

УДК 501
ББК 20
В74

Главный редактор

М.Г. Ясовеев доктор геолого-минералогических наук, профессор, заведующий кафедрой экономической географии и охраны природы БГПУ

Отвественный редактор

Т.А. Бонина кандидат химических наук, доцент кафедры общей биологии БГПУ

Редакционная коллегия:

В.Н. Киселев доктор географических наук, профессор кафедры физической географии БГПУ;

В.Б. Кадацкий доктор географических наук, профессор кафедры физической географии БГПУ;

А.Т. Федорук доктор биологических наук, профессор кафедры общей биологии БГПУ;

Н.В. Науменко кандидат сельскохозяйственных наук, доцент, декан факультета естествознания БГПУ;

А.В. Деревинский кандидат сельскохозяйственных наук, доцент кафедры ботаники и основ сельского хозяйства БГПУ;

Г.И. Литвинюк кандидат геолого-минералогических наук, доцент, заведующий кафедрой физической географии БГПУ;

Н.Д. Лисов кандидат биологических наук, доцент, заведующий кафедрой ботаники и основ сельского хозяйства БГПУ;

А.В. Хандогий кандидат биологических наук, доцент, заведующий кафедрой зоологии БГПУ;

В.В. Маерищев кандидат биологических наук, доцент, заведующий кафедрой общей биологии БГПУ;

Ф.Ф. Лахвич кандидат химических наук, доцент, заведующий кафедрой химии БГПУ.

В74

Вопросы естествознания. сборник научных статей. Выпуск 5 / глав. ред. М.Г. Ясовеев, Белорусский государственный педагогический университет имени Максима Танка. – Минск: Право и экономика, 2010. – 128 с.
ISBN 978-985-442-820-8.

В сборнике представлены экспериментальные данные исследований в области биологии, географии, экологии, химии, валеологии, анатомии. Актуализируются проблемы в сфере новейших разработок по естественнонаучным дисциплинам.

Адресуется научным сотрудникам, аспирантам, магистрантам и студентам, занимающимся вопросами естествознания.

УДК 501
ББК20

ISBN 978-985-442-820-8

© Учреждение образования «Белорусский государственный педагогический университет имени Максима Танка», 2010
© Оформление. ИООО «Право и экономика», 2010

бурн
проя
разви
коле
усло
верс
цело

ляет
обра
куль
дуци
гогич
лист

позв
куль
даго
вани
Хара
стви
и со
полн

фек
сион
студ
ном

овла
иссл
част
став
тере
ских
сах
прик
фак

ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ**Относительные размеры атомов**

А.Г. Емельянов, 2 курс

научный руководитель – кандидат химических наук, доцент С.Ю. Елисеев

От размеров радиусов атомов и ионов зависят многие физические и химические свойства элементов, поэтому определение радиусов принципиально важно. Электронные облака не имеют резко очерченных границ. Поэтому понятие о размере атома не является строгим и зависит от способа определения. Но, как правило, различные способы определения дают близкие друг другу результаты, во всяком случае – коррелируют друг с другом.

Атомы и ионы обладают сферически симметричной электронной конфигурацией и в первом приближении их можно считать шарами. Конечно, их нельзя считать «бильярдными шарами», скорее их можно представить «резиновыми мячиками», в определенных условиях меняющих свой размер [1].

С точки зрения квантовой механики невозможно определить абсолютные размеры атомов, так как электронная плотность теоретически обращается в нуль лишь на бесконечном удалении электрона от ядра. В то же время электронное облако сильно размывается уже на отрезке в несколько десятков нанометров от ядра. Поэтому радиусы атомов и ионов рассматривают как *эффективные*, зависящие от того в каком химическом соединении они определены. Т.е. должны учитываться такие факторы как структура вещества, характер связи, степень окисления элементов и т.д. Из-за различного состояния атомов в молекуле или кристалле не может быть единого типа атомных радиусов, и, следовательно, может быть определено несколько видов радиусов.

