N E W S
OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN
SERIES CHEMISTRY AND TECHNOLOGY
ISSN 2224-5286
Volume 3, Number 429 (2018), 79 – 85

УДК 542.8:544.14:539.19

A.M. Tatenov, V.V. Savelyeva, A.S. Kaliev

Euroasian technological university, Almaty, Kazakhstan.
tatenov_adambek@mail.ru, vika-sova@mail.ru

THE MECHANISM OF COMPOUND OF CHEMICAL ELEMENTS FOR THE TABLE OF D.I. MENDELEYEV AND THE VIRTUAL INTERAKTIVIZATION IN THE PROGRAM ENVIRONMENT FLASH-CC, JAVA SCRIPT

Abstract. It is asked creations of the virtual interactive laboratories with obviousness of deep mechanisms of chemical reactions at the atomic level in inorganic chemistry.

On the basis of a research practical use of results of the virtual laboratory operated (interactive) with visualization and animation of mechanisms course of processes, on inorganic and organic chemistry are planned. Will be applied to upgrading of tutoring, big saving of time (about 60% for assimilation of a subject), to self-contained carrying out research works, to development of creativity of students. The product will be used all system of secondary education (schools, lyceums, gymnasiums), all system of the higher education where study chemistry, research institutes and laboratories and also food, chemical, pharmaceutical, other technological industries.

Keywords: periodic system of elements, atom, electron, proton, neutron, atomic weight, Pauli's exclusion principle, rule Hunda, orbital, energy levels, valence.

УДК 542.8:544.14:539.19

А.М. Татенов, В.В. Савельева, А.С. Калиев

Евразийский технологический университет. Г.Алматы.Казахстан.

МЕХАНИЗМ СОЕДИНЕНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ ТАБЛИЦЫ Д.И.МЕНДЕЛЕЕВА И ВИРТУАЛЬНАЯ ИНТЕРАКТИВИЗАЦИЯ В ПРОГРАММНОЙ СРЕДЕ FLASH-CC, JAVA SCRIPT

Аннотация. Ставится вопрос создания виртуальных интерактивных лаборатории с наглядностью глубинных механизмов химических реакций на атомарном уровне по неорганической химии.

На основе исследования планируются практические применения результатов виртуально-управляемой (интерактивная) лаборатории с визуализацией и анимацией механизмов протекания процессов, по неорганической и органической химии. Будут применяться для повышения качества обучения, большой экономии времени (около 60% на усвоение предмета), для самостоятельного проведения исследовательских работ, для развития творчества обучающихся. Продукт будут использовать вся система среднего образования (школы, лицеи, гимназии), вся система высшего образования где изучают химию, научно-исследовательские институты и лаборатории, а также пищевая, химическая, фармацевтическая, другие технологические индустрии.

Ключевые слова: периодическая система элементов, атом, электрон, протон, нейтрон, атомная масса, принцип Паули, правило Хунда, орбиталь, энергетические уровни, валентность,

Введение.

Периодический закон – величайшее достижение химической науки, основа всей современной химии. С его открытием химия перестала быть описательной наукой, в ней стало возможным научное предвидение.

Периодический закон открыт Д. И. Менделеевым в 1869 г. Ученый сформулировал этот закон так: «Свойства простых тел, также формы и свойства соединений элементов находятся в периодической зависимости от величины атомных весов элементов»[1, 2].

Более детальное изучение строения вещества показало, что периодичность свойств элементов обусловлена не атомной массой, а электронным строением атомов.

Заряд ядра является характеристикой, определяющей электронное строение атомов, а следовательно, и свойства элементов. Поэтому в современной формулировке Периодический закон звучит так: свойства простых веществ, а также формы и свойства соединений элементов находятся в периодической зависимости от порядкового номера (от величины заряда ядра их атомов). Выражением Периодического закона является периодическая система элементов.

Периодическая система Д. И. Менделеева

Периодическая система элементов Д. И. Менделеева состоит из семи периодов, которые представляют собой горизонтальные последовательности элементов, расположенные по возрастанию заряда их атомного ядра. Периоды 1, 2, 3, 4, 5, 6 содержат соответственно 2, 8, 8, 18, 18, 32 элемента. Седьмой период не завершен. Периоды 1, 2 и 3 называют *малыми,* остальные - *большими.*

Каждый период (за исключением первого) начинается атомами щелочных металлов (Li, Na, K, Rb, Cs, Fr) и заканчивается благородным газом (Ne, Ar, Kr, Xe, Rn), которому предшествует типичный неметалл. В периодах слева направо постепенно ослабевают металлические и усиливаются неметаллические свойства, поскольку с ростом положительного заряда ядер атомов возрастает число электронов на внешнем уровне [2].

