УДК 544.11

ТЕРМИНОЛОГИЯ И СИМВОЛИКА АТОМНО-МОЛЕКУЛЯРНОГО УЧЕНИЯ

Стась Н. Ф.

Федеральное государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», Томск, Россия (634050, г. Томск, пр. Ленина, 30), e-mail: stanif@mail.ru

В статье обсуждается проблема терминологии и символики в химии в связи с процессами глобализации, присоединением России к Болонской декларации, использованием в образовании тестовых систем обучения и контроля. Проведен анализ терминов, символов и определений (атом, молекула, формульная единица, эквивалент, химическая реакция и др.), которые являются содержанием атомно-молекулярного учения и стехиометрии. Показана тавтология классического определения атома и необходимость использования определения, основанного на его свойствах и составе. Показана необходимость сохранения классического определения молекулы как частицы, которая является носителем химических свойств вещества, и разделения понятий формулы и формульной единицы. Рассмотрено понятие моля вещества с точки зрения его использования в химических текстах. Предлагается последовательная система формулировок и символов, относящихся к эквивалентам химических элементов и химических соединений. Предложено считать свойством неорганического соединения его стехиометрическую валентность, равную эквивалентному числу в конкретной реакции.

Ключевые слова: атом, молекула, моль, эквивалент, валентность.

TERMINOLOGY AND SYMBOLISM OF THE ATOMIC THEORY

Stas N. F.

Federal State Educational Institution of the Highest Vocational Education "National Research Tomsk Polytechnic University", Tomsk, Russia (634050, Tomsk, Lenin ave., 30) , e-mail: stanif@mail.ru

The problem of terminology and symbolism in chemistry in connection with globalization processes, adoption in Russia the Bolognian declaration, use of test systems in education for study and check is discussed in the paper. The analysis of terms, symbols and definitions (atom, molecule, formula unit, equivalent, chemical reaction and other), which are the content of atomic theory and stoichiometry is carried out. The tautology of the classical definition of atom and the need of using the definition, based on atom characteristics and structure, are shown. The need of keeping to the classical definition of molecule as a particle, which is a carrier of substance chemical properties and separation of formula and formula unit definitions are shown. The mole of substance definition is discussed in the context of its use in the chemical texts. The sequential system of statements and symbols related to the equivalents of chemical elements and chemical compounds is proposed. Stoichiometric valence of an inorganic substance, equal to the equivalent number in a certain reaction is proposed to consider the property of the substance.

Keywords: atom, molekule, mole, equivalent, valence.

Введение

В литературе по химии наблюдается расхождение по терминологии и символике, которое нежелательно в связи с процессами глобализации, присоединения России к Болонской декларации, использования в образовании взаимопризнаваемых методов контроля. Причин расхождения много: изменение содержания многих понятий в современной химии по сравнению с классическими представлениями, отношение многих химиков к этому вопросу как второстепенному и т.д. Но система понятий, определений и терминов – это язык науки. Химия – сложная наука, и её язык сложен, поэтому овладение языком химии – это первый этап изучения самой химии.

1. Атом, молекула, моль

Изучение химии начинается с атомно-молекулярного учения, и ключевое понятие этой темы – **атом.** В учебной литературе встречается определение атома, которое относится к тому времени в истории развития химии, когда были тождественны понятия химический элемент и простое вещество: атом – наименьшая часть химического элемента, способная к самостоятельному существованию и являющаяся носителем его химических свойств. Но сейчас мы знаем другое: химический элемент – это вид атома с определенным зарядом ядра, следовательно, классическое определение атома является тавтологией.

Самый распространенный способ определения какого-либо понятия заключается в том, что его рассматривают как часть более широкого понятия, акцентируя внимание на его специфических признаках. С этих позиций атом – это частица, из которой состоят все металлы и некоторые неметаллы, а также молекулы всех простых и сложных веществ. Бывают и такие определения объектов, когда за основу берутся их свойства. С этих позиций атомы – это мельчайшие частицы вещества, которые химическим путем невозможно разделить на составные части, превратить друг в друга или уничтожить. Но можно дать определение объекта, исходя из его строения. При таком подходе атом – это электронейтральная частица, состоящая из положительно заряженного ядра и электронной оболочки. Таким образом, имеется несколько определений атома, и студентов надо знакомить со всеми определениями, побуждая их к критическому анализу каждого.

