

## Балансиране на химични уравнения. Метод на свързания граф

Георги Гачев, Йорданка Димова

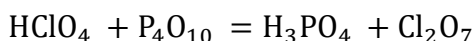
Институт по математика на БАН,  
Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“  
E-mail: gachev@math.bas.bg, dimova59@abv.bg

**Резюме:** Методът на графите е нов и сравнително лесен начин за балансиране на химични уравнения. Сравнително лесен означава, че е необходима известна практика. С негова помощ бързо и без помощта на изчислителна техника могат да се решават сложни химични уравнения. Прилагането на метода се основава на лесен алгоритъм с прости правила, което съществено намалява вероятността от допускане на грешки.


**Ключови думи:** метод на графите, балансиране на химично уравнение

Графо-алгебричен или „метод на графите“ се нарича метод за балансиране на химично уравнение в който се използват едновременно матрично представяне на химичното уравнение и помощен граф за решаване на система от линейни уравнения. Методът се основава на обхождане на граф по път, който се образува като се решават само уравнения с едно неизвестно.

Методът ще бъде пояснен стъпка по стъпка при балансиране на реакцията:




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

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



Фигура 1

Стъпка 2: В първата редица над съответните колони се изписват химичните съединения, а в първата колона в началото на всеки ред химичните елементи. Подредбата на химичните елементи е без значение:

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


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

Фигура 2

Стъпка 3: Така построената таблица е своеобразна координатна система. По хоризонталната ос са отбелязани химичните съединения, а по вертикалната ос химичните елементи, които участват в реакцията. Клетките в таблицата се образуват от пресичането на колона с химично съединение и ред с химичен елемент. Във всяка клетка се записва броят на атомите от химичния елемент в редицата, които се съдържат в химичното съединение от колоната. Например на **Фигура 3** в клетката, която се намира при пресичането на химичното съединение  $\text{HClO}_4$  и химичния елемент О 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 им клетка се оставя празна:

	$\text{HClO}_4$	$\text{P}_4\text{O}_{10}$	$\text{H}_3\text{PO}_4$	$\text{Cl}_2\text{O}_7$
H	1		3	
Cl	1			2
O	4	10	4	7
P		4	1	

Фигура 3

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

	$\text{HClO}_4$	$\text{P}_4\text{O}_{10}$	$\text{H}_3\text{PO}_4$	$\text{Cl}_2\text{O}_7$
H	1		3	
Cl	1			2
O	4	10	4	7
P		4	1	

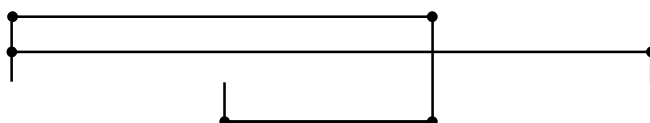
Фигура 4

Стъпка 5: Начертават се хоризонтални ребра в редовете, в които има само две пълни 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 **Фигура 5** редовете на водорода, хлора и фосфора образуват хоризонтални ребра, тъй като имат само по две клетки с числа. Редът на кислорода не образува ребро, защото съдържа повече от две запълнени клетки. За да бъде ясно точно къде хоризонталните ребра се съединяват с вертикалните мястото на съединението е отбелязано с точка:

	$\text{HClO}_4$	$\text{P}_4\text{O}_{10}$	$\text{H}_3\text{PO}_4$	$\text{Cl}_2\text{O}_7$
H	1 •		3 •	
Cl	1 •		•	2 •
O	4	10	4	7
P		4 •	1 •	

Фигура 5

След съединяване на всички ребра се образува се **граф**. На **Фигура 6** той е отделен от таблицата, за да бъдат пояснени неговите свойства.



Фигура 6

**Определение 1:** "Граф се нарича множество от **възли (върхове)** и **ребра**. Всяко ребро свързва двойка върхове."

**Определение 2:** "Път между два възела в графа се нарича такава последователност от ребра, която води от единия възел до другия така, че всеки две съседни ребра имат общ възел и никое ребро не се среща повече от един път."

