

**Ю.С. Саркисов**

# **ХИМИЯ В СТРОИТЕЛЬСТВЕ**

**Часть 1**

Электронное учебное пособие

Томск  
Издательство ТГАСУ  
2020

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
«Томский государственный архитектурно-строительный университет»

*Серия «Учебники ТГАСУ»*

**Ю.С. Саркисов**

# **ХИМИЯ В СТРОИТЕЛЬСТВЕ**

**Часть 1**

Электронное учебное пособие

*Рекомендовано Учебно-методическом советом ТГАСУ  
в качестве учебного пособия для подготовки бакалавров и магистров  
по направлению 08.03.01 «Строительство»*

Томск  
Издательство ТГАСУ  
2020

УДК 691:666.9(075.8)

ББК 38.32я73

С20

*Серия «Учебники ТГАСУ» основана в 2013 году*

**Саркисов, Ю.С.** Химия в строительстве. Электронное учебное пособие. В 2 частях. Часть 1 / Ю.С. Саркисов; Томский государственный архитектурно-строительный университет. – Томск : Изд-во Том. гос. архит.-строит. ун-та, 2020. – (Серия «Учебники ТГАСУ»). – 1 электрон. диск (CD-ROM) : 12 см; в контейнере 14×12,5 см. – Систем. требования: PC не ниже класса Pentium; 1 Гб RAM; свободное место на HDD 9,15 Мб; Windows XP/Vista/7/8/10; Adobe Acrobat Reader; дисковод CD-ROM 2-х и выше; клавиатура; мышь. – Загл. с этикетки диска. – ISBN 978-5-93057-936-9. – Текст : электронный.

В электронном учебном пособии изложены квантово-механические закономерности проявления вязущих свойств в свете современных представлений о теориях строения атома, химической связи и геометрии молекул.

Комплексное изложение основ химии применительно к химии вязущих веществ направлено на формирование химического мышления, способствующего обогащению профессиональных знаний студентов, бакалавров и магистров, обучающихся по направлению «Строительство» по дисциплине «Химия в строительстве».

Настоящее издание посвящается 150-летию открытия Периодического закона Д.И. Менделеева.

УДК 691:666.9(075.8)

ББК 38.32я73

#### **Рецензенты:**

докт. техн. наук, профессор НОЦ им. Кижнера ТПУ, **В.И. Верещагин;**

докт. физ.-мат. наук, профессор кафедры «Прикладная механика и материаловедение» ТГАСУ, **А.А. Клопотов.**

ISBN 978-5-93057-936-9

© Томский государственный  
архитектурно-строительный  
университет, 2020

© Саркисов Ю.С., 2020

## ВВЕДЕНИЕ

Дисциплина «Химия в строительстве» появилась в учебном плане направления «Строительство» совсем недавно. Однако за это время в науке о материалах накопилось множество новых данных как фундаментального, так и прикладного характера. В полной мере это касается и химии вяжущих веществ. Эти достижения во многом связаны с развитием физико-химических представлений о сущности и закономерностях процессов и явлений, связанных с получением, применением и свойствами вяжущих веществ.

С учебно-методической точки зрения новая дисциплина обеспечивает более конкретную преемственность между родственными дисциплинами, позволяет увидеть все многообразие проявления фундаментальных законов природы.

Это первый опыт систематизации данных по применению теории строения атома и химической связи к теории вяжущих веществ и он, безусловно, не лишен недостатков. Но автор надеется, что представления о содержании и месте дисциплины в учебном процессе найдут поддержку у коллег по подготовке специалистов строительно-технологического профиля, а высказанные критика и замечания будут способствовать совершенствованию новой учебной дисциплины, созданию других, улучшенных, вариантов учебного пособия или учебника.

Настоящее учебное пособие включает контрольно-обучающие тренажеры по теории строения атома и химической связи. По этой причине данное пособие будет полезным для студентов и бакалавров всех форм обучения по химическим дисциплинам, а также для магистрантов и аспирантов, занимающихся исследованиями в области химии вяжущих веществ.

Содержание учебного пособия базируется на обобщении известных многочисленных научных трудов и учебных пособий по теории строения атома и химической связи, а также химии вяжущих веществ с авторскими дополнениями, изменениями, с интерпретацией теоретических и экспериментальных закономерностей и обоснованием их применения к химии вяжущих веществ. Этот подход позволил автору дать несколько определений основных понятий квантовых представлений о строении атома и химической связи, что в значительной мере облегчает усвоение изложенного материала. Учебное пособие содержит разработанный автором тренажер, как по теории строения атома, так и по теории химической связи. Многие аспекты химии вяжущих веществ заимствованы на основе обобщения трудов В.Ф. Журавлева, Н.Ф. Федорова, Д.И. Чемоданова, особенно М.М. Сычева и Л.В. Сватовской.

В этой связи автор настоящего пособия считает себя автором-составителем и отчетливо осознает, что данный подход требует дальнейшего осмысления и более глубокого обоснования применения квантово-механических закономерностей к проблеме вяжущих свойств.

