

МЕТОДЫ НАУЧНОГО ПОЗНАНИЯ

Научные методы исследования химических веществ и превращений

Основным **научным методом**, применяемым для исследования химических веществ и их превращений, является **эксперимент**. **Эксперимент** — исследование веществ, проводимое в строго контролируемых и управляемых условиях. Подавляющее большинство сведений о веществах, их свойствах и химических превращениях получено с помощью химических, физических или физико-химических экспериментов.

Роль химического эксперимента в познании природы

Основные теоретические открытия в области химии — результат обобщения большого числа экспериментальных фактов. Познание природы веществ достигается с помощью химического эксперимента, на основании которого раскрывают взаимосвязи и взаимозависимости между ними, формируют представления и понятия о веществах и их превращениях, делают теоретические обобщения, открывают законы природы.

Моделирование химических явлений — исследование химических моделей реально существующих явлений с целью получения объяснений этих явлений. Моделирование заключается в создании лабораторной установки для изучения химического явления в уменьшенных масштабах и проведении экспериментов на этой модели. Выводы и данные, полученные в этих экспериментах, распространяются затем на явление в реальных масштабах.

Взаимосвязь химии, физики, математики и биологии

Химия, физика и биология — фундаментальные естественные науки, тесно связанные между собой. Химические изменения всегда сопровождаются изменениями физическими. Поэтому химия тесно связана с физикой. Химия также связана и с биологией, поскольку биологические процессы сопровождаются непрерывными химическими превращениями. Однако химические явления не сводятся к физическим процессам, а биологические — к химическим и физическим. Каждая форма движения материи имеет свои особенности. В настоящее время на стыке этих естественных наук развиваются такие науки, как физическая химия, химическая физика, биохимия, биофизика и др.

Все вышеуказанные науки не могут обойтись без математики — фундаментальной науки, предоставляющей общие языковые средства другим наукам. Математика по существу устанавливает структурную взаимосвязь между естественными науками (физика, химия, биология) и таким образом способствует нахождению общих законов природы.

Естественнонаучная картина мира — система важнейших принципов и законов, лежащих в основе функционирования и развития мира природы, а также современные представления об устройстве мира. Однако при установлении новых научных фактов, привлечении новых концепций и теорий данная картина изменяется. Таким образом, научная картина мира не является абсолютной истиной. Новейшие научные представления об окружающем мире, основанные на совокупности доказанных фактов и установленных причинно-следственных связей, позволяют делать заключения и прогнозы о свойствах нашего мира и дальнейшем развитии человеческой цивилизации. При несоответствии этих представлений реальности, выявлении новых фактов происходит пересмотр имеющейся естественнонаучной картины мира, что ведёт к созданию новой, более соответствующей реальности, картины.

ОСНОВЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Атом

Атом — электронейтральная частица, состоящая из положительно заряженного ядра, окружённого отрицательно заряженной электронной оболочкой. Термин «атом» (от греч. *atomos* — неделимый) введён Демокритом (460–390 гг. до н. э.).

Модели строения атома: Томпсон (1904 г.) — в положительно заряженную сферу вокруг ядра вкраплены электроны; Резерфорд (1912 г.) — электроны врачаются вокруг ядра по эллиптическим орбитам; Бор (1913 г.) — электроны врачаются вокруг ядра по стационарным (соответствующим энергии электрона) орбитам.

Современная квантово-механическая модель — электроны расположены в пространстве вокруг ядра в разных его точках с разной вероятностью, которую определяют с помощью волнового уравнения Шрёдингера.

Ядро и нуклоны

Ядра атомов состоят из протонов и нейтронов, которые постоянно превращаются друг в друга и поэтому имеют общее название **нуклоны**.

Протон (${}_1^1\text{p}$) — положительная частица с зарядом равным +1 элементарного электрического заряда.

Нейтрон (${}_0^1\text{n}$) — электронейтральная частица. Масса (массовое число) протона и нейтрона равна 1 атомной единице массы, которая составляет $1,6605402(10) \cdot 10^{-24}$ г.

Нуклиды и изотопы

Нуклиды — вид атомов одного элемента с определённым числом нейтронов и массовым числом.

Изотопы — вид атомов одного элемента с одинаковым числом протонов, но различным числом нейтронов и, следовательно, различным массовым числом.

Электрон (\bar{e}) — стабильная отрицательно заряженная частица с зарядом (-1) и массой, в ≈ 1840 раз меньшей массы протона.

Дуализм электрона — электрон следует рассматривать одновременно и как частицу (корпускулу), и как волну. Волновые свойства электрона преобладают над корпускулярными, поэтому электрон в атоме не имеет, подобно волне, определённой траектории движения.

Квантовые числа — энергетические параметры, используемые для определения состояния каждого электрона в атоме.

Главное квантовое число ($n = 1, 2, 3, \dots$) определяет общую энергию электрона и степень его удаления от ядра (номер энергетического уровня).

Орбитальное (побочное или азимутальное) **квантовое число** $l = 0, 1, 2, 3, \dots, n - 1$ определяет форму атомной орбитали — области наиболее вероятного местонахождения электрона в атоме:

s-орбитали — орбитали с $l = 0$, **p-орбитали** — орбитали с $l = 1$, **d-орбитали** — орбитали с $l = 2$, **f-орбитали** — орбитали с $l = 3$.

