

СТРОЕНИЕ ЭЛЕКТРОНА И ЭЛЕКТРОННАЯ КОНФИГУРАЦИЯ АТОМОВ И ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ В СВЕТЕ ГИПОТЕЗЫ ТРАНСФОРМАЦИИ ЭЛЕКТРОННЫХ ОРБИТАЛЕЙ

Р. А. Эшчанов

Профессор Чирчикского государственного педагогического института
Ташкентской области
ruzimboy@gmail.com

Ш. Б. Хасанов

Старший научный сотрудник Хорезмской академии Маъмуна
shadlik@mail.ru

М. Р. Ибрагимова

Старший научный сотрудник Института общей и неорганической химии АН
РУз
mavluda@gmail.com

АННОТАЦИЯ

В статье приведены новые взгляды на строение электрона, конфигурация электронов в атоме и предлагаются новые механизмы образования химической связей в свете гипотезы трансформации электронных орбиталей в атомах.

Ключевые слова: форма электронов, орбиталь, возбужденное состояние, притяжение и отталкивание электронов, теория трансформация электронных орбиталей в химической связи

ВВЕДЕНИЕ

В мировой литературе имеется очень много попыток построить структуру электрона исходя из соотношения неопределенностей координат и импульса, размерности постоянной Планка, простых соотношений между приведенными величинами. При рассмотрении существующих вариантов строения электрона бросаются в глаза недостатки и нестыковки с реальностью. Поэтому каждый исследователь

предлагает такую модель, которую представляет, работая с электронами.

В работе [1] на основании разработанной теории предложена модель электрона, объясняющая формы s-, p- и d- орбиталей.

В предлагаемой модели электрон – это объемная волна всеобъемлющей среды, сконцентрированная в некотором шарообразном (или более сложной формы) объеме вокруг протона. Всеобъемлющая среда (ВС) циркулирует в виде вихря в некоторой плоскости S, а плоскость S сама вращается в виде вихря вокруг некой оси, лежащей на этой плоскости. Тогда образуется объемная волна ВС в виде шара. Такой шарообразный непрерывно циркулирующий сгусток всеобъемлющей среды и есть электрон. Электрон является объемной волной всеобъемлющей среды. Всеобъемлющая среда циркулирует в электроне одновременно в нескольких плоскостях вращения.

ЛИТЕРАТУРА И МЕТОДОЛОГИЯ

Если записать в параметрическом виде уравнение искомой кривой наглядно показывающей движение волны-электрона, то оно будет иметь такой вид:

$$F(R,t) = \begin{cases} X(t) = R \cdot \cos(2 \cdot \pi \cdot f_2 \cdot t) \\ Y(t) = -R \cdot \cos(2 \cdot \pi \cdot f_1 \cdot t) \cdot \sin(2 \cdot \pi \cdot k \cdot f_2 \cdot t) \\ Z(t) = R \cdot \sin(2 \cdot \pi \cdot f_1 \cdot t) \cdot \sin(2 \cdot \pi \cdot k \cdot f_2 \cdot t) \end{cases}$$

Здесь

f_2 – частота вращения вихря, который создает заряд электрона

f_1 – частота вращения вихря, который создает спин электрона

k – коэффициент. Для S-электрона $k = 1$

t – параметр времени

Проекция этой пространственной траектории на оси X, Y, Z будут иметь следующий вид (рисунок 1):

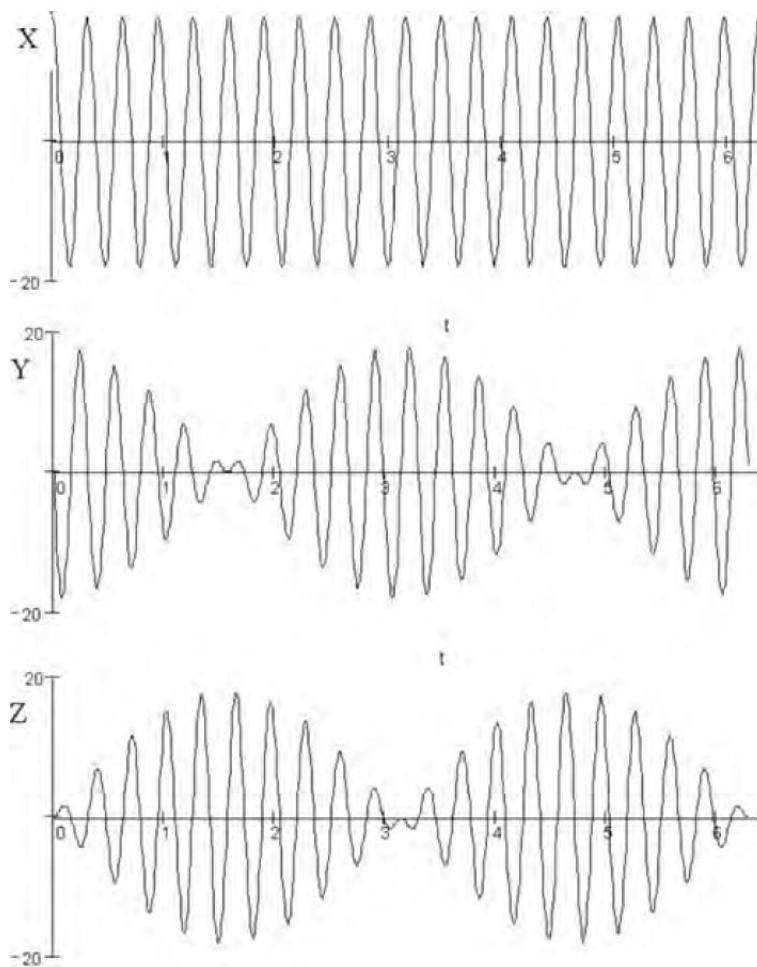


Рис.1. Проекция функции $F(R,t)$ на оси X, Y, Z

А в трехмерном пространстве эта траектория будет выглядеть так (рисунок 2) [1, 6-стр]:

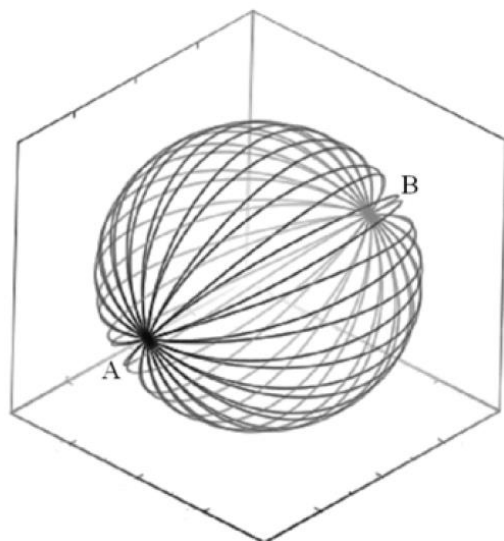


Рис.2. График функции $F(R,t)$ при $k=1$ (модель S-электрона)



Рис.3. Правый и левый торы свернутые по принципу ленты Мёбиуса [2]

Как видим, сколько ученых столько и видений строения электрона. Но во всех случаях, электрон ассоциируется с некоей материальной точкой, которая отличается от других электронов квантовыми числами, а в основном спином. Также форма электрона в атомной орбитали представляет собой шарообразную, гантелеобразную [3], а также несколько искаженных эллипсоидов [4]. При этом с некоторыми предлагаемыми формами электронов невозможно согласиться. В предлагаемых формах во первых нарушается стационарность электрона, как электромагнитной волны, во вторых s-электроны свободно скрещиваются с p,d и f-электронами в атомной орбитали, а также p,d,f форма электронов в одной орбитали перекрывает друг друга, все это невозможно как-то объяснить существующими теориями и гипотезами, так как электромагнитные волны, коими являются электроны, в атоме не возможно при этих условиях ограничить и не дать им перекрываться. Кроме того, если рассматривать электрон в качестве частицы, образование химических соединений также приводят к возникновению вопроса, как точка или шар может покинуть свою стационарную орбиталь и не разрушить равновесия системы атома? Возможна ли стабильная система, если наблюдается дефект заряда? Такие вопросы до сих пор остаются открытыми, и мы сегодня попробуем ответить на эти вопросы.

До сих пор химики открыто игнорируют дуалистический характер электрона. В чем это отражается спросите вы? Наглядным примером этому является гибридизация, в основе которого лежит понятие о неизменной форме электронов. Шарообразном, гантелеобразном и др. сложных формах. Если электрон является волной, то о какой форме вообще может идти речь, даже если допустить возможность какого-то сгущения волны до определенных форм, как возможно перекрывание этих волн? Вот вопросы, которые мучают и ставят в тупик многие умы.

Как известно из курса физики [5] атом имеет радиус порядка 10^{-10} м, если перевести это значение в форму волн, то получится волна со спиралевидным излучением (рис.4).

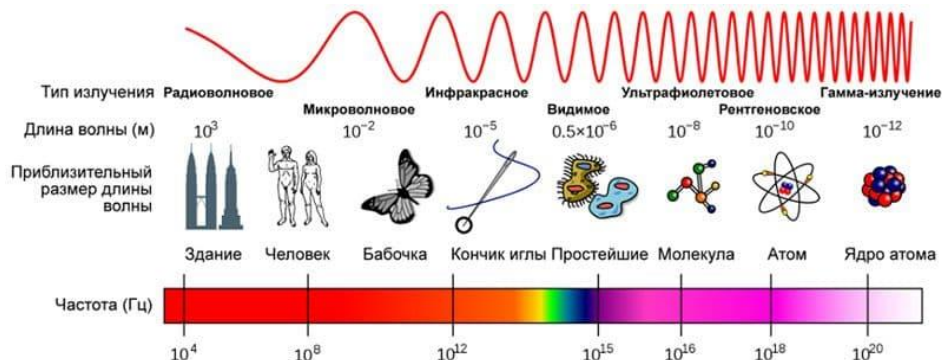
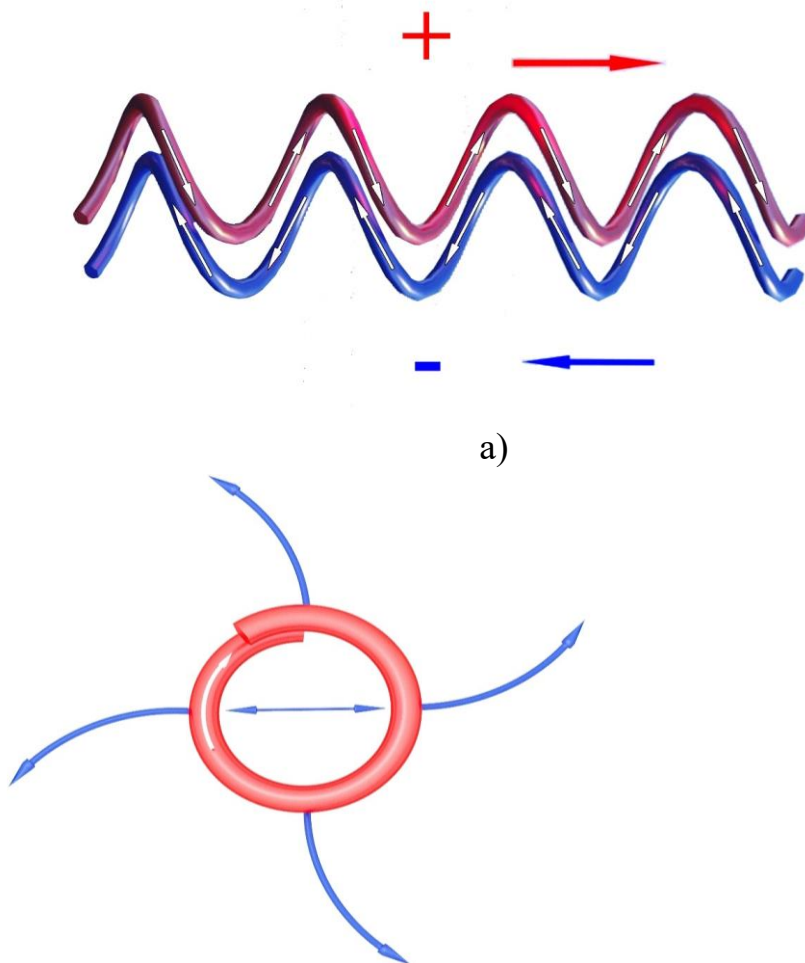