Автор-составитель будет благодарен за замечания и пожелания по структуре учебного пособия и его содержанию, которые следует направлять по адресу:

г. Томск, 634003, пл. Соляная, 2;

Томский государственный архитектурно-строительный университет (ТГАСУ), кафедра физики, химии и теоретической механики, докт. техн. наук, профессор Ю.С. Саркисов;

e-mail: sarkisov@tsuab.ru.

## 1. СТРОЕНИЕ АТОМА

Атом представляет собой сложную микросистему находящихся в движении и взаимодействии элементарных частиц. Экспериментально установлено, что 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. Область положительного заряда атома – *ядро*, несмотря на преобладание ее массы, очень невелика по размерам.

За исключением ядра атома водорода, ядра атомов состоят из *протонов* и *нейтронов*, называемых *нуклонами*. Протон  $p$  – частица, имеющая массу  $m_p = 1,6726 \cdot 10^{-27}$  кг и положительный электрический заряд  $1,6022 \cdot 10^{-19}$  Кл. Нейтрон  $n$  – незаряженная нейтральная частица, обладающая массой  $m_n = 1,6750 \cdot 10^{-27}$  кг.

На некотором расстоянии от ядра располагаются области с противоположным зарядом, так называемые *электронные орбитали*, – области определенной вероятности нахождения электрона. *Электрон* – элементарная частица, обладающая наименьшей массой покоя  $m_e^- = 0,91095 \cdot 10^{-30}$  кг. Заряд электрона принято считать отрицательным. Электроны имеют отрицательный электрический заряд, равный  $1,6022 \cdot 10^{-19}$  Кл. Общее число электронов в атоме равно числу протонов в ядре и поэтому атом электрически нейтрален.

Геометрический размер атома, условно описываемый диаметром его электронной оболочки, имеет порядок  $10^{-10}$  м, а диаметр атомного ядра –  $10^{-14}$  м, т. е. по размеру ядро в 10 000 раз меньше, чем атом. Масса атома чрезвычайно мала и сосредоточена в его ядре. Обычно ее выражают в атомных единицах массы (аеm.).

В качестве атомной единицы массы принята  $\frac{1}{12}$  массы атома изотопа углерода  $C_6^{12}$ . Одна единица аеm равна  $1,667 \cdot 10^{-27}$  кг. Интересно отметить, что произведение  $1\text{аеm} \cdot N_A \equiv 1$ , где  $N_A$  – число Авогадро, равное  $0,60402 \cdot 10^{24}$ .

Число протонов  $Z$  в ядре равно заряду ядра, если выразить заряд в единицах заряда электрона. Сумма числа протонов  $Z$  и числа нейтронов  $N$  равна массовому числу  $A$ , т. е. массе атома, выраженной в единицах атомных масс и округленных до целых единиц.

Существуют ядра с одним и тем же значением  $Z$ , но различным значением  $A$ , т. е. ядра с различным содержанием нейтроном  $N$ . Атомы, имеющие одинаковый заряд ядра, но разное количество нейтронов, называют *изотопами*. Так, ядра изотопов урана содержат по 92 протона, но различают по числу нейтронов:  ${}_{92}^{238}U$  ( $A = 238$ ,  $Z = 92$ ,  $N = 146$ );  ${}_{92}^{235}U$  ( $A = 234$ ,  $Z = 92$ ,  $N = 142$ );  ${}_{92}^{235}U$  ( $A = 235$ ,  $Z = 92$ ,  $N = 143$ );  ${}_{92}^{233}U$  ( $A = 233$ ,  $Z = 92$ ,  $N = 141$ ).

Вследствие того, что именно числом протонов в ядре определяются число электронов в оболочке атома и химические свойства элемента, следует, что атомы всех изотопов одного и того же элемента имеют одинаковое электронное строение, а сами изотопы – близкие химические свойства.

Таким образом, главной характеристикой атома является величина положительного заряда ядра атома, определяющая общее число электронов в атоме и химические свойства элемента. Поскольку в возникновении химических связей и в образовании молекул веществ происходят изменения электронной конфигурации атомов, то именно изучению этой структуры уделяют особое внимание.

### 1.1. Квантово-механическое объяснение строения атома

Химические свойства элементов определяются строением электронных оболочек атома, т. к. при химических реакциях ядра атомов не претерпевают изменений. Современная теория строения атома основана на законах, описывающих поведение микрообъектов – микрочастиц, элементарных частиц и электронов в том числе.

Представление о поведении электронов как микрочастиц основано на следующих трех характеристиках:

- 1) квантовый характер энергетических изменений;
- 2) двойственное корпускулярно-волновое поведение;
- 3) неопределенность положения и скорости при одновременном их измерении.

**Квантовый характер энергетических изменений.** В системе микрообъектов энергия поглощается и испускается не непрерывно, а *дискретно*, отдельными порциями – *квантами*.

