из двух связанных между собой циклических фрагментов:



б) Гипотетический бензол Клауса имеет следующий вид:



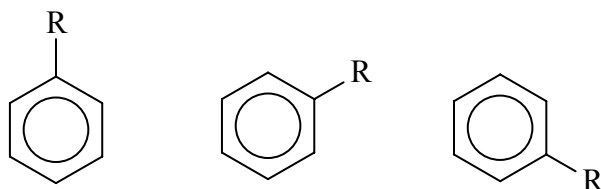
В последней структуре связи между атомами не пересекаются в центре молекулы. Из этих шести структур пять были получены в индивидуальном виде. В частности, смесь дьюаровского бензола, бензвалена и призмана получается при ультрафиолетовом облучении обычного жидкого бензола:



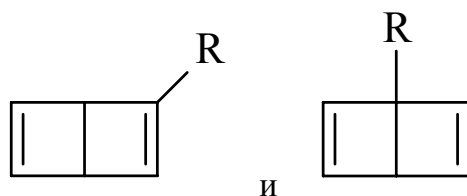
Бензол Клауса не существует из-за пространственных ограничений.

Теперь посмотрим, какие экспериментальные факты позволили приписать бензолу формулу Кекуле. Найдем число теоретически возможных производных бензола, в которых один или несколько атомов водорода замещены на другие атомы или группы атомов (обозначим заместитель буквой R). Экспериментально определено, что для каждого R существует только одно монозамещенное производное  $C_6H_5R$  и ровно три дизамещенных  $C_6H_4R_2$ .

Существование только одного монозамещенного говорит о том, что все атомы углерода в  $C_6H_6$  структурно эквивалентны. Этому условию удовлетворяют только бензолы Кекуле и Ладенбурга. В самом деле, в силу симметрии бензола Кекуле замещенные структуры



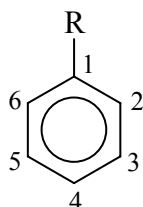
представляют одно и то же вещество. Аналогично – для бензола Ладенбурга. А вот в бензоле Дьюара атомы углерода бывают двух типов: при двойной связи и вне ее, поэтому возможны два типа монозамещенных:



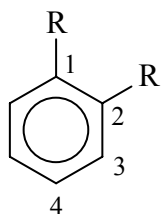
Попробуйте самостоятельно определить, сколько различных монозамещенных состава  $C_6H_5R$  существует у бензвалена и бициклопропенила.

Определим теперь теоретическое число различных дизамещенных,  $C_6H_4R_2$ . После введения первого заместителя в молекулу кекулевского бензола симметрия молекулы уменьшается: если в молекуле  $C_6H_6$  все атомы углерода в кольце были эквивалентны, то в  $C_6H_5R$  эквивалентность сохраняется только между атомами 2,6 и 3,5:

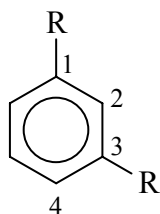




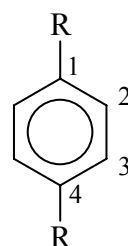
Поэтому добавление второго R в молекулу  $C_6H_5R$  приводит к трем дизамещенным – *орто*-, *мета*- и *пара*-изомерам:



*орто*-изомер  
(1,2-)

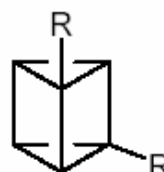
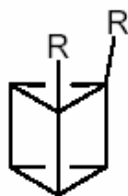


*мета*-изомер  
(1,3-)



*пара*-изомер  
(1,4-)

Для призмана, на первый взгляд, число дизамещенных точно такое же – три:

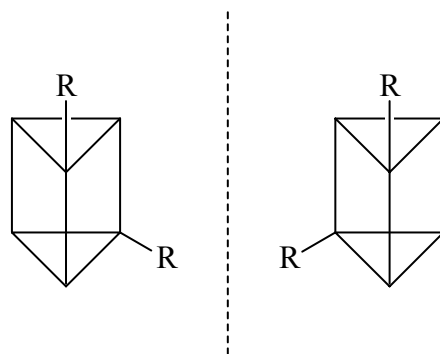


Именно так рассуждал Ладенбург, который считал, что благодаря этому факту его модель соответствует молекуле бензола. Однако Ладенбург был не совсем прав. На самом деле, существует четвертое дизамещенное производное. Дело в том, что одна из структур, а именно правая, не имеет ни осей, ни плоскостей симметрии. Такие молекулы не совпадают со своим зеркальным отражением. Их называют зеркально асимметричными или оптически активными, потому что они способны взаимодействовать с плоскополяризованным светом. Молекулы, имеющие плоскость симметрии, зеркально симметричны и на плоскополяризованный свет не влияют.

Зеркальная асимметрия – понятие не только химическое. Зеркально асимметричные объекты встречаются не только в химии, но и в окружающем нас мире. Например, левая и правая рука являются зеркальным отображением друг друга, но не совпадают между собой<sup>4</sup>.

Одно из дизамещенных призмана также является зеркально асимметричным и может существовать в виде двух оптических изомеров:

<sup>4</sup> В химии зеркально асимметричные объекты часто называют *хиральными* (от греческого *chier* – рука).



А у кекулевского бензола и его моно- и дизамещенных не существует оптических изомеров, так как молекула бензола – плоская и его производные имеют плоскость симметрии, проходящую через атомы углерода.

Следовательно, единственной структурой, удовлетворяющей экспериментальным данным о числе моно- и дизамещенных производных, является кекулевский бензол.

