

Лекция 1

Введение. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ ХИМИИ

Еремин Вадим Владимирович,

Химический факультет, комн. 273

(495) 939-12-86

vadim@educ.chem.msu.ru

Структура курса

Всего – 15 лекций

Основные понятия и законы химии – 4 лекции

Неорганическая химия – 7 лекций

Органическая химия – 4 лекции

Форма аттестации – экзамен

Литература

- Еремин В.В., Борщевский А.Я. Общая и физическая химия. – Интеллект, 2012.
- Кузьменко Н.Е., Еремин В.В., Попков В.А. Начала химии. – М.: Лаборатория знаний, 2016, 2017.
- Глинка Н.Л. Общая химия. – М.: Интеграл-Пресс, 2004, 2006.
- Ахметов Н.С. Общая и неорганическая химия. – М.: Высшая школа, 2005.
- Грандберг И.И. Органическая химия. – М.: Дрофа, 2004.

Все материалы курса на сайте

<http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/fizfak/welcome.html>

www.chem.msu.ru

Химический факультет

Электронная библиотека
учебных материалов

Химия для физиков

Физики, 1 курс. Весна 2017

Наука

Современная наука – способ познания реального мира, включающего в себя как ощущаемую органами чувств человека реальность, так и реальность невидимую, способ познания, **основанный на построении проверяемых моделей этой реальности.**

(Уильям Хетчер)

Физика

изучает **наиболее общие**
свойства и **законы** движения
объектов материального мира

Химия

изучает **вещества**, их строение,
свойства и превращения

Масштабы химии и физики

	Время, с	Расстояние, м	Энергия, эВ
Химия	$10^{-14} - 10^{13}$ (27 порядков)	$10^{-11} - 10^2$ (13 порядков)	$10^{-3} - 10^1$
Физика	$10^{-35} - 10^{18}$ (> 50 порядков)	$10^{-18} - 10^{26}$ (> 40 порядков)	до 10^{20}

В основе химического мышления – атомно-молекулярная картина мира

chemistry: art, science, fun

2007 15-24

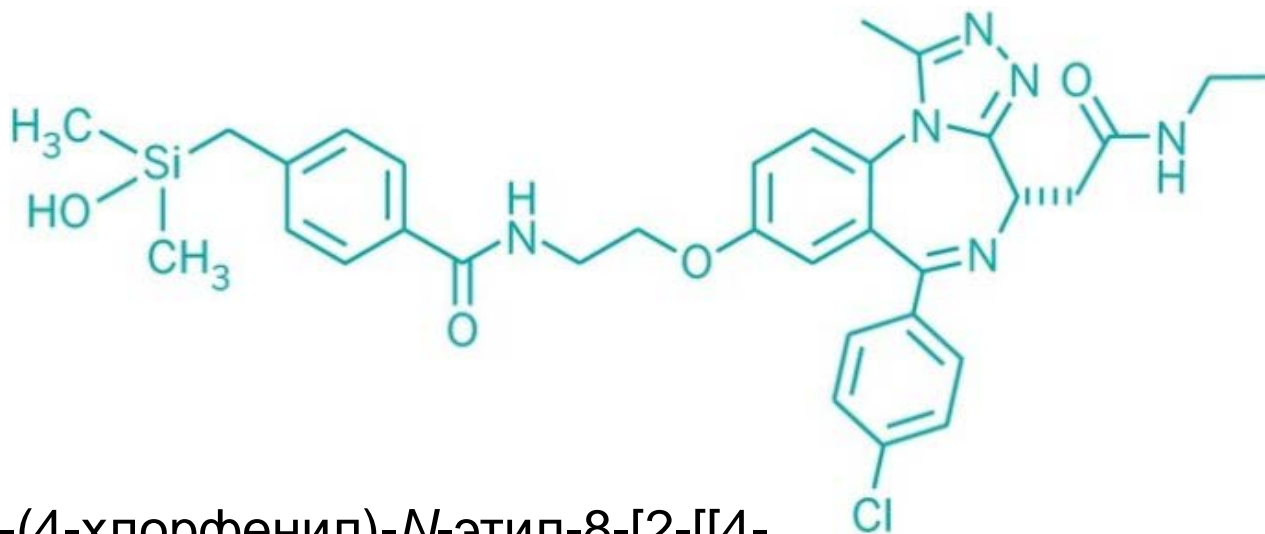
Moscow State University

INFO@ICHO39.CHEM.MSU.RU WWW.ICHO39.CHEM.MSU.RU

Основные понятия химии. 1. Вещества

Вещества (> 120 млн.)

29 июня 2015 года в базе данных CAS было зарегистрировано 100-миллионное вещество – терапевтическое средство от лейкемии:



(4S)-6-(4-хлорфенил)-*N*-этил-8-[2-[[4-
[(гидроксидиметилсилил)метил]бензоил]амино]этоксиг]-1-метил-
4*H*-[1,2,4]триазоло[4,3- α][1,4]бензодиазепин-4-ацетамид

Что надо знать о веществах?

1. **Формула** (из чего состоит)
2. **Структура** (как устроено)
3. **Физические** свойства
4. **Химические** свойства
5. Способы **получения**
(лаб. и промышл.)
6. Практическое **применение**

Основные понятия химии.

