

Univerzita Karlova
Pedagogická fakulta
Katedra matematiky a didaktiky matematiky

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Matematické postupy vyčíslování chemických rovnic: sbírka řešených úloh
Mathematical procedures for calculating chemical equations: a collection of
solved problems

RNDr. Vlastimil Horálek

Vedoucí práce: JUDr. Mgr. Filip Beran
Konzultant práce: doc. RNDr. Ing. Petr Distler, Ph.D. et Ph.D.
Studijní program: Chemie se zaměřením na vzdělávání
Studijní obor: Chemie se zaměřením na vzdělávání se sdruženým studiem
Matematika se zaměřením na vzdělávání

Prohlašuji, že jsem bakalářskou práci na téma *Matematické postupy vyčíslování chemických rovnic: sbírka řešených úloh* vypracoval pod vedením vedoucího práce JUDr. Mgr. Filipa Berana samostatně za použití v práci uvedených pramenů a literatury a bez využití nástrojů umělé inteligence. Dále prohlašuji, že tato práce nebyla využita k získání jiného nebo stejného titulu.

Praha 10. 7. 2025

.....

podpis

Poděkování

Na tomto místě bych chtěl poděkovat vedoucímu práce JUDr. Mgr. Filipu Beranovi za pečlivé, podnětné a systematické vedení, veškerou spolupráci i možnost vyzkoušet úlohy ve výuce.

Poděkování si rovněž zaslouží konzultant práce doc. Petr Distler za čas strávený konzultací, jakož i za cenné připomínky, komentáře, které se vázaly nejen k chemické stránce práce, ale i k úlohám samotným a které pomohly práci významně zkvalitnit.

V neposlední řadě chci poděkovat svým nejbližším a rodině za podporu, jmenovitě své sestře Kristýně za vzájemnou podporu při souběžném psaní našich bakalářských prací, dále Tomáši F. (Fajstovi), Vojtovi D. a Kamilu M. za jejich dlouhodobý a formativní matematický vliv, který mě nakonec přivedl ke studiu matematiky na Pedagogické fakultě Univerzity Karlovy.

ABSTRAKT

Bakalářská práce *Matematické postupy vyčíslování chemických rovnic: sbírka řešených úloh* je napsána jako portfolio výukových materiálů, které jsou založené na silném interdisciplinárním propojení matematiky a chemie. V rámci portfolio byla sestavena sbírka řešených úloh na téma matematických přístupů k vyčíslování chemických rovnic. Matematické postupy byly rozděleny do čtyř kapitol podle využitého postupu, a sice *Vyčíslování na základě jednoduchých poměrů*, *Postupné vyčíslování bez soustavy lineárních rovnic*, *Vyčíslování řešením soustavy lineárních rovnic* a *Nedourčené úlohy*. Každá kapitola je zakončena shrnujícím komentářem, jehož cílem je porovnat běžné chemické postupy vyčíslování a prezentované matematické metody, pojmenovat jejich klady i zápory, vhodnost či přesnost. Po každé kapitole následují úlohy k procvičení, které jsou obdobné řešeným příkladům. Celkem bylo připraveno dvanáct řešených příkladů a 33 úloh k procvičení. Vybrané úlohy byly pilotovány v gymnaziální i vysokoškolské výuce. Součástí práce je i popis teoretických chemických a matematických východisek, která podávají hlubší vysvětlení využitých metod s ohledem na lineární algebru, a vysvětlují je v kontextu vyčíslování chemických rovnic. Práce by měla sloužit primárně vyučujícím matematiky na středních školách jako zdroj a inspirace pro výuku představených témat, využitelná je i pro vyučující chemie, jejich žáky jako samostudijní materiál a studenty matematiky či chemie se zaměřením na vzdělávání.

KLÍČOVÁ SLOVA

chemická rovnice, stechiometrické koeficienty, soustava lineárních rovnic, střední škola, sbírka úloh

ABSTRACT

The bachelor thesis *Mathematical procedures for calculating chemical equations: a collection of solved problems* is written as a portfolio of teaching materials based on a strong interdisciplinary connection between mathematics and chemistry. Within the portfolio, a collection of solved problems on mathematical approaches to the enumeration of chemical equations has been compiled. The mathematical approaches have been divided into four chapters according to the approach used, namely Enumeration based on simple ratios, Sequential enumeration without a system of linear equations, Enumeration by solving a system of linear equations and Unspecified problems. Each chapter concludes with a summarizing commentary that aims to compare common chemical enumeration procedures and the mathematical methods presented, naming their pros and cons, suitability or accuracy. Each chapter is followed by practice problems that are similar to the solved examples. A total of 12 solved examples and 33 practice problems have been prepared. The selected problems were piloted in both high school and college classes. The work includes a description of the theoretical chemical and mathematical background, which gives a deeper explanation of the methods used with respect to linear algebra, and explains them in the context of enumerating chemical equations. The work should primarily serve secondary school mathematics teachers as a resource and inspiration for teaching the topics presented, and it is also useful for chemistry teachers, their students as self-study material, and students of mathematics or chemistry with a focus on education.

KEYWORDS

chemical equation, stoichiometric coefficients, system of linear equations, high school, collection of task

Obsah

Úvod a cíle.....	7
1 Teoretický základ	8
1.1 Chemické principy a pojmy spojené s vyčíslováním chemických rovnic.....	8
1.2 Matematické principy a pojmy spojené s vyčíslováním chemických rovnic	10
2 Sbírka řešených úloh	13
2.1 Vyčíslování na základě jednoduchých poměrů	14
2.1.1 Příklad 1: Vznik vody přímo z prvků	14
2.1.2 Příklad 2: Reznutí železa	15
2.1.3 Příklad 3: Exploze trinitrotoluenu	17
Komentář k matematickému a chemickému řešení (P1–P3).....	18
2.2 Postupné vyčíslování bez soustavy lineárních rovnic	19
2.2.1 Příklad 4: Pražení pyritu	19
2.2.2 Příklad 5: Příprava chloru.....	23
2.2.3 Příklad 6: Reakce cínu s koncentrovanou kyselinou dusičnou	25
Komentář k matematickému a chemickému řešení (P4–P6).....	28
2.3 Vyčíslování řešením soustavy lineárních rovnic	29
2.3.1 Příklad 7: Reakce mědi se zředěnou kyselinou dusičnou.....	29
2.3.2 Příklad 8: Oxidace síranu železnatého dichromanem draselným.....	34
2.3.3 Příklad 9: Reakce oxidu vanadičného s hydroxidem draselným.....	36
Komentář k matematickému a chemickému řešení (P7–P9).....	38
2.4 Nedourčené úlohy.....	39
2.4.1 Příklad 10: Reakce sulfanu s kyselinou sírovou.....	39
2.4.2 Příklad 11: Oxidace sulfanu na elementární síru manganistanem draselným	

2.4.3	Příklad 12: Spalování methanu.....	49
	Komentář k matematickému a chemickému řešení (P10–P12).....	51
2.5	Zadání úloh a výsledky.....	53
2.5.1	Zadání	53
2.5.2	Výsledky.....	55
3	Reflexe portfolia výukových materiálů	61
3.1	Motivace a geneze vzniku portfolia.....	61
3.2	Hodnocení vytvořených materiálů.....	62
3.3	Výběr úloh do portfolia	63
3.4	Testování úloh v praxi	64
3.4.1	Kvinta osmiletého gymnázia	64
3.4.2	Třetí ročník bakalářského studia učitelství matematiky	66
3.5	Prostor pro další směřování	69
3.5.1	Iontové rovnice	69
3.5.2	Rovnice s organickými sloučeninami.....	70
	Závěr.....	72
	Seznam použitých informačních zdrojů	73
	Vyjádření k využití nástrojů umělé inteligence	76

Úvod

V kontextu dnešního vzdělávání, kdy je kladen důraz na mezipředmětová propojení a interdisciplinaritu, je vhodné nacházet ve výuce příležitosti k vytváření situací naplňujících tyto požadavky. Dalším důležitým bodem současného vzdělávání je motivace, ať už míněna jako snaha zaujmout žáky, případně jim názorně ilustrovat důležitost a využitelnost matematických konceptů. Pro naplnění obou bodů lze využít aplikační matematické úlohy, které jsou založeny na využití matematických konceptů v kontextu reálného života a jiných oborů.

Na základě těchto myšlenek vznikla bakalářská práce *Matematické postupy vyčíslování chemických rovnic: sbírka řešených úloh* formou portfolio výukových materiálů, které prezentuje různé matematické postupy při vyčíslování chemických rovnic, hodnotí jejich klady i zápory a dává je do kontextu s běžně vyučovaným chemickým řešením, tj. vyčíslení na základě změn oxidačních čísel (křížovým pravidlem).

Cílem práce je teoreticky pokrýt matematický i chemický pohled na vyčíslování chemických rovnic a na základě dostupných zdrojů sestavit portfolio výukových materiálů ve formě sbírky řešených úloh zaměřených na uplatnění různých matematických přístupů k vyčíslování chemických rovnic.

Portfolio představuje různé chemické rovnice a prostřednictvím řešených úloh poskytuje návod i inspiraci zejména pro vyučující matematiky na středních školách, nicméně využitelná může být sbírka i pro vyučující chemie, jejich žáky či studenty učitelských oborů. Součástí jsou rovněž úlohy k procvičení s výsledky.

Práce je členěna na tři hlavní kapitoly:

- *Teoretický základ,*
- *Sbírka řešených úloh,*
- *Reflexe portfolio výukových materiálů.*

Veškeré obrázky jsou dílem autora práce a byly vytvořeny v programu *ChemSketch*.

1 Teoretický základ

Cílem této kapitoly je stručně popsat základní chemické a matematické pojmy, pravidla a koncepty, které jsou používány a uplatňované v řešených příkladech. Kapitoly *Chemické principy a pojmy spojené s vyčíslováním chemických rovnic* a *Matematické principy a pojmy spojené s vyčíslováním chemických rovnic* by tak měly zvýšit srozumitelnost následujících kapitol a prezentovat teoretické pozadí za použitými metodami vyčíslování.

1.1 Chemické principy a pojmy spojené s vyčíslováním chemických rovnic

Vzhledem k přesahu bakalářské práce do chemie a pro snazší srozumitelnost je níže uveden soupis základních užívaných principů a pojmů a jejich stručné vysvětlení na základě učebnice *Chemie pro čtyřletá gymnázia 1. díl* (Mareček & Honza, 2005a).

Motivace vyčíslovat chemické rovnice: vyčíslení chemické rovnice tvoří základ pro výpočty z chemických rovnic. To může být užitečné v chemickém průmyslu (jaké množství surovin je nutné pro výrobu chemické látky, případně kolik jí vznikne), v analytické a forenzní chemii (jaké množství chemické látky se někde nachází), v současné době zejména v environmentálních vědách (kolik zplodin vzniká spalováním fosilních paliv).

Stechiometrický koeficient: číslo zapsané před chemickou látkou v rovnici, je důležité pro vyjádření poměrů (např. v jakém poměru látky reagují, v jakém poměru vzniká určitá látka z jiné). V práci dále bude tento pojem dále používán pouze jako *koeficient*.

Vyčíslení chemické reakce: volba takových stechiometrických koeficientů, aby se jednalo o nejmenší kladné celočíselné koeficienty. Věcně správné jsou i jakékoliv nenulové kladné násobky těchto koeficientů¹, nicméně v chemickém zápisu to není běžné. Pokud je v práci uvedena určitá uspořádaná n-tice hodnot koeficientů jako řešení dané soustavy, matematicky vyhovujícím řešením by byly i všechny její nenulové kladné násobky.

Oxidační číslo: formální elektrický náboj atomu chemického prvku.

¹ Z chemického hlediska jsou ekvivalentní vyčíslené rovnice $C + O_2 \rightarrow CO_2$ a např. $2C + 2O_2 \rightarrow 2CO_2$. Klíčový je pouze poměr jednotlivých koeficientů a odpovídající trojice koeficientů (1, 1, 1) a (2, 2, 2) zde mají chemicky stejný význam.

Neredoxní reakce: chemická reakce, při které nedochází ke změně oxidačních čísel. Lze je vyčíslit pouze na základě matematických metod.

Redoxní reakce: chemická reakce, při které dochází ke změně oxidačních čísel. Lze je vyčíslit pomocí níže vysvětleného křížového pravidla.

- **Oxidace:** zvýšení oxidačního čísla atomu, je spojeno s odevzdáním určitého počtu elektronů redukované látce.
- **Redukce:** snížení oxidačního čísla atomu, je spojeno s přijetím určitého počtu elektronů od oxidované látky.
- **Křížové pravidlo:** způsob vyčíslení redoxní chemické reakce, je založeno na skutečnosti, že počet přijatých elektronů a počet odevzdaných elektronů během reakce musí být, v návaznosti na zákon zachování hmotnosti, totožné. Koeficienty musejí být proto voleny tak, aby byl získán nejmenší společný násobek odevzdaných a přijímaných elektronů. Detailně je tento způsob vysvětlen v řešení *Příkladu 2*. V práci tento způsob vzhledem ke svému obvyklému využívání v chemii nazývám jako *chemický způsob řešení* nebo *chemické řešení*. Jakékoliv jiné metody označuji jako *matematický způsob řešení*, *matematické metody* nebo *matematické řešení*.

Reaktanty: chemické látky na levé straně rovnice, při reakci zanikají a vznikají z nich produkty.

Produkty: chemické látky na pravé straně rovnice, při reakci vznikají z reaktantů.

Chemická látka: vzhledem k jemným významovým nuancím běžně používaných chemických pojmů níže je zde použit zobecňující termín *chemická látka*, kam lze zahrnout vše následující:

- **Prvek:** látka tvořená výhradně atomy se stejným protonovým číslem.
- **Molekula:** částice složené ze dvou nebo více atomů nebo iontů vzájemně vázaných chemickou vazbou (např. O_2 , H_2SO_4 nebo H_2O).
- **Sloučenina:** látka složená z atomů nebo iontů alespoň dvou různých chemických prvků (z výše uvedených pouze H_2SO_4 a H_2O , O_2 je molekula, ale ne sloučenina).

1.2 Matematické principy a pojmy spojené s vyčíslováním chemických rovnic

Cílem této kapitoly je shrnout matematické důvody, které stojí za rozdílnými strategiemi vyčíslování chemických rovnic v jednotlivých kapitolách části *Sbírka řešených úloh*. V práci jsou představeny různé postupy vyčíslování, ale ač tento způsob není diskutován u všech řešených příkladů (poprvé je ukázán u *Příkladu 6*), jednotlivé postupy jsou matematicky založeny na řešení soustavy lineárních rovnic, která vznikne následujícím způsobem:

- Jednotlivým reaktantům i produktům přidělíme neznámé jako koeficienty.
- Na základě koeficientů sestavíme rovnice pro každý prvek.

Soustavy budeme řešit v oboru přirozených, respektive kladných racionálních čísel. Pokud výsledek obsahuje neceločíselný výsledek, lze celou uspořádanou n -tici výsledků vynásobit vhodným přirozeným číslem tak, aby obsahovala pouze přirozená čísla. Z chemického hlediska jsou taková řešení ekvivalentní. Pokud je u soustavy uvedeno řešení jako uspořádaná n -tice neznámých, je tím myšleno řešení z chemického hlediska, třebaže matematicky může jít i o další násobky této n -tice v závislosti na hodnotě parametru.

V souvislosti s řešením této soustavy si můžeme položit otázky: Na čem závisí výsledek? Jak to ovlivňuje chemický charakter konkrétní rovnice? Pro zodpovězení těchto otázek se hodí tyto pojmy:

n ... počet neznámých (počet koeficientů, tedy celkový počet reaktantů a produktů)

- **m** ... počet rovnic (počet chemických prvků v rovnici)
- **d** ... dimenze řešení soustavy
- **h** ... hodnota soustavy

Okomentujme a ilustrujme poslední dva pojmy:

Dimenze řešení soustavy (d) můžeme intuitivně chápat (a odpovídá tomu i geometrická interpretace) jako počet stupňů volnosti nebo počet parametrů, které musíme zavést, abychom pomocí nich mohli všechna řešení zapsat (Barto & Tůma, 2022). Pro ilustraci v kapitole *Vyčíslování řešením soustavy lineárních rovnic* měly soustavy s řešením dimenze 1, komplikovanější *Příklad 10* a *Příklad 11* mají dimenzi 2, *Příklad 12* dokonce 3.

Hodnost soustavy (h) lze popsat jako maximální počet lineárně nezávislých rovnic v soustavě (Barto & Tůma, 2022). Pokud je nějaká rovnice lineárně závislá, pak ji lze nakombinovat z ostatních rovnic; obdobou ve středoškolské matematice je lineární (ne)závislost vektorů v analytické geometrii. Lze to ilustrovat na soustavě rovnic z *Příkladu 9* – původně sestavíme 4 rovnice pro 4 neznámé. Řešením soustavy však získáme jeden parametr (stupeň volnosti). To je dáno lineární závislostí rovnic, rovnici pro vodík z této soustavy lze ostatně nakombinovat z ostatních:

$$R(H) = -5R(V) + 2R(O) - R(K)$$

Při řešení soustav lineárních rovnic můžeme postupně dospět k pozorování, že rozhodující pro dimenzi řešení není vedle počtu neznámých počet rovnic v soustavě, nýbrž počet *lineárně nezávislých* rovnic (jen ty nám dávají nějakou novou informaci), tj. hodnost soustavy. Vztah mezi počtem neznámých, hodnotou soustavy a dimenzí řešení pak můžeme formulovat takto; důkaz zájemce nalezne např. ve skriptech (Barto & Tůma, 2022):

$$n = h + d$$

Jak na tuto problematiku nahlíží chemici? U vyčíslení chemické rovnice nás zajímá nejmenší kladné celočíselné řešení z množiny řešení, která jsou jeho násobky (viz *Chemické principy a pojmy spojené s vyčíslováním chemických rovnic*). Dimenze vyčíslení je tedy, zjednodušeně řečeno, vždy o jedna menší než dimenze matematického řešení; speciálně, pokud matematicky dostaneme řešení s jedním parametrem (tj. dimenze 1), chemicky tomu odpovídá jednoznačné řešení (tedy jedna konkrétní n -tice koeficientů). Distler v publikaci *Výpočty z obecné chemie (nejen) pro jaderné chemiky* (2022) rozvádí, že pro vyčíslování chemických rovnic platí níže uvedené (značení bylo oproti zdroji změněno, aby bylo konzistentní se značením v práci):

- Při rovnosti $h = n - 1$ má soustava jediné řešení, které odpovídá nejmenším celočíselným kladným koeficientům a jejich nenulovým kladným násobkům.
- Platí-li $h < n - 1$, počet různých řešení soustavy je neomezený. Tento případ zahrnuje i číselně platná řešení, která nejsou násobky jednoho řešení. Ve sbírce to jsou příklady v kapitole *Nedourčené úlohy*.

- Platí-li $h = n$, má soustava jen triviální řešení a rovnici upravit nelze. Takovou rovnici může být např. $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{NH}_4\text{OH} + \text{SO}_2$ (Blakley, 1980), kdy $h = n = 3$. I z chemického hlediska lze odhalit, že je nemožná – docházelo by sice k redukci síry ze síranu amonného na oxid siřičitý, ale k žádné oxidaci.

Pro vyčíslování rovnic pak platí:

- Je-li $h = n$, rovnice je vždy jednoznačná (dle chemického významu) a k nalezení řešení stačí zvolit hodnotu jednoho koeficientu (tento postup je detailně popsán v kapitole *Postupné vyčíslování bez soustavy lineárních rovnic*).
- Pro případ $h < n$ je počet řešení obvykle neomezený, k nalezení jednoho z nich je nutné doplnit $(n - m)$ podmínek (rovnic) nebo zvolit $(n - m + 1)$ koeficientů. Ukázkou takového doplnění v rámci práce jsou *Příklad 10* a *Příklad 11*, kdy přidáním jedné podmínky (rovnice) vedlo v obou případech na soustavu, jejíž řešení již bylo chemicky jednoznačné (dimenze řešení byla snížena na 1).

