

МЕТОД НА ГРАФИТЕ ЗА БАЛАНСИРАНЕ НА ХИМИЧНИ УРАВНЕНИЯ. НАСОКИ ЗА ПРЕПОДАВАНЕ

Георги Гачев

РЕЗЮМЕ

Методът на графите е нов и сравнително лесен начин за балансиране на химични уравнения. С негова помощ без изчислителни устройства могат да бъдат балансирани сложни химични уравнения. Методът се основава на алгоритъм с прости правила, което съществено намалява вероятността от допускане на грешки. Целият процес на балансиране носи интересен характер и наподобява решаване на ребус. Въпреки това, за да бъде метода на графите прилаган ефективно, са необходими известен опит и задълбочено изучаване.

Ключови думи: химично уравнение, балансиране, граф

УВОД

Задачата за балансиране на химично уравнение е решена отдавна. Според най-използвания алгоритъм, търсените количествени коефициенти на химичните съединения, които участват в реакцията се разглеждат като неизвестни в система от линейни алгебрични уравнения (Hiremath, 2013), (Kafi & Abdillah, 2018). Ако системата има решение, то намерените стойности са и коефициенти на химичните съединения. Разбира се, съществуват и други подходи, които са възникнали и се употребяват с конкретно практическо предназначение (Smith & Missen, 1982), (Risteski, 2014).

Настоящата училищна практика предвижда балансирането на химични уравнения да се изучава на по-ранен етап от изучаването на системи от линейни уравнения. Следователно, за да бъде усвоен този дял от химията, преподавателите са принудени да използват някакъв друг метод за балансиране. Наблюденията на учебния процес показват, че най-често това е методът на случайният подбор на коефициенти или методът на „налучкването“. Както показва названието, неговата същност се състои в това, първоначално да се подбере случаен коефициент на случайно химично съединение, а впоследствие да се направи опит останалите коефициенти в уравнението да бъдат подбрани по такъв начин, че да се получи количествен баланс. От друга страна не съществува правило, което да указва кой коефициент трябва да бъде избран за първи. Също така не съществува правило за определяне на следващия коефициент, който следва да бъде балансиран въз основа на предходния. Липсата на ясни правила в метода на подбора води до спорадично получаване на верен отговор. Най-често след няколко неуспешни опита учениците губят интерес. Налага се преподавателят да работи само с предварително подготвени примери, а решенията да се наизустяват от учениците. Това е съществена причина материалът да е все още труден за преподаване и разбиране.

Методът на графите дава отговор на двата въпроса, на които метода на случайния подбор не успява. Първо, това е от кой коефициент трябва да се започне балансирането и второ, как то да се продължи докрай. Необходимо е да се подчертае, че методът на графите е нов и до момента не се използва в практиката. Неговото прилагане изисква изграждане на определени навици като в това отношение не се различава от усвояването други знания и умения.

Методът на графите по същество е алгоритъм за решаване на система от линейни уравнения. Той се основава на характерната особеност на химичните уравнения да

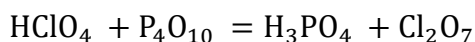
образуват разредени алгебрични матрици. Разредени са тези матрици, в които сравнително малка част от коефициентите са различни от нула. Целта на метода е, доколкото това е възможно, да се „маскира“ решаването на системата от линейни уравнения зад процес, който е подобен на мислено обхождане на път в граф. Предназначението на метода е да улесни балансирането на химични уравнения, както и да направи процеса достъпен и разбираем в обхвата на повече образователни етапи. Подходът е представен подробно в (Гачев & Димова, 2019). Трябва да се има предвид, че не всяко химично уравнение може да бъде балансирано по метода на графите. Необходимо условие за намиране на решение е графът на химичното уравнение да бъде „свързан“. Това е такъв граф, за който съществува път между всеки два върха.