2. Химические реакции

Химическая реакция (>80 млн.)

Что надо знать о химической реакции?

- 1. Условия проведения** – температура, давление, агрегатное состояние веществ, растворитель, катализатор.
- 2. Кинетические и термодинамические функции** – энергия активации, теплота, энтропия и энергия Гиббса, константа равновесия
- 3. Механизм реакции** – последовательность разрыва и образования химических связей

Источники информации в химии

Chemical Abstracts Service – www.cas.org







– ровно год назад






– сегодня в 15.45

Пример записи в SciFinder

<http://www.cas.org/products/scifinder>

SUBSTANCE DETAIL   **Get References**  **Get Reactions**  **Get Commercial Sources**

CAS Registry Number 58-08-2

~32,932  ~207  

$C_8H_{10}N_4O_2$

1,4-Purine-2,6-dione, 3,7-dihydro-1,3,7-trimethyl-

Molecular Weight
194.19

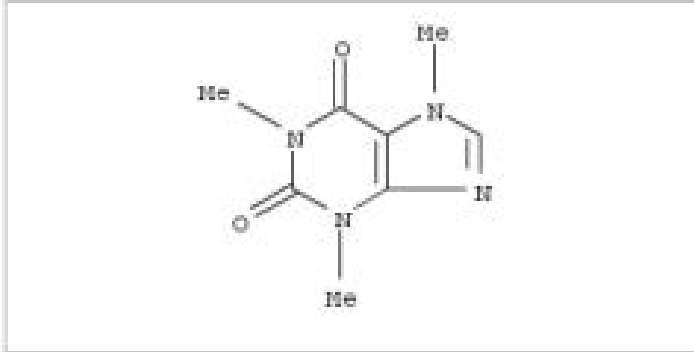
pKa (Predicted)
Value: 0.52 ± 0.70 | Condition: Most Basic Temp: 25 °C

Melting Point (Experimental)
Value: 238 °C

Boiling Point (Predicted)
Value: 416.8 ± 37.0 °C | Condition: Press: 760 Torr

Density (Experimental)
Value: 1.23 g/cm³ | Condition: Temp: 18 °C

Other Names
Caffeine (BCI)
1,3,7-Trimethyl-2,6-dioxopurine
1,3,7-Trimethylxanthine
3,7-Dihydro-1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6-dione
7-Methyltheophylline
[View more...](#)



Основные вопросы химии

- Как устроены вещества?
- Как связано строение веществ с их свойствами?
Корреляция структура-свойство
- Какие надо создать условия, чтобы реакция шла **в нужном направлении**?
- Как получить заданное вещество из доступных веществ с максимально возможным выходом?
- Как создать вещество с заданной структурой и нужными свойствами? **Молекулярный дизайн**

Особенности химии как науки

- Отсутствие собственных законов
- Многообразии объектов
- Создание собственного предмета для изучения – большинство из 120 млн. веществ не существует в природе

**Никто не сделал так много для
улучшения условий жизни людей, как
ХИМИКИ.**

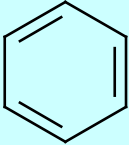
Г. Крото, Нобелевский лауреат по химии 1996 г.

**Основная задача химии – создание
веществ с полезными свойствами**

Основные теории химии

- **Квантовая химия**
(квантовая механика в применении к атомам, молекулам и твердым телам)
- Химическая **термодинамика**
- Химическая **кинетика**
- **Структурная** теория + стереохимия

Язык химии

- **Химические формулы** отражают состав и (или) строение молекул
 - а) молекулярные – C_6H_6
 - б) эмпирические (брутто) – CH
 - в) структурные – 
- **Названия** веществ
- **Уравнения** и схемы реакций

Элементный анализ

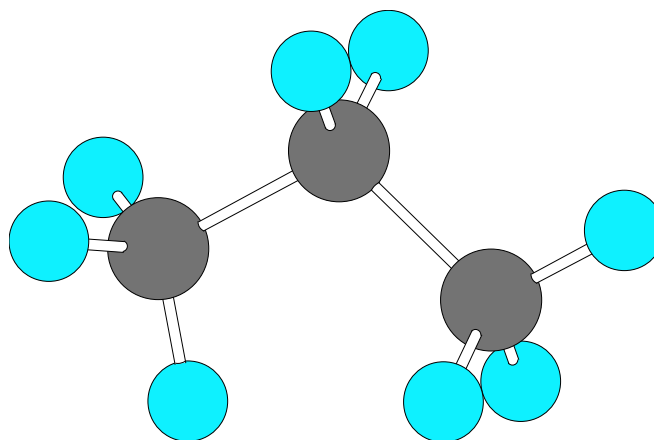
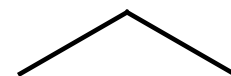
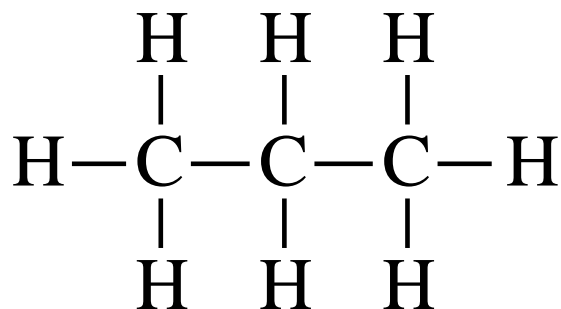
По массовым долям элементов можно определить брутто-формулу