V návaznosti na teorii uvedenou výše by mělo být možné v případě soustav lineárních rovnic s jedním stupněm volnosti zvolit libovolně jeden koeficient a zbylé koeficienty by měly být touto volbou jednoznačně určeny. Ne u všech takových rovnic lze však využít pouze tuto metodu (dále v textu nazvána jako *metoda postupného vyčíslování*) a na základě (ne)možnosti jejího využití se pak odlišují způsoby vyčíslování rovnic uvedených v kapitolách *Postupné vyčíslování bez soustavy lineárních rovnic* (lze využít metodu postupného vyčíslování) a *Vyčíslování řešením soustavy lineárních rovnic* (rovnici nelze vyčíslit pouze pomocí uvedené metody²). Příčinou je (ne)provázanost neznámých v rovnicích pro jednotlivé prvky, kterou lze zjednodušit na počet umístění daného prvku na obou stranách rovnice.

² To však neznamená, že nelze využít kombinaci obou metod, např. část rovnice vyčíslit volbou jednoho koeficientu a koeficientů získaných na základě této volby, zbylé dopočítat na základě rovnic. Tento postup popisuje např. Distler (2022) a přirozeně k němu dospěli někteří žáci při pilotáži, jak je uvedeno v podkapitole *Testování úloh v praxi*.

2 Sbírka řešených úloh

Tato kapitola obsahuje čtyři dílčí části, jejichž názvy vystihují matematickou strategii uplatněnou při vyčíslování chemických rovnic: *Vyčíslování na základě jednoduchých poměrů*, *Postupné vyčíslování bez soustavy lineárních rovnic*, *Vyčíslování řešením soustavy lineárních rovnic* a *Nedourčené úlohy*. Příklady jsou v jednotlivých částech po trojicích, přičemž řešení posledního příkladu z trojice přesahuje do následující kapitoly. Každý řešený příklad je strukturován na zadání, chemický kontext týkající se dané rovnice nebo chemických látek v ní a komentované postupy matematického a chemického řešení. Na konci každé kapitoly jsou úlohy k procvičení a stručný komentář porovnávající matematické a chemické řešení.

Níže je uveden přehled jednotlivých kapitol a příkladů:

Vyčíslování na základě jednoduchých poměrů

- *Příklad 1: Vznik vody přímo z prvků*
- *Příklad 2: Reznutí železa*
- *Příklad 3: Exploze trinitrotoluenu*

Postupné vyčíslování bez soustavy lineárních rovnic

- *Příklad 4: Pražení pyritu*
- *Příklad 5: Příprava chloru*
- *Příklad 6: Reakce cínu s koncentrovanou kyselinou dusičnou*

Vyčíslování řešením soustavy lineárních rovnic

- *Příklad 7: Reakce mědi se zředěnou kyselinou dusičnou*
- *Příklad 8: Oxidace síranu železnatého dichromanem draselným*
- *Příklad 9: Reakce oxidu vanadičného s hydroxidem draselným*

Nedourčené úlohy

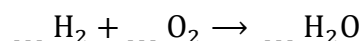
- *Příklad 10: Reakce sulfanu s kyselinou sírovou*
- *Příklad 11: Oxidace sulfanu na elementární síru manganistanem draselným*
- *Příklad 12: Spalování methanu*

2.1 Vyčíslování na základě jednoduchých poměrů

V této kapitole jsou prezentovány chemické rovnice, k jejichž vyčíslení není zapotřebí využít specifické matematické metody. Všechny jsou založeny na jednoduchých poměrech počtů atomů jednotlivých prvků, na základě nichž lze určit stechiometrické koeficienty.

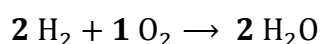
2.1.1 Příklad 1: Vznik vody přímo z prvků

Zadání: Vyčíslete chemickou rovnici:



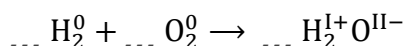
Kontext: Reakci lze také jinak nazvat jako hoření vodíku, jedná se o prudkou a exotermní (teplo uvolňující) reakci. Současně rovnice označuje souhrnný děj, který probíhá při spalování vodíku ve vodíkových automobilech (Housecroft & Sharpe, 2014).

Matematické řešení: Jde o triviální rovnici, která obsahuje malý počet prvků i chemických látek. Výsledná molekula vody obsahuje dvakrát více atomů vodíku než kyslíku. Na první pohled vidíme řešení:

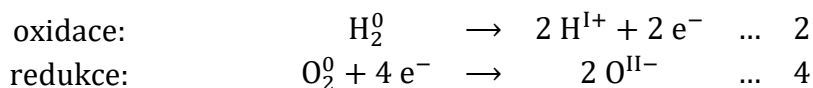


Chemické řešení: Protože se jedná o redoxní reakci, lze uplatnit křížové pravidlo. V tomto případě jde o poměrně triviální rovnici, detailně je proto pravidlo vysvětleno u *Příkladu 2* a následně je stručně uvedeno u každého dalšího příkladu.

Určíme oxidační čísla všech prvků v rovnici a najdeme oxidaci a redukci:

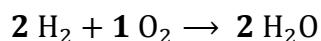


Zapišeme oxidaci a redukci pro jednotlivé prvky:



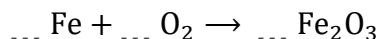
Na základě křížového pravidla získáváme koeficient pro kyslík (1) a vodík (2), koeficient pro vodu snadno dopočítáme (2).

Rovnice je vyčíslena:



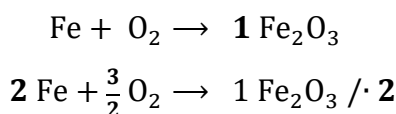
2.1.2 Příklad 2: Reznutí železa

Zadání: Vyčíslete chemickou rovnici:

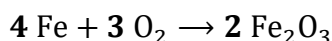


Kontext: Jedná se o zjednodušenou reakci důvěrně známou z běžného života, kdy železné předměty vystavené vzduchu a vlhkosti reznou. Zjednodušenou proto, že během reznutí vzniká velká řada látek – kromě různých oxidů i hydroxidy, uhličitany a další (Mička & Lukeš, 1998). Vzniklý oxid železitý je charakteristický svou rezatou barvou a nesoudržností s původním materiálem, důsledkem čehož se odlupuje (Housecroft & Sharpe, 2014; Mareček & Honza, 2005b).

Matematické řešení: Podobně jako v minulém příkladu máme reakci, kdy sloučením dvou látek vzniká látka třetí. Na první pohled je řešení náročnější, protože nestačí vzít poměr počtu atomů železa a kyslíku z oxidu železitého. Musíme začít od jednoho z prvků a zohlednit vzájemný poměr na obou stranách rovnice. Níže je ukázáno schéma vyčíslení, začneme-li od oxidu železitého (obsahuje oba prvky současně, proto bude vyčíslování jednodušší)³:

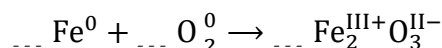


Rovnice je vyčíslena:



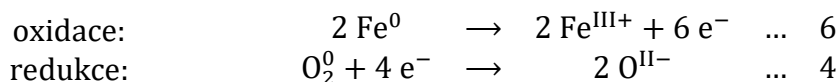
Chemické řešení: Protože se jedná o redoxní reakci, lze koeficienty odvodit na základě křížového pravidla, které je níže podrobně vysvětleno. U dalších příkladů není pravidlo podobně detailně rozváděno, více informací k postupu uvádějí např. Mareček a Honza (2001).

Určíme oxidační čísla všech prvků v rovnici a najdeme oxidaci a redukci:



³ Zde i v dalších příkladech jsou užívána tato schémata, kdy každý řádek znamená umístění jednoho nebo více koeficientů, ty jsou pro přehlednost ztučněny. Ztučněny jsou pak koeficienty i ve výsledném vyčíslení.

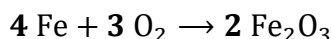
Redoxní polorovnice pro oba prvky vypadají takto:



Při reakci dochází k oxidaci železa, kdy každý atom železa odevzdává 3 elektrony (mění oxidační číslo z 0 na III +). Protože se však železo vyskytuje po dvou atomech ve vznikajícím oxidu železitém, je nutné počet zdvojnásobit a počítat, že při oxidaci dochází k odevzdání 6 elektronů. Kyslík se redukuje a na jednu redukci připadají dva elektrony (dochází k poklesu oxidačního čísla z 0 na II –). Vzhledem ke dvouatomové molekule kyslíku je nutné také počítat s dvojnásobkem a na redukci tak připadají 4 přijaté elektrony.

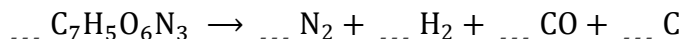
Aby byl dodržen zákon zachování náboje, počet odevzdaných a přijatých elektronů musí být shodný. Toho lze docílit nalezením nejmenšího společného násobku obou čísel a volbou takových koeficientů, abychom tohoto čísla dosáhli. To znamená počty obou elektronů vyměnit a jejich poměr zkrátit na základní tvar. Tím získáme koeficient pro železo (2) a kyslík (3), koeficient pro oxid železitý (2) snadno dopočítáme. S ohledem na polorovnice je pak význam takový, že celkový počet atomů železa musí být 4 a celkový počet atomů kyslíku 6. Získáváme tak koeficient pro železo (4), případně pro oxid železitý (2) a pro molekulu kyslíku (3). Počet vyměňovaných elektronů je teď stejný – při oxidaci dochází k odevzdání 12 elektronů (4 atomy železa ztrácejí po 3 elektronech), při redukci k přijetí 12 elektronů (6 atomů kyslíku získává po 2 elektronech).

Rovnice je vyčíslena:



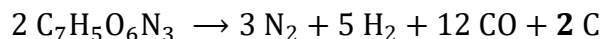
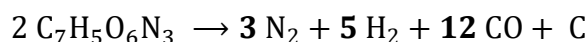
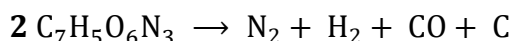
2.1.3 Příklad 3: Exploze trinitrotoluenu

Zadání (Robová a kol., 2014): Vyčíslete chemickou rovnici:

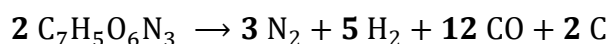


Kontext: Trinitrotoluen neboli TNT je světoznámá výbušnina, která podobně jako jiné výbušniny funguje na jednoduchém principu – při jejím rozkladu vzniká velký objem plynných látek (kromě elementárního uhlíku jsou všechny produkty uvedené výše plyny). Prudký nárůst tlaku je pak to, co způsobí výbuch a tlakovou vlnu (Mareček & Honza, 2005b; McMurry, 2015).

Matematické řešení: Podobně jako v minulých příkladech postupujeme na základě poměrů jednotlivých prvků. Na začátku můžeme pozorovat, že vzhledem ke dvouatomovým molekulám dusíku a vodíku na straně produktů bychom dostali neceločíselné koeficienty, kdybychom k TNT umístili koeficient 1, z toho důvodu bude výhodnější rovnou zvolit koeficient 2.



Rovnice je vyčíslena:



Chemické řešení: Rovnici je možné vyčíslit i na základě křížového pravidla, nicméně takový výpočet by byl poměrně složitý, neboť zde dochází ke čtyřem dílčím změnám oxidačních čísel. I pokud bychom znali strukturu TNT, uplatnění křížového pravidla by vyžadovalo speciální znalosti oxidačních čísel u organických sloučenin. Z těchto důvodů je efektivnější vyčíslovat rovnici matematicky.

Komentář k matematickému a chemickému řešení (P1–P3)

Vzhledem k jednoduchým číselným poměrům není nutné u rovnic tohoto typu využívat chemický způsob řešení, tj. křížové pravidlo u redoxních rovnic. Navíc, jak jsme viděli v *Příkladu 3*, pokud se jedná o komplikovanější reakci v organické chemii, nelze snadno využít tento postup a v chemii se obvykle používá přímý matematický postup (podobný je případ neredoxní chemické reakce později v *Příkladu 9*). Prezentované rovnice v řešených příkladech i úlohy k procvičení mají stejné schéma, kdy z jednoho reaktantu vzniká více produktů nebo z více reaktantů vzniká jeden produkt. Vyplatí se tedy vyčíslování začít touto jednou chemickou látkou a pokračovat přes zbývající chemické látky. U některých jednoduchých rovnic (jako v *Příkladu 1*) jsou koeficienty patrné ihned.

Kraina (2016) a Indra (2008) označují ve svých pracích tuto metodu jako *pokus/omyl* (volíme koeficienty bez hlubšího zamyšlení a zkoušíme), pokud se jedná o promyšlenější volbu koeficientů, Vaňková (2017) ji popisuje jako *metodu zkusmo* (tato metoda odpovídá způsobu představeném v této a následující kapitole). V případě hlubšího zamyšlení nad číselnými vztahy se jedná o *metodu úvahou* (Indra, 2008) – všímáme si více číselných poměrů, rozmístění prvků na obou stranách rovnice a dalších užitečných číselných vztahů, na základě toho vyčísľujeme.

Obdobné úlohy k procvičení (P1–P3)

- a) $\dots \text{BaO} + \dots \text{O}_2 \rightarrow \dots \text{BaO}_2$
- b) $\dots \text{SO}_2 + \dots \text{O}_2 \rightarrow \dots \text{SO}_3$
- c) $\dots \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \dots \text{H}_2\text{O} + \dots \text{O}_2$
- d) $\dots \text{CO} + \dots \text{O}_2 \rightarrow \dots \text{CO}_2$
- e) $\dots \text{N}_2\text{O}_5 \rightarrow \dots \text{NO} + \dots \text{O}_2$
- f) $\dots \text{Pb}(\text{NO}_3)_2 \rightarrow \dots \text{PbO} + \dots \text{NO}_2 + \dots \text{O}_2$
- g) $\dots \text{C}_3\text{H}_5\text{O}_9\text{N}_3 \rightarrow \dots \text{N}_2 + \dots \text{H}_2\text{O} + \dots \text{CO}_2 + \dots \text{O}_2$
- h) $\dots \text{HBrO}_3 \rightarrow \dots \text{Br}_2 + \dots \text{O}_2 + \dots \text{H}_2\text{O}$

Výsledky úloh se nacházejí na straně 55.

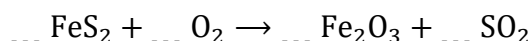
Rovnice převzaty z *Chemie: sbírka příkladů pro studenty středních škol* (Mareček & Honza, 2001) a *Základní pojmy, příklady a otázky z anorganické chemie* (Mička a kol., 2003).

2.2 Postupné vyčíslování bez soustavy lineárních rovnic

V této kapitole je představena metoda uplatnitelná zejména v případě složitějších rovnic než v předchozí kapitole – složitějších v tom smyslu, že rovnice obsahuje současně minimálně dva reaktanty a dva produkty. Oproti předchozí kapitole nespolehá metoda pouze na jednoduché poměry mezi počty atomů, ale je založena na volbě jednoho vhodného koeficientu a dopočítávání zbylých koeficientů.

2.2.1 Příklad 4: Pražení pyritu

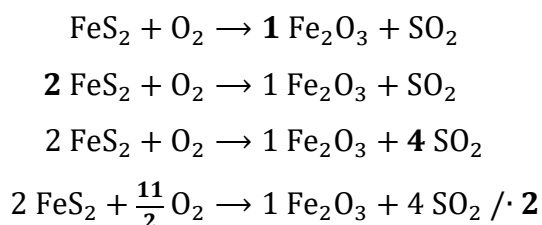
Zadání: Vyčíslete chemickou rovnici:



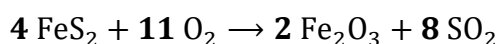
Kontext: Pyritu se pro svou vizuální podobnost se zlatem přezdívá *kočičí zlato* nebo *zlato bláznů*. Rovnice výše popisuje jednu z reakcí výroby železa, kdy prvním krokem je pražení neboli převedení sulfidu na oxid, který se dále zpracovává na surové železo (Housecroft & Sharpe, 2014; Mareček & Honza, 2005b).

Matematické řešení: Oproti příkladům uvedeným v předchozí kapitole je rovnice složitější a nelze ji řešit přímo pomocí poměrů počtů atomů jednotlivých prvků v reaktantech a produktech. Pro takový typ rovnic můžeme zvolit metodu postupného vyčíslování. Zvolíme počáteční koeficient pro vhodný prvek a další kroky vyčíslování přímo navazují. Jako vhodný prvek lze chápat prvek, který se vyskytuje na obou stranách rovnice pouze na jednom místě – zde železo a síra; nevhodný je kyslík, protože se vyskytuje ve více chemických látkách. Pokud to chemická rovnice umožňuje, je výhodné zvolit společnou sloučeninu takových prvků, jak je ukázáno u volby pyritu níže.

Začátek od železa:

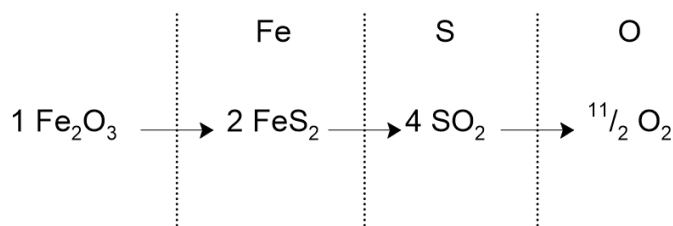


Rovnice je vyčíslena:



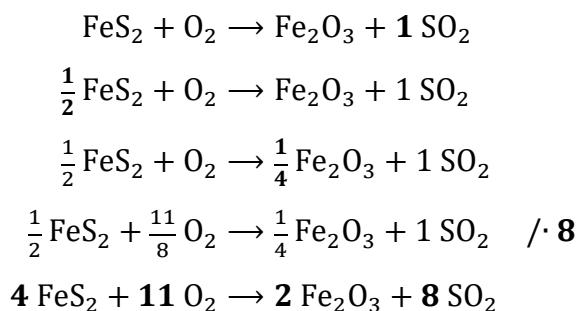
Schematicky zapsáno (Obr. 1): $1 \text{ Fe}_2\text{O}_3$, 2 FeS_2 , 4 SO_2 , $\frac{11}{2} \text{ O}_2$

Schematicky je postupné vyčíslování zde a v příkladech dále znázorněno graficky (Obr. 1), kdy jednotlivé šipky znamenají, kterou chemickou látkou se začíná vyčíslování a jak se dále postupuje. Značka prvku napsaná ve schématu nahoře znamená, který prvek je v daném kroku vyčíslen.



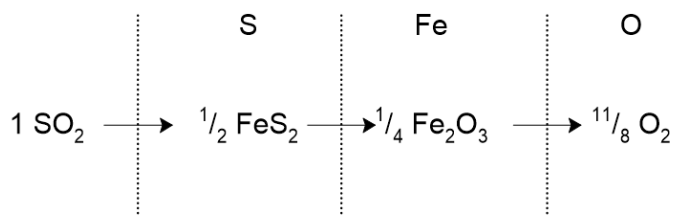
Obrázek 1 Schéma postupného vyčíslování (začátek od Fe)

Začátek od síry:



Pro efektivnější řešení rovnice je možné násobit koeficienty s cílem získat celá čísla.