За последние десятилетия (начиная с середины шестидесятых годов XX века) в связи с бурным развитием электронно-вычислительной техники получило определенное распространение понятие об *орбитальных радиусах атомов* (радиусы Слэйтера). Орбитальные радиусы – это расстояния от ядра до наиболее удаленного от него максимума функции радиального распределения электронной плотности. Для любого атома может быть только один орбитальный радиус в нормальном состоянии и сколько угодно значений орбитального радиуса в возбужденных состояниях [2, 3, 4, 5].

Из самого понятия орбитального радиуса следует, что он ближе к истинному размеру атома, чем эффективный радиус. В отличие от эффективного орбитальный радиус является характеристикой свободного атома или иона и не зависит от природы химической связи и других факторов.

Надо отметить, что на каждой кривой электронной плотности (кроме 1s) имеется несколько максимумов и высота максимумов будет увеличиваться по мере удаления от ядра, т.е. наибольший максимум будет самым удаленным и именно он рассматривается в качестве главного радиуса. Спад кривых по обе стороны от рассматриваемого максимума будет неодинаков. В сторону ядра будет идти чередование понижающихся максимумов, круто сбывающихся у ядра и плавное понижение на внешней границе электронного облака (рис.1).

Истинные пределы электронной оболочки атома простираются значительно дальше от ядра, чем то расстояние, на котором находится максимум радиальной плотности, отвечающий главному радиусу. Т.е. понятна условность радиусов максимальной радиальной плотности, но это не лишает их значения как характеристики размеров электронной оболочки атома.

Каждому главному квантовому числу соответствует серия пучков линий радиусов, соответствующих s, p, d положению максимумов плотности этих электронных облаков (рис.2).

Последовательность линий в пучке (при одном и том же главном квантовом числе n) в основном соответствует возрастанию вращательного орбитального момента, т.е. переходу от s-орбиталей к p, а затем к d и f-электронам.

Пучки линий для одного и того же n сначала узки. Линии $2s$ и $2p$ почти сливаются, т.к. отвечающие им электроны недалеко от ядра, и центробежным силам труднее бороться с полем заряда последнего. Линии $3s$, $3p$, $3d$ в большей степени отодвинуты друг от друга; линии $4s$, $4p$ еще более широко отходят друг от друга (рис.3).

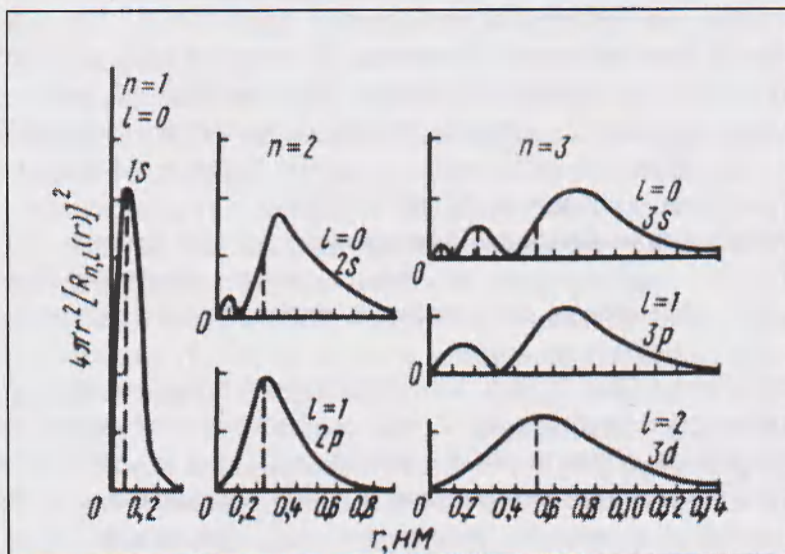


Рисунок 1 Функции радиального распределения, передающие вероятность нахождения электрона на расстоянии r от ядра

