



УДК 378.147

**А.С. Тихонов**

Учреждение образования «Белорусский государственный педагогический университет имени Максима Танка», г. Минск

## ПОНЯТИЯ «СТЕХИОМЕТРИЧЕСКИЙ КОЭФФИЦИЕНТ», «СТЕХИОМЕТРИЧЕСКИЕ И НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ»

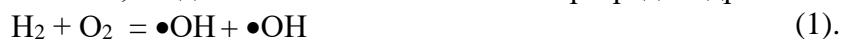
В публикациях [1, 2] обосновывалась необходимость более обстоятельного изложения в перспективных школьных учебниках химии раздела «Стехиометрия». Для этого предлагалось внести в новую учебную программу по химии для старших классов учреждений, обеспечивающих получение среднего образования, следующие вопросы:

- стехиометрия (в современной формулировке);
- количественная информация, содержащаяся в уравнении химической реакции;
- обоснование стехиометрических расчётов с использованием основного закона стехиометрии.

Изложение этих вопросов базируется на понятии о стехиометрическом коэффициенте в уравнении химической реакции. Рассмотрим его на примере практически важной и поэтому детально изученной реакции водорода с кислородом.

Это разветвлённая цепная реакция, в ходе которой на начальной стадии образуются радикалы  $\bullet\text{H}$ ,  $\bullet\text{OH}$ ,  $\bullet\text{O}$  (точки около символов обозначают неспаренные электроны). Образовавшиеся радикалы атакуют молекулы водорода и кислорода с образованием молекул воды и ещё некоторого числа радикалов, которых, таким образом, становится всё больше и больше. С течением времени скорость реакции нарастает лавинообразно, и, если реакцию не регулировать, происходит взрыв.

Приведём механизм этой реакции для случая, когда инициаторами цепи выступают гидроксильные радикалы  $\text{OH}$ . Они образуются, например, из исходных молекул водорода и кислорода при нагревании смеси этих газов, воздействии высокочастотного разряда и др.:

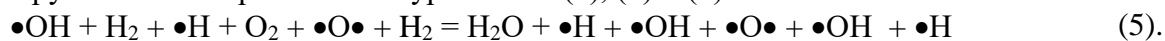


Далее идут реакции разветвления цепи:



Аналогичные реакции происходят и в тех случаях, когда первичными радикалами являются атомы водорода  $\bullet\text{H}$  или бирадикалы с двумя неспаренными электронами  $\bullet\text{O}\bullet$ .

Суммируем левые и правые части уравнений (2), (3) и (4):



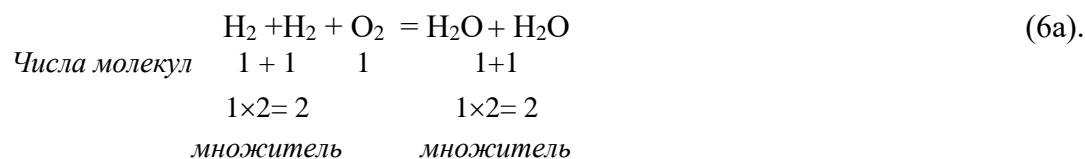
В уравнении (5) исключаем в левой и правой его частях одноименные члены. С учётом того, что радикалы  $\bullet\text{OH}$  и  $\bullet\text{H}$  при взаимодействии образуют молекулы воды, получаем суммарное уравнение реакции водорода с кислородом:



Цифры, стоящие в уравнении этой реакции перед формулами водорода, кислорода и воды, называют коэффициентами.

Коэффициент (от латинского *co-* совместно и *efficiencie-* производящий) – множитель, обычно выражаемый цифрами [3, с. 641]. Согласно математическому энциклопедическому словарю [4, с. 299], «коэффициент – это числовой множитель при буквенном выражении».

Для пояснения используемого в химии понятия о коэффициенте запишем суммарное уравнение реакции (6) в виде:



При таком формальном рассмотрении коэффициенты в левой части уравнения (6) – это 2 для одного реагента и 1 для другого. Иными словами, две молекулы  $\text{H}_2$  и одна молекула  $\text{O}_2$  совместно производят химическое превращение в две молекулы  $\text{H}_2\text{O}$ . В данном случае уравнение (6) читается так: 2 молекулы водорода реагируют с 1 молекулой кислорода, образуя 2 молекулы воды.

Это минимально возможная порция реагентов – микропорция. Принимается [5], что в микропорциях насчитывается от нескольких до  $10^{16}$  молекул. Например, микропорция воды, состоящая из такого числа молекул, имеет массу  $10^{-6}$  граммов или 1 микрограмм. Близкую по значению величины массу имеют мельчайшие капельки воды, образующие во множестве туман.

Теперь представим, что в уравнении (6) минимально возможные числа молекул водорода и кислорода увеличили в 10, 100, 1000 ....  $6,02 \cdot 10^{23}$  раз. Очевидно, что умножение коэффициентов в обеих его частях на одно и то же число не приведёт к нарушению равенства. В таком случае получится, что  $2 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}$  молекул  $\text{H}_2$  прореагируют с  $1 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}$  молекулами  $\text{O}_2$  и при этом образуется  $2 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}$  молекул  $\text{H}_2\text{O}$ . Порции веществ с такими астрономически большими числами молекул (порядка  $10^{23}$ ) относят к макропорциям.

Химики характеризуют размер порций веществ не только их массой или объёмом, но и числом составляющих макропорции атомов, молекул, формульных единиц. Для этого они используют величину, называемую химическим количеством вещества ( $n_B$ ):

$$n_B = \frac{N_B}{N_A},$$

где В – молекула (атом) вещества,  $N_B$  – число молекул (атомов) в порции вещества,  $N_A$  – постоянная Авогадро.