Рис.4. Форма излучения волн различной частоты

Исходя из этих представлений мы предлагаем для электрона строение, согласно которому электрон — это волна спиралевидной формы. В пространстве такая волна может иметь два направления вращения: налево или направо (что и будет выражать спин электрона) (рис.5).



б)

**Рис.5. Форма электрона: а) Спиралевидное движение в оси направления электромагнитной волны;
б) поперечное сечение вращательно-колебательного движения электромагнитной волны электрона**

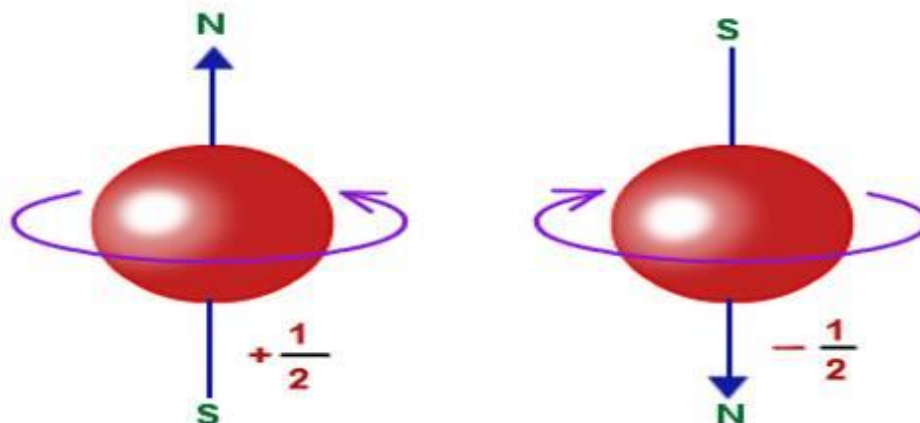


Рис.6. Спин электрона по классической теории

Спиралевидное вращательно-колебательное движение в оси направления электромагнитной волны при высоких частотах образует спин электрона (рис.5), многие теоретики показывают спин как вращающиеся точки вокруг своей оси (рис.6), что далеко от истины.

А как располагаются электроны в орбитали, и вообще уместно ли понятие орбитали? Ведь, электрон как мы утверждаем не точка, не частица, чтобы иметь определенное место. Даже Гейзенберг, признался, что невозможно определить скорость и местоположение электрона одновременно. По предлагаемой нами гипотезе электрон не есть частица, занимающая определенное место в пространстве, электрон полностью заполняет пространство вокруг ядра. И как во всех вращающихся объектах в пустоте между ядром и электроном возникает электромагнитное поле шарообразной, полусферической и секториально-сферической формы, которое мы можем принять за форму электрона (рис.7-13).

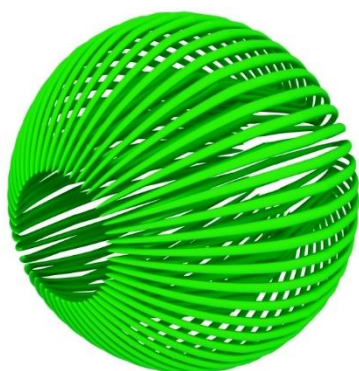


Рис.7. Сферический электрон (S^1)

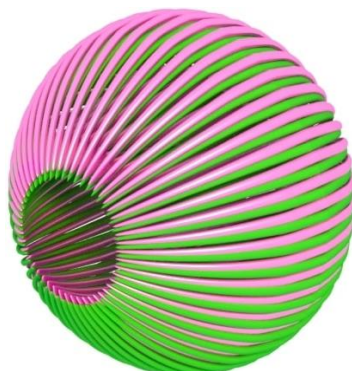


Рис.8. Сферические два электрона с противоположными спинами (S^2)

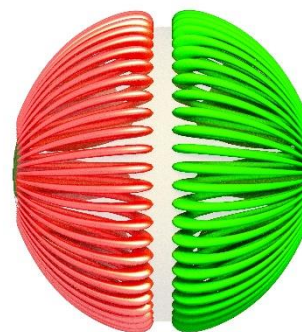


Рис.9. Полусферическое электрона ($S_{em1}^1 S_{em2}^1$)



Рис.10. Полусферические два электрона с противоположными спинами (S_{em1}^2)



Рис.11. Секториальное сферическое электрона (S_{ec1}^1)



Рис.12. Секториальные сферические два электрона с противоположными спинами (S_{ec1}^2)



Рис.13. Спаренный электрон при образовании химической связи (CB)

Нами предлагаются следующие состояния электронов: в рис.7 приведено состояние электрона, когда один электрон находится в одной орбитали (s^1), если в одной орбитали находятся два электрона, то в следствии разности спинов они перекрываются с образованием одной единой сферы, которая заполняет

данный орбиталь (s^2) (рис.8). Если в атоме имеются две орбитали, и в каждой находится по одному электрону, то заполнение происходит по схеме рис.9. При этом атом орбиталь делится на две условные сферы, которые будут заполнены двумя электронами, находящимися в полусферической форме ($S_{em1}^1 S_{sec2}^1$). При наличии трех электронов спаренные электроны (S_{em1}^2) состояние отвечает рис.10. Увеличение числа электронов в атоме приводит к разделению атома орбиталь на условные секториальные сферы, при этом форма и состояние электрона соответствует (S_{ec1}^1) рис.11. Появление спаренных электронов в таких сферах приводит к образованию электронных пар с разными спинами и их условное обозначение приводится в рис.12. При образовании химической связи (СВ- химическая связь) между двумя электронами разных элементов приводит к образованию сплюснутых дисков, состоящих из двух взаимно прикрываемых электронов с противоположными спинами (рис.13).

Как видно из приведенных изображений по нашей гипотезе электрон и остальные элементарные частицы являются закрытыми электромагнитными волнами с различными частотами, что определяет их характер, например, световая волна тоже закрытая волна с различными частотами (рис.14):



Рис.14. Распространение светового луча, как волны

В квантовой механике есть такое понятие как «суперпозиция» при котором фотон расширяется при прохождении через отверстие, но стоит ему соприкоснуться с чем-либо, так сразу происходит «коллапс» - сжатие до начального объема. До сих пор, считается, что «это нельзя объяснить не потому, что, мы не можем, а потому что это не объяснимо по сути». Но если будем руководствоваться предлагаемой нами гипотезой и считать, что, фотон есть поток дискретных частиц, то по второму закону термодинамики, энтропия (беспорядочность) в такой системе увеличивается, что приводит к расширению фотона в пространстве. Но стоит нам оградить данную систему (соприкосновение с препятствием), как система будет уже замкнутой, и внутренняя энергия системы будет стремиться к минимуму, что приводит к «коллапсу» - сжатию фотона.

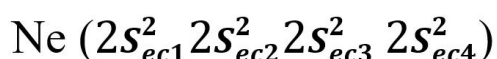
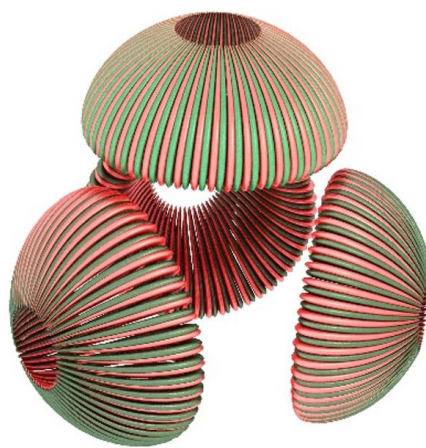
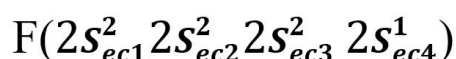
Таким образом, дискретные волны светового луча имеют одно направление, но каждая волна может независимо изменять направление, а при встрече с препятствием закрытая волна разрушается, что приводит к поглощению или отражению волны данным объектом. Поглощение волны приводит к изменению энергии объекта, так как волна при разрушении закрытой системы испускает свою энергию.

Следовательно, электрон нужно рассматривать не как частицу в пространстве, а как электромагнитную волну, имеющую спиралевидное вращательно-колебательное движение закрытой формы. При этом предлагаемая нами форма электрона дает возможность объяснения перекрывания электронных облаков, не нарушая стационарные орбиты атома, предложенные Бором.

Теперь рассмотрим электрон в атомной орбитали.

Электронные орбитали заполняются согласно принципу Паули, при этом максимальное количество ячеек в орбитали для заполнения равно половине максимального числа электронов по принципу Паули, при этом количество ячеек увеличивается по мере надобности (по мере заполнения электронами).

По предлагаемой теории электронное строение последнего слоя элементов первого и второго периода будет выглядеть следующим образом (рис.15).