МЕТОД НА ГРАФИТЕ

Методологията на преподаване следва принципа „от просто към сложно“ като на всеки етап новите знания се затвърждават с практически примери. Разбира се, предложеният подход не е единствен. Той може да бъде разглеждан като средство за самоподготовка или според замисъла на преподавателя като част от учебен сценарий. Препоръчителните етапи при запознаване с „Метода на графите“ са:

1. Демонстриране на метода
2. Разлагане на уравнение в матрица
3. Построяване на граф
4. Изчисляване на коефициентите на уравнението
5. Теоретични бележки, ограничителни условия и математическа същност на алгоритъма

Методът ще бъде пояснен стъпка по стъпка при балансиране на химичната реакция:



Стъпка 1: Построява се таблица с толкова колони, колкото са химичните съединения и толкова реда, колкото са химичните елементи в уравнението. Знакът за равенство се изобразява вертикално там, където се намира в химичното уравнение. На Фиг. 1 това е показано със стрелка. По този начин таблицата се разделя на две части, тази на реагентите и тази на продуктите:

$$\text{HClO}_4 + \text{P}_4\text{O}_{10} = \text{H}_3\text{PO}_4 + \text{Cl}_2\text{O}_7$$

↓

		↓		
		↓		
		↓		
		↓		

Фиг. 1. Начален вид на таблицата, в която ще се разполага матрицата на химичното уравнение

Стъпка 2: Над първата редица като заглавия на съответните колони се изписват химичните съединения. Вляво от първата колона в началото на всеки ред се изписват

всички химичните елементи, които участват в уравнението. Подредбата на химичните елементи е без значение (Фиг. 2):

$$\text{HClO}_4 + \text{P}_4\text{O}_{10} = \text{H}_3\text{PO}_4 + \text{Cl}_2\text{O}_7$$

	\swarrow	\swarrow	\searrow	\searrow
	HClO_4	P_4O_{10}	H_3PO_4	Cl_2O_7
H				
Cl				
O				
P				

Фиг. 2. Разполагане на химичните елементи и химичните съединения в таблица

Стъпка 3: Във всяка пресечна клетка на редица и колона се записва броят на атомите на химичния елемент, които се съдържат в съответното химичното съединение. Така например, на Фиг. 3 в клетката, която е пресечна на химичното съединение HClO_4 и химичния елемент O е необходимо да се запише числото 4, защото 4 атома кислород се съдържат в съединението. Ако в химично съединение не се среща атом от даден вид, то съответната клетка се оставя празна:

	HClO_4	P_4O_{10}	H_3PO_4	Cl_2O_7
H	1		3	
Cl	1			2
O	4	10	4	7
P		4	1	

Фиг. 3. Записване на количеството на атомите

Стъпка 4: В колоната на всяко химично съединение се начертава вертикално ребро. Реброто започва от първата пълна клетка и завършва в последната пълна клетка (Фиг. 4):

	HClO_4	P_4O_{10}	H_3PO_4	Cl_2O_7
H	1		3	
Cl	1			2
O	4	10	4	7
P		4	1	

Фиг. 4. Изобразяване на вертикални ребра в графа

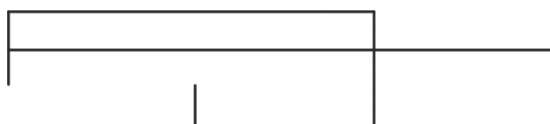
Нека въведем работно определение за термините граф, ребро и връх. Графът е геометрична фигура, която се състои от точки и линии, които ги съединяват. Точките се наричат „върхове“, а линиите „ребра“.

Стъпка 5: Начертават се хоризонтални ребра в редовете, в които има само две запълнени клетки. Ребрата започват в първата клетка и завършват във втората като съединяват вертикалните ребра, които минават през тези клетки. Всеки две вертикални ребра могат да се свържат само с едно хоризонтално ребро. Мястото на съединяване на хоризонталното и вертикалното ребро се нарича „възел“. На Фиг. 5 редовете на водорода, хлора и фосфора образуват хоризонтални ребра, тъй като имат само по две запълнени клетки. Редът на кислорода не образува хоризонтално ребро, тъй като съдържа повече от две запълнени клетки:

	HClO_4	P_4O_{10}	H_3PO_4	Cl_2O_7
H	1		3	
Cl	1			2
O	4	10	4	7
P		4	1	

Фиг. 5. Съединяване на вертикалните и хоризонталните ребра в графа

След съединяване на всички ребра се образува граф. На Фиг. 6 той е отделен от таблицата. Можем да си представим графа като карта на път, по който мислено ходим. Движението е разрешено навсякъде, където има начертани ребра.



