

ЕСТЕСТВЕННЫЕ НАУКИ

Люц Ольга Сергеевна

учитель химии

Виноградова Лариса Ивановна

учитель математики

Чурилова Ольга Юрьевна

учитель математики и информатики

МБОУ «СОШ с углубленным изучением отдельных предметов №8»

г. Ленинск-Кузнецкий, Кемеровская область

ТЕОРИЯ ГРАФОВ В ХИМИИ

Аннотация: в статье рассматриваются возможности интеграции двух школьных учебных курсов – математики и химии. Авторы сделали попытку применения теории графов и теории химического строения А.М. Бутлерова в процессе решения практического задания по химии.

Ключевые слова: теория графов, теория химического строения А.М. Бутлерова, химия, математика, матрица.

В целях расширения кругозора и повышения уровня знаний по химии ученики химико-биологических классов посещают внеурочные занятия по химии. При изучении темы «Строение вещества» мы столкнулись с проблемой построения структурных формул органических веществ, имеющих ковалентный тип химической связи между атомами. Изучение строения вещества – одна из основных задач химии. У нас имеется набор атомов химических элементов, которые нам необходимо соединить друг с другом с использованием химического понятия «валентность». Известно, что химия широко использует в своих целях математику, поэтому обратились за помощью к учителю математики. Как оказалось, решить проблему можно с помощью теории графов, которая позволила найти неожиданный способ решения для нашей логической задачи.

Таким образом, целью нашей дальнейшей работы с обучающимися стало освоение теории графов для построения структурных формул молекул органических соединений.

Задачи:

1. Изучить теорию графов.
2. Познакомиться с теорией химического строения А.М. Бутлерова.
3. Представить строение молекул органических соединений с помощью теории графов.

Актуальность заключена в том, что теория графов позволяет нестандартным способом подойти к проблеме построения структурных формул молекул органических соединений.

Сопоставив теорию графов и теорию химического строения органических соединений А.М. Бутлерова, мы получили возможность соотнести математические и химические понятия [1, 2] Представим эти соответствия в виде таблицы.

Таблица 1

Соотношения между понятиями химии и математики

Математические понятия	Химические понятия
1. Граф	1. Структурная формула вещества
2. Вершина	2. Атомы углерода
3. Ребро	3. Химическая связь между атомами
4. Степень вершины	4. Валентность атома углерода (IV)
5. Висячие вершины	5. Атомы углерода, не входящие в линейную цепь
6. Маршрут	6. Порядок соединения атомов в молекуле
7. Путь	7. Порядок соединения атомов в нециклических молекулах
8. Неориентированный граф	8. В изображении формулы пренебрегают направлением связей
9. Смежные вершины	9. Атомы углерода, которые прилегают к одной и той же химической связи
10. Неполный граф	10. Линейная цепь, в которой не соединены концевые атомы углерода

Из данной таблицы можно увидеть, что принцип построения структурных формул в химии полностью соотносятся с существующей математической теорией.

Таким образом, мы можем в своих целях использовать математические способы задания зависимости между структурными элементами в органических соединениях, т. е. между атомами углерода. В теории графов существует три способа:

1. Аналитический способ (общая формула для соответствующего класса соединений).
2. Матричный способ (позволяет увидеть взаимосвязь между атомами углерода).
3. Графический способ (служит для иллюстрации полученных результатов).

Теория А.М. Бутлерова содержит положение о том, что атомы в молекулах могут соединяться друг с другом в соответствии с их валентностью в определённой последовательности [3]. Но при этом, изучив теорию графов, выяснили, что граф – это множество вершин и множество рёбер, соединяющих между собой всё или часть этих вершин. В химии вершины будут являться атомы углерода, рёбрами – химические связи между ними. Степень вершины графа будет соответствовать химическим связям. В нашем случае максимально возможная степень вершины четыре (валентность углерода). Так же мы увидели существование различных видов графов, позволяющих описывать множество органических соединений [4].

При работе мы рассматривали молекулы алканов, алкенов и циклоалканов.

Задав аналитическим способом состав молекул, т. е. в виде общей формулы, составили возможные варианты матриц. Матрица – это прямоугольная таблица каких-либо элементов. В нашем случае это будут атомы углерода. Далее, по этим матрицам выясним зависимость между ее элементами. Где это взаимодействие, возможно ставим 1, где нет 0. При возможном двойном взаимодействии ставим 2. После чего отразили этот результат геометрическим способом. Как оказалось, данные структуры отражают строение углеродного скелета молекул.

Например, для алканов с общей формулой С4 Н10, с учетом химических ограничений, возможно задать две матрицы (таблица 2 и таблица 3):

Таблица 2

Матрица для алкана С4 Н10

	C ₁	C ₂	C ₃	C ₄
C ₁	0	1	0	0
C ₂	1	0	1	0
C ₃	0	1	0	1
C ₄	0	0	1	0

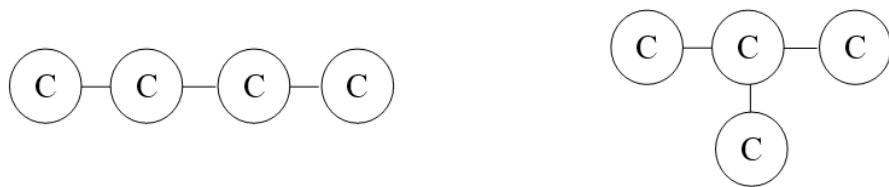
Таблица 2

Матрица для алкана С4 Н10

	C ₁	C ₂	C ₃	C ₄
C ₁	0	1	0	0
C ₂	1	0	1	1
C ₃	0	1	0	0
C ₄	0	1	0	0

В данном случае С1, С3, С4 с соседями образуют одну химическую связь (или одно ребро), а С2 – две связи (два ребра).

Соответственно, получаем два графических изображения:



Таким образом, в результате проделанной работы мы смогли решить поставленные задачи:

1. Изучить с учащимися теорию графов, при этом они приобретают дополнительные знания из раздела дискретной математики, которая исследует свойства конечных множеств с заданными отношениями между их элементами.
2. Увидеть на наглядных примерах прикладное значение математического аппарата.

3. Познакомить учащихся с теорией химического строения органических соединений А.М. Бутлерова. При этом стало очевидным, что данная теория налагает ряд ограничений на возможные математические решения.

4. Сопоставив две теории, получить возможность освоить способы задания графов.

Список литературы

1. Березина, Л.Ю. Графы и их применение [Текст]: пособие для учителей / Л.Ю. Березина. – М.: Просвещение, 1979. – 143 с.
2. Бусев, А. И. Определения, понятия, термины в химии [Текст]: пособие для учащихся / А.И. Бусев, И.П. Ефимов. – М.: Просвещение, 1987. – 192 с.
3. Новошинский, И.И. Органическая химия. 11 класс [Текст]: учебное пособие / И.И. Новошинский, Н.С. Новошинская. – М.: ООО «ТИД «Русское слово – РС», 2008. – 352с.
4. Терешин, Г.С. Химическая связь и строение вещества [Текст] / Г.С. Терешин. – М.: Просвещение, 1980. – 176 с.