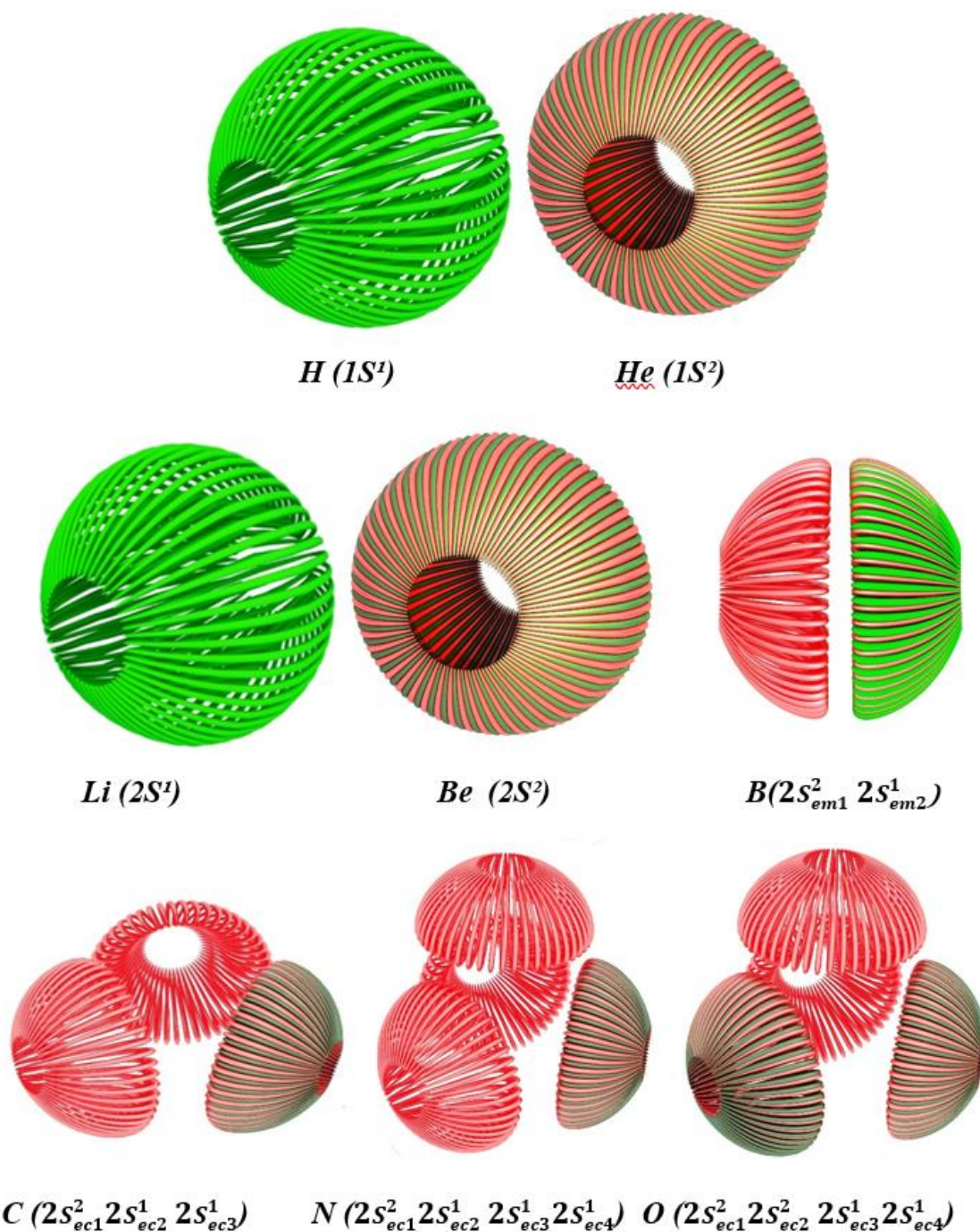


Рис.15. Волновая форма внешней электронной конфигурации элементов первого и второго периода

Как видно из нашей гипотезы внешние электроны можно представить в виде шара (H, He, Li, Be):

Сферическая электронная формула:

$$NS^n$$

N -номер периода
 S -сферический электрон
 n - количество электронов

полусферической (B)
Полусферическая электронная формула:

$$NS_{em s}^n$$

N -номер периода
 sem -полусферический электрон
 n - количество электронов
 s - номера сектора
и секториально-сферической (C, N, O, F, Ne).
Секториально-сферическая электронная формула:

$$NS_{ec s}^n$$

N - номер периода
 Sec -секториально-сферический электрон
 n - количество электронов
 s - номера сектора

В приведенных схемах конфигураций валентного слоя элементов первого и второго периода, электроны находящиеся в орбитали занимают всё пространство орбитали. В водороде орбиталь заполнена одним сферическим электронным облаком, в атоме гелия орбиталь заполнена электронным облаком пары электронов.

При переходе во второй период, валентный слой для лития и бериллия повторяет электронное строение водорода и гелия, но надо помнить, что для этих периодов возможность образования ячеек для расположения электронов равна до четырех. Такое разделение ячеек мы можем наблюдать для валентного слоя бора, здесь образуются две ячейки, каждая из которых занимает половину сферы. В одной ячейке находится пара электронов, а во второй половине неспаренный электрон. В атоме углерода имеются два неспаренных электрона, располагающихся на двух ячейках, а спаренная электронная пара на третьей ячейке, в результате в атоме углерода орбиталь разделена на три части. В атоме азота, орбиталь разделена на 4 части и имеется спаренная электронная пара. Данная пара приводит к большему отталкиванию остальных электронов, в результате орбиталь разделена не на равные четыре части. Валентный угол между электронами составляет

порядка 107° . А в атоме кислорода орбиталь тоже разделена на четыре ячейки, но в отличие от предыдущих атомов, имеются две электронные пары в ячейке, взаимное отталкивание которых уменьшает валентный угол. В случае воды она равна $104,3^\circ$.

Исходя из вышеуказанных сведений можно предложить следующую гипотезу, гипотеза состоит из шести постулатов:

1. Электрон имеет единый заряд, импульс которого обладает волновой функцией электромагнитного облака, движущегося по свободному пространству атома (сферической, полусферической или многосекториальной сферической формы), электроны располагаются в стационарной орбите одиночно или парно в ячейках, на которые разделена орбиталь, но на одной орбите ячейки не могут располагаться слоями, пересекаться и иметь различные формы, например, гантелеобразную, эллипсоидную форму.

2. Образование атомных и молекулярных орбиталей путем спаривания электронных облаков происходит с высокой порядочностью беспорядочности электромагнитных волн.

3. Электроны одной атомной орбитали стремятся заполнить всю орбиталь, равномерно распределяя пространство, сферической, полусферической, секториально-сферической электромагнитной волной по принципу минимальной общей энергии, направления молекулярной орбитали зависит от состояние валентного электрона и является частью атомной орбитали.

4. Природа спаривания электронных пар в атомах и при образовании химической связи не отличается друг от друга (аналогична), но с противоположным спином.

5. При образовании химической связи элементов переменной валентности происходит трансформация электронных облаков, в результате которого все участвующие в химической реакции валентные сферические электронные облака трансформируются с образованием секториально-сферической формы в количестве, соответствующем валентному значению.

6. Химическая связь всегда имеет единый характер и не делится на σ - и π -связи.

Теперь рассмотрим поведение электрона при образовании химической связи.

Химическая связь – это сила, удерживающая вместе два или несколько атомов, ионов, молекул или любую

комбинацию из них. По своей природе она представляет собой электростатическую силу притяжения между отрицательно заряженными электронами и положительно заряженными ядрами. Величина этой силы притяжения зависит главным образом от электронной конфигурации внешней оболочки атомов [4]. При этом чем больше неспаренный электронов во внешнем электронном слое элемента, тем больше накапливается отрицательный заряд и тем более притягивается электрон соседнего элемента.

Для объяснения образования химической связи между атомами одного или различных элементов в настоящее время используется электронная теория валентности.

Из положений электронной теории валентности при образовании химической связи между атомами происходит спаривание валентных электронов внешней оболочки. При этом два электрона одного атома имеет различные формы и состояния и образует с двумя электронами второго атома две химических связи, которые по логике должны иметь различные природы исходя из различности образующейся связи из s , p -электронов. Но как показывает практика все связи между атомами двух элементов обычно одинаковой природы.

Как же возможно такое и как объяснить это? Образование одинаковых связей из атомных орбиталей разного вида потребовало введения такого понятия, как гибридизация (то есть “скрещивания”) атомных орбиталей [7] (рис.16, 17).

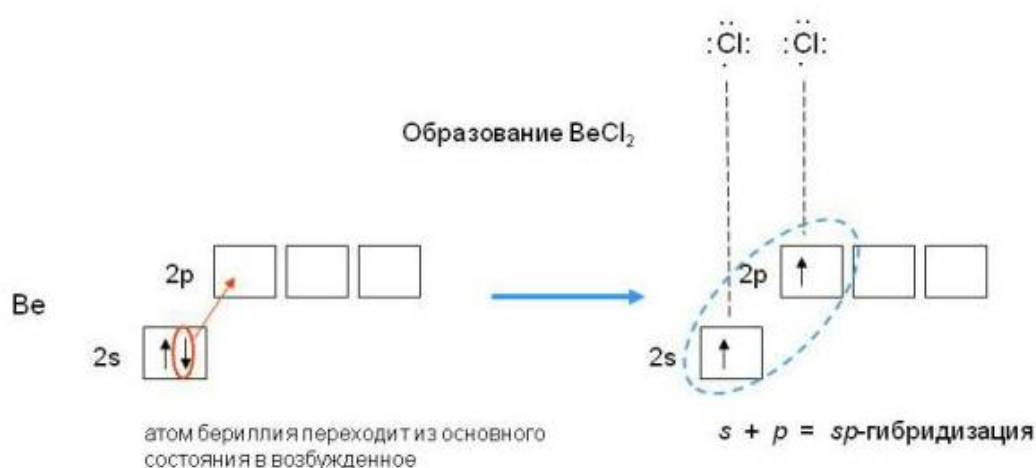


Рис.16. Орбитальная диаграмма атома бериллия

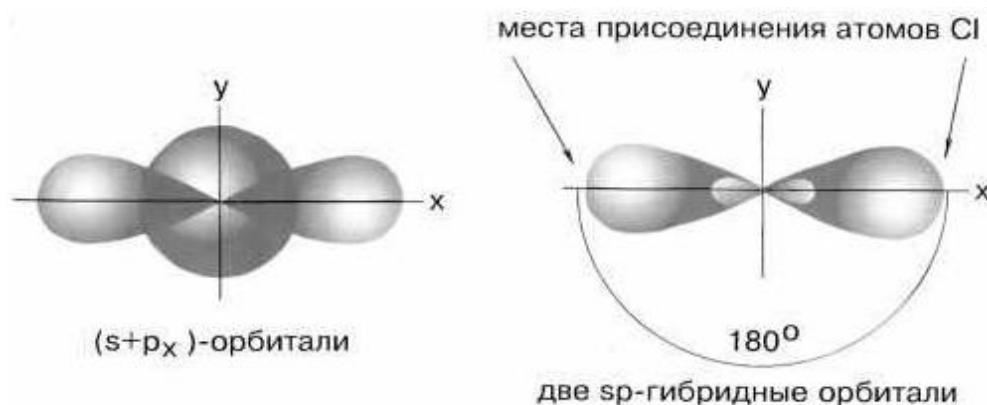


Рис.17. Схема гибридизации электронов в атоме бериллия

И вот тут появляется непонимание: как один s-электрон и p-электроны могут образовать независимые единицы (гибридов)? Неужели электроны гантелеобразной формы делятся на две части и s электрон сливается с двумя полуэлектронами с образованием одного гибрида? Возможно ли существование половины электрона, а также несимметричная гибридная форма электрона. При этом в образующихся гибридных орбиталях происходит образование вытянутых форм, что в свою очередь приводит к образованию двух разноэнергетических концов. Один из этих концов ближе к ядру, а второй находится дальше. Это не соответствует утверждению, что все гибридные облака равносильны.

