**Лекция1.  СТРОЕНИЕ АТОМА**

Лекции, которые будут прочитаны в течение данного семестра, помогут Вам разобраться в физико-химической сущности  строения и свойств различных материалов. Вы узнаете, почему природные и искусственно созданные материалы имеют различные теплопровод­ность, механические и эксплуатационные свойства, как связаны эти свойства друг с другом, как и в каких пределах их можно изме­нять. Одно­временно с изучением этих вопросов, вы более глубоко познакомитесь с физическими и химическими свойствами элемен­тов, информация о которых заложена в периодической системе Д.И. Менделеева. Особо отмечу, что строение атомов химиче­ских элементов определяет структуру и энергию образуемых имимхимических связей, которые, в свою очередь, лежат в основе всего комплекса свойств веществ и материалов. Лишь опираясь на по­нимание химического взаимодействия атомов, можно управлять процессами, происходящими в веществах, и получать заданные рабочие характеристики.

Однако более важной, чем изучение отдельных проблем, изло­женных в лекциях, является предоставляемая вам возможность объединить основные положения физики, химии и прикладных научных направлений (теплофизи­ки, механики) для комплексного понимания взаимодействия веществ и их свойств.

В лекциях главное внимание уделено фундаментальным основам материалове­дения в связи с тем, что современное материаловедение направлено на получение ма­териалов с заданными характеристиками и служит базой для нау­коемких технологий XXI века.

***Материалом****называется вещество, обладающее необходимым комплексом свойств, для выполнения заданной функции отдельно или в совокупности с другими веществами.*

Современное материаловедение полностью сложилось как нау­ка во второй половине XXвека, что было связано с быстрым возрастанием роли материалов в развитии техники, тех­нологии и строительства. Создание принципиально новых материалов с заданными свойствами, а на их основе сложнейших конструкций по­зволило человечеству достичь за короткое время небывалых успе­хов в атомной и космической технике, электронике, информацион­ных технологиях, строительстве и т.д. Можно считать, что *материаловедение -*это раздел научного знания, посвященный свойствам веществ и их направленному изменению с целью получения материалов с заранее заданными рабочими характеристиками. Он опирается на фунда­ментальную базу всех разделов физики, химии, механики и смежных дисциплин и включает теоретические основы современных нау­коемких технологий получения, обработки и применения материа­лов. Основу материаловедения составляет знание о процессах, про­текающих в материалах под воздействием различных факторов, об их влиянии на комплекс свойств материала, о способах контроля и управления ими. Поэтому материаловедение и технология ма­териалов - взаимосвязанные разделы знания.

Курс материаловедения и технологии строительных мате­риалов служит **цели**познания природы и свойств ма­териалов, методов получения материалов с заданными ха­рактеристиками для наиболее эффективного использования в строительстве.

**Основные задачи**изучения курса:

- дать понимание физико-химической сущности явлений, происходящих в материалах при воздействии на них различных факторов в условиях производства и эксплуатации, и их влияния на свойства материалов;

-     установить зависимость между химическим составом, строением и свойствами материалов;

-     изучить теоретические основы и практику реализации раз­личных способов получения и обработки материалов, обеспечи­вающих высокую надежность и долговечность строительных конструкций;

-     дать знания об основных группах неме­таллических материалов, их свойствах и областях применения.

**Итак, задача современного материаловедения - получение материалов с заранее заданными свойства­ми.**Свойства материалов определяются химическим составом и структурой, которые являются результатом получения материала и его дальнейшей обработки. Для разработки материалов и техноло­гий необходимо знание физических и химических явлений и процес­сов, протекающих в материале на различных стадиях его получения, обработки и эксплуатации, их предсказание, описание и управление ими. Таким образом, знание теории необходимо для создания управ­ляемых технологических процессов, результатом которых будет ма­териал с четко определенными значениями рабочих свойств.