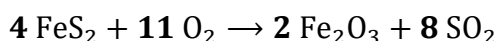
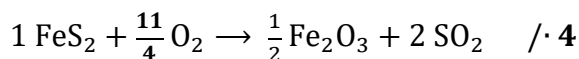
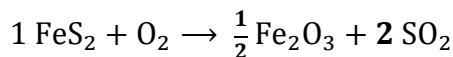
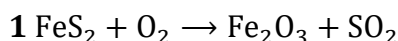
Schematicky zapsáno (Obr. 2): 1 SO_2 , $\frac{1}{2} \text{ FeS}_2$, $\frac{1}{4} \text{ Fe}_2\text{O}_3$, $\frac{11}{8} \text{ O}_2$



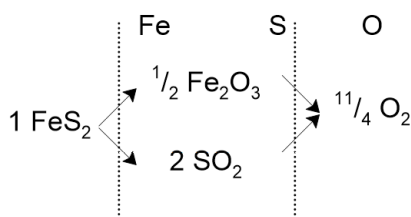
Obrázek 2 Schéma postupného vyčíslování (začátek od S)

Obdobně by bylo možné začít vyčíslovat od pyritu (FeS_2), tím vlastně dojde ke spojení předchozích dvou postupů do jednoho, protože ve druhém kroku rovnou vyčíslíme železo i síru současně.

Začátek od pyritu (železa a síry společně):



Schematicky zapsáno (Obr. 3): 1 FeS_2 , $\frac{1}{2} \text{Fe}_2\text{O}_3$, 2SO_2 , $\frac{11}{4} \text{O}_2$

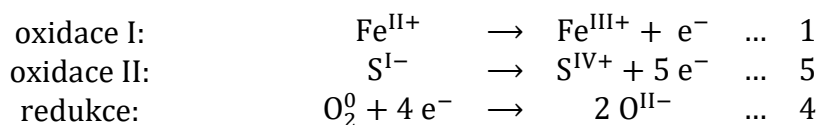


Obrázek 3 Schéma postupného vyčíslování (začátek od FeS_2)

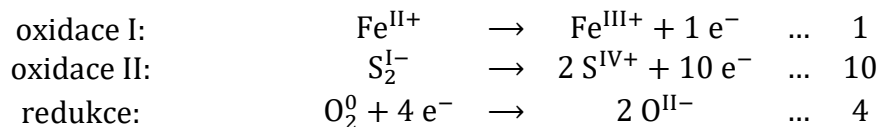
Chemické řešení: Určíme oxidační čísla všech prvků v rovnici a najdeme oxidaci a redukci:



Obdobně jako v minulém případě zjistíme koeficienty pomocí křížového pravidla, zde je ovšem nutné pracovat s dvěma oxidacemi a jednou redukcí:

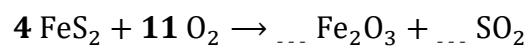


V případě dílčích oxidačních reakcí musíme zohlednit poměr počtu atomů železa a síry v FeS_2 (oxidační polorovnici pro síru vynásobit dvěma):

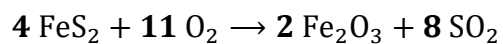


Poznámka: Oxidační číslo síry v pyritu je nestandardní, protože se jedná o tzv. disulfid. Oproti běžnému sulfidovému aniontu $\text{S}^{\text{II}-}$ jde o anion $\text{S}_2^{\text{II}-}$, zde má číslo II^- význam náboje celého iontu, nikoliv jednotlivých atomů síry jako výše (kde je náboj jednoho iontu I^-). Analogií je oxidový a peroxidový anion ($\text{O}^{\text{II}-}$ a $\text{O}_2^{\text{II}-}$) (Mička & Lukeš, 1998).

Celkový počet elektronů odevzdávaných při oxidaci je 11 (10 + 1), při redukci jsou přijímány 4 elektrony. Na základě křížového pravidla získáváme koeficient pro kyslík (11), a pro pyrit (4).

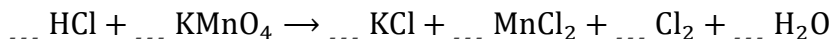


Koeficienty produktů dopočítáme díky koeficientu u pyritu a rovnice je tímto vyčíslena:



2.2.2 Příklad 5: Příprava chloru

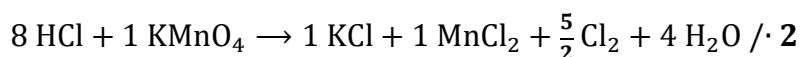
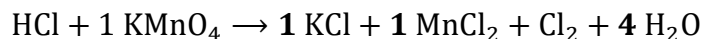
Zadání: Vyčíslete chemickou rovnici:



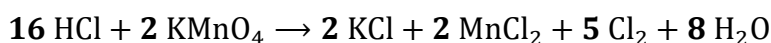
Kontext: Manganistan draselný (triviálně nazývaný jako *hypermangan*) je fialová krystalická látka, s jejímž vodným roztokem se člověk může setkat jako s kožní dezinfekcí při nákaze planými neštovicemi (Mareček & Honza, 2005b). Kyselina chlorovodíková se v drogeriích běžně prodává pod názvem *kyselina solná* (jako cca 30% roztok), chemicky ji lze vyrábět ze soli neboli chloridu sodného (Mička a kol., 2003).

Matematické řešení: Úloha je obdobou minulého příkladu v tom, že ji lze vyčíslit postupným dosazováním, obsahuje však více chemických látek. Při volbě vhodného prvku pro umístění prvního koeficientu musíme zohlednit, na kolika místech se na obou stranách rovnice nachází. Vhodnými kandidáty jsou proto vodík, draslík, mangan nebo kyslík (na každé straně rovnice se vyskytují pouze v jedné sloučenině), chlor je z tohoto důvodu zcela nevhodný (vyskytuje se na více místech). Ukažme si dva různé způsoby:

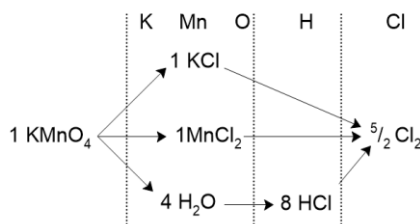
Začátek od manganistanu draselného (draslík a mangan společně):



Rovnice je vyčíslena:

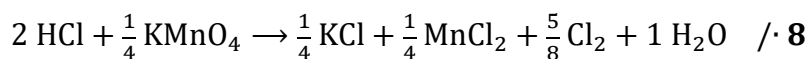
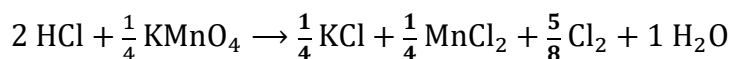
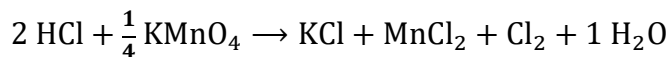
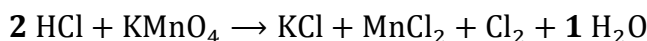


Schematicky zapsáno (*Obr. 4*): 1 KMnO₄, 1 KCl, 1 MnCl₂, 4 H₂O, 8 HCl, $\frac{5}{2}$ Cl₂



Obrázek 4 Schéma postupného vyčíslování (začátek od KMnO₄)

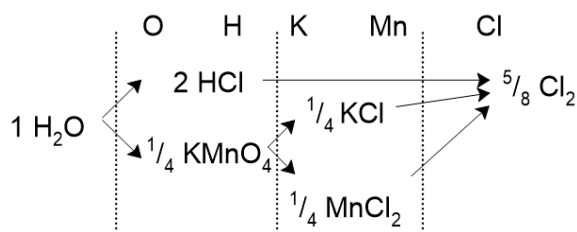
Začátek od vodíku:



Rovnice je vyčíslena:

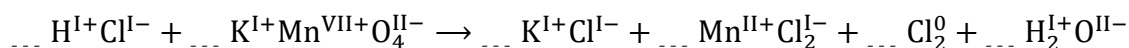


Schematicky zapsáno (*Obr. 5*): $1 \text{H}_2\text{O}$, 2HCl , $\frac{1}{4} \text{KMnO}_4$, $\frac{1}{4} \text{KCl}$, $\frac{1}{4} \text{MnCl}_2$, $\frac{5}{8} \text{Cl}_2$



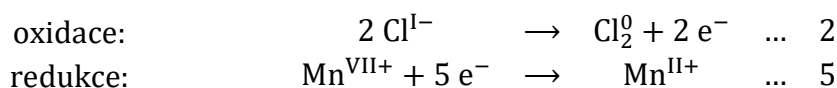
Obrázek 5 Schéma postupného vyčíslování (začátek od H)

Chemické řešení: Určíme oxidační čísla všech prvků v rovnici a najdeme oxidaci a redukci:

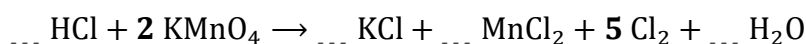


Ve výše uvedené redoxní reakci dochází ke změně oxidačních pouze u manganu (snižuje oxidační číslo z VII + na II +) a u chloru (oxidační číslo se zvyšuje z I – na 0), k této změně však dochází pouze mezi HCl a Cl₂, chlor v KCl a MnCl₂ nemění oxidační číslo.

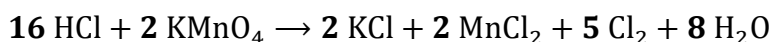
Níže jsou zapsané polorovnice pro oxidaci a redukci:



Díky křížovému pravidlu získáváme koeficienty pro chlor (5) a manganistan draselný (2):

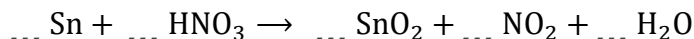


Na tomto základě už dopočítáme zbývající a rovnice je vyčíslena:



2.2.3 Příklad 6: Reakce cínu s koncentrovanou kyselinou dusičnou

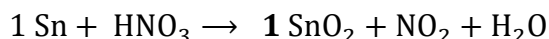
Zadání: Vyčíslete chemickou rovnici:



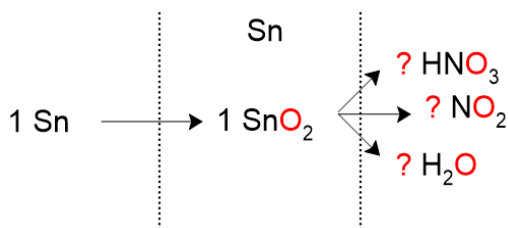
Kontext: Cín je součástí některých významných slitin (bronz, pájka) a používá se při výrobě plechovek na potraviny. Kyselina dusičná je průmyslově významná jakožto látka, ze které se vyrábí například hnojiva nebo výbušniny. Vznikající oxid dusičitý je rizikový z environmentálního hlediska coby příčina pozemního smogu a kyselých dešťů (Housecroft & Sharpe, 2014).

Matematické řešení I – postupné dosazování: Jako v předchozích případech zvolíme metodu postupného vyčíslování, zde však bude těžší vybrat vhodný prvek. Zde se jako vhodný prvek může jevit cín, protože se na obou stranách rovnice vyskytuje pouze na jednom místě.

Začátek od cínu:



V této situaci však nevíme, jak dále pokračovat – vyčíslením SnO_2 nebyl vyčíslen žádný další prvek, pouze jsme částečně vyčíslili kyslík, který však v reakci vystupuje ve více než dvou chemických látkách a nelze tak dále pokračovat jednoznačně (*Obr. 6*).

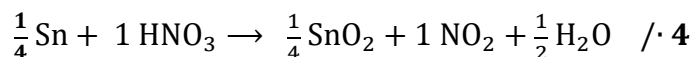
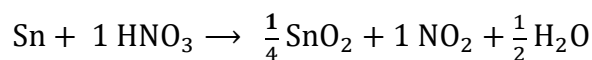


Obrázek 6 Schéma postupného vyčíslování (začátek od Sn)

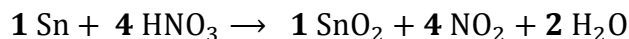
Zkusme proto začít rovnici vyčíslovat od jiného prvku, resp. prvků; zde se nabízí dusík a vodík, které jsou každý součástí pouze jedné chemické látky na obou stranách rovnice a navíc jsou společně svázány v kyselině dusičné.

Začátek od dusíku a vodíku současně:

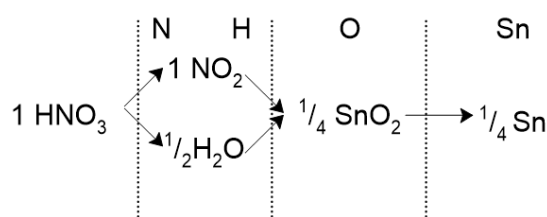




Rovnice je vyčíslena:



Schematicky zapsáno (Obr. 7): 1HNO_3 , 1NO_2 , $\frac{1}{2} \text{H}_2\text{O}$, $\frac{1}{4} \text{SnO}_2$, $\frac{1}{4} \text{Sn}$



Obrázek 7 Schéma postupného vyčíslování (začátek od N)

Matematické řešení II – soustava lineárních rovnic: Alternativním způsobem vyčíslování chemických rovnic je explicitní sestavení soustavy lineárních rovnic a její řešení. Jak uvidíme v následující kapitole, tato metoda je nejen univerzální, ale vhodná zejména pro případy, kdy není možné použít metodu postupného dosazování, popř. se nám ji nedaří použít (jako zde při začátku od cínu).

Prvním krokem je zavedení neznámých jako koeficientů:



Následně pro každý prvek sestavíme rovnici:

Sn:	x	$=$	a		
H:	y	$=$		$2c$	
N:	y	$=$	b		
O:	$3y$	$=$	$2a$	$+$	$2b + c$

Protože jsme získali soustavu 4 rovnic o 5 neznámých, lze předpokládat existenci jednoho stupně volnosti (parametru), pokud jsou rovnice navzájem lineárně nezávislé. Následující příklady budou řešeny způsobem ilustrovaným zde – volbou vhodného parametru a postupným dosazováním neznámých z jednodušších rovnic do složitějších.

Zvolme jako parametr neznámou y – vyskytuje se totiž v nejvíce rovnicích a ostatní neznámé lze pomocí ní snadno vyjádřit. Neznámé b, c vyjádříme pomocí y a dosadíme do poslední rovnice.

$$3y = 2a + 2y + \frac{y}{2}$$

$$\frac{y}{2} = 2a$$

$$y = 4a$$

Zvolme hodnoty koeficientů tak, abychom získali nejmenší celočíselné řešení, tedy $a = 1$, na základě toho $y = 4$. Dosazením do původních rovnic získáváme $x = a = 1$, $b = y = 4$, $c = \frac{y}{2} = \frac{4}{2} = 2$.

Řešením soustavy je:

$$(x, y; a, b, c) = (1, 4; 1, 4, 2)$$

Rovnice je vyčíslena:

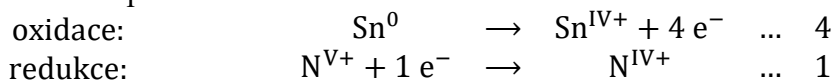


Na závěr si můžeme všimnout, že zvolit za výchozí parametr neznámou y odpovídalo v postupném dosazování začátku od kyseliny dusičné. V tomto případě, na rozdíl od příkladů následující kapitoly, tak příslušné řešení soustavy lineárních rovnic kopíruje vhodný postup dosazování.

Chemické řešení: Určíme oxidační čísla všech prvků v rovnici a najdeme oxidaci a redukci:



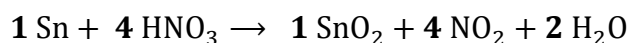
Zapišeme polorovnice pro oxidaci a redukci:



Na základě křížového pravidla získáme koeficienty pro kyselinu dusičnou (4) a pro cín (1):



Na základě nich snadno dopočítáme zbylé koeficienty a rovnice je vyčíslena:



Komentář k matematickému a chemickému řešení (P4–P6)

Pokud je chemická rovnice složitější a není praktické použít jednoduché číselné poměry jako v předchozí kapitole, případně rovnice nemá pouze jeden produkt nebo pouze jeden reaktant, je vhodné uplatnit metodu postupného vyčíslování. Vhodné umístění koeficientu lze chápat volbu takového prvku, který se na obou stranách rovnice vyskytuje pouze na jednom místě. Pokud je takových případů více, je efektivnější volit jejich společnou sloučeninu.

Oproti chemickému způsobu je výše uvedený způsob výhodnější, protože nevyžaduje znalost oxidačních čísel a vyčíslování pomocí křížového pravidla. Jak je patrné, v případech reakcí s více dílčími redukcemi nebo oxidacemi (*Příklad 4*) je tento přístup podstatně jednodušší. Podobnou metodu vyčíslování zmiňují ve svých pracích např. Indra (2008) jako *metodu úvahou*, která začíná vyčíslování od toho prvku, který je na obou stranách rovnice pouze na jednom místě. Distler (2022) ji nazývá jako *úpravu postupným doplňováním koeficientů* a je založena na volbě libovolného koeficientu a dopočítání ostatních (tento způsob kombinuje postupy uvedené v této a následující kapitole).

Obdobné úlohy k procvičení (P4–P6)

- a) ... H_2SeO_3 + ... H_2S $\rightarrow$... Se + ... H_2O + ... S
- b) ... P + ... H_2O + ... Br_2 $\rightarrow$... HBr + ... H_3PO_3
- c) ... Te + ... HClO_3 + ... H_2O $\rightarrow$... H_6TeO_6 + ... Cl_2
- d) ... Se + ... Cl_2 + ... H_2O $\rightarrow$... H_2SeO_4 + ... HCl
- e) ... Ag_2SeO_3 + ... Br_2 + ... H_2O $\rightarrow$... H_2SeO_4 + ... AgBr
- f) ... H_6TeO_6 + ... HCl $\rightarrow$... H_2TeO_3 + ... Cl_2 + ... H_2O
- g) ... SiO_2 + ... BrF_3 $\rightarrow$... SiF_4 + ... Br_2 + ... O_2
- h) ... NaOH + ... Cl_2 $\rightarrow$... NaClO_3 + ... NaCl + ... H_2O
- i) ... $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ + ... HCl $\rightarrow$... S + ... SO_2 + ... NaCl + ... H_2O
- j) ... Au + ... NaCN + ... O_2 + ... H_2O $\rightarrow$... $\text{Na}[\text{Au}(\text{CN})_2]$ + ... NaOH

Výsledky úloh se nacházejí na straně 55.

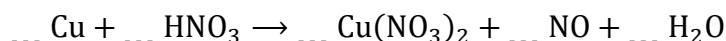
Rovnice převzaty z *Chemie: sbírka příkladů pro studenty středních škol* (Mareček & Honza, 2001) a *Základní pojmy, příklady a otázky z anorganické chemie* (Mička a kol., 2003).

2.3 Vyčíslování řešením soustavy lineárních rovnic

V rámci této kapitoly je představeno využití soustavy lineárních rovnic pro vyčíslení chemických rovnic, a to metodou vzájemného dosazování. Oproti předchozí kapitole je tento postup vhodný zejména v případech, kdy nelze celou rovnici vyčíslit pouze metodou postupného vyčíslování.

2.3.1 Příklad 7: Reakce mědi se zředěnou kyselinou dusičnou

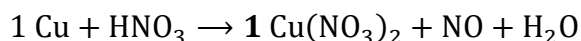
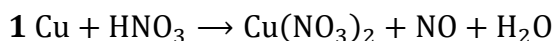
Zadání: Vyčíslete chemickou rovnici:



Kontext: Měď nachází řadu uplatnění v lidské činnosti – pro svou vodivost se využívá jako vodič, je součástí některých slitin (bronz, mosaz), mnoho historických budov je známo pro své měděné střechy. Jedná se rovněž o důležitý biogenní prvek, v lidském těle je měď součástí některých enzymů (Housecroft & Sharpe, 2014; Mareček & Honza, 2005b).

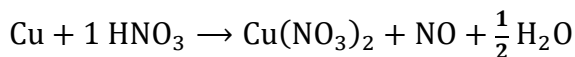
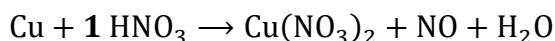
Matematické řešení I – postupné dosazování: Pokusme se rovnici vyčíslit nejprve metodou postupného dosazování. Z důvodů vysvětlených dříve je vhodné zvolit měď nebo vodík jako začátek vyčíslování (na obou stranách rovnice se vyskytují pouze na jednom místě).

