

Лекция №1

Химия как раздел естествознания, значение химии для науки и технологии. Вещество и его строение. Понятие о квантово-механической модели атома водорода. Вероятностный характер процессов в микромире: принцип неопределенности Гейзенберга, волна де-Бройля, волновое уравнение Шредингера. Квантовые числа. Атомная орбиталь. Формы орбиталей. Строение многоэлектронных атомов. Принцип минимальной энергии. Принцип Паули. Правила Хунда и Клечковского. Электронные конфигурации атомов. Энергетические характеристики атомов: энергия ионизации, сродство к электрону, электроотрицательность.

Химия как раздел естествознания, значение химии для науки и технологии.

Представлять химию студентам бауманского Университета предоставим возможность М.В.Ломоносову, который, по характеристике А.С.Пушкина, сам есть «наш первый Университет».

После 6 (17) сентября 1751 года, когда М.В.Ломоносов в публичном собрании Императорской Академии Наук произнес свое знаменитое «Слово о пользе химии», у всех нас на слуху его провидческие слова: «Широко распространяет химия руки свои в дела человеческие, слушатели. Куда ни посмотрим, куда ни оглянемся, везде обращаются пред очами нашими успехи ее прилежания».

В результате отмеченного Ломоносовым «прилежания» современная химия превратилась в одну из важнейших ветвей естествознания и сегодня ее можно определить так: **Химия – это область естествознания о химических соединениях и химических веществах, их свойствах и превращениях, а также о явлениях, сопровождающих эти превращения.**

Химические соединения – это атомные группировки определенного состава и структуры. Химические вещества – это макротела, состоящие из химических соединений. Например, химическое соединение H_2O может образовывать несколько химических веществ – жидкая вода и 10 кристаллических веществ, имеющих общее название «лед».

Химия возникла на заре цивилизации как область экспериментального знания. И во многом остается таковой и сегодня. Но сегодня эксперимент в химии базируется на фундаментальных химических теориях о структуре и свойствах вещества.

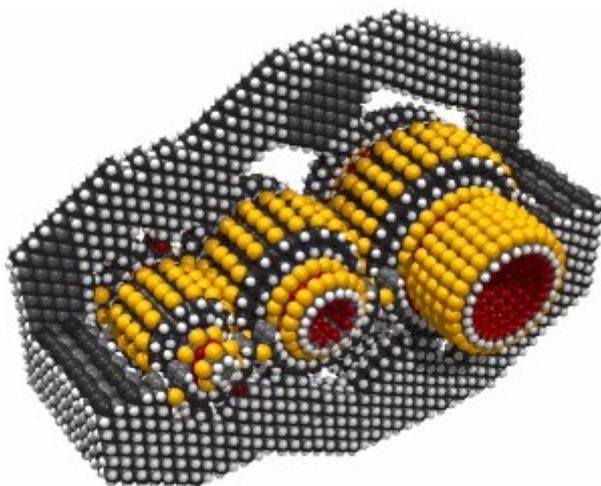
Роль химии в современной науке, технологии и жизни общества в целом переоценить нельзя. Химия лежит в основе процессов получения всех конструкционных материалов – металлов, полупроводников, полимеров, керамики, композитов. Она же обеспечивает защиту этих материалов от разрушающего воздействия окружающей среды – коррозии.

Химические превращения – основной источник энергии как в технологических процессах самих машино- и приборостроения, так и необходимой для функционирования их продукции. (Доля атомной энергетики в общемировом энергетическом балансе составляет только 7%).

Но химия сегодня – это не только «скелет и мускулы» современных машин и приборов. Без помощи химии невозможно себе представить создания ни робототехники (сенсорные элементы для ориентации в окружающей среде), ни «интеллектуализации» нового поколения машин и приборов (носители памяти и процессоры).

На уровне технологий назревает прорыв в нано-область. Сегодня мы начинаем структурировать и функционально использовать пространство с линейными размерами 10^{-8} – 10^{-9} метра! Учтем при этом, что в механике, этой основе конструкторской деятельности, при уменьшении размеров детали резко возрастает ее механическая прочность – вес уменьшается пропорционально кубу размера, а площади сечений – только квадрату! И в 10 раз меньшая деталь оказывается в 10 раз прочнее. Это крайне важное обстоятельство делает перспективными сложнейшие конструкторские решения в области космического машиностроения. Парадокс заключается в том, что чем меньше и сложнее конструкция, тем она надежнее в работе!

Вот, например, как может выглядеть редуктор, построенный всего из 15342 атомов (анимацию см. <http://kbogdanov1.narod.ru/nanotechnology/Drexler.htm>):



А такие размеры – это области протекания элементарных актов химических реакций. И без учета химических факторов освоение этой области совершенно невозможно.

Огромную роль играет химия в решении экологических проблем, накопившихся в современном социуме. Борьба с загрязнением окружающей среды, решение проблемы «парникового эффекта» и неконтролируемого

изменения климата, создание эффективных средств борьбы с раком и СПИДом – все это сегодня однозначно связано с химией.

Однако все, о чем здесь было сказано, относится к компетенции именно химии и должно разрабатываться профессионалами-химиками.