В первом периоде, кроме гелия, имеется только один элемент - водород. Его условно размещают в IA или VIIA подгруппе, так как он проявляет сходство и со щелочными металлами, и с галогенами. Сходство водорода со щелочными металлами проявляется в том, что водород, как и щелочные металлы является восстановителем и, отдавая один электрон, образует однозарядный катион. Больше общего у водорода с галогенами: водород, как и галогены неметалл, его молекула двухатомна, он может проявлять окислительные свойства, образуя с активными металлами солеподобные гидриды, например, NaH, CaH_2.

В четвертом периоде вслед за Ca расположены 10 переходных элементов (декада Sc - Zn), за которыми находятся остальные 6 основных элементов периода (Ga - Kr). Аналогично построен пятый период. Понятие *переходный элемент* обычно используется для обозначения любого элемента с валентными d– или f–электронами.

Шестой и седьмой периоды имеют двойные вставки элементов. За элементом Ba расположена вставная декада d–элементов (La - Hg), причем после первого переходного элемента La следуют14 f–элементов - *лантаноидов* (Ce - Lu). После Hg располагаются остальные 6 основных p-элементов шестого периода (Tl - Rn).

В седьмом (незавершенном) периоде за Ac следуют 14 f–элементов-*актиноидов* (Th - Lr). В последнее время La и Ac стали причислять соответственно к лантаноидам и актиноидам. Лантаноиды и актиноиды помещены отдельно внизу таблицы.

Таким образом, каждый элемент в периодической системе занимает строго определенное положение, которое отмечается *порядковым,* или *атомным,* номером [3].

В периодической системе по вертикали расположены восемь групп (I – VIII), которые в свою очередь делятся на подгруппы - *главные,* или подгруппы А и *побочные,* или подгруппы Б. Подгруппа VIIIБ-особая, она содержит *триады* элементов, составляющих семейства железа (Fe, Co, Ni) и платиновых металлов (Ru, Rh, Pd, Os, Ir, Pt).

Сходство элементов внутри каждой подгруппы - наиболее заметная и важная закономерность в периодической системе. В главных подгруппах сверху вниз усиливаются металлические свойства и ослабевают неметаллические. При этом происходит увеличение устойчивости соединений элементов в низшей для данной подгруппы степени окисления. В побочных подгруппах – наоборот

– сверху вниз металлические свойства ослабевают и увеличивается устойчивость соединений с высшей степенью окисления.

Периодическая система и электронные конфигурации атомов

Поскольку при химических реакциях ядра реагирующих атомов не изменяются, то химические свойства атомов зависят от строения их электронных оболочек.

Заполнение электронных слоев и электронных оболочек атомов происходит в соответствии с принципом Паули и правилом Хунда.

Принцип Паули (запрет Паули)

Два электрона в атоме не могут иметь четыре одинаковых квантовых числа (на каждой атомной орбитали может находиться не более двух электронов).

Принцип Паули определяет максимальное число электронов, обладающих данным главным квантовым числом n (т.е. находящихся на данном электронном слое): $N_n = 2n^2$. На первом электронном слое (энергетическом уровне) может быть не больше 2 электронов, на втором – 8, на третьем – 18 и т. д.

В атоме водорода, например, имеется один электрон, который находится на первом энергетическом уровне в 1s – состоянии. Спин этого электрона может быть направлен произвольно ($m_s = +1/2$ или $m_s = -1/2$). Следует подчеркнуть еще раз, что первый энергетический уровень состоит из одного подуровня – 1s, второй энергетический уровень – из двух подуровней – 2s и 2p, третий – из трех подуровней – 3s, 3p, 3d и т.д. Подуровень, в свою очередь, содержит орбитали, число которых определяется побочным квантовым числом l и равно $(2l + 1)$. Каждая орбиталь условно обозначается клеткой, находящийся на ней электрон – стрелкой, направление которой указывает на ориентацию спина этого электрона.

Расположение спинов определяется правилом Хунда, которое гласит: заполнение энергетических уровней происходит таким образом, чтобы суммарный спин был максимальным.

В атоме каждый электрон занимает свободную орбиталь с наиболее низкой энергией, отвечающей его наибольшей связи с ядром. В 1961 г. В.М. Клечковский сформулировал общее положение, согласно которому энергия электронных орбиталей возрастает в порядке увеличения суммы главного и побочного квантовых чисел (n + l), причем в случае равенства этих сумм, меньшей энергией обладает орбиталь с меньшим значением главного квантового числа n [5, 7].

Определение валентности

Согласно по электронным формулам, все элементы VI A и VI B групп имеют электронные конфигурации законченные на p^4 и d^{4-5}. В рамках электронной теории валентность атома определяется на основании числа непарных электронов, которые участвуют в образовании электронных пар с электронами других атомов.

В образовании химических связей участвуют только электроны, находящиеся на внешней оболочке атома. Поэтому максимальная валентность химического элемента – это число электронов во внешней электронной оболочке его атома.

Исходя из этого, все элементы VI A и VI B групп показывают разные валентности:II, III, IV, V, VI.