Второе важнейшее понятие этой темы – **молекула**. Большинство химиков ориентируется на классическое определение: молекула – это наименьшая частица данного вещества, обладающая его химическими свойствами. В химической энциклопедии приводится развернутое определение этого понятия, в котором акцент сделан на состав и строение молекул: «Молекула – микрочастица, образованная из двух или большего числа атомов и способная к самостоятельному существованию. Имеет постоянный состав (качественный и количественный) входящих в неё атомных ядер и фиксированное число электронов. Обладает совокупностью свойств, позволяющих отличать одну молекулу от других» [5].

Но предлагается иное определение: «Молекула – это способная к самостоятельному существованию, нейтральная по заряду наименьшая совокупность атомов, связанных вследствие химического взаимодействия в определенном порядке (то есть обладающая определенной структурой), не имеющая, как правило, неспаренных электронов» [2].

Различие этих определений в том, что в первом молекула считается носителем химических свойств вещества, а во втором – нет. Соответствующая выдержка из работы [2]: «В формулировке понятия молекулы не следует указывать такой признак, как свойства, поскольку они зависят от внешних условий, растворителя, агрегатного состояния…».

Действительно, свойства веществ в различных агрегатных состояниях, а также в растворе различаются. Например, раствор аммиака и соляной кислоты имеют иные свойства, чем газообразный аммиак и хлороводород. Но в водных растворах находятся, строго говоря, другие вещества: это гидраты молекул (раствор аммиака) или гидратированные ионы (раствор хлороводорода). Целесообразно знакомить студентов с обоими определениями, побуждая их к выработке собственного мнения.

Молекулярное строение имеют не все вещества, поэтому существуют понятия структурная единица вещества и формульная единица вещества. **Структурная единица** – это атом, молекула, ион, радикал и т.д. Например, структурной единицей метана является молекула, кремния – атом, аргона – одноатомные молекулы. Структурными элементами ионных соединений являются катионы и анионы, например, структурными единицами хлорида натрия являются ионы Na^+ и Cl^-. **Формульными единицами** называются химические формулы ионных соединений: NaCl, K_2SO_4, $K_3[Fe(CN)_6]$ – это формульные единицы соединений.

Термин **моль** – это и полное название единицы измерения количества вещества, и её сокращенное обозначение; в других единицах измерения такого не бывает. Поэтому слово моль при написании после числа и в заголовках таблиц не склоняется, но при чтении текста его следует склонять, иначе нарушаются правила грамматики. Рассмотрим два примера.

Пример 1. Написано: в химической реакции 500 г NaOH взаимодействует с 1 кг H_2SO_4. Читается: в химической реакции пятьсот граммов гидроксида натрия взаимодействует с одним килограммом серной кислоты.

Пример 2. Написано: в реакции 2 моль KOH взаимодействует с 3 моль HNO_3. Читается: в химической реакции два моля гидроксида калия взаимодействует с тремя молями азотной кислоты.

Считается, что в термине количество вещества обязательно должно быть слово вещество [2]. При соблюдении этого требования читаем: в реакции участвовало количество вещества аммиака 5 моль. Но из единицы измерения ясно, что имеется в виду количество, а если указан аммиак, то он является веществом. Поэтому лучше: в реакции участвовало 5 моль аммиака. Можно возразить, что термин количество применяется не только в химии, но шире, например, количество тепла, электричества и т.д. Но в химии это – количество вещества.

Понятие моль распространяется на любые формульные и структурные единицы: n(Fe) – количество атомов железа, $n(H_2O)$ – количество молекул воды, n(NaCl) – количество формульных единиц хлорида натрия, $n(Ag^+)$ – количество катионов серебра, n(OH) – количество радикалов OH, $n(e^-)$ – количество электронов. В текстах формульная или структурная единица указана в символе и разночтений не бывает. В устной речи молекулы и формульные единицы указывать не нужно, а все остальные структурные единицы следует указывать. Напри-

мер, если имеют в виду молекулярный водород (кислород, азот и др.), то говорят: количество водорода (кислорода, азота), полагая, что студенты знают о том, что естественное состояние водорода, азота, кислорода – это двухатомные молекулы.

2. Химические реакции

Рассмотрим терминологию, относящуюся к химическим реакциям. Прежде всего, следует различать понятия: схема реакции и уравнение реакции. В **схеме реакции** нет стехиометрических коэффициентов, и между левой и правой частью ставится стрелка. В **уравнении реакции** указаны стехиометрические коэффициенты, и между левой и правой частью ставится знак равенства, который свидетельствует о возможности проведения стехиометрических расчётов. В школьных учебниках по химии стрелки проставляются не только в схемах, но и в уравнениях реакций. Это неправильно. Стрелка вместо знака равенства пишется только в тех случаях, когда над ней указываются особые условия проведения реакции: $\xrightarrow{\text{электролиз}}$, $\xrightarrow{\text{катализатор}}$ и т.д. В уравнениях обратимых реакций ставятся две стрелки, направленные в противоположные стороны, и соответствующий символ: ⇆. Другие символы (↔, ⇔, ↔) использовать не следует, поскольку они недостаточно однозначны.