Začátek od mědi:



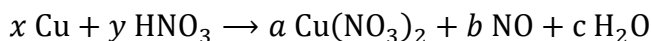
Z tohoto kroku však nelze jednoznačně postupovat – pokud bychom chtěli dále vyčíslovat, musíme pokračovat na dusík nebo kyslík. Kyslík se vyskytuje ve více sloučeninách, proto je nevhodný. Dusíkem také nelze pokračovat – pro vyčíslení dusíku na straně produktů (koeficient u kyseliny dusičné) bychom museli znát celkový počet atomů dusíku na straně reaktantů (zbývá vyčíslit oxid dusnatý). Koeficient u oxidu dusnatého nelze jednoznačně určit, protože se týká i kyslíku, který v tomto kroku není možné vyčíslit.

Začátek od vodíku:



Z tohoto kroku rovněž nelze jednoznačně pokračovat – vodík je sice vyčíslen, ale kyslík a dusík pouze částečně. Na základě dostupných informací nemůžeme dále volit koeficienty, protože nevíme, v jakém poměru budou zbývající počty atomů kyslíku a dusíku.

Matematické řešení II – soustava lineárních rovnic: Je patrné, že rovnici výše není možné vyčíslit postupným dosazováním, zavedme proto neznámé jako koeficienty a sestavme soustavu lineárních rovnic:



$$\begin{array}{lclclcl} \text{Cu:} & & x & = & a & \\ \text{H:} & & & y & = & 2c \\ \text{N:} & & & y & = & 2a + b \\ \text{O:} & & & 3y & = & 6a + b + c \end{array}$$

Získali jsme 4 rovnice o 5 neznámých. Nejprve dosadíme x a y z prvních dvou rovnic do rovnic pro dusík a kyslík s cílem snížit počet rovnic:

$$2c = 2x + b$$

$$5c = 6x + b$$

První rovnici odečteme od druhé, abychom eliminovali neznámou b , a poté vyjádříme neznámou c pomocí neznámé x .

$$3c = 4x$$

$$c = \frac{4}{3}x$$

Volíme hodnotu x pro získání celočíselného řešení a zpětným dosazováním získáváme další koeficienty.

$$x = 3$$

$$c = 4$$

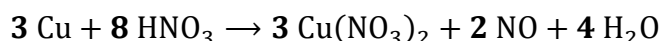
$$x = a = 3$$

$$y = 2c = 8$$

$$b = 2c - 2x = 2$$

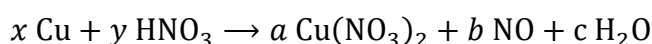
$$(x, y, z; a, b, c) = (3, 8, 3; 2, 4)$$

Rovnice je vyčíslena:



Matematické řešení III – Gaussova eliminační metoda: Další možností řešení soustavy lineárních rovnic je Gaussova eliminační metoda, která je založená na sčítání vhodných násobků rovnic s cílem postupně snižovat počet neznámých (Barto & Tůma, 2022). V souvislosti s vyčíslováním chemických rovnic pomocí maticového zápisu ji dále rozpracovávají např. Ramasami (2003) nebo Kraina (2016), bez využití maticového zápisu ji ve své práci zpracoval Schwarzbacher Zeman (2017).

Pro ilustraci dalšího možného postupu je níže ilustrována Gaussova eliminace pomocí maticového zápisu. Stejně jako v minulém případě zavedme neznámé coby koeficienty a sestavme pro každý prvek rovnici:



$$\begin{array}{lclclcl} \text{Cu:} & & x & & = & a \\ \text{H:} & & & y & = & 2c \\ \text{N:} & & & y & = & 2a + b \\ \text{O:} & & & 3y & = & 6a + b + c \end{array}$$

Nyní všechny rovnice upravíme tak, aby měly nulovou pravou stranu, koeficienty uspořádáme abecedně:

$$\begin{array}{rclclcl} - & a & & + & x & & = & 0 \\ & & - & 2c & & + & y & = & 0 \\ - & 2a & - & b & & + & y & = & 0 \\ - & 6a & - & b & - & c & + & 3y & = & 0 \end{array}$$

Hodnoty koeficientů napíšeme do matice níže a uspořádáme řádky (tj. jednotlivé rovnice):

$$\begin{pmatrix} a & b & c & x & y \\ -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 1 \\ -2 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ -6 & -1 & -1 & 0 & 3 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} -6 & -1 & -1 & 0 & 3 \\ -2 & -1 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Nyní ekvivalentní úpravami převedeme soustavu do tzv. odstupňovaného tvaru, ve kterém, neformálně vyjádřeno, se na každém řádku nachází zleva více nul než na předchozím. To přesně odpovídá myšlence postupné eliminace neznámých, kdy každá rovnice má alespoň o jednu neznámou méně než předchozí. Nejprve první rovnici přičteme k vhodným násobkům druhé a třetí rovnice, čímž eliminujeme první neznámou a , v dalším kroku přičteme upravenou druhou rovnici k dvojnásobku třetí, čímž v ní eliminujeme b , nakonec přičteme dvojnásobek upravené třetí rovnice k dvojnásobku čtvrté, čímž v ní eliminujeme třetí neznámou c .

$$\begin{pmatrix} -6 & -1 & -1 & 0 & 3 \\ -2 & -1 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} -6 & -1 & -1 & 0 & 3 \\ 0 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & -6 & 3 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} -6 & -1 & -1 & 0 & 3 \\ 0 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -3 & -12 & 6 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -6 & -1 & -1 & 0 & 3 \\ 0 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -3 & -12 & 6 \\ 0 & 0 & 0 & 24 & -9 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} -6 & -1 & -1 & 0 & 3 \\ 0 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -3 & -12 & 6 \\ 0 & 0 & 0 & 8 & -3 \end{pmatrix}$$

Z posledního řádku matice, tj. upravené čtvrté rovnice, získáváme kýžený vztah mezi posledními dvěma neznámými x a y . Z něho vyjádříme např. x pomocí y a postupným zpětným dosazováním pak získáme i zbylé koeficienty c , b a a vyjádřené pomocí y , které takto plní roli parametru:

$$8x - 3y = 0$$

$$x = \frac{3}{8}y$$

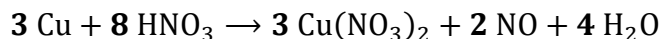
$$-3c = 12x - 6y = 12 \cdot \frac{3}{8}y - 6y = \frac{9-12}{2}y = -\frac{3}{2}y \dots c = \frac{1}{2}y$$

$$2b = c = \frac{1}{2}y \dots b = \frac{1}{4}y$$

$$-6a = b + c - 3y = \frac{1}{4}y + \frac{1}{2}y - 3y = -\frac{9}{4}y \dots a = \frac{9}{24}y = \frac{3}{8}y$$

Získali jsme tak řešení soustavy vyjádřené pomocí y : $(x, y; a, b, c) = (\frac{3}{8}y, y; \frac{3}{8}y, \frac{1}{4}y, \frac{1}{2}y)$, jehož správnost si snadno ověříme dosazením do původní soustavy. Volbou $y = 8$,

tj. nejmenšího společného násobku jmenovatelů zlomků ve výsledku, získáme kýžené vyčíslení původní chemické rovnice $(x, y; a, b, c) = (3, 8; 3, 2, 4)$:

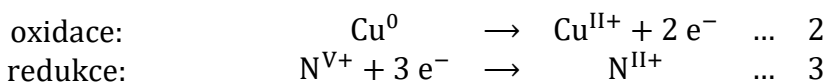
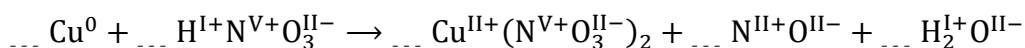


K témuž výsledku se můžeme dostat podstatně jednodušeji, když rovnou zvolíme vhodné hodnoty x a y a zbývající neznámé dopočteme ne z upravené soustavy, nýbrž z jejího původního tvaru. Protože $8x - 3y = 0$.

Zvolme $x = 3$ a $y = 8$ a dosadíme do rovnic, které jsme napsali na začátku řešení soustavy: $a = x = 3$, $b = y - 2a = 8 - 6 = 2$, $c = 3y - 6a - b = 24 - 18 - 2 = 4$.

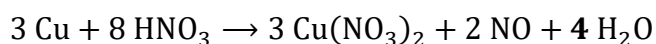
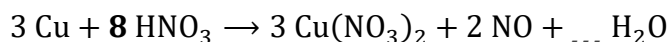
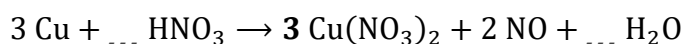
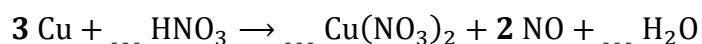
Dostali jsme stejné řešení jako výše: $(x, y; a, b, c) = (3, 8; 3, 2, 4)$. Pokud by koeficienty vyšly neceločíselné nebo naopak celočíselné soudělné, vhodným přenásobením z nich snadno získáme hledané nesoudělné celočíselné řešení.

Chemické řešení: Určíme oxidační čísla všech prvků v rovnici a najdeme oxidaci a redukci:

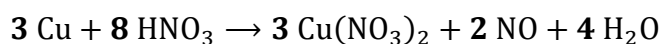


Poznámka: Pouze část atomů dusíku v kyselině dusičné redukuje své oxidační číslo a přechází do oxidu dusnatého; ze zbylého podílu vznikají dusičnanové anionty přítomné v dusičnanu měďnatém, u kterých tak nedochází ke změně oxidačního čísla. Tato skutečnost nemá na vyčíslování vliv.

Křížovým pravidlem získáváme koeficient pro měď (3) a oxid dusnatý (2), zbylé koeficienty snadno dopočítáme:

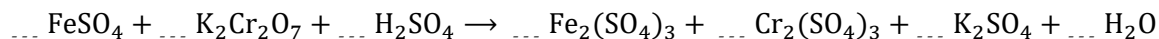


Rovnice je vyčíslena:



2.3.2 Příklad 8: Oxidace síranu železnatého dichromanem draselným

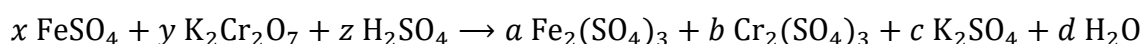
Zadání: Vyčíslete chemickou rovnici:



Kontext: Dichroman draselný je účinné oxidační činidlo, jeho hlavní nevýhodou je karcinogenita a toxicita. Při reakci se jeho charakteristická oranžová barva mění na světle zelenou. Chrom, podobně jako jiné přechodné kovy, má mnoho barevných variant (žluté chromany, červený oxid chromový nebo tmavě zelený oxid chromitý) (Housecroft & Sharpe, 2014; Mareček & Honza, 2005b).

Matematické řešení: Rovnice výše obsahuje znatelně více chemických prvků i vyskytujících se chemických látek, což z ní činí potenciálně obtížnou úlohu k vyčíslení pouhým tipováním nebo odhadováním koeficientů. Ze stejných důvodů jako u *Příkladu 7* ji nelze vyčíslit pouze metodou postupného vyčíslování. I zde bude proto rovnice vyčíslena pomocí sestavení a řešení soustavy lineárních rovnic.

Zavedeme neznámé a pro každý prvek sestavíme rovnici; získáme 6 rovnic o 7 neznámých:



$$\begin{array}{lclclclclclclclclclclcl} \text{Fe:} & & x & & & & = & 2a & & & & & & & & & & \\ \text{S:} & & x & & & + & z & = & 3a & + & 3b & + & c & & & & & \\ \text{O:} & & 4x & + & 7y & + & 4z & = & 12a & + & 12b & + & 4c & + & d & & & \\ \text{K:} & & & & 2y & & = & & & & & & 2c & & & & \\ \text{Cr:} & & & & 2y & & = & & & & 2b & & & & & & \\ \text{H:} & & & & & & 2z & = & & & & & & & & 2d & \end{array}$$

Po úpravě (zkrácení posledních tří rovnic dvěma):

$$\begin{array}{lclclclclclclclclclclcl} \text{Fe:} & & x & & & & = & 2a & & & & & & & & & & \\ \text{S:} & & x & & & + & z & = & 3a & + & 3b & + & c & & & & & \\ \text{O:} & & 4x & + & 7y & + & 4z & = & 12a & + & 12b & + & 4c & + & d & & & \\ \text{K:} & & & & y & & = & & & & & & c & & & & \\ \text{Cr:} & & & & y & & = & & & & b & & & & & & \\ \text{H:} & & & & & & z & = & & & & & & & & d & \end{array}$$

Do složitějších rovnic (obsahujících více než dvě neznámé, zde rovnice pro síru a kyslík) dosadíme vztahy z předchozích rovnic, abychom zmenšili počet rovnic i neznámých.

$$2a + z = 3a + 3y + y$$

$$8a + 7y + 4z = 12a + 12y + 4y + z$$

Po úpravách:

$$z = a + 4y$$

$$3z = 4a + 9y$$

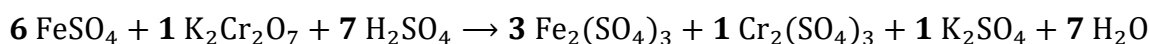
Trojnásobek první rovnice odečteme od druhé, čímž získáme vztah mezi neznámými a a y .

$$a = 3y$$

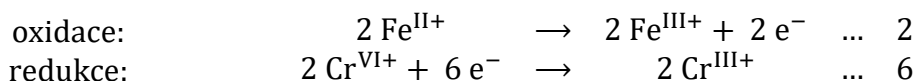
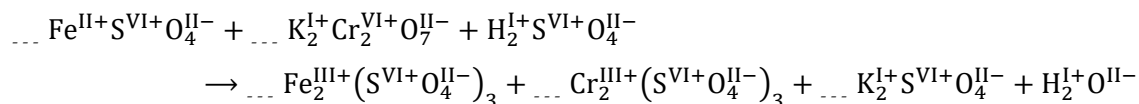
Zvolme hodnotu $y = 1$, abychom získali nejmenší možné celočíselné řešení. Další koeficienty dostaneme postupným dosazením: $a = 3y = 3$, $y = b = c = 1$, $z = d = a + 4y = 3 + 4 = 7$, $x = 2a = 6$.

$$(x, y, z; a, b, c, d) = (6, 1, 7; 3, 1, 1, 7)$$

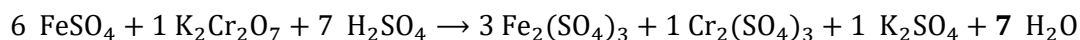
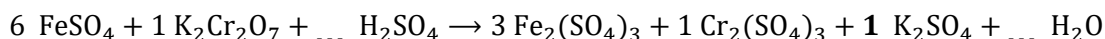
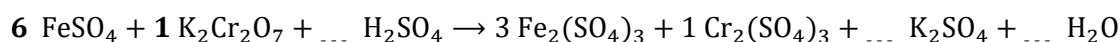
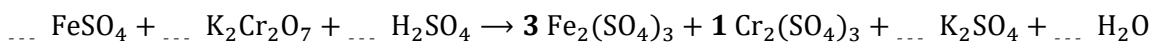
Rovnice je vyčíslena:



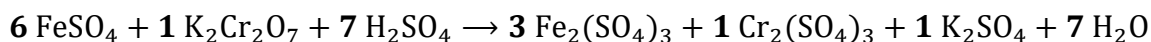
Chemické řešení: Určíme oxidační čísla všech prvků v rovnici a najdeme oxidaci a redukci:



Na základě křížového pravidla získáváme koeficient pro síran železitý (3) a pro síran chromitý (1), zbylé koeficienty snadno dopočítáme:

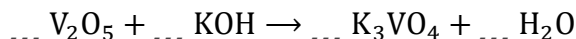


Rovnice je vyčíslena:



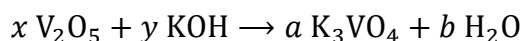
2.3.3 Příklad 9: Reakce oxidu vanadičného s hydroxidem draselným

Zadání: Vyčíslete chemickou rovnici:



Kontext: Podobně jako v minulých příkladech s přechodnými kovy lze ukázat na této reakci variabilitu jejich barevnosti. Zatímco oxid vanadičný je žlutý, vzniklý vanadičnan draselný je bezbarvý (Housecroft & Sharpe, 2014). Kromě toho lze podotknout, že oxid vanadičný je nezbytný katalyzátor oxidace oxidu siřičitého na oxid sírový při výrobě kyseliny sírové, jejíž objem výroby je ze všech chemikálií největší na světě (*The Essential Chemistry Industry*, 2016).

Matematické řešení: Zavedeme neznámé jako koeficienty a sestavíme rovnice pro každý prvek.



$$\begin{array}{lclclcl} \text{V:} & 2x & & = & a & \\ \text{O:} & 5x & + & y & = & 4a + b \\ \text{K:} & & & y & = & 3a \\ \text{H:} & & & y & = & 2b \end{array}$$

Získáváme soustavu 4 rovnic o 4 neznámých. Do rovnice pro kyslík dosadíme za neznámé a, b jejich vyjádření pomocí neznámé y :

$$\begin{aligned} 5x + y &= \frac{4y}{3} + \frac{y}{2} \\ y &= 6x \end{aligned}$$

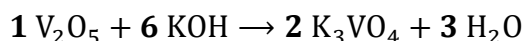
Pro získání řešení volme nejmenší celočíselné koeficienty, tedy:

$$\begin{aligned} x &= 1 \\ y &= 6 \end{aligned}$$

Zbylé koeficienty pak lze snadno dopočítat:

$$\begin{aligned} a &= 2 \\ b &= \frac{y}{2} = 3 \\ (x, y; a, b) &= (1, 6; 2, 3) \end{aligned}$$

Rovnice je tímto vyčíslena:

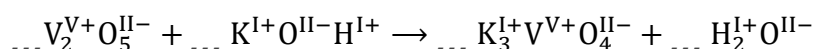


Ačkoliv jsme tuto rovnici poměrně přímočaře vyčíslili, měla by nás zarazit skutečnost, že jsme na začátku řešili soustavu o stejném počtu rovnic a neznámých. Pokud by byly tyto rovnice lineárně nezávislé, měla by tato soustava matematicky právě jedno řešení; a protože má nulovou pravou stranou, tímto řešením by mohla být pouze triviální čtveřice $(x, y; a, b) = (0, 0; 0, 0)$. To by chemicky mohlo znamenat nanejvýš to, že taková reakce nemůže probíhat.

Postupným řešením jsme však ukázali, že tato rovnice má i matematicky netriviální, tedy chemicky reálné řešení, a to opět závislé na jednom parametru, jak tomu bylo v předchozích příkladech. To je díky tomu, že sestavené rovnice nejsou lineárně nezávislé; podrobnějším pozorováním můžeme získat, že stejnou rovnici jako pro O získáme, když sečteme 2,5násobek rovnice pro V, polovinu rovnice pro K a polovinu rovnice pro H, tj. v obou případech $5x + y = 4a + b$.

Zároveň z toho získáváme postřeh, že na základě samotného počtu rovnic a počtu neznámých ještě nemůžeme usoudit, zda má soustava nějaké netriviální řešení a jaká bude jeho dimenze (tj. počet parametrů nutných pro jeho zápis); rozhodující pro toto zjištění totiž není počet rovnic, nýbrž tzv. hodnost soustavy, což už je však pojem přesahující běžnou středoškolskou matematiku a pro samotné nalezení řešení není nutné jej užívat.

Chemické řešení: Určíme oxidační čísla všech prvků v rovnici a najdeme oxidaci a redukci:



Vzhledem k tomu, že se oxidační čísla nemění, reakce výše není redoxní, nelze využít křížové pravidlo a rovnici je nutné vyčíslit matematickými metodami.