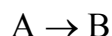
Вот так соображения симметрии позволяют установить структуру молекул, анализируя число их производных или количество продуктов реакций.

### Какая связь между дифференциальным уравнением $y' = y/x - 1$ и сложным эфиром этиленгликоля и уксусной кислоты?

Поговорим о дифференциальных уравнениях в химии.

Химия изучает свойства веществ и их зависимость от условий – температуры, давления, концентрации. Поэтому химикам часто приходится исследовать функции одной или нескольких переменных. Как известно, основной способ исследования функции – анализ ее производной. Некоторые законы химии имеют дело с производными и устанавливают правила, по которым можно рассчитать производные и найти искомые функции.

В первую очередь это касается химической кинетики – науки о скоростях и механизмах химических реакций. Скорость химической реакции показывает, насколько быстро увеличивается количество продуктов реакции и уменьшается количество исходных веществ (реагентов). Она обычно определяется как производная от концентрации продуктов по времени. Например, для реакции изомеризации вида



скорость реакции  $r$ , по определению, равна:

$$r(t) = c_B'(t).$$

Как и концентрации, скорость реакции зависит от времени. Согласно уравнению реакции, сколько молекул В образовалось, столько же молекул А израсходовано, поэтому общее количество молекул А и В в любой момент времени остается неизменным – оно равно исходной концентрации А:

$$c_A(t) + c_B(t) = c_{A,0}.$$

Продифференцировав это тождество по времени и учтя, что производная от постоянной равна 0, находим, что скорость реакции можно выразить и через производную от концентрации исходного вещества А:

$$c_A'(t) + c_B'(t) = 0$$

$$r(t) = c_B'(t) = -c_A'(t)$$

Основной закон химической кинетики утверждает, что скорость элементарной реакции (то есть, реакции, протекающей в одну стадию) пропорциональна произведению концентраций всех реагирующих веществ. В реакции изомеризации участвует только одно вещество, поэтому ее скорость прямо пропорциональна концентрации А:

$$r(t) = kc_A(t),$$

где  $k$  – коэффициент пропорциональности, называемый константой скорости. Он не зависит ни от времени, ни от концентраций, поэтому и называется константой.

Закон действующих масс в сочетании с определением скорости дает дифференциальное уравнение, которому подчиняется концентрация исходного вещества А:

$$-c_A'(t) = kc_A(t).$$

Если задана начальная концентрация, то это уравнение имеет единственное решение. Оно выражается через экспоненциально убывающую функцию от времени:

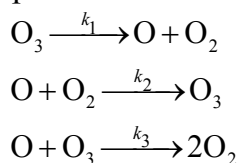
$$c_A(t) = c_A(0)e^{-kt}.$$

Данное решение имеет ряд интересных свойств. Например, время, за которое происходит превращение половины вещества А, не зависит от его концентрации, а определяется только константой скорости:

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$$

Разные реакции первого порядка отличаются только начальными концентрациями  $c(0)$  и константами скорости  $k$  (периодами полураспада). Так, период полураспада радиоактивного изотопа иода  $^{131}\text{I}$ , который попал в атмосферу в результате Чернобыльской аварии, – 8 дней. Через месяц после аварии распалось 93% этого изотопа, а через два месяца – 99.5%. Другой изотоп, который попадал в атмосферу в результате ядерных испытаний –  $^{90}\text{Sr}$  – имеет период полураспада 28,1 лет. За два месяца распадается только 0,42% этого изотопа.

В сложных химических реакциях, состоящих из нескольких стадий, закон действующих масс записывается независимо для каждой стадии. Рассмотрим, например, реакцию разложения озона  $\text{O}_3$ , которая состоит из трех стадий:



Озон расходуется в первой и третьей реакциях и образуется во второй. Скорость изменения его концентрации выражается следующим образом:

$$c_{\text{O}_3}'(t) = -r_1 + r_2 - r_3 = -k_1c_{\text{O}_3}(t) + k_2c_{\text{O}}(t)c_{\text{O}_2}(t) - k_3c_{\text{O}}(t)c_{\text{O}_3}(t)$$

Аналогичным образом находятся уравнения для двух других участников реакции – атомарного и молекулярного кислорода:

$$c_{O'}(t) = r_1 - r_2 - r_3 = k_1 c_{O_3}(t) - k_2 c_{O'}(t) c_{O_2}(t) - k_3 c_{O'}(t) c_{O_3}(t)$$

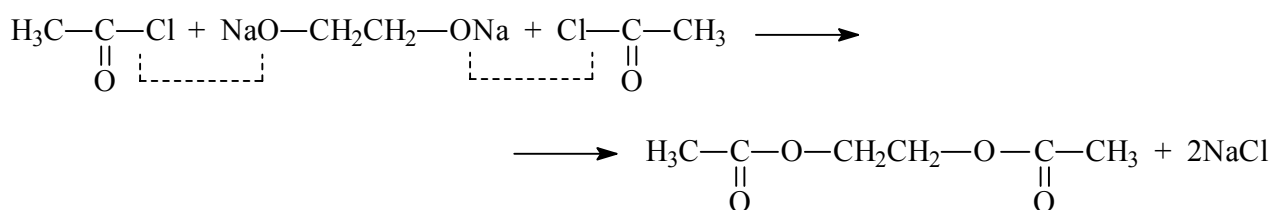
$$c_{O_2}'(t) = r_1 - r_2 + 2r_3 = k_1 c_{O_3}(t) - k_2 c_{O'}(t) c_{O_2}(t) + 2k_3 c_{O'}(t) c_{O_3}(t)$$

Данная система трех дифференциальных уравнений первого порядка имеет однозначное решение при условии, что заданы начальные концентрации веществ, например:

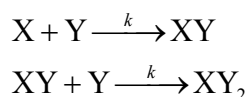
$$c_{O_3}(0) = 0.01 \text{ моль/л}, \quad c_{O'}(0) = 0, \quad c_{O_2}(0) = 0.$$

Решение находят или численными методами, или аналитически, то есть выражают его через элементарные функции. Последнее достигается, как правило, с помощью приближенных методов.