Каковы же требования к химической компетенции инженера-механика, который профессионально должен конструировать создавать и эксплуатировать различные машины и приборы?

Инженер-механик должен уметь осознать химический характер вставшей перед ним проблемы, сформулировать ее на химическом языке перед специалистом-химиком, и *понять* смысл решений и рекомендаций, полученных от специалиста-химика. Поэтому **в курсе будет уделяться большое внимание терминологии и определениям химических понятий.**

Вещество и его строение.

Понятие «вещество» имеет разное значение в разных областях знания. Вещество в физике – это форма материи, обладающая массой покоя. Вещество в биологии – это материя, образующая ткани организмов.

Вещество в химии – это физическая субстанция со специфическим составом.

Вещество состоит из частиц, среди которых чаще всего встречаются электроны, протоны и нейтроны. Последние два сорта частиц образуют атомные ядра (нуклиды), а все вместе - нуклидо-электронные системы атомов, молекул и ионов (атомное вещество). Именно нуклидо-электронные системы и образуют физические субстанции.

Каждому веществу присущ набор специфических свойств – объективных характеристик, которые определяют индивидуальность конкретного вещества и, тем самым, позволяют отличить его от всех других веществ. К наиболее характерным физико-химическим свойствам относятся константы – плотность, температуры плавления и кипения, термодинамические характеристики, параметры кристаллической структуры и т.д. К основным характеристикам вещества принадлежат и его химические свойства – кислотно-основные, окислительно-восстановительные, способность к комплексообразованию и др.

Согласно современным представлениям физические субстанции – это разновидность материи, которая содержит число частиц химических соединений от 10^{15} и более. Именно к такому количеству частиц можно применять понятия агрегатного состояния, упорядоченности структуры (кристаллы), термодинамических характеристик и других характеристических констант.

Теоретическим фундаментом описания свойств вещества является квантовая механика.

Вероятностный характер процессов в микромире: принцип неопределенности Гейзенберга, волна де-Бройля, волновое уравнение Шредингера.

Квантовая механика – фундаментальный раздел теоретической физики, описывающий квантовые системы и законы их движения.

В основе понятия квантовой системы лежит представление о том, что некоторые физические величины могут принимать только определенные значения (говорят, что физическая величина *квантуется*). В некоторых важных частных случаях эта величина или шаг её изменения могут быть только целыми кратными некоторого фундаментального значения, которое и называют *квантом*.

Классическая механика, хорошо описывающая системы макроскопических масштабов, не способна описать явления на уровне атомов, молекул, электронов и фотонов. Квантовая механика адекватно описывает основные свойства и поведение нуклидо-электронных систем.

Принципиальным отличием классической и квантовой механики является описание движения материальных тел.

В классической механике движение описывается как перемещение по определенной траектории – от точки к точке через ближайшие окрестности.

Изучаемый в классической физике тип движения описывает движение *центра масс* физического тела. Квантово-механическое движение описывает поведение конкретных материальных частиц.

Оказалось, что при квантово-механическом движении отсутствуют понятия траектории и орбиты. Электрон при своем движении в поле ядра НЕ перемещается в пространстве из данной области в соседнюю, а как бы «хаотически прыгает» из одной в другую с определенной вероятностью.

Таким образом, **все процессы в квантовых системах имеют принципиально вероятностный характер.**

Представление о движении, *разрывном в каждой точке*, ввел и последовательно развивает российский физик В.Л.Янчилин.

Хаотичность такого движения, однако, во многом только кажущаяся. Движение электрона в поле ядра подчинено особым квантовым законам, которые «удерживают» эту хаотичность в определенных рамках. В результате оказывается, что квантовое движение электрона проявляется в некоторой области пространства.

Область пространства вокруг ядра, в которой по законам квантовой механики движется электрон с заданной энергией, получила название *орбиталь*.

Иными словами орбиталь – это область ярко выраженного квантово-механического движения электрона.

Основные понятия и законы квантовой механики, необходимые нам для понимания химического поведения атомов, подробно будут представлены в

курсе физики. Здесь же мы рассмотрим только наиболее существенные для химии.

Как стало ясно после завершения формального описания квантово-механического движения в работах Нильса Бора, Луи Де Бройля, Вернера Гейзенберга, Эрвина Шредингера, Поля Дирака, Макса Борна и многих других физиков, каждый физический объект имеет в нашем пространстве генеральную характеристику, которая определяет все его наблюдаемые физические свойства.

Эта характеристика называется *волновой функцией (или пси-функцией Ψ)*. Зная вид волновой функции частицы, можно определить **ВЕРОЯТНОСТЬ** того, что она находится в данной области пространства и имеет определенную энергию, импульс, магнитный момент и другие физические характеристики.

Эта вероятность просто пропорциональна квадрату модуля волновой функции - $|\Psi|^2$.

Как было сказано выше, принципиально новым в этом типе движения является не плавное перемещение частицы от точки к точке, а скачкообразное изменение её положения в пространстве.

