

## СТАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АТОМА В ТЕОРИИ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ

В.К. Дюпин<sup>1</sup>, канд. тех. наук

А.А. Колесников<sup>1</sup>, канд. тех. наук

И.Д. Угрюмова<sup>2</sup>, магистрант

<sup>1</sup>ООО «КОНСАЛТ-М»

<sup>2</sup>Томский политехнический университет

<sup>1</sup>(Россия, г. Москва)

<sup>2</sup>(Россия, г. Томск)

DOI:10.24412/2500-1000-2025-3-1-325-338

**Аннотация.** На основе фотонной модели элементарных частиц предложена формула, связывающая массу частицы с её размером, двумя видами энергии и магнитным моментом, для чего предложена и определена ДюК-константа. По предложенной формуле рассчитаны радиусы протона, электрона и мюона. Адекватность модели подтверждается соответствием расчётных и экспериментальных данных.

На основе «Закона сохранения энергии» показано, что «Закон сохранения массы веществ, вступающих в реакцию» должен быть заменён на «Закон изменения массы веществ, вступающих в реакцию».

Предложены статические модели атомов на основе электрических и магнитных сил взаимного притяжения и отталкивания ядра и электронов. В отличие от квантово-механической модели атомов, в статической модели атомов электроны занимают определённое положение относительно ядра и друг друга. Электроны в атоме располагаются в виде слоёв. При образовании молекул внешние электроны одного атома занимают электронные вакансии в слое другого атома. В этом принципиальное отличие предлагаемой теории от теории валентности, основой которой является спаривание внешних электронов. Атомы представлены в виде пазлов, используемых для составления структурных формул веществ.

Рассмотрен пример действия катализатора на основе энергетических характеристик соединений.

**Ключевые слова:** фотон, элементарные частицы, электрон, протон, магнитный момент, размер частицы, пазл атома, электронная вакансия атома, вещество, молекула, катализатор.

Затруднения, возникающие при использовании теории валентности, делают актуальной разработку альтернативных теорий химической связи. Предлагаемая теория химической связи основана на электрических и магнитных силах взаимного притяжения и отталкивания ядра и электронов как внутри атома, так и между атомами. В статической модели атома [1] электроны занимают определённое положение относительно ядра и друг друга, которое должно быть представлено в сферической или иной системе координат. Электроны в атоме располагаются в виде слоёв. Если слой заполнен не полностью, тогда в нём могут быть вакансии для электронов других атомов. В молекуле электроны одного атома занимают вакансии другого атома и становятся общими для обоих атомов. Для первых трёх периодов Периодической системы атомы представлены в виде пазлов, используя кото-

рые, по предлагаемым в работе правилам, можно составлять структурные формулы молекул веществ. Максимальное число электронов у атомов первого периода Периодической системы равно 2, они образуют первый слой в атомах других периодов. Максимальное число электронов у атомов второго и третьего периодов во внешнем слое равно 8. Электроны внешнего слоя назовём о-электронами (outer shell electrons).

Слои о-электронов у элементов первого, второго и третьего периодов на подслои не делятся. Слой о-электронов у элементов четвёртого и пятого периодов разделяется на два подслоя. У элементов шестого и седьмого периодов о-электроны разделяются на три подслоя: верхний, средний и нижний.

Число электронных вакансий атома равно разнице между максимально возможным и действительным числом электронов слоя

(подслоя). Атом, отдающий о-электрон другому атому, будем считать донором, а принимающий о-электрон – акцептором. Во многих случаях атом может быть одновременно и донором, и акцептором, тогда образуется кольцевая связь между атомами (примером такой связи являются молекулы простых веществ). Она является наиболее прочным видом связи химического соединения. В противном случае образуется простая связь, когда электрон одного атома занимает вакансию другого атома, не принимая электрон от последнего. Примером такой связи является гидрид лития (см. далее).

Таким образом, предлагаемая теория образования химической связи основана **не на**

**спаривании электронов, а на образовании донорно-акцепторной связи между атомами.** При этом понятие валентности, при упрощённой оценке свойств атома должно определяться, как число возможных связей атома, а не количеством спариваемых электронов.

#### 1. Элементарные частицы

Модель элементарной частицы основана на том, что частица представляет собой свёрнутый в кольцо однопериодный фотон. Полная энергия кольцевой частицы,  $E$ , определяется по формуле (здесь и далее предложенные авторами формулы приводятся без ссылок на источники):

$$E = m \cdot c^2 = h \cdot c / \lambda_f + d / \lambda_f^3 = \hbar \cdot c / r_f + \mathfrak{d} / r_f^3, \quad (1)$$

где  $m$  – масса частицы, кг;

$c$  – скорость света,  $c = 2,99792458 \cdot 10^8$ , м/с;

$h$  – постоянная Планка,  $h = 6,6260687 \cdot 10^{-34}$ ,  
 $\hbar = 1,0545724 \cdot 10^{-34}$ , Дж·с;

$\lambda_f$  – длина окружности кольца фотона, образующего частицу, м;

$d$  – ДюК-константа ( $d$  соответствует фамилиям авторов – Дюпин-Колесников),  $d = 4,8322 \cdot 10^{-54}$ ,  $\mathfrak{d} = 1,9481 \cdot 10^{-56}$ , Дж·м<sup>3</sup>.

$r_f$  – радиус частицы, м

Используя формулу (1), получим значения радиусов протона –  $0,5867 \cdot 10^{-15}$  м, мюона –  $0,2124 \cdot 10^{-14}$  м и электрона –  $0,3863 \cdot 10^{-12}$  м.

Магнитный момент кольцевой частицы определяется по формуле:

$$\mu = e \cdot \lambda_f \cdot c / (4\pi \cdot (1 - \alpha/2\pi)) = K_\mu \cdot \lambda_f, \quad (2)$$

где  $e$  – элементарный заряд,  $e = 1,60217646 \cdot 10^{-19}$  Кл;

$\alpha$  – постоянная тонкой структуры,  $\alpha = 0,00729735$ ;

$K_\mu$  – коэффициент магнитного момента кольцевой частицы,  
 $K_\mu = 0,38267 \cdot 10^{-11}$  Дж/(Тл·м).

Рассчитанные в по формуле (2) магнитные моменты протона, мюона и электрона соответственно равны  $1,41061 \cdot 10^{-26}$ ;  $0,44908 \cdot 10^{-25}$ ;  $9,28475 \cdot 10^{-24}$  Дж/Тл; измеренные значения соответственно равны  $1,41061 \cdot 10^{-26}$ ;  $0,44908 \cdot 10^{-25}$ ;  $9,28475 \cdot 10^{-24}$  Дж/Тл [2, 3].

#### 2. Статическая модель атома водорода

Атом водорода является простейшим атомом. Электрическая сила,  $F_e$ , действующая между протоном и электроном, направлена на их взаимное притяжение и определяется согласно закону Кулона по формуле:

$$F_e = \alpha \cdot c \cdot h / 2\pi z^2 = K_e / z^2, \quad (3)$$

где  $z$  — расстояние между частицами, м;  
 $K_e$  — коэффициент электрической силы,  $K_e = 0,2307077 \cdot 10^{-27}$  Дж·м.

В формуле (3) закон Кулона записан при единичном заряде каждой из двух частиц, равном  $1,60217646 \cdot 10^{-19}$  Кл.

Магнитная сила  $F_m$ , действующая между протоном и электроном, направлена на их взаимное отталкивание и определяется по формуле:

$$F_m = -(1 - \alpha / (2\pi)) \cdot (r_e + r_p) \cdot c \cdot (h / (2\pi)) / z^3 = K_m / z^3, \quad (4)$$

где  $r_e, r_p$  — радиусы электрона и протона;  
 $K_m$  — коэффициент магнитной силы,  $K_m = 0,122101 \cdot 10^{-37}$  Дж·м<sup>2</sup>.

В равновесном состоянии силы притяжения и отталкивания равны, что позволяет по приведённым выше формулам определить расстояние между частицами, оно равно  $0,529272 \cdot 10^{-10}$  м («радиус» атома водорода по Бору —  $0,529177 \cdot 10^{-10}$  м). Таким образом, мы получили статическую модель атома водорода, которая будет пригодна и для атомов других элементов с учётом их особенностей. Координаты электрона атома водорода в сферической системе координат — ( $0,5294599 \cdot 10^{-10}$ , 0, 0). Расстояние выраже

но в метрах, а углы — в радианах. В [1] приведены координаты электронов и расчётные характеристики атомов гелия, лития и бериллия.

3. Закон **изменения** массы веществ, вступающих в реакцию

Из формул (3) и (4), интегрируя выражения сил по  $z$ , получим формулу для расчёта энергии, выделившейся при образовании атома водорода (экзотермическая реакция) [1]. При этом масса его элементов уменьшается на  $\Delta m_n$ , равную  $0,000242224 \cdot 10^{-31}$  кг. Отсюда определим массу атома водорода по формуле:

$$m_H = m_e + m_p - \Delta m_H = 1,673532838 \cdot 10^{-27} \text{ кг}, \quad (5)$$

где  $m_e$  — масса свободного электрона,  $m_e = 9,10938189 \cdot 10^{-31}$  кг;  
 $m_p$  — масса свободного протона,  $m_p = 1,67262192369 \cdot 10^{-27}$  кг.  
 $\Delta m_n$  — масса продуктов реакции,  $\Delta m_n = 0,001393883 \cdot 10^{-27}$  кг.

Сумма масс, вступающих в экзотермическую реакцию электрона и протона при образовании атома водорода, равна  $1,673532862 \cdot 10^{-27}$  кг, а после —  $1,673532838 \cdot 10^{-27}$  кг. Энергия, затраченная на образование нейтрона из электрона и протона (эндотермическая реакция), равна энергии, выделившейся при его распаде, т.е.  $1,25276 \cdot 10^{-13}$  Дж. Этой энергии соответ-

Приведённые расчёты основаны на «Законе сохранения энергии», они позволяют сделать вывод о том, что существующий ныне «Закон сохранения массы веществ, вступающих в реакцию» следует заменить на «Закон изменения массы веществ, вступающих в реакцию». Согласно этому закону: **«Изменение массы веществ, вступающих в реакцию, равно изменению их внутренней энергии, делённой на квадрат скорости света»**. Он лежит в основе всей ядерной энергетики и может быть представлен формулой:

$$m_{out} = m_{in} + \Delta E / c^2, \quad (6)$$

где  $m_{out}$  — масса веществ, образующихся в результате реакции;

$m_{in}$	масса веществ, вступающих в реакцию;
$\Delta E$	изменение внутренней энергии веществ, образующихся в результате реакции.

В результате экзотермической реакции масса реагирующих веществ и продуктов реакции теряет энергию, поэтому  $\Delta E < 0$  и  $m_{out} < m_{in}$ . В результате эндотермической реакции, когда масса реагирующих веществ и продуктов реакции получает энергию извне,  $\Delta E > 0$  и  $m_{out} > m_{in}$ . Закон изменения массы веществ, вступающих в реакцию, в предложенном виде действителен как для ядерных, так и для химических реакций. В последнем случае изменения массы настолько малы, что в обычных условиях величиной  $\Delta E / c^2$  можно пренебречь. Но, во-первых, существует вероятность использования предложенного «Закона изменения массы веществ...» в каких-либо особых случаях и в химических реакциях, во-вторых, желательно иметь **один закон для всех наук**, а не свой для каждой науки (например, физики и химии).

4. Расчёт величины сродства к электрону атома водорода

Одной из важных характеристик атома является сродство к электрону. Справочные значения этой величины имеют значительный разброс и не всегда достоверны. Например, сродство к электрону атома углерода представлено в пределах от 1,2 до 2,1 эВ, у кислорода от 1,47 до 2,33 эВ [2, 4]. Справочное значение сродства к электрону у атома водорода равно 0,754 эВ [2, 4], однако данную величину сродства нельзя считать верной. Покажем это путём расчёта энергии сродства к электрону атома водорода на основе статической модели атома. Для этого определим энергию, необходимую для отрыва электрона от иона водорода  $H^+$ , равную величине сродства к электрону.

Уравнение силы в ионе водорода, действующей на каждый из электронов со стороны протона и второго электрона, имеет вид:

$$F = F_e - F_m - F_{ee} = K_e / z^2 - K_m / z^3 - K_e / (2 \cdot z)^2 = 0, \quad (7)$$

- где  $F$  – сила, действующая на электрон;  
 $F_e$  – электрическая сила, действующая между электроном и протоном;  
 $F_m$  – магнитная сила, действующая между электроном и протоном;  
 $F_{ee}$  – электрическая сила, действующая между электронами;  
 $z$  – расстояние между электроном и протоном.

Решение уравнения (7) даёт значение  $z$ , равное  $0,707 \cdot 10^{-10}$  м.  
 Энергия связи электронов в ионе водорода,  $E$ , равна:

$$E = 2 \cdot (K_e / z - K_m / (2 \cdot z^2)) - K_e / (2 \cdot z). \quad (8)$$

При расстоянии  $z$ , равном  $0,707 \cdot 10^{-10}$  м, величина  $E$  равна 15,34 эВ.  
 Сродство к электрону атома водорода,  $E_e$ , равно:

$$E_e = E - E_H = 15,34 - 13,59 = 1,75 \text{ эВ}, \quad (9)$$

где  $E_H$  – энергия связи электрона в атоме водорода,  $E_H = 13,59$  эВ.

Расчётное значение сродства к электрону атома водорода равно 1,75 эВ, оно соответствует экспериментальным данным, проявляемым атомами водорода в молекулах, и значительно превышает справочную величину.

Электрическая сила, определяющая занятие вакансии электроном другого атома к яд-

ру, в значительной степени соответствует сродству к электрону. Чем больше сродство атома к электрону, тем большей силой обладает вакансия атома. Вакансии атома можно условно разделить на сильные, средние и слабые вакансии. Неметаллы обычно обладают сильными вакансиями, полупроводники –

средними, металлы – слабыми. Внешний слой электронов у инертных газов заполнен полностью, поэтому сродство к электрону у них равно нулю и вакансии отсутствуют.

5. Групповое представление короткой Периодической таблицы

Статическая модель атома предполагает наличие оси, проходящей через центр ядра и ближайший к ядру электрон. На этой оси расположены электроны водорода и гелия. Третий электрон лития расположен на этой же оси, следовательно, третий электрон образует новый слой, что подтверждается соответствием расчётных данных [1], согласующихся с проявлением периодичности свойств водорода, лития и т.д. Электроны атома стремятся занять наименьшее расстояние от атомной оси, так как такое расположение соответствует максимальной энергии связи с ядром.

Максимальное число электронов и вакансий, расположенных с каждой стороны оси при заполнении второго периода, равно четырём. Следующим электронам энергетически выгоднее перейти в третий слой, образуя третий период. Расположение о-электронов в третьем слое аналогично их расположению во втором слое. Внешние оболочки четвёртого и пятого периодов имеют два подслоя, а шестого и седьмого периодов – три подслоя. При этом у первых двух элементов и последних

шести элементов каждого из этих периодов заполнение верхнего подслоя идёт аналогично заполнению внешних слоёв второго и третьего периодов.

В настоящее время в литературе представлены длинно- и короткопериодный вид таблицы. В столбцах короткопериодной таблицы элементы подобны по химическим свойствам, а номер столбца обычно соответствует одной из возможных валентностей атома. Выделим в Периодической таблице три группы элементов: «а», «b» и «с». В группу «а» войдут элементы первого, второго и третьего периодов, а также элементы из двух первых и шести последних элементов четвёртого, пятого, шестого и седьмого периодов. При образовании химической связи с другими элементами у элементов группы «а» число электронов внешнего слоя второго и третьего периодов, а также внешнего подслоя остальных периодов остаётся неизменным.

Элементы группы «а» приведены в таблицах 1-3. Для каждого атома группы «а» указаны: G – номер столбца E – количество о-электронов; Et – количество электронов в верхнем (top) подслое; Em – количество электронов в среднем (middle) подслое; Eb – количество электронов в нижнем (bottom) подслое; V – количество вакансий.

Таблица 1. Первый, второй и третий периоды, группа «а»

Период	G, E							
	1	2	3	4	5	6	7	8
	V							
	1	0	5	4	3	2	1	0
I	H 1	He 2						
II	Li 3	Be 4	B 5	C 6	N 7	O 8	F 9	Ne 10
III	Na 11	Mg 12	Al 13	Si 14	P 15	S 16	Cl 17	Ar 18

Таблица 2. Четвёртый и пятый периоды, группа «а» (Et – количество электронов в верхнем подслое (top); Eb – количество электронов в нижнем подслое (bottom)).

Период	G							
	1	2	3	4	5	6	7	8
	Et							
	1	2	3	4	5	6	7	8
	Eb							
	0	0	10	10	10	10	10	10
IVa	V							
	0	0	0	0	3	2	1	0
IVa	K 19	Ca 20	Ga 31	Ge 32	As 33	Se 34	Br 35	Kr 36
Va	Rb 37	Sr 38	In 49	Sn 50	Sb 51	Te 52	I 53	Xe 54

Таблица 3. Шестой и седьмой периоды, группа «а» (через дробь указаны возможные значения E и V, Em – количество электронов в среднем подслое (middle))

Период	G								
	1	2	3	4	5	6	7	8	
	Et								
	1	2	3/1	4/2	5/3	6/4	7/5	8/6	
	Em								
	0	0	10/12						
	Eb								
	0	0	12						
VIa	V								
	0	0	0/2	0/6	3/5	2/4	1/3	0/2	
VIa	Cs 55	Ba 56	Tl 81	Pb 82	Bi 83	Po 84	At 85	Rn 86	
VIIa	Fr 87	Ra 88	Nh 113	Fl 114	Mc 115	Lv 116	Ns 117	Og 118	

В группах «b» и «с» все элементы представлены металлами. Сильные и средние вакансии в этих группах отсутствуют из-за наличия подслоев у внешнего слоя оболочки. Появляется возможность перехода электрона в верхний подслой из нижнего подслоя при появлении в верхнем подслое средней или сильной вакансии и закрытия этой вакансии.

В каждом периоде группы «b» есть три близких по свойствам элемента (триады), в группе «с» – семь. У металлов групп «b» и «с» число слабых вакансий превышает число валентных внешних электронов, поэтому число вакансий не имеет существенного значения. Элементы, находящиеся в первом столбце групп «b» и «с», кроме валентности 2 и 3, могут также проявлять валентность 1. Элементы

четвёртого столбца этих групп могут проявлять валентность 4.

#### 6. Пазлы атомов

Представление атомов в виде пазлов строится на основе соответствия групповому виду Периодической таблицы Менделеева. Каждый пазл имеет два полюса со стрелками. Прямыми стрелками обозначены o-электроны, обратными – вакансии. Действие слабых вакансий проявляется в кристаллах и комплексных соединениях. Слабые и средние вакансии на пазлах лития, бериллия, и бора не показаны. Изображения пазлов атомов элементов первого и второго периодов показаны на рисунке 1. Изображения пазлов третьего периода аналогичны пазлам второго периода.

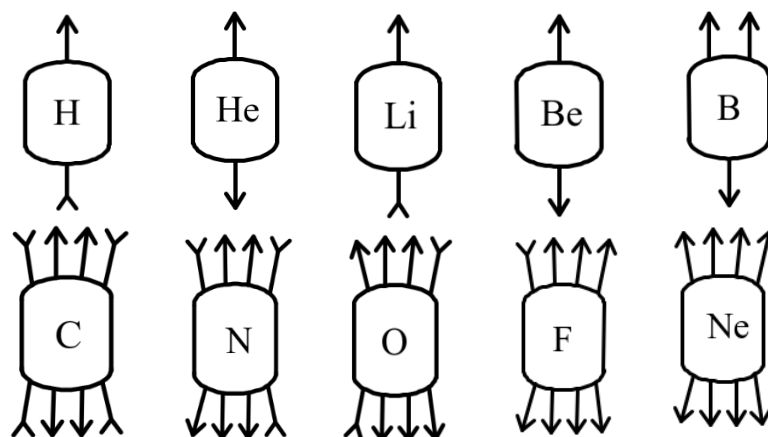


Рис. 1. Пазлы атомов элементов первого и второго периодов

### 7. Структурные формулы молекул простых веществ

Структурные формулы простых веществ элементов первых трёх периодов показаны на рисунке 2. При этом используется ограничение: стрелки полюса любого пазла могут соединяться со стрелками только одного полюса другого пазла.

В молекуле водорода каждый из атомов является одновременно донором и акцептором, такую связь назовём кольцевой связью, в противном случае – простой связью. Кольцевая связь имеет две связи.

Структурная формула молекулы лития содержит 14 слабых свободных вакансий, их

наличие соответствует твёрдому состоянию вещества при нормальных условиях. Двухатомные молекулы лития образуются в газообразном состоянии при увеличении температуры до его кипения. При этом рвутся кристаллические связи  $\sigma$ -электронов со слабыми вакансиями других атомов лития.

Наличие свободных электронов и отсутствие любых вакансий у молекул азота, кислорода, фтора и неона соответствует их газообразному состоянию. Атомы кислорода могут создавать двух- и трёхатомные молекулы.

Атомы фосфора могут образовывать двух- и четырёхатомные молекулы.

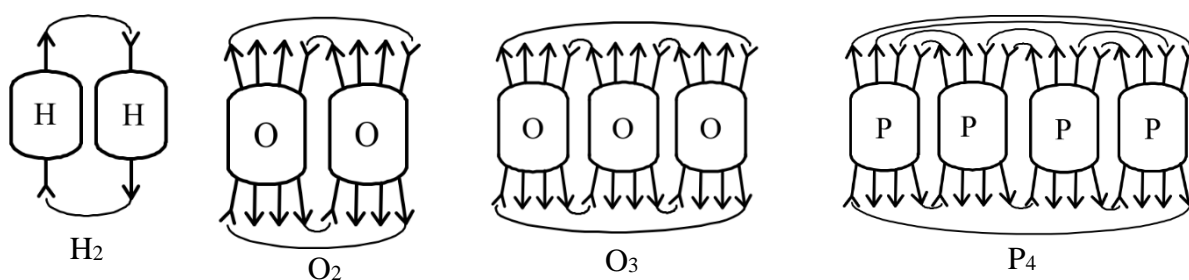


Рис. 2. Молекулы простых веществ

### 8. Структурные формулы сложных соединений

Структурные формулы некоторых сложных соединений, составленные из пазлов элементов первых трёх периодов, показаны на рисунке 3, они представлены кольцевыми и простыми связями. При составлении структурных формул сложных веществ необходимо учитывать величины сродства к электрону каждого из атомов, а также энергии связи

внешних электронов. Статическая модель даёт возможность рассчитать сродство к электрону и энергию связи электронов оболочки [1].

При составлении структурных формул многоатомных молекул необходимо использовать энергию диссоциации,  $E_d$ , (численные значения  $E_d$ , используемые при составлении молекул, приведены в таблице 4).

Таблица 4. Энергия диссоциации двухатомных молекул [4]

Молекула	Число связей	$E_d$ , эВ	Молекула	Число связей	$E_d$ , эВ
OH	2	4,4	SH	2	3,5
OS	4	5,3	NH	2	3,6
ON	5	3,5	LiH	2	2,4
OO	4	5,1	LiCl	2	4,8
NN	6	9,76	ClCl	2	2,48
LiLi	2	1,1	$O_3 \rightarrow O_2 + O$		0,11
$SO_3 \rightarrow SO_2 + O$		3,6	$HO_2 \rightarrow O_2 + H$		2,0

В молекулах не сохраняется пропорциональность энергии с количеством связей. В молекуле кислорода две кольцевых связи, в молекуле озона – 3 (см. рисунок 2). Энергия, приходящаяся на одну связь в молекуле кислорода, равна 1,3 (5,1/4) эВ, в молекуле озона – 0,87 ((5,1 + 0,11)/6) эВ (см. таблицу 4). Из двух молекул озона, имеющих суммарную энергию связи 10,42 эВ, получаются три молекулы кислорода с суммарной энергией связи 15,3 эВ. Энергетически выгодна молекула кислорода, что обуславливает нестабильность озона. Отсюда следующее правило составления молекул из пазлов атомов: **количество атомов в устойчивой молекуле должно соответствовать максимальной энергии связи.**

Гидрид лития LiH образован из одной простой связи, в нём остаются свободными 6 слабых вакансий, которые не позволяют образовать свободную молекулу LiH. Гидрид лития не образует отдельных молекул и при 850 °С разлагается на литий и водород. Энергия связи гидрида лития равна 2,4 эВ [4], молекулы водорода – 4,48 эВ, молекулы лития – 1,1 эВ. Это соединение при нагревании не испаряется, а разлагается. Сумма энергий связи Li<sub>2</sub> и H<sub>2</sub> (5,58 эВ) превышает энергию связи двух атомов LiH 4,48 эВ (2,4•2), поэтому энергетически выгоднее существование молекул водорода и лития, а не гидрида лития.

Энергия связи молекулы LiCl равна 4,8 эВ. Сумма энергии связи двух молекул LiCl равна 9,6 эВ и превышает сумму энергии связи молекул лития (1,1 эВ) и хлора (2,48 эВ), равную 3,58 эВ. Молекуле LiCl энергетически невыгодно распадаться на молекулы хлора и водо-

рода. Шесть незаполненных слабых вакансий лития, слабо связываясь со свободными электронами атома хлора придают этому соединению кристаллическую структуру. Соединение LiCl имеет кольцевую связь, что позволяет ему существовать в виде отдельных молекул при высоких температурах, когда разрушается связь электронов хлора со слабыми вакансиями лития. Как и другие хлориды и фториды щелочных и щелочноземельных металлов, LiCl при нагреве выше температуры кипения испаряется, переходя в молекулярное состояние.

На рисунке 3 показаны структурные формулы молекул воды и перекиси водорода. В молекуле воды остаются четыре не связанных электрона кислорода.

В молекуле аммиака азот имеет два несвязанных электрона, им выгоднее занять вакансии атомов водорода в молекуле NH<sub>4</sub>OH, а не кислорода, т.к. энергия сродства к электрону у водорода больше, чем у кислорода. Этот атом водорода не имеет кольцевой связи ни с одним атомом, поэтому его связь с атомами азота и кислорода ослаблена. При отсутствии воды молекула аммонии существовать не может, так как энергия связи OH (4,4 эВ) больше, чем энергия связи ON (3,5 эВ). Энергетически выгоднее существование двух молекул (NH<sub>3</sub> и H<sub>2</sub>O), имеющих кольцевые связи.

В соединениях атомов углерода и водорода, показанных на рисунке 3, атомы углерода связаны друг с другом кольцевой связью. Структура этих молекул была бы более наглядной при использовании объёмных пазлов.

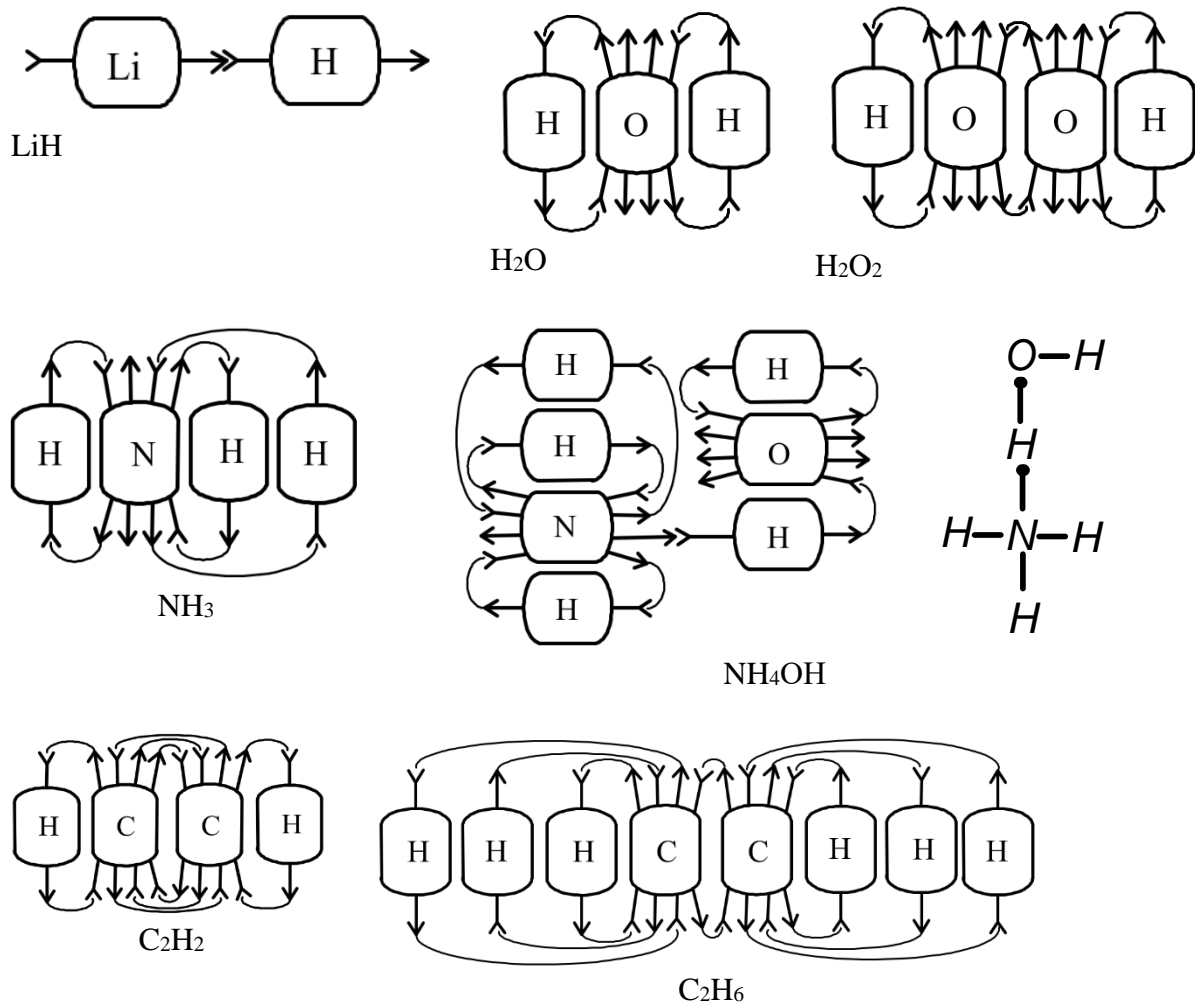
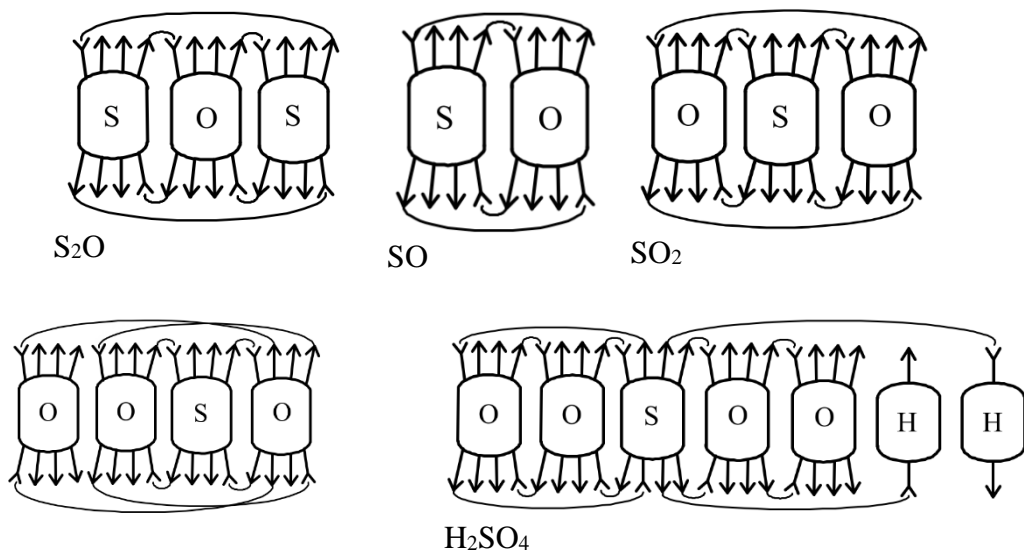


Рис. 3. Структурные формулы молекул сложных веществ

### 9. Структурные формулы соединений серы и азота

Предлагаемая теория отличается от теории валентности в том, что позволяет составлять только возможные варианты молекул и предсказывать некоторые свойства веществ по наличию свободных о-электронов и вакансий.

Покажем это на примере изменений валентности серы и азота, которые затруднительно объяснить на основе теории валентности. Структурные формулы этих же веществ, созданные на основе пазлов, показаны на рисунке 4.



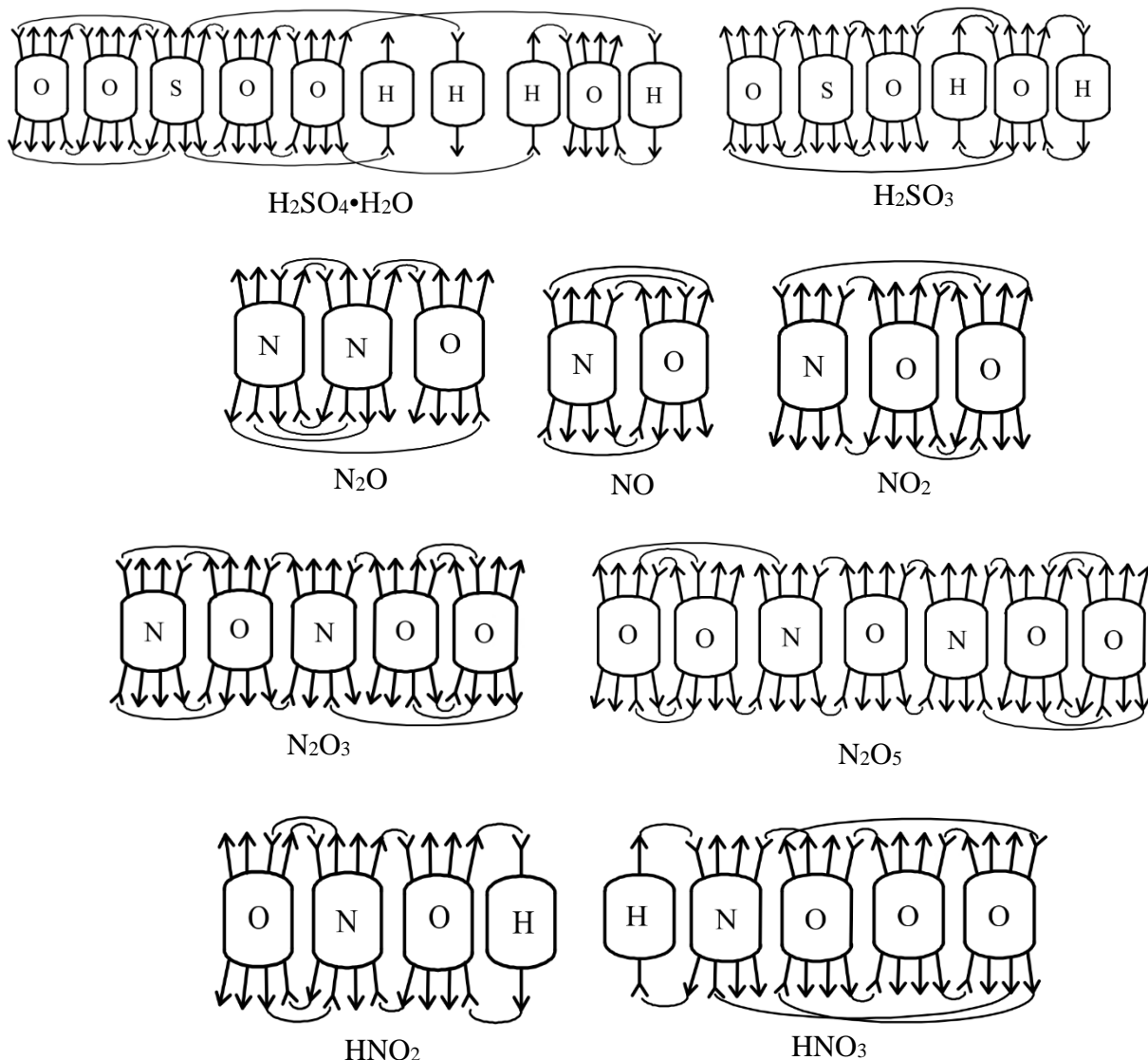
SO<sub>3</sub>

Рис. 4. Составленные из пазлов структурные формулы окислов серы и азота, а также кислот на их основе

Исходя из структурной формулы серной кислоты, построенной на основе валентности, затруднительно объяснить причину обугливания органических соединений этой кислотой и отсутствие такой способности у сернистой кислоты. Из формулы сернистой кислоты не следует какая-либо причина невозможности существования этой кислоты в чистом виде. Аналогичные затруднения возникают при оценке свойств азотной и азотистой кислот по структурным формулам. Причину неустойчивости в свободном виде азотистой кислоты, которая существует только в растворе, структурная формула не открывает. Азот в азотной кислоте имеет степень окисления +5, однако от него в структурной формуле отходит четы-

ре линии. В общепринятой структурной формуле азотной кислоты, для доведения валентности до пяти, требуется обычную черту валентности превращать в стрелку или дополнять формулу знаком заряда. Также трудно объяснимым остаётся факт, что при любых реакциях с азотной кислотой не происходит выделение водорода. Строение молекулы  $N_2O$ , а также других молекул окислов азота (кроме  $N_2O_5$ ), нельзя описать методом валентных связей. Для описания их строения прибегают к особому для каждой молекулы виду:  $N \equiv \overset{+}{N} - O^- \leftrightarrow \overset{-}{N} = \overset{+}{N} = O$ ,  $N \equiv \overset{+}{N} = O$  и т.д.

Рассмотрим составленные на основе пазлов структурные формулы окислов серы и азота. Из окислов серы наиболее устойчивым явля-

ется молекула  $\text{SO}_2$ . Молекула  $\text{SO}_3$  проявляет окислительное свойство (стремление заполнить свои вакансии электронами другого вещества), а молекулы  $\text{SO}$  и  $\text{S}_2\text{O}$  проявляют восстановительное свойство (стремление отдать свои электроны на заполнение чужих вакансий). Молекула  $\text{SO}$  подобна структурной формуле стабильной молекулы  $\text{O}_2$ . При этом молекула  $\text{SO}$  более прочная, так как энергия связи  $\text{SO}$  равна 5,3 эВ, а энергия связи  $\text{O}_2$  – 5,1 эВ. Молекула серного ангидрида  $\text{SO}_3$  имеет слабо связанный третий атом кислорода, поскольку он не имеет кольцевых связей с атомом серы (см. рисунок 4). Именно этот слабо связанный атомарный кислород обугливает органику при контакте с серным ангидридом.

Молекула серной кислоты образуется из молекулы серного ангидрида  $\text{SO}_3$  и молекулы воды. При построении структурной формулы молекулы серной кислоты у атомов водорода возможны разные варианты объединения с кислородом или серой. Энергии диссоциации  $\text{OO}$  равна 5,1 эВ,  $\text{HH}$  – 4,48 эВ,  $\text{OH}$  – 4,4 эВ,  $\text{SO}$  – 5,3 эВ. Так как энергия связи водорода с серой энергетически наиболее выгодна, то атомы водорода связываются с серой. Атому кислорода в молекуле воды энергетически выгоднее образовать связь с атомом кислорода серного ангидрида, чем оставлять менее выгодную связь с атомом водорода.

В сернистой кислоте атом водорода связан с атомом кислорода, а не с атомом серы, поскольку энергия связи  $\text{HO}$  больше энергии связи  $\text{HS}$ . В этой молекуле каждому из атомов кислорода выгоднее иметь связь с атомом серы, а не связь между собой, поскольку энергия связи  $\text{OS}$  больше энергии связи  $\text{OO}$ . В сернистой кислоте атом кислорода молекулы воды связан с атомом кислорода молекулы сернистого ангидрида. Атом кислорода у ангидрида серы связывается кольцевой связью с кислородом молекулы воды, образуя в растворе сернистую кислоту  $\text{H}_2\text{SO}_3$ . Без воды эта молекула распадается на  $\text{SO}_2$  и  $\text{H}_2\text{O}$ , так как энергетически менее выгодная связь  $\text{OH}$  в  $\text{H}_2\text{SO}_3$  рвётся с дальним от серы атомом кислорода. Этот атом кислорода соединяется с другим атомом кислорода, образуя  $\text{SO}_2$  и приобретая энергетически более выгодную энергию связи  $\text{OO}$ . Для отделившегося от кислорода атома водорода энергия связи не изменя-

ется, так как он, образуя молекулу воды, связывается с атомом кислорода  $\text{OH}$ . В целом энергия связи отдельных молекул  $\text{SO}_3$  и  $\text{H}_2\text{O}$  больше, чем энергия связи молекулы  $\text{H}_2\text{SO}_3$ . Энергия связи кислоты  $\text{H}_2\text{SO}_3$  в водном растворе за счёт связи с молекулами воды больше, чем её энергия связи в чистом виде, поэтому сернистая кислота существует только в растворе. Отличие структурной формулы молекулы серной кислоты от формулы молекулы сернистой кислоты в том, что атомы водорода связаны не только с атомами кислорода, но и с атомом серы.

В молекуле серной кислоты у атома кислорода, связанного своими двумя вакансиями с двумя о-электронами атома серы, два о-электрона связаны с двумя вакансиями другого атома кислорода. Эти два атома кислорода связаны между собой и с атомом серы двумя простыми связями. Эти две простые связи соответствуют меньшей энергии связи, чем одна кольцевая связь. Слабосвязанный атом кислорода легко отрывается от молекулы кислоты, соединяясь с атомами водорода и углерода органических соединений, он образует воду, углекислый газ и свободный углерод (идёт обугливание). Также эти, связанные два атома кислорода в молекуле кислоты, образуют связи с молекулами воды, что придаёт серной кислоте способность поглощать влагу из воздуха. При разбавлении серной кислоты водой выделяется энергия, потому что образуется молекула  $\text{H}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (см. рисунок 4), а не простое смешение молекул серной кислоты и воды. В ряде реакций связь атомов водорода с атомом серы в молекуле серной кислоты приводит к выделению сероводорода.

Из окислов азота наиболее устойчивыми являются два окисла:  $\text{N}_2\text{O}$  и  $\text{NO}_2$ . Остальные окислы на воздухе переходят в  $\text{NO}_2$ .

Структурная формула молекулы  $\text{N}_2\text{O}$  должна отвечать максимальной энергии связи, этому условию отвечает вариант структурной формулы, показанный на рисунке 4.

В молекуле  $\text{NO}_2$  энергия связи между атомами кислорода больше, чем между кислородом и азотом. Поэтому атом азота не может находиться между атомами кислорода, что соответствует структурной формуле, показанной на рисунке 4.

Азотистая кислота  $\text{HNO}_2$  существует только в растворе. Энергия диссоциации у  $\text{HO}$

(4,4 эВ) больше, чем у  $\text{HN}$  (3,6 эВ). По этой причине атом водорода в молекуле этой кислоты связан с атомом кислорода и не связан с атомом азота, как в молекуле азотной кислоты. Простая связь электрона атома водорода приводит к непрочности молекулы  $\text{HNO}_2$  и лёгкому выделению из двух молекул  $\text{HNO}_2$  молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  и молекулы  $\text{N}_2\text{O}_3$ .

В молекуле  $\text{HNO}_3$  энергия связи атома водорода с атомом азота больше энергии связи атома водорода с атомом кислорода, поэтому атом водорода связан с атомом азота, а не кислорода (см. рисунок 4). В этой молекуле три атома кислорода связаны между собой, как у озона. Это ослабляет связь между ними и придаёт молекуле азотной кислоты окислительное свойство. По этой же причине у азотной кислоты нет осушающего действия как у серной кислоты.

#### 10. Полиморфизм

Если число атомов в соединении больше двух, то разница в свойствах может объясняться различным соединением атомов, но для двух атомов полиморфизм теория валентности не объясняет. Теория, основанная на

статической модели атома, позволяет с помощью пазлов (лучше объёмных) составить разные варианты молекул и объяснить разницу в их свойствах. Покажем это на примере молекулы хлорида йода  $\text{ICl}$ .

Составленные с помощью плоских пазлов атомов два вида молекулы  $\text{ICl}$  показаны на рисунках 5а и 5б. Более наглядно эти два вида показаны с помощью объёмных пазлов на рисунках 5в и 5д (объёмные пазлы атомов йода и хлора показаны на рисунке 5г). На объёмных пазлах центр атома обозначен квадратом, а вакансии – кольцом.

Один вид молекулы  $\text{ICl}$  представлен тёмно-красными иглами. Это соединение плавится при  $27^\circ\text{C}$  и разлагается при  $97^\circ\text{C}$ , не образуя молекул. Второй вид соединения  $\text{ICl}$  плавится при  $19^\circ\text{C}$  и кипит, переходя в молекулярное состояние, при  $97^\circ\text{C}$ . Оно имеет красно-коричневый цвет кристаллов и ромбическую кристаллическую решётку. Первое соединение имеет две простые связи, а второе – одну кольцевую, чем и обусловлена разница физических свойств и прочность соединений.

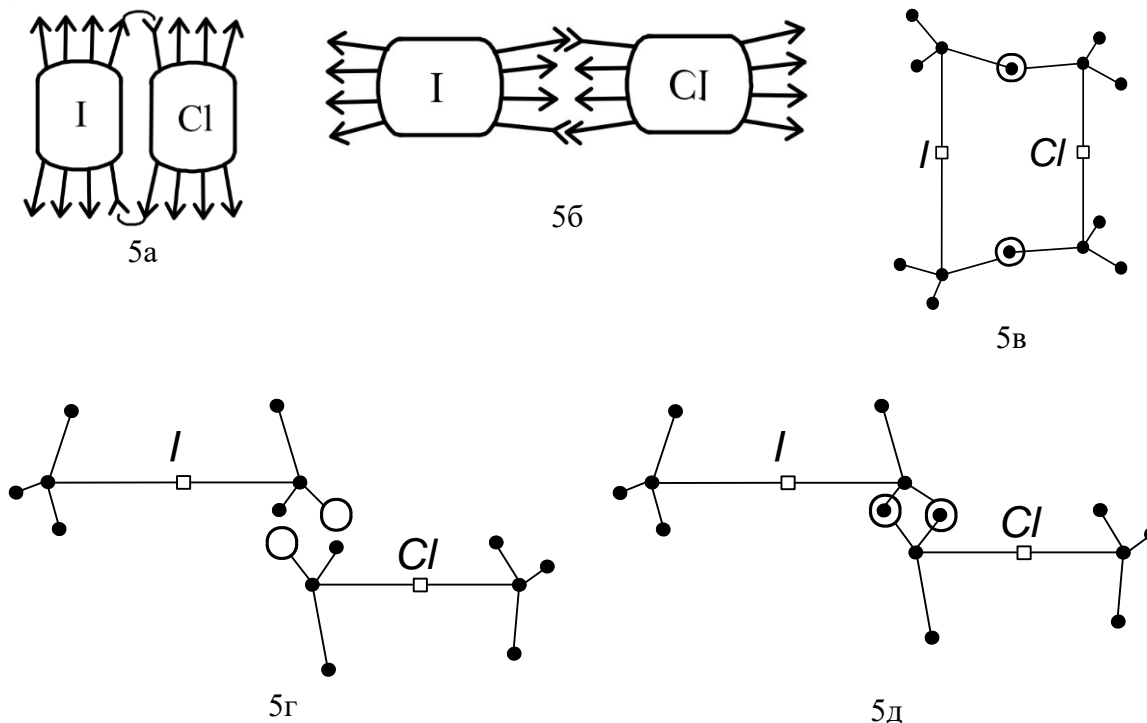


Рис. 5. Плоские и объёмные пазлы

#### 11. Каталитический синтез аммиака

Энергия диссоциации молекулы водорода равна 4,48 эВ, молекулы азота – 9,76 эВ. Энергия диссоциации молекулы  $\text{NH}$  составля-

ет 3,6 эВ. На одну связь электрон-вакансия этой молекулы приходится 1,8 эВ. Энергия связи молекулы  $\text{NH}_3$  равна трём связям молекулы  $\text{NH}$ , то есть около 10,8 эВ ( $3,6 \cdot 3$ ). Состав

молекулы азота и состав трёх молекул водорода соответствует составу двух молекул аммиака. Энергия связи двух молекул аммиака равна 21,6 (10,8•2) эВ. Энергия связи молекулы азота и трёх молекул водорода равна 23,2 (13,44 + 9,76) эВ. Для образования одной молекулы аммиака из молекул водорода и азота требуется затратить 0,8 ((23,2 – 21,6)/2) эВ. Поскольку энергия связи у отдельных газов больше, чем у молекул аммиака, то прямая реакция синтеза аммиака невозможна. Она возможна только с использованием катализатора. В качестве катализатора требуется вещество, которое бы давало нестойкое соединение с одним атомом водорода или азота. Нестойкое соединение азота трудно получить из-за прочности его азота, поэтому трудно получить атомарный азот путём диссоциации.

Если используется атомарный водород, идёт реакция образования аммиака из водорода и азота с выделением энергии 1,04 эВ (энергия связи молекулы азота 9,76 эВ, а энергия связи молекулы аммиака 10,8 эВ).

Для получения атомарного водорода используются металлы, вступающие с ним в реакцию. Например, гидрид палладия Pd<sub>2</sub>H, который вступает в реакцию с водородом при температуре выше 500 °С и давлении в сотни атмосфер. При этом возникает динамическое равновесие между распадом и синтезом неустойчивого гидрида палладия Pd<sub>2</sub>H, зависящее от давления и температуры. В качестве катализатора подходят железо и кобальт, так как они также образуют соединения FeH и CoH, при распаде которых выделяется атомарный водород. Гидрид никеля NiH<sub>2</sub> в качестве катализатора не выгоден, так как при его разложении выделяется не атомарный, а молекулярный водород.

### Заключение

В предложенной статической модели атомов все виды атомных, молекулярных и межмолекулярных сил представлены электрической и магнитной силами притяжения и отталкивания между электронами и ядрами. При составлении структурных формул молекул атомы могут быть представлены в виде объёмных или плоских пазлов.

Причинно-следственные связи при использовании пазлов и энергетических характеристик атомов и межатомных соединений для

составления структуры молекул являются общими для всех видов молекул и не требуют индивидуального подхода, как это приходится делать в некоторых случаях в теории валентности. Полученные на основе пазлов структурные формулы молекул позволяют прогнозировать свойства этих соединений и определять пути и условия возможности их синтеза.

Возможность образования составляемых из пазлов молекул и прочность их связей оцениваются по энергетическим характеристикам исходных веществ и синтезируемых из них молекул. В данное время величина сродства к электрону определяется различными методами, и погрешность может превышать 100%. Расчёт сродства электрона атома водорода на основе статической модели атома соответствует поведению водорода в составе молекул и показывает некорректность справочной величины. Энергия связи внешних электронов известными методами рассчитана лишь для электрона атома водорода. На основе статической модели возможен расчёт энергии связи конкретного электрона, как в атоме, так и в молекуле.

С целью определения числа электронов и вакансий во внешнем электронном слое атома и построения соответствующего ему пазла, представлен и используется групповой вид Периодической таблицы.

Построенные на основе пазлов структурные формулы соединений серы и азота с кислородом, а также серной и азотной кислот позволили объяснить свойства этих веществ корректнее, чем объяснения на основе валентности. Структурные формулы на основе пазлов можно представить в упрощённом виде, подобно структурным формулам, построенным на основе валентности. В структурных формулах на основе валентности ряду элементов соответствует различное число связей в соединениях. Например, азот может иметь в различных соединениях от одной до пяти положительных валентных связей и тройную отрицательную связь. Неопределённость валентности может приводить к ошибочному виду структурной формулы, например, к ошибочной формуле азотной кислоты, где водород связан с кислородом, а не с азотом. В отличие от валентности у пазлов элементов группы «а» число вакансий и внешних элек-

тронов остаётся неизменным во всех соединениях.

На примере синтеза аммиака показано, что при выборе катализатора следует руководствоваться энергетическими характеристика-

ми исходных веществ и создаваемого вещества.

Предложенные в работе правила составления молекул могут быть распространены на комплексные соединения и двойные соли.

#### Библиографический список

1. Дюпин В.К., Колесников А.А., Угрюмова И.Д. Модели элементарных частиц, атомов и молекул // Международный журнал гуманитарных и естественных наук. – 2024. – № 2-3 (89). – С. 7-17.
2. Гороновский И.Т., Назаренко Ю.П., Некряч Е.Ф. Краткий справочник по химии. Пятое издание, исправленное и дополненное / Под общей редакцией академика АН УССР А.Т. Пилипенко. – Киев: Наукова Думка, 1986.
3. Яворский Б.М., Детлаф А.А. Справочник по физике. – М.: Наука, 1995.
4. Таблицы физических величин. Справочник // Под ред. акад. И.К. Кикоина. – М.: Атомиздат, 1976.

### STATIC MODEL OF ATOM IN THE THEORY OF CHEMICAL BONDING

**V.K. Dyupin<sup>1</sup>**, *Candidate of Technical Sciences*

**A.A. Kolesnikov<sup>1</sup>**, *Candidate of Technical Sciences*

**I.D. Ugryumova<sup>2</sup>**, *Graduate Student*

<sup>1</sup>CONSULT-M LLC

<sup>2</sup>Tomsk Polytechnic University

<sup>1</sup>(Russia, Moscow)

<sup>2</sup>(Russia, Tomsk)

**Abstract.** *Based on the photon model of elementary particles, a formula is proposed that relates the mass of a particle to its size, two types of energy, and magnetic moment, for which the DuK-constant is proposed and determined. The radii of the proton, electron, and muon are calculated using the proposed formula. The adequacy of the model is confirmed by the correspondence between the calculated and experimental data.*

*Based on the "Law of Conservation of Energy" it is shown that the "Law of Conservation of Mass of Reacting Substances" should be replaced by the "Law of Change in Mass of Reacting Substances".*

*Static models of atoms are proposed based on the electric and magnetic forces of mutual attraction and repulsion of the nucleus and electrons. Unlike the quantum-mechanical model of atoms, in the static model of atoms, electrons occupy a certain position relative to the nucleus and each other. Electrons in an atom are arranged in layers. When molecules are formed, the outer electrons of one atom occupy electron vacancies in the layer of another atom. This is the fundamental difference between the proposed theory and the valence theory, which is based on the pairing of outer electrons. Atoms are presented as puzzles used to create structural formulas of substances.*

*An example of the action of a catalyst based on the energy characteristics of compounds is considered.*

**Keywords:** *photon, elementary particles, electron, proton, magnetic moment, particle size, atomic puzzle, electron vacancy of an atom, substance, molecule, catalyst.*