$$\begin{aligned} x : y : z &= n(A) : n(B) : n(C) = \\ &= \frac{m(A)}{M(A)} : \frac{m(B)}{M(B)} : \frac{m(C)}{M(C)} = \frac{\omega\%(A)}{M(A)} : \frac{\omega\%(B)}{M(B)} : \frac{\omega\%(C)}{M(C)} \end{aligned}$$

Органические структуры

1) Сокращенные структурные формулы



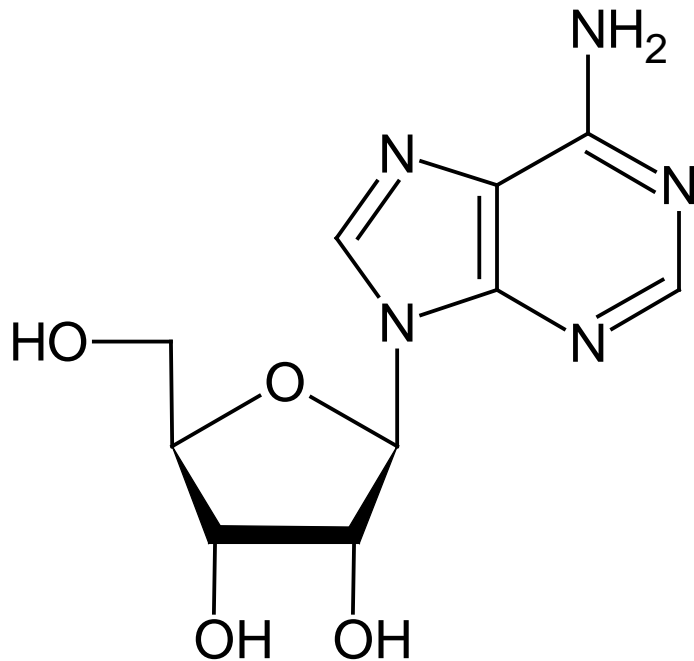
Органические структуры

2) Сокращения для наиболее распространенных групп атомов

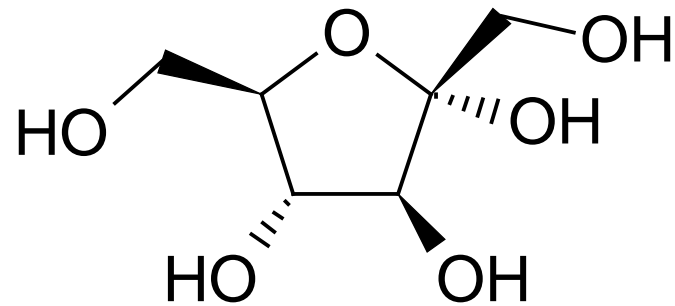
Группа	Формула	Обозначение
Метил	CH_3	Me
Этил	C_2H_5	Et
Фенил	C_6H_5	Ph

Органические структуры

3) Трёхмерные структуры – линии разной толщины и клиновидные связи:



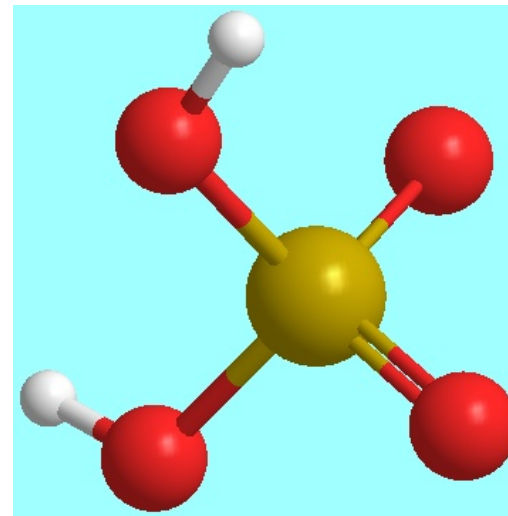
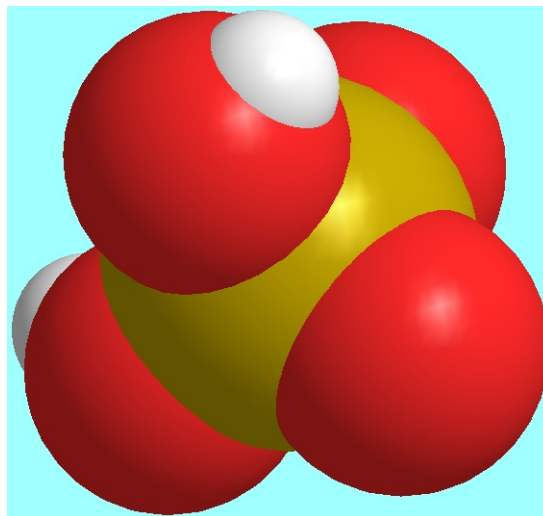
Аденозин