Возникает вопрос как эти гантелеобразные p электроны скрещиваются с s электроном и что происходит между ними при скрещивании электронов. По идее электроны являются электромагнитными облаками и не скрещиваются. И даже если допустить, что они скрещиваются, то при этом должны происходить какие-то явления, например образование простейшей химической связи. Раньше я как-то мирился с этими умозаключениями. Когда обучал студентов по этой теме обходил острые углы. Рассказывал им что, облако — это не часть чего-то, оно не может иметь конкретную форму, и все что говорится о форме электронных облаков относительные понятия, которые можно рассматривать только как частные случаи. Но когда приходилось говорить о гибридизации электронных облаков, то тут никак нельзя было обойти такие вопросы, как разделение электронных облаков на части, образование каких-то непонятных форм, которые будут действовать как одно целое, игнорируя все существующие на сегодняшний день законы физики. После при объяснении гибридизации, я стал говорить, что с s-электроном соединяется выпуклая часть половины электронного облака p электрона. При этом возник вопрос, можно ли разделить электрон на части? И

тогда я обратился к самому Л. Полингу, может он сможет что-то прояснить. Я зачитывался трудами этого великого ученого, но не мог найти объяснений. Наоборот, я наткнулся на такие подробности, что стало ясно, что сам Полинг был недоволен предложенной им самим теорией [8].

Концепция гибридизации валентных атомных орбиталей была предложена американским химиком Лайнусом Полингом в 1931 г. для ответа на вопрос, почему при наличии у центрального атома разных (s, p, d, f) валентных орбиталей, образованные им связи в многоатомных молекулах с одинаковыми лигандами оказываются эквивалентными по своим энергетическим и пространственным характеристикам [5].

В 1954 году Нобелевский комитет удостоил Л.Полинга премии по химии «За изучение природы химической связи и его применение к объяснению строения сложных молекул». Но сам Л.Полинг не был удовлетворён введением σ, π —связей для описания двойной и тройной связи и сопряжённых систем [6].

Исходя из вышеприведенных данных, мы видим, что до сих пор остаются неясности при объяснении природы химической связи. Теория гибридизации оперирует большинством относительностей при объяснении образования химической связи, к которым можно отнести такие понятия как, π - связь, гибридизация, разделение электронов на виды.

Поэтому нами предлагается вышеизложенная гипотеза трансформации электронных облаков, как альтернатива к существующим объяснениям образования равноценных химических связей из разных электронных облаков.

Теперь рассмотрим образование химической связи в различных молекулах исходя из гипотезы трансформации электронных облаков.

Начнем с самой простой молекулы водорода:

В классическом стиле образование молекулы водорода имеет следующий вид (рис.18):

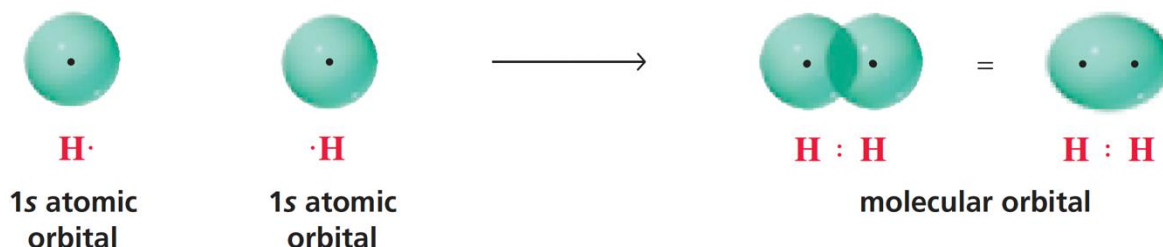


Рис.18. Образование молекулы водорода [7]

Если такое взаимодействие с образованием молекулы водорода верно, то какая часть электронов участвует в образовании химической связи (молекулярной орбитали) и

какая часть остается в атомной орбитали, а также целостность химической связи под вопросом. Когда дело доходит до молекулярной орбитали, электронные орбитали объединяются в единую орбиталь, и стационарная орбиталь атома исчезает (рис.7). Однако это не соответствует закону стационарных атомных орбиталей - потому что электромагнитная волна электрона постоянно находится в определенном секторе атомного орбиталей.

Мы предлагаем следующую схему образования молекулы водорода (рис.19):

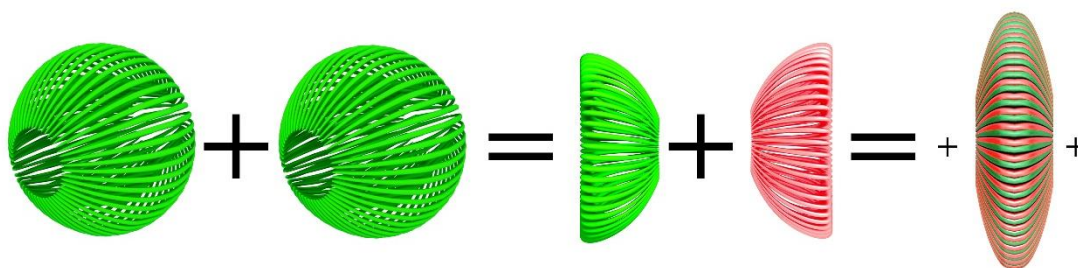


Рис.19. Образование молекулы водорода

Две сферические электронные облака атомов водорода при образовании химической связи подвергаются трансформации и переходя в форму полусферы и в таком виде образуют электронную пару. По экспериментальным данным радиус электронного облака атома водорода $0,53 \text{ \AA}$, а радиус электронного облака молекулы водорода $0,74 \text{ \AA}$. Для объяснения данных значений классическим методом понадобилось внесение корректирующих коэффициентов в уравнения квантовохимических расчетов, так как если наблюдается перекрывание двух электронных облаков сферической формы значение радиуса была бы близка к $1,06 \text{ \AA}$ (сумме радиусов двух электронных облаков) [8]. Но, как мы видим, здесь наблюдается уменьшение на $0,32 \text{ \AA}$, а это хорошо согласуется с предлагаемой теорией, где радиус электронного облака молекулярного водорода уже не есть сумма электронных облаков двух атомов водорода, а имеет значение суммы радиусов двух полусфер плюс межоблаковое расстояние.

Вместе с тем в литературе приводятся данные о том, что в значении радиуса молекулярного водорода равного $1,06 \text{ \AA}$ имеется минимум, что будет отвечать стабильной форме соединения [9]. Это нельзя объяснить классическими методами, но легко согласуется с предлагаемым нами теорией. Так как в момент образования связи между атомами водородов происходит столкновение двух электронных облаков с образованием промежуточной формы, которая и будет иметь радиус равный сумме двух электронных радиусов водородов. Но вследствие

трансформации выделяется энергия 50 ккал/моль и происходит уменьшение радиуса молекулярного электронного облака за счет перехода в форму полусферы, что приводит к уплотнению электронного облака в атомах и уменьшению радиуса.

Как мы видим из приведенных выше фактов, предлагаемая теория лучше отражает образование молекулы водорода и даже помогает объяснить некоторые явления, которые не были объяснены классическими теориями.

Но в химии есть такое явление как молекулярный катион, которое нельзя было объяснить методом валентных орбиталей. Как можно объяснить такое с помощью предлагаемой теории? Давайте рассмотрим на примере H_2^+ (рис.20).

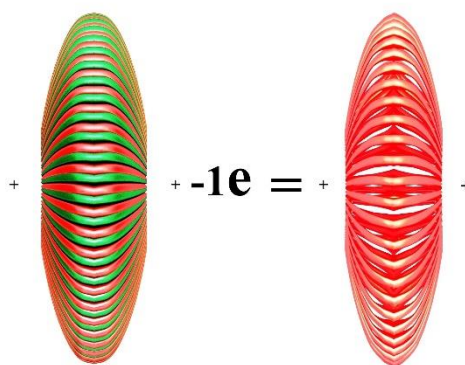


Рис.20. Образование молекулярного иона водорода

Почему так? Как известно из литературных данных, радиус молекулярного водорода равен $0,74 \text{ \AA}$, радиус атома водорода $0,53 \text{ \AA}$, а радиус молекулярного иона водорода равен $1,07 \text{ \AA}$. Почему увеличивается радиус молекулярного иона водорода, ведь ничего такого что могло бы повлиять на радиус молекулы водорода туда не прибавилось, а наоборот из молекулы удален один электрон? А все дело в том, что, когда один электрон покидает молекулу водорода, то оставшийся электрон будет притягиваться обоими ядрами, но в то же время ядра будут взаимно отталкиваться, т.е. если в молекуле водорода два ядра держали два электрона, то в ионе их будет удерживать один электрон. В результате длина связи молекулярного иона водорода будет растягиваться в пространстве и достигнет суммы радиуса атомов водорода, т.е. $0,53+0,53=1,06 \text{ \AA}$. А оставшийся электрон уже не будет иметь форму полусферы, а будет взаимно растянут двумя протонами двух атомов водорода и будет иметь форму сферического диска. Таким образом, предлагаемая теория объясняет и это явление, которое классическим теориям не удастся объяснить. Также, один электрон между двумя ядрами сохраняет свой стационарный

орбиталь, каждый ядро рассматривает электрона как свою тем самым один электрон между двумя ядрами образует химическую связь в молекулярном ионе водорода.

Теперь давайте поговорим о гибридизации электронных облаков при образовании соединений. Как было показано выше, при гибридизации происходит скрещивание электронов различных форм и орбиталей, с образованием единого облака переходной формы, которая будет реагировать со вторым элементом как одно целое.

А теперь мы попробуем объяснить образование соединений на основе предлагаемой теории, не используя гибридизацию.