Фиг. 6. Граф на химичното съединение

Стъпка 6: До този момент всички коефициенти пред химичните съединения са неизвестни. Необходимо е да се присвои коефициент, на някое, което и да е химично съединение. Коефициентът трябва да бъде естествено число. Например допускаме, че коефициентът пред H_3PO_4 е равен на едно. Тогава от първи ред на таблицата на Фиг. 7 по хода на реброто $\text{HClO}_4 - \text{H}_3\text{PO}_4$ получаваме едно уравнение с едно неизвестно x . $1 = 1.3$. Уравнението може да бъде прочетено така: “Три атома водород, които се съдържат в H_3PO_4 , умножени по коефициента пред H_3PO_4 – едно, са равни на един атом водород, който се съдържа в HClO_4 , умножен по неизвестния коефициент x пред HClO_4 ”. След решаване на уравнението се получава, че $x = 3$.

$x \cdot 1 = 3 \cdot 1$

$x = 3$

1

HClO_4
 P_4O_{10}
 H_3PO_4
 Cl_2O_7

Н	1			3	
Cl	1				2
O	4		10		7
P			4		1

Фиг. 7. Решаване на уравнения по хода на хоризонталните ребра

Аналогично, по хода на реброто $\text{H}_3\text{PO}_4 - \text{P}_4\text{O}_{10}$ в четвърти ред на таблицата, редът на фосфора, се получава уравнение с едно неизвестно $x \cdot 4 = 1 \cdot 1$, следователно $x = 1/4$. Коефициентът пред Cl_2O_7 може да се получи по реброто $\text{HClO}_4 - \text{Cl}_2\text{O}_7$ в трети ред на таблицата от уравнението $3 \cdot 1 = 2 \cdot x$, следователно $x = 3/2$. Всички коефициенти се записват в таблицата над съответните химични съединения (Фиг. 8).

3
1/4
1
 $x = 3/2$

HClO_4
 P_4O_{10}
 H_3PO_4
 Cl_2O_7

Н	1			3	
Cl	1				2
O	4		10		7
P			4		1

Фиг. 8. Намиране на коефициентите в химичното уравнение

След умножаване на всички коефициенти на най-малкото им общо кратно се получава и окончателният вид на таблицата (Фиг. 9):

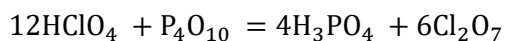
12
1
4
6

HClO_4
 P_4O_{10}
 H_3PO_4
 Cl_2O_7

Н	1			3	
Cl	1				2
O	4		10		7
P			4		1

Фиг. 9. Намиране на целочислени коефициенти в химичното уравнение

След пренасяне на коефициентите от таблицата в химичното уравнение се получава крайното решение:



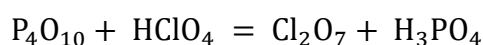
Още веднъж на Фиг. 10 със стрелки и последователни номера е показан пътът, по който се обхожда графа, за да бъдат изчислени четирите коефициента:

	12 HClO ₄	1 P ₄ O ₁₀	4 H ₃ PO ₄	6 Cl ₂ O ₇
H	1		3	
Cl	3			2
O	4	10	4	7
P		4	1	

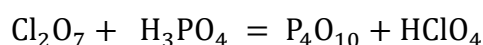
Фиг. 10. Обхождане на графа стъпка по стъпка за намиране на коефициентите на химичното уравнение

С това демонстрирането на метода може да приключи и да се пристъпи към втория етап на урока, в който учениците се учат да разлагат химично уравнение във вид на матрица. Разполагането на химичните елементи, съединения и коефициенти се извършва така, както е описано по-горе като се започне със Стъпка 1 и се завърши със Стъпка 3. Матриците на няколко по-елементарни реакции се съставят от учениците под наблюдението и ръководството на преподавателя. След като се изгради определен навик е необходимо учениците да съставят няколко матрици самостоятелно. Преподавателят в изложението си трябва да подчертае, три характерни особености:

- Химичната реакция може да бъде обърната и местата на реагентите и продуктите да бъдат разменени. Това не касае съществуването на химичната реакция, тъй като тук става въпрос единствено за намиране на неизвестните коефициенти, които количествено балансират химичното уравнение.
- Химичните съединения могат да се разполагат в произволна колона, стига да се намират от своя страна на уравнението по отношение на равенството.
- Редът на химичните елементи е произволен. Например двете матрици на Фиг. 11 представят уравнението от Фиг. 2, но написано с различен ред на химичните съединения и атомите:



	P ₄ O ₁₀	HClO ₄	Cl ₂ O ₇	H ₃ PO ₄
O	10	4	7	4
H		1		3
P	4			1
Cl		1	2	



	Cl_2O_7	H_3PO_4	P_4O_{10}	HClO_4
H		3		1
O	7	4	10	4
Cl	2			1
P		1	4	

Фиг. 11. Еквивалентни матрици на една и съща химична реакция с различно разположение на химичните съединения и химичните елементи

Няколко допълнителни химични реакции за упражнение под ръководството на преподавателя биха могли да бъдат: $\text{H}_2 + \text{O}_2 = \text{H}_2\text{O}$; $\text{H}_3\text{BO}_3 = \text{H}_4\text{B}_6\text{O}_{11} + \text{H}_2\text{O}$; $\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH} + \text{O}_2 = \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$

Третият етап на обучението е построяването на граф. След като химичното уравнение е било разложено в матрица, построяването на граф се извършва, така както е показано в Стъпка 4 и Стъпка 5. В зависимост от подредбата на химичните съединения и елементи в матрицата е възможно образуваните графи да изглеждат по различен начин (Фиг. 12), но всъщност тези графи са еднакви. Независимо от тяхната форма съществува взаимно еднозначно съответствие между съответните им върхове и ребрата. Когато е налице подобно съответствие между два графа, то те се наричат „изоморфни“. Терминът „изоморфизъм“, буквално означава „еднаква форма“.

	P_4O_{10}	HClO_4	Cl_2O_7	H_3PO_4
O	10	4	7	4
H		1		3
P	4			1
Cl		1	2	

	Cl_2O_7	H_3PO_4	P_4O_{10}	HClO_4
H		3		1
O	7	4	10	4
Cl	2			1
P		1	4	

Фиг. 12. Изоморфни графи на една и съща химична реакция с различно разположение на химичните съединения и химичните елементи

Нека да покажем, че Граф 1 и Граф 2 на Фиг.13 са изоморфни. Проверяваме съответствието на върховете:

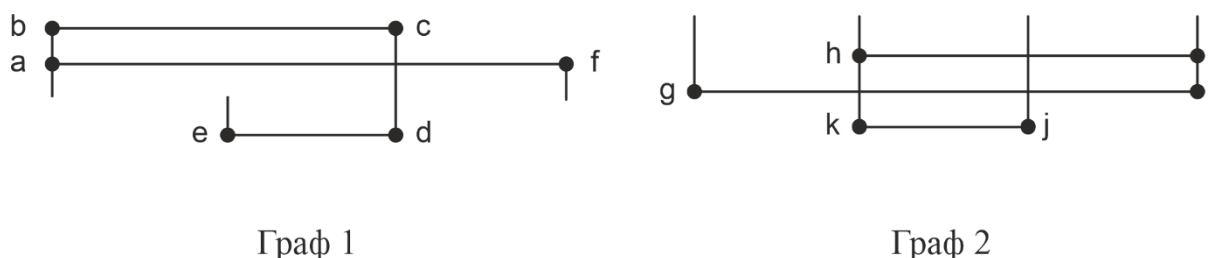
- $f \leftrightarrow j$
- $a \leftrightarrow k$
- $b \leftrightarrow h$
- $c \leftrightarrow l$
- $d \leftrightarrow i$
- $e \leftrightarrow g$