Фруктоза

Молекулярные модели

Серная кислота H_2SO_4



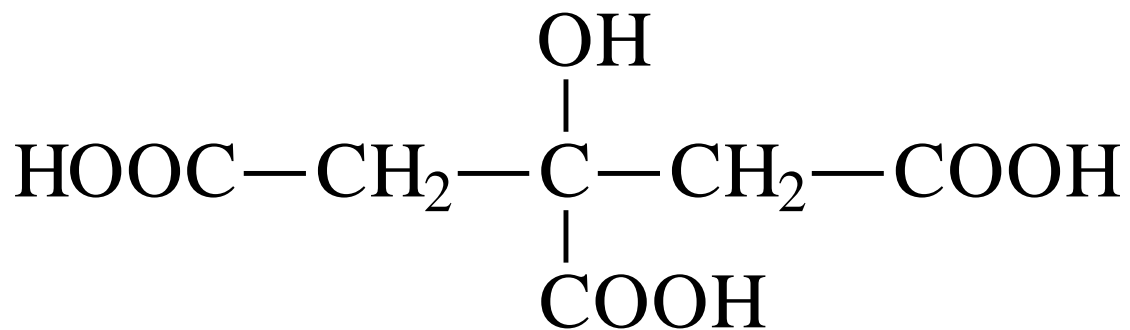
Структурная
формула

Объемная
модель

Шаростержневая
модель

Названия

По номенклатуре – длинные,
предпочитают использовать тривиальные



2-Гидроксипропан-1,2,3-трикарбоновая кислота
(лимонная кислота)

Вещества

Вещество – любая совокупность атомов, молекул, ионов

- **Индивидуальные** (чистые)
- **Смеси**
- **Простые**
- **Сложные** (химические соединения)
 - а) постоянного состава – CO_2
 - б) переменного состава – TiO_x (широкая область гомогенности, $x = 0.65-1.25$)

Вещества

Молекулярного
строения

Состоят из молекул

H_2O , CO_2 , HNO_3 , C_{60} ,
почти все орг. вещества

Формула отражает
состав молекулы

Немолекулярного
строения

Состоят из атомов
или ионов

Алмаз, графит, SiO_2 ,
металлы, соли

Формула отражает состав
формульной единицы

Количество вещества

1 моль – 6.0221×10^{23} частиц

$N_A = 6.0221 \times 10^{23}$ моль⁻¹ – постоянная Авогадро

$$n = \frac{F}{F_m}$$

F – любое экстенсивное свойство

$$n = \frac{m}{M} = \frac{V}{V_m} = \frac{N}{N_A} = \frac{Q}{F}$$

Молярные величины

$$M = \frac{m}{n}$$

– **молярная масса. $[M] = \text{г/моль}$**

Численно равна массе молекулы в а.е.м.

$M(\text{CO}_2) = 44 \text{ г/моль}$, $m(\text{молек. CO}_2) = 44 \text{ а.е.м.}$

$$V_m = \frac{M}{\rho}$$

– **молярный объем. $[V_m] = \text{л/моль}$**

Для твердых веществ и жидкостей – практически постоянный.

Для газов – зависит от T и P : $V_m = RT / P$

$$F = eN_A = 96500 \text{ Кл/моль}$$

– **постоянная Фарадея.**

Равна заряду одного моля электронов

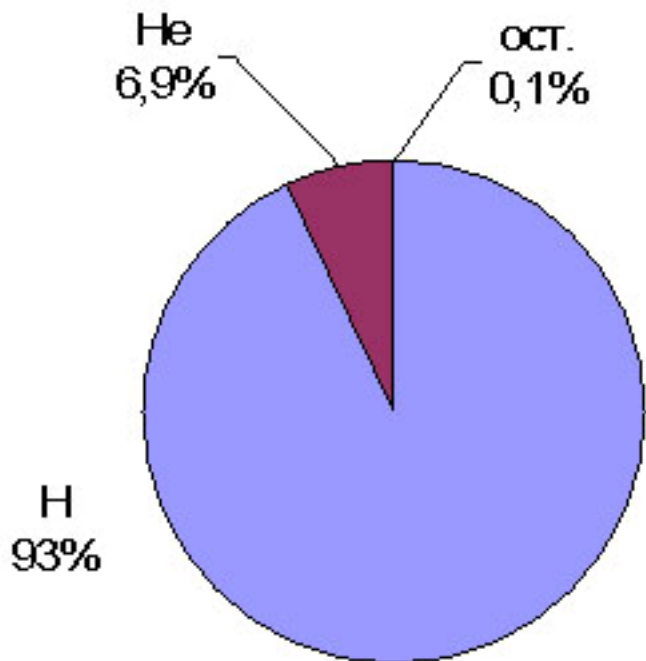
Смеси.