Почему же мы не ощущаем таких скачков при движении в нашем, «классическом» мире? Оказалось, что квантово-механическое движение явно проявляется при условии, что область движения имеет размер L меньший, чем некоторый характерный для данной частицы. Этот характерный размер носит название *длины волны Де Бройля (λ_b)* и для одиночной частицы в лабораторной системе координат может быть рассчитан так:

$$\lambda_b = h/mv$$

Где h - постоянная Планка, равная $6,63 \times 10^{-34}$ Дж с
 m – масса частицы (для электрона $9,1 \times 10^{-31}$ кг)
 v – скорость частицы

Для типичного электрона, входящего в состав атома, величина λ_b оказывается порядка нанометра, т.е. примерно в 10 раз большей, чем размер атома водорода. И движение электрона в атоме должно подчиняться законам квантово-механического движения.

А для макротел, имеющих массы во многие квинтиллионы раз большие, чем масса электрона, и величина λ_b оказывается меньше размеров атомного ядра. Вот почему мы и не наблюдаем в окружающем нас мире такого «скачкообразного» движения ни футбольных мячей, ни автомобилей на дорогах.

Нужно пояснить появление слова «волна» в теории Де Бройля. Дело в том, что Де Бройль обобщил особенности движения светового кванта –

фотона – на движение *любых частиц, обладающих массой*. А свет во времена Де Бройля считался только электромагнитной волной.

Так возникло понятие *корпускулярно-волнового дуализма*. Оно означает, что полное описание движения частиц требует привлечения уравнений, в классической механике используемых для описания волновых движений.

Сегодня существует несколько трактовок физического смысла корпускулярно-волнового дуализма, совместимых с экспериментальными данными. Это – свидетельство и залог неизбежности дальнейшего развития квантовой механики.

Но нужно твердо помнить, что никакой «волнообразности» в квантово-механическом движении нет!

Просто для каждой области пространства определена вероятность того, что искомая частица будет обнаружена именно там.

Формально квантово-механическое движение описывает уравнение Шредингера. В простейшем случае для частицы, движущейся в силовом поле U , вдоль координаты x оно выглядит так:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U)\Psi = 0$$

Где первое слагаемое представляет собой вторую производную от Ψ по координате x , h – постоянная Планка, m – масса частицы, E – полная энергия частицы, U – потенциальная энергия частицы

Поскольку проведение количественных квантово-механических расчетов вероятностей по известной волновой функции не входит в нашу задачу (этому вас будут учить в курсе физики), не будем детализировать алгоритма таких расчетов. Укажем только, что это относительно несложная и однозначная математическая задача.

Но «все просто» становится только тогда, когда мы имеем аналитическое выражение для решения уравнения Шредингера, т.е. знаем вид функции Ψ .

Математические проблемы, делающие невозможным точное решение уравнения Шредингера для любых систем, более сложных, чем атом водорода, связаны с тем, что неизвестен точный вид функции потенциальной энергии U для таких систем.

На практике используют различные приближения для U и получают решения той или иной степени точности.

Итак, совмещая с расчетом вероятности нахождения частицы в данной области пространства результаты расчетов энергии и импульса, мы должны получить полный набор параметров её движения.

Оказалось, однако, что при квантово-механическом движении не все физические характеристики могут быть определены *одновременно и точно*.

Выяснилось, в частности, что при квантово-механическом движении неопределенности при одновременном определении импульса и точки его

приложения, а также энергии и времени, в течение которого эта энергия фиксируется в системе, связаны так называемыми *соотношениями неопределенностей Гейзенберга*:

$$\Delta P_x \Delta X > \hbar$$

или

$$\Delta E \Delta t > \hbar,$$

где $\hbar = h/(2\pi)$

Здесь дельта (Δ) именно *физическая неопределенность*, а не экспериментальная погрешность. ■

Понятие о квантово-механической модели атома водорода.

Принципы и механизмы химического поведения атомов всех видов – а их сегодня известно 118 ■, можно продемонстрировать на примере простейшего из них – атома водорода.

Атом водорода состоит из двух элементарных частиц – протона (нуклид) и электрона. Протон в 1836 раз тяжелее электрона. Обе частицы несут единичный электрический заряд. Протон – положительный, а электрон – отрицательный.

Очевидно, что образовать устойчивую систему – атом – эти частицы могут только в относительном движении. Очевидно также, что при такой разнице в массах более подвижным будет электрон.

Простейшей моделью, объяснившей основные свойства атома водорода, была планетарная модель Резерфорда-Бора 1913 года. Она описывала атом водорода как «планетную систему» - тяжелый протон в центре (ядро атома), а вокруг него вращается легкий электрон.

Модель давала количественные предсказания, совпадающие с данными по изучению оптического спектра водорода, но содержала ряд допущений, противоречивших электродинамике. Противоречия были преодолены в квантово-механическом описании атома водорода.

Квантовые числа. Атомная орбиталь. Формы орбиталей.

Оказалось, что атом водорода – единственный химический объект, для которого возможно точное решение уравнения Шредингера. Решение для энергии электрона, входящего в состав этого атома, оказывается функцией трех параметров n, l, m :

$$E = f(n, l, m).$$

Целочисленные параметры решения уравнения Шредингера называются квантовыми числами.