Физико-химические свойства вещества определяются элек­тронным строением его атомов. Взаимодействия атомов связаны, в первую очередь, с взаимодействием их электронных оболочек. По­этому при разработке материалов и процессов их получения необ­ходимо четко представлять, как различные химические элементы отдают и принимают электроны, как изменение электронного со­стояния влияет на свойства элементов.

**Электронное строение атома**

Около, двух с половиной тысяч лет древнегреческий философ Демокрит высказал мысль о том, что все окружающие нас тела состоят из мельчайших невидимых и неделимых частиц - атомов.

Из атомов, как из своеобразных кирпичиков собираются молекулы: из одинаковых атомов - молекулы *простых,*веществ, из атомов различного вида -молекулы *сложных*веществ.

Уже в конце девятнадцатого века наукой установлено, что атомы - частицы далеко не "неделимые", как представляла древняя философия, а, в свою очередь, состоят из ещё более мелких и, если так можно выразиться, ещё более простых частиц. В настоящее время с большей или меньшей достоверностью доказано существование уже около трех сотен элементарных частиц, входящих в состав атомов.

Для изучения химических превращений в большинстве случаев нам достаточно указать три частицы, входящие в атом: *протон, электрон и нейтрон.*

Протон представляет собой частицу массой условно принятой за единицу (1/12 массы атома углерода) и единичным положительным зарядом. Масса протона – 1,67252 х 10-27 кг

Электрон - частица с практически нулевой массой (в 1836 раз меньшей, чем у протона) и единичным отрицательным зарядом. Масса электрона – 9,1091х10-31 кг.

Нейтрон, представляет собой частицу с массой практически равной массе протона, но не имеющую заряда (нейтрален). Масса нейтрона – 1,67474 х 10-27 кг.

Современная наука представляет атом, устроенным приблизительно, также как утроена наша солнечная система: в центре атома находится *ядро*(солнце), вокруг которого на относительно большом расстоянии вращаются электроны (как планеты вокруг солнца). Эта "планетарная" модель атома, предложенная в 1911 году Эрнестом Резерфордом и в 1913 году уточнённая постулатами Бора, сохранила своё значение до настоящего времени.

В ядре, состоящим из протонов и нейтронов и занимающем очень малую часть объема атома, сосредоточена основная масса атома (масса электронов в химических расчётах атомных и молекулярных масс обычно не учитывается).

Число протонов в ядре определяет *вид*атома. Всего сейчас открыто более ста видов атомов, которые и представлены в Таблице элементов под номерами, соответствующими числу протонов в ядре.

Простейший атом содержит в ядре всего один протон: это атом водорода. Более сложный атом гелия имеет в ядре уже два протона, третий (литий) - три и т.д. *Определённый вид атома называется элементом.*

**Спектры излучения и поглощения. Главное квантовое число**

Согласно *планетарной*модели строения атома в центре атома находится ядро, содержащее протоны и нейтроны и сосредоточивающее, таким образом, фактически всю массу. Число протонов определяет вид атома а также его порядковый номер в периодической системе элементов Д.И. Менделеева (при записи элемента число протонов указывается перед буквенным символом элемента внизу).

Вокруг положительно заряженного ядра вращаются отрицательно заряженные электроны. Число электронов атома равно числу протонов в ядре, так что в целом атом электронейтрален.

Согласно такой Резерфордовской модели атома электрон, вращаясь вокруг ядра, должен излучать энергию и, с каждым оборотом теряя её, упасть на ядро. Это излучение должно быть непрерывным, т.е. спектр излучения атома должен быть сплошным. Представление о такого рода (сплошном) спектре может дать разложение солнечного света призмой на плавнопереходящие друг в друга цвета радуги.

Однако уже в конце Х1Х века было экспериментально доказано, что спектры излучения атомов (в газообразном состоянии) не сплошные, а состоят из ряда чётко фиксированных полос (*"полосатый"*спектр).

Кроме того, данная простейшая модель не могла объяснить устойчивости (долгоживучести) атома: электрон, теряя энергию в форме электромагнитного излучения, должен был упасть на ядро (согласно простейшим расчётам в течении 10 секунд).