Энергия электрона в атоме не может быть произвольной. Она принимает только определенные значения, кратные числам квантов. Энергия кванта  $E$  пропорциональна частоте излучения (колебания)  $\nu$ :

$$E = h\nu, \quad (1)$$

где  $h$  – постоянная Планка ( $6,626 \cdot 10^{-34}$  Дж · с);  $\nu = c/\lambda$ ;  $c$  – скорость света ( $2,997 \cdot 10^8$  м/с);  $\lambda$  – длина волны.

Из этих соотношений, в частности, следует, что чем меньше длина волны или чем больше частота колебаний, тем больше энергия кванта, и наоборот. Поэтому ультрафиолетовые лучи обладают большей энергией, чем лучи видимого света.

Квантовый характер энергетических изменений особенно ярко проявляется в спектрах веществ и, в первую очередь, – в атомных спектрах. Атомные спектры состоят из отдельных спектральных линий. Каждая спектральная линия характеризуется определенной частотой колебаний света  $\nu$  и соответствует строго определенному энергетическому квантовому переходу между различными уровнями энергии:

$$h\nu = E_2 - E_1.$$

Атомные спектры возникают при переходах между энергетическими уровнями внешних электронов атомов. Каждому элементу отвечает свой спектр, т. е. каждому виду атомов присущ свой характеризующий его прерывистый (дискретный) ряд значений внутренней энергии. Отсюда следует невозможность для атома непрерывно изменять свое состояние и в связи с этим невозможность как поглощать, так и испускать энергию любыми, в том числе бесконечно малыми, порциями.

Атом элемента, поглотив энергию, через некоторый очень короткий промежуток времени снова самопроизвольно возвращается в первоначальное состояние, излучая поглощенную энергию в количестве одного кванта ( $h\nu$ ), т. е. энергии, соответствующей определенной частоте или длине волны.

**Корпускулярно-волновое поведение.** Электроны – микрочастицы, обладающие рядом свойств, которые присущи волнам и частицам. *Корпускулярные* свойства (свойства частицы) электрона выражаются в его неспособности дробиться, в наличии массы и способности оказывать давление. *Волновые свойства* выражаются в особенностях движения, в дифракции и интерференции. Энергия кванта излучения связана с частотой излучения уравнением Планка (1). В то же время масса частицы  $m$  связана с ее энергией  $E$  и скоростью  $c$  формулой Эйнштейна:  $E = mc^2$ . Двойственность свойств частицы (электрона) отражается соотношением (уравнением Луи де Бройля) между скоростью частицы, ее массой и длиной:

$$\lambda = \frac{h}{mc}. \quad (2)$$

Известно, что импульс  $p = mc$ . В этом случае уравнение Луи де Бройля принимает вид:

$$\lambda = \frac{h}{p},$$

где  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ .



Соотношение волна – частица таково, что с уменьшением массы частицы ее волновые свойства усиливаются, а корпускулярные – ослабевают. С увеличением частоты и уменьшением длины волны происходит усиление корпускулярных свойств.

**Неопределенность положения и скорости** (принцип неопределенности Гейзенберга). В микромире вообще принципиально нельзя определить точно положение и скорость частиц. Если невозможно одновременно установить местонахождение в пространстве и скорость движения электронов, то нельзя точно описать размеры и формы их орбиты, а также размер и форму атома. Все, что можно сказать о положении электрона в атоме, – это только вероятность его нахождения в какой-либо области пространства вблизи ядра. Но порознь (не одновременно!) можно точно измерить либо скорость, либо месторасположение электрона. В будущем, по-видимому, это станет возможно.

Наиболее распространенным является представление электрона в виде электронного облака, т. е. области пространства вокруг ядра атома, где находится преобладающая часть заряда и массы электрона.

Исходя из квантового характера энергетических изменений, корпускулярно-волнового поведения микрочастиц, неопределенности положения и скорости микрочастицы, австрийский физик Шредингер и ряд других ученых разработали теорию движения микрочастиц – волновую механику, которая привела к созданию современной *квантово-механической модели атома*.

Квантовая механика описывает движение электрона в атоме при помощи волновой функции. Общий вид этой функции находится из уравнения Шредингера, которое связывает волновую функцию с потенциальной энергией электрона и его полной энергией.

Математический аппарат волновой механики в применении к модели атома очень сложен. Уравнение Шредингера точно решено для атома водорода и для одноэлектронных ионов  $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{2+}$ . Решая уравнения, находят значения волновых функций, характеризующих вероятность нахождения электрона в некотором пространстве вблизи ядра атома, а также определяют возможные энергетические состояния электрона.

Решение уравнения Шредингера даже для атома водорода – очень сложная задача, поскольку это уравнение имеет бесконечно большое число решений в связи с тем, что энергия электрона может принимать бесконечно большое число квантовых значений. Однако все решения можно разделить на три серии и ограничиться только теми значениями энергии, которые один электрон может принимать в поле ядра атома водорода (протона). Три серии решений уравнения объединяются значениями связанных между собой *квантовых чисел*.

Для характеристики энергетического состояния электрона в атоме квантовая механика пользуется *системой квантовых чисел*.