При задании определенной вероятности (обычно это 90...99%) обнаружить электрон, можно получить геометрические характеристики области, где это произойдет. Эта область является «основной частью» орбитали данного электрона. Такие геометрические образы (абрисы) в химии обычно и называют орбиталями электронов.

Рассмотрим физический смысл квантовых чисел n, l, m .

Главное квантовое число n :

Может принимать значение чисел натурального ряда. $n = 1, 2, 3$ и т.д.

Главное квантовое число определяет:

1. Основную долю энергии данной орбитали, или основную энергию *энергетического уровня*. Оно является и номером энергетического уровня. Чем больше n , тем больше энергия данного уровня.
2. Число подуровней данного энергетического уровня.
3. Размер орбитали. Чем больше n , тем больше размер орбитали. При этом увеличение размера не меняет формы орбитали.

В сложных атомах главное квантовое число имеет и специальные буквенные обозначения: 1 – K; 2 – L; 3 – M; 4 – N; 5 – O;

Орбитальное квантовое число l .

Может принимать значения $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$, т.е. при данном n l может принять n значений.

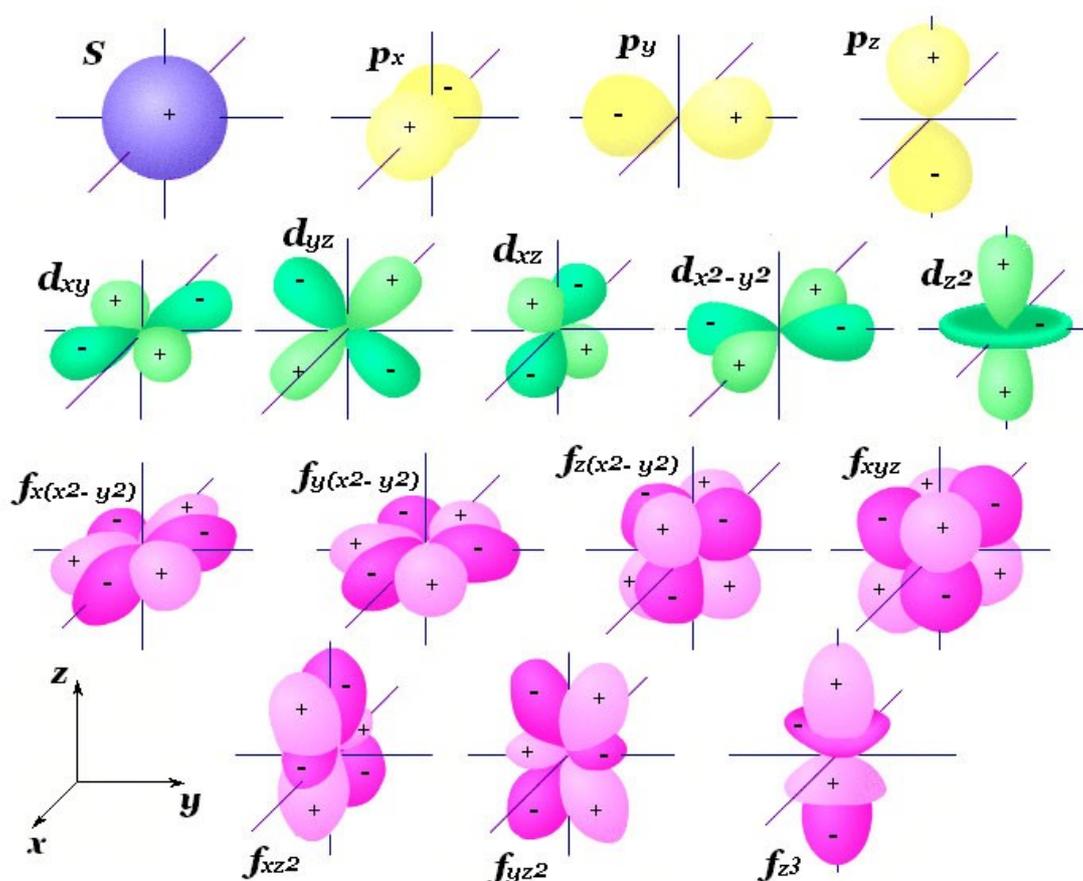
Орбитальное квантовое число определяет:

1. Форму абриса и внутреннюю структуру s , p и большинства d -орбиталей.
2. Энергию энергетических подуровней энергетического уровня.
3. Орбитальный момент количества движения (импульс) электрона.

Кроме численных значений орбитальное квантовое число имеет и буквенное обозначение: 0 – s ; 1 – p ; 2 – d ; 3 – f ; 4 – g ; 5 – h ...

Первое из отмеченных свойств (наличие у большинства орбиталей сложной формы абриса) связано с тем, что волновая функция электрона имеет две составляющие – радиальную и угловую, т.е. вероятность нахождения электрона зависит как от расстояния до ядра, так и от направления в пространстве.

