

ПРОГРАММА

«Теоретические основы химии»

Настоящая программа является частью «Примерной программы дисциплины «Химия» (Теоретические основы химии; неорганическая химия; органическая химия), утвержденной Министерством образования РФ для направления 550800 – Химическая технология и биотехнология.

Составители программы:

Воробьев А.Ф. - академик АН ВШ, профессор Российского химико-технологического университета им. Д.И. Менделеева

Павлов Н.Н. - профессор Московского текстильного института

Ответственный редактор: **А.Ф. Воробьев.**

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Данная программа по дисциплине "Химия" предназначена для подготовки бакалавров технических направлений химико-технологического профиля и ее особенность, состоит в более фундаментальном характере изложения, имеющем целью формирование у студентов целостного естественнонаучного мировоззрения.

Опираясь на полученные в средней школе химические знания, программа предусматривает дальнейшее углубление современных представлений в области химии, без знания основ которой невозможна подготовка бакалавра.

Задачей раздела "Теоретические основы химии" является краткое, но строгое изложение наиболее значимых для химии теоретических понятий и обучение студентов их использованию на обширном материале неорганической химии.

Цель лабораторных занятий - привить студентам навыки экспериментальной работы, показать им методы и средства химического исследования и дать возможность конкретно познакомиться с веществами и их превращениями, развить навыки решения конкретных практических задач и исследовательской работы, а также закрепить в памяти студентов теоретические сведения о закономерностях неорганической химии, почувствовать эти закономерности в практической работе, убедиться в их действительности.

СОДЕРЖАНИЕ ПРОГРАММЫ КУРСА «ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ХИМИИ»

Введение.

Задачи, стоящие перед химической наукой; отличительные особенности изучения химии в вузе. Необходимость творческого отношения к познанию. Основные направления познания химии. Место химии в ряду наук о природе, ее связь с другими естественнонаучными достижениями. Развитие "пограничных" наук. Примеры достижений химии и пограничных с нею наук в последние годы.

Содержание раздела "Теоретические основы химии", его роль и значение. Основы химической термодинамики, основы кинетики, учение о растворах и основы строения вещества, как теоретические основы химии. Достижения в этих направлениях исследования. Роль термодинамических исследований в различных областях науки. Необходимость изучения химии в вузе. Периодический закон и его роль в изучении химии.

Часть 1. Основные понятия химии.

1.1. Международная система единиц физических величин и ее применение в неорганической химии. Основные единицы системы СИ. Масса, объем и плотность вещества, давление, концентрация, энергетические величины.

1.2. Атомно-молекулярное учение. Современная система атомных масс. Изотопы и изобары. Атомная масса и массовое число изотопа. Изотопный состав элемента. Простые и

сложные вещества. Молекулярная масса. Индивидуальные вещества и их смеси. Химическая классификация чистоты веществ.

1.3. Стехиометрия химических реакций. Стехиометрические законы. Стехиометрические уравнения. Моль - единица количества вещества. Эквивалент. Закон эквивалентов. Способы выражения концентрации растворов.

1.4. Современная номенклатура неорганических веществ. Химические элементы. Простые вещества. Ионы; различные классы соединений. Кислоты и их соли, оксиды. Комплексные соединения.

Часть 2. Основы строения вещества

2.1. Строение атома. Понятие о квантовой механике. Квантование энергии электронов в атоме. Двойственная природа электрона. Волновые свойства материальных объектов. Уравнение Де Бройля. Соотношение неопределенностей Гейзенберга. Уравнение Шредингера. Волновая функция. Электронная плотность.

Характеристика состояния электронов системой квантовых чисел, их физический смысл. Спин электрона. Атомные орбитали для s-, p-, d- состояний электронов. Многоэлектронные атомы. Принцип Паули. Максимальное число электронов в электронных слоях и оболочках. Правило Хунда. Последовательность энергетических уровней и подуровней электронов в многоэлектронных атомах. Магнитные и энергетические характеристики атомов. Энергия ионизации, сродство к электрону.

