

Chemické pokusy s Mathematicou

Většinu informací o prvcích periodické soustavy poskytuje funkce `ElementData[]`.

```
In[16]= ElementData[1, "Name"]
```

```
Out[16]= hydrogen
```

```
In[17]= ElementData[8, "Name"]
```

```
Out[17]= oxygen
```

```
In[18]= Table[{n, ElementData[n, "StandardName"],  
             ElementData[n, "Abbreviation"]}, {n, 1, 115}]
```

```
Out[18]= {{1, Hydrogen, H}, {2, Helium, He}, {3, Lithium, Li}, {4, Beryllium, Be},  
          {5, Boron, B}, {6, Carbon, C}, {7, Nitrogen, N}, {8, Oxygen, O},  
          {9, Fluorine, F}, {10, Neon, Ne}, {11, Sodium, Na}, {12, Magnesium, Mg},  
          {13, Aluminum, Al}, {14, Silicon, Si}, {15, Phosphorus, P}, {16, Sulfur, S},  
          {17, Chlorine, Cl}, {18, Argon, Ar}, {19, Potassium, K}, {20, Calcium, Ca},  
          {21, Scandium, Sc}, {22, Titanium, Ti}, {23, Vanadium, V}, {24, Chromium, Cr},  
          {25, Manganese, Mn}, {26, Iron, Fe}, {27, Cobalt, Co}, {28, Nickel, Ni},  
          {29, Copper, Cu}, {30, Zinc, Zn}, {31, Gallium, Ga}, {32, Germanium, Ge},  
          {33, Arsenic, As}, {34, Selenium, Se}, {35, Bromine, Br}, {36, Krypton, Kr},  
          {37, Rubidium, Rb}, {38, Strontium, Sr}, {39, Yttrium, Y}, {40, Zirconium, Zr},  
          {41, Niobium, Nb}, {42, Molybdenum, Mo}, {43, Technetium, Tc},  
          {44, Ruthenium, Ru}, {45, Rhodium, Rh}, {46, Palladium, Pd},  
          {47, Silver, Ag}, {48, Cadmium, Cd}, {49, Indium, In}, {50, Tin, Sn},  
          {51, Antimony, Sb}, {52, Tellurium, Te}, {53, Iodine, I}, {54, Xenon, Xe},  
          {55, Cesium, Cs}, {56, Barium, Ba}, {57, Lanthanum, La}, {58, Cerium, Ce},  
          {59, Praseodymium, Pr}, {60, Neodymium, Nd}, {61, Promethium, Pm},  
          {62, Samarium, Sm}, {63, Europium, Eu}, {64, Gadolinium, Gd}, {65, Terbium, Tb},  
          {66, Dysprosium, Dy}, {67, Holmium, Ho}, {68, Erbium, Er}, {69, Thulium, Tm},  
          {70, Ytterbium, Yb}, {71, Lutetium, Lu}, {72, Hafnium, Hf}, {73, Tantalum, Ta},  
          {74, Tungsten, W}, {75, Rhenium, Re}, {76, Osmium, Os}, {77, Iridium, Ir},  
          {78, Platinum, Pt}, {79, Gold, Au}, {80, Mercury, Hg}, {81, Thallium, Tl},  
          {82, Lead, Pb}, {83, Bismuth, Bi}, {84, Polonium, Po}, {85, Astatine, At},  
          {86, Radon, Rn}, {87, Francium, Fr}, {88, Radium, Ra}, {89, Actinium, Ac},  
          {90, Thorium, Th}, {91, Protactinium, Pa}, {92, Uranium, U}, {93, Neptunium, Np},  
          {94, Plutonium, Pu}, {95, Americium, Am}, {96, Curium, Cm}, {97, Berkelium, Bk},  
          {98, Californium, Cf}, {99, Einsteinium, Es}, {100, Fermium, Fm},  
          {101, Mendeleevium, Md}, {102, Nobelium, No}, {103, Lawrencium, Lr},  
          {104, Rutherfordium, Rf}, {105, Dubnium, Db}, {106, Seaborgium, Sg},  
          {107, Bohrium, Bh}, {108, Hassium, Hs}, {109, Meitnerium, Mt},  
          {110, Darmstadtium, Ds}, {111, Roentgenium, Rg}, {112, Copernicium, Cn},  
          {113, Ununtrium, Uut}, {114, Ununquadium, Uuq}, {115, Ununpentium, Uup}}
```