**Главное квантовое число  $n$ .** Электроны, движущиеся вокруг атома, группируются в *энергетические уровни* (оболочки). Принадлежность электрона к тому или иному энергетическому уровню определяется *главным квантовым числом  $n$* . Главное квантовое число принимает значения 1, 2, 3, 4, 5, ...  $\infty$ . Значение главного квантового числа соответствует номеру периода в периодической системе; для всех известных элементов  $n$  изменяется от 1 до 7. Энергетические уровни имеют буквенные обозначения:  $K(n = 1)$ ,  $L(n = 2)$ ,  $M(n = 3)$ ,  $N(n = 4)$ ,  $O(n = 5)$ ,  $P(n = 6)$ ,  $Q(n = 7)$ .

*Главное квантовое число определяет энергию электрона, находящегося на данном энергетическом уровне и размеры электронного облака.*

**Побочное (орбитальное) квантовое число  $l$ .** Электроны каждого уровня группируются в *подуровни*, причем число возможных подуровней равно номеру уровня и определяется

побочным или орбитальным квантовым числом ( $l$ ). Побочное (орбитальное) квантовое число  $l$  может принимать значения от нуля до  $n - l$  ( $n \leq 4$ ).

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. Это указывает на незначительное различие в энергии электронов одного и того же энергетического уровня. Поэтому уровни, кроме первого, разделяют на подуровни, которые обозначают буквами  $s, p, d, f$  соответственно значениям  $l$ :

Подуровень	$s$	$p$	$d$	$f$	$g$	$h$
Орбитальное квантовое число $l$	0	1	2	3	4	5

Первый энергетический уровень ( $n = 1$ ) содержит 1 подуровень –  $1s$ ; второй ( $n = 2$ ) – 2 подуровня –  $2s, 2p$ ; третий ( $n = 3$ ) – 3 подуровня –  $3s, 3p, 3d$ ; четвертый ( $n = 4$ ) –  $4s, 4p, 4d, 4f$  и т. д. Число подуровней в каждом данном уровне равно главному квантовому числу.

*Орбитальное квантовое число определяет форму поверхности максимальной вероятности нахождения электрона и ее симметрию.*

Электронное облако  $s$ -подуровня имеет вид сферической поверхности и не обладает направленностью в пространстве. Облака  $p$ -подуровня имеют форму объемной восьмерки и расположены взаимно перпендикулярно. Форма  $d$ -орбиталей значительно сложнее формы  $p$ -облаков.

**Магнитное квантовое число  $m_l$**  характеризует пространственное расположение электронных облаков, т. е. их ориентацию в пространстве. Число значений, принимаемых  $m_l$ , зависит от значения побочного квантового числа  $l$  и указывает на число орбиталей с данным значением  $l$  и может принимать значения от  $-l$ , проходя через нуль, до  $+l$ :

$$m_l = -l \dots 0 \dots +l.$$

Число орбиталей с данным значением  $l$  равно  $(2l + 1)$ . При  $l = 0$ ,  $m_l$  принимает только одно значение, т. е.  $s$ -подуровень содержит одну атомную орбиталь. При  $l = 2$ ,  $m_l$  принимает три значения, на  $p$ -подуровне находится 3 атомные орбитали, которые отличаются друг от друга своей ориентацией в пространстве по трем осям координат и обозначаются как  $p_x, p_y, p_z$ -облака. На  $d$ - и  $f$ -подуровнях содержится соответственно 5 и 7 орбиталей.

Физический смысл магнитного квантового числа заключается в том, что в спектрах атомов, помещенных во внешнее магнитное поле, обнаруживается дополнительное расщепление спектральных линий. Возникновение новых близлежащих линий свидетельствует о том, что в магнитном поле энергия электронов изменяется. Но это возможно только в случае различной взаимной ориентации электронных облаков. Это говорит о том, что  $s$ -электронное облако имеет шаровую симметрию,  $p$ -подуровни расщепляются в магнитном поле на три различных типа ориентации  $p$ -облаков в пространстве.

Состояние электрона в атоме, которое характеризуется одинаковыми значениями квантовых чисел  $n, l$  и  $m_l$ , т. е. определенными размером, формой и ориентацией в пространстве электронного облака, называется *атомной электронной орбиталью* (АО), или *квантовой ячейкой* (иногда их называют *ячейки Гунда*). Схематически квантовые ячейки принято обозначать в виде клеточки  $\square$ . Соответственно,  $s$ -подуровень состоит из одной АО  $\square$ ,  $p$ -подуровень – из трех АО  $\square\square\square$ ,  $d$ -подуровень – из пяти АО  $\square\square\square\square\square$ ,  $f$ -подуровень – из семи АО  $\square\square\square\square\square\square\square$ .

Каждый энергетический уровень включает  $n^2$ -орбиталей и на нем может располагаться  $2n^2$  электронов. Максимальное число электронов на подуровне равно  $2(2l + 1)$ , см. табл. 1.