Начнем с хлорида бериллия. Здесь при реакции бериллия с хлором происходит переход атома бериллия в возбужденное состояние (рис.21), при котором два электрона бериллия трансформируются на две полусферические орбитали и полностью разделяют между собой пространство, располагаясь друг к другу под углом 180° и образуют две валентные электронные облака.

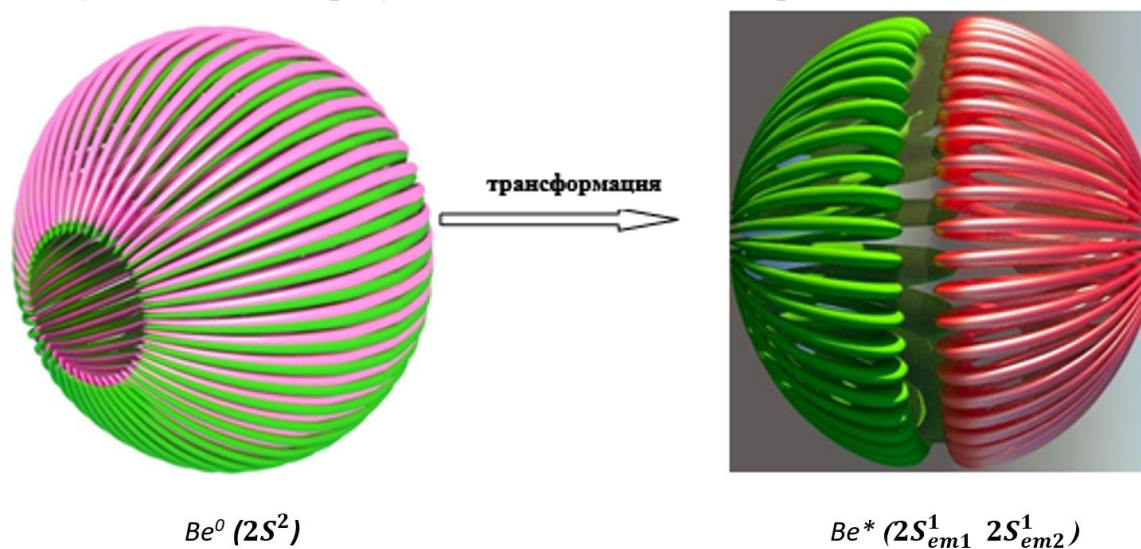


Рис.21. Трансформация электронов бериллия на две полусферические электромагнитные волны

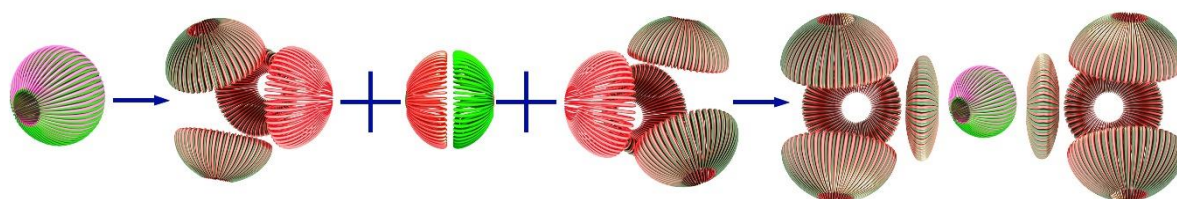


Рис.22. Образование молекулы хлорида бериллия

При этом в атоме хлоре во внешнем электронном слое находятся 7 электронов, которые образуют 3 пары и 1

электрон находится в неспаренном состоянии. При взаимодействии с атомом бериллия два неспаренных электрона двух атомов хлора взаимно перекрываются с двумя трансформированными электронами атома бериллия, при этом образуются два спаренных трансформированных электронных пар. Таким образом образуется молекула хлорида бериллия с двумя одинаковыми связями (рис.22).

При образовании солей бора два электрона образуют электронную пару, а один электрон находится в неспаренном состоянии, при действии электронов другого атома происходит трансформация электронов (рис.23), при этом каждый электрон занимает 1/3 часть сферы и располагается под углом 120° , что обеспечивает равноудаленность электронов друг от друга и образование связи между электронами реагирующего атома фтора (рис.24).

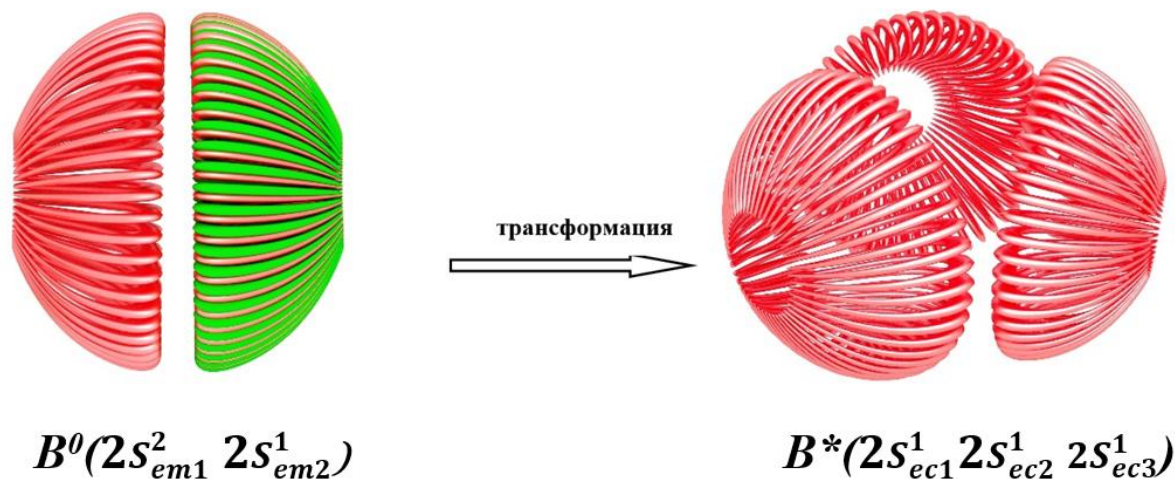


Рис.23. Трансформация электронов в атоме бора

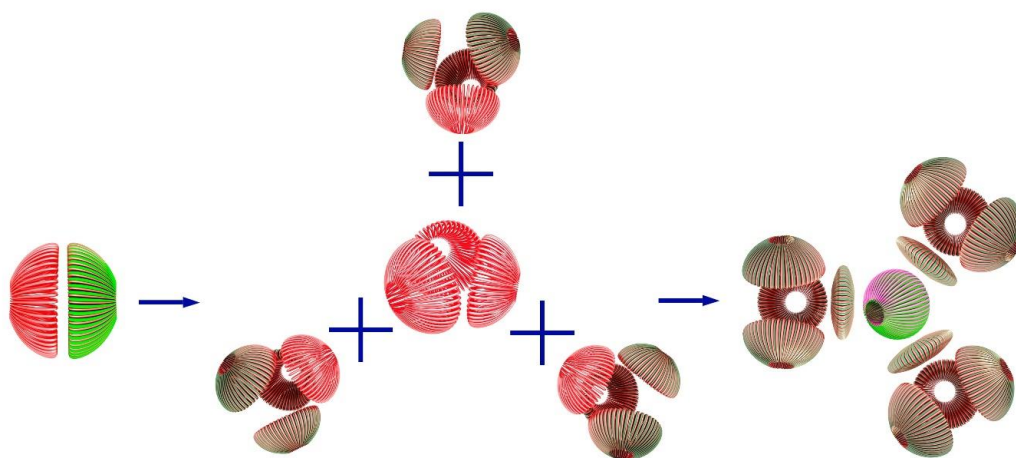


Рис.24. Образование молекулы фторида бора

В вышеприведенной реакции при взаимодействии с атомом бора три неспаренных электрона трех атомов фтора

взаимно перекрываются с двумя трансформированными электронами атома бериллия, при этом образуются три спаренных трансформированных электронных пар.

В невозбужденном состоянии углерода участвуют все четыре электрона второй орбитали, при этом сфера орбитали разделена на 3 части, в одной части, которая занимает половину сферы расположены 2 спаренные электроны, оставшаяся половина сферы в свою очередь разделена тоже на две части, в которых располагаются по одному электрону.

Воздействие на атом углерода некоторой энергией при взаимодействии другого атома приводит к трансформации электронных облаков. При этом в результате трансформации сфера орбитали делится на четыре части, которые расположены по отношению друг к другу в пространстве под углом $109^{\circ}28'$. На этих частях сферы располагаются электроны и образуют тетраэдрическое строение, при котором электроны будут равноудалены друг от друга (рис.25).

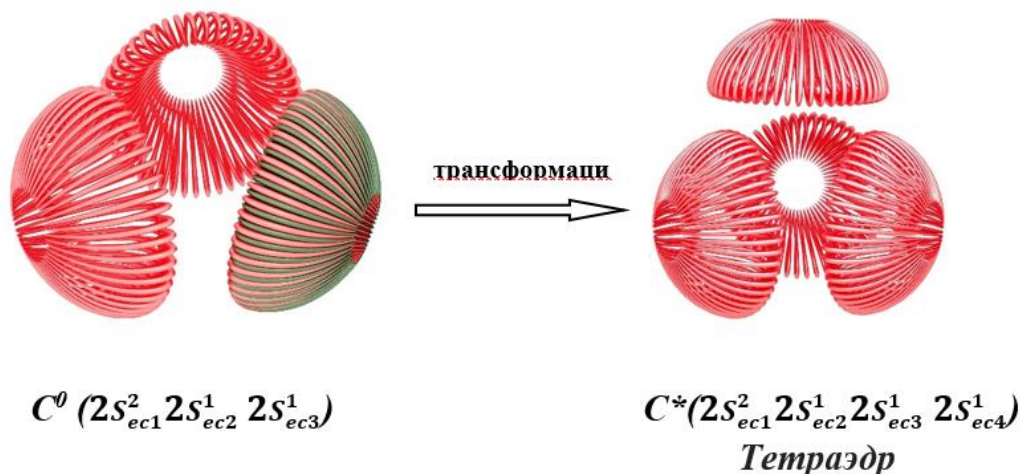
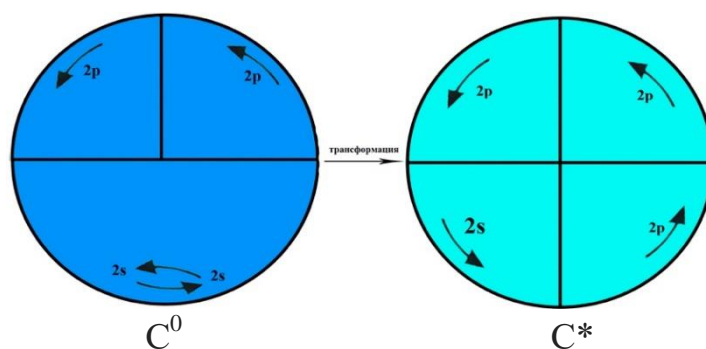


Рис.25. Трансформация электронов в атоме углерода

Гипотеза трансформации электронных орбиталей предназначена не только для узкого круга знатоков химии, а должна преподаваться даже в средней школе. Но для наглядного и простого объяснения гипотезы атомных орбиталей можно использовать схематические проекционные методы отображения атомных орбиталей, что хорошо согласуется с теорией валентности. На основе этого метода орбитали атома углерода изображаются следующим образом (рис.26).