Эти два  основных  противоречия   модели  Резерфорда  были устранены постулатами Бора (1913 год), согласно которым допускалось что:

1. В атоме имеются орбитали, находясь на которых, электрон не излучает и не поглощает энергию (так называемые *стационарные*орбиты).

2. Поглощение или выделение энергии происходит только как следствие перехода электронов с одной стационарной орбиты на другую стационарную. Поглощение - при переходе с ближайшей к ядру орбиты на более отдалённую; излучение – наоборот, при переходе с отдаленной на ближайшую.

Приравнивая математические выражения для центростремительной силы вращающегося вокруг ядра электрона силе электростатического притяжения электрона к ядру, и, учитывая уже известные положении квантовой механики о том, что энергия излучается не непрерывно, а определенными порциями (квантами), Бор рассчитал для простейшего атома (водорода) радиусы дозволенных такой теорией (стационарных) орбит и величины энергий электрона на каждой из таких электронных орбит (слоев). Радиус ближайшей к ядру стационарной орбиты водорода, согласно расчёта, оказался равным 0,053 нм, т.е. R = 0,053.10-9 м.

Стационарные орбиты расположены вокруг ядра слоями. Для обозначения номера слоя, в котором находится данный электрон, введено *первое или главное*квантовое число.

Общее буквенное обозначение главного квантового числа - n. Условно принято обозначать стационарные орбиты порядковыми числами от 1 до бесконечности. Таким образом, главное квантовое число обозначает номер электронного слоя, в котором находится интересующий нас электрон.

n = 1, 2, 3, ... ∞.

Для обозначения главного квантового числа используют заглавные латинские буквы: K, L,M, N, O, P, Q.

Если мы говорим, что для данного электрона главное квантовое число равно единице (n = 1), то с физической точки зрения это равносильно утверж­дению: данный, электрон находится в первом (наиболее близком к ядру) электронном слое.

Естественно, чем дальше тот или иной электронный слой от ядра (больше значение n), тем больше размер (радиус) этого слоя.

Радиусы стационарных орбит атомов оказались пропорциональны квадрату главного квантового числа (номера слоя):

R = An2

Принимая во внимание, что электроны в столь маленьком пространстве движутся с огромной линейной скоростью (около 260 тыс. км/с), близкой к скорости света (300 тыс. км/с), электронный слой можно представить себе в форме электронного облака, то есть размытого электроотрицательного поля.

Согласно постулатам Н. Бора электрон, вращаясь по стационарным орбитам, не излучает и не поглощает энергии и только переход его с одной орбиты на другую вызывает изменение его энергии, т.е. излучение или поглощение. Переход из отдалённого слоя в более близкий к ядру слой вызывает излучение энергии, напротив, получив энергию из вне (поглотив), электрон приобретает возможность перескочить на более удалённый уровень.

**Орбитальное квантовое число. Физический смысл, числовое и буквенное обозначения**

Более детальное рассмотрение линий спектра показало, что большинство их мультиплётно, то есть они состоят из нескольких близко друг к другу расположенных линий. Это наводит на мысль, что квантовые уровни не однородны, в пределах одного стационарного уровня может быть несколько близких по энергии стационарных подуровней. Для обозначений этих подуровней введено *второе*квантовое число, которое иногда называют также *"побочное",*а чаще всего ***"орбитальное".***

Общее буквенное обозначение этих подуровней (другими словами, орби­тальных квантовых чисел) -*l* (малая латинская буква л).

Число таких возможных подуровней зависит от номера уровня, т.е. от главного квантового числа и определяется по формуле:

*l* = 0, 1, 2, 3, ... n-1.

Другими словами, подуровни условно обозначены также, как и уровни, целыми числами, но начиная с нуля. Их число в каждом уровне зависит от номера уровня.

Для обозначения подуровней чаще используются не цифры, а малые буквы латинского алфавита:

*l* = s, p, d, f,...