**Квантовые числа и максимальное число электронов  
на энергетических уровнях ( $n$ ) и подуровнях ( $l$ )**

Энергетический уровень. Значение $n$	Энергетический уровень $l$		Число АО в данном подуровне	Макс число электронов	
	Значение $l$	Вид орбитали		на $l$ $2(2l + 1)$	на $n$ $2n^2$
1 ( $n = 1$ )	0	$s$	1	$s-2$	2
2 ( $n = 2$ )	0 1	$s$ $p$	1 3	$s-2$ $p-6$	8
3 ( $n = 3$ )	0 1 2	$s$ $p$ $d$	1 3 5	$s-2$ $p-6$ $d-10$	18
4 ( $n = 4$ )	0 1 2 3	$s$ $p$ $d$ $f$	1 3 5 7	$s-2$ $p-6$ $d-10$ $f-14$	32

*Примечание.* При  $n = 5, N = 50; n = 6, N = 70; n = 7, N = 98$  и т. д.

Для полной характеристики поведения электрона в атоме оказалось недостаточно трех рассмотренных выше квантовых чисел.

Изучение структуры линий показало, что два электрона, имеющие одни и те же значения  $n, l$  и  $m_l$ , т. е. одни и те же энергетические характеристики, ту же форму орбитали и одинаковую ориентацию, могут различаться некоторым особым магнитным свойством, которое обуславливает собственный магнитный момент электрона.

**Спиновое квантовое число – спин ( $s$  или  $m_s$ ).** Спин можно рассматривать как результат одновременного вращения электрона вокруг собственной оси, которое возможно в двух взаимно противоположных направлениях, а также вокруг ядра.

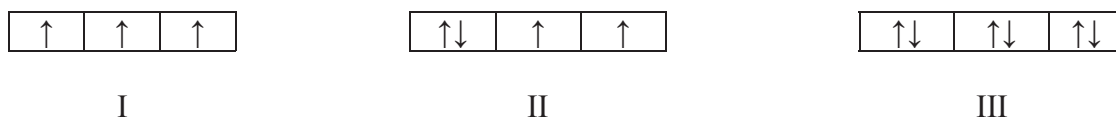
Спиновое квантовое число имеет только два значения:  $+1/2$  и  $-1/2$ . Электроны с положительным или отрицательным спинами обозначаются стрелками, направленными соответственно вверх или вниз. Принято стрелкой вверх  $\uparrow$  обозначать спиновое квантовое число  $+1/2$ , и соответственно стрелкой  $\downarrow$   $-1/2$ .

Ученый В. Паули сформулировал принцип, согласно которому *в атоме не может быть двух электронов, характеризующихся одинаковым значением четырех квантовых чисел*. Следовательно, каждый электрон в атоме имеет свою собственную энергетическую характеристику, отличающуюся от характеристики другого электрона в этом же атоме. Принцип Паули позволяет определить максимальное число электронов на энергетических уровнях, подуровнях, орбиталях. Из принципа Паули следует, что на каждой атомной орбитали максимально могут находиться только два электрона с противоположно направленными спинами.

Получается, что принцип Паули – это запретный принцип. Он запрещает на одной орбитали находиться одновременно двум электронам с одинаковым набором квантовых чисел. Как минимум одно квантовое число (принято считать им – спиновое квантовое число) долж-

но отличаются. Отсюда на одной орбитали могут находиться два электрона, но только с противоположно направленными спинами. Третий электрон «уходит» на другую орбиталь другого подуровня. Из принципа Паули следует, что структура атома имеет иерархический, оболочечный, многослойный вид.

Два электрона, находящиеся на одной орбитали, т. е. имеющие одинаковые значения квантовых чисел  $n$ ,  $l$ , и  $m_l$ , но различные значения спинного квантового числа, называются *спаренными*. Электроны, размещенные по одному на орбиталях одного и того же подуровня, называются *неспаренными*. Например, в состоянии на схеме I имеются три неспаренных электрона, в состоянии II имеется два спаренных и два неспаренных электрона, а в состоянии III все электроны спарены:



Вещества с неспаренными электронами *парамагнитны*, т. е. эти вещества проводят магнитные силовые линии лучше, чем вакуум, и магнитное поле втягивает эти вещества. Парамагнитны атомы водорода, молекула  $N_2O$  и др.

Вещества, имеющие спаренные электроны, *диамагнитны*, т. е. они проводят магнитные силовые линии хуже, чем вакуум, и магнитное поле их выталкивает. Диамагнитны молекулы  $H_2$ ,  $N_2O_4$ , атомы He, Ag и др. вещества.

## 1.2. Строение многоэлектронных атомов

**Электронные конфигурации (формулы) элемента.** Запись распределения электронов в атоме по уровням, подуровням и орбиталям называется *электронной конфигурацией элемента*. Обычно электронная конфигурация приводится для основного состояния атома. При записи электронной конфигурации указывают цифрами главное квантовое число ( $n$ ), буквами – орбитальное квантовое число ( $l$ ). Количество электронов на подуровне обозначают числом в виде степени буквенного обозначения подуровня. Например, электронная конфигурация водорода H –  $1s^1$ , магния Mg –  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ , титана Ti –  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^2$ .