Тетраэдр

Рис.26. Проекционная схема трансформации электронов в атоме углерода

Для объяснения образования химической связи между атомами одного или различных элементов в настоящее время используется электронная теория валентности.

Электронная теория валентности. Современные представления о природе химической связи основаны на электронной теории валентности. Эту теорию разработали независимо Г. Н. Льюис и В. Коссель в 1916 г. Согласно электронной теории валентности, атомы, образуя связи, приближаются к достижению наиболее устойчивой (т.е. имеющей наиболее низкую энергию) электронной конфигурации. Атомы могут достичь этого двумя способами:

1. Они могут терять либо приобретать электроны, образуя ионы. Если атомы приобретают электроны, они превращаются в анионы. Если они теряют электроны, то превращаются в катионы. Анионы и катионы с заполненной внешней электронной оболочкой имеют устойчивую электронную конфигурацию. Между анионом и катионом возникает химическая связь, представляющая собой электростатическую силу притяжения. Химическая связь такого типа ранее называлась электровалентной связью, современное название ионная связь.

2. Атомы могут также приобретать устойчивые внешние электронные конфигурации путем обобществления электронов. Возникающая при этом химическая связь называется ковалентной связью. Ковалентная связь образуется в результате обобществления пары электронов, поставляемых по одному от каждого атома. Однако в некоторых молекулах или многоатомных ионах оба таких электрона могут поставляться только одним атомом. Такая разновидность ковалентной связи называется координационной, донорно-акцепторной или дативной ковалентной связью.

Правило октета. Когда атом какого-либо элемента образует химическую связь, приобретая, теряя либо

обобществляя валентные электроны, его электронная конфигурация становится такой же, как у атома благородного газа, расположенного в конце того же периода, что и данный элемент, либо в конце предыдущего периода. Атомы всех благородных газов, за исключением гелия, имеют во внешней оболочке устойчивый октет (восьмерку) электронов. Поэтому образование химических связей путем достижения устойчивых электронных конфигураций, как в атомах благородных газов, составляет суть так называемого правила октета. Это правило применимо и к ионным, и к ковалентным связям.

Чтобы было еще понятнее образование химической связи посредством трансформации электронных облаков представим вышеприведенные химические реакции в схематической проекционной форме. Начнем с образования молекулы водорода:

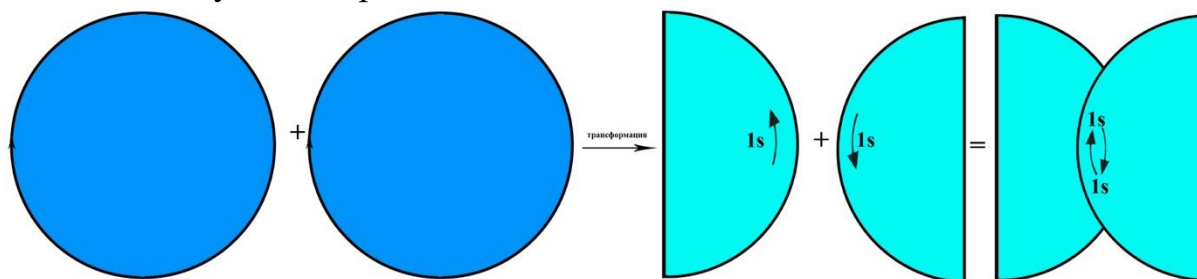


Рис.27. Схематическая проекционная форма образования молекулы водорода

В атоме водорода единственный электрон заполняет все отведенное ему орбиталь. Поэтому движение электрона по орбите показано в виде стрелки по границе орбиты. Воздействие двух атомов водорода друг на друга приводит к трансформации электронного облака и переходу его в форму полусферы. При этом электроны будут иметь противоположные спины и дальнейшие столкновения атомов приводит к объединению двух атомов с образованием молекулы водорода (рис.27).

При образовании молекулярного иона водорода, как было указано выше один электрон отделяется от молекулы водорода и в результате оставшийся электрон выполняет роль объединяющего центра для двух ядер атомов водорода. При этом электрон, притягиваемый с двух сторон одинаковой силой ядер будет иметь форму не полусферы, а сферического диска (рис.28).

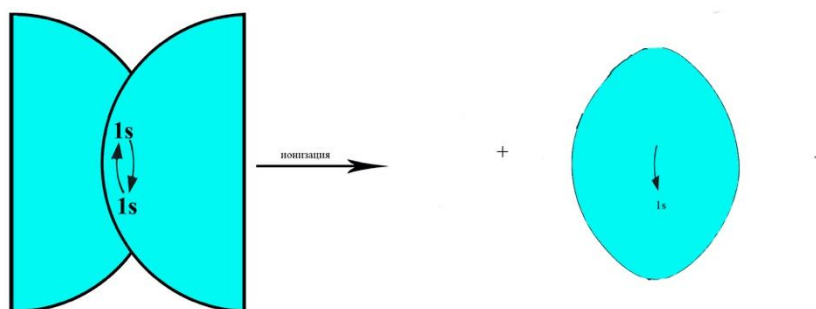


Рис.28. Схематическая проекционная форма образование молекулярного иона водорода

Точно также во втором электронном слое бериллия два электрона заполняют весь орбиталь и различаются своими спинами. При трансформации происходит образование двух полусферических электронных облаков, но они будут иметь единый спин (рис.29).

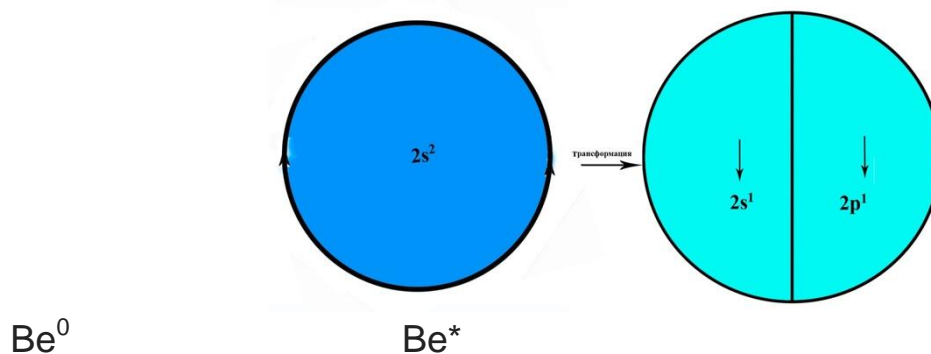
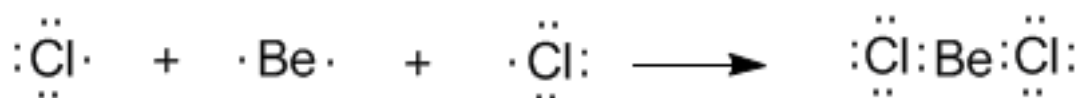


Рис.29. Трансформация двух электронов бериллия

Давайте рассмотрим образование молекулы BeCl₂. Ее образование вполне понятно из электронного строения атомов бериллия и хлора, которое изображается формулами Льюиса:



По предлагаемой гипотезе легко объяснить электронной теорией валентности схематическом методом, что хорошо согласуются с теорией валентности.

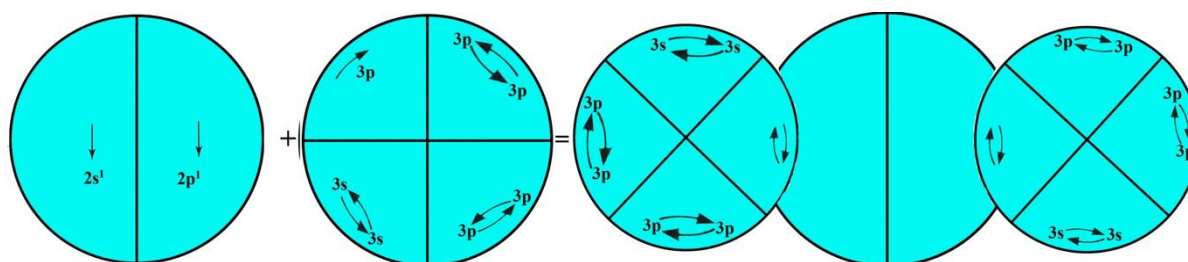


Рис.30. Схематическая проекционная форма образования молекулы хлорида бериллия

Таким образом образуется молекула хлорида бериллия с двумя одинаковыми связями (рис.30).

При образовании солей бора, в невозбужденном состоянии два электрона образуют электронную пару, а один электрон находится в неспаренном состоянии, сфера разделена на две полусферы, при действии электронов другого атома происходит трансформация электронов (рис.31), при этом каждый электрон занимает 1/3 часть сферы и располагается под углом 120° , что обеспечивает равноудаленность электронов друг от друга и образование связи между электронами реагирующего атома фтора (рис.32).