2.2. Периодический закон Д.И. Менделеева и строение атомов элементов. Доменделеевская систематизация элементов. Современная формулировка периодического закона. Структура периодической системы. Периоды, группы подгруппы. Периодическая система и ее связь со строением атомов. Порядковый номер элемента. Заполнение электронных слоев и оболочек атомов. Правило Клечковского. Особенности электронного строения атомов в главных, побочных подгруппах, в семействах лантаноидов, актиноидов: s-, p-, d- и f-элементы. Периодическое изменение свойств элементов (вертикальная, горизонтальная и диагональная периодичности).

Атомные и ионные радиусы, их зависимость от электронного строения и степени окисления. Периодический закон как основа неорганической химии, его философское значение.

2.3. Ковалентная связь. Метод валентных связей. Электроотрицательность. Свойства ковалентной связи; направленность и насыщенность. Полярная ковалентная связь. Механизм образования ковалентной связи (обменный, донорно-акцепторный и дативный).

Характеристика ковалентной связи: длина, прочность, валентные углы. Понятие о нахождении средней энергии связи в сложных молекулах. Эффективные заряды атомов в молекулах. Дипольные моменты и строение молекул.

Кривая потенциальной энергии двухатомной молекулы. Основные положения метода валентных связей. Валентность элемента. Рассмотрение схем перекрывания атомных орбиталей при образовании связей в молекулах. Гибридизация волновых функций; примеры sp-, sp²-, sp³-гибридизаций. Гибридизация с участием d-орбиталей. Заполнение гибридных орбиталей неподеленными парами электронов.

Образование кратных связей. Сигма- и пи-связи, их особенности. Де-локализованные пи-связи.

2.4. Ионная связь. Ионная связь как предельный случай ковалентной связи. Ненаправленность и ненасыщаемость ионной связи. Электростатическое взаимодействие ионов. Кривая потенциальной энергии для ионной молекулы. Понятие о расчете энергии ионной связи. Поляризация ионов. Зависимость поляризации ионов от типа электронной структуры, заряда и радиуса иона. Влияние поляризации ионов на свойства вещества, температуру плавления, термическую устойчивость.

2.5. Основные понятия метода молекулярных орбиталей. Основные положения метода молекулярных орбиталей (МО ЛКАО). Энергетические диаграммы МО. Связывающие, несвязывающие и разрыхляющие орбитали. Последовательность заполнения МО в двухатомных молекулах. Объяснение закономерностей в изменении длин и энергий связи в двухатомных молекулах при помощи метода МО. Влияние спина электронов на магнитные свойства вещества. Объяснение магнитных свойств молекул и ионов с позиций метода МО. Многоцентровая связь. Свободные радикалы.

2.6. Межмолекулярное взаимодействие. Природа межмолекулярных сил. Энергия межмолекулярного взаимодействия. Взаимодействие между полярными и неполярными молекулами: ориентационное индуктивное, дисперсионное (силы ван-дер-Ваальса). Его зависимость от температуры и от расстояния между молекулами. Водородная связь. Межмолекулярная и внутримолекулярная, симметричная и асимметричная водородная связь. Энергия и длина связи. Влияние водородной связи на свойства вещества (температуру плавления, кипения, степень диссоциации в водном растворе и др.).

2.7. Строение вещества в конденсированном состоянии. Твердое, жидкое, газообразное, плазменное состояния; их особенности.

Кристаллическое состояние. Изоморфизм, полиморфизм. Типы кристаллических решеток (атомная, молекулярная, ионная, металлическая). Природа связи между частицами в различных типах кристаллических решеток.

Жидкое и аморфное состояния, их особенности. Понятие о строении жидкой воды. Жидкокристаллическое состояние вещества. Дисперсные системы.