Следва да се убедим, че ребрата в двата графа също съвпадат. Нека вземем ребро fa в Граф 1. От съответствието на върховете, виждаме, че връх f е съпоставен на връх j , а

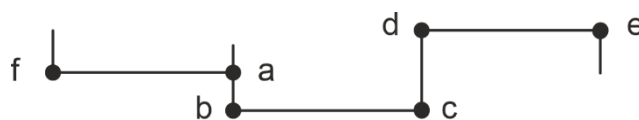
върх a съответства на върх k . Проверяваме дали съществува ребро jk в Граф 2. Ребърото съществува. По този начин проверяваме съответствието на останалите ребра в двата графа.

- $fa \leftrightarrow jk$
- $ab \leftrightarrow kh$
- $bc \leftrightarrow hl$
- $cd \leftrightarrow li$
- $de \leftrightarrow ig$

Тъй като подобна проверка може да се окаже отегчителна, доказването на изоморфизма на графите на химичното уравнение се прави по преценка на преподавателя в зависимост от образователните цели на урока. Например, ако урокът е предназначен за учители по химия, то доказателството може да бъде разяснено подробно. Ако урокът е предназначен за ученици, то е достатъчно да се демонстрира фактът, че при геометрична трансформация на двата примерни графа от Фиг.13 се получава един и същ граф като този, който е показан на Фиг.14.



Фиг. 13. Вид графите от Фиг. 9 и Фиг.12 без помощни матрици



Фиг. 14. Разгъване на графите от Фиг.13, чрез геометрична трансформация

Изчисляване на коефициентите на уравнението е четвъртият етап от урока. Всички необходими действия се извършват, така както е показано в Стъпка 6. При необходимост е възможно да се направят теоретични допълнения, като например:

„Всяко хоризонтално ребро в графа представя едно линейно уравнение с две неизвестни. Неизвестни са количествените коефициенти с които химичните съединения участват в уравнението. На Фиг.15 неизвестните коефициенти са обозначени в таблицата над символния запис на химичните съединения. Така например по хода на хоризонталното ребро на атома водород може да бъде записано уравнението $x \cdot 1 = z \cdot 3$, където x и z са неизвестните коефициенти, а 1 и съответно 3 е броят на атомите, с които водородът участва в химичните съединения HClO_4 и H_3PO_4 . Броят на атомите е взет от върховете на хоризонталното ребро на водорода.

	x	y	z	w
	HClO_4	P_4O_{10}	H_3PO_4	Cl_2O_7
H	1		3	
Cl	1			2
O	4	10	4	7
P		4	1	

Фиг. 15. Намиране на неизвестни коефициенти в химичното уравнение

Аналогично от ребрата на хлора и фосфора могат да бъдат записани уравненията $x.1 = w.2$ и $y.4 = z.1$. Заедно трите уравнения имат четири неизвестни. За да решим системата е необходимо да зададем числено значение на коя да е от неизвестните величини. Желателно е коефициентите или количествата с които химичните съединения участват в уравнението да са цели числа. Тук ще се отклоним от традиционния начин на решаване на система от линейни уравнения и ще покажем как решението може да бъде намерено по хода на графа като се опитаме да направим това на ум.

Нека приемем, че P_4O_{10} участва в реакцията с коефициент 1. Тогава по хода на хоризонталното ребро на фосфора можем да заключим, че коефициента на H_3PO_4 е 4. Прилага се уравнението $1.4 = z.1$ или $z = 4$. Тъй като това е линейно уравнение с едно неизвестно и без свободен член, се предполага, че изчислението на резултата може да бъде извършено на ум. От тук нататък, по същия начин следва да се намерят неизвестните коефициенти на HClO_4 и Cl_2O_7 по хода на ребрата на водорода $x.1 = 4.3$, $x = 12$ и хлора $12.1 = w.2$, $w = 6$. С това действие завършва балансирането на химичното уравнение, тъй като са намерени всички неизвестни коефициенти.“