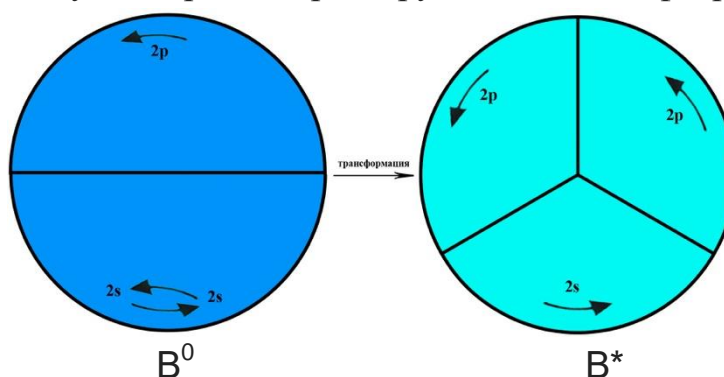


Рис.31. Трансформация электронов в атоме бора

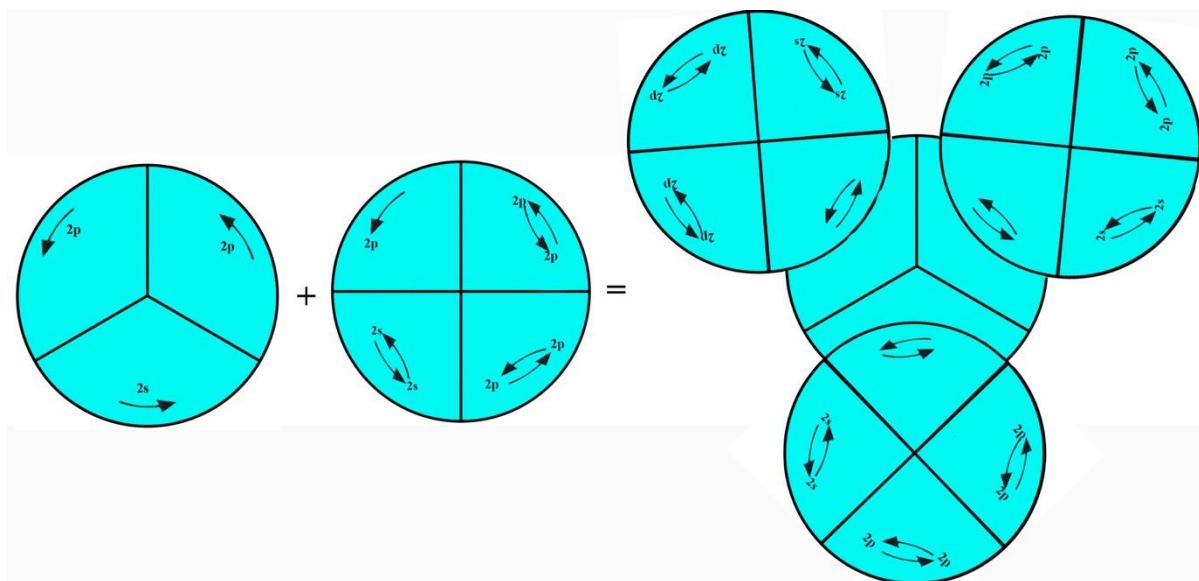


Рис.32. Схематическая проекционная форма образования молекулы фторида бора

Возникает резонный вопрос как объяснить образование π -связи в молекулах непредельных углеводородов. Но на самом деле по предлагаемой теории нет π -связи. Два электрона образуют связь между атомами углерода, так как связь равносильная то возникает избыточная энергия двойной связи, которая приводит к разрыхлению двойной связи. Здесь следует сказать, что две связи, образованные атомами углерода одинаковы, т.е. нет понятия σ - и π -связи. Поэтому в реакциях присоединения может участвовать любой из двух связей (рис.33). Почему же возникло представление о неравноценности связей в двойной связи в соединениях? Все дело в том, что исследователь видит только начальное и конечное состояние. При взаимодействии с другими веществами любая из двух связей может вступать в реакцию, но после образования новой связи, энергия оставшейся связи между атомами углерода усиливается и у исследователя возникает ощущение, что одна из связей всегда была крепче, чем вторая. На самом деле обе связи равносильны и обладают одинаковой энергией.

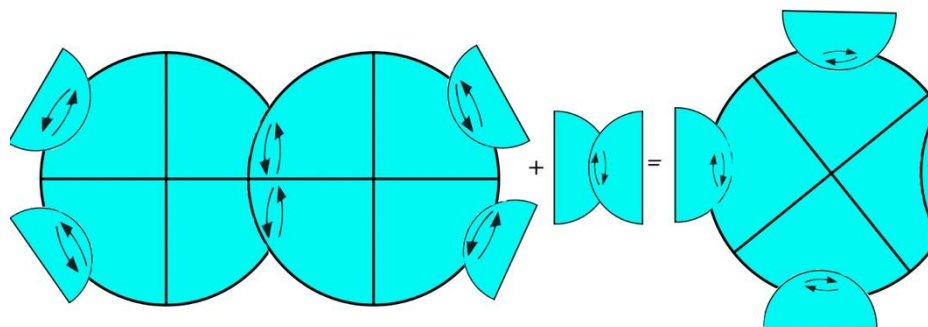


Рис.33. Схематическая проекционная форма реакции этилена с водородом с образованием этана

Использование предлагаемой теории трансформации электронных облаков легко объясняет строение молекулы бензола и равнозначность атомов углерода без применения мигрирующей двойной связи (рис.34).

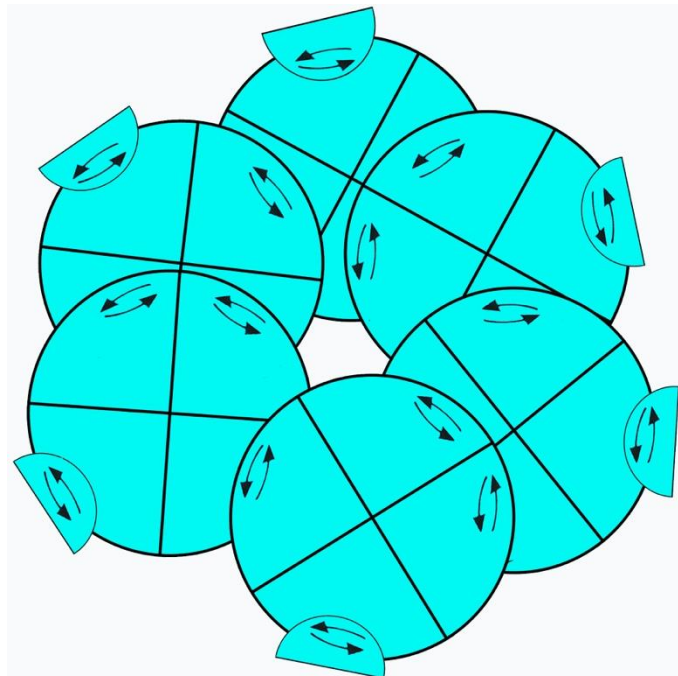


Рис.34. Схематическая проекционная форма строения молекулы бензола по ТТЭО

Как мы видим из предлагаемой структуры каждый атом углерода имеет парную связь с другим атомом углерода, и как в случае с этиленом происходит накопление избыточной энергии, которая приводит к увеличению реакционной способности такой связи.

Как видно из приведенных примеров, предлагаемая теория трансформации электронных облаков вполне объясняет даже некоторые проблемные вопросы, такие как локальный минимум при образовании молекулы водорода, равноценности всех атомов углерода в молекуле бензоле (рис.34).

Теперь рассмотрим молекулы, для объяснения гибридизации которых использовали добавку “типа”.

Например, строение аммиака объясняли тем, что нераспределенная пара азота в аммиака будет считаться за одну связь и тем самым образуется соединение гибридизацией типа – sp^3 . Но теперь исходя из предлагаемой гипотезы (рис.35) можно забыть о словах типа, и вообще о гибридизации. При образовании молекулы аммиака, нераспределенная электронная пара азота отталкивает от себя

электронные пары N-H и в результате валентный угол будет не $109^{\circ}28'$, а немного меньше, $107,3^{\circ}$.

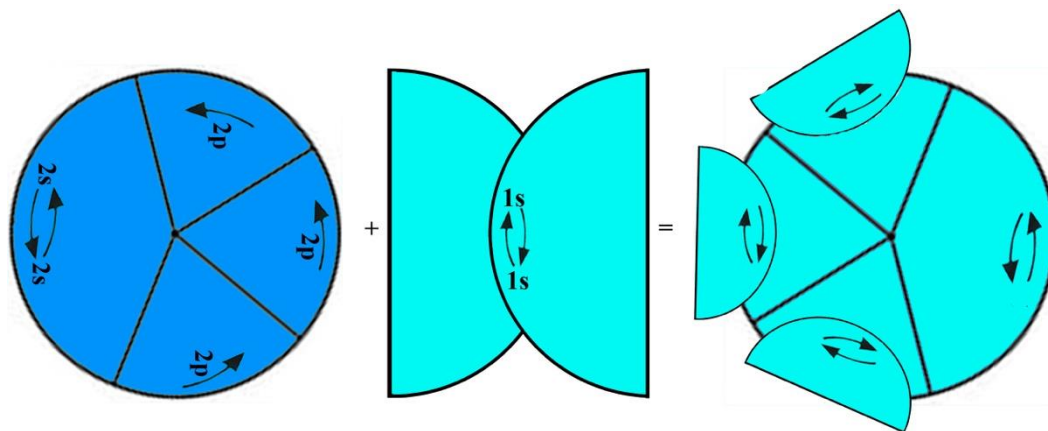


Рис.35. Схематическая проекционная форма образования молекулы аммиака

Также в молекуле воды не стоит считать, что две нераспределенные пары электронов кислорода будут выступать в роли псевдосигма связи, тем самым образуя sp^3 -гибридизацию. Ведь, если считать, что во всех соединениях, где центральный атом образует четыре сигма связи или sp^3 -гибридизацию, валентный угол каждый раз будет иметь разное значение.

Поэтому исходя из гипотезы трансформации электронных облаков будем говорить просто о валентном угле, без привязки к гибридизации (необходимость в гибридизации отпадает). В атоме кислорода нераспределенная электронная пара и электронная пара O-H взаимно отталкиваются, но в отличие от атома азота, здесь двум нераспределенным электронным парам кислорода противостоят 2 пары O-H электроном, в результате отталкивание к большему раздвижению валентного угла. И как показывают экспериментальные результаты, и вправду валентный угол воды составляет $104,27^{\circ}$ (рис.36) и меньше валентного угла аммиака.

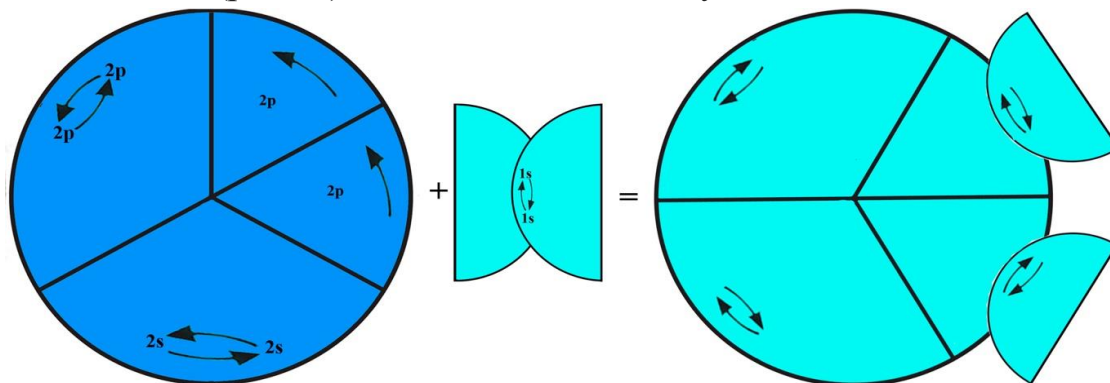


Рис. 36. Схематическая проекционная форма образования
ВОДЫ

Как видно из приведенных выше данных, предлагаемая гипотеза трансформации электронных облаков помогает намного легче описать процесс образования химической связи, при этом отпадает нужда в скрещивании электронов различных типов. Вместе с тем, в рамках гипотезы трансформации электронных облаков нами объяснены некоторые моменты, которые существующие теории не могли объяснить и относили к частным случаям.