Формы абрисов некоторых орбиталей приведены на рисунке:



Магнитное квантовое число m

Может принимать значения от $-l$ до $+l$: $m = -l, -(l-1), \dots, -1, 0, 1, \dots, (l-1), l$.
Магнитное квантовое число определяет:

1. Изменение энергии и ориентацию орбитали в пространстве при воздействии внешнего магнитного поля
2. Количество орбиталей с данным значением l . Оно равно $2l+1$
3. Форму абриса орбиталей со значением $l > 2$ (например, dz^2)

Спин

Кроме рассмотренных квантовых чисел, которые характеризуют орбиталь и являются следствием решения уравнения Шредингера, в химии большую роль играет ещё одно квантовое число, которое характеризует свойство самого электрона, который движется по пространству орбитали.

Это свойство называется *спин* (S). Спин является проявлением некоторых внутренних свойств элементарных частиц, связанных с эффектами СТО (специальной теории относительности). Спин имеет размерность момента импульса и принимает значения, кратные \hbar :

$$S = m_s \hbar,$$

где m_s – спиновое квантовое число

Для электрона m_s принимает два значения: $1/2$ или $-1/2$.

Наличие спина проявляется в том, что во внешнем электрическом поле собственный момент импульса электрона ориентируется двойко – по полю и против поля. В первом случае считается, что спиновое квантовое число электрона m_s (или s) равно $+1/2$, а во втором $-1/2$. (Отметим, что спиновое квантовое число – единственное дробное среди набора квантовых чисел, характеризующих строение атома).

Строение многоэлектронных атомов

Итак, мы рассмотрели некоторые понятия, возникающие при анализе решения уравнения Шредингера для атома водорода. В результате дальнейших работ выяснилось, что эти понятия – квантовые числа и их физический смысл – применимы и для всех других атомов Периодической системы элементов.

Вследствие этого была выработана схема строения электронных оболочек многоэлектронных атомов, к рассмотрению которой мы и приступаем.

Атомные орбитали в этой схеме обозначаются двумя символами. Первый – число – соответствует значению главного квантового числа n . Второй – латинская буква – соответствует значению орбитального квантового числа l . Например, $1s$ -орбиталь. Это орбиталь, у которой $n=1$, а $l=0$. Ещё пример: $5f$ -орбиталь. У неё $n=5$, а $l=3$.

Все орбитали с одинаковым значением n образуют *энергетический уровень*. Общее число орбиталей на энергетическом уровне равно n^2 . Орбитали энергетического уровня с разными значениями l образуют *энергетические подуровни* этого энергетического уровня.

В результате сравнения предсказаний теории с экспериментальными данными (прежде всего – спектроскопическими) были определены энергии атомных орбиталей для различных элементов. Оказалось, что для большинства из них ряд, выстроенный по возрастанию энергии, имеет один и тот же вид:



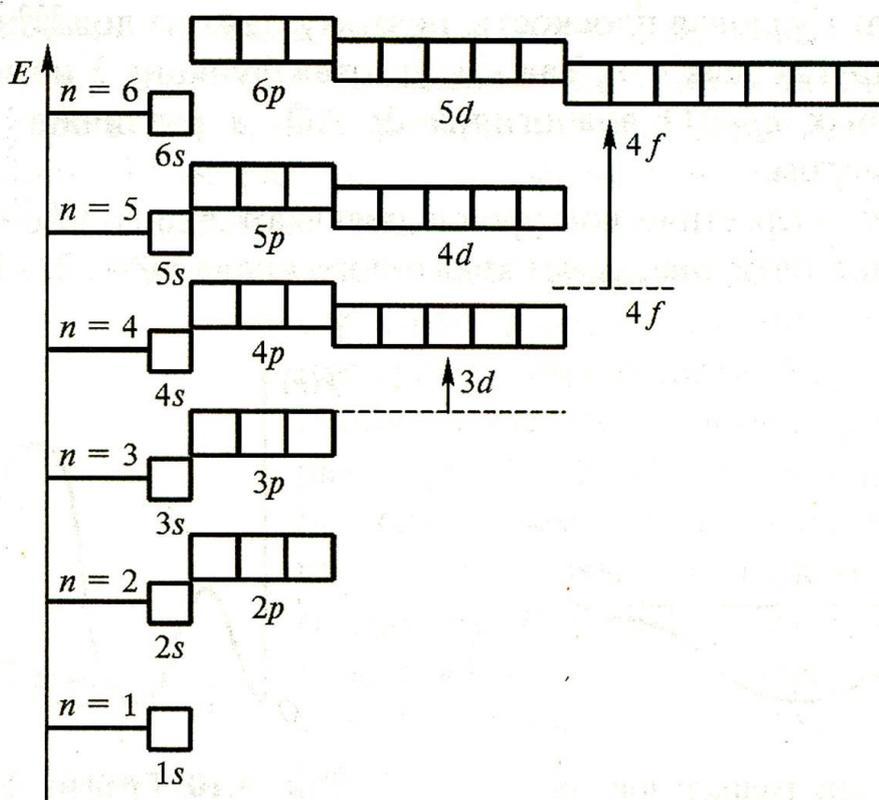
Эта последовательность, которая называется А-последовательностью (от немецкого Aufbau – конструкция, структура), может быть построена по правилу Клечковского.