2.8. Нестехиометрические соединения. Кристаллическая решетка и ее дефекты. Дальтониды и бертоллиды. Номенклатура нестехиометрических соединений. Нестехиометрические оксиды, гидриды, карбиды, нитриды, сульфиды. Соединения включения, сложные соединения графита, нестехиометрические фазы, обладающие сверхпроводимостью.

Часть 3. Взаимодействие веществ.

3.1. Растворы неэлектролитов. Процессы, сопровождающие образование жидких истинных растворов. Краткая характеристика межмолекулярных взаимодействий в растворах. Закон Рауля. Идеальные и реальные растворы. Активность. Коэффициент активности как мера отклонения свойств компонента от поведения в идеальном растворе. Кипение и отвердевание растворов.

3.2. Элементы химической термодинамики. Функции состояния. Понятие о химической термодинамике. Внутренняя энергия и энтальпия, их физический смысл. Термохимия. Экзо- и эндотермические реакции. Термохимические уравнения. Понятие о стандартном состоянии. Стандартные энтальпии образования веществ. Закон Гесса и его следствия. Применение закона Гесса для вычисления энтальпий химических реакций, энергий связей в молекулах, энтальпий атомизации, энтальпий сгорания, энтальпий растворения и др.

Понятие об энтропии. Абсолютная энтропия и строение вещества. Изменение энтропии в различных процессах. Использование справочных данных для расчета характеристик различных процессов.

3.3. Химическое равновесие. Истинное и кажущееся равновесия, их признаки. Константа химического равновесия (K_p , K_c , K_a). Энергия Гиббса, ее связь с энтропией и энтальпией.

Изменение энергии Гиббса как характеристика равновесного состояния. Связь стандартного изменения энергии Гиббса с константой равновесия. Равновесие в гомогенных и гетерогенных системах. Использование справочных данных для расчета стандартного изменения энергии Гиббса и константы химического равновесия. Связь изменения энергии Гиббса со стандартным изменением этой величины. Критерий самопроизвольности процессов.

Смещение химического равновесия. Принцип Ле-Шателье-Брауна. Влияние температуры, давления и концентрации реагентов на химическое равновесие.

3.4. Окислительно-восстановительные реакции. Степень окисления. Важнейшие окислители и восстановители. Окислительно-восстановительные свойства элементов и их соединений и периодический закон. Классификация реакций окисления-восстановления. Составление уравнений реакций окисления-восстановления. Влияние температуры, концентрации реагентов, их природы, среды и других условий на глубину и направление протекания окислительно-восстановительных процессов. Окислительно-восстановительный эквивалент. Понятие об электродных потенциалах. Стандартные электродные потенциалы, э.д.с. окислительно-восстановительной реакции. Электролиз. Вычисление стандартного изменения энергии Гиббса окислительно-восстановительных реакции на основе данных э.д.с.

3.5. Растворы электролитов. Типы электролитов. Ассоциированные и неассоциированные электролиты. Теория электролитической диссоциации Аррениуса. Сольватация ионов и молекул. Определение степени диссоциации слабого электролита в растворе на основе измерений электропроводности. Константа диссоциации; закон разбавления Оствальда. Ступенчатая диссоциация слабых электролитов. Влияние одноименных ионов на равновесие диссоциации слабого электролита в растворе.

Равновесие в системе, состоящей из насыщенного раствора электролита и его кристаллов. Кривая растворимости. Произведение растворимости; условия осаждения и растворения малорастворимого электролита.

3.6. Протолитическое равновесие. Протонная теория кислот и оснований. Амфолиты, автопротолиз протолитических растворителей. Ионное произведение воды. Водородный показатель (рН). Сила кислот и оснований, константа кислотности, единая шкала кислотности для водных растворов. Константа основности, связь констант кислотности и основности для кислотно-основной сопряженной пары. Степень протолиза слабых кислот и оснований. Роль растворителя в реакциях протолиза. Кислотные свойства аквакатионов. Представление об электронной теории и теории сольвосистем.