Установлено, что подуровни различаются между собой не только энергией находящихся на них электронов, но и формой орбитали (электронного облака). Так подуровень s имеет *шаровую*форму электронного облака, подуровень р - форму, напоминающую *гантель,*формы d электронных облаков получили названия *"розетка".*

**Магнитное и спиновое квантовые числа**

Установлено, что при помещении атома во внешнее магнитное или электрическое поле спектры атомов становятся еще более мультиплётными. С физической точки зрения это означает, что различные электронные облака находящиеся даже на одном подуровне, по разному реагируют на внешнее магнитное поле. Для обозначения этих подподуровней введено третье, ***магнитное***квантовое число *тl,*принимающее значения всех целых чисел от   -*l*через 0 до +*l*.

*тl*= -*l,*...-2,-1,0,+1.+2,...,+ *l*

*То есть: магнитное квантовое число (тl) показывает реакцию орбит на внешнее магнитное или электрическое поле, зависит, от орбитального квантового числа и обозначается целыми числами от -l до*+*l.*

Электрон помимо движения "вокруг ядра" вращается и вокруг собственной оси. Для обозначения направления этого вращения введено четвёртое квантовое  число – ***cnuнoвoe (ms).***Собственный момент вращения -*(спин)*имеет два значения, условно обозначенные как +1/2 и -1/2.

Упрощенно иногда указывают: по часовой или против часовой стрелки; или изображают в виде стрелки, направленной остриём вверх или вниз.

Следует помнить, что обозначения и числовые значения всем квантовым числам даны условно. Все квантовые числа являются *энергетическими*характеристиками электрона, т.е.*условным*образом указывают на различия в энергетическом состоянии электрона. В целях болееудобного восприятия мы и придаём квантовым числам определенный физический смысл.

Все вещества состоят из взаимодействующих химических эле­ментов. Минимальной частицей химического элемента является атом, состоящий из ядра и окружающих его электронов. Периоди­ческая система химических элементов Д.И. Менделеева устанавливает взаимосвязь периодичности свойств химических элементов с электронным строением атома. Важнейшее значение периодического закона заключается в том, что на его основе осу­ществляется осмысление и обобщение практически необъятного фактического материала о строении и свойствах простых и слож­ных веществ. На плакате 1 представлен вариант длинной формы периодической системы химических элементов Д.И. Менделеева. В ячейках таблицы приводятся порядковый номер химического элемента, его обозначение, относительная атомнаямасса и конфигурация внешнего электронного уровня.

Таблица.2 **Обозначение уровней электронов в атоме**

|  |  |
| --- | --- |
| Уровень | Главное квантовое число *п* |
| К | I |
| L | 2 |
| М | 3 |
| N | 4 |
| О | 5 |
| Р | 6 |
| Q | 7 |

Горизонтальные ряды таблицы Менделеева называются *перио­дами.*Номер периода соответствует *главному квантовому числу п.*Периоды определяют заполнение электронных*уровней*(слоев, обо­лочек) в атоме (табл. 2). Столбцы соответствуют *группам*и *под­группам.*Группы обозначены римскими цифрами, а подгруппы бук­вами а и b.

Группы соответствуют последовательности заполнения электронных оболочек в каждом периоде согласно *орбитальному (азимутальному - l), магнитному (тl)*и *спиновому (ms) квантовым числам.*Подгруппы разделяют заполнение s-, р- и d- подуровней *(орбиталей)*(табл. 3).

*Главное*(радиальное) квантовое число *п*характеризует дискретность изменения энергии и расстояния электрона (радиуса орбиты) от атома, *п*= 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7.

*Орбитальное (азимутальное)* квантовое число *l,*или квантовое число *угловогомомента,*определяет дискретность изменения величины орби­тального углового момента вращения электрона вокруг ядра атома, *l*= 0, 1, 2, 3, ..., (n - 1).