Мы рассмотрели строение валентных оболочек элементов первого и второго периода. Что происходит при появлении так называемых d-электронов? Ровным счетом ничего. На оболочке появляются дополнительные ячейки (рис.37), на которых эти электроны начинают располагаться и вращаются в своей секториально-сферической ячейке.

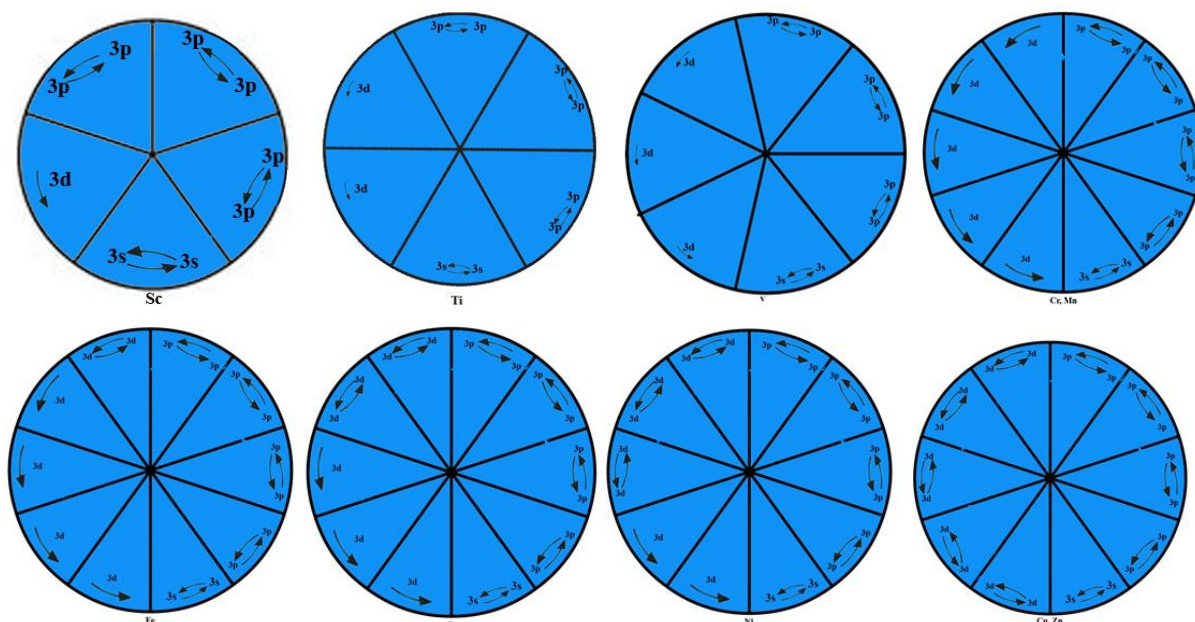


Рис. 37. Строение валентного слоя элементов 4-периода

Таким образом, согласно второму постулату, число ячеек в третьей орбитали максимально равно половине максимального числа электронов по принципу Паули, и она равномерно занимается электронами по мере их появления в атоме элемента.

Как мы знаем, некоторые элементы проявляют переменную валентность, которая связана с переходом элемента в возбужденное состояние. Рассмотрим на примере атома хлора переход его в возбужденное состояние. Хлор находится в третьем периоде периодической системы химических элементов Д.И. Менделеева и имеет 3 орбитали, которые могут быть заполнены электронами. По принципу Паули максимальное количество электронов в третьей орбитали может быть равно $2 \times 3^2 = 18$, согласно второму постулату предлагаемой гипотезы максимальное

количество ячеек в третьей орбитали равно половине максимального числа электронов, т.е. $18/2=9$. В состоянии покоя (невозбужденном состоянии) третья орбиталь хлора разделена на 4 ячейки, в которых находятся 3 пары и 1 неспаренный электрон (рис.38а).

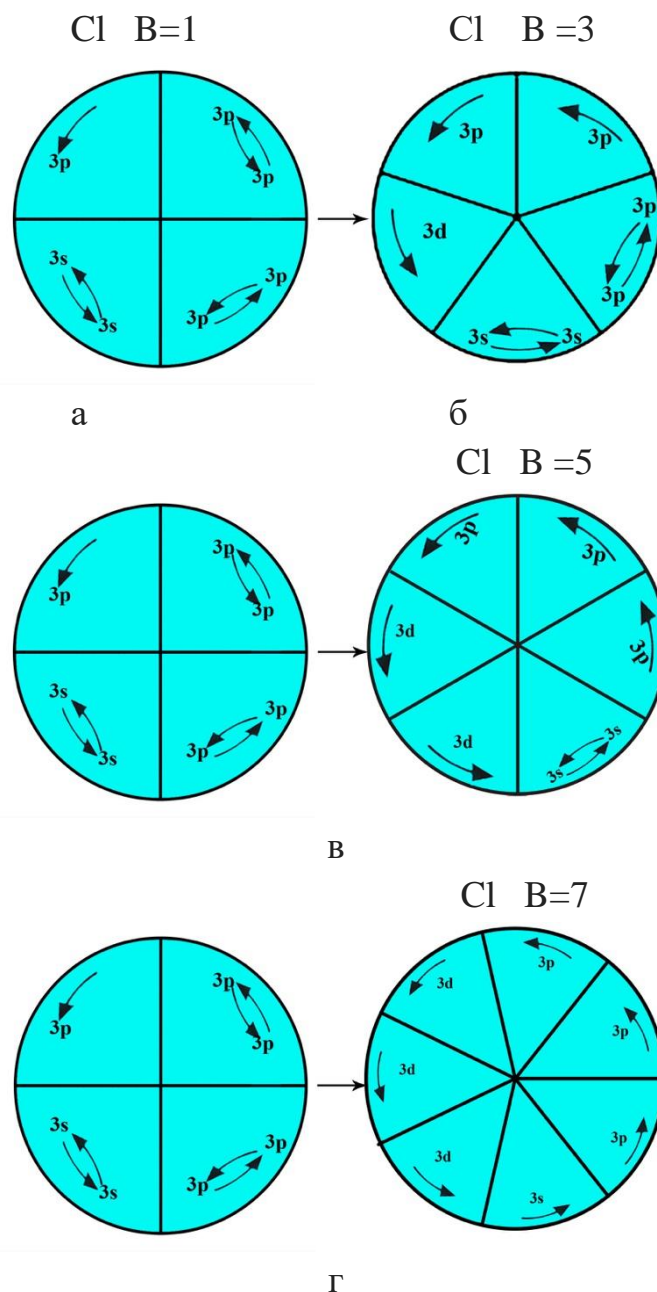


Рис. 38. Переход хлора в возбужденное состояние

При переходе в возбужденное состояние происходит распаривание электронных пар и переход неспаренных электронов с образованием новых ячеек в третьей орбитали (рис 38б-г). В результате постепенного распаривания электронных пар хлор может проявлять валентности равные 1, 3, 5 и 7 [8].

Как видим, предлагаемая гипотеза прекрасно объясняет явления классической химии, для которых раньше приходилось оперировать разными предположениями.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исходя из вышеприведенных данных можно сделать следующие выводы:

1. Раскрыта форма дискретности электромагнитных волн, что было ранее не ясным.

2. Существующие на данный момент теории о строении электронных орбиталей и о природе образования химической связи не описывают полностью все случаи, и с развитием химии все больше появляется частных случаев и исключений из данных теорий.

3. Предлагаемая гипотеза трансформации электронных орбиталей не только полно описывает конфигурацию электронных орбиталей химических элементов, но раскрывает дискретность электромагнитных волн и природу химической связи. При этом, вносится ясность во многие явления, для которых не было объяснений в существующих теориях.

4. На основании предлагаемой гипотезы полностью опровергается теория гибридизации и доказывается возможность объяснения равносильности образуемых двумя атомами химических связей без образования гибридных облаков.

5. На примере строения молекул этилена и бензола доказана одинаковая природа всех связей между атомами углеродов и нелогичность разделения химических связей на σ - и π -связи.

6. Объяснен переход элементов в возбужденное состояние с проявлением переменной валентности с помощью гипотезы трансформации электронных орбиталей.

7. Применение гипотезы трансформации электронных облаков приводит к более точной интерпретации результатов квантовохимических расчетов, а также дает возможность приблизительного расчета объёмов электромагнитных волн в атоме и химических связей.

REFERENCES

1. Kurotchenko, S.P., no date. Model of the electron structure of mass, charge and spin. Dissertation abstract, originally in Russian.

Available online: https://nadisa.org/wp-content/files/electron_ru.pdf (date accessed: February 12, 2022)

2. Nature – online journal, 2012. Magnetism flips heat flow. Column by Edwin Cartlidge. 19 December, 2012. Available online: <https://www.nature.com/articles/nature.2012.12090> (date accessed: February 12, 2022)

3. Daniels, F., Alberti, R. 1978. Physical Chemistry (originally in Russian), Moscow: "Mir", 1978, pp. 389-390.

4. Ramsden E.N., 1989. The beginning of modern chemistry (Russian translation), Moscow: "Chemistry", 1989, pp. 45-46.

5. Kuznetsov, S.I., 2011. Physics, Tomsk city: Tomsk Polytechnic University press, 2011, p.253.

6. Martynova, T.V., Artamonova, I.V., Godunov, E.B. Chemistry: textbook and workshop for applied undergraduate studies; ed. T. V. Martynova. — 2nd ed., corrected. and enriched - Moscoow: Yurayt Publishing House, 2019. p. 368. — (Series: Bachelor Applied Courses).

7. Chemistry portal, no date. Visual explanation of hybridization of orbitals. Available online: http://www.himiy88.blogspot.com/p/3_42.html (date accessed: February 12, 2022)

8. Pauling, L., 1947. The nature of the chemical bond (Russian translation by eds. Dyatkina, M. E and Prof. Syrkina Ya. K.). Moscow: GosKhimIzdat, 1947. p.440.

9. Freidlina, R. Kh. (editor), 1963. "Theoretical Organic Chemistry." (Russian translation ed. Bundel, Yu.G). Moscow: Publishing house of foreign literature, 1963. - Vol. 1. – p. 365.

10. Fox, M.A., Whitesell, J.K., 2003. Organic Chemistry, 3rd edtion. Johns and Barlett Publishers. Boston, Toronto, London, Singapore. p.88.