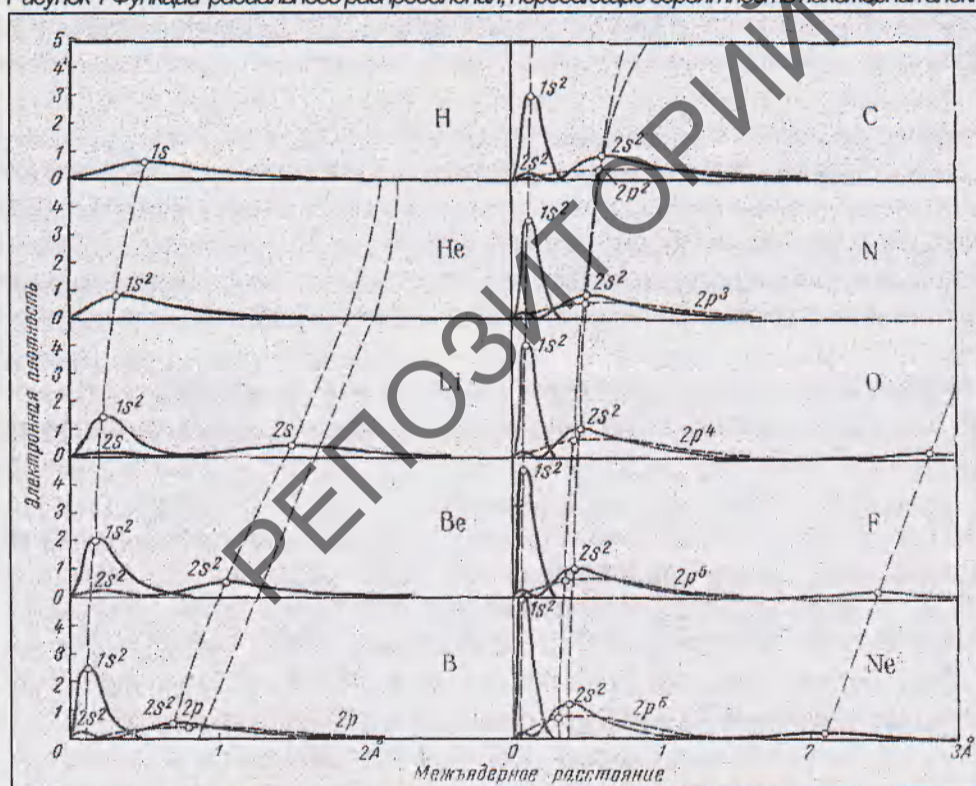


Рисунок 2 Схемы радиальных электронных плотностей у атомов первого и второго периодов Периодической системы Д.И. Менделеева

Внутри каждого пучка при увеличении заряда ядра замечается пересечение линий s , p , d -электронов и часто происходит изменение порядка их расположения. Т.е. линии s -электронов могут отвечать уже не наименьшим, а наибольшим радиусам ($2n$), аналогичная картина наблюдается частично и для $3p$ и $3d$ -электронов.

Это можно в какой то степени объяснить тем, что сферические s -орбитальные облака труднее сжимаются в радиальном направлении при нарастании заряда ядра. То же самое можно сказать о p -орбиталях по сравнению d -орбиталями.

Одними из самых надежных данных орбитального радиуса положения максимума плотности электронных облаков практически всех элементов - являются данные Уобера и Кромера, неоднократно подтвержденные различными исследователями [2, с.341].