Правило гласит: энергия атомных орбиталей возрастает с ростом суммы $n+l$. При равном значении суммы энергия больше у орбитали с большим значением n .

Как мы видели из свойств магнитного квантового числа m_l , количество орбиталей с данным l равно $2l+1$, т.е. в этом ряду все s орбитали ($l=0$) –

единственны, все p-орбитали ($l=1$) существуют в трех разновидностях, все d-орбитали ($l=2$) – в пяти, а все f-орбитали ($l=3$) – в семи.

Исходя из вышеизложенного, схема орбиталей многоэлектронного атома приобретает вид:



Энергетическая диаграмма АО для многоэлектронных атомов

Подобные схемы носят название электронографических диаграмм.

Принцип минимальной энергии. Принцип Паули. Правила Хунда и Клечковского. Электронные конфигурации атомов.

Теперь, когда мы имеем энергетическую схему строения орбиталей многоэлектронного атома, мы можем рассмотреть вопрос о том, как заполняется эта схема электронами.

При заполнении орбиталей в сложных атомах действует ряд правил, важнейшими из которых являются Принцип минимальной энергии, Принцип Паули и правило Хунда.

Принцип минимальной энергии гласит, что электроны заполняют орбитали в порядке возрастания их энергии.

Иными словами, каждый последующий электрон, попадающий в систему орбиталей данного атома, занимает очередную свободную орбиталь с наименьшей энергией.

Принцип Паули гласит, что в атоме нет и не может быть даже двух электронов с одинаковым набором квантовых чисел.

Вследствие именно Принципа Паули и возникают *заполненные орбитали*. На каждой такой орбитали могут находиться по два электрона с противоположно направленными спинами и потому общая «емкость» электронного уровня составляет $2n^2$ электронов.

Правило Хунда (Гунда) требует, чтобы заполнение электронами орбиталей происходило так, чтобы суммарный спин системы был максимальным.

Правило Хунда действует в рамках структурированных систем (изолированных атомов) при выполнении Принципа минимальной энергии и Принципа Паули.

Электронная формула атома – это краткая запись последовательности его орбиталей с указанием количества занимающих их электронов.

Например, для атома углерода:



Рассмотренные правила являются общими и точными для всех химических элементов до хрома. Для более сложных атомов возможны небольшие отклонения, вызванные тем, что на характер квантово-механического движения электронов влияет увеличение размера орбиталей, а также их влияние друг на друга.

Энергетические характеристики атомов: энергия ионизации, сродство к электрону, электроотрицательность.

Химические свойства атомов определяются в основном свойствами электронов, находящихся на внешнем энергетическом уровне. Именно они принимают участие в химических реакциях. И главными характеристиками являются энергетические – способность удерживать принадлежащие атому электроны, способность присоединять новые, а также способность к поляризации химической связи.

В связи с этим рассмотрим три энергетические характеристики внешних электронных орбиталей: энергию ионизации, сродство к электрону и электроотрицательность.

Энергия ионизации E_I – это минимальная энергия, которую необходимо затратить, для того, чтобы оторвать от нейтрального атома один электрон с образованием положительного иона (катиона). Чем меньше эта энергия, тем легче атом окисляется. И, соответственно, тем лучшим восстановителем он является. (Как известно, окисление – это процесс отдачи электронов).

Сродство к электрону E_A – это минимальная энергия, которую можно получить или необходимо затратить для присоединения

электрона к свободному нейтральному атому с образованием отрицательного иона (аниона). В отличие от ионизации, всегда требующей затраты энергии, присоединение электрона может сопровождаться как выделением (положительное сродство), так и поглощением энергии (отрицательное сродство). Экспериментальные методы определения E_A более сложны и менее надежны, чем методы определения E_I .

При положительном сродстве атом может быть окислителем.

Электроотрицательность χ (греч. буква «хи») – способность атома смещать орбитали электронов, участвующих в образовании химической связи в направлении своего ядра.

При этом атом в молекуле приобретает дополнительный отрицательный заряд.

Электроотрицательность химического элемента не является абсолютно постоянной. Она немного меняется в разных соединениях этого элемента. Но взаимные отношения электроотрицательностей атомов различных элементов сохраняются (в любом случае электроотрицательность атома фтора больше, чем атома натрия).

Существует несколько шкал электроотрицательностей. В качестве примера укажем одну – шкалу Малликена χ_M :

$$\chi_M = \frac{1}{2}(E_I + E_A)$$

Смысл этой шкалы состоит в том, что чем сильнее атом удерживает электрон на внешнем энергетическом уровне (чем больше E_I) и чем больше энергии выделяется при присоединении электрона к атому (чем больше E_A), тем более он способен смещать в сторону своего ядра электроны химической связи.

Дополнительные материалы

Определение химии не может быть исчерпывающе полным, поскольку не существует резкой границы ни между веществами с химической и не химической структурой, ни, тем более, между физическими, биологическими и химическими процессами.