Komentář k matematickému a chemickému řešení (P7–P9)

Využití soustavy lineárních rovnic k nalezení koeficientů je univerzální a lze ji uplatnit na libovolnou rovnici. Praktické je však využít ji v případech, kdy není možné nacházet koeficienty intuitivněji metodou postupného vyčíslování.

Taková situace může nastat, pokud jsou pro účely vyčíslování nevhodně provázané rovnice prostřednictvím neznámých. V předchozí kapitole v *Příkladu 4* bylo možné zvolit železo nebo síru, protože oba prvky se na obou stranách rovnice vyskytují pouze na jednom místě, totéž platí o *Příkladu 5* a draslíku, manganu nebo vodíku. V *Příkladu 6* již byla volba omezena, protože byť se cín nachází pouze na jednom místě na obou stranách rovnice, jeho vyčíslení nás směřuje na kyslík – nevhodný prvek, protože se v rovnici vyskytuje na více místech. Volba dusíku byla výhodnější, protože jeho vyčíslení vedlo k jednoznačnému vyčíslení vodíku a zbytku rovnice. V případě *Příkladu 7* a obdobných úloh k procvičení v této kapitole to již není možné, neboť volbou libovolného počátečního prvku dospějeme do situace, kdy další prvek na řadě se vyskytuje na více místech v rovnici. Není proto možné pokračovat jednoznačně. Tato metoda je zmíněna v některých zdrojích, ale pouze u neredoxních rovnic (Kopecká, 2023; Mareček & Honza, 2005a). Autoři jiných chemicky zaměřených zdrojů ji považují za nevhodnou kvůli vynechávání chemických informací (Brachtlová, 2022) nebo kvůli údajné složitosti a možným chemicky nepřesným výsledkům (Mička a kol., 2003).

Obdobné úlohy k procvičení (P7–P9)

- a) $\dots \text{Se} + \dots \text{HNO}_3 + \dots \text{H}_2\text{O} \rightarrow \dots \text{H}_2\text{SeO}_3 + \dots \text{NO}$
- b) $\dots \text{H}_2\text{SeO}_3 + \dots \text{HClO}_3 \rightarrow \dots \text{H}_2\text{SeO}_4 + \dots \text{Cl}_2 + \dots \text{H}_2\text{O}$
- c) $\dots \text{TeO}_2 + \dots \text{KMnO}_4 + \dots \text{HNO}_3 + \dots \text{H}_2\text{O} \rightarrow \dots \text{H}_6\text{TeO}_6 + \dots \text{KNO}_3 + \dots \text{Mn}(\text{NO}_3)_2$
- d) $\dots \text{H}_2\text{O}_2 + \dots \text{KMnO}_4 + \dots \text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \dots \text{MnSO}_4 + \dots \text{O}_2 + \dots \text{K}_2\text{SO}_4 + \dots \text{H}_2\text{O}$
- e) $\dots \text{NaCl} + \dots \text{H}_2\text{SO}_4 + \dots \text{MnO}_2 \rightarrow \dots \text{Cl}_2 + \dots \text{MnCl}_2 + \dots \text{Na}_2\text{SO}_4 + \dots \text{H}_2\text{O}$
- f) $\dots \text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 + \dots \text{Cl}_2 + \dots \text{H}_2\text{O} \rightarrow \dots \text{NaHSO}_4 + \dots \text{HCl}$
- g) $\dots \text{H}_2\text{SeO}_3 + \dots \text{KMnO}_4 \rightarrow \dots \text{H}_2\text{SeO}_4 + \dots \text{K}_2\text{SeO}_3 + \dots \text{MnSeO}_3 + \dots \text{H}_2\text{O}$
- h) $\dots \text{KCl} + \dots \text{KMnO}_4 + \dots \text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \dots \text{MnSO}_4 + \dots \text{Cl}_2 + \dots \text{K}_2\text{SO}_4 + \dots \text{H}_2\text{O}$
- i) $\dots \text{P} + \dots \text{H}_2\text{O} + \dots \text{I}_2 \rightarrow \dots \text{HI} + \dots \text{H}_3\text{PO}_3$

Výsledky úloh se nacházejí na straně 55.

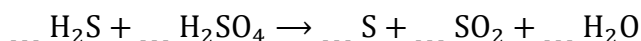
Rovnice převzaty z *Chemie: sbírka příkladů pro studenty středních škol* (Mareček & Honza, 2001) a *Základní pojmy, příklady a otázky z anorganické chemie* (Mička a kol., 2003).

2.4 Nedourčené úlohy

Součástí této kapitoly jsou matematicky náročnější úlohy vedoucí na soustavu lineárních rovnic, jejichž řešení je nutné vyjádřit na rozdíl od předchozích pomocí více než jednoho parametru. Tato skutečnost pak vede k mírně odlišnému způsobu řešení než v předchozích kapitolách, cílem však zůstává obtížností nepřekročit úroveň středoškolské výuky matematiky. Z chemického hlediska jde o dva typy situací – chemické řešení existuje pouze jediné a řešení získaná matematicky neodpovídají chemické skutečnosti (Mička a kol., 2003), případně jde o složitý chemický děj, kdy lze připustit více možných řešení v závislosti na reakčních podmínkách (Blakley, 1980).

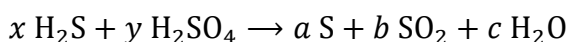
2.4.1 Příklad 10: Reakce sulfanu s kyselinou sírovou

Zadání: Vyčíslete chemickou rovnici:



Kontext: V rovnici se vyskytuje hned několik významných látek, které obsahují síru. Sulfan je typický svým zápachem, vzniká i při rozkladu masa a bílkovin obecně. Kyselina sírová je průmyslově nejvýznamnější látkou na světě, využívá se při zpracování kovů, výrobě plastů, výbušnin, léčiv a jiných látek. Síra je součástí střelného prachu a setkáme se s ní v podobě sirných knotů, zatímco oxid siřičitý je jedovatý plyn, který způsobuje kyselé deště (Housecroft & Sharpe, 2014).

Matematické řešení: Zavedeme neznámé jako koeficienty a sestavíme rovnice pro každý prvek.



$$\begin{array}{lclclcl} \text{H:} & 2x & + & 2y & = & & 2c \\ \text{S:} & x & + & y & = & a & + & b \\ \text{O:} & & & 4y & = & & 2b & + & c \end{array}$$

Získáváme 3 rovnice o 5 neznámých. Po úpravách (zkrácení první rovnice dvěma):

$$\begin{array}{lclclcl} \text{H:} & x & + & y & = & & c \\ \text{S:} & x & + & y & = & a & + & b \\ \text{O:} & & & 4y & = & & 2b & + & c \end{array}$$

Je patrné, že levé strany prvních dvou rovnic se rovnají, z toho vyplývá i rovnost jejich pravých stran. Získaný vztah dosadíme do poslední rovnice.

$$\begin{aligned}c &= a + b \\4y &= 2b + a + b \\4y &= a + 3b\end{aligned}$$

V poslední rovnici získáváme vztah nikoliv mezi dvěma koeficienty, jako tomu bylo v předchozích případech, nýbrž mezi třemi; z rovnic jsme pomocí dosazování eliminovali x a c , ale další eliminace neznámých už není možná. Za parametry tedy můžeme zvolit např. a a b a ostatní koeficienty už pomocí nich jednoznačně vyjádřit:

$$\begin{aligned}y &= \frac{1}{4}a + \frac{3}{4}b \\c &= a + b \\x = c - y &= a + b - \left(\frac{1}{4}a + \frac{3}{4}b\right) = \frac{3}{4}a + \frac{1}{4}b\end{aligned}$$

Zapsáno souhrnně jako uspořádaná pětice:

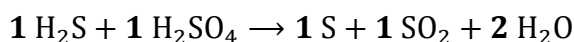
$$(x, y; a, b, c) = \left(\frac{3}{4}a + \frac{1}{4}b, \frac{1}{4}a + \frac{3}{4}b; a, b, a + b\right)$$

Případně, pokud bychom se chtěli vyhnout neceločíslným koeficientům u parametrů, můžeme též zvolit parametry $t = \frac{a}{4}$ a $s = \frac{b}{4}$ a řešení pomocí nich ekvivalentně zapsat takto: $(x, y; a, b, c) = (3t + s, 3s + t; 4t, 4s, 4t + 4s)$. Celkově tak vidíme, že matematické řešení je oproti předchozím příkladům dvourozměrné, tj. závisí na dvou parametrech; to nám také ukazuje, že v původní soustavě 3 rovnic o 5 neznámých byly rovnice lineárně nezávislé, protože nám ve výsledku zůstaly zachovány dva stupně volnosti. Blíže uvádí kapitola *Matematické principy a pojmy spojené s vyčíslováním chemických rovnic*, případně *Lineární algebra* (Barto & Tůma, 2022).

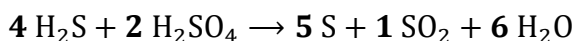
Jak však z tohoto výsledku získáme řešení původní chemické rovnice? Tam nás zajímají řešení, z nichž vybíráme nejmenší kladné celočíselné řešení, tj. s přirozenými a vesměs nesoudělnými koeficienty. V předchozích příkladech, jejichž matematický výsledek byl

závislý právě na jednom parametru, bylo takové řešení určeno jednoznačně. V případě výskytu dvou či více parametrů je však situace daleko složitější. Ukažme to na řešeném příkladě:

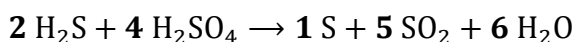
Volbou $a = b = 1$ získáme pětici $(x, y; a, b, c) = (1, 1; 1, 1, 2)$, tedy vyčíslení:



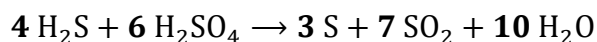
Volbou $a = 5, b = 1$ získáme pětici $(x, y; a, b, c) = (4, 2; 5, 1, 6)$, tedy vyčíslení:



Naopak volbou $a = 1, b = 5$ získáme pětici $(x, y; a, b, c) = (2, 4; 1, 5, 6)$, tedy vyčíslení:



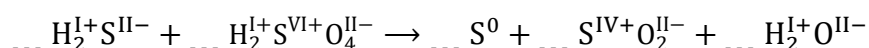
Dostali jsme tak tři různá řešení, která nejsou svými násobky a z hlediska rovnosti počtů atomů jednotlivých prvků na stranách reaktantů a produktů jsou korektní. Současně je zřejmé, že obdobně můžeme pokračovat i dále a nacházet další vyčíslení. Speciálně se nabízí volba a a b ve tvaru $a = 4k + 1, b = 4l + 1$, jinými slovy čísel, která po dělení čtyřmi dávají zbytek 1; máme pak zaručeno, že výsledná pětice bude celočíselná, neboť je tvaru $(x, y; a, b, c) = (3k + l + 1, k + 3l + 1; 4k + 1, 4l + 1, 4k + 4l + 2)$, a v případě nesoudělné volby a a b rovněž nesoudělná. Zároveň jsme tak ale stále nepopsali všechna řešení; např. volbou $a = 3, b = 7$ získáme pětici $(x, y; a, b, c) = (4, 6; 3, 7, 10)$, tedy vyčíslení:



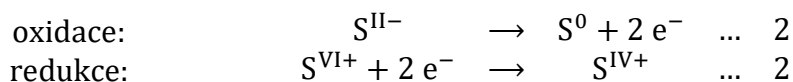
Úplná diskuse a obecný popis algoritmu řešení už vyžaduje pokročilejší propojení konceptů teorie čísel (řešení diofantických soustav lineárních rovnic) a lineární algebry (projektivní prostory), čímž přesahuje záměr i možnosti této práce a nebudeme se jim proto dále věnovat.

Obrátme nyní pozornost k chemickému řešení: je tomu skutečně tak, že reakce se může takto odehrávat více různými způsoby s různými poměry zúčastněných chemických látek, nebo matematické řešení pomocí soustavy lineárních rovnic zanedbává nějakou podstatnou chemickou informaci?

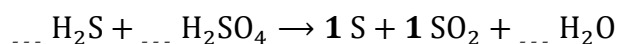
Chemické řešení: Určíme oxidační čísla všech prvků v rovnici a najdeme oxidaci a redukci:



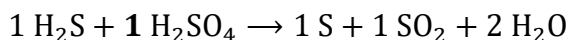
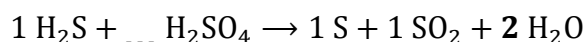
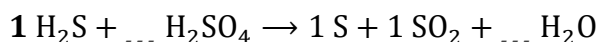
Na základě studia reakčního mechanismu bylo zjištěno, že síra se oxiduje ze sulfanu na elementární síru a naopak síra z kyseliny sírové se redukuje na oxid siřičitý. Zapišeme rovnice pro oxidaci a redukci:



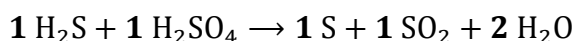
Na základě křížového pravidla získáváme koeficient pro oxid siřičitý (1) i pro síru (1), zbylé koeficienty snadno dopočítáme:



V tento okamžik může být další krok nejednoznačný – v tomto okamžiku musíme mít chemickou znalost, že elementární síra pochází ze sulfanu (blíže to jde poznat při využívání křížového pravidla, jak je uvedeno níže), počty atomů síry se tak v obou chemických látkách musí rovnat:



Rovnice je vyčíslena:



Poznámka: Bylo by možné uvažovat i opačnou kombinaci, a sice oxidaci síry ze sulfanu na oxid siřičitý a redukci síry z kyseliny sírové na elementární síru. Vyčíslení by v tomto případě dopadlo stejně jako v předchozím případě – při oxidaci síra odevzdává 6 elektronů, při redukci přijímá 6 elektronů, z toho důvodu by byl poměr koeficientů opět 1 : 1. Z chemického hlediska je pravděpodobnější varianta uvedená výše, neboť odpovídá běžnému redoxnímu chování sulfanu a kyseliny sírové (sulfan je obvykle oxidován na elementární síru, kyselina sírová se obvykle redukuje na oxid siřičitý, nikoliv až na elementární síru) (Housecroft & Sharpe, 2014; Mička & Lukeš, 1998).

Matematické řešení s dodatečnou chemickou podmínkou: Výše uvedené matematické řešení končí otázkou, která matematická řešení jsou v souladu s tím chemickým. I matematickým způsobem řešení lze získat to chemické, pokud odebereme jeden stupeň volnosti neboli pokud doplníme jednu rovnici (níže ztuchněna), která vychází z chemického řešení (síra ze sulfanu přechází do elementární síry, jejich koeficienty se musejí rovnat):

$$\begin{array}{lclclcl} \text{H:} & x & + & y & = & & c \\ \text{S:} & x & + & y & = & a & + & b \\ \text{S:} & x & & & = & a & & \\ \text{O:} & & & 4y & = & & 2b & + & c \end{array}$$

Získali jsme tak nikoliv 3, nýbrž 4 rovnice o 5 neznámých. Pokud jsou lineárně nezávislé, dostaneme obvyklé jednoparametrické řešení, které vede jako v předchozích příkladech na chemicky jednoznačný výsledek. Soustavu nyní dořešme. Dosazením nové podmínky do prvních dvou rovnic získáme:

$$\begin{aligned} a + y &= c \\ a + y &= a + b \\ y &= b \end{aligned}$$

Neznámou y vyjádříme v první a poslední rovnici jako b :

$$\begin{aligned} a + b &= c \\ 4b &= 2b + c \end{aligned}$$

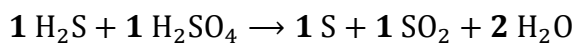
Neznámou c vyjádříme pomocí neznámé b :

$$c = 2b$$

Volíme nejmenší možnou celočíselnou hodnotu $b = 1$ a dopočítáme zbylé neznámé:

$$\begin{aligned} c &= 2b = 2 \\ y &= b = 1, \\ a &= c - b = 2 - 1 = 1 \\ a &= x = 1 \end{aligned}$$

Rovnice je vyčíslena:



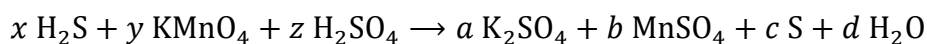
2.4.2 Příklad 11: Oxidace sulfanu na elementární síru manganistanem draselným

Zadání: Vyčíslete chemickou rovnici:



Kontext: Tato reakce je doprovázena změnou barvy roztoku z fialové, dané přítomností manganistanu, na bíle až jemně nažloutle zakalenou, způsobenou elementární sírou (Housecroft & Sharpe, 2014; Mareček & Honza, 2005).

Matematické řešení: Jedná se o obdobnou situaci jako v předchozím příkladě, pouze s více rovnicemi a neznámými. Zavedeme neznámé coby koeficienty, napíšeme rovnice pro jednotlivé prvky.



$$\begin{array}{lclclclclcl} \text{H:} & & 2x & & + & 2z & = & & & 2d \\ \text{S:} & & x & & + & z & = & a & + & b & + & c \\ \text{K:} & & & & y & & = & 2a & & & & \\ \text{Mn:} & & & & y & & = & & & b & & \\ \text{O:} & & & & 4y & + & 4z & = & 4a & + & 4b & + & d \end{array}$$

Po úpravách (zkrácení první rovnice dvěma):

$$\begin{array}{lclclclclcl} \text{H:} & & x & & + & z & = & & & d \\ \text{S:} & & x & & + & z & = & a & + & b & + & c \\ \text{K:} & & & & y & & = & 2a & & & & \\ \text{Mn:} & & & & y & & = & & & b & & \\ \text{O:} & & & & 4y & + & 4z & = & 4a & + & 4b & + & d \end{array}$$

Z prvních dvou rovnic získáváme rovnost níže uvedenou rovnost:

$$d = a + b + c$$

Do výše uvedeného vztahu a do poslední rovnice dosadíme y na základě rovnic pro draslík a mangan.

$$\begin{aligned} \frac{y}{2} + y + c &= d \\ 4y + 4z &= 4 \cdot \frac{y}{2} + 4y + d \end{aligned}$$

Po úpravách:

$$3y + 2c = 2d$$

$$4z = 2y + d$$

Následně po sečtení obou rovnic získáváme:

$$8z = 7y + 2c$$

Obdobně jako v předchozím příkladu získáváme řešení závislé na dvou parametrech, např. y a c . Zkoumat zde obecné řešení by bylo ještě složitější, představíme proto jiný, možná více intuitivní způsob, jak nalézt některá (nikoliv ovšem všechna) vyčíslení. Budeme hledat celočíselné hodnoty neznámých vhodným dosazováním do rovnice výše, nicméně je nutné brát ohled na některé skutečnosti. Protože na levé straně máme pouze násobky osmi, tedy sudé násobky, za koeficient y musíme volit pouze sudá čísla (součin $2c$ bude vždy sudý).

Vyzkoušejme nejjednodušší případ:

$$z = 1$$

$$8 = 7y + 2c$$

Protože nejmenší možná hodnota y je 2, abychom získali sudé číslo, není možné tuto rovnici vyčíslit tak, abychom získali kladné celočíselné koeficienty. Zvolme další možnou hodnotu z :

$$z = 2$$

Získáváme první možné řešení, které vyhovuje podmínkám:

$$16 = 7y + 2c$$

$$16 = 14 + 2$$

Z toho vyplývá $y = 2, c = 1$.

