TƏBİƏT ELMLƏRİ

NATURAL SCIENCES

https://doi.org/10.36719/2789-6919/41/81-87

Əli Zalov
Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Universiteti
kimya üzrə elmlər doktoru
https://orcid.org/0000-0002-2171-8906
zalov1966@mail.ru
Sürayyə İsayeva
Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Universiteti
riyaziyyat üzrə fəlsəfə doktoru
https://orcid.org/0009-0000-9488-1811
surayye.necefova@gmail.com

Mürəkkəb tərkibli qarışıqların hesablanması

Xülasə

Məqalədə matris və determinant anlayışlarının kimyaya tətbiqi araşdırılmışdır. Kimyəvi reaksiyaların balanslaşdırılması, kvant kimyası və molekulyar orbital nəzəriyyəsi kimi sahələrdə bu riyazi anlayışların mühüm rol oynadığı göstərilmişdir. Matrislər, kimyəvi reaksiyaların atom səviyyəsindəki uyğunluqlarını təsvir etmək üçün effektiv bir metod təqdim edir, determinantlar isə bu sistemlərin həllini tapmaq üçün riyazi bir vasitədir. Tədqiqatın nəticələri göstərir ki, riyaziyyatın bu fundamental bölmələri kimyəvi problemlərin daha dəqiq və effektiv həllinə imkan yaradır və bu da elm və texnologiyanın müxtəlif sahələrində geniş tətbiq potensialına malikdir.

Açar sözlər: *matris, determinant, kimyəvi maddə, qarışıq, turşuların sərfiyyatı, maddənin qatılığı, həssaslıq, Kramer qaydası*

Ali Zalov
Azerbaijan State Pedagogical University
Doctor of Science in Chemistry
https://orcid.org/0000-0002-2171-8906
zalov1966@mail.ru
Suraya Isayeva
Azerbaijan State Pedagogical University
Doctor of Philosophy in Mathematics
https://orcid.org/0009-0000-9488-1811
surayye.necefova@gmail.com

Calculation of Complex Mixtures

Abstract

The article explores the application of the consepts of matrix and determinant in chemistry. In demonstrates the significant role these mathematical concepts play in areas such as balancing chemical reactions, quantum chemistry, and molecular orbital theory. Matrices provide an effective method for describing the consistencies at the atomic level in chemical reactions, while determinants serve as a mathematical tool for solving these systems. The results of the research indicate that the fundamental branches of mathematics enable a more precise and efficient solution to chemical problems, which highlights their broad potential for application in science and technology.

***Keywords**: matrix, determinant, chemical substance, mixture, Cramers rule, acid consumption, substance participation, sensitivity*

Giriş

Riyaziyyat elmi yalnız nəzəri tədqiqatlarla məhdudlaşmayaraq, digər təbiət elmlərinin inkişafında da mühim rol oynayır. Kimya elmi də bu baxımdan riyaziyyatın tətbiq sahələrindən biri kimi, riyazi metodların köməyi ilə kompleks problemləri həll edir.

Matris və determinant anlayışları kimyanın müxtəlif sahələrində, o cümlədən kimyəvi reaksiyaların balanslaşdırılması, molekulyar strukturların analiz edilməsi və kvant kimyasında geniş istifadə olunur. Bu anlayışlar kimyəvi sistemləri riyazi cəhətdən təsvir etməyə və həmin sistemlərin xassələrini daha yaxşı başa düşməyə imkan verir.

Məqalədə matris və determinantın kimya elmində ən mühüm tətbiqləri araşdırılmış, onların əsasında kimyəvi reaksiyaların balanslaşdırılması, molekulyar orbital nəzəriyyəsi təhlil edilmişdir.

Riyazi üsulların kimyəvi problemlərin həllində effektivliyini vurğulamaq bu məqalənin əsas məqsədidir.

Tədqiqat

m*n sayda ədədlərdən düzəldilmiş

$$\begin{matrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{mn} \end{matrix}$$

bu cədvələ $m \times n$ ölçülü matris deyilir. $m \times n$ ölçülü matrislər aşağıdakı kimi işarə olunur.