В формуле  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$  цифра 1 перед буквой  $s$  соответствует главному квантовому числу  $n$  и указывает на номер уровня удаленного от ядра. Одновременно эта же цифра 1 указывает на число подуровней на этом уровне. Например, на первом уровне от ядра может быть только  $1s$ -подуровень, на втором уровне два подуровня  $2s$  и  $2p$ , на третьем уровне – три подуровня  $3s$ ,  $3p$  и  $3d$ .

При составлении электронных конфигураций многоэлектронных атомов учитывают *принцип наименьшей энергии, принцип Паули, правила Гунда и Клечковского*.

**Принцип наименьшей энергии.** Современная теория строения атома позволила объяснить электронную структуру всех элементов и показала, что конфигурация электронной структуры невозбужденного атома однозначно определяется зарядом ядра. При заполнении электронами уровней и подуровней последовательность размещения электронов в атоме должна отвечать как наименьшей энергии электрона, так и наименьшей энергии атома в целом. Наиболее устойчивым состоянием атома является такое, в котором электроны находятся на наиболее близких к ядру энергетических уровнях.

При переходе от одного элемента к другому электроны будут постепенно заполнять подуровни и уровни в порядке возрастания их энергии. Однако вследствие взаимодействия электронов между собой в многоэлектронных атомах порядок заполнения уровней и подуровней отличается от ожидаемого в соответствии с расположением энергетических

уровней в атоме водорода. Правило суммы ( $n + l$ ) позволяет предвидеть отличия в расположении энергетических уровней у многоэлектронных атомов по сравнению с атомом водорода.

**Первое правило Клечковского** гласит: при близости энергий подуровней вперед заполняется тот из них, для которого сумма главного и орбитального квантовых чисел ( $n + l$ ) меньше.

Например, для подуровня  $3d$  эта сумма равна  $3 + 2 = 5$ , а для подуровня  $4s - 4 + 0 = 4$ . Поскольку  $4 < 5$ , то согласно первому правилу Клечковского, сначала заполняется  $4s$ -подуровень, а только потом  $3d$ -подуровень.

**Второе правило Клечковского** гласит: при равенстве сумм ( $n + l$ ) для двух разных подуровней вперед заполняется тот из них, для которого число  $n$  меньше, число  $l$  – больше.

Например,  $4p$ -подуровень заполняется раньше  $5s$ -подуровня, т. к. при равенстве сумм ( $n + l = 5$ ) для  $4p$ -подуровня  $n = 4$ , а для  $5s - n = 5$  и соответственно  $l = 1$ , а для  $5s - l = 0$ .

Таким образом, необходимо запомнить, что орбитальному числу  $l$ , представленному в виде цифры, строго соответствует свой символ в виде буквы:

0	1	2	3	4	5...
<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>	<i>h...</i>

Согласно этому правилу последовательность заполнения электронами уровней имеет следующий вид:

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < 4f \approx 5d < 6p < 7s < 5f \approx 6d < 7p.$$

Последовательность возрастания энергии определена опытным путем и называется *шкалой энергии*. Исключение составляют *d*- и *f*-элементы с полностью и наполовину заполненными подуровнями (случаи повышенной устойчивости подуровней), у которых наблюдается так называемый «проскок» электронов: Cr, Cu, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag, Pt. Именно поэтому в выделенном фрагменте  $4s < 3d$  энергия  $4s$ -подуровня ( $n + l = 4 + 0 = 4$ ), а для  $3d$ -подуровня – ( $n + l = 3 + 2 = 5$ ), в связи с этим вначале происходит заполнение  $4s$ -подуровня, затем –  $3d$ .

Энергия  $4p < 5s$ , т. к. сумма ( $n + l$ ) равна 5 в обоих случаях ( $4p \rightarrow 4 + 1 = 5$ ;  $5s \rightarrow 5 + 0 = 5$ ). Поэтому сначала заполняется подуровень с меньшим значением главного квантового числа, т. е.  $4p$ .

Порядок заполнения орбиталей данного энергетического подуровня подчиняется **правилу Гунда**, согласно которому *минимальной энергии атома соответствует такое распределение электронов по атомным орбиталям данного подуровня, при котором абсолютное значение суммарного спинового квантового числа атома максимально*.

Таким образом, правило Гунда устанавливает закономерность распределения электронов по орбиталям внутри одного подуровня. Это означает, что электроны заселяют орбитали по порядку, последовательно. Складывается впечатление, что природа умеет считать. Например, на *p*-подуровне в начале один электрон заселяет одну орбиталь, затем второй электрон заселяет вторую орбиталь, третий электрон – третью орбиталь (причем у всех этих электронов одинаковое направление спинов – стрелка вверх), затем четвертый электрон с противоположным направлением спинов (стрелка вниз), согласно принципу Пауля, заполняет первую орбиталь, аналогично пятый электрон – вторую орбиталь и, наконец, шестой электрон – последнюю, третью, орбиталь.

Иными словами, при заполнении электронами атомных орбиталей данного подуровня сначала на каждой атомной орбитали размещается по одному электрону и только после заполнения всех АО в каждой из них может расположиться другой электрон. Электроны с противоположными спинами на одной и той же АО образуют двухэлектронное облако, и их суммарный спин равен нулю.