Dopočítáme zbylé koeficienty:

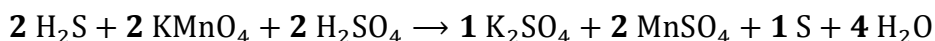
$$b = y = 2$$

$$a = \frac{y}{2} = \frac{2}{2} = 1$$

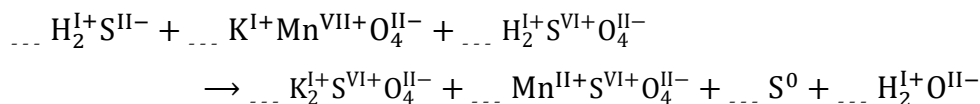
$$x = a + b + c - z = 1 + 2 + 1 - 2 = 2$$

$$d = x + z = 2 + 2 = 4$$

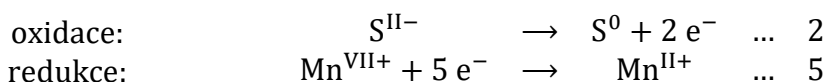
Rovnice je vyčíslena:



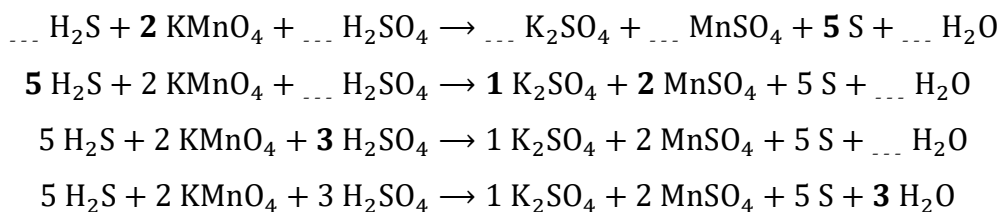
Chemické řešení: Určíme oxidační čísla všech prvků v rovnici a najdeme oxidaci a redukci:



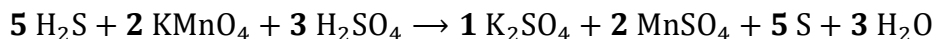
Zapišeme polorovnice pro oxidaci a redukci:



Na základě křížového pravidla získáváme koeficient pro manganistan draselný (2) a síru (5), zbylé koeficienty jednoduše dopočítáme:



Rovnice je vyčíslena:



Poznámka: Podobně jako u *Příkladu 10* by bylo možné uvažovat dvě možné oxidace síry v sulfanu (na elementární síru jako výše, případně na síru s oxidačním číslem VI + v síranech). Chemicky správná je první varianta, neboť síra v síranech (K_2SO_4 a MnSO_4) s oxidačním číslem VI + pochází z kyseliny sírové (Mička a kol., 2003).

Matematické řešení s dodatečnou chemickou podmínkou: Obdobně lze získávat další řešení pro vyšší hodnoty koeficientu y . Nabízí se však otázka, které z mnoha získaných řešení odpovídá chemické realitě a která řešení naopak ne. Jak bylo ukázáno dříve, vyčíslení za pomoci redoxních čísel a křížového pravidla nám dalo vždy jedno řešení (a jeho případné násobky, které zachovávají poměry mezi koeficienty).

I zde lze omezit počet řešení na jedno a jeho násobky, pokud na základě chemické znalosti stanovíme, že veškerá síra ze sulfanu přechází pouze do elementární síry neboli přidáme rovnici navíc (zvýrazněna tučně):

$$\begin{array}{rclclclcl}
 \text{H:} & 2x & + & 2z & = & & & 2d \\
 \text{S:} & x & + & z & = & a & + & b & + & c \\
 \text{\textbf{S:}} & \textbf{x} & & & = & & & & & \textbf{c} \\
 \text{K:} & & y & & = & 2a & & & & \\
 \text{Mn:} & & y & & = & & b & & & \\
 \text{O:} & & 4y & + & 4z & = & 4a & + & 4b & + & d
 \end{array}$$

Pokusíme se využitím rovností některých neznámých a dosazováním neznámých z jednodušších rovnic do složitějších zmenšit počet rovnic i neznámých, abychom získali parametrické vyjádření založené na jedné neznámé. Začneme rovností levých stran pro vodík a síru:

$$\begin{aligned}
 x + z &= d \\
 x + z &= a + b + c
 \end{aligned}$$

Z toho vyplývá:

$$d = a + b + c$$

Dále pro druhou (ztučněnou) rovnici pro síru a výše uvedenou rovnici platí:

$$\begin{aligned}
 x &= c \\
 x + z &= a + b + c \\
 c + z &= a + b + c \\
 z &= a + b
 \end{aligned}$$

Rovností pravých stran rovnic pro draslík a mangan získáme:

$$\begin{aligned}
 y &= 2a \\
 y &= b \\
 2a &= b
 \end{aligned}$$

Výše získané závislosti lze vyřešit tím, že v poslední rovnici dosadíme za všechny neznámé kromě jedné zvolené (např. a) jejich vyjádření z předchozích rovnic:

$$\begin{aligned}
4y + 4z &= 4a + 4b + d \\
8a + 4(a + b) &= 4a + 8a + (a + b + c) \\
8a + 4(a + 2a) &= 4a + 8a + (a + 2a + c) \\
20a &= 15a + c \\
c &= 5a
\end{aligned}$$

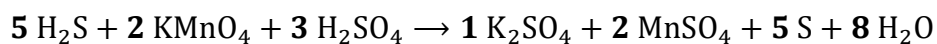
Nyní lze ostatní neznámé postupným dosazováním vyjádřit pomocí parametru a :

$$\begin{aligned}
b &= 2a \\
d &= a + b + c = a + 2a + 5a = 8a \\
x &= c = 5a \\
y &= 2a \\
z &= a + b = a + 2a = 3a
\end{aligned}$$

Z toho plyne pouze jedno řešení soustavy lineárních rovnic a jeho násobky dané parametrem a , které je uvedeno níže. Současně jde o to řešení, které respektuje chemická pravidla.

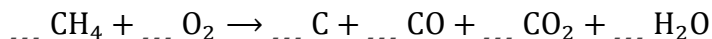
$$(x, y, z; a, b, c, d) = (5; 2; 3; 1; 2; 5; 8)$$

Rovnice je vyčíslena:



2.4.3 Příklad 12: Spalování methanu

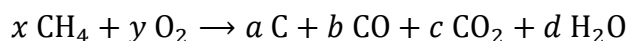
Zadáni: Vyčíslete chemickou rovnici:



Kontext: Při spalování uhlovodíků vzniká voda a v závislosti na množství dostupného kyslíku oxid uhličitý (dostatek kyslíku), oxid uhelnatý (méně kyslíku) nebo elementární uhlík (uhlíkové saze, nedostatek kyslíku). V reálné situaci však nelze izolovat jednotlivé případy a lze spíše uvažovat směs všech produktů v různých poměrech v závislosti na množství dostupného kyslíku (Mareček & Honza, 2005; McMurry, 2015).

Podobně jako u *Příkladu 10* a *Příkladu 11* zde získáme více matematicky platných řešení, oproti zmíněným příkladům však mohou mít tato řešení i reálný chemický význam.

Matematické řešení: Do rovnice zavedme koeficienty coby neznámé:



A napíšeme rovnice pro jednotlivé prvky:

$$\begin{array}{lclcl} \text{C:} & x & = & a + b + c \\ \text{H:} & 4x & = & & 2d \\ \text{O:} & & 2y & = & b + 2c + d \end{array}$$

Získali jsme tak 3 rovnice o 6 neznámých. Po úpravách (zkrácení druhé rovnice dvěma):

$$\begin{array}{lclcl} \text{C:} & x & = & a + b + c \\ \text{H:} & 2x & = & & d \\ \text{O:} & & 2y & = & b + 2c + d \end{array}$$

Koeficient d v poslední rovnici vyjádříme pomocí $2x$ z rovnice pro vodík, následně za neznámou x v první rovnici dosadíme vyjádření z druhé rovnice:

$$\begin{aligned} 2y &= b + 2c + 2x \\ x &= a + b + c \end{aligned}$$

Dále nelze eliminovat. Zvolíme tedy a , b a c jako parametry a vedle x pomocí nich vyjádříme i y a d . Po dosazení získáváme:

$$2y = b + 2c + 2(a + b + c) = 2a + 3b + 4c$$

$$y = a + \frac{3}{2}b + 2c$$

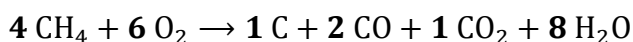
$$d = 2x = 2(a + b + c) = 2a + 2b + 2c$$

Pokud bychom tedy chtěli zapsat všechna matematická řešení, můžeme tak učinit pomocí parametrů a, b, c např. takto:

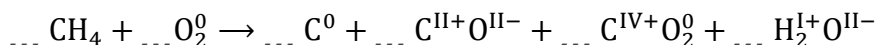
$$(x, y; a, b, c, d) = (a + b + c, a + \frac{3}{2}b + 2c; a, b, c, 2a + 2b + 2c)$$

Obdobně jako v předchozích dvou příkladech, dosazováním různých trojic parametrů a, b, c pak získáváme různá řešení. Z toho, že $y = a + \frac{3}{2}b + 2c$, plyne nutnost pro koeficient b být vždy sudým číslem; koeficienty a, c mohou být sudé i liché.

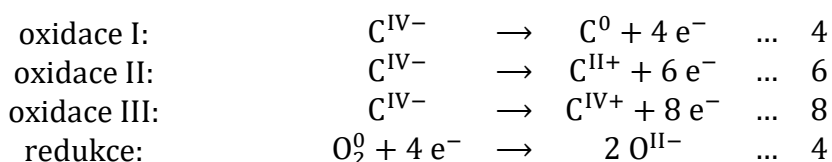
Zkusme najít nejmenší celočíselné řešení. Volbou $a = c = 1, b = 2$ získáváme šestici $(x, y; a, b, c, d) = (4, 6; 1, 2, 1, 8)$, tj. vyčíslení:



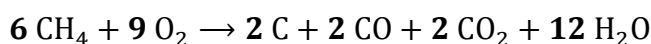
Chemické řešení: Určíme oxidační čísla všech prvků v rovnici a najdeme oxidaci a redukci:



Zapišeme rovnice všech dílčích oxidací a jedné redukce:



Po sečtení počtů elektronů vyměňovaných při oxidačních reakcích získáváme číslo 18, u redukce 4. Na základě křížového pravidla získáváme koeficient pro kyslík (9) a pro všechny produkty obsahující uhlík (C, CO, CO₂) koeficient 2. Rovnice je tímto vyčíslena:



Toto řešení je odlišné od matematického. Jak bylo však uvedeno v úvodu této kapitoly, některé chemické děje jsou složité a mohou probíhat více způsoby. Získané řešení vystihuje sice formálně správný stav (kdyby opravdu docházelo k výměnám elektronů, jak je napsáno výše), ale může nabývat i jiných hodnot v závislosti na reakčních podmínkách.

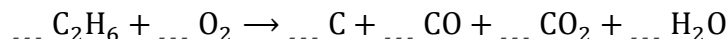
Komentář k matematickému a chemickému řešení (P10–P12)

V této kapitole došlo poprvé k odchylce matematického a chemického řešení, což je zapříčiněno existencí dvou a více stupňů volnosti, v důsledku čehož lze získat různá řešení, která nejsou násobky jednoho řešení. V případě některých chemických rovnic je platné pouze řešení získané chemickými způsoby (*Příklad 10, Příklad 11*), v jiných případech může jít o natolik složité chemické děje, že různé podoby vzešlé z matematického řešení jsou přípustná (*Příklad 12*).

Matematické řešení je založeno na sestavení soustavy lineárních rovnic a postupném dosazování jako v případě předchozí kapitoly, nicméně vzhledem k existenci dvou a více parametrů a požadavku na celočíselné výsledky je řešení komplikovanější. I přesto lze představenými způsoby poměrně snadno získat různá celočíselná řešení a nepřekročit úroveň středoškolské matematiky. Navazuje na předchozí kapitoly a rozšiřuje práci s parametry při řešení soustavy lineárních rovnic. V případě chemického řešení se obtížnost neodlišuje od případů prezentovaných dříve, ovšem v méně standardních příkladech (*Příklad 12*) je řešení vzhledem k více dílčím oxidacím složitější.

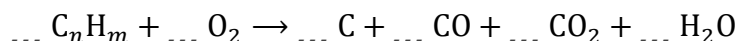
Obdobné úlohy k procvičení (P10–P12)

- a) Vyčíslete rovnici spalování ethanu, najděte alespoň 2 různá řešení a to, které odpovídá chemickým pravidlům:



- b) Určete poměr objemů (totožný s poměrem stechiometrických koeficientů) methanu a kyslíku, pokud víte, že při hoření methanu vznikají všechny možné spalné produkty (uhlík, oxid uhelnatý, oxid uhličitý a voda) a současně:
- oxidu uhličitýho vzniká desetkrát více než oxidu uhelnatého nebo uhlíku,
 - oxidu uhelnatého vzniká stejně jako oxidu uhličitýho, ale současně dvacetkrát více než uhlíku.

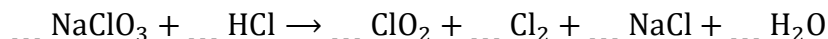
- c) Najděte obecné vyjádření vyčíslení rovnice hoření obecného uhlovodíku.



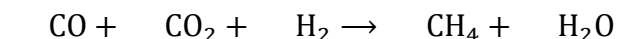
- d) Vyčíslete rovnici oxidace železa, nalezněte alespoň 2 různá řešení a to, které odpovídá chemickým pravidlům.



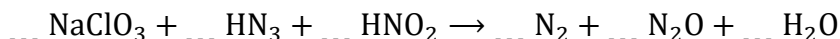
- e) Vyčíslete rovnici níže, nalezněte alespoň 2 různá řešení a to, které odpovídá chemickým pravidlům (Ramasami, 2003).



- f) Vyčíslete rovnici níže, nalezněte alespoň 2 různá řešení a to, které odpovídá chemickým pravidlům (Blakley, 1980).



- g) Vyčíslete rovnici níže, nalezněte alespoň 2 různá řešení a to, které odpovídá chemickým pravidlům (Distler a kol., 2022).



Výsledky úloh se nacházejí na straně 56.

2.5 Zadání úloh a výsledky

2.5.1 Zadání

Vyčíslování na základě jednoduchých poměrů

Vyčíslete chemické rovnice:

- a) $\dots \text{BaO} + \dots \text{O}_2 \rightarrow \dots \text{BaO}_2$
- b) $\dots \text{SO}_2 + \dots \text{O}_2 \rightarrow \dots \text{SO}_3$
- c) $\dots \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \dots \text{H}_2\text{O} + \dots \text{O}_2$
- d) $\dots \text{CO} + \dots \text{O}_2 \rightarrow \dots \text{CO}_2$
- e) $\dots \text{N}_2\text{O}_5 \rightarrow \dots \text{NO} + \dots \text{O}_2$
- f) $\dots \text{Pb}(\text{NO}_3)_2 \rightarrow \dots \text{PbO} + \dots \text{NO}_2 + \dots \text{O}_2$
- g) $\dots \text{C}_3\text{H}_5\text{O}_9\text{N}_3 \rightarrow \dots \text{N}_2 + \dots \text{H}_2\text{O} + \dots \text{CO}_2 + \dots \text{O}_2$
- h) $\dots \text{HBrO}_3 \rightarrow \dots \text{Br}_2 + \dots \text{O}_2 + \dots \text{H}_2\text{O}$

Postupné vyčíslování bez využití soustavy lineárních rovnic

Vyčíslete chemické rovnice metodou postupného vyčíslování:

- a) $\dots \text{H}_2\text{SeO}_3 + \dots \text{H}_2\text{S} \rightarrow \dots \text{Se} + \dots \text{H}_2\text{O} + \dots \text{S}$
- b) $\dots \text{P} + \dots \text{H}_2\text{O} + \dots \text{Br}_2 \rightarrow \dots \text{HBr} + \dots \text{H}_3\text{PO}_3$
- c) $\dots \text{Te} + \dots \text{HClO}_3 + \dots \text{H}_2\text{O} \rightarrow \dots \text{H}_6\text{TeO}_6 + \dots \text{Cl}_2$
- d) $\dots \text{Se} + \dots \text{Cl}_2 + \dots \text{H}_2\text{O} \rightarrow \dots \text{H}_2\text{SeO}_4 + \dots \text{HCl}$
- e) $\dots \text{Ag}_2\text{SeO}_3 + \dots \text{Br}_2 + \dots \text{H}_2\text{O} \rightarrow \dots \text{H}_2\text{SeO}_4 + \dots \text{AgBr}$
- f) $\dots \text{H}_6\text{TeO}_6 + \dots \text{HCl} \rightarrow \dots \text{H}_2\text{TeO}_3 + \dots \text{Cl}_2 + \dots \text{H}_2\text{O}$
- g) $\dots \text{SiO}_2 + \dots \text{BrF}_3 \rightarrow \dots \text{SiF}_4 + \dots \text{Br}_2 + \dots \text{O}_2$
- h) $\dots \text{NaOH} + \dots \text{Cl}_2 \rightarrow \dots \text{NaClO}_3 + \dots \text{NaCl} + \dots \text{H}_2\text{O}$
- i) $\dots \text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 + \dots \text{HCl} \rightarrow \dots \text{S} + \dots \text{SO}_2 + \dots \text{NaCl} + \dots \text{H}_2\text{O}$
- j) $\dots \text{Au} + \dots \text{NaCN} + \dots \text{O}_2 + \dots \text{H}_2\text{O} \rightarrow \dots \text{Na}[\text{Au}(\text{CN})_2] + \dots \text{NaOH}$

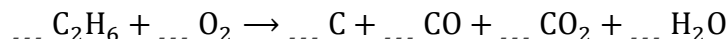
Vyčíslování na základě soustavy lineárních rovnic

Vyčíslete chemické rovnice řešením soustavy lineárních rovnic:

- a) $\dots \text{Se} + \dots \text{HNO}_3 + \dots \text{H}_2\text{O} \rightarrow \dots \text{H}_2\text{SeO}_3 + \dots \text{NO}$
- b) $\dots \text{H}_2\text{SeO}_3 + \dots \text{HClO}_3 \rightarrow \dots \text{H}_2\text{SeO}_4 + \dots \text{Cl}_2 + \dots \text{H}_2\text{O}$
- c) $\dots \text{TeO}_2 + \dots \text{KMnO}_4 + \dots \text{HNO}_3 + \dots \text{H}_2\text{O} \rightarrow \dots \text{H}_6\text{TeO}_6 + \dots \text{KNO}_3 + \dots \text{Mn}(\text{NO}_3)_2$
- d) $\dots \text{H}_2\text{O}_2 + \dots \text{KMnO}_4 + \dots \text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \dots \text{MnSO}_4 + \dots \text{O}_2 + \dots \text{K}_2\text{SO}_4 + \dots \text{H}_2\text{O}$
- e) $\dots \text{NaCl} + \dots \text{H}_2\text{SO}_4 + \dots \text{MnO}_2 \rightarrow \dots \text{Cl}_2 + \dots \text{MnCl}_2 + \dots \text{Na}_2\text{SO}_4 + \dots \text{H}_2\text{O}$
- f) $\dots \text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 + \dots \text{Cl}_2 + \dots \text{H}_2\text{O} \rightarrow \dots \text{NaHSO}_4 + \dots \text{HCl}$
- g) $\dots \text{H}_2\text{SeO}_3 + \dots \text{KMnO}_4 \rightarrow \dots \text{H}_2\text{SeO}_4 + \dots \text{K}_2\text{SeO}_3 + \dots \text{MnSeO}_3 + \dots \text{H}_2\text{O}$
- h) $\dots \text{KCl} + \dots \text{KMnO}_4 + \dots \text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \dots \text{MnSO}_4 + \dots \text{Cl}_2 + \dots \text{K}_2\text{SO}_4 + \dots \text{H}_2\text{O}$
- i) $\dots \text{P} + \dots \text{H}_2\text{O} + \dots \text{I}_2 \rightarrow \dots \text{HI} + \dots \text{H}_3\text{PO}_3$

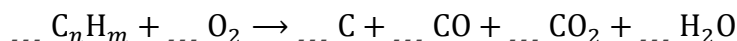
Nedourčené úlohy

- a) Vyčíslete chemickou rovnici spalování ethanu, najděte alespoň 2 různá řešení a to, které odpovídá chemickým pravidlům:

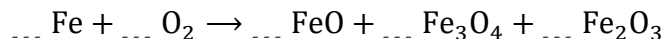


- b) Určete poměr objemů (totožný s poměrem stechiometrických koeficientů) methanu a kyslíku, pokud víte, že při hoření methanu vznikají všechny možné spalné produkty (uhlík, oxid uhelnatý, oxid uhličitý a voda) a současně:
- oxidu uhličitého vzniká desetkrát více než oxidu uhelnatého nebo uhlíku,
 - oxidu uhelnatého vzniká stejně jako oxidu uhličitého, ale současně dvacetkrát více než uhlíku.