А в случаях этих трех элементов их валентность определяется явлением «проскока». Явление «проскока» представляет собой символическое перенесение одного из двух валентных s-электронов на d-подуровень, что отражает неравномерность удержания ядром внешних электронов.

Определение способности вступать в реакцию элемента с другими элементами, причина ограниченности реакции химических элементов VI A и VI B групп

Внешним уровнем атома называется самый далекий от ядра уровень, на котором еще есть электроны. Именно эта оболочка соприкасается при столкновении с внешними уровнями других атомов в химических реакциях. При взаимодействии с другими атомами кислород способен принять 2 дополнительный электрон на свой внешний уровень. При этом атом кислород получит *завершенный*, то есть максимально заполненный внешний электронный уровень, на котором расположатся 6 электронов. И этим объясняется причина ограниченности реакции химических элементов. Исходя из этого, правила Гунда является аналогичным и для всех элементов этой группы.

Характеристики химических элементов закономерно изменяются в группах и периодах [13].

Поскольку химическая связь, строение атома, электронные оболочки атома влияют на свойства элемента, то способность вступать в реакцию элемента тоже зависят от этих факторов. Например, молекула кислорода состоит из двух атомов. Химическая связь ковалентная неполярная[].

Кислород отличает высокая реакционная способность, он окисляет многие вещества уже при комнатной температуре. Кислород образует соединения со всеми химическими элементами, кроме гелия, неона и аргона. С большинством элементов он взаимодействует непосредственно, кроме галогенов, за исключением фтора, золота и платины.

Определение способности вступать в реакцию элемента с другими элементами, причина ограниченности реакции химических элементов лантаноидов

Лантаноиды – это 14 элементов, следующих за лантаном, у которых к электронной конфигурации лантана последовательно добавляются 14 4f-электронов. В табл. 8.12 приведены электронные конфигурации лантаноидов и их наиболее устойчивые степени окисления [8]. Общая электронная конфигурация лантаноидов – $4f^{2-14}5d^{0-1}6s^2$.

Интерактивизация и виртуализация на компьютере таблицы Менделеева и химических соединений элементов в программной среде Flash-CC, Java- script. Анимационные образы в движений и работа с ними требует большого объема памяти. А для сокращения емкости памяти, использование для виртуальной –интерактивизаций процессов, Flash является очень эффективным. [14-17]. От основного векторно – графического формата Flash технологий сформировалась Shorewave Flash (SWF) – ответвление. Но, это не первый векторный формат, это механизм передачи Web – страницы к SWF как нахождение графического изображения, согласующего звена инструментального оборудования и графического изображения. Преимущество SWF- приложения это его легко переносимость в другую среду, т.е. этот формат используется в разных информационно – программной платформе (в операционной системе Mac OS Macintosh, в ОС -Windows OS). Еще одна особенность SWF – построенные основные изображения не только принимают анимацию но и дополнительно, возможность создавать интерактивные элементы и аудио установки, а из них формировать интерактивную виртуальную лабораторию, очень удобно форматы SWF, CC – программной среды Flash. Еще одна причина популярности SWF – формата это очень легкое и удобное применение иструментариев для других платформ разработка фирмы Macromedia. Например:-для создания мультимедийных презентаций применяют программный аппарат – Macromedia Director Shockwave Studio, - а для создания графических образов применяются программный аппарат – Macromedia Authorwave, Macromedia Course Builder. Поэтому среди Web – публикации самое узнаваемое и легко применяемая публикация это Macromedia Flash Web – дает возможность украсить каждый сайт анимацией и собрать полную страницу. Action Script Tools - позволяет Web- дополнение собрать эффективно и его новые языки аналогично похоже на сценарий Java Script, Action Script и с помощью редактора Devigger является решением часто применяемых элементов. Для виртуализации и интерактивизации электронных орбиталей, электронных конфигурации по каждому элементу таблицы Менделеева выбрана компьютерно-програмная среда в формате CC – программной среды Flash и Web- дополнение сценарий Java Script, Action Script и с помощью редактора Devigger. По каждому элементу таблицы Менделеева создавалось электронная конфигурация согласно закону Гунда. По правилу Гунда при заполнении электронами одинаковых по энергии орбиталей электроны располагаются в первую очередь по одиночке на каждой орбитали, и лишь потом начинается заселение этих орбиталей вторыми электронами.

Например электронная формула кислорода несет очень важную информацию: внешний электронный уровень кислорода заполнен электронами не до конца (на нем 4+ 2= 6 электронов) и до полного заполнения не хватает два электрона. Общий вид виртуально-интерактивной таблицы в названной программной среде приведен на рисунке-1. При нажатии любой кнопки автоматически изображаются в движений- динамике электронные конфигурации любого химического элемента в плоском-2D и объемном- 3D формате, а также последовательность энергетических уровней в порядке возрастания энергии по следующей схеме:

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