Иногда, используя специальные приемы, удается найти точное решение. Рассмотрим реакцию образования сложного эфира этиленгликоля и уксусной кислоты [5]. Для его получения берут динариевую соль этиленгликоля  $\text{NaOCH}_2\text{CH}_2\text{ONa}$  и хлорангидрид уксусной кислоты  $\text{CH}_3\text{COCl}$ :



Эта реакция протекает в две стадии: сначала с солью реагирует одна молекула хлорангидрида, затем – вторая. Обозначив исходные вещества через X и Y, механизм реакции можно записать в виде:



где  $\text{XY}_2$  – продукт реакции, полный сложный эфир, а  $\text{XY}$  – промежуточное вещество, содержащее только одну сложноэфирную группу  $-\text{O}-\text{CO}-$ . Константы скорости  $k$  в обеих стадиях одинаковы, так как в каждом случае между собой реагируют одни и те же атомы.

Составим систему кинетических уравнений для этой реакции:

$$-c_X'(t) = r_1 = kc_X(t)c_Y(t)$$

$$-c_Y'(t) = r_1 + r_2 = kc_X(t)c_Y(t) + kc_{XY}(t)c_Y(t)$$

$$c_{XY}'(t) = r_1 - r_2 = kc_X(t)c_Y(t) - kc_{XY}(t)c_Y(t)$$

$$c_{XY_2}'(t) = r_2 = kc_{XY}(t)c_Y(t)$$

Начальные условия выберем так, чтобы количества исходных веществ соответствовали уравнению реакции, а продукты в начальный момент времени отсутствовали:

$$c_X(0) = 1, \quad c_Y(0) = 2, \quad c_{XY}(0) = c_{XY_2}(0) = 0.$$

Я сильно сомневаюсь, что можно точно решить эту систему в явном виде и найти зависимость всех концентраций от времени. Существует, однако, любопытный прием,

позволяющий упростить систему: вместо того, чтобы рассматривать концентрации как функции времени, можно исключить время и найти зависимость одной концентрации от другой. В физической химии это называется «составить фазовый портрет». Для того, чтобы исключить время, поделим третье уравнение на первое и найдем производную одной концентрации по другой:

$$c_{XY}'(c_X) = \frac{c_{XY} - 1}{c_X}$$

Это – в точности то уравнение, которое приведено в заголовке параграфа (если принять  $c_{XY} = y$ ,  $c_X = x$ ). В качестве дополнительного условия выберем концентрации в конце реакции, когда не останется ни исходного вещества X, ни промежуточного XY:  $c_X(\infty) = c_{XY}(\infty) = 0$ . С этим условием дифференциальное уравнение имеет точное решение:

$$c_{XY} = -c_X \ln c_X$$

Концентрации остальных веществ можно найти, используя закон сохранения массы: в любой момент времени сумма концентраций веществ, содержащих фрагменты X, равна исходной концентрации X, то есть 1:

$$c_X(t) + c_{XY}(t) + c_{XY_2}(t) = c_X(0) = 1,$$

откуда

$$c_{XY_2} = c_X \ln c_X - c_X + 1.$$

Аналогично записывается закон сохранения фрагментов вещества Y:

$$c_Y(t) + c_{XY}(t) + 2c_{XY_2}(t) = c_Y(0) = 2,$$

откуда

$$c_Y = 2c_X - c_X \ln c_X.$$

Таким образом, мы получили полное кинетическое описание этой двухстадийной реакции. На рис. 1 представлен график зависимости концентраций всех веществ от  $c_X$ .

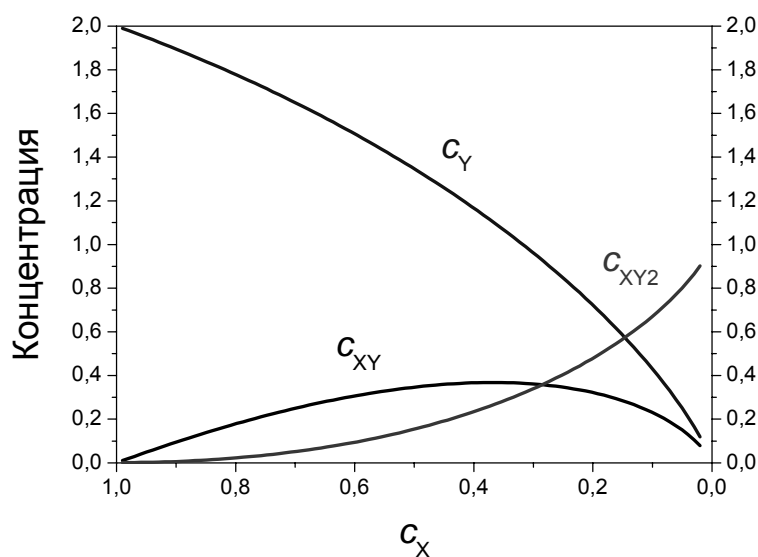


Рис. 1. Фазовый портрет двухстадийной реакции  $X + 2Y = XY_2$

Направление оси  $c_X$  выбрано так, что левая часть графика соответствует началу реакции. Из полученного решения можно найти максимальную концентрацию промежуточного вещества. Максимум функции  $-c_X \ln c_X$  достигается при  $c_X = e^{-1}$  и равен  $e^{-1}$ , то есть примерно 0.368, а не 1, как можно было бы ожидать из схемы последовательной реакции  $X + Y + Y$ . Это означает, что вещество  $XU$  сразу, как только образуется, начинает превращаться в конечный продукт  $XU_2$ .