Способы выражения состава

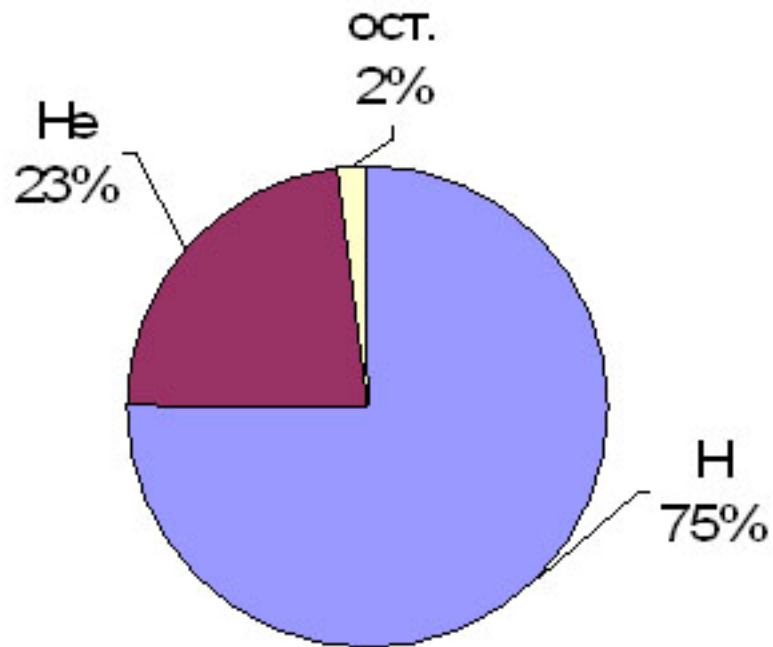
Массовая доля (массовая концентрация)	$\omega_i = \frac{m_i}{\sum_i m_i}$	Безразмерна
Мольная доля	$x_i = \frac{n_i}{\sum_i n_i}$	Безразмерна
Молярная концентрация	$C_i = \frac{n_i}{V}$	Моль/л (М)

Химический элемент

Вид атомов с одинаковым зарядом ядра



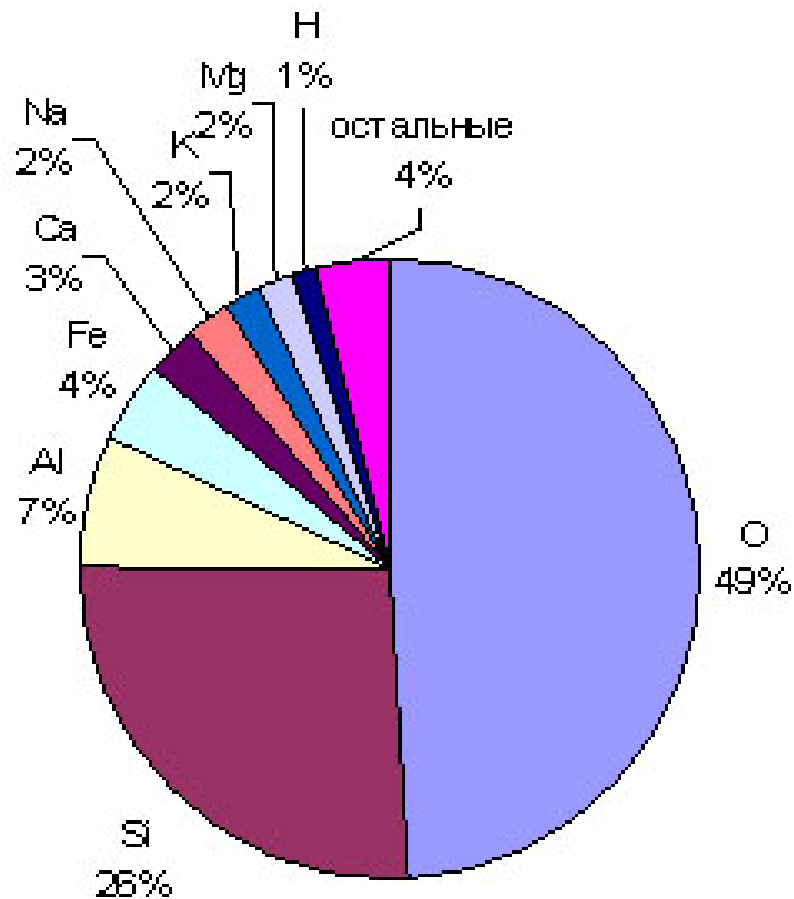
Состав Вселенной (ат.%)



Состав Вселенной (масс. %)