Приведем ещё одно определение химии, учитывающее некоторые особенности химических веществ: «Химия – это область естествознания, изучающая такую форму движения материи, в которой источником развития является противоречие между электромагнитными силами притяжения и отталкивания нуклидо-электронных систем, вызванное квантовым характером движения электронов; имеет своим предметом состав, строение, состояние и приводящие к качественным изменениям взаимодействия простых и сложных веществ, а также изучает явления, сопровождающие такие взаимодействия».

Данное определение учитывает тот факт, что химическая форма движения материи связана с нуклидо-электронными системами, т.е. системами, состоящими из атомных ядер и связанных с ними электронов. Однако и здесь следует помнить, что при образовании нуклидо-электронной плазмы системы выходят за рамки химического описания.

Что касается процессов, то, например, как можно абсолютно точно отнести процесс ионизации веществ к физике или химии? При электролитической диссоциации протекают процессы разрыва химических связей с образованием ионов. Это в значительной мере химический процесс. При высокотемпературной ионизации или ионизации под действием высокоэнергетичного излучения химические явления, как правило, вторичны на фоне физических процессов образования плазмы, изменения электропроводности и т.п.

Можно привести примеры, когда химические соединения не образуют веществ. Скажем, это относится ко всем сложным катионам и анионам.

То, что материальный мир вовсе не сводится только к химическим соединениям и химическим веществам, легко видеть, если принимать во внимание такие хорошо известные науке вещества, как плазма, вещества белых карликов и нейтронных звезд.

Но, кроме этого, в последнее время стало известно, что в природе на «каждый грамм» обычного вещества (нуклидо-электронного или даже звездного) приходится 5 граммов так называемой темной материи и 15 граммов поля неизвестной природы – темной энергии. Оказалось, что мы живем в мире, 95% массы которого приходится на материю, о существовании которой мы и не подозревали ещё 10 лет назад.

И даже когда «никакой химии» в энергообеспечении, казалось бы, нет (вилки, клеммы и провода химически почти неизменны в процессе своей работы!) нужно помнить, что разность потенциалов в электросетях возникает потому, что где-то протекают бурные окислительно-восстановительные процессы сгорания органически веществ (уголь, нефть, природный газ) в топках котлов, или спокойные, но, по химической сути, точно такие же процессы «медленного горения» таких металлов, как цинк, кадмий, литий в гальванических элементах («батарейках»).

В связи с ограниченностью природных запасов нефти на повестке дня стоит подготовка к переходу на новые, экологически безопасные и энергетически более оптимальные источники энергии. И здесь многого ждут от химии. В частности, прорыва в неисчерпаемую область водородной энергетики вряд ли удастся добиться без разработки эффективных катализаторов фотохимического разложения воды, а создание нового поколения автомобилей, использующих водород в качестве горючего, невозможно без принципиально нового хемосорбента.

См., например, материал об углеродных нанотрубках как конструкционной основе движущихся элементов приборов <http://kbogdanov1.narod.ru/nanotechnology/Nanotubes.htm> и <http://nature.web.ru/db/msg.html?mid=1183580&s=>)

Н.Бор



О нем см. <http://n-t.ru/nl/fz/bohr.htm>

Л.Де Бройль



О нем см. <http://www.alhimik.ru/great/brogie.html>

В.Гейзенберг



О нем см. <http://www.alhimik.ru/great/heisenberg.html>

Э.Шредингер



О нем см. <http://n-t.ru/nl/fz/schrodinger.htm>

П.Дирак



О нем см. <http://www.alhimik.ru/great/dirac.html>

М.Борн



О нем см. <http://n-t.ru/nl/fz/born.htm>

Более строго, в квантовой механике основополагающей характеристикой любого объекта и системы является так называемый *вектор состояния*. В общем случае это математический конструкт в бесконечномерном Гильбертовом пространстве. При переходе от описания состояния в математически абстрактном Гильбертовом пространстве к физическому четырехмерному пространству-времени, вектор состояния трансформируется в волновую функцию или волновой вектор.

Здесь нужно учитывать, что волновая функция, как правило, является комплексной и значение модуля определяется по определению модуля комплексного числа.

То, что это именно так, демонстрирует сравнение соотношений неопределенностей для импульса и координаты с рассмотренным нами выражением для λ_b .

Действительно, если внимательно посмотреть на выражение для λ_b , то можно увидеть – даже для макротел значительной массы мы должны наблюдать квантово-механическое

«скачкообразное» движение при остановке тела. При $v=0$ λ_b становится бесконечно большим. И футбольный мяч из рук *действительно* остановившего его вратаря *может* самопроизвольно прыгнуть в сетку ворот.