Найдём по этой формуле химические количества молекул водорода, кислорода и воды:

$$\begin{aligned}
 n(\text{H}_2) &= \frac{2 \times 6,02 \cdot 10^{23} \text{ молекул}}{6,02 \cdot 10^{23} \text{ молекул / моль}} = 2,00 \text{ моль}, \\
 n(\text{O}_2) &= \frac{1 \times 6,02 \cdot 10^{23} \text{ молекул}}{6,02 \cdot 10^{23} \text{ молекул / моль}} = 1,00 \text{ моль}, \\
 n(\text{H}_2\text{O}) &= \frac{2 \times 6,02 \cdot 10^{23} \text{ молекул}}{6,02 \cdot 10^{23} \text{ молекул / моль}} = 2,00 \text{ моль}.
 \end{aligned}$$

Отсюда следует, что соотношение коэффициентов в уравнении (6) есть в то же время и соотношение химических количеств молекул реагентов и молекул продукта реакции в молях (мольные соотношения):

$$n(\text{H}_2) : n(\text{O}_2) : n(\text{H}_2\text{O}) = 2 : 1 : 2.$$

Для макропорции воды уравнение (6) читают: 2 моль молекул водорода реагируют с 1 моль молекул кислорода, образуя 2 моль молекул воды.

Рассматривать уравнение химической реакции для микропорции вещества нужно для того, чтобы обосновать числовые соотношения для немногих молекул, а затем распространить эти же соотношения на макропорции.

Обратим внимание на то, что молекулы  $\text{H}_2$  и  $\text{O}_2$ , содержащиеся как в микро-, так и макропорции, взаимодействуют между собой только в строго определённом числовом соотношении - два к одному:



$$\frac{N(H_2)}{N(O_2)} = \frac{2 \text{ молекулы}}{1 \text{ молекула}} = \frac{2}{1};$$

*микрорпропорция*

$$\frac{n(H_2)}{n(O_2)} = \frac{2 \text{ моль}}{1 \text{ моль}} = \frac{2}{1}.$$

*макрорпропорция*

Подобные числовые соотношения называют стехиометрическими.

Коэффициенты в уравнениях реакций, в которых соблюдаются целочисленные соотношения между молекулами реагентов и продуктов, называют стехиометрическими. Продукты таких реакций с молекулярной структурой – это стехиометрические соединения.

В молекулах воды числовое соотношение атомов Н и атомов О выражено целыми числами. Эти числа, указывающие на количественный состав атомов в воде и подобных ей молекулярных соединениях, называют стехиометрическими индексами. Отметим, что индекс 1 в формулах веществ, как и коэффициент 1 в уравнениях реакций, не пишется, но подразумевается. Индекс ставят справа внизу у символа атома элемента или же групп атомов, например  $H_3PO_4$ ,  $Fe_2(SO_4)_3$  и др.

Произведение стехиометрических коэффициентов перед формулами веществ на стехиометрические индексы у атомов в левой части уравнения химической реакции должно быть равно аналогичному произведению в правой его части. Это условие соблюдения закона сохранения атомов в химических реакциях, который базируется на законе сохранения массы веществ.

Для немолекулярных кристаллических соединений – оксидов, сульфидов, селенидов, теллуридов и других бинарных соединений типа металл-неметалл соотношения между числами атомов, образующих формульные единицы этих веществ, не целые, а дробные. Например, оксид титана (II) существует при изменении состава от  $TiO_{0,65}$  до  $TiO_{1,25}$ , а сульфид железа (II) от  $Fe_{0,8}S$  до  $FeS_{1,1}$  [6, с. 111]. При изменении состава оксидов в указанных диапазонах тип кристаллической решётки остаётся тем же самым. Целочисленные соотношения представляют лишь предельный, частный случай. Химические соединения, в формулах которых индексы выражены дробными числами, называют нестехиометрическими. К таким соединениям относят и сверхпроводники.

Явление нестехиометричности всегда сопровождается нарушением периодичности кристаллической решётки и возникновением дефектов. С ними связаны практически важные свойства нестехиометрических кристаллов – прочностные, электрофизические, оптические и др. Свойства нестехиометрических кристаллов, обусловленные их дефектностью, широко используют в различных областях науки и техники.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тихонов, А.С. Стехиометрия в химических реакциях / А.С. Тихонов Новое в методике преподавания химических и экологических дисциплин: Сб. научн. ст. / УО «Брестск. гос. ун-т им. А.С. Пушкина», УО «Брестск. гос. техн. ун-т»; Редкол.: Н.М. Голуб [и др.]. – Брест, 2010. – С. 195–199.
2. Тихонов, А.С. Концептуальные аспекты изложения темы «Химические реакции» в школьном курсе химии / А.С. Тихонов // Актуальные проблемы химического образования в средней и высшей школе: сборник научных статей / редкол.: А.П. Солодков (гл. ред.) [и др.]. – Витебск: ВГУ имени П.М. Машерова, 2013. – с. 115–117.
3. Коэффициент // Советский энциклопедический словарь / Гл. ред. А.М. Прохоров. – 4-е изд. – М.: Советская энциклопедия, 1988. – 1632 с.
4. Коэффициент // Математический энциклопедический словарь / Гл. ред. Ю.В. Прохоров. – М.: Советская энциклопедия, 1988. – 847 с.
5. Гузей, Л.С. Как устроено химическое вещество: учебное пособие для изучения химии в общеобразовательной школе / Л.С. Гузей – М.: Мирос, КД «Университет», 1997. – 55 с.
6. Коровин, Н.В. Общая химия : учеб. для технических направ. и спец. вузов. / Н.В. Коровин. – М.: Высшая школа, 1998. – 558 с.