Состав земной коры

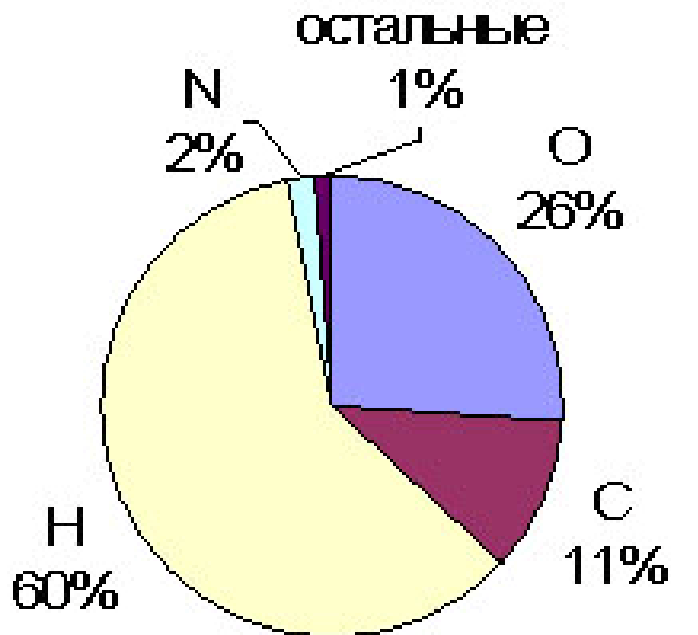
O – 49%
Si – 26%
Al – 7%
Fe – 4%



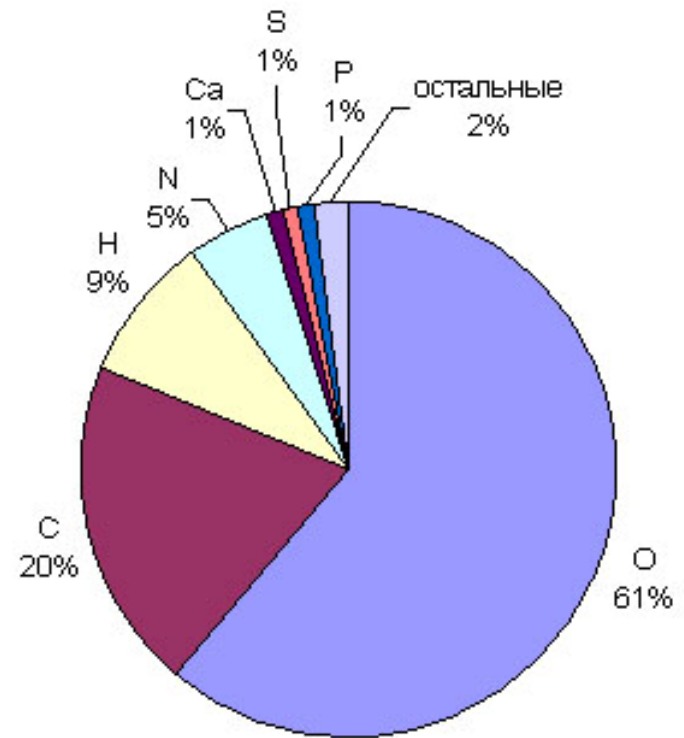
Состав земной коры (мас. %)

Состав организма

$C + H + O + N > 99 \text{ ат.}\%$



Состав организма (ат. %)



Состав организма (мас. %)

Фрагмент периодической таблицы

Group 1 Группа		Group 2 Группа	
Ia		IIa	
Период 1	1 1.00794 H 1s ¹ -259.14 -252.87 2.02/- Hydrogen Водород <i>Hydrogenium</i>		
Период 2	3 6.941 Li [He]2s ¹ 180.54 1347 0.98/0.97 Lithium Литий	4 9.012182 Be 2s ² 1278 2970 1.57/1.47 Beryllium Бериллий	
Период 3	11 22.989770 Na [Ne]3s ¹ 97.86 883.15 0.93/1.01 Sodium Натрий <i>(Natrium)</i>	12 24.3050 Mg 3s ² 648.8 1107 1.31/1.23 Magnesium Магний	
Период 4	19 39.0983 K [Ar]4s ¹ 63.65 774 0.82/0.91 Potassium Калий <i>(Kalium)</i>	20 40.078 Ca 4s ² 839 1487 1.00/1.04 Calcium Кальций	

Современная периодическая таблица

Атомная масса, относительная

186.207

Атомный номер. Обозначение

75Re

Распределение электронов

[Xe] 4f¹⁴5d⁵6s²

Температура плавления (°C)

3180

Температура кипения (°C)

5627

Электроотрицательность

1.9/1.46

(по Полингу/по Аллреду и Рохову)

Rhenium

Рений

Rhenium

Название

Латинское название

3	4	5	6	7
IIIB	IVB	VB	VIB	VIIb
44.955910 21Sc 3d ¹ 4s ² 1541 2831 1.36/1.20 Scandium Скандий	47.867 22Ti 3d ² 4s ² 1670 3287 1.54/1.32 Titanium Титан	50.9415 23V 3d ³ 4s ² 1890 3380 1.63/14.5 Vanadium Ванадий	51.9961 24Cr 3d ⁵ 4s ¹ 1857 2672 1.66/1.56 Chromium Хром	54.938046 25Mn 3d ⁵ 4s ² 1244 1962 1.55/1.60 Manganese Марганец <i>Manganum</i>