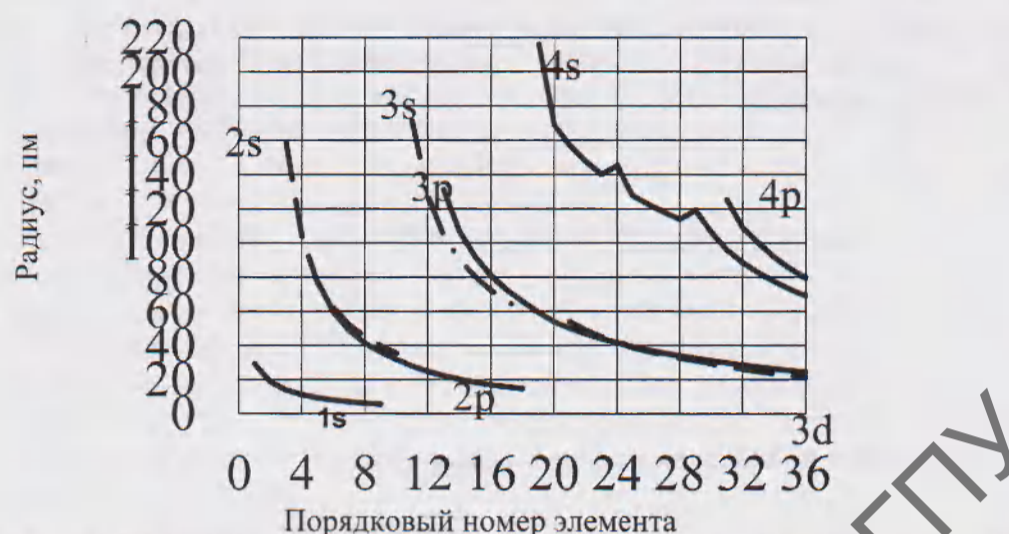


Рисунок 3. Зависимость условных радиусов нейтральных атомов от порядкового номера элемента

Значения $r_{\text{макс}}$ дают как бы постоянный скелет для характеристики атомных размеров. Внешняя часть облака может быть при данном скелете и растянутой радиально, но это как бы постоянная, систематическая «ошибка». Поэтому знание определенных «скелетных» размеров облака дает твердую отправную точку для качественных и даже полуколичественных суждений. И в этом их большое значение.

Литература

1. Барнард А. Теоретические основы неорганической химии. М., Мир, 1968. С.72.
2. Жукарев С.А. Неорганическая химия. М., Высшая школа, 1970. С.
3. Дей К., Селбин Д. Теоретическая неорганическая химия. М., Химия, 1976. С.109.
4. Шиманович И.Е., Павлович М.Л., Тикавский В.Ф., Малашко П.М. Общая химия в формулах, определениях, схемах. Мн., Універсітэцкае, 1996. С.47.
5. Хьюи Дж. Неорганическая химия. Строение вещества и реакционная способность. М., Химия, 1987. С.174.

Кетовинилпероксиды в синтезе нафтопирилиевых солей

Т.В.Зенкевич, 3 курс

научный руководитель – кандидат химических наук, доцент Л.С.Новиков

Интерес к полифункциональным пероксидам постоянно растет, что связано с рядом их преимуществ при использовании в качестве инициаторов радикальных процессов [1], а также удобных интермедиатов для получения веществ самого различного назначения [2,3]. Особое место в ряду перекисных соединений указанного типа занимают пероксиды α , β -непредельных кетонов, простота получения которых и особенности химического строения (наличие енонового фрагмента в сочетании с перекисной группой) делают их удобными исходными субстратами в синтезе разнообразных продуктов, обладающих полезными свойствами [4,5].

С учетом этих данных в настоящей работе осуществлен синтез отдельных представителей указанного класса кетовинилпероксидов и проведены их трансформационные преобразования с участием всех функциональных групп в нафтопирилиевые соли – гетероциклические соединения, используемые в качестве агентов многоцелевого назначения [6,7].

4-Гидроперокси-4-метил-1-арил-2-пентен-1-оны (II,IV) и их ацетаты (III,V) были получены жидкофазным окислением молекулярным кислородом β , γ -ненасыщенных 1,5-дикетонов (I), образующихся в одну стадию из соответствующих арилметилкетонов и изомасляного альдегида, в условиях реализации ретрореакции Михаэля (избыток трет-бутилата