Вещества левой части уравнений реакций часто называются исходными (начальными), а правой – конечными. Мы предлагаем термины **реагенты** и **продукты**. Относительно химических реакций пишут, что они идут, протекают. В буквальном смысле реакции не идут, но мы считаем, что эти термины можно использовать: **реакция идёт, реакция протекает**.

При характеристике свойств веществ говорят, что они реагируют: кислоты реагируют с основаниями, но не реагируют друг с другом. Но реагируют на что-то, а не с чем-то, поэтому мы рекомендуем применять термин **взаимодействуют**.

3. Эквивалент и закон эквивалентов

В заключение рассмотрим понятие **эквивалент**. Прилагательное эквивалентный означает равноценный, а существительное эквивалент означает: равноценный данному предмету или количеству. В классической химии эквивалентом химического элемента называется его масса, которая эквивалентна одному грамму водорода, то есть соединяется с одним граммом или замещает один грамм водорода. Это определение согласуется с классическим понятием химического элемента как простого вещества. Но сейчас химическим элементом называется вид атома с определенным значением заряда ядра. Поэтому надо ориентироваться на современный подход к этому понятию, который используется в учебной литературе [1, 3, 4]. Но имеются расхождения, которые начинаются с определения самого понятия эквивалент.

1. Эквивалент – это реальная или условная частица, соответствующая одному иону водорода в кислотно-основных или ионообменных реакциях или одному электрону в окислительно-восстановительных реакциях [1].

2. Эквиваленты – условные частицы вещества, в z_B раз меньшие, чем соответствующие им формульные единицы [3].

Целесообразно использовать первое определение. Второе определение хуже первого потому, что в нем содержится символ z_B, смысл которого в определении не приводится. Далее разъясняется, что z_B – это эквивалентное число, которое равно или больше единицы. Если вместо символа в определение ввести его название, то получается тавтология: *эквиваленты* – условные частицы вещества, в *эквивалентное* число раз меньшие, чем соответствующие им формульные единицы. Кроме этого, по второму определению эквивалент относится только к веществу, состав которого выражен формульной единицей. Но эквивалент является характеристикой не только всех веществ (включая вещества молекулярного строения), но и химических элементов. Наконец, если эквивалентное число равно единице, что часто бывает, то эквивалентом является не условная, а реальная частица, например, эквивалентом водорода – его атом, а эквивалентом азотной кислоты (в основно-кислотных реакциях) – её молекула.

В работе [4] последовательно проводится мысль о том, что значение эквивалентного числа z_B определяется только по химической реакции, в которой участвует данное вещество. Эквиваленты кислот нельзя определять по их основности, оснований – по кислотности, а солей и оксидов по суммарному заряду катионов. Например, в первой реакции, приведенной ниже, эквивалентное число серной кислоты равно 2, а во второй реакции – единице:

$$1)\ H_2SO_4 + 2KOH = K_2SO_4 + 2H_2O$$

$$2)\ H_2SO_4 + KOH = KHSO_4 + 2H_2O$$

Эквивалентное число сульфата алюминия в третьей реакции равно шести, а в четвёртой – двенадцати (!):

$$3)\ Al_2(SO_4)_3 + 6KOH = 2Al(OH)_3 + 3K_2SO_4$$

$$4)\ Al_2(SO_4)_3 + 12KOH = 2K_3[Al(OH)_6] + 3K_2SO_4$$

Автор второго определения [3, 4] считает эквивалентное число ключевой характеристикой соединения и фактор эквивалентности не употребляет. Но автор первого определения [1], наоборот, ключевой характеристикой вещества считает фактор эквивалентности, а эквивалентное число он использует только для окислительно-восстановительных реакций, где оно равно числу электронов, присоединённых одной молекулой окислителя или отданных одной молекулой восстановителя. Разный способ вычисления эквивалентной массы вещества в основно-кислотных реакциях (молекулярная масса умножается на фактор эквивалентности) и в окислительно-восстановительных процессах (молекулярная масса делится на эквивалентное число) неоправданно усложняет усвоение этого понятия химии.