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}, \left\| \begin{matrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{matrix} \right\|, \left(a_{ij}\right)_{j=1,2,\dots n}^{i=1,2,\dots m}, \left[a_{ij}\right]_{j=1,2,\dots n}^{i=1,2,\dots m}$$

Bəzən matrisi bir hərflə də işarə edirlər.

$$A = \left\| \begin{matrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{matrix} \right\|$$

a_{ij} ədədlərinə matrisin elementləri deyilir (Alməmmədov, Qarayev, Quluzadə, 2013: 7-12).

Biz yalnız ölçüləri eyni olan matrislərə baxacağıq. A və B matrislərinin cəmi elə C matrislərinə deyilir ki, onun elementləri A və B matrislərinin uyğun elementlərinin cəmindən ibarət olsun.

Əgər $A = \lfloor a_{ij} \rfloor, B = \lfloor b_{ij} \rfloor$ olarsa, onların cəmi $C = \lfloor c_{ij} \rfloor$ üçün $c_{ij} = a_{ij} + b_{ij}$ olar.

A və B matrislərinin cəmi $A + B$ kimi işarə edilir. Üç matrisin cəmini də ardıcıl toplamaqla yerinə yetirmək olar:

$$A + B + C = (A + B) + C.$$

Analoji olaraq $n > 3$ olduqda $A_1 + A_2 + \dots + A_n$ cəmini də təyin etmək olar.

A matrisinin λ ədədi ilə hasili elə B matrisinə deyilir ki, onun elementlərinin hamısı A-nın bütün elementlərinin λ ədədi ilə hasilindən ibarət olsun. $A = \lfloor a_{ij} \rfloor$ matrisi üçün

$$B=\lambda A=\lambda\begin{Vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{Vmatrix}=\begin{Vmatrix} \lambda a_{11} & \lambda a_{12} & \dots & \lambda a_{1n} \\ \lambda a_{21} & \lambda a_{22} & \dots & \lambda a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \lambda a_{m1} & \lambda a_{m2} & \dots & \lambda a_{mn} \end{Vmatrix}$$

$(-1)A$ matrisinə A matrisinin əks matrisi deyilir və $-A$ kimi işarə edilir.
Matrislərin toplanması və ədədə vurulması aşağıdakı xassələrə malikdir.
1. $A+B=B+A$ (kommutativlik)
2. $(A+B)+C=A+(B+C)$
3. $A+0=A$
4. $A+(-1)A=0$
5. $1\cdot A=A$
6. $\lambda(\alpha\cdot A)=(\lambda\alpha)A$ (vurmaya nəzərən assosiativlik)
7. $\lambda(A+B)=\lambda A+\lambda B$
8. $(\alpha+\lambda)A=\alpha A+\lambda A$

İki matrisin fərqi aşağıdakı kimi təyin edilir.
$A-B=A+(-1)B.$

$m\times n$ ölçülü $A=\lfloor a_{ij}\rfloor$ və $r\times s$ ölçülü $B=\lfloor b_{ij}\rfloor$ matrisləri üçün $n=r$ olarsa, başqa sözlə, birinci matrisin sütunlarının sayı ikincinin sətirlərinin sayına bərabərdirsə, onda belə matrislərə "uyğunlaşdırılmış" matrislər deyilir.

i -ci sətirlə j -cı sütununun kəsişməsindəki c_{ij} elementi A matrisinin i -ci sətri və B matrisinin j -cı sütununun uyğun elementlərinin hasilləri cəmi kimi təyin olunan C matrisinə A və B-nin hasili deyilir. İki matrisin hasili AB kimi işarə edilir (Kərimov, 1998: 11-26).

Matrislərin vurulmasında aşağıdakı xassələr doğrudur:
1. Matrislərin vurulmasında kommutativlik qanunu həmişə doğru deyildir: $A\cdot B\neq B\cdot A.$
Məsələn,

$$\begin{Vmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 2 \end{Vmatrix}\cdot\begin{Vmatrix} 2 & 2 \\ 0 & 0 \end{Vmatrix}=\begin{Vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{Vmatrix}.$$

Lakin

$$\begin{Vmatrix} 2 & 2 \\ 0 & 0 \end{Vmatrix}\cdot\begin{Vmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 2 \end{Vmatrix}=\begin{Vmatrix} 0 & 8 \\ 0 & 0 \end{Vmatrix}.$$