Атомная масса элемента

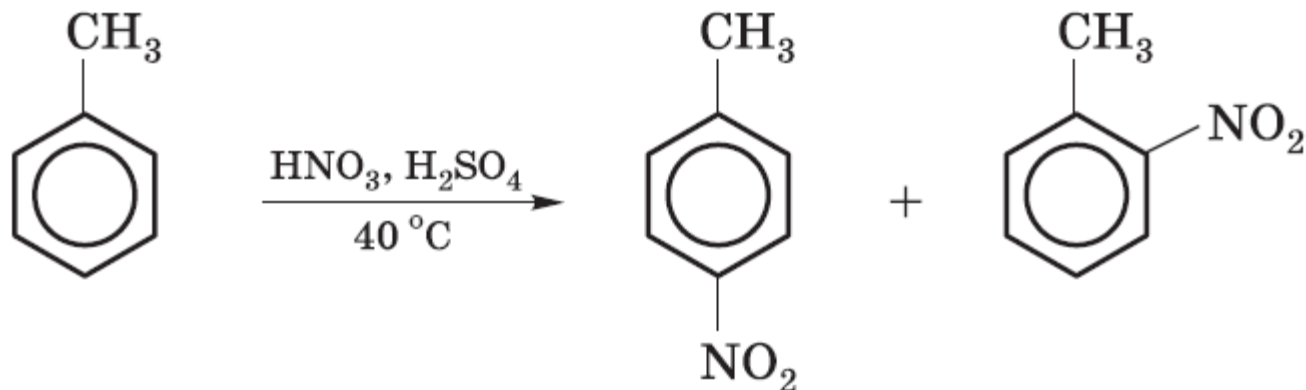
Рассчитывается с учетом распространенности изотопов элемента в земной коре

$$A(\text{Cl}) = \chi(^{35}\text{Cl})A(^{35}\text{Cl}) + \chi(^{37}\text{Cl})A(^{37}\text{Cl}) = \\ = 0.7578 \cdot 34.969 + 0.2422 \cdot 36.966 = 35.453 \text{ а.е.м.}$$

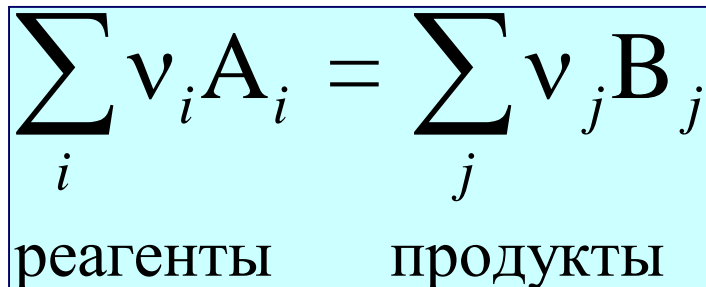
Язык химии. 2.