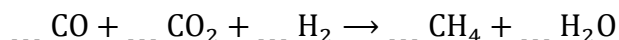
- c) Najděte obecné vyjádření vyčíslení rovnice hoření obecného uhlovodíku:



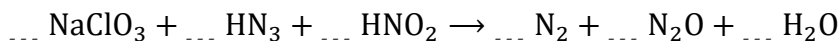
- d) Vyčíslete chemickou rovnici oxidace železa, nalezněte alespoň 2 různá řešení a to, které odpovídá chemickým pravidlům:



- e) Vyčíslete chemickou rovnici níže, nalezněte alespoň 2 různá řešení a to, které odpovídá chemickým pravidlům (Blakley, 1980).



- f) Vyčíslete chemickou rovnici níže, nalezněte alespoň 2 různá řešení a to, které odpovídá chemickým pravidlům (Distler a kol., 2022).



2.5.2 Výsledky

Vyčíslování na základě jednoduchých poměrů (výsledky)

- a) 2, 1, 2
- b) 2, 1, 2
- c) 2, 2, 1
- d) 2, 1, 2
- e) 2, 4, 3
- f) 2, 2, 4, 1
- g) 4, 6, 10, 12, 1
- h) 4, 2, 5, 2

Postupné vyčíslování bez využití soustavy lineárních rovnic (výsledky)

- a) 1, 2, 1, 3, 2
- b) 2, 6, 3, 6, 2
- c) 5, 6, 12, 5, 3
- d) 1, 3, 4, 1, 6
- e) 1, 1, 1, 1, 2
- f) 1, 2, 1, 1, 3
- g) 3, 4, 3, 2, 3
- h) 6, 3, 1, 5, 3
- i) 1, 2, 1, 1, 2, 1
- j) 4, 8, 1, 2, 4, 4

Vyčíslování na základě soustavy lineárních rovnic (výsledky)

- a) 3, 4, 1, 3, 4
- b) 5, 2, 5, 1, 1
- c) 5, 2, 6, 12, 5, 2, 2
- d) 5, 2, 3, 2, 5, 1, 8
- e) 4, 2, 1, 1, 1, 2, 2
- f) 1, 4, 5, 2, 8
- g) 8, 2, 5, 1, 2, 3
- h) 10, 2, 8, 2, 5, 6, 8
- i) 2, 6, 3, 6, 2

Nedourčené úlohy (postup řešení a výsledky)

- a) Řešení této úlohy plně odpovídá vzorovému *Příkladu 12*. Hodnoty koeficientů mohou být následující (značení je totožné jako v celé práci):

$$(x, y; a, b, c, d) = (3, 6; 4, 1, 1, 9)$$

$$(x, y; a, b, c, d) = (4, 10; 1, 6, 1, 12)$$

Chemické řešení odpovídá:

$$(x, y; a, b, c, d) = (6, 15; 4, 4, 4, 18)$$

- b) Základem řešení je zohlednění zadaných číselných poměrů (ty jsou níže zvýrazněny tučně) a dopočítání zbylých koeficientů:

- a. Řešením rovnice je:

$$(x, y; a, b, c, d) = (24, 45; \mathbf{2}, \mathbf{2}, \mathbf{20}, 48)$$

- b. Řešením rovnice je:

$$(x, y; a, b, c, d) = (41, 71; \mathbf{1}, \mathbf{20}, \mathbf{20}, 82)$$

- c) Řešení vede na jednu rovnici obsahující neznámou y vyjádřenou pomocí parametrů a, b, c (obdobně jako v *Příkladu 12*):

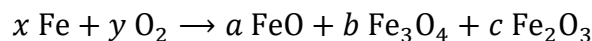
$$4y = a \cdot \frac{m}{n} + b \cdot (2 + \frac{m}{n}) + c \cdot (4 + \frac{m}{n})$$

Vzhledem k tomu, že poměr atomů vodíku a uhlíku v molekule $\frac{m}{n}$ může nabývat různých hodnot (celočíslných i neceločíslných)⁴, další řešení spočívá v dosazení konkrétních hodnot m, n a úpravou rovnice na tvar podobný tomu v *Příkladu 12*. Způsob řešení se rovněž neliší – nejprve je hodnota neznámé y určena a k ní jsou hledány vhodné hodnoty parametrů a, b, c .

⁴ To lze ukázat na příkladech dvou po sobě jdoucích uhlovodíků: pro ethan (C_2H_6) je poměr $\frac{6}{2}$ neboli 3, pro propan (C_3H_8) s neceločíslným poměrem $\frac{8}{3}$.

- d) Protože se jedná o soustavu 2 lineárních rovnic o 5 neznámých, lze volně vybrat tři neznámé a zbylé jsou pak jednoznačně určeny (za předpokladu lineární nezávislosti těchto rovnic).

Pokud jsou za stechiometrické koeficienty zvoleny neznám obdobně jak v příkladech dříve, získáme:



Rovnice pro oba prvky:

$$\begin{array}{lcl} \text{Fe:} & x & = a + 3b + 2c \\ \text{O:} & 2y & = a + 4b + 3c \end{array}$$

Zvolme dvě různé trojice neznámých a, b, c , těm pak odpovídají různé hodnoty neznámých x, y . Pro první trojici platí:

$$a = 1$$

$$b = 1$$

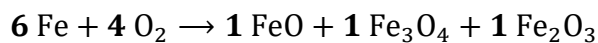
$$c = 1$$

Na základě toho:

$$\begin{aligned} x &= a + 3b + 2c = 1 + 3 + 2 = 6 \\ y &= \frac{a + 4b + 3c}{2} = \frac{1 + 4 + 3}{2} = \frac{8}{2} = 4 \end{aligned}$$

$$(x, y; a, b, c) = (6, 4; 1, 1, 1)$$

Rovnice je vyčíslena:



Pro druhou trojici platí:

$$a = 2$$

$$b = 1$$

$$c = 1$$

Na základě toho:

$$\begin{aligned} x &= a + 3b + 2c = 2 + 3 + 2 = 7 \\ y &= \frac{a + 4b + 3c}{2} = \frac{2 + 4 + 3}{2} = \frac{9}{2} \end{aligned}$$

$$(x, y; a, b, c) = \left(7, \frac{9}{2}; 2, 1, 1\right) = (14, 9; 4, 2, 2)$$

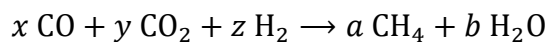
Rovnice je vyčíslena:



Chemické řešení odpovídá těmto hodnotám neznámých:

$$(x, y; a, b, c) = (6, 4; 1, 1, 1)$$

e) Do rovnice doplníme koeficienty aby neznámé a sestavíme příslušné rovnice.



$$\begin{array}{lclclcl} \text{C:} & x & + & y & & = & a \\ \text{H:} & & & & 2z & = & 4a + 2b \\ \text{O:} & x & + & 2y & & = & b \end{array}$$

Z rovnice pro uhlík vyjádříme neznámou x a dosadíme do rovnice pro kyslík:

$$\begin{aligned} x &= a - y \\ (a - y) + 2y &= b \\ y &= b - a \end{aligned}$$

Neznámou y následně dosadíme zpět do rovnice pro uhlík pro vyjádření neznámé x pomocí neznámých a, b :

$$\begin{aligned} x + (b - a) &= a \\ x &= 2a - b \end{aligned}$$

Protože neznámá z je v rovnici pro vodík přímo vyjádřená pomocí neznámých a, b , lze všechny neznámé vyjádřit pomocí těchto parametrů:

$$\begin{aligned} x &= 2a - b \\ y &= b - a \\ z &= 2a + b \end{aligned}$$

Abychom získali celočíselné kladné koeficienty, volme např.:

$$a = 2$$

$$b = 3$$

Pak platí:

$$x = 4 - 3 = 1$$

$$y = 3 - 2 = 1$$

$$z = 7$$

Jedno z řešení pak je:

$$(x, y, z; a, b) = (1, 1, 7; 2, 3)$$

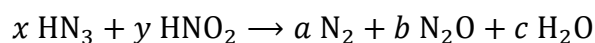
Obdobně lze získat jiné řešení:

$$(x, y, z; a, b) = (2, 1, 10; 3, 4)$$

Chemické řešení odpovídá:

$$(x, y, z; a, b) = (1, 1, 7; 2, 3)$$

f) Do rovnice doplníme koeficienty aby neznámé a sestavíme příslušné rovnice.



Pro jednotlivé prvky sestavíme rovnice:

$$\begin{array}{rclclcl} \text{H:} & x & + & y & = & 2c \\ \text{N:} & 3x & + & y & = & 2a + 2b \\ \text{O:} & & & 2y & = & b + c \end{array}$$

Vzhledem k počtu rovnic a neznámých lze očekávat dva stupně volnosti, zvolme např. neznámé x, y jako parametry a vyjádříme pomocí nich ostatní. Z rovnice pro vodík lze vyjádřit c :

$$c = \frac{x + y}{2}$$

To lze dosadit do rovnice pro kyslík a vyjádřit neznámou b :

$$\begin{aligned} 2y &= b + \frac{x + y}{2} \\ b &= 2y - \frac{x + y}{2} \end{aligned}$$

$$b = \frac{-x + 3y}{2}$$

Následně lze neznámou b vyjádřenou pomocí neznámých x, y dosadit do rovnice pro dusík a vyjádřit neznámou a :

$$3x + y = 2a + 2\left(\frac{-x + 3y}{2}\right)$$

$$3x + y = 2a - x + 3y$$

$$2a = 4x - 2y$$

$$a = 2x - y$$

Vhodnou volnou hodnot neznámých x, y lze dopočítat hodnoty zbylých koeficientů. Zvolme hodnoty neznámých x, y :

$$x = 1, y = 1$$

Pak platí:

$$a = 2 - 1 = 1$$

$$b = \frac{-1 + 3}{2} = 1$$

$$c = \frac{1 + 1}{2} = 1$$

Řešení pak je:

$$(x, y; a, b, c) = (1, 1; 1, 1, 1)$$

Obdobně lze získat jiné řešení:

$$(x, y; a, b, c) = (6, 8; 4, 9, 7)$$

Chemickém řešení odpovídá:

$$(x, y; a, b, c) = (4, 2; 6, 1, 3)$$

3 Reflexe portfolia výukových materiálů

Cílem této kapitoly je popsat proces vzniku portfolia, výběr vhodných úloh z matematického i chemického hlediska a vizi stojící za sbírkou. Následně je popsána pilotáž vybraných úloh ve výuce na gymnáziu (Gymnázium Jana Keplera) i na vysoké škole (Pedagogická fakulta Univerzity Karlovy), dále je uvedeno hodnocení úloh a poslední kapitola se zaměřuje na další možné směřování při zpracovávání tohoto tématu.

3.1 Motivace a geneze vzniku portfolia

Podnětem pro vznik bakalářské práce coby portfolia výukových materiálů bylo jedno z cvičení předmětu *Lineární algebra a geometrie* v akademickém roce 2022/2023 s vedoucím práce JUDr. Mgr. Filipem Beranem. V návaznosti na využití soustavy lineárních rovnic pro vyčíslování nedourčených chemických rovnic (tj. majících alespoň dva stupně volnosti, které umožňují vznik více možných řešení, jež zároveň nejsou násobky, v rámci této práce se jedná o *Příklad 10* a *Příklad 11*) vyvstaly dvě otázky, stojící za vznikem nápadu na portfolio:

- Kdy se vyplatí vyčíslovat chemické rovnice na základě chemických způsobů a kdy pomocí matematických metod?
- Existují chemická nebo matematická omezení těchto způsobů? (Ztrácíme tím některé informace nebo dostáváme fakticky nesprávná řešení?)

V návaznosti na tyto vytyčené otázky vznikla myšlenka vytvořit portfolio výukových materiálů, které by mělo:

- Sloužit jako podklad pro vyučující matematiky a jejich žáky na středních školách, nevyjímaje však další kategorie čtenářů (např. studenty matematiky se zaměřením na vzdělávání, pro které může sbírka sloužit nejenom jako inspirace do budoucí výuky, ale i jako propojení s lineární algebrou).
- Prezentovat gradované úlohy, tj. úlohy s postupně narůstající obtížností. Tomu odpovídá i členění kapitol a jejich návaznost (jednotlivé metody řešení jsou postupně náročnější).
- Komplexně a samonosně předat zpracované téma jako materiál pro samostudium, z toho důvodu obsahuje sbírka řešené příklady a jejich detailně popsané postupy, obdobné úlohy k procvičení i odkazy na další zdroje.

- Prezentovat matematické metody v aplikačním kontextu. Různé matematické metody jsou využity pro řešení konkrétních chemických problémů, každý řešený příklad navíc obsahuje i stručný informační kontext.

3.2 Hodnocení vytvořených materiálů

Na základě zpracování řešených příkladů, jejich rozčlenění podle druhu využité matematické metody, pilotáže a dalších hodnocení lze formulovat následující výhody a nevýhody obou uvažovaných způsobů vyčíslování chemických rovnic (na jedné straně chemický s pomocí oxidačních čísel, na druhé straně matematický, založený na více metodách):

- Výhodou chemického způsobu je možnost dále pracovat s chemickými informacemi (např. jak silné oxidační/redukční činidlo daná látka je⁵, jak se redoxně chová daná látka v různých podmínkách⁶). Tyto informace vycházejí ze změn oxidačních čísel, na nichž je způsob založen. Bez této znalosti nelze vyvozovat uvedené interpretace.
- Další výhodou chemického způsobu je získání fakticky správného řešení. Jak bylo ukázáno v kapitole *Nedourčené úlohy*, matematickými metodami lze docílit více různých řešení. Ne všechna však odpovídají realitě.
- Nevýhodou chemického způsobu řešení a výhodou matematických metod je otázka oxidačních čísel. Pro vyčíslení chemické rovnice na základě změn oxidačních čísel je nutné znát oxidační čísla mnoha různých chemických prvků, případně je umět odvodit nebo dopočítat. Matematické metody pracují pouze s počty atomů, tudíž tato nutnost odpadá.
- Nevýhodou chemického způsobu řešení je neefektivní vyčíslování rovnic, které mají více dílčích oxidačních nebo redukčních reakcí (v práci se jedná o *Příklad 4* a *Příklad 12*). Tento způsob sice vede ke správnému výsledku, ale podstatně složitější cestou v porovnání s matematickým způsobem.
- Dalším omezením chemického způsobu vyčíslování jsou rovnice obsahující organické sloučeniny (*Příklad 3*, dále rozvedeno v kapitole *Prostor pro další směřování*), kdy může

⁵ Jednoduše řečeno se jedná o velikost rozdílu původního a nového oxidačního čísla. Pokud je daná látka schopna změnit oxidační číslo prvku v jiné látce o velký rozdíl, případně pokud se jedná o obtížně realizovatelnou chemickou reakci, můžeme ji označit jako silné oxidační/redukční činidlo (Mička a kol., 2003; Vacík, 2017).

⁶ Schopnost oxidovat/redukovat může být závislá např. na pH prostředí (Mička & Lukeš, 1998; Vacík, 2017).

být poměrně obtížné dopočítat oxidační čísla. Tento přístup je možný, nicméně vyžaduje další kroky včetně znalosti elektronegativity prvků, z toho důvodu matematické metody vyplývají jako efektivnější.

- Výhodou matematických metod je jejich efektivita (zejména v případě příkladů, které byly prezentovány v kapitole *Postupné vyčíslování bez soustavy lineárních rovnic*) a univerzalita.
- Výhodou matematických způsobů řešení je jejich různorodost, kterou lze využít ve výuce matematiky. A to i z konstruktivistického hlediska, kdy žáci sami vymýšlejí různé strategie.

3.3 Výběr úloh do portfolia

Úlohy zařazené do portfolia byly vybírány z běžných a dostupných zdrojů, tj. gymnaziálních učebnic a sbírek úloh, případně z vysokoškolských skript. Zatímco v těchto zdrojích zpravidla nejsou úlohy dále členěny (kromě chemického hlediska, tj. na rovnice neredoxní, redoxní a iontové), pro účely této práce byly úlohy vybírány tak, aby je bylo možné zařadit do níže uvedených matematických kategorií, které odpovídají kapitolám práce.

- **Vyčíslování na základě jednoduchých poměrů:** úlohy v této části mají sloužit jako jednoduše vyčíslitelné rovnice, všechny mají tvar *jeden reaktant* $\rightarrow$ *více produktů* nebo *více reaktantů* $\rightarrow$ *jeden produkt*.
- **Postupné vyčíslování bez soustavy lineárních rovnic:** úlohy do této části byly vybrány tak, aby se z hlediska vytvořené soustavy lineárních rovnic jednalo o soustavu s počtem neznámých o jedna větší, než je počet rovnic. Jeden stupeň volnosti pak umožňuje pevnou volbu jednoho koeficientu a jednoznačné dopočítání zbylých. Více je tato problematika rozvedena v kapitole *Matematické principy a pojmy spojené s vyčíslováním chemických rovnic*.
- **Vyčíslování řešením soustavy lineárních rovnic:** úlohy v této kapitole byly voleny podle téhož klíče jako v předchozí kapitole, nicméně kvůli vzájemné (ne)provázanosti rovnic není možná metoda postupného vyčíslování. Více je tato problematika rozvedena v kapitole *Komentář k matematickému a chemickému řešení (P7–P9)*.

- **Nedourčené úlohy:** úlohy v této kapitole představují speciální případy z chemického i matematického hlediska, kritériem pro jejich výběr byla existence dvou a více stupňů volnosti z hlediska vytvořené soustavy lineárních rovnic.

3.4 Testování úloh v praxi

Vytvořené úlohy byly pilotovány a prezentovány v praxi s cílem získat následující informace:

- Jak žáci/studenti řeší předložené úlohy a jak hodnotí oba způsoby.
- Jak lze úlohy, respektive výběr úloh upravit.

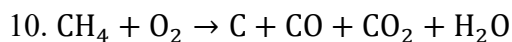
3.4.1 Kvinta osmiletého gymnázia

Vybrané úlohy byly pilotovány ve vyučovací hodině matematiky ve třídě pátého ročníku osmiletého gymnázia na Gymnáziu Jana Keplera ve školním roce 2024/2025 (bylo přítomno 25 žáků). V době pilotáže měli žáci již probraná témata chemického způsobu vyčíslování (v rámci výuky chemie) i řešení soustav lineárních rovnic s více než dvěma neznámými (v rámci výuky matematiky). Po stručném úvodu (5 minut) dostali žáci 25 minut k řešení úloh, během kterého bylo možné konzultovat řešení s přítomným vyučujícím, se spolužáky i s autorem bakalářské práce, závěr hodiny byl věnován rozboru náročnějších úloh (níže uvedené úlohy 4–6). Žáci dostali níže uvedené úlohy a byli instruováni, aby vyčíslili dané chemické rovnice jinak než chemickým způsobem (tedy pomocí matematických metod).

1. $\text{Fe} + \text{O}_2 \rightarrow \text{Fe}_2\text{O}_3$
2. $\text{CO} + \text{I}_2\text{O}_5 \rightarrow \text{I}_2 + \text{CO}_2$
3. $\text{C}_7\text{H}_5\text{O}_6\text{N}_3 \rightarrow \text{N}_2 + \text{H}_2 + \text{CO} + \text{C}$
4. $\text{FeS}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{SO}_2$
5. $\text{HCl} + \text{KMnO}_4 \rightarrow \text{KCl} + \text{MnCl}_2 + \text{Cl}_2 + \text{H}_2\text{O}$
6. $\text{Cu} + \text{HNO}_3 \rightarrow \text{Cu}(\text{NO}_3)_2 + \text{NO} + \text{H}_2\text{O}$

Bonus:

7. $\text{FeSO}_4 + \text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7 + \text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3 + \text{Cr}_2(\text{SO}_4)_3 + \text{K}_2\text{SO}_4 + \text{H}_2\text{O}$
8. $\text{H}_2\text{S} + \text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{S} + \text{SO}_2 + \text{H}_2\text{O}$
9. $\text{H}_2\text{S} + \text{KMnO}_4 + \text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{K}_2\text{SO}_4 + \text{MnSO}_4 + \text{S} + \text{H}_2\text{O}$



Výše uvedené úlohy byly vybrány podle těchto kategorií:

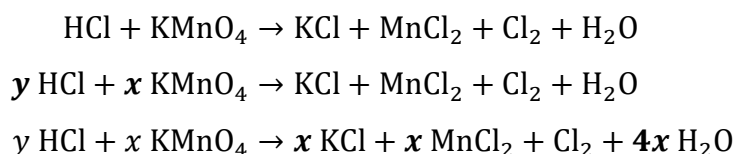
- Úlohy 1–2 jako jednoduše vyčíslitelné rovnice, úloha 3 spadá do stejné kategorie, obsahuje však více produktů (odpovídá kapitole *Vyčíslování na základě jednoduchých poměrů*).
- Úlohy 4–5 jako rovnice nevyžadující řešení na základě soustavy lineárních rovnic (odpovídá kapitole *Postupné vyčíslování bez soustavy lineárních rovnic*).
- Úloha 6 jako úloha, kterou bez sestavení soustavy lineárních rovnic nelze matematickými metodami vyřešit (odpovídá kapitole *Vyčíslování řešením soustavy lineárních rovnic*), bonusová úloha 7 odpovídá téže kategorii, jen obsahuje více chemických látek.
- Úlohy 8–10 jsou nestandardní, náročnější úlohy, které obsahují dva a více stupňů volnosti (odpovídají kapitole *Nedourčené úlohy*).

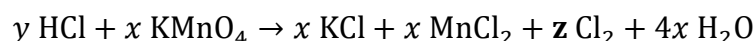
Podle původních očekávání žáci neměli problém vyřešit úlohy 1–2, úloha 3 byla pro některé náročnější, ale v závěru vyučovací hodiny ji vyřešili všichni přítomní žáci. Úlohy 4–5 vyřešila většina žáků a úlohu 6 pouze někteří žáci.

Žáci dopředu nedostali informace o charakteru úloh a následně byly sledovány jejich strategie řešení, mezi body hodné zmínění patří:

- Žáci často brali při řešení v potaz poměry počtů atomů na obou stranách rovnice (podobně jako je vysvětleno u *Příkladů 1–3* v této práci).
- Pouze malá část žáků sestavila soustavu lineárních rovnic (což nebylo omezující, dokud nezačali řešit úlohu 6).
- Nemalá část žáků kombinovala způsoby postupného dosazování a sestavení soustavy lineárních rovnic.

Poslední bod lze ilustrovat např. na řešení úlohy 5, níže je uveden postup jednoho z žáků, který reprezentuje uvedenou kombinaci přístupů:





$$y = 8x$$

$$2z = y - (x + 2x) = y - 3x$$

$$2z = 8x - 3x = 5x$$

$$z = \frac{5}{2}x$$

Od toho závěru již řešení vede ke správnému řešení, nicméně jde o pozoruhodný přístup založený na práci s poměry, volby koeficientů jako neznámých a následné řešení soustavy. Na konci vyučovací hodiny byl žákům nastíněn postup při řešení úlohy 9 jakožto nedourčené úlohy se dvěma parametry. Bonusové úlohy byly ponechány pro řešení zájemcům.

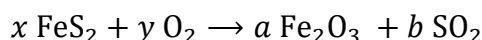
Žáci hodnotili matematické způsoby jako efektivní, přímočaré oproti chemickému řešení, nicméně někteří měli obtíže při práci se soustavou lineárních rovnic, která obsahuje více než dvě rovnice se dvěma neznámými. Na základě pilotáže nebyly úlohy ani jejich výběr nijak upraveny.

3.4.2 Třetí ročník bakalářského studia učitelství matematiky

V rámci výuky pro studenty třetího ročníku bakalářského studia matematiky se zaměřením na vzdělávání na Pedagogické fakultě UK byly úlohy uvedené níže součástí mého výstupu v rámci předmětu *Aplikace matematiky* v akademickém roce 2023/2024 a 2024/2025 v bloku zaměřeném na využití matematiky v chemii.

Studenti dostali níže uvedené rovnice k vyčíslení, na vyčíslení rovnic měli 20 minut času, po kterém následovalo společně komentované řešení na tabuli. Během řešení mohli svůj postup konzultovat mezi sebou, s autorem bakalářské práce i s vyučujícím. Dopředu zadané koeficienty je měly vést na matematické řešení.

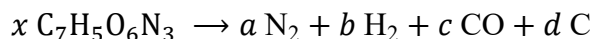
1. Vyčíslete chemickou rovnici reakce pyritu s kyslíkem:



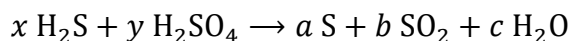
2. Vyčíslete chemickou rovnici popisující reakci chlóru a hydroxidu draselného:



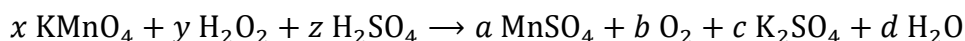
3. Vyčíslete chemickou rovnici popisující explozi TNT:



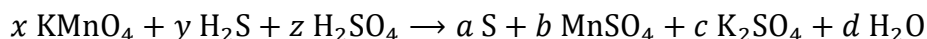
4. Vyčíslete chemickou rovnici reakce sulfanu s kyselinou sírovou:



5. Vyčíslete reakci peroxidu vodíku s manganistanem draselným v prostředí kyseliny sírové:



Bonus: Vyčíslete reakci sulfanu s manganistanem draselným v prostředí kyseliny sírové:



Úlohy byly vybrány zejména s ohledem na ilustraci rozdílu mezi chemickým a matematickým řešením (mj. v souvislosti s efektivitou) a pro další možnost dalšího matematického komentáře:

- Úlohy 1–3 představují rovnice, jejichž chemický způsob vyčíslení obsahuje určité obtížnosti (v případě úlohy 1 již zmíněná přítomnost dvou dílčích oxidací oproti jedné redukce, u úlohy 2 dochází k disproportionaci⁷, v úloze 3 nelze jednoduše odvodit oxidační čísla).
- Úloha 4 a Bonus představují úlohy obsahující dva stupně volnosti.
- Úloha 5 představuje reakci, která obsahuje pouze jeden stupeň volnosti, lze ji řešit metodou postupného dosazování.

Studenti byli instruováni vyčíslit dané chemické rovnice libovolným způsobem, přičemž byl kladen důraz jednak na možné využití ve výuce na střední škole, jednak na matematickou stránku řešení úloh (zejména v případě rovnic s dvěma stupni volnosti).

⁷ Redoxní reakce, při níž se týž prvek v jednom reaktantu zároveň oxiduje i redukuje. Obdobou je synproportionace, při níž je jeden prvek přítomen ve více reaktantech a přechází do téhož produktu, dochází zde u části k oxidaci, u části k redukci (Vacík, 2017).

Podle očekávání neměli studenti v kombinaci s chemií se zaměřením na vzdělávání problém úlohy vyřešit a preferovali chemický způsob, zatímco matematický způsob podobně jako v případě dříve zmíněné pilotáže byl většinou studentů oceňován pro přímočarost a možnost vyčíslovat rovnice bez chemických znalostí (efektivita matematického způsobu řešení byla podtržena konfrontací s obtížemi u chemického řešení prvních tří vybraných rovnic), jedinou obtížnou oblastí bylo sestavit a následně vyřešit soustavu lineárních rovnic.

V obou pilotážích byly využity výše uvedené úlohy pro jejich reprezentativnost, a protože se neobjevily žádné komplikace, nebyly učiněny žádné úpravy.

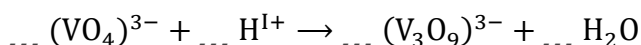
3.5 Prostor pro další směřování

Bakalářská práce představuje pouze výběr úloh zaměřených na vyčíslování chemických rovnic, nicméně metody zde představené jsou aplikovatelné i na další druhy. Mezi takové rovnice lze řadit:

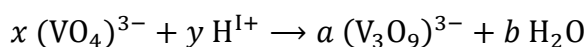
- iontové rovnice,
- rovnice s organickými sloučeninami.

3.5.1 Iontové rovnice

Takové rovnice obsahují ve svém zápisu navíc ještě ionty. Tato skutečnost vede k zavedení rovnice navíc, která se týká celkového náboje. Musí pak platit, že celkový náboj reaktantů je roven náboji produktů (z hlediska zápisu jsou pro celé nábojové skupiny použity arabské číslice, pro oxidační čísla dále římské číslice). Níže je uveden modelový příklad:



Řešení: Do rovnice umístíme neznámé jako stechiometrické koeficienty.



Pro každý prvek i náboj obou stran sestavíme rovnice:

V:	x	$=$	$3a$	
O:	$4x$	$=$	$9a$	$+ b$
H:		y	$=$	$2b$
náboj:	$-3x$	$+ y$	$=$	$-3a$

Je patrné, že se jedná o soustavu 4 lineárních rovnic o 4 neznámých, nicméně při řešení zjistíme, že rovnice má jeden stupeň volnosti. Za x v rovnici pro kyslík dosadíme jeho vyjádření pomocí a z rovnice pro vanad:

$$12a = 9a + b$$

$$3a = b$$

Dále platí:

$$y = 2b = 6a$$

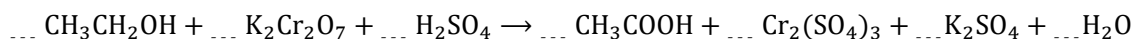
Z toho plyne řešení $(x, y; a, b) = (3, 6; 1, 3)$.

3.5.2 Rovnice s organickými sloučeninami

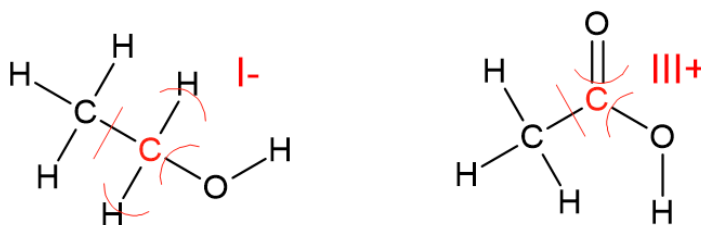
Tyto rovnice lze dále ještě rozdělit na dva případy, které se liší chemickým i matematickým způsobem řešení:

- **Organické sloučeniny jsou psány sumárními vzorci⁸.** V tomto případě nelze bez bližších znalostí o chemické struktuře sumárně zapsané sloučeniny aplikovat chemický způsob, nabízí se matematické metody (jako v *Příkladu 3*).
- **Organické sloučeniny nejsou psány sumárními vzorci.** V takovém případě je možné na základě struktury odvodit oxidační čísla a rovnici řešit na základě nich. Nevýhodou tohoto způsobu je nutnost znalosti nejen struktury daných organických látek, ale také vaznosti a elektronegativity. Jako efektivnější se proto jeví matematické metody.

Ilustrace druhého typu je uvedena níže na rovnici oxidace alkoholu na kyselinu octovou:

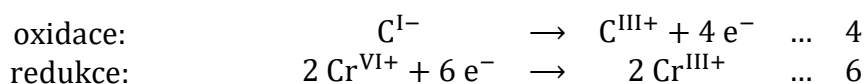


Chemické řešení: Nejprve je nutné identifikovat změny oxidačních čísel v organických sloučeninách (ethanol a kyselina octová), k tomu je nezbytné znázornit obě sloučeniny strukturním vzorcem (*Obr. 8*), elektrony chemické vazby přiřadit prvku s větší hodnotou elektronegativity a následně vypočítat formální náboj.



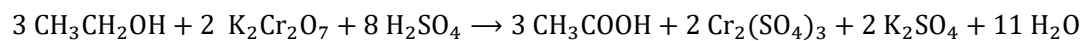
Obrázek 8 Odvození formálních nábojů ethanolu a kyseliny octové

Následně je možné pokračovat tak, jak bylo naznačeno v předchozích řešených příkladech zápisem rovnic pro oxidaci a redukci:



⁸ Typ vzorce v organické chemii, který dává informaci pouze o přítomnosti jednotlivých druhů atomů a jejich počtu, nikoliv o struktuře (Mareček & Honza, 2005). V práci je tento typ zastoupen v *Příkladu 3*.

Výměnou obou čísel a zkrácením dvěma jsou získány koeficienty pro kyselinu octovou (3) a pro síran chromitý (2), zbylé koeficienty lze snadno dopočítat:



Matematické řešení: Koeficienty lze získat s využitím soustavy lineárních rovnic, postup byl vysvětlen v předchozích kapitolách.

Závěr

Bakalářská práce *Matematické postupy vyčíslování chemických rovnic: sbírka řešených úloh* je pojata jako portfolio výukových materiálů. Úvodní kapitola *Teoretický základ* vysvětluje základní chemické a matematické pojmy a principy využívané ve zbytku práce. Následující kapitola *Sbírka řešených úloh* prezentuje dvanáct řešených úloh zaměřených na různé matematické přístupy k vyčíslování chemických rovnic, jejichž obtížnost roste. Z toho důvodu lze některé postupy využít v běžné výuce, zatímco jiné nabídnout např. žákům volitelných seminářů jako rozšiřující učivo. Jmenovitě jde o tyto postupy:

- *Vyčíslování na základě jednoduchých poměrů,*
- *Postupné vyčíslování bez soustavy lineárních rovnic,*
- *Vyčíslování řešením soustavy lineárních rovnic,*
- *Nedourčené úlohy.*

Součástí každé kapitoly jsou dále obdobné úlohy k procvičení. V rámci prezentace matematických přístupů jsou diskutovány jejich klady a zápory a jsou porovnávány s běžným chemickým způsobem řešení.

Poslední kapitola *Reflexe portfolia výukových materiálů* popisuje motivaci a genezi vzniku portfolia, proces výběru jednotlivých úloh i ověření vybraných materiálů ve výuce na gymnáziu a vysoké škole.

Motivací pro vznik portfolia bylo vytvořit studijní text sloužící nejen vyučujícím středoškolské matematiky, potažmo chemie, ale také jejich žákům nebo studentům učitelských oborů. Sbírká předpokládá znalosti základů středoškolské chemie a matematiky a slouží jako samonosný zdroj pro případné samostudium.

Vzhledem k mezioborovému charakteru a pojetí práce věřím, že bude přínosem nejen pro výše zmíněné kategorie čtenářů a že přinese inspiraci do výuky matematiky i chemie.

Seznam použitých informačních zdrojů

Barto, L., & Tůma, J. (2022). *Lineární algebra*.

https://www.karlin.mff.cuni.cz/~barto/LinAlg/skripta_la7.pdf

Blakley, G. R. (1980, 28/03). *Chemical Equation Balancing: A General Method which is Quick, Simple, and has Unexpected Applications*. Symposium on the Goals of General Chemistry, Part III, Houston.

Brachtlová, I. (2022). *Mezipředmětové vztahy ve výuce chemie – matematika. Aplikace matematiky v učivu chemie na střední škole*. [Diplomová práce, Univerzita Palackého v Olomouci].

<https://theses.cz/id/98rjts/#:~:text=V%20pedagogick%C3%A9m%20v%C3%BDzkumu%20je%20vy%C5%A1et%C5%99ov%C3%A1no%2C%20zda%20%C5%BE%C3%A1ci%20p%C5%99i,-%20u%C5%BEit%C3%AD%20chemick%C3%BDch%20vzorc%C5%AF%20nebo%20matematick%C3%BD%20postup%20%C5%99e%C5%A1en%C3%AD>

Distler, P., Drtinová, B., & Motl, A. (2022). *Výpočty z obecné chemie (nejen) pro jaderné chemiky*. ČVUT.

Housecroft, C., & Sharpe, A. (2014). *Anorganická chemie*. VŠCHT Praha.

Indra, I. (2008). *Vyrovňování chemických rovnic: Tvorba e-learningových studijních materiálů* [Bakalářská práce, Vysoké učení technické v Brně].

<https://dspace.vut.cz/items/995371ec-d45f-42a2-b47d-6ea06b468879>

Kopecká, R. (2023). *Podpurný materiál k předmětu obecná chemie se zaměřením na chemické výpočty* [Bakalářská práce, Univerzita Palackého v Olomouci].

https://theses.cz/id/jsiqgt/Podpurny_material_k_predmetu_obecna_chemie_se_zam

erenim_n.pdf?isslret=p%C4%9Bti%3B;zpet=%2Fvyhledavani%2F%3Fsearch%3Dprogram%20pet%20p%26start%3D38;info=1

Kraina, M. (2016). *Automatické vyčíslování chemických rovnic z fotografie* [Bakalářská práce, Vysoké učení technické v Brně].

<https://dspace.vut.cz/server/api/core/bitstreams/6df10622-e465-43e4-87d6-e947cf61525c/content>

Mareček, A., & Honza, J. (2001). *Chemie: Sbírka příkladů pro studenty středních škol*. Nakladatelství Olomouc.

Mareček, A., & Honza, J. (2005a). *Chemie pro čtyřletá gymnázia 1. Díl*. Nakladatelství Olomouc.

Mareček, A., & Honza, J. (2005b). *Chemie pro čtyřletá gymnázia 2. Díl*. Nakladatelství Olomouc.

McMurry, J. (2015). *Organická chemie*. VŠCHT Praha.

Mička, Z., Havlíček, D., Lukeš, I., Mosinger, J., & Vojtíšek, P. (2003). *Základní pojmy, příklady a otázky z anorganické chemie*. Nakladatelství Karolinum.

Mička, Z., & Lukeš, I. (1998). *Anorganická chemie II.: Systematická část*. Nakladatelství Karolinum.

Ramasami, P. (2003). A Concise Description of an Old Problem: Application of Matrices to Obtain the Balancing Coefficients of Chemical Equations. *Journal of Mathematical Chemistry*, 34(1/2), 123–129.

<https://doi.org/10.1023/A:1025150130276>

Robová, J. (2014). *Sbírka aplikačních úloh ze středoškolské matematiky*. Prometheus.

Schwarzbacher Zeman, T. (2017). *Využití matematických znalostí v chemických výpočtech*

[Bakalářská práce, Univerzita Karlova].

https://dspace.cuni.cz/bitstream/handle/20.500.11956/84660/BPTX_2014_2_11410_0_383772_0_164030.pdf?sequence=1&isAllowed=y

The Essential Chemistry Industry. (2016).

<https://www.essentialchemicalindustry.org/chemicals/sulfuric-acid.html>

Vacík, J. (2017). *Obecná chemie*. Přírodovědecká fakulta UK.

Vaňková, B. (2017). *Využití matematických výpočtů v učivu chemie na ZŠ* [Diplomová

práce, Masarykova univerzita]. https://is.muni.cz/th/e3euc/DP_verze_pro_tisk.pdf

Vyjádření k využití nástrojů umělé inteligence

Při zpracování bakalářské práce nebyly využity žádné nástroje umělé inteligence.