**Определение 3:** "Графът се нарича **свързан**, ако съществува път между всеки два негови възела."

**Определение 4:** "Свързан граф, в който между всеки два възела има единствен път се нарича **дърво**."

**Теорема 1:** „Ако графът е дърво, което съдържа  $n$  възела, то той съдържа и  $n - 1$  ребра.“

От определенията следва, че графът на Фигура 6 е свързан и е от тип дърво. Това означава, че съществува единствен път между всеки два негови възела. Балансирането на химичното уравнение ще бъде направено като се обхождат ребрата на графа от възел до възел.

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 е цяло положително число. Например, допуска се, че коефициентът пред  $\text{H}_3\text{PO}_4$  е равен на едно. Тогава от първи ред на таблицата на **Фигура 7** по хода на реброто  $\text{HClO}_4 - \text{H}_3\text{PO}_4$  получаваме едно уравнение с едно неизвестно  $x \cdot 1 = 1 \cdot 3$ . Уравнението може да бъде прочетено така: “Три атома водород, които се съдържат в  $\text{H}_3\text{PO}_4$ , умножени по коефициента пред  $\text{H}_3\text{PO}_4$  – едно, са равни на един атом водород, който се съдържа в  $\text{HClO}_4$ , умножен по неизвестния коефициент  $x$  пред  $\text{HClO}_4$ ”. След решаване на уравнението се получава, че  $x=3$ .

	$x \cdot 1 = 3 \cdot 1$		
	$x=3$		1
	$\text{HClO}_4$	$\text{P}_4\text{O}_{10}$	$\text{H}_3\text{PO}_4$
H	1		3
Cl	1		
O	4	10	4
P		4	1

Фигура 7

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  $\text{Cl}_2\text{O}_7$  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.

	3	1/4	1	3/2
	$\text{HClO}_4$	$\text{P}_4\text{O}_{10}$	$\text{H}_3\text{PO}_4$	$\text{Cl}_2\text{O}_7$
H	1		3	
Cl	1			2
O	4	10	4	7
P		4	1	

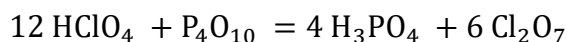
Фигура 8

След умножаване на всички коефициенти по най-малкото общо кратно - 4 се получава:

	12	1	4	6
	HClO <sub>4</sub>	P <sub>4</sub> O <sub>10</sub>	H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub>	Cl <sub>2</sub> O <sub>7</sub>
H	1		3	
Cl	1			2
O	4	10	4	7
P		4	1	

Фигура 9

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



Още веднъж на

**Фигура 10** със стрелки и последователни номера е показан пътът по който се обхожда графа и се намират четирите коефициента:

	12	1	4	6
	HClO <sub>4</sub>	P <sub>4</sub> O <sub>10</sub>	H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub>	Cl <sub>2</sub> O <sub>7</sub>
H	1		3	
Cl	1			2
O	4	10	4	7
P		4	1	

Фигура 10

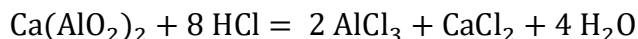
Ще бъде приведен в съкратен вид още един пример с повече химични съединения и елементи. Примерът ще бъде използван за поясняване на други свойства на метода за балансиране със свързан граф:



	1	8	2	1	4
	Ca(AlO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	HCl	AlCl <sub>3</sub>	CaCl <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O
Ca	1			1	
Al	2		1		
O	4				1
H		1			2
Cl		1	3	2	

Фигура 11

След пренасяне на коефициентите се получава балансираното уравнение:



Уравнението на **Фигура 11** съдържа  $n = 5$  химични съединения и съответно толкова вертикални ребра. Хоризонталните ребра са  $r = 4$ . Като следствие от *Теорема 1* е възможно да се формулират следните определения:

Определение 5: “Химична реакция може да се представи като свързан граф от тип дърво тогава, когато химичните съединения, които участват в реакцията са с едно повече от хоризонталните ребра:  $r + 1 = n$ ”.

Определение 6: “Количеството на свързаните графи  $g$  от тип дърво, които образува една химична реакция е  $g = n - r$ ”.