Схемы и уравнения реакций

Схема

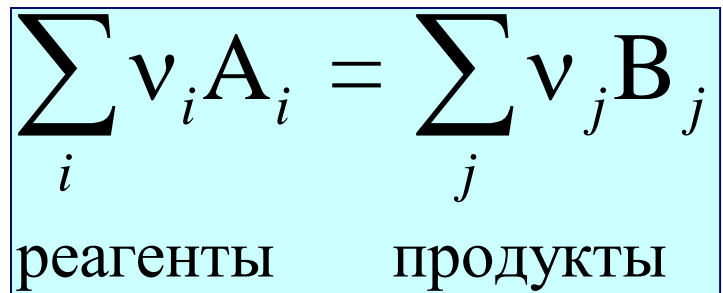


Уравнение



ν_i, ν_j – стехиометрические коэффициенты

Химическая переменная



пропорция

$$\frac{n(A_i)}{\nu_i} = \frac{n(B_j)}{\nu_j}$$

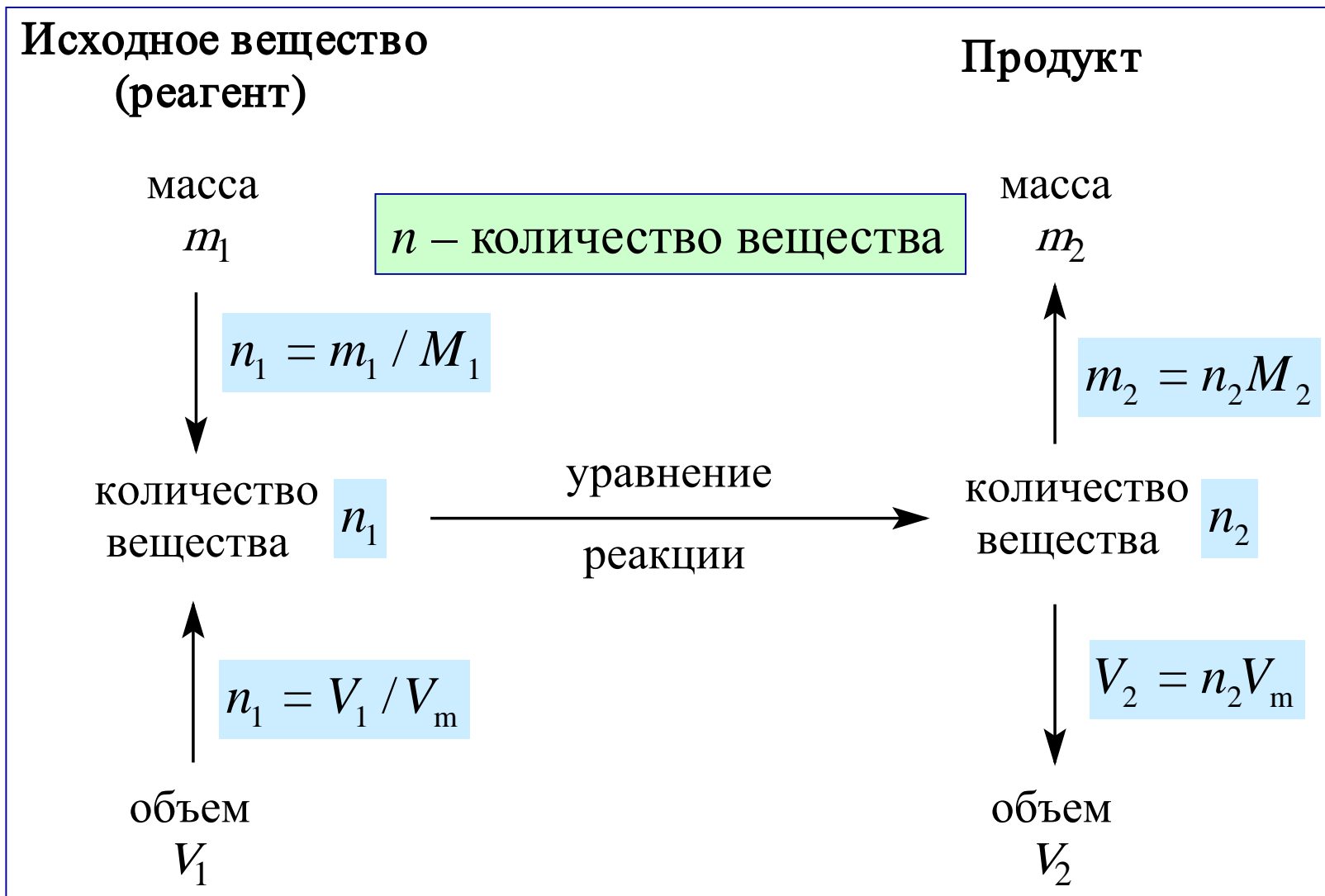
химическая
переменная

$$d\xi = -\frac{dn(A_i)}{\nu_i} = \frac{dn(B_j)}{\nu_j}$$

количества
веществ

Реагенты: $n(A_i) = n_0(A_i) - \nu_i \xi$
Продукты: $n(B_j) = n_0(B_j) + \nu_j \xi$

Расчет по уравнению реакции



Примеры задач на химическую стехиометрию

1. Определите простейшую формулу гексогена: 16.2% С, 2.7% Н, 37.8% N. ($\text{CH}_2\text{N}_2\text{O}_2$)
2. Определите молекулярную формулу гексогена, если при детонации 1 моля образуется 100 л газов (при 163 кПа и 54 °С). ($\text{C}_3\text{H}_6\text{N}_6\text{O}_6$)
3. Определите формулу углеводорода, если при сгорании 10 л этого вещества образовалось 30 л углекислого газа и 40 л паров воды. (C_3H_8)
4. Сколько азотной кислоты можно получить из 1 кубометра воздуха? Сколько для этого потребуется воды? (5 кг HNO_3 , 750 г H_2O)
5. При прокаливании 29 г гидроксида магния выделилось 7,2 г воды. Какая часть гидроксида разложилась? (80%)

Важнейшие формулы

Количество вещества

$$n = \frac{m}{M} = \frac{V}{V_m} = \frac{N}{N_A} = \frac{Q}{F}$$

Определение
брутто-формулы

$$A_x B_y C_z$$
$$x : y : z = \frac{\omega\%(A)}{M(A)} : \frac{\omega\%(B)}{M(B)} : \frac{\omega\%(C)}{M(C)}$$

Расчет по
уравнению
реакции

$$\sum_i \nu_i A_i = \sum_j \nu_j B_j \quad \frac{n(A_i)}{\nu_i} = \frac{n(B_j)}{\nu_j}$$

реагенты продукты

Коротко о главном

- 1. Химия** – наука о веществах, их строении, свойствах и превращениях. Главная **задача** химии – получение веществ с **полезными** свойствами.
2. Основные понятия химии – **вещество** и **реакция**. Вещества описываются химическими **формулами**, реакции – химическими **уравнениями**. Информация обо всех известных веществах и реакциях содержится в химических базах данных.
- 3. Расчеты** по химическим формулам и уравнениями основаны на стехиометрических соотношениях (пропорциях) и использовании понятия «**моль**».
- 4. Вещество** – любая совокупность атомов, молекул или ионов. **Химический элемент** – вид атомов с одинаковым зарядом ядра. Свойства элементов периодически изменяются с увеличением заряда ядра.

Основные понятия

- Наука
- Вещество
- Химическая реакция
- Химический элемент
- Химическая формула
 - простейшая (брутто)
 - молекулярная
 - структурная
- Стехиометрия
- Схема реакции, уравнение реакции
- Стехиометрические коэффициенты
- Химическая переменная
- Моль, молярная масса, молярный объем

Литература

1. Еремин, Борщевский. Основы общей и физической химии. Гл. 1.
2. Кузьменко, Еремин, Попков. Начала химии. Гл. 1.
3. Свойства химических элементов:
www.webelements.com