2. Matrislərin hasilində assosiativlik qanunu doğrudur:

$$(AB)C=A(BC).$$

3. A matrisinin vahid E matrisinə hasili kommutativlik xassəsinə malikdir:

$$A\cdot E=E\cdot A.$$

4. $\alpha(AB)=(\alpha A)\cdot B=A(\alpha\cdot B),\alpha\in R$
5. $(A+B)C=AC+BC$
6. $C(A+B)=CA+CB$

Kvadrat matrisə qarşı qoyulan ədədlərdən biri də onun determinantıdır. İndi tutaq ki, bizə ikitərtibli

$$A=\begin{Vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{Vmatrix} \tag{1}$$

kvadrat matrisi verilmişdir.

$$|A| = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \qquad (2)$$

ifadəsi ilə təyin edilən $|A|$ ədədinə A matrisinin determinantı deyilir və $|A|$, $\begin{Vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{Vmatrix}$, $D(A), det A$ kimi işarələrlə göstərilir.

(2) ifadəsindəki $a_{11}a_{12}$ və $-a_{12}a_{21}$ ədədləri ikitərtibli determinantın hədləri adlanır. İndi də tutaq ki, üçtərtibli kvadrat matris verilmişdir:

$$A = \begin{Vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{Vmatrix}$$

$$\begin{aligned} |A| = {} & a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{22}a_{32} - a_{13}a_{22}a_{31} - \\ & - a_{11}a_{23}a_{32} - a_{12}a_{23}\|a_{33}\| \end{aligned} \qquad (3)$$

ifadəsi ilə təyin edilən ədədə bu matrisin determinantı deyilir.

(3) ifadəsinin sağ tərəfindəki toplananlar determinantın hədləri adlanır.

İkitərtibli determinantda olduğu kimi üçtərtibli determinantı da işarə etmək üçün $|A|, D(A), det A$ və s. simvollarından biri işlədilir (Korn, 1974: 832)

Tutaq ki, təcrübənin aparılması üçün hər hansı *m* maddəsindən ibarət qarışıq hazırlamaq tələb olunur. Bu qarışığa *i* maddəsinin $(i=1,....m)b_i$ (kütlə,həcm) vahidləri daxil edilməlidir. Məlumdur ki, qarışığı hazırlamaq hər bir *j* hissəsi *i*-ci maddənin a_{ij}-vahidini saxlayır ($j=1, ..., n$).

Lazım olan qarışığı hazırlamaq üçün götürülmüş x_j ilə *j*-komponentinin miqdarını işarə etsək, onda cəm

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \ldots + a_{in}x_n$$

qarışıqda tələb olunan b_i maddəsinin miqdarını verəcəkdir.

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}\, x_j = b_i \qquad (i = 1,2,\ldots.,m) \qquad (4)$$

Beləliklə, müəyyən bir maddənin miqdarını təşkil edən qarışığın hazırlanması ardıcıllığı (4) xətti cəbri tənlik şəklində olur.

Məsələ: [Skateçkiy, 1981: 144] Üç komponentdən ibarət nitrollaşdırıcı qarışıq hazırlanır, bu komponentlər su, nitrat və sulfat turşularıdır. *M* kq qarışıq əldə etmək üçün hər bir komponentdən nə qədər götürmək lazım ki, qarışıqda H_2O, HNO_3 və H_2SO_4 uyğun olaraq miqdarı b_1, b_2, b_3% olsun. Nəzərə alın ki, hər bir komponentdə su, nitrat və sulfat turşularının miqdarı məlumdur və üçtərtibli matris şəklində təqdim olunur.

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

Həlli: Qarışıq üç maddədən, üç komponentdən ibarətdir. Onda (4) aşagıdakı kimi olur:

$$\begin{gathered} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = Mb_1 \\ a_{21}x_2 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = Mb_2 \\ a_{31}x_3 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = Mb_3 \end{gathered}$$

x_i kəmiyyətini tapmaq üçün Kramer qaydasından istifadə edilir. Bunun üçün detA -nı tapaq (Məmmədov, 1976: 35-42).