### Колебательные химические реакции

Теория устойчивости дифференциальных уравнений – одна из тех областей математики, на которые химия оказала значительное влияние. Это произошло после того, как Б.П. Белоусовым (1893-1970) и А.М. Жаботинским (1938-2008) была открыта знаменитая колебательная химическая реакция, впоследствии названная в их честь.

Интересна история этого открытия. Борис Павлович Белоусов был военным химиком. Он обладал качествами выдающегося ученого и сделал ряд важных открытий в области воздействия радиации на организм. Этим объясняется то, что, даже не имея высшего образования, ученый заведовал лабораторией и по письменному указанию высшего руководства страны<sup>5</sup> получал оклад доктора наук. В послевоенные годы Белоусов интересовался биологическими циклами, связанными с превращениями веществ в живых организмах. Пытаясь найти химические аналоги биологических циклов, он исследовал окисление лимонной кислоты броматом калия в присутствии иона церия (редкоземельного металла) и обнаружил, что в этой реакции концентрации веществ испытывают колебания во времени. В 1951 г. и 1955 г. Белоусов предпринял попытки опубликовать свое открытие в журналах «Журнал физической химии» и «Журнал общей химии». Отзывы на его статьи были категорично отрицательные – в них утверждалось, что колебания концентраций невозможны, так как противоречат законам химии. Это так повлияло на ученого, что он выбросил свои лабораторные записи и забыл о своей колебательной реакции.

Через несколько лет после этого новой реакцией заинтересовались биохимики и попросили Белоусова сообщить им методику эксперимента. Так как никаких документов у Белоусова к тому времени не осталось, ему снова пришлось искать исходные компоненты и их пропорции, на этот раз путем последовательного перебора. Можно сказать, что открытие было сделано Белоусовым дважды – первый раз случайно, второй раз в результате систематического поиска. Но активно участвовать в работе научного коллектива он больше не хотел. Все, что удалось коллегам, это уговорить Белоусова еще раз попытаться опубликовать свою статью. В результате единственная прижизненная публикация ученого появилась в «Сборнике рефератов по радиационной медицине» за 1958 г.

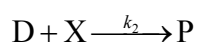
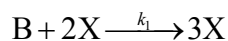
Систематическое исследование открытой Белоусовым реакции первым провел А.М. Жаботинский. Он обнаружил целый класс колебательных реакций, названный

<sup>5</sup> В те годы первым лицом в СССР был И.В. Сталин (1878-1953).

впоследствии реакциями Белоусова – Жаботинского (в англоязычной литературе даже образовалась устойчивая аббревиатура – “BZ reactions”). Жаботинский установил, что многие химические реакции проявляют кинетическую неустойчивость. При одних условиях – концентрации и температуре они протекают в устойчивом режиме, при других – переходят в колебательный режим, а в некоторых случаях демонстрируют и хаотическое поведение. Исследуя механизмы подобных реакций, химики, а за ними и математики узнали много нового о разнообразном поведении решений дифференциальных уравнений и их зависимости от параметров уравнения [6].

Все неустойчивые химические реакции включают автокаталитические стадии. В них продукт реакции сам является катализатором: чем больше образуется продукта, тем быстрее идет реакция. Рассмотрим несколько простых моделей автокаталитических реакций, используя качественный анализ дифференциальных уравнений.

Первая модель включает одну автокаталитическую стадию:



(B и D – реагенты, P – продукт). Складывая первое и второе уравнение и сокращая X в левой и правой частях, находим суммарное уравнение реакции.



Промежуточное вещество X образуется в первой реакции (в правой части на одну молекулу больше, чем в левой) и расходуется во второй:

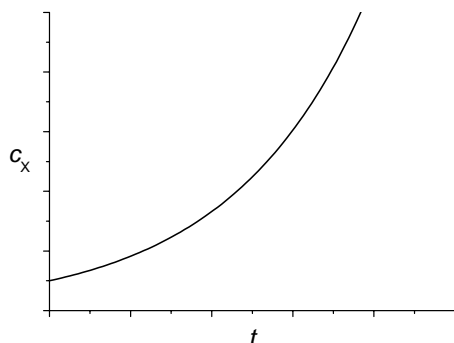
$$c_X'(t) = r_1 - r_2 = k_1 c_B(t) c_X(t)^2 - k_2 c_D(t) c_X(t)$$

Пусть реакция протекает в открытой системе, где вещества B и D постоянно добавляются в реагирующую систему так, что их концентрации поддерживаются постоянными и равными друг другу:  $c_B(t) = c_D(t) = \text{const}$ . В этом случае, не решая кинетическое уравнение, можно качественно определить зависимость концентрации X от времени.