Например, если в атоме азота (N) имеется семь электронов (электронная формула азота  $1s^2 < 2s^2 < 2p^3$ ), то они будут распределяться согласно правилу Гунда по АО одним единственным способом:

$1s^2$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow$	$\uparrow$	$\uparrow$
$2s^2$	$\uparrow\downarrow$			

### 1.3. Периодическая система элементов Д.И. Менделеева и электронная структура атомов

В 1869 г. Д.И. Менделеевым был открыт периодический закон: *свойства простых тел, а также формы и свойства соединений элементов находятся в периодической зависимости от величины атомных весов элементов.*

Физический смысл периодического закона подтвердило развитие учения о строении атома. В связи с этим произошло уточнение формулировки периодического закона Д.И. Менделеева: *свойства элементов, а также их соединений находятся в периодической зависимости от величин заряда ядер атомов элементов.*

Периодическая система (ПС) – графическое отображение этого закона, таблица, в которой расположены все известные химические элементы (Приложение 3). Наиболее общепринятыми являются короткая и длиннопериодная формы периодической системы.

В периодической системе элементы расположены в порядке возрастания зарядов ядер их атомов. Порядковый номер элемента равен заряду ядра и, соответственно, общему количеству электронов и протонов этого атома.

Периодическая система элементов состоит из **периодов**, **групп** и **подгрупп**.

Горизонтальные ряды химических элементов в таблице Д.И. Менделеева, в пределах которых последовательно изменяются их химические свойства, называются *периодами*. В настоящее время периодическая система содержит 7 периодов.

Первые три периода называются *малыми*. В первом *периоде* только два элемента: водород H и гелий He. Вторым и третьим – содержат по восемь элементов. *Второй период* – это элементы от № 3 (литий Li – щелочной металл) до № 10 (неон Ne – инертный газ). *Третий период* – это элементы от № 11 (натрий Na – щелочной металл) до № 18 (аргон Ar – инертный газ).

Начиная с четвертого, периоды называются *большими*. В *четвертом* и *пятом периодах* находится по 18 элементов. Для этих периодов характерно то, что более или менее полное повторение свойств наблюдается через 18, а не через 8 элементов. *Шестой период* – это 32 элемента от щелочного металла – цезия Cs (№ 55) до инертного газа – радона Rn (№ 86), 14 элементов в этом периоде, следующие за лантаном La (№ 57), очень сходны по своим свойствам, они называются *лантаноидами*. Поскольку различие в химических свойствах этих элементов очень мало, они вынесены из таблицы в отдельную строку.

Вертикальные ряды в таблице называются *группами*. В периодической системе 8 групп, что соответствует максимальному числу электронов во внешних оболочках. Каждая группа делится на *главную* и *побочную подгруппы*. Подгруппы включают в себя элементы с аналогичными электронными структурами и сходными химическими свойствами.

*Главные подгруппы* (подгруппы *A*) составляют элементы малых и больших периодов. *Побочные подгруппы* (подгруппы *B*) – элементы только больших периодов. К побочным подгруппам принадлежат *d*- и *f*-элементы.

Периодический закон и периодическая система оказали большое влияние на дальнейшее развитие химии и смежных с ней естественных наук. Руководствуясь периодическим законом, Д.И. Менделеев предсказал несколько новых элементов, с большой точностью обосновал их свойства и указал те места, которые должны занять эти элементы в периодиче-

ской системе уже известных элементов. Последующее открытие существующих в природе элементов скандия Sc, галлия Ga и германия Ge подтвердило предвидение Д.И. Менделеева. Намного позже в природе были обнаружены элементы полоний Po и рений Re и искусственно получен радиоактивный элемент технеций Tc, также предсказанные Д.И. Менделеевым.

Распределение электронов по уровням и подуровням атома подчиняется рассмотренным выше принципам и правилам распределения электронов многоэлектронных атомов. Рассмотрим связь между положением элемента в периодической системе и электронным строением его атома.

**Первый период** состоит из двух элементов: водорода и гелия. Минимальное значение энергии для единственного электрона водорода соответствует энергетическому уровню ( $n = 1$ ), т. е. состоянию  $1s$ . У гелия два электрона, которые занимают положение  $1s^2$ . Водород и гелий относятся к *s-элементам*.

Начиная с лития, формируется **второй период** ( $n = 2$ ). Период завершается неоном, у которого заполнены  $2s$ - и  $2p$ -подуровни:



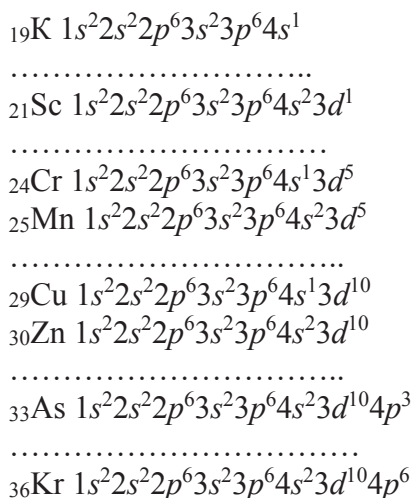
У первых двух элементов Li и Be формируется  $2s$ -подуровень, поэтому они относятся к *s-элементам*. Остальные шесть элементов периода входят в число *p-элементов*.