Relativní atomová hmotnost

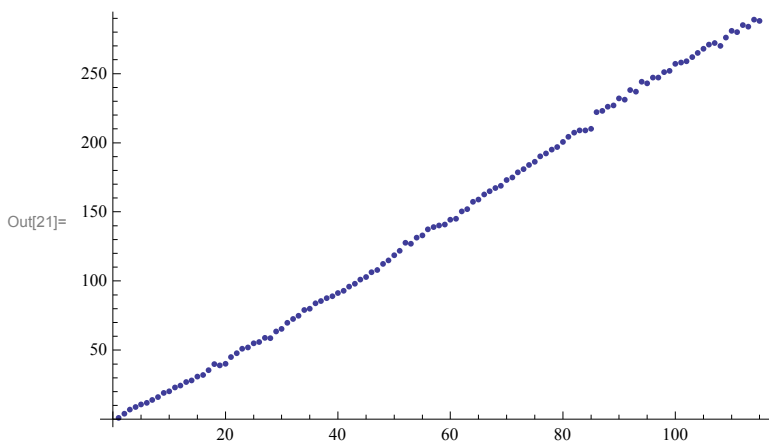
```
In[19]= ElementData["Carbon", "AtomicWeight"]
```

```
Out[19]= 12.0107
```

```
In[20]= ElementData["Gold", "AtomicWeight"]
```

```
Out[20]= 196.966569
```

```
In[21]= ListPlot[Table[ElementData[n, "AtomicWeight"], {n, 1, 115}]]
```

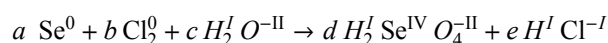


Vyčíslování rovnic

Příklad 1

Vyčíslete rovnici: $\text{Se} + \text{Cl}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{SeO}_4 + \text{HCl}$.

Dopište do rovnice oxidační čísla a neznámé stechiometrické koeficienty, které musí být kladné, větší než nula:



Sepišme rovnice, které pro koeficienty platí, aby v rovnici nastala rovnováha pravé a levé strany.

$$\text{Se: } a - d = 0$$

$$\text{Cl: } 2b - e = 0$$

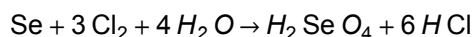
$$\text{H: } 2c - 2d - e = 0$$

$$\text{O: } c - 4d = 0$$

```
In[22]= NullSpace[{{1, 0, 0, -1, 0}, {0, 2, 0, 0, -1}, {0, 0, 2, -2, -1}, {0, 0, 1, -4, 0}}]
```

```
Out[22]= {{1, 3, 4, 1, 6}}
```

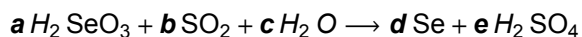
Výsledek je:



Příklad 2

Vyčíslete rovnici: $\text{H}_2\text{SeO}_3 + \text{SO}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Se} + \text{H}_2\text{SO}_4$.

Dopište do rovnice oxidační čísla a neznámé stechiometrické koeficienty, které musí být kladné, větší než nula:



Sepišme rovnice, které pro koeficienty platí, aby v rovnici nastala rovnováha pravé a levé strany.

$$H: 2a + 2c = 2e \longrightarrow 2a + 2c - 2e = 0$$

$$Se: a = d \longrightarrow a - d = 0$$

$$O: 3a + 2b + c = 4e \longrightarrow 3a + 2b + c - 4e = 0$$

$$S: b = e \longrightarrow b - e = 0$$

Takto získaná soustava rovnic má pravou stranu rovnu "nulám" – nulovém vektoru, takovým soustavám se říká homogení. Soustava má jistě alespoň jedno řešení pro neznámé a, b, c, d, e : samé nuly! Takovému řešení se říká triviální a odpovídá situaci, kdy spolu nereagují žádné sloučeniny a také žádné nevznikají. To ovšem nemá žádný smysl. Existuje pro soustavu jiné netriviální řešení? Funkce `NullSpace[]` hledá netriviální řešení homogeních soustav.

In[23]:= `NullSpace[{{2, 0, 2, 0, -2}, {1, 0, 0, -1, 0}, {3, 2, 1, 0, -4}, {0, 1, 0, 0, -1}}]`

Out[23]= `{{1, 2, 1, 1, 2}}`

Výsledek je:

