## Вещества. Вещества простые и сложные. Физические и химические явления. Закон сохранения массы.

**Что такое химия и почему она важна?** Любая форма материи в мире животных, растений и минералов состоят из элементов и их соединений. Известно более сотни химических элементов; далеко не все из них широко распространены. Подавляющее большинство элементов встречается в природе, но некоторые, такие как технеций или кюрий, получены искусственно.

Задача химии – изучить свойства элементов, т.е. узнать, как они взаимодействуют друг с другом, и какие химические превращения претерпевают их соединения.

Живые (биологические) системы состоят в основном из углерода, водорода, азота и кислорода. Правильное понимание биологии, и в частности молекулярной биологии, должно быть основано на детальном знании структур, свойств и реакционной способности биомолекул. Эти фундаментальные знания приобретаются при изучении химии.

Химическая и физическая наука также тесно взаимосвязаны. Например, сверхпроводники – соединения, обладающие ничтожно малым электрическим сопротивлением, проявляется это свойство в основном при очень низких температурах, вследствие этого использование сверхпроводников для широкого применения осложнено, и необходим синтез новых соединений обладающих данным свойством, работающих при обычных температурах. Таким образом, физик работает с данными соединениями и их свойствами, но прогресс в данной области науки возможен только благодаря химическому синтезу и изучению химического состава этих материалов.

Химия играет ключевую роль среди естественных наук. Она дает фундаментальные знания, необходимые для таких наук, как материаловедение, экология, физика, информатика. Вот почему надо изучать химию на первом курсе высших учебных заведений. В любой области науки необходимо понимание основных химических концепций.

Проследить возникновение химии у истоков цивилизации – задача крайне трудная. Согласно исследованиям Бертло и Штрунца химией в древности называли искусство превращать обыкновенные металлы в золото или серебро и их сплавы.

В соответствии с классификацией принятой большей частью историков химии, мы ожжем выделить следующие эпохи развития данной науки:

1. Период предалхимический от начала цивилизации до IV в. нашей эры (характеризуется отсутствием понятий обобщающих практические навыки).
2. Период алхимический от IV в. нашей эры до XVI в. (наличие философского камня, поиски эликсира долголетия и т.д.).
3. Период объединения химии XVI - XVIII вв. (развитие химии газов (Бойль, Лавуазье), медицинской химии (Парацельс)).
4. Период количественных законов химии охватывает первые 60 лет XIX в. (основные законы химии).
5. Современный период длится с 60х годов XIX в. по настоящее время. Это золотой период химии, когда менее чем за сто лет были разработаны периодическая таблица, теория валентности, теория ароматических соединений и стехиометрия, развились и углубились методы исследования строения веществ, огромные успехи достигнуты в синтетической химии.

Химия как наука родилась в 1660х годах 17 века начиная с работ Роберта Бойля. На химию Бойль имел совершенно особый взгляд; он считал ее наукой способной добиться самостоятельности и от алхимии, занимающейся извлечением и изучением металлов, и от медицины, использовавшей химию как метод получения лекарств. «Я смотрю на химию … не как врач, не как алхимик, а как должен смотреть философ…».

Концепцию химии как науки можно отразить в следующей схеме:

Предалхимический период

Алхимический период

1660

Учение о составе

Учение о структуре

Учение о химическом процессе

Эволюционная химия

**ИЮПАК.** Поскольку химия как наука постоянно развивается, совершенно необходимы определенные правила для структурирования материала по единому образцу. ИЮПАК – это Международный союз теоретической и прикладной химии. Данная организация занимается созданием единой номенклатуры химических соединений, решением организационных вопросов определением названий элементов и т.д. и т.п. Мы по мере изучения материала постоянно будем сталкиваться с рекомендациями ИЮПАК и выполнять их. Введем с вами первоначальные понятия. Без которых мы не можем начинать изучение химии.

*Материя* – это весь окружающий нас мир, все бесконечное множество су­ществующих в мире объектов и систем, форм движения, отноше­ний и взаимодействий. *Движение -* это свойство и способ существования материи. Движение происходит в *пространстве* и *времени,* которые являются всеобщими формами существова­ния материи. Пространство и время не существуют вне материи независимо от нее.

Человек может изучать только движущуюся материю, так как только движу­щаяся материя дает сигналы и информацию о своих свойствах. Это позволяет описывать материю и движение при помощи пространствен­ных и временных характеристик.

**Пространственные характеристики** вещества: положение тел относительно друг друга, их размеры, тип симметрии, межъядер­ные расстояния, углы между связями и т. п.

**Временные характеристики**: длитель­ность процессов, продолжительность между моментами совершения событий, ритмичность процессов, период полупревращения, константа скорости и т. п.

Любой материальный объект обладает *пространственно-временными свойствами.* Можно выделить следующие общие харак­теристики известных в настоящее время элементарных частиц: масса, заряд, спин, время жизни.

*Масса - одна* из основных характеристик материи. *Те виды материи, дискретные частицы которых имеют конечную массу покоя, называются веществом.* Веществом явля­ются такие элементарные частицы, как протон, нейтрон, элек­трон и др.

Таблица 1.

Свойства субатомных частиц.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Свойства | протон | электрон | нейтрон |
| Заряд, Кл | +1,602⋅10-19 | -1,602⋅10-19 | 0 |
| Относительный заряд | 1 | -1 | 0 |
| Масса покоя, кг | 1,673⋅10-27 | 9,109⋅10-31 | 1,675⋅10-27 |
| Относительная масса | 1837 | 1 | 1839 |

*Те виды материи, дискретные частицы которых не имеют массы покоя, называются полями.* Таковы электромагнитное и гравитационное поля. Квант электромагнитного поля называ­ется *фотоном.* Масса покоя фотона равна нулю, а скорость равна скорости света, и невозможно найти систему отсчета, в которой фотон покоится. Поле и вещество находятся в неразрывной связи друг с дру­гом. Так, частицы вещества связаны между собой при помощи поля, будь то ядерное поле, связывающее протоны и нейтроны в ядре, электромагнитное поле, притягивающее два магнита, или же поле тяготения.

*Заряд* элементарных частиц определяет их электромагнитное взаимодействие. Имеется два вида электрических зарядов, кото­рые по из взаимному притягиванию или отталкиванию условно считают положительными и отрицательными. Электрону припи­сывают отрицательный заряд, а заряды других частиц определя­ются по их отношению к заряду электрона. Электроны имеют наименьший электрический заряд *е* = - 1,602·10-19 Кл. Заряд протона положителен и численно равен заряду электрона. Эле­ментарная частица и ее античастица имеют заряды противопо­ложных знаков.

*Спин - определяет* собственный момент количества движения элементарной частицы, не связанный с ее перемещением как целого. Спин измеряется в единицах по­стоянной Планка, и равен некоторому характерному для каждого сорта частиц целому или полуцелому числу, называемому *спино­вым квантовым числом,* умноженному на постоянную Планка. Спин фотона равен единице; спины электрона, нейтрона и прото­на равны половине.

Стабильность частицы - ее время жизни (τ) - количественно характеризует ее устойчивость в различных состояниях. Так, все перечисленные, за исключением нейтрона, частицы являются ус­тойчивыми. Среднее время жизни электрона в свободном состоя­нии τ > 5 . 1021 лет, а протона τ > 2 . 1030 лет. Нейтрон устойчив только в составе стабильных атомных ядер. Свободный, находящийся в вакууме нейтрон нестабилен. Среднее время его жизни τ ≈ 16 мин; он распадается на протон, электрон и антинейтрино.

Нейтрино и фотон - устойчивые элементарные частицы. Некото­рые другие частицы живут только около 10-20 с. Соотношением чисел протонов и нейтронов в ядре определя­ется его устойчивость и, в конечном счете распространенность элемента в природе.

Количественно движение измеряется *энергией.* **Закон сохранения и превращения энергии формулируется так: *энергия не творится и не исчезает, любая форма энергии способна превращаться в эквивалентное количество энергии любой другой формы.***

**Закон сохранения материи в применении к химическим про­цессам формулируется так: *масса веществ, вступающих в хими­ческую реакцию, всегда равна массе веществ, образующихся в ре­зультате реакции.***

А. Эйнштейн показал, что между массой тела и его энергией существует взаимосвязь, выражаемая формулой Е=mc2; где Е-энергия; m-масса; с-коэффициент пропорциональ­ности, равный скорости света в вакууме. Это уравнение может быть представлено в виде ∆m = ∆Е/с2, что можно сформулировать так: **каждое тело, изменяющее энер­гию*,* одновременно изменяет в эквивалентном количестве свою массу*.* Если тело теряет (испускает) энергию, то одновременно имеет место эквивалентное уменьшение массы и наоборот.**

Ввиду чрезвычайно большого численного значения с2-квад­рата скорости света - даже крайне малые изменения массы должны привести к огромным изменениям энергии. При сообщении телу энергии в 1 Дж его масса увеличивается на 1,11⋅10-14 г (что не обнаруживается современными измери­тельными приборами). Если же произошло уменьшение массы продуктов реакции на 1 г по сравнению с массой исходных веществ (в ядерных реакциях или в реакциях между элементарны­ми частицами), то выделилось эквивалентное количество энер­гии, равное 9·1013 Дж:

1 г = 9·1013 Дж = 5,62·1023 эВ; 1 Дж = 1,11·10-14 г.

В спектроскопии и в атомной физике принято энергии выражать в электрон­вольтах (эВ). Электрон вольт-единица энергии, равная энергии, которую приоб­ретает частица с зарядом, равным заряду электрона, проходя разность потенци­алов 1 В. 1 эВ = 1,60219 .10- 19 Дж. 1 эВ на 1 моль соответствует 96,48 кДж.

Способность частиц к взаимодействию приводит к образова­нию агрегатов частиц и материальных объектов, которые всегда обладают упорядоченностью и системной организацией. Упоря­доченность любых объектов проявляется во взаимодействии их элементов, что вызывает взаимное изменение исходных тел. Это мы наблюдаем, в частности, при прохождении химических реак­ций. При взаимодействиях образуются системы, в которых связь между составными частями - элементами - более прочна, чем связь элементов системы с окружающей средой или с элементами других систем. Человек может познавать только объекты, об­ладающие системной организацией, и изучать процессы, совер­шающиеся между системами или между элементами систем.

**Строение вещества.**

Свойства вещества, как вида материи, состоящего из дискретных частиц, имеющих массу покоя, определяются типом и количеством объединившихся частиц и описываются периодическим законом: ***свойства химических элементов являются периодической функцией положительного заряда ядра атомов элементов.***Напомним, что *химический элемент-это* вид атомов с положительным одинаковым зарядом ядра. Отсюда вытекает важнейшее положение химии: *свойства элементов определяются зарядом ядра.* Заряды ядер, в свою очередь, связаны с их строением, так как только определенное сочетание числа протонов и нейтро­нов может приводить к существующим устойчивым ядрам с из­вестной атомной массой. А том представляет собой сложную систему находящихся в дви­жении и взаимодействии элементарных частиц.

Экспериментально установлено, что каждый атом состоит из двух областей, несущих противоположные заряды. Заряд области, где сосредоточена поч­ти вся масса атома, условно принято считать положительным. Эта область названа *ядром* атома. На некотором расстоянии от ядра располагаются области с противоположным зарядом - так называемые электронные орбитали. Орбитали - это области определенной вероятности на­хождения электрона. Заряд электронов принято считать отрица­тельным. Область положительного заряда атома – ядро - не­смотря на преобладание ее массы очень невелика по размерам. Носителем положительного заряда ядра является *протон.* За исключением ядра атома водорода, ядра состоят не только из протонов. Согласно протонно-нейтронной теории атомных ядер они содержат также и *нейтроны.* Нейтрон и протон­ы - частицы, почти одинаковые по массе, но нейтрон не обладает зарядом. Число протонов в ядре равно заряду ядра, если выражать заряд в единицах заряда электрона. Сумма числа протонов и чис­ла нейтронов равна массовому числу *А,* т. е. массе атома, выра­женной в единицах атомных масс и округленной до целых еди­ниц. **Масса одного атома может быть определена делением мас­сы 1 моль атомов элемента на постоянную Авогадро.** Масса атома чрезвычайно мала. Обычно ее выражают в *атомных еди­ницах массы* (а. е. м.). В качестве атомной единицы массы приня­та 1/12 массы атома изотопа углерода 12С.

Ядра с одинаковым числом протонов Z, но различным числом нейтронов называются *изотопами.* Например, бор состоит из двух изотопов 105В И 115В. Атомная масса бора равна 10,811. Вычислим содержание в боре каждого изотопа, приняв процентное содержание 105В за *а1,* а 115В за *а2* и зная, что *а1+а2=* 100%. Получаем 18,9% 105В и 81,1% 115В.

Протоны и нейтроны в ядре атома связаны между собой ядерными силами; природа этих сил не выяснена, но количествен­но их можно оценить. Энергия разрозненных протонов и нейтро­нов больше их энергии в составе атомного ядра. Образование ядра из этих частиц сопровождается выделением энергии. В соответствии с. соотношением Эйнштейна Е = mс2 масса ядра должна быть меньше суммы масс составляющих его частиц. Эта разность называется ***дефектом массы.***Чем больше дефект массы, т. е. чем больше выделилось энергии при образовании ядра, тем оно устойчивее. Например, ядро атома лития 7Li образовано из четырех нейтронов и трех протонов. Сумма масс частиц равна: 4⋅1,008665+3 ⋅1,007276=7,056488 а. е. м. Масса ядра атома лития равна 7,01601 а. е. м., откуда дефект массы 0,04048 а. е. м.

В расчете на 1 моль ядер атомов лития это соответствует выделению энергии: Е=0,04048 а. е. м. ⋅1,49⋅10-10 Дж ⋅ 6,02⋅1023 =0,36⋅1013 Дж/моль.

Образование атомного ядра из нейтронов и протонов сопро­вождается выделением энергии. По количеству выделившейся энергии можно судить об энергии связи между частицами: чем больше выделяется энергии, тем устойчивее ядра. ***Энергию связи***вычисляют делением величины энергии, определенной по дефекту массы, на массовое число. Энергия связи показывает, какая часть дефекта массы и соот­ветствующей ему выделившейся энергии приходится на одну частицу. Устойчивость атомного ядра связана с соотношением в нем числа нейтронов и протонов. Массовые числа атомов до 42 почти вдвое больше заряда ядра, число нейтронов в них равно числу протонов или меньше его. У более тяжелых элементов число нейтронов преобладает над числом про­тонов. Несмотря на то что нейтрон не имеет заряда, взаимодействие протонов и нейтронов играет ог­ромную роль при образовании устойчивых ядер.

Распростра­ненность атомов в земной коре связана с устойчивостью атом­ных ядер: чем устойчивее ядро, тем больше содержание атомов в земной коре. Сопоставление числа протонов и нейтронов в ядре с содержа­нием атомов в земной коре позволило обнаружить интересные закономерности.

**Оказалось, что в земной коре наи­более распространены изотопы с четным зарядом ядра и четным массовым чис­лом, т. е. содержащие четные числа про­тонов и нейтронов. На втором месте находятся изотопы с нечетным зарядом ядра и нечетным массовым числом, т. е. содержащие четное число нейтронов и не­четное число протонов. На долю осталь­ных атомных ядер приходится около 1 %.**

Чрезвычайно ярко подобная за­кономерность проявляется в семействе лантаноидов. У лантаноидов ясно обнаруживается большая распространенность элементов с четными порядковыми но­мерами. Это свойство ядер объясняется такой моделью ядерных обо­лочек, когда они строятся по аналогии с электронными оболоч­ками или энергетическими электронными уровнями. Согласно этой модели в ядре существуют энергетические уровни протонов и нейтронов, заполняемые парами протонов и нейтронов с анти­параллельными спинами. Поэтому при четном числе протонов и нейтронов ядро более стабильно.

**Исторические модели строения атома.**

1. Модель атома Дальтона (1805): атомы элемента представлялись одинаковы­ми шарообразными частицами; гипотеза без экспериментального обоснования.

2. Модель атома «сливовый пудинг» Томсона (1904): атом как шарообразная частица, заряжен­ная положительным электричеством, в которой равномерно распределены отрицательно заряженные электроны; экспериментальные основания­, электрический заряд частиц (изучение потока электронов, каналовых лучей).

3. Модель атома Резерфорда (1911): атом состоит из положительно заря­женного ядра и отрицательно заряженных электронов, которые вращаются вокруг ядра в оболочке атома; экспериментальные основания - опыты с рассеянием а-частиц в золотой фольге.

4. Модель атома Бора (1913): атом состоит из положительно заряженного ядра и отрицательно заряженных электронов, которые имеют определенную энергию и без потери энергии могут двигаться в оболочке атома только по определенным орбитам; экспериментальные основания - спектры атомов водорода, использование первоначальной квантовой теории.

5. Модель атома Бора-Зоммерфельда (1916): усовершенствование моде­ли атома Бора: движение электронов происходит не по круговым, а по эл­липтическим орбитам; экспериментальные основания - тонкая структура атомных спектров.

6. Квантово-механическая модель атома (1926): описывает состояние ато­ма посредством математических функций; электроны находятся в атомной оболочке в соответствии с уровнем их энергии в местах наибольшей вероят­ности их пребывания - на орбиталях; возникла после исследований Гейзен­берга, Бора, Шрёдингера и др.; экспериментальные основания – волновая природа электрона, дуализм волна-частица.

**КОЛЛИЧЕСТВЕННЫЕ ЗАКОНЫ АТОМНО-МОЛЕКУЛЯРНОЙ ТЕОРИИ**

Количественное (по массе или объему) изучение многих реак­ций и объяснение результатов эксперимента приводит к так называемым *стехиометрическим законам,* подтверждающим атомно-молекулярное учение. Исторически именно эти законы утвердили в химии атомно-молекулярное учение. Изучение массовых соотношений, в которых одни вещества соединяются с другими, привело к **закону эквивалентов *отношения масс, вступающих в химическую реакцию веществ, равны или кратны мольным массам их эквивалентов.*** *Эквивалентом* называется некоторая реальная или условная химическая частица, которая может присоединять или выделять в реакции один атом или ион водорода. Единица количества эквивалента - моль. Масса 1 моль эквивалента - это мольная молярная масса эквивалента. *Мольной массой эквивалента* (или *эквивалентной массой эле­мента)* называют массу элемента, которая присоединяет или замещает в соединении 1,008 массовых частей водорода или 8,000 весовых частей кислорода (или 12 массовых частей углерода).

Экспериментально найти мольную массу эквивалента неслож­но: следует определить массовое количество элемента, соединя­ющегося или с *1,008* массовыми частями водорода, или с 8 мас­совыми частями кислорода. Например, при окислении 0,253 г металлического магния получено *0,420* ок­сида магния. Следовательно, 0,253 г Mg прореагировало с 0,420-0,253=0,167 г кислорода. Узнаем количество магния, которое прореагирует с 8 г кислорода, воспользовавшись пропорцией:

0,253 г магния - 0,167 г кислорода

*х* « » - 8 « » г, х = 12,1. Полученное число и есть мольная масса эквивалента магния.

Многие химические элементы образуют друг с другом более одного соединения. **Закон кратных отношений следует формулировать следу­ющим образом: *если два элемента образуют друг с другом не­сколько соединений* с *молекулярной структурой, то на одно и тоже массовое количество одного из них приходятся такие количе­ства другого, которые относятся между собой как целые числа.***Этот закон подтверждает дискретность вещества, а также то, что все атомы одного химического элемента одинаковы и об­ладают строго определенной массой.

**Закон объемных отношений: *объемы вступающих в ре­акцию газов относятся друг к другу, а также к объемам получа­ющuхся газообразных продуктов как небольшие целые числа****.* Так, один объем водорода без остатка реагирует с одним объемом хлора, образуя два объема хлороводорода. Объемы прореагировавших и получающегося газов относятся друг к дру­гу как 1:1:2. На основании закона кратных отношений можно предполо­жить, что одинаковые объемы разных газов (при равных темпе­ратурах и давлении) содержат одинаковое число атомов. Это предположение объясняет, почему один объем водорода реагиру­ет с одним объемом хлора, но совершенно непонятно, почему образуется не один объем хлороводорода, а два, т. е. почему в данной реакции объем системы не изменяется. Такое проти­воречие возникает для большинства реакций между газами, будь-то реакции между водородом и кислородом или реакции между азотом и кислородом с образованием различных оксидов азота.

Для объяснения противоречий закона объемных отношений Авогадро предположил, что простые газы - водород, кислород, азот, хлор и др.- со­стоят не из отдельных атомов, а из молекул, в каждую из которых входят по два одинаковых атома *(это* гипотеза Авогад­ро, ее идея была высказана еще Ломоносовым). **Закон Авогадро: *в равных объемах любых газов* (независи­мо от того, из какого числа атомов состоят молекулы) *при одинаковой температуре и одном и том же давлении содержится равное число молекул.***Во всех реакциях с водородом, кислородом, азотом, хлором и другими простыми газами объем продукта никогда не бывает больше, чем удвоенный объем про реагировавшего газа. Из этого следует, что молекулы простых газов состоят из двух атомов каждая. Основываясь на законе Авогадро, можно определить, во сколько раз молекула одного газообразного вещества тяжелее молекулы другого. **D = M1/M2.**Отношение D называется *относительной плотностью* первого газа по второму и показывает, во сколько раз одна молеку­ла первого газа тяжелее молекулы второго. Для разных веществ массы 1 моль вещества различны, но число молекул в - каждом моле вещества одно и то же и составляет постоянную Авогадро **N=6,02⋅1023.** Отсюда следует, что для веществ в газообразном состоянии при одинаковых условиях *(Т, р)* объемы 1 моль вещества одинаковы. Объем, занимаемый молем газа при нормальных условиях *(Т=* 273 К, *р=* 101 325 Па), равен **22,4 л.**

Обычно определяют плотность газа по воздуху. Молярная масса 28,9 *г/моль.*

**Закон постоянства состава** его исторически устаре­вшей формулировке утверждает количественную определенность каждого химического соединения: *каждое химическое соединение независимо от способа его получения всегда имеет один и тот же состав.* Сейчас трудно оценить значение этого закона для развития химии. Первое время после его открытия этот закон несомненно способствовал развитию препаративной химии, однако впослед­ствии сильно затормозил изучение большого класса веществ, ему не подчиняющихся. Только в последнее время началось широкое исследование и практическое использование достижений химии соединений переменного состава.

Все газообразные вещества действительно имеют определенный состав неза­висимо от способа их получения. Например, диоксид углерода, полученный любым способом:

С (к)+02 (г)=С02 (г) 2СО (г) + 02 (г) = 2С02 (г)

2СН4 (г)+402 (г)=4Н2О (г)+ 2С02 (г)

СаСО3 (к)=СаО(к)+С02 (г)

СаСО3 (K)+2HCI (р-р) =CaCI2 (р-р)+ Н2О(Ж)+С02 (г)

С02 (к)=С02(г)

всегда имеет один и тот же состав и обладает всегда одними и теми же свойствами. Если получить оксид железа FeO - его обычно называют вюститом - различными методами, то обнаружится, что продукт будет иметь состав и свойства (например, плотность, электрическую проводимость, цвет, реакционную способность, температуру плавления и т. п.), разные в зависимости от способа получения. При этом состав оксида железа может изменяться в интер­вале FeOl,02 - FeOl.19.

Открытие и исследование соединений переменного состава потребовало введения ограничивающих условий в закон кратных отношений и закон постоянства состава. Теперь **закон постоян­ства состава следует формулировать следующим образом: *хими­ческие соединения* с *молекулярной структурой имеют один и тот же состав и свойства независимо от способа получения; химичес­кие соединения в кристаллическом и жидком состояниях имеют один и тот же состав только при строгом соблюдении постоян­ными всех условий эксперимента.***

**Закон изоморфизма Митчерлиха. Одинаковое число атомов соединенное одним и тем же способом, дает одну и ту же кристаллическую форму, которая не зависит от химической природы атомов, а зависит лишь от их числа и положения.**

**Закон удельных теплоемкостей Дюлонга и Пти. Атомы элементов имеют одинаковую теплоемкость, или же атомные теплоемкости элементов имеют одну и туже величину. Для определения атомных весов элементов надо было разделить определенную удельную теплоемкость элемента на константу 6,25.**

**Закон электролиза Фарадея. Количество вещества разлагающегося при прохождении электрического тока через раствор электролита, пропорционально количеству электричества.**

**Закон постоянства количества тепла Гесса. При химическом процессе выделяется всегда одно и то же количество тепла не зависимости от того, протекает ли процесс в одну стадию или в две и более; т.е. количество тепла выделяющегося при химическом процессе не зависит от пути процесса, а зависит лишь от конечного и начального состояния системы.**

**Закон атомов Канницаро. Различные количества одного и того же элемента, содержащегося в различных молекулах, являются целыми кратными одного и того же количества, которое выступая всегда не раздельно, должно с полным основанием называться атомом.**

***Валентность.*** *В*алентность есть количественная характеристика химического поведения атома. Ее можно определить как способность атома элемента присоединять к себе (или замещать в молекулах различных соединений) определенное число атомов других элементов.

Валентность элемента в данном соединении можно определить, если известны его атомная масса и мольная масса эквивалента, из соотношения:

Валентность = Атомная масса/мольная масса эквивалента.

Роль стехиометрических законов в науке исключительно вели­ка, так как они исторически явились базой современного учения о строении вещества. Благодаря им, мы имеем представление об атомах как пределе делимости вещества и о молекуле как предельном количестве вещества, обладающем теми же химическими свойствами, что и все вещество. Следует иметь в виду, что молекуле можно приписать на основании общности состава те же свойства, что и у всего вещества, но большинство свойств вещест­ва определяется именно благодаря объединению в нем большого количества молекул. Мы уже знаем, что нельзя говорить о темпе­ратуре одной молекулы. Точно так же нельзя говорить о размерах одной молекулы, ее плотности, ее теплоемкости, цвете и т. п.

Даже такие главнейшие характеристики молекулы, как межъя­дерные расстояния, энергии связей, углы между связями и др., существенно изменяются в зависимости от того, изолирована молекула (в газовой фазе) или находится во взаимодействии (в жидкости или в кристалле). Заметим, что термин «атомная масса» неточен. Правильнее говорить мольная масса атомов элемента *или,* сокращенно, «мольная масса данного элемента».

**ПОВЕДЕНИЕ ЭЛЕКТРОНА В АТОМЕ**

Стехиометрические законы и вытекающие из них представле­ния о валентности дают косвенное указание на сложность атома. Атом представляет собой систему из ядра и некоторого числа электронов, равного числу протонов, распределенных в пространстве вокруг ядра. Современная теория строения атома основана на законах, описывающих поведение микрообъектов. Представление о поведении электронов как микрочастиц ос­новано на следующих трех главнейших положениях: 1) квантовый характер энергетических изменений; 2) двойственное корпускулярно-волновое поведение; 3) неопределенность положения и скорости (если их измерять одновременно).

**Атомы и атомная структура.**

Классическое описание строения атом, (на основании законов Ньютона) было сформулировано во всех исторических моделях строения атома, включая модель Резерфорда. Начиная с модели Нильса Бора, мы говорим уже о квантовой теории строения атома. В атоме Бора электроны вращаются вокруг ядра по кольцевым, планетарным орбитам. Основное предположение, отличавшее модель Бора от предыдущих моделей в том, что энергия электрона на орбите остается постоянной и единственно возможной для данной орбиты и каждой орбите соответствует своя энергия. В рамках классической механики, электрон не может двигаться по кольцевой орбите, если нет силы удерживающей его на ней; если нет силы притяжения, он сойдет с орбиты (мячик на веревке). В атоме Бора центробежная силы, пытающаяся увести электрон с орбиты, точно равна силе притяжения между отрицательно заряженным электроном и положительно заряженным ядром. Таким образом электрон остается на некотором расстоянии от ядра. В модели Бора заложено несколько орбит с определенным дискретным значением энергии. Данная модель во многом упрощала понимание природы электрона и атома, и соответствовала новейшим открытиям того времени. Дискретность значений внутренней энергии электронов и поглощение и испускание квантов энергии - были сформулированы Бором (1913) в виде двух постулатов.

**Первый постулат Бора**. Атомы могут существовать, не изменяя своей энергии, т. е. не излучая и не поглощая ее, только в определенных состояниях, которые образуют дискретный ряд значений энергии Е1, Е2, Е3, Ен причем атом, испуская или поглощая энергию, скачкообразно переходит из одного состоя­ния в другое.

**Второй постулат Бора.** При переходе из одного состоя­ния в другое атом испускает или поглощает один квант энергии, частота которого определяется из уравнения ∆E=hv

Постулаты Бора были сформулированы для модели вращающегося электро­на, от которой сейчас отказались.

В это время Макс Планк приходит к идее дискретных, квантованных энергий электромагнитного излучения и установил соотношение между энергией и частотой электромагнитного излучения Е = hν. В 1927 году Луи де Бройль доказал, что электрон, как и любая движущаяся частица, обладает корпускулярно-волновым дуализмом, т.е. обладает рядом свойств, которые одновременно присущи и волнам и частицам. Дифракция и интерференция света говорят о его волновом харак­тере, а явление фотоэффекта - о его поведении как потока час­тиц. Соотношение де Бройля показывает, что частица с моментом mv (m – масса частицы, v – скорость частицы) является также волной с длиной λ:

λ = h/ mv, где h – постоянная Планка.

Для частиц относительно большой массы волновые свойства несущественны, и ее координаты и направление движения могут быть определены и измерены относительно точно. Однако для электрона с крошечной массой это не так. Если бы электрон был просто классической частицей, то двигался бы по траектории как брошенный мячик, но он обладает еще и волновыми свойствами, довольно значительными. И вследствие этого становится невозможным определить одновременно с одинаковой точностью его координаты и момент количества движения. **Согласно принципу неопределенности Гeйзенберга произведение неопределенности скорости и неопреде­ленности положения не может быть меньше чем h/2πm:**

**∆uх∆х≥ h/2πm,** где **h –** постоянная Планка, **m –** масса частицы, **∆uх**  - неопределенность скорости (составляющей скорости по оси х), **∆х –** неопределенность положения электрона (на оси х).

Таким образом микрочастицы вообще не имеют точных положений и скоростей.. Следовательно, если нельзя точно определить координаты и скорость электронов, то нельзя точно описать формы и размеры их орбиталей, а также форму и размер атома. Все что можно сказать об электроне, это только вероятность нахождения его в определенной области пространства вблизи ядра. Эта вероятность описывается квадратом волновой функции ψ2. волновая функция – математическое выражение, определяющее поведение электрона-волны согласно волновому уравнению Шредингера.

Ηψ = Еψ, где Н – это оператор Гамильтона (гамильтониан), применяемый к функции, выполняющий сложную операцию дифференцирования. ψ - это волновая функция, Е – энергия. Волновая функция является решением уравнения Шредингера и описывает поведение электрона в пространстве, называемом атомной орбиталью. Развернутое уравнение имеет вид: ∂2ψ/∂х2 + ∂2ψ/∂y2 + ∂2ψ/∂z2 + 8π2m/h(Е – Епот)ψ = 0

Где первые три члена – это сумма вторых производных волновой функции по координатам х, y, z; m – масса электрона; h - постоянная Планка.

Решение уравнения Шредингера связано с большими математическими трудностями. Оно точно решено для атома водорода и для одноэлектронных ионов He+, Li+2, H+2.

Однако все решения данного уравнения можно разделить на три серии, которые объединяются значениями связанных между собой квантовых чисел. С помощью этих чисел можно описать атомную орбиталь атома (набором из 3 чисел) и любой электрон атома (набором из 4 чисел).

Главное квантовое число n может принимать значения любых целых чисел от 1 до бесконечности. Нам понадобятся только первые семь.

Побочное (орбитальное) квантовое число l может принимать значения от нуля до n-1.

Необходимость введения побочного квантового числа под­тверждается изучением спектра атома водорода. Спектральные линии, отвечающие переходам с одного уровня на другой, часто состоят из нескольких очень близко расположенных отдельных линий. Причем линия n = 1 состоит только из одной линии, линия n = 2 состоит из двух линий, или, как говорят, расщеплена на две линии, линия n = 3 расщеплена на три близко распо­ложенные линии и т. д. Это указывает на незначительное раз­личие в энергии электронов одного и того же энергетического уровня. Поэтому уровни, кроме первого, разделяют на под­ уровни, которые обозначают буквами s, р, d, f соответственно значениям l=0, 1, 2, 3.

При n=2 побочное квантовое число принимает значения 0 и 1; это означает, что уровень n=2 состоит из двух подуровней: s и р. При n= 3 [принимает три значения: о, 1 и 2-третий энергетиче­ский уровень состоит из трех подуровней: s, р и d. Четвертый энергетический уровень состоит из четырех подуровней: s, р, d и f. Число подуровней в каждом данном уровне равно главному квантовому числу.

Орбитальное квантовое число определяет форму поверхности максимальной вероятности нахождения электрона и ее симмет­рию. Только s-орбитали имеют вид сферической поверхности, у других орбиталей форма иная. Их возможное число на каждом подуровне задается третьим квантовым числом.

Магнитное квантовое число m зависит от побочного квантового числа l и может принимать значения от -l, проходя через нуль, до + l. Число орбиталей с данным значением l равно (2l+ 1). Физический смысл магнитного квантового числа заключается в следующем. В спектрах атомов, помещенных во внешнее магнитное поле, обнаруживается дополнительное расщепление спектральных линий. Возникновение новых близколежащих линий свидетельствует о том, что в магнитном поле энергия электронов изменяется. Но это возможно только в случае различной взаимной ориентации электронных облаков. Обнаружилось, что все s-подуровни в несильном постоянном магнитном поле не расщепляются. Это говорит о том, что s-электронное облако имеет шаровую симметрию. р-Подуровни расщепляются в магнитном поле на три близкие линии. Это указывает на три различных типа ориентации р-облаков в пространстве. Расчеты показывают, что область максимального значения квадрата волновой функции р­-орбиталей имеет форму, напоминающую гантель.

Так как возможны три различных направления р-орбиталей в пространстве, то удобно их расположить вдоль координатных осей и обозначить рх, ру и pz.

d-Подуровень дает в магнитном поле пять близколежащих линий, что указывает на пять различных способов их ориентации в пространстве. Форма d-облаков значительно сложнее формы р-облаков. Четыре d-облака схожи по внешнему виду между собой - каждое из них как бы составлено из двух рас­положенных под прямым углом гантелей.

Принято три такие d-орбитали располагать в трех плоскостях xz, yz и ху между координатными осями. Четвертую орбиталь располагают вдоль осей х и y и обозначают dх2 – у2 Форма пятой отличается от остальных это гантель с кольцом расположенным перпендикулярно гантели и обозначается dz2.

Для описания поведения одного электрона в атоме водорода вполне достаточно трех квантовых чисел. Для двухэлектронного атома и остальных многоэлектронных атомов необходимо введение четвертого квантового числа.

s - спиновое квантовое число. Характеризует собственное вращение электрона. Принимает значения ½ (стрелки вверх, левовращающий) и -½ (стрелки вниз, правовращающий).

**ЭЛЕКТРОННАЯ КОНФИГУРАЦИЯ**

Электронная конфигурация элемента - это запись распределения электронов в его атомах по оболочкам, подоболочкам и орбиталям. Электронная конфигурация обычно записывается для атомов в их основном состоянии. Электронная конфигурация атома, у которого один или несколько электронов находятся в возбужденном состоянии, называется возбужденной конфигурацией. Для определения конкретной электронной конфигурации элемента в основном состоянии существуют следующие три правила:

Правило 1: принцип заполнения, принцип наименьшей энергии. Согласно принципу заполнения, электроны в основном состоянии атома заполняют орбитали в последовательности повышения орбитальных энергетических уровней. Низшие по энергии орбитали всегда запол­няются первыми.

Прuмер

Водород; атомный номер = 1; число электронов = 1

Этот единственный в атоме водорода электрон должен занимать s-орбиталь К-обо­лочки, поскольку из всех возможных орбиталей она имеет самую низкую энергию. Электрон на этой s-орбитали называется Is-электрон, Водород в основном состоянии имеет электронную конфигурацию Is1.

Правило 2: принцип запрета Паули. Согласно этому принципу, на любой орбитали может находиться не более двух электронов и то лишь в том случае, если они имеют противоположные спины (неодинаковые спиновые числа).

Орбиталь с самой низкой энергией -это 1s-орбиталь. Она может принять на себя только два электрона. У этих электронов должны быть неодинаковые спины. Если обозначать спин + 1/2 стрелкой, направленной вверх, а спин -1/2 -стрелкой, направ­ленной вниз, то два электрона с противоположными (антипараллельными) спинами на одной орбитали схематически можно представить записью разрешенное расположение спинов На одной орбитали не могут находиться два электрона с одинаковыми (параллель­ными) спинами. Третий электрон в атоме лития должен занимать орбиталь, следующую по энергии за самой низкой орбиталью, т. е. 2S-орбиталь. Таким образом, литий имеет электронную конфигурацию 1s22sl.

Правило 3: правило Гунда. Согласно этому правилу, заполнение орбиталей одной подоболочки начинается одиночными электронами с параллельными (одинаковыми по знаку) спинами, и лишь после того, как одиночные электроны займут все орбитали, может происходить окончательное заполнение орбиталей парами электронов с проти­воположными спинами. Суммарное спиновое число должно быть максимально.

Правило Клечковского:

1. Заполнение электронных орбиталей осуществляется в порядке увеличения суммы n+l.
2. Если сумма одинакова, то первым заполняется то подуровень n которого меньше.

Обнаружено, что подуровни не заполненные, заполненные на половину и заполненные полностью обладают повышенной устойчивостью.

**Спектры поглощения и испускания**. Если единственный электрон на 1s-орбитали водорода возбудить, т.е. сообщить ему энергию, он может быть переведен на более высокий энергетический уровень. Возбужденное состояние неустойчиво, атом может находиться в нем очень короткое время, и в среднем уже через 10-8-10-9 с электрон испускает энергию и перескакивает на ниже расположенный энергетический уровень или же, в конце концов, на уровень основного состояния. Испускать энергию, как и по­глощать ее, он может только квантами (hv). Так возникает спектр испускания (эмиссионный спектр). Если атом поглощает эл.-м. излучение, происходят дискретные электронные переходы и наблюдается спектр поглощения (абсорбционный спектр). Испускание: (высокоэнергетическое состояние)→(низкоэнергетическое состояние); поглощение: (высокоэнергетическое состояние)←(низкоэнергетическое состояние). Конечно же не все переходы в спектрах разрешены. Существуют правила отбора: 1)переходы с изменением величины главного квантового числа не запрещены; 2) при переходе l (побочное квантовое число) должно меняться только не единицу.

**Валентные электроны и электроны внутренних оболочек.**

Валентные электроны в атоме это такие электроны, которые расположены на внешних (высокоэнергетических) квантовых уровнях; именно они определяют химические свойства элемента. Электроны внутренних оболочек – остовные электроны, электроны занятых полностью заполненных оболочек.

**Правило октета.**

При рассмотрении периодической таблицы мы явно наблюдаем повторяемость последовательностей заполнения на каждом уровне 8-ми электронной оболочки. Это правило октета. Атом удовлетворяет правилу октета, когда он путем присоединения, потери или обобществления электронов с другими атомами получает конфигурацию ns2np6, т.е. имеет 8 электронов на внешней электронной оболочке. Но правило октета являясь удобным инструментом предсказания возможности образования ионов или ковалентной связи имеет свои ограничения в связи с малым количеством элементов отвечающим ему (например, AlCl3 ему не отвечает, а соединение существует).