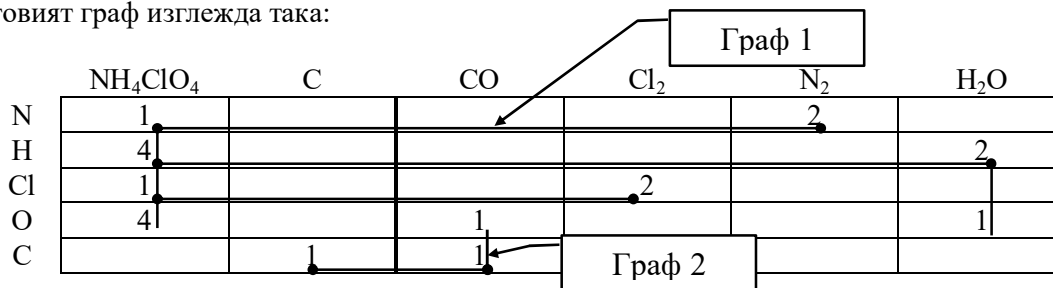
Графът на **Фигура 5** съдържа  $n = 4$  химични съединения и  $r = 3$  хоризонтални ребра. По **Определение 6**  $g = n - r = 4 - 3 = 1$ , следователно химичното уравнение образува само един граф. На **Фигура 11** ребрата са съответно  $n = 5$  и  $r = 4$ , тогава  $g = n - r = 5 - 4 = 1$ , следователно графът е само един.

Количеството на вертикалните ребра е винаги гарантирано, защото те са толкова, колкото са химичните съединения в уравнението. Това не може да се каже за хоризонталните ребра. Тяхното количество зависи от какви комбинации на химични елементи са образувани химичните съединения. Броят на хоризонталните ребра е случаен и се намира в интервала  $m \geq r$ , където  $m$  е количеството на химичните елементи в реакцията.

Това е причината само някои химични уравнения да образуват един свързан граф. При голяма част от уравненията графът се „разпада“ на два или повече свързани графа. Например такова е уравнението:



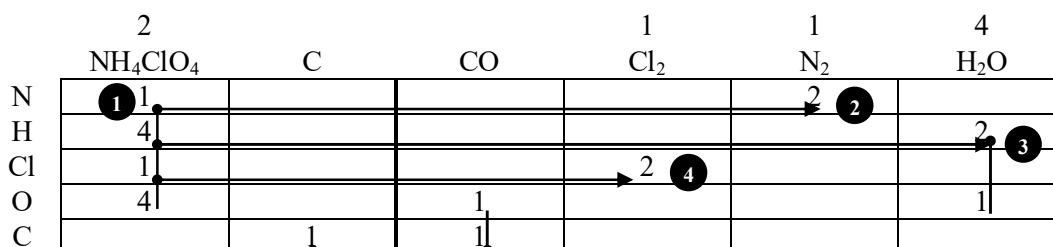
Неговият граф изглежда така:



Фигура 12

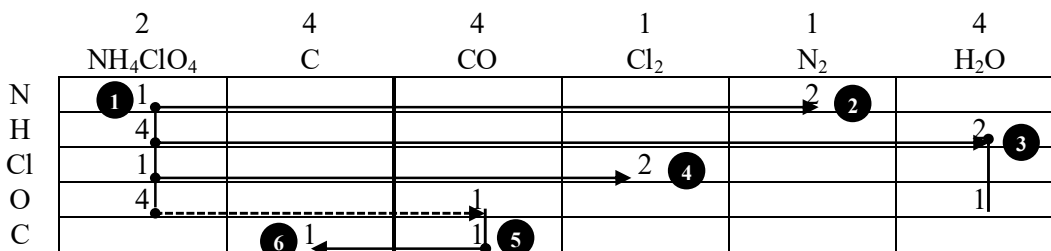
На пръв поглед не се виждат вертикалните ребра в колоните на C, Cl<sub>2</sub> и N<sub>2</sub>. Това е така, защото вертикалните ребра са образувани от химично съединение, в което участва само от един химичен елемент. В този случай дължината на вертикалното ребро е само една клетка или една точка. Уравнението образува два отделни графа (два дяла), защото при  $n = 6$  и  $r = 4$  от **Определение 6** следва, че  $g = n - r = 6 - 4 = 2$ . Двата графа са обозначени на **Фигура 12**.