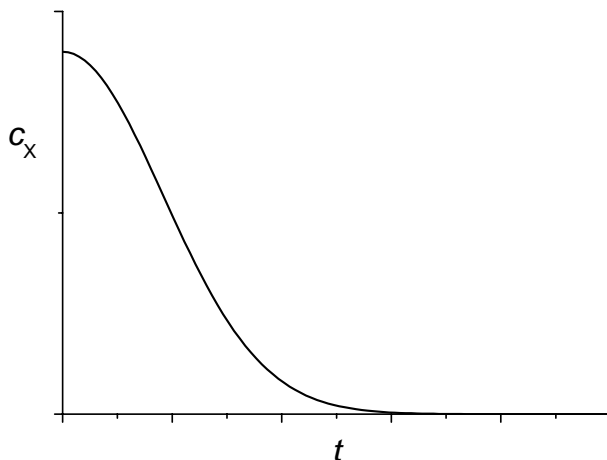
При указанных условиях дифференциальное уравнение для  $c_X(t)$  принимает вид:

$$c_X'(t) = c_B c_X(t) (k_1 c_X(t) - k_2).$$

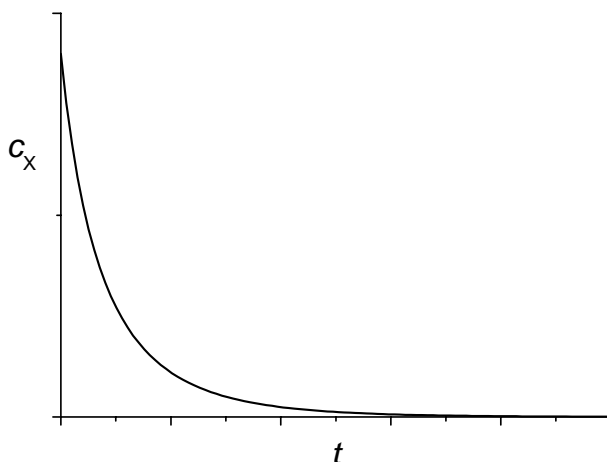
Если начальная концентрация X достаточно велика:  $c_X(0) > k_2/k_1$ , то  $c_X'(t) > 0$  в любой момент времени, и концентрация X монотонно и неограниченно возрастает, вместе со своей первой производной:



Если же начальная концентрация X меньше порогового значения:  $c_X(0) < k_2/k_1$ , то  $c_X'(t) < 0$  в любой момент времени, и концентрация X монотонно убывает. Возможны два типа кривых: если  $k_2/2k_1 < c_X(0) < k_2/k_1$ , на кривой будет точка перегиба:



Если же начальная концентрация X совсем мала,  $c_X(0) < k_2/2k_1$ , то с течением времени концентрация будет монотонно убывать вместе с модулем своей первой производной.

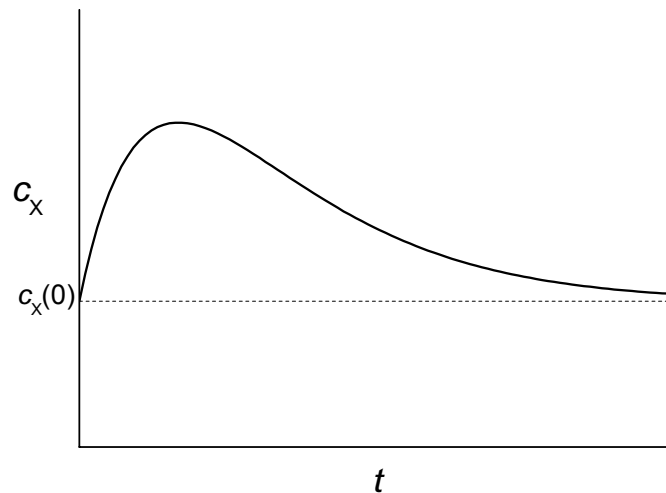


В закрытой системе, где вещества В и D расходуются и не возобновляются, вид зависимости  $c_X(t)$  будет совсем другим. Рассмотрим случай большой начальной концентрации, тогда начальная скорость образования X положительна

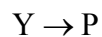
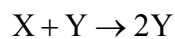
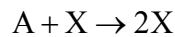
$$c_X'(0) = k_1 c_B(0) c_X^2(0) - k_2 c_D(0) c_X(0) > 0$$

Следовательно, в начале реакции  $c_X$  возрастает, но она не может увеличиваться до бесконечности, поскольку вторая реакция необратима и все образовавшееся вещество X неизбежно в конце концов превращается в продукт P. Согласно общему уравнению реакции  $V + D \rightarrow P$ , вещество X в результате всей реакции не образуется и не расходуется, то есть служит просто катализатором.





Еще более интересное поведение возможно в системе с несколькими промежуточными веществами. Рассмотрим такой модельный механизм:



Для простоты примем все константы скорости равными единице, а концентрацию реагента А – постоянной (открытая система). Запишем систему кинетических уравнений для X и Y.

Вещество X образуется в первой реакции и расходуется во второй, Y образуется во второй и расходуется в третьей реакции:

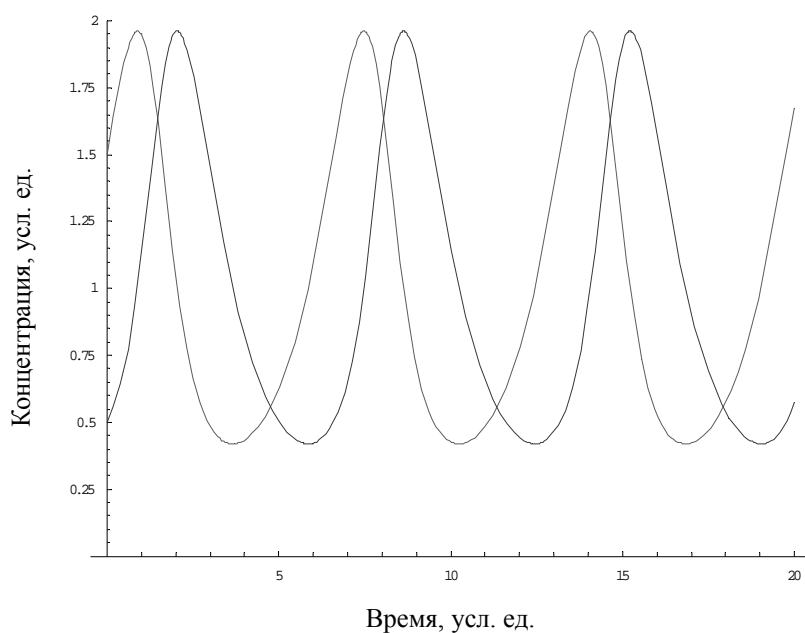
$$\begin{cases} c_X'(t) = c_A c_X(t) - c_X(t) c_Y(t) \\ c_Y'(t) = c_X(t) c_Y(t) - c_Y(t) \end{cases}$$

Стационарные концентрации веществ найдем из условия равенства нулю производных:  $c_{X,s} = 1$ ,  $c_{Y,s} = c_A$ . Рассмотрим качественно зависимость от времени концентраций X и Y для случая, когда начальная концентрация X больше стационарной, а начальная концентрация Y – меньше стационарной. Перепишем систему кинетических уравнений, введя в нее значения стационарных концентраций X и Y:

$$\begin{cases} c_X'(t) = c_X(t)(c_{Y,s} - c_Y(t)) \\ c_Y'(t) = c_Y(t)(c_X(t) - c_{X,s}) \end{cases}$$

Из условий  $c_X(0) > c_{X,s}$ ,  $c_Y(0) < c_{Y,s}$  видно, что в начальный момент обе производные положительны, то есть обе концентрации растут. При увеличении  $c_Y$  производная  $c_X'(t)$  проходит через 0, становится отрицательной, и  $c_X$  начинает убывать. Когда  $c_X$  становится меньше стационарного значения, производная  $c_Y'(t)$  приобретает отрицательный знак, и теперь уже  $c_Y$  убывает. По мере уменьшения  $c_Y$  производная

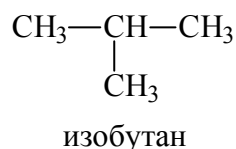
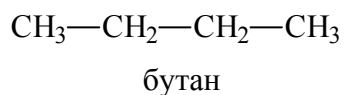
$c_X'(t)$  становится положительной и  $c_X$  снова начинает расти. В результате обе концентрации,  $c_X(t)$  и  $c_Y(t)$ , испытывают колебания во времени:



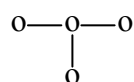
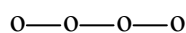
Этот пример демонстрирует условия, которые требуются для появления колебательных реакций: 1) открытая система, 2) несколько промежуточных веществ, 3) автокаталитические стадии.

### Графическое представление молекул и их свойств – теория графов в химии

Изучение связи свойств веществ с их строением – одна из основных задач химии. Большой вклад в ее решение внесла структурная теория органических соединений, в число создателей которой входит великий российский химик Александр Михайлович Бутлеров (1828-1886). Именно он первым установил, что свойства вещества зависят не только от его состава (молекулярной формулы), но и от того, в каком порядке связаны между собой атомы в молекуле. Такой порядок назвали «химическим строением». Бутлеров предсказал, что составу  $C_4H_{10}$  могут соответствовать два вещества, имеющие разное строение – бутан и изобутан, и подтвердил это, синтезировав последнее вещество.



Идея о том, что порядок соединения атомов имеет ключевое значение для свойств вещества, оказалась очень плодотворной. На ней основано представление молекул с помощью графов, в которых атомы играют роль вершин, а химические связи между ними – ребер, соединяющих вершины. В графическом представлении длины связей и углы между ними игнорируются. Описанные выше молекулы  $C_4H_{10}$  изображаются следующими графами:

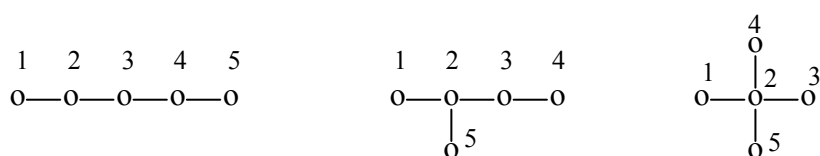


Атомы водорода в таких графах не указываются, так как их расположение можно однозначно установить по структуре углеродного скелета. Напомним, что углерод в органических соединениях четырехвалентен, поэтому в соответствующих графах от каждой вершины может отходить не более четырех ребер.

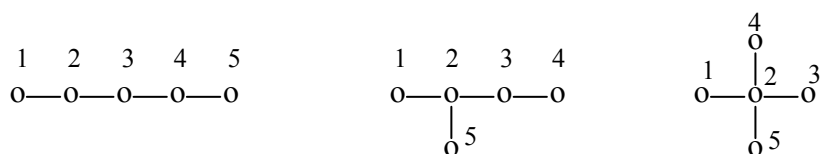
Графы – это математические объекты, поэтому их можно характеризовать с помощью чисел. Отсюда появилась идея выражать строение молекул числами, которые связаны со структурой молекулярных графов. Эти числа в химии называют «топологическими индексами». Рассчитав какой-либо топологический индекс для большого числа молекул, можно установить связь между его значениями и свойствами веществ, и затем использовать эту связь для предсказания свойств новых, еще не синтезированных веществ [7]. К настоящему моменту химиками и математиками предложены сотни разнообразных индексов, характеризующих те или иные свойства молекул.