Таблица3 **Обозначение подуровней электронов в атоме**

|  |  |
| --- | --- |
| Под­уровень | Орбитальное квантовое число *l* |
| sрdf | 0123 |

*Магнитное*квантовое число *т*определяет дискретность пространственной ориентации орбитального углово­го момента электрона, а следовательно, и *атомного магнитногомомента, тl*= - *l,*..., -3, -2, -1,0, 1,2, 3, ..., *l.*

*Спиновое*квантовое число *ms*определяет величину спинового (вращение вокруг собст­венной оси) углового момента электрона, *ms*= -1/2, 1/2. Знак «ми­нус» для квантовых чисел *т*и *ms*означает существование положи­тельных и отрицательных проекций углового момента на осьвращения.

Поскольку каждый отдельно взятый атом - электрически ней­тральная система, то числу электронов в атоме химического эле­мента соответствует эквивалентное число *протонов*в*атомном ядре,*а, следовательно, пропорциональное значение электрического заряда ядра. Номер химического элемента в периодической систе­ме соответствует электрическому заряду его ядра, выраженному в единицах заряда электрона *е =*1,60217733 . 10-19 Кл. У атома с но­меромZ положительный заряд ядра равен +Z.e. Этот заряд несут Z протонов, каждый из которых имеет такую же массу, как ядро атома водорода и заряд *+е.*Увеличение числа электронов, а, следовательно, и протонов в атоме приводит к росту атомной массы. Однако одному и тому же хими­ческому элементу могут соответствовать атомы с разной величи­ной массы - *изотопы.*Это связано с различным содержанием *нейтронов*в ядре химического элемента.

*Примечание. Под изолированной системой понимается система, совершенно невзаимодействующая с окружающей средой.*

Любая изолированная система стремится занять состояние с ми­нимальной энергией -*основное состояние.*Соответственно ведут себя и электроны в атоме. Распределение электронов по орбиталям (по энергетическим уровням) определяется *принципом исключенияПаули,*который гласит, что в атоме не может быть двух электронов, у которых все четыре квантовых числа одинаковы.

*Пример:*

По периодической таблице легко определить электронную конфигурацию атома каждого элемента, например, для лития Is22s1, углерода Is22s22p2, неона Is22s22p6, кремния Is22s22p63s23p2, ванадия Is22s22p63s23p63d34s2, урана Is22s22p63s23p63d104s24p64d104f145s25p65d105f36s26p66d17s2.

**Периодичность свойств химических элементов**

Периодичность заполнения электронных оболочек в соответст­вии с условиями квантования приводит к сходству свойств химиче­ских элементов. Выделяют следующие классы (см. табл. I):*благо­родные газы -*элементы с полностью заполненными электронными оболочками (Не, Ne,Ar, Kr, Xe, Rn); *типичные элементы*- эле­менты, у которых все электронные слои атомов (см. табл. 1, 2, 3), кроме *внешнего,*заполнены (***s- и р-элементы***); *переходные элементы*- элементы, имеющие два незаполненных внешних электронных слоя, в том числе подуровни *(п-l)*d (***d-элементы***); ***внутрирядные******переходные элементы (редкоземельные)****-*элементы, имеющие тринезаполненных внешних электронных слоя, в том числе подуровни *(п*- 2)f (***f-элементы***). Таким образом, **полнота заполнения элек­тронами внешних *(валентных)*орбиталей имеет важнейшее значение и определяет свойства элементов.**

*Примечание. Валентными электронами**называются электроны внешних электронных орбиталей атома. Число валентных электронов, отдаваемых атомом для обра­зования связей, определяет величину его валентности**в конкретном случаевзаимодействия.*

Рост числа электронов, с одной стороны, и соответствующее экранирование электрического заряда ядра (заряд ядра становится *эффективным),*с другой стороны, приводят к периодическому из­менению *атомных радиусов*химических элементов, а соответст­венно, и*атомных объемов.***Атомный объем имеет существенное значение при взаимодействии атомов различных химических элементов,**особенно в твердом состоянии (при образовании*твер­дых растворов).*

В процессах межатомного взаимодействия, в частности, в технологии строительных материалов, существенную роль играют ***окислительно-восстано­вительные способности***элементов — склонность отдавать или принимать электроны. Естественно, чем меньше *энергия (потен­циал) ионизации,*тем легче атом отдает электроны и тем самым может являться более сильным *восстановителем.*Чем легче атом химического элемента присоединяет электроны, чем выше его *срод­ство к электрону,*тем более сильным *окислителем*он может яв­ляться. Понятия окислителя и восстановителя - это понятия относи­тельные и очевидны лишь при образовании чисто *ионной связи.*

*Примечание.****Ионы****- одноатомные или многоатомные частицы, несущие электрический заряд, например Н+, Li+, Al3+, O22-, SO42-. Положительно заряженные ионы на­зывают****катионами,****а отрицательно заряженные -****анионами.***

При взаимодействии атомов разных химических элементов с образованием*гетерополярной ковалентной связи*полезно исполь­зовать понятие *электроотрщателъности,*которой также свойст­венна периодичность изменения в зависимости от атомного номера химического элемента.

Нужно помнить, что не только свойства свободных атомов, но и свойства простых веществ, которые они составляют, подчиняют­ся периодической закономерности.

**Атомные радиусы химических элементов**

Понятие атомного радиуса достаточно относительно, так как полностью определяется тем состоянием, в котором находится данный атом: свободном, молекулярном, жидком, кристалличе­ском,причем надо также учитывать, например, *тип химической связи*и*кристаллической структуры.*Радиус связанного атома можно считать либо *ионным,*либо*атомным.*

Орбитальные атомные радиусы химических элементов, по Веберу и Кромеру представлены на плакате 2.

В среднем атомный радиус возрастает с ростом порядкового номера элемента (заряда ядра), особенно с пе­реходом к новому периоду. Однако внутри каждого периода с рос­том числа электронов величина радиуса падает, что обусловлено ростом заряда атомного ядра, увеличивающую силу притяжения электронов на данной орбите.

При заполнении *р*-подуровня подобная тенденция слабее, хотя также имеет место. Незначительные искажения, обнаруживаемые для радиусов переходных элементов, обусловлены особенностями заполнения электронами *d*-орбитали.

**Энергия ионизации**

Энергия ионизации характеризует величину силы связи электрона с ядром, по которой можно судить о стабильности той или иной электронной конфигурации, а также, частично, о легкости или трудностях передачи электрона от одного атома к другому при образовании чисто*ионной химической связи*в окислительно-восстановительных процессах.

***Первая энергия (первый потенциал) ионизации I1****-*наи­меньшее количество энергии, которое необходимо для удаления электрона от свободного атома в его низшем (основном) энергети­ческом состоянии. ***Вторая I2, третья I***3 (и т.д.) энергии иониза­ции представляют собой энергии, необходимые для удаления наи­более слабо связанных электронов от однократно, двукратно (и т.д.) положительно заряженных ионов в их основном состоянии.Очевидно, что *I1 < I2*< *I3*< ... < *Iп ,*где *п -*общее число электронов в атоме. На энергию ионизации наиболее существенное влияние оказывают следующие факторы:

-     эффективный заряд ядра;

-     расстояние от электрона до ядра (точнее, радиус максимума
электронной плотности);

-     глубина проникновения электрона в облака зарядов внутрен­них электронов.

Периодичность энергии ионизации представлена на плакате 2.

Глубина проникновения электронов в нижеследующие слои меняется в последовательностиs →р → d → f, т.е. наиболее глу­боко проникают s-электроны. В результате прочность связи элек­тронов с ядром растет в той же последовательности, а степень эк­ранирования ядра - в обратной. Увеличение энергии связи электронов с ядрами приводит к сжатию электронных оболочек.

Отметим, что по мере увеличения атомного номера Z нижеследующие электронные оболочки сни­жают энергию связи внешних электронов с ядрами. В то же время энергия связи электронов, заполняющих внешние р-подуровни, растет по мере их накопления с ростом Z и достигает максимума у благородных газов (Не, Ne, Ar, Кг, Хе и Rn).