Ако химичното уравнение образува повече от един граф е възможно отделните части на графа да бъдат свързани в един граф и да бъде прилаган методът за решаване на уравнение с един свързан граф. Например графът от **Фигура 12** може да бъде свързан така:



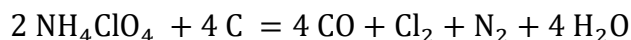
Фигура 13

Използва се фактът, че ако обхождането на графа започне от NH<sub>4</sub>ClO<sub>4</sub>, то веднага могат да бъдат определени всички коефициенти, освен тези на C и CO. Оказва се, че в реда на кислорода може да се състави уравнение с едно неизвестно от вече известните коефициенти пред NH<sub>4</sub>ClO<sub>4</sub> и H<sub>2</sub>O и неизвестния коефициент пред CO,  $2.4 = x.1 + 4.1$ , откъдето  $x=4$ . Тогава:



Фигура 14

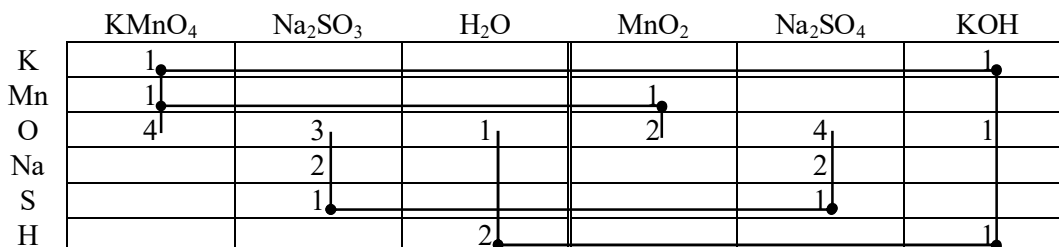
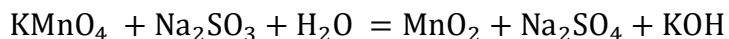
Окончателно:



*Определение 7: “Ако едно химично уравнение образува повече от един граф, то има значение редът на намиране на коефициентите пред химичните съединения”.*

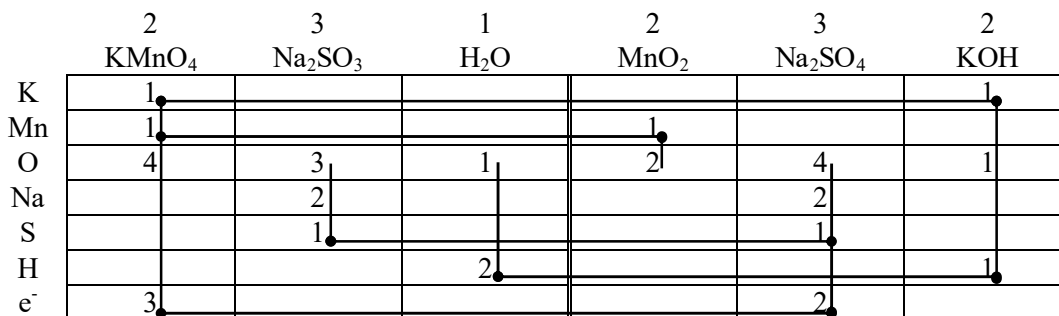
Като илюстрация на *Определение 7* може да послужи примерът от **Фигура 13**. Свързването на двата графа нямаше да бъде възможно, ако определянето на коефициентите беше започнало от C или CO.

Свързването на отделни графи в един може да стане като се използват различни свойства на химичната реакция и химичните вещества. Например обмен на електрони в окислително-редукционните процеси или наличието на химично съединение, което не се променя в хода на реакцията. Пример за окислително-редукционно „свързване“ на графи може да се демонстрира с реакцията:



Фигура 15

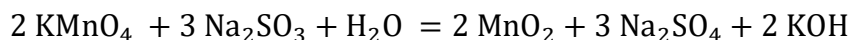
В тази химична реакция графите са два, защото има 6 химични съединения и 4 хоризонтални ребра. За да се реши уравнението може да се използва окислително-редукционната природа на реакцията. Манганът променя степента си на окисление  $\text{Mn}^{7+} \rightarrow \text{Mn}^{4+}$  като отнема два електрона от сярата  $\text{S}^{4+} \rightarrow \text{S}^{6+}$ . Към графа на последното уравнение може да бъде добавен и изискването за баланс на електроните.



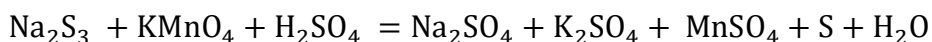
Фигура 16

Добавя се още едно хоризонтално ребро в реда на електроните. В този случай графът става само един тъй като  $n - r = 6 - 5 = 1$ . Определянето на коефициентите може да започне от всяко едно химично съединение.