Способы расчета топологических индексов могут быть самыми разнообразными, но все они должны удовлетворять вполне естественным требованиям: 1) каждой молекуле соответствует свой, индивидуальный индекс; 2) близкие по свойствам молекулы имеют похожие индексы.

Посмотрим, как реализуется эта идея на примере предельных углеводородов – алканов. Ключевым для построения многих индексов служит понятие «матрицы расстояний» **D**. Так называют матрицу, элементы которой показывают число ребер, разделяющих соответствующие вершины молекулярного графа. Построим эту матрицу для трех изомерных углеводородов состава  $\text{C}_5\text{H}_{12}$ . Для этого изобразим их молекулярные графы и перенумеруем вершины (в произвольном порядке):



Диагональные элементы матрицы расстояний для углеводородов равны 0. В первом графе вершина **1** связана с вершиной **2** одним ребром, поэтому элемент матрицы  $d_{12} = 1$ . Аналогично,  $d_{13} = 2$ ,  $d_{14} = 3$ ,  $d_{15} = 4$ . Первая строка в матрице расстояний нормального пентана имеет вид: (0 1 2 3 4). Полные матрицы расстояний для трех графов:



$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 0 & 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 3 & 2 & 1 & 0 & 1 \\ 4 & 3 & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 3 & 2 & 1 & 0 & 3 \\ 2 & 1 & 2 & 3 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 0 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

Расстояние между вершинами не зависит от порядка их перечисления, поэтому матрицы расстояний симметричны относительно диагонали.

Первый топологический индекс, отражающий структуру молекулярного графа (G), был предложен в 1947 г. Винером [7, с. 188]. Он определяется как сумма диагональных элементов матрицы расстояний плюс полусумма ее недиагональных элементов:

$$W(G) = \sum_{i=1}^n d_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n d_{ij}$$

Для указанных выше графов, соответствующих пентанам C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>, индекс Винера принимает значения 20, 18 и 16. Можно предположить, что он описывает степень разветвленности углеводорода: наибольшие значения соответствуют наименее разветвленным углеводородам. С увеличением длины углеродного скелета индекс Винера растет, так как в матрице расстояний становится больше элементов. Статистический анализ на примере нескольких сотен углеводородов показал, что индекс Винера коррелирует с некоторыми физическими свойствами алканов: температурами кипения, теплотами испарения, молярным объемом.

Другой тип индексов основан не на расстояниях между вершинами, а на числе ближайших соседей для каждой вершины. В качестве примера рассчитаем индекс Рандича [7, с. 190], который определяется следующим образом:

$$\chi(G) = \sum_{\text{всем ребрам}} \frac{1}{\sqrt{v_i v_j}},$$

где  $v_i$  – степень  $i$ -й вершины, то есть число ребер, от нее отходящих. Для указанных выше графов индекс Рандича равен:

$$\chi(G_1) = \frac{1}{\sqrt{v_1 v_2}} + \frac{1}{\sqrt{v_2 v_3}} + \frac{1}{\sqrt{v_3 v_4}} + \frac{1}{\sqrt{v_4 v_5}} = \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{2}} = 1 + \sqrt{2} = 2.414$$

$$\chi(G_2) = \frac{1}{\sqrt{v_1 v_2}} + \frac{1}{\sqrt{v_2 v_3}} + \frac{1}{\sqrt{v_3 v_4}} + \frac{1}{\sqrt{v_2 v_5}} = \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{1}{\sqrt{6}} + \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{3}} = 2.270$$

$$\chi(G_3) = \frac{1}{\sqrt{v_1 v_2}} + \frac{1}{\sqrt{v_2 v_3}} + \frac{1}{\sqrt{v_2 v_4}} + \frac{1}{\sqrt{v_2 v_5}} = 4 \frac{1}{\sqrt{4}} = 2.000$$

Этот индекс также уменьшается с увеличением степени разветвленности углеродного скелета и может быть использован для описания физических свойств алканов.

Алканы – самый скучный с химической точки зрения тип органических молекул, так как он не содержит никаких «особенностей» – двойных и тройных связей или

атомов других элементов, кроме водорода и углерода (такие элементы называют *гетероатомами*). Введение гетероатомов в состав молекулы может кардинально изменить свойства вещества. Так, добавление всего одного атома кислорода превращает довольно инертный газообразный этан  $C_2H_6$  в жидкий этанол  $C_2H_5OH$ , проявляющий весьма высокую химическую и биологическую активность.

Следовательно, в топологических индексах молекул, более сложных, чем алканы, надо учитывать присутствие кратных связей и гетероатомов. Это делается путем присвоения вершинам и ребрам графов определенных числовых коэффициентов – «весов» [7, с. 262]. Например, в матрице расстояний диагональные элементы можно определить через заряд ядра  $Z_i$  (напомним, что для углерода  $Z = 6$ ):

$$d_{ii} = 1 - \frac{6}{Z_i}.$$

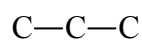
Недиагональные элементы определяются суммированием по ребрам, причем каждому ребру, соединяющему атомы с зарядами  $Z_i$  и  $Z_j$ , присваивается вес

$$k = \frac{1}{b} \frac{36}{Z_i Z_j},$$

где  $b$  равно порядку связи между атомами (1 для одинарной связи, 2 для двойной, 3 для тройной). Для обычных одинарных связей углерод – углерод,  $k = 1$ .