Гидролиз солей. Усиление и подавление гидролиза. Ступенчатый гидролиз. Полный гидролиз.

3.7. Химия комплексных соединений. Общие сведения о комплексных соединениях. Комплексообразователь, лиганды, координационное число, дентатность и амбидентатность лигандов, внутренняя и внешняя сфера комплексного соединения. Классификация комплексов.

Изомерия комплексных соединений. Химическая связь в комплексных соединениях. Квантово-механические методы трактовки природы химической связи в комплексных соединениях. Понятие о теории кристаллического поля. Спектрохимический ряд. Объяснение магнитных свойств и электронных спектров поглощения комплексных соединений. Образование сигма- и пи-связей в комплексных соединениях.

Равновесия в растворах комплексных соединений. Константы образования - полная и ступенчатые; вычисление этих величин с использованием справочных данных по величинам стандартных изменений энергии Гиббса. Реакции с участием комплексных соединений. Хелатный эффект, закономерность трансвлияния.

3.8. Скорость химических реакций. Понятие о химической кинетике. Элементарные (одностадийные) и неэлементарные (многоступенчатые) реакции. Классификация реакций. Последовательные и параллельные реакции. Закон действующих масс, константа скорости реакции. Молекулярность и порядок реакции. Зависимость скорости реакции от температуры; энергия активации. Понятие о цепных реакциях. Понятие о гомогенном и гетерогенном катализе. Примеры каталитических процессов в промышленности.

3.9. Заключение. Краткий обзор изложенного материала по теоретическим основам химии; наиболее важные положения курса. Взаимосвязь разделов курса. Успехи современной химии. Перспективы развития теоретических основ химии.

ПРИМЕРНЫЙ ПЕРЕЧЕНЬ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ

1. Техника химического эксперимента.
2. Определение содержания кристаллизационной воды в кристаллогидратах.
3. Определение эквивалентов веществ.
4. Приготовление растворов и титрование.
5. Окислительно-восстановительные реакции.
6. Электролитическая диссоциация.
7. Гидролиз солей.
8. Комплексные соединения.

ПРИМЕРНАЯ ТЕМАТИКА КУРСОВЫХ РАБОТ

1. Основные законы и понятия стехиометрии. Эквивалент
2. Способы выражения концентрации растворов и расчеты по ним.
3. Основы термодинамики, тепловые эффекты процессов.
4. Энтропия и энергия Гиббса; химическое равновесие.
5. Строение атомов: изображение электронных оболочек и объяснение положения элемента в периодической системе и его главных химических свойств.
6. Химическая связь и строение молекул
7. Окислительно-восстановительные реакции
8. Диссоциация электролитов. Произведение растворимости.
9. Гидролиз солей.
10. Комплексные соединения.

ЛИТЕРАТУРА

Основная

1. Карапетьянц М.Х., Дракин С.И. Общая и неорганическая химия. М., Химия, 2000.
2. Павлов Н.Н. Неорганическая химия. М., Высшая школа, 1986.
3. Практикум по неорганической химии под редакцией А.Ф. Воробьева, С.И. Дракина М., Химия, 1983.
4. Практикум по общей и неорганической химии под редакцией Н.Н. Павлова М., Высшая школа, 1986.
5. Гольбрайх З.Е. Задачи и упражнения по общей и неорганической химии. М., Высшая школа, 1984.

Дополнительная

1. Аноганикум (редактор Л.Кольдиц). Пер. с нем. под ред. А.Ф.Воробьева, М., Мир, 1984.
2. Ахметов Н.С. Общая и неорганическая химия. Учебник для вузов. М. Высшая школа. 2001.
3. Угай Я.А. Общая и неорганическая химия. Учебник для вузов. М. Высшая школа. 2000.
4. Семенов И.Н., Перфилова И.Л. Химия. Учебник для вузов. С-Пб. Химиздат. 2000.