Балансираното уравнение изглежда така:



В следващото химично уравнение се допуска, че в хода на реакцията сулфатната група  $\text{SO}_4$  не се променя.



Първоначално графът на реакцията изглежда по следния начин:

	$\text{Na}_2\text{S}_3$	$\text{KMnO}_4$	$\text{H}_2\text{SO}_4$	$\text{Na}_2\text{SO}_4$	$\text{K}_2\text{SO}_4$	$\text{MnSO}_4$	S	$\text{H}_2\text{O}$
Na	2			2				
S	3		1	1	1	1	1	
K		1			2			
Mn		1				1		
O		4	4	4	4	4		1
H			2					2

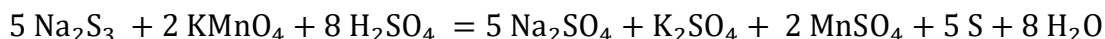
Фигура 17

Състои се от три дяла, тъй като химичните съединения са седем, а хоризонталните ребра са четири. Ако се предположи, че сулфатната група не се променя, то тя може да бъде представена като хипотетичен химичен елемент  $Z = \text{SO}_4$ . Тогава:

	5 $\text{Na}_2\text{S}_3$	2 $\text{KMnO}_4$	8 $\text{H}_2\text{SO}_4$	5 $\text{Na}_2\text{SO}_4$	1 $\text{K}_2\text{SO}_4$	2 $\text{MnSO}_4$	5 S	8 $\text{H}_2\text{O}$
Na	2			2				
S	3						1	
K		1			2			
Mn		1				1		
O		4						1
H			2					2
Z			1	1	1	1		

Фигура 18

Намирането на коефициентите започва от колоната на сярната киселина. Окончателно уравнението се балансира така:

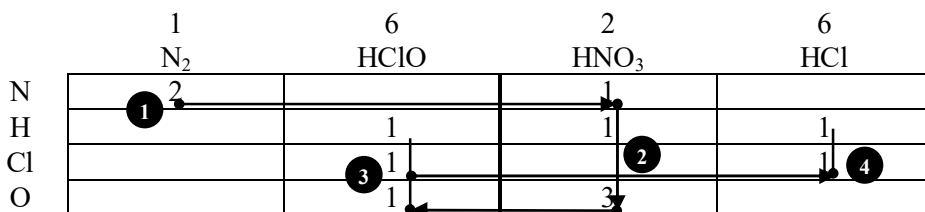
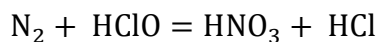


Трябва да се обърне особено внимание на две ограничения. Първо, възможно е да се свържат графите не на всички химични уравнения. Второ, намирането на коефициентите пред химичните съединения не означава, че уравнението е балансирано. Второто ограничение ще бъде разгледано по-подробно.

*Определение 8: “Ако едно химично уравнение образува свързан граф, то могат да бъдат намерени коефициенти за всички химични съединения, които участват в уравнението”.*

Въпреки, че за всяко химично съединение може да се намери коефициент, това все още не означава, че съществува решение, при което химичното уравнение ще бъде балансирано. Като

потвърждение ще бъде приведен пример на химично уравнение, което образува дърво, но няма решение:



Фигура 19

Дървото е обходено правилно и са намерени коефициентите пред химичните съединения. При проверката се оказва, че всички редове образуват равенства с изключение на реда на водорода. Там се получава неравенство  $6.1 \neq 2.1 + 6.1$ , откъдето следва, че уравнението не може да бъде балансирано.

*Определение 9: “Ако едно химично уравнение образува свързан граф и не може да бъде балансирано, то образува несъвместима система от линейни уравнения”.*

Последното определение означава, че ако химично уравнение образува свързан граф и не се балансира, то уравнението не може да се балансира по какъвто и да било друг начин. Това е полезно, защото може да предотврати следващи опити за балансиране, чрез използване на други методи.

Методът на графите е сравнително лесен начин за балансиране на химични уравнения. Сравнително лесен означава, че е необходима известна практика. С негова помощ бързо и без помощта на изчислителна техника могат да се решават сложни химични уравнения. Прилагането на метода се основава на лесен алгоритъм с прости правила, което съществено намалява вероятността от допускане на грешки.