$$det\,A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}$$

Əgər detA$\neq$ 0 olarsa, detA_i-ni hesablamaqla x_i kəmiyyətini tapmaq olar. Məsələn:

$$x_2 = \frac{M}{det\,A} = \begin{vmatrix} a_{11} & b_1 & a_{13} \\ a_{21} & b_2 & a_{23} \\ a_{31} & b_3 & a_{33} \end{vmatrix}$$

Nümunə: Tutaq ki, tərkibi aşağıdakı kimi olan 4250 kq nitrollaşdırıcı qarışıq hazırlamaq lazımdır: su(b_1)-22%, nitrat turşusu (b_2)-16%, sulfat turşusu (b_3)-62%; qarışıqdan (*melanj –qarışıq (fransızca)*): H_2O(a_{11})-5%, HNO_3(a_{21})-85%,H_2SO_4 (a_{31})-10%, oleumdan: H_2O(a_{21})-0%, HNO_3(a_{22})-0%, H_2SO_4 (a_{32})-100%; işlənmiş turşulardan: H_2O(a_{13})-30%, HNO_3(a_{23})-0%, H_2SO_4 (a_{33})-70%. Bu qarışığı hazırlamaq üçün turşuların tələb olunan miqdarını hesablayın.

Turşuların sərfiyyatını tapmaq üçün bu qarışıqdan düzəlmiş determinantı quraq və hesablayaq:

$$det\,A = \begin{vmatrix} 5 & 0 & 30 \\ 85 & 0 & 0 \\ 10 & 104 & 70 \end{vmatrix} = 85 \cdot 30 \cdot 104 =$$

daha sonra

$$det\,A_1 = 4250 \begin{vmatrix} 22 & 0 & 30 \\ 16 & 0 & 0 \\ 62 & 104 & 70 \end{vmatrix} = 4250 \cdot 16 \cdot 30 \cdot 104$$

Buradan melanjın sərfi

$$x_1 = \frac{4250 \cdot 16 \cdot 30 \cdot 104}{85 \cdot 104 \cdot 30} = 800{,}0(kq)$$

$$det\,A_2 = 4250 \begin{vmatrix} 5 & 22 & 30 \\ 85 & 16 & 0 \\ 10 & 62 & 70 \end{vmatrix} = \ldots$$

alarıq.

Oleumun sərfi isə $x_2 = 4250 \frac{100*280}{85*104*30} = 4250 * 0{,}1098 = 467\ kq$

İndi isə:

$$det\,A_3 = 4250 \begin{vmatrix} 5 & 0 & 22 \\ 85 & 0 & 16 \\ 10 & 104 & 62 \end{vmatrix} = 4250 \cdot 104 (85 \cdot 22 - 16 \cdot 5) =$$

$$= 4250 \cdot 104 \cdot 5 \cdot 2 \cdot 179$$

tapıb, işlənmiş turşusunun sərfini tapa bilərik:

$$x_3 = 4250 \cdot \frac{104 \cdot 5 \cdot 2 \cdot 179}{85 \cdot 104 \cdot 30} = 4250 \cdot 0{,}7019 = 2983\,(kq)$$

Alınmış nəticənin düzgünlüyünü yazmaq üçün cəmi tapaq:

$$x_1+x_2+x_3=800+467+2983=4250 \text{ (kq)}$$

Bu da tələb olunan qarışığın kütləsi ilə eynidir (Skateçkiy,Yaşkin, 6-27).

Məhlulun tərkibinin kimyəvi sensorlar sistemi vasitəsilə tədqiqi

Müəyyən bir maddənin qatılığından asılı olaraq qaz və ya məhlul mühitində çıxan siqnalın kimyəvi həssas cihazlar vasitəsilə qeydə alınması sensorlar adlanır.

Tutaq ki, A, B və C adlı üç maddədən ibarət qarışıq verilib və bu maddələrə qarşı həssaslıqları məlum olan üç sensor mövcuddur (cədvəl 1).

Sensorun nömrəsi	Sensorun maddələrə həssaslığı			Qeyd olunan siqnal
	A	B	C	
1	a_{11}	a_{12}	a_{13}	b_1
2	a_{21}	a_{22}	a_{23}	b_2
3	a_{31}	a_{32}	a_{33}	b_3

Bu halda hər bir sensor üçün aşağıdakı şərtlər ödənir:

1) qarışıqdakı hər bir maddənin mövcudluğundan qaynaqlanan siqnallar, sensorun ümumi cavabına əlavə təsir göstərir $b_{1;}$

2) müəyyən bir maddədən (komponentdən) gələn siqnalın böyüklüyü onun qatılığı ilə mütənasibdir və mütənasiblik əmsalının qiyməti (yəni həssaslıq kəmiyyətia_{ij}) hər bir maddə üçün fərqlidir.