От натрия до аргона комплектуется **третий период**:



Хотя после заполнения  $3s$ - и  $3p$ -подуровней в третьем энергетическом уровне остается свободным весь  $3d$ -подуровень, его заполнение не происходит, он останется пока свободным, т. к. в соответствии с правилом Клечковского подуровень  $4s$  характеризуется более низкой энергией, чем подуровень  $3d$ .

Следующие за аргоном калий K и кальций Ca открывают **четвертый период**. У них начинает заполняться четвертый энергетический уровень, и только со скандия Sc возобновляется достройка третьего уровня (формирование  $3d$ -подуровня). Заполнение  $3d$ -подуровня в **декаде Sc – Zn** осуществляется не вполне регулярно: у атома хрома Cr и меди Cu происходит «проскок» внешнего *s*-электрона на предшествующую *d*-орбиталь. «Проскок» электрона в атоме хрома приводит к заполнению *d* наполовину (конфигурация  $d^5$ ), а у меди – к его полному комплектованию (конфигурация  $d^{10}$ ). Аналогичные неравномерности в застройке *d*-, а затем и *f*-подуровней наблюдаются и в следующих периодах. После цинка, вплоть до криптона, продолжается заполнение четвертого энергетического уровня ( $4p$ -подуровень). Таким образом, четвертый (большой) период содержит 18 элементов:





## ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>Введение</b> .....	3
<b>1. Строение атома</b> .....	4
1.1. Квантово-механическое объяснение строения атома .....	4
1.2. Строение многоэлектронных атомов .....	9
1.3. Периодическая система элементов Д.И. Менделеева и электронная структура атомов .....	11
1.4. Свойства элементов и периодическая система .....	14
1.5. Связь кислотно-основных свойств с электроотрицательностью атомов .....	18
1.6. Зависимость реакций иона от положения элемента в таблице Д.И. Менделеева .....	32
1.7. Химический тренажер – I: 50 вопросов и ответов по теории строения атома и периодической системе Д.И. Менделеева .....	36
<b>2. Строение молекул и химическая связь</b> .....	70
2.1. Ковалентная связь. Метод валентных связей .....	70
2.2. Гибридизация атомных орбиталей .....	75
2.3. Ковалентные связи с участием атома углерода .....	81
2.4. Ионная связь .....	85
2.5. Металлическая связь .....	86
2.6. Водородная связь .....	86
2.7. Поляризация связи и дипольный момент .....	87
2.8. Основные положения модели Гиллеспи (ОЭПВО) .....	93
2.9. Предсказание пространственного строения молекул и ионов на основе модели Гиллеспи .....	94
2.10. Основные положения метода молекулярных орбиталей (ММО) .....	95
2.11. Характеристики молекул, оцениваемые из энергетической диаграммы молекулярных орбиталей .....	96
2.12. Понятие о синглетном кислороде .....	96
2.13. Химический тренажер – II: 50 вопросов и ответов по теории химической связи и строению молекул .....	97
<b>3. Квантово-механические закономерности проявления вязущих свойств</b> .....	110
3.1. Определение вязущего вещества .....	110
3.2. Классификация вязущих веществ .....	111
3.3. Основные понятия спиновой химии .....	122
3.4. Гомолитические и гетеролитические процессы. Парамагнитные частицы .....	123
3.5. Управление спиновыми состояниями взаимодействующих парамагнитных микрочастиц .....	124
3.6. Магнитные эффекты первого поколения .....	126
3.7. Магнитные эффекты второго поколения .....	127
3.8. Магнитные эффекты третьего поколения (спиновый катализ) .....	127
3.9. Универсальная статическая модель (УСМ) детального представления и описания элементарных актов химических процессов .....	128
3.10. Применение методов спиновой химии в строительных материалах и технологиях .....	133
3.11. Элементарные акты гидратации трехкальциевого силиката (алита) .....	138
<b>Заключение</b> .....	144
<b>Список рекомендуемой литературы</b> .....	145
<b>Приложение 1.</b> Объемная 3D-форма таблицы Д.И. Менделеева .....	147
<b>Приложение 2.</b> Проблемы верхней границы таблицы Д.И. Менделеева .....	152
<b>Приложение 3.</b> Современная периодическая система элементов таблицы Д.И. Менделеева .....	161



*Учебное издание*

*Саркисов Юрий Сергеевич*

## ХИМИЯ В СТРОИТЕЛЬСТВЕ

Часть 1

Редактор Т.А. Титоренко  
Оригинал-макет подготовлен Т.А. Титоренко

Подписано к использованию: 30.04.2020.  
Объем издания: 9,15 Мб.  
Тираж 30 экз.

Изд-во ТГАСУ, 634003, г. Томск, пл. Соляная, 2.  
rio@tsuab.ru, +7 (3822) 65-37-61.