Магнитное квантовое число m определяет направление орбитали в пространстве и меняется от $+l$ до $-l$, включая 0.

Спиновое квантовое число s принимает два значения $+1/2$ и $-1/2$, соответствующие двум противоположным направлениям собственного магнитного момента электрона.

Атомная орбиталь (АО) — пространство вокруг ядра, где вероятность нахождения электрона будет наибольшей ($\approx 90\%$), которое описывается с помощью совокупности трёх квантовых чисел: n , l и m .

Распределение электронов по орбиталям

Энергетический уровень содержит электроны с близкими размерами орбиталей.

Энергетические уровни нумеруют в порядке их удаления от ядра: 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7.

Максимальное число электронов (N) на одном энергетическом уровне равно $N = 2n^2$.

Энергетические уровни подразделяют на подуровни, число которых равно номеру уровня.

s-подуровень — первый подуровень каждого уровня, содержащий **s-орбитали**.

p-подуровень — второй подуровень каждого уровня, начиная со второго, который содержит **p-орбитали**.

d-подуровень — третий подуровень каждого уровня, начиная с третьего, который содержит **d-орбитали**.

f-подуровень — четвертый подуровень каждого уровня, начиная с четвертого, который содержит **f-орбитали**.

Максимальное число электронов: на *s*-подуровне — $2\bar{e}$; на *p*-подуровне — $6\bar{e}$; на *d*-подуровне — $10\bar{e}$; на *f*-подуровне — $14\bar{e}$.

Электронная конфигурация атома — распределение электронов на энергетических уровнях и подуровнях.

Электронную конфигурацию атома условно записывают в виде электронных формул, в которых цифрой указывают номер энергетического уровня, буквами (*s*, *p*, *d*, *f*) — энергетический подуровень и вверху над буквой (в виде степени) — число электронов на этом подуровне.

Валентные электроны — химически наиболее активные электроны, участвующие в образовании химической связи по **обменному** (неспаренные электроны) и **донорно-акцепторному** (спаренные электроны) механизмам.

Основное состояние атома — энергетическое состояние, при котором все электроны находятся на стационарных орбитах с наименьшей возможной энергией.

Возбуждённое состояние атома — состояние с более высокой энергией, чем основное.

Возбуждение атома — процесс перехода атома из основного в возбуждённое состояние, которое происходит при получении атомом энергии извне (при поглощении квантов ($\hbar\nu$) энергии).

Современная формулировка Периодического закона и современное состояние Периодической системы химических элементов Д. И. Менделеева

Периодический закон: свойства химических элементов находятся в периодической зависимости от величины заряда ядра и строения электронных оболочек их атомов. В современной формулировке заключена идея о том, что причиной периодической

повторяемости свойств элементов, расположенных в порядке возрастания заряда ядра атома (порядкового или атомного номера), является периодически повторяющееся сходное строение электронных оболочек этих атомов. В настоящее время известно свыше 400 вариантов периодической системы химических элементов, различающихся размещением отдельных групп элементов-аналогов, способом отображения Периодического закона. Так как изменение свойств элементов связано со строением электронных оболочек атомов (ёмкостью электронных уровней, равной 8, 18 и 32), то отсюда вытекает три основных варианта клеточного изображения системы элементов: 8-клеточный (вариант короткой формы), 18-клеточный (полудлинная таблица) и 32-клеточный (длиннопериодная таблица). Наиболее распространённым является вариант короткой формы, в котором размещены известные на сегодняшний день 118 элементов. Каждый элемент помещён в отведённую ему клетку в строгом соответствии с его порядковым номером (Z), равным заряду ядра атома. Там же указана и средняя относительная атомная масса (Ar) элемента. Короткая форма Периодической системы состоит из 7 периодов и 8 групп.

Период — горизонтальный ряд элементов, который начинается щелочным металлом и заканчивается благородным газом. Только I период начинается неметаллом (водородом). I, II и III периоды называют малыми, а остальные — большими.

Группы — вертикальные столбцы элементов, объединённых по проявляемой ими высшей степени окисления в соединениях. Группы в короткопериодном варианте составлены из главной и побочной подгрупп. С этой целью элементы одной из подгрупп смещены влево, а другой — вправо. В главную подгруппу входят элементы малых и больших периодов. Число электронов на внешнем уровне у этих элементов равно номеру группы (кроме Не). В побочную подгруппу входят только элементы больших периодов.

Электронные конфигурации атомов переходных элементов

Переходные элементы — химические элементы (металлы), расположенные в побочных подгруппах больших периодов периодической системы. Всего известно 68 переходных элементов, у которых заполняются внутренние ($n - 1$) d -оболочки (d -элементы) или ($n - 2$) f -оболочки (f -элементы). Например, электронная конфигурация атома титана ($_{22}\text{Ti}$ — d -элемент) будет $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2$, а электронная конфигурация атома празеодима ($_{59}\text{Pr}$ — f -элемент) — $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^3 5s^2 5p^6 5d^{10} 6s^2$.