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методът на графите е удобен начин за балансиране на химични уравнения, който не изисква знания за решаване на системи от линейни уравнения. Избягва се използването на специализирани програмни продукти и употребата на изчислителни устройства. Процесът на намиране на решение е интересен и носи характерните черти на ребус. Това от своя страна може да внесе разнообразие не само в учебния процес на всички нива но и да бъде полезно на практика. Като демонстрация привеждаме пример как може да бъде балансирано и по-сложно уравнение по метода на графите (Фиг. 16):

$$\text{K}_4\text{Fe}(\text{CN})_6 + 6\text{H}_2\text{SO}_4 + 6\text{H}_2\text{O} = 2\text{K}_2\text{SO}_4 + \text{FeSO}_4 + 3(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4 + 6\text{CO}$$

	1	6	6	2	1	3	6
	$\text{K}_4\text{Fe}(\text{CN})_6$	H_2SO_4	H_2O	K_2SO_4	FeSO_4	$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$	CO
K	4			2			
Fe	1				1		
C	6						1
N	6					2	
H		2	2			8	
S		1		1	1	1	
O		4	1	4	4	4	1

Фиг. 16. Балансиране на сложно уравнение по метода на графите

ЛИТЕРАТУРА

- Гачев, Г., Димова, Й., (2019). Балансиране на химични уравнения. Метод на свързания граф., Сборник с доклади от Национална конференция с международно участие "Природни науки '2018", 5-7.10.2018 г., гр. Шумен 39-46
- Hiremath, S., (2013). Balancing Chemical Equations by Using Mathematical Model. Available from: https://www.researchgate.net/publication/288825280_Balancing_Chemical_Equations_by_Using_Mathematical_Model. [Viewed 2024-06-27]
- Kafi, R., Abdillah, B. (2018). Journal of Physics: Conference Series, Volume 948, 1st International Conference of Education on Sciences, Technology, Engineering, and Mathematics (ICE-STEM) 17–19 October 2017 DOI 10.1088/1742-6596/948/1/012074
- Smith, W., Missen, R. (1982). Chemical reaction equilibrium analysis: theory and algorithms, New York: Wiley, c1982.
- Risteski, I., (2014). A New Generalized Algebra for the Balancing of Chemical Reactions. Materials and Technology, 48, 215-219.

REFERENCES

- Gachev, G., Dimova, J., (2019). Balancing chemical equations. Connected graph method., Collection of reports from the National Conference with international participation "Natural Sciences '2018", 5-7.10.2018 г., Shumen 39-46
- Hiremath, S., (2013). Balancing Chemical Equations by Using Mathematical Model. Available from: https://www.researchgate.net/publication/288825280_Balancing_Chemical_Equations_by_Using_Mathematical_Model. [Viewed 2024-06-27]
- Kafi, R., Abdillah, B., (2018). Journal of Physics: Conference Series, Volume 948, 1st International Conference of Education on Sciences, Technology, Engineering, and Mathematics (ICE-STEM) 17–19 October 2017 DOI 10.1088/1742-6596/948/1/012074
- Smith, W., Missen, R. (1982). Chemical reaction equilibrium analysis: theory and algorithms, New York: Wiley, c1982.
- Risteski, I., (2014). A New Generalized Algebra for the Balancing of Chemical Reactions. Materials and Technology, 48, 215-219.

METHOD OF GRAPHS FOR BALANCING OF CHEMICAL EQUATIONS. TEACHING GUIDELINES

Georgi Gachev

ABSTRACT

The method of graphs is a new and relatively easy way to balance chemical equations. With its help, complex chemical equations can be solved without computing devices. The method is based on an algorithm with simple rules, which significantly reduces the probability of making mistakes. The whole balancing process is entertaining and resembles solving a puzzle. However, in order for the graph method to be applied effectively, some experience and in-depth study are required.

Keywords: *chemical equation, balancing, graph*

Dr. Georgi Stamov Gachev, Assist. Prof.

*Institute of Mathematics and Informatics
Bulgarian Academy of Sciences*

Acad. Georgi Bonchev Str., Block 8

1113 Sofia, Bulgaria

e-mail: gachev@math.bas.bg

ORCID iD: 0000-0002-7297-0888