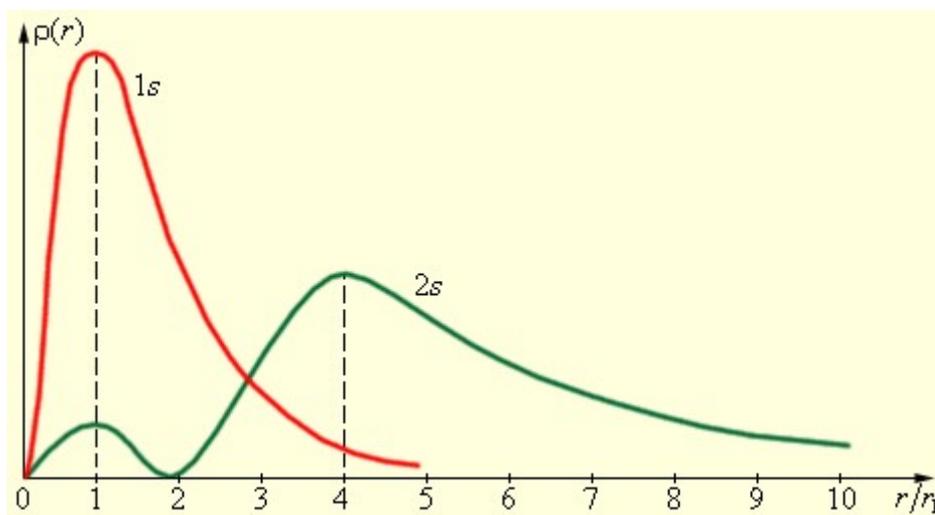
И вообще все «стоящие» предметы должны начинать движение с квантово-механических скачков! Этого не происходит именно из-за *физической неопределенности* состояния покоя.

Таким образом, квантовая механика показала, что абсолютный покой ($v=0$) невозможен физически – при $v=0$, как видно из соотношения неопределенностей Гейзенберга, частица должна «размазаться» по всему пространству ($x=\infty$).

■ Об открытии самого тяжелого - 118 элемента см. <http://science.compulenta.ru/295630/?r1=rss&r2=remote>

■ Например, абрисом всех s-орбиталей является сфера. Но оказывается, что вероятность обнаружения электрона внутри этой сферы не равномерна, а зависит от расстояния от ядра. На рисунке

(<http://www.college.ru/enportal/physics/content/chapter9/section/paragraph3/theory.html>) показана внутренняя структура 1s и 2s- орбиталей. Как видно из рисунка, 2s-орбиталь подобна «двухслойной луковице» с внутренними оболочками, расположенными на расстоянии 1 и 4 радиуса боровской орбиты. Как правило, в химии факт сложности внутреннего строения орбиталей не играет значительной роли.



Распределение вероятности обнаружения электрона в атоме водорода в состояниях 1s и 2s. $r_1 = 5,29 \cdot 10^{-11}$ м – радиус первой боровской орбиты.

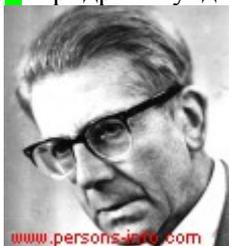
■ О нем см. <http://www.alhimik.ru/stroenie/scientists/klechkovsky.html>

■ Вольфганг Паули



О нем см. <http://www.krugosvet.ru/articles/04/1000482/1000482a1.htm>

Фридрих Хунд



О нем см. http://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A5%D1%83%D0%BD%D0%B4%2C_%D0%A4%D1%80%D0%B8%D0%B4%D1%80%D0%B8%D1%85

Это значит, что данное правило не является всеобщим и, например, в системах, содержащих плазму, оно не действует – в ней ядра и электроны не связаны в структурированные системы.

Исключения из $(n + l)$ — правила для первых 86 элементов

Элемент	Электронная конфигурация	
	по правилу $(n + l)$	фактическая
Cr (Z = 24)	[Ar] $4s^2 3d^4$	$4s^1 3d^5$
Cu (Z = 29)	[Ar] $4s^2 3d^9$	$4s^1 3d^{10}$
Nb (Z = 41)	[Kr] $5s^2 4d^3$	$5s^1 4d^4$
Mo (Z = 42)	[Kr] $5s^2 4d^4$	$5s^1 4d^5$
Tc (Z = 43)	[Kr] $5s^2 4d^5$	$5s^1 4d^6$
Ru (Z = 44)	[Kr] $5s^2 4d^6$	$5s^1 4d^7$
Rh (Z = 45)	[Kr] $5s^2 4d^7$	$5s^1 4d^8$
Pd (Z = 46)	[Kr] $5s^2 4d^8$	$5s^0 4d^{10}$
Ag (Z = 47)	[Kr] $5s^2 4d^9$	$5s^1 4d^{10}$
La (Z = 57)	[Xe] $6s^2 4f^1 5d^0$	$6s^2 4f^0 5d^1$
Ce (Z = 58)	[Xe] $6s^2 4f^2 5d^0$	$6s^2 4f^1 5d^1$
Gd (Z = 64)	[Xe] $6s^2 4f^8 5d^0$	$6s^2 4f^7 5d^1$
Ir (Z = 77)	[Xe] $6s^2 4f^{14} 5d^7$	$6s^0 4f^{14} 5d^9$
Pt (Z = 78)	[Xe] $6s^2 4f^{14} 5d^8$	$6s^1 4f^{14} 5d^9$
Au (Z = 79)	[Xe] $6s^2 4f^{14} 5d^9$	$6s^1 4f^{14} 5d^{10}$

Роберт Малликен



О нем см. <http://chemistry.narod.ru/persones/Mulliken.html>