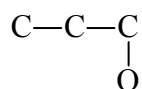
Сравним индексы Винера пропана  $C_3H_8$  и трех близких по составу кислородсодержащих веществ: пропилового спирта  $C_3H_8O$ , изомерного ему изопропилового спирта  $C_3H_8O$  и ацетона  $C_3H_6O$ . Для этого рассчитаем по указанным правилам матрицы расстояний. В молекулярных графах укажем все атомы, кроме атомов водорода.

1) Пропан:



$$D = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad W(G) = 4$$

2) В молекуле пропилового спирта кислород связан с крайним атомом углерода:

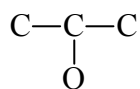


Для одинарной связи C–O весовой коэффициент равен  $36/(6 \cdot 8) = 0.75$ . Диагональный элемент матрицы, отвечающий кислороду:  $d_{44} = 1 - 6/8 = 0.25$ .

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 2.75 \\ 1 & 0 & 1 & 1.75 \\ 2 & 1 & 0 & 0.75 \\ 2.75 & 1.75 & 0.75 & 0.25 \end{pmatrix} \quad W(G) = 9.5$$

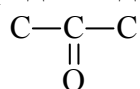
Для молекул, содержащих гетероатомы, индекс Винера перестает быть целым.

3) В молекуле изопропилового спирта кислород связан со средним атомом углерода:



$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 1.75 \\ 1 & 0 & 1 & 0.75 \\ 2 & 1 & 0 & 1.75 \\ 1.75 & 0.75 & 1.75 & 0.25 \end{pmatrix} \quad W(G) = 8.5$$

4) В ацетоне порядок соединения атомов – такой же, как в изопропиловом спирте, но связь между углеродом и кислородом – двойная:



Для двойной связи C=O весовой коэффициент равен  $36/(2 \cdot 6 \cdot 8) = 0.375$

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 1.375 \\ 1 & 0 & 1 & 0.375 \\ 2 & 1 & 0 & 1.375 \\ 1.375 & 0.375 & 1.375 & 0.25 \end{pmatrix} \quad W(G) = 7.375$$

Как видно, добавление гетероатома в структуру алканов приводит к возрастанию индекса Винера за счет увеличения размера матрицы расстояний. Добавление кратных связей или увеличение степени разветвления молекулы уменьшают этот индекс. Эти правила выполняются и для более сложных молекул.

Первоначально топологические индексы разрабатывались только с целью предсказания физико-химических свойств веществ. Однако впоследствии их стали применять и для решения других задач.

Одно из приложений топологических индексов связано с классификацией органических соединений и созданием органических баз данных. Задача состоит в том, чтобы найти такой индекс (или набор индексов), который взаимно однозначно характеризует химическую структуру и по которому эту структуру можно восстановить. Требуемый индекс должен обладать хорошей дискриминирующей способностью, то есть различать между собой даже близкие по структуре молекулы. Эта задача – грандиозная, поскольку органических структур известно уже более 20 миллионов. Ее решение, по-видимому, будет найдено в результате использования составных топологических индексов.

Наиболее перспективные применения топологических индексов связаны с разработкой лекарственных препаратов и других биологически активных веществ. Разработка каждого нового лекарства занимает не менее 10 лет, требует вложения более 100 млн. долларов и проведения десятков тысяч испытаний для веществ-кандидатов.

Использование топологических индексов для характеристики биологической активности препаратов позволяет значительно сэкономить время и средства, отбросив большое число веществ, которые по результатам расчета индексов заведомо не обладают требуемыми свойствами. Для подобных исследований в научной литературе сформировалась устойчивая аббревиатура – QSAR (Quantitative structure-activity relationships), по-русски – КССА (количественные соотношения структура – активность). Фундаментальной научной ценностью эти исследования не обладают, так как их результаты не имеют глубокого физико-химического обоснования, а носят, в значительной степени, статистический характер. И все же, их достоинство в том, что они количественно отражают одну из основных идей химии: «Структура определяет свойства».

### **Заключение**

Мы рассмотрели всего несколько примеров, показывающих, как математика используется в химии. Они дают определенное, хотя, конечно, неполное представление о задачах, решаемых химиками с помощью математики, и ограничениях, которые химия накладывает на применяемую в ней математику.

Взаимодействие химиков и математиков не ограничивается решением только химических задач. Иногда и в химии возникают абстрактные задачи, которые приводят даже к появлению новых областей математики. Так, математики до сих пор работают над доказательством второго закона термодинамики – одного из основных законов химии, справедливость которого для самих химиков очевидно вытекает из всех известных до сих пор экспериментальных данных о химических веществах и химических реакциях.

История науки говорит о том, что на границах различных областей знания могут происходить очень интересные события. И хотя химики и математики мыслят совсем по-разному, те случаи, когда им удается взаимодействовать, приводят к появлению красивых и нетривиальных результатов и способствуют обогащению обеих наук.

### **ЛИТЕРАТУРА**

1. Воронков М.Г., Рулев А.Ю. О химии с улыбкой, или основы пегниохимии. – СПб: Наука, 1999.
2. Химия и жизнь – XXI век, 1997, № 2, с. 5.
3. Сингх С. Великая теорема Ферма. М.: МЦНМО, 2000.
4. Харгитгаи И., Харгитгаи М. Симметрия глазами химика. – М.: Мир, 1989.
5. Левицкий М.М. О химии серьезно и с улыбкой. – М.: Академкнига, 2005.
6. Колебания и бегущие волны в химических системах. – М.: Мир, 1988.
7. Химические приложения топологии и теории графов. – М.: Мир, 1987.