Символика по данному вопросу в химии не однозначна. Эквивалент как реальная или условная частица обозначается символом **Э** [1]. Приводим цитату из первоисточника [1], вы-

делив в ней два ключевых термина: «Эквивалент (Э) – это реальная или условная *частица*, соответствующая одному иону водорода в кислотно-основных или ионообменных реакциях или одному электрону в окислительно-восстановительных реакциях Эквивалент – безразмерная *величина*, состав которой выражается с помощью химических формул и символов. При определении эквивалента вещества необходимо исходить из конкретной реакции, в которой участвует данное вещество. Так, из уравнения реакции

$$H_2SO_4 + 2KOH = K_2SO_4 + 2H_2O$$

следует, что одному иону водорода соответствует одна молекула KOH, одна молекула H_2O, $^1/_2$ молекулы H_2SO_4 и $^1/_2$ молекулы K_2SO_4, поэтому Э(KOH) = KOH, Э(H_2O) = H_2O, Э(H_2SO_4) = $^1/_2H_2SO_4$, Э(K_2SO_4) = $^1/_2K_2SO_4$.

Эквивалент воды в окислительно-восстановительной реакции

$$O_2 + 4H^+ + 4e = 2H_2O$$

отличается от эквивалента, определенного выше. В данном примере одному электрону соответствует $^1/_2$ молекула воды, то есть Э(H_2O) = $^1/_2H_2O$. Одному электрону эквивалентна $^1/_4$ молекулы кислорода, следовательно, Э(O_2) = $^1/_4O_2$».

Из приведенной цитаты видно, что авторы от понятия эквивалента как реальной или условной частицы переходят к устаревшему понятию эквивалента как величины. Этот переход произошёл, вероятно, по ошибке, поэтому его не следует принимать во внимание. Но использование символа **Э** для краткого обозначения эквивалента мы считаем правильным.

Масса одного моля эквивалента называется **молярной массой эквивалента** вещества и обозначается в учебниках близкими, но неодинаковыми символами $M_э$ или $M_{эк}$; единица измерения этой величины также различается: г/моль или г/моль эк. Понятие **относительной эквивалентной массы** в учебной литературе отсутствует.

Мы предлагаем последовательный и не противоречивый подход к этому элементу содержания химии, используем его в учебном процессе и предлагаем на обсуждение всем преподавателям этой дисциплины.

1. Формулировка понятия «эквивалент» должна быть такой, как её рекомендует ИЮПАК: эквивалент – это реальная или условная частица, взаимодействующая с одним атомом или ионом водорода в кислотно-основных и ионообменных реакциях или с одним электроном в окислительно-восстановительных реакциях. При этом под реальными частицами понимаются атомы, молекулы или формульные единицы, а под условными – их части.

2. Эквивалент обозначается символом **Э**, его эквивалентная масса (относительная масса, выраженная в атомных единицах массы – а.е.м.) – символом $\mathbf{Э_г}$, а его молярная масса (молярная масса эквивалента) – $\mathbf{M_{эк}}$. Эта символика «параллельна» той, что относится к атомам ($A_г$ и M) и к молекулам ($M_г$ и M). Подстрочный индекс **эк** в символе $M_{эк}$ лучше, чем ин-

декс **э**, так как на букву **э** начинаются, кроме слова эквивалент, такие химические термины как элемент, энтальпия, энтропия, электроотрицательность и др. Единица измерения молярной массы эквивалента – **г/моль эк**.

3. Число, показывающее, во сколько раз эквивалент меньше реальной частицы, называется **эквивалентным числом**, обозначается символом **z** и входит в формулы, по которым вычисляются эквивалентные массы и молярные массы эквивалентов.

4. Фактор эквивалентности – величина, обратная эквивалентному числу, но его употребление как дробной величины неудобно, поэтому от его использования надо отказаться.

5. Для химического элемента эквивалентное число равно валентности элемента в данном соединении. Поэтому эквивалентное число и валентность обозначаются одним и тем же символом **z**, и эквивалентная масса химического элемента вычисляется по формуле:

$$Э_г = \frac{A_г}{z},$$

в которой z – валентность элемента в данном соединении, равная его эквивалентному числу.