İndi isə qarışıqda A,B,C maddələrinin qatılıqlarını müvafiq olaraq $x_{1,}x_2$ $və$ x_3 ilə ifadə etsək, onad i-ci

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + a_{i3}x_3$$

sensorun cəminin ümumi sensorun ifadə edəcək:

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + a_{i3}x_3 = b_{i4} \qquad (5)$$

Beləliklə, A, B və C komponentlərinin qatılıqlarının hesablanması xətti cəbri tənliklərin həllinə gətirilir (Skateçkiy, 1981: 144).

Məsələ: Siqnalın böyüklüyünə əsasən qarışıqda A, B və C komponentlərinin qatılıqlarını təyin etmək üçün cəbri tənliklər sistemi yaradaq (cəvəl 1- in son sütunu).

Həlli: Hər bir sensor üçün (5) tənliyini yazaq:

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = b_1$$
$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = b_2$$
$$a_{31}x_1 + a_{23}x_2 + a_{33}x_3 = b_3$$

Bu xətti tənliklər sisteminin həllini tapmaq üçün ya Qaus üsulundan, ya da Kramer qaydasından istifadə edilir. Qatılığın tapılan qiymətini $(x_1 - x_3)$ başlanğıc sistemə daxil edib və digər qalıqları da hesablamaq $r_i(i = 1,2,3)$ yolu ilə qarışıqda komponentlərin qatılığının təyininin dəqiqliyinə nəzarət etmək olar:

$$r_1 = b_1 - \sum_{j=1}^{\xi} a_{1j}x_j$$

$$r_2 = b_2 - \sum_{j=1}^{\xi} a_{2j}x_j$$

$$r_3 = b_3 - \sum_{j=1}^{\xi} a_{3j} x_j$$

Kiçik xətalarla r_i həll sıfra yaxınlaşır (Stepanov, Erlekina, Filippov, 1976: 360).

Baxılan sistemin həssaslıq ölçüsü bir neçə sensordan ibarət olan a_{ij} əmsallarından düzəlmiş matrisin determinantıdır. Əgər bütün sensorlar seçilmişdirlərsə, onda bu halda determinantın qiyməti maksimum olar (bu o deməkdir ki, matrisin bütün elementləri, dioqanaldan başqa sıfra bərabərdir).

Nəticə

Matrisdən kimyanın bir çox nəzəri və praktik məsələlərinin həllində istifadə olunur. Buna misal olaraq kimyəvi maddələrin sintezini texnoloji proseslərin gedişinin öyrənilməsini, maddələrin valentin bucaqlarının və rabitələrin uzunluğunun hesablanmasını, dərəcəli əyrinin qrafikinin tənliyinin hesablanmasını, molekulların fəza həndəsi quruluşunun öyrənilməsini göstərmək olar.

Ədəbiyyat

1. Alməmmədov, M.S., Qarayev, M.İ., Quluzadə, T.H. (2013). Ali riyaziyyatdan mühazirə mətnləri.
2. Batuner, B.E., Pozin, M.E. (1971). Matematicheskie metodi v chimicheskoy technologii.
3. Kərimov, K.R. (1998). Ali riyaziyyat.
4. Korn, T. (1974). Spravochnik po matematike.
5. Məmmədov, R. (1976). Ali riyaziyyat (I hissə).
6. Skatechkiy,V.Q., Yaşkin. (1980). Matematicheskie metodi i sxemi.
7. Skatechkiy, V.Q. (1981). Matematiçeskoe modelirovanie fiziko-ximiçeskix prosessov.
8. Stepanov, N.F., Erlekina, M.E., Filippov, Q.Q. (1976). Metodi lineynoy algebri v
9. fiziçeskoy ximii.

Daxil oldu: 07.11.2024
Baxışa göndərildi: 25.11.2024
Təsdiq edildi: 06.01.2025
Çap olundu: 28.01.2025