6. Для химического соединения эквивалентное число зависит от реакции, в которой оно участвует. Эту зависимость можно объяснять на конкретных примерах. Например, в реакции

$$Al_2(SO_4)_3 + 6KOH = 2Al(OH)_3 + 3K_2SO_4$$

эквивалентное число сульфата алюминия равно 6, так как одна формульная единица этого соединения взаимодействует с шестью формульными единицами гидроксида калия, эквивалентное число которого равно единице. На вопрос о том, почему эквивалентное число гидроксида калия равно единице, ответ простой: в формульной единице этого вещества содержится один ион OH^-, который может соединяться только с одним катионом водорода.

Зависимость эквивалентного числа вещества от реакции, в которой это вещество участвует, можно также объяснять по-другому: по закону эквивалентов (см. ниже п.п. 8 и 9).

7. Значение эквивалентной массы или молярной массы эквивалента вещества записывается без отрыва от уравнения реакции, в которой это вещество участвует, например:

$H_2SO_4 + 2KOH = K_2SO_4 + 2H_2O$; $Э_г(H_2SO_4) = 49$; $M_{эк}(H_2SO_4) = 49$ г/моль

$H_2SO_4 + KOH = KHSO_4 + H_2O$; $Э_г(H_2SO_4) = 98$; $M_{эк}(H_2SO_4) = 98$ г/моль

$Al_2(SO_4)_3 + 6KOH = 2Al(OH)_3 + 3K_2SO_4$; $Э_г(Al_2(SO_4)_3) = 57$; $M_{эк}(Al_2(SO_4)_3) = 57$ г/моль

8. Правильная формулировка закона эквивалентов такова: в химических реакциях участвует равное число и количество эквивалентов взаимодействующих веществ, или короче: числа и количества эквивалентов взаимодействующих без остатка веществ одинаковы [5]. Формулировка закона эквивалентов, которая обычно приводится в химической учебной литературе (массы взаимодействующих без остатка веществ пропорциональны их эквивалентным массам), является следствием закона эквивалентов.

9. Закон эквивалентов в правильной формулировке позволяет определять эквивалентные числа в тех случаях, когда они не очевидны. Например, необходимо определить эквивалентные числа сульфата алюминия и карбоната натрия в реакции их совместного гидролиза:

$$Al_2(SO_4)_3 + 3K_2CO_3 + 3H_2O = 2Al(OH)_3 + 3K_2SO_4 + 3CO_2$$

Рассуждаем так. Эквивалентное число воды равно 2, в реакции участвуют три молекулы, следовательно, 6 эквивалентов H_2O. Числа эквивалентов K_2CO_3 и $Al_2(SO_4)_3$ должны быть такими же (закон эквивалентов), следовательно, эквивалентное число карбоната калия равно двум, а сульфата алюминия – шести.

10. Мы считаем, что эквивалентное число сложного вещества или иона является его стехиометрической валентностью. Действительно, можно говорить о том, что NaOH является одновалентным соединением, серная кислота одно- или двухвалентным соединением (в основно-кислотных реакциях), а валентность сульфата алюминия в рассмотренных выше примерах равна 6 и 12. Таким образом, стехиометрическая валентность является свойством не только химических элементов, но и взаимодействующих веществ.

11. В школьной химии желательно изучение валентности. Валентность должна рассматриваться как главное свойство элемента, а его степень окисления – как число, равное стехиометрической валентности, но отличающееся наличием знака.

Список литературы

1. Задачи и упражнения по общей химии: учебное пособие. / Под ред. Н.В. Коровина. – М.: Высшая школа. – 2003. – 255 с.

2. Крестов Г. А., Березин Б. Д. Основные понятия современной химии. – Л.: Химия, 1986. – 104 с.

3. Стёпин Б. Д. Применение международной системы единиц физических величин в химии: Практическое пособие. – М.: Высшая школа. – 1990. – 96 с.

4. Стёпин Б. Д., Цветков А. А. Неорганическая химия: Учебник для химических и химико-технологических специальностей вузов. – М.: Высшая школа. – 1994. – 608 с.

5. Химическая энциклопедия: В 5 т. / Гл. ред. И. Л. Кнунянц и Н. С. Зефиров. – М: Советская энциклопедия, 1988–1998. – 4555 с.

Рецензенты:

Саркисов Юрий Сергеевич, д.т.н., профессор, заведующий кафедрой химии ГОУ ВПО «Томский государственный архитектурно-строительный университет», г. Томск.

Лотов Василий Агафонович, д.т.н., профессор кафедры силикатов и наноматериалов ГОУ ВПО «Научно-исследовательский Томский политехнический университет», г. Томск.

Полещук О. Х., д.х.н., профессор, зав. кафедрой органической химии, Томский государственный педагогический университет Министерства науки и образования, г. Томск.