

化合物

JUNE 25



氯化钠晶体的扫描电子显微镜图像。本章讨论了化合物、它们的分子式和它们的名称。

学习内容

- 3.1 区分经验式、分子式和离子化合物的式单元
- 3.2 使用阿伏伽德罗常数将分子和离子化合物的质量和摩尔质量与其基本实体（原子或离子）联系起来
- 3.3 使用化合物的百分比组成数据来确定其经验式和分子式（反之亦然）
- 3.4 使用分配氧化态的规则来确定化合物中每个元素的氧化态
- 3.5 区分有机和无机化合物
- 3.6 使用一般规则命名简单的无机化合物，包括二元化合物、二元酸、多原子离子和含氧酸
- 3.7 使用一般规则命名简单的有机化合物，包括基本的支链烷烃和带有官能团的烷烃，如醇和羧酸。

3-1 化合物的类型及其分子式

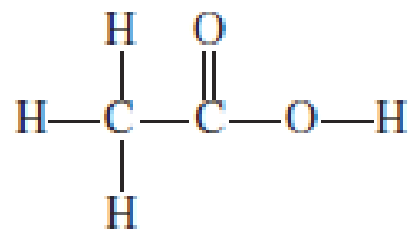
- 化学键将化合物中的原子结合在一起
- **分子化合物**由称为分子的离散单元组成，分子通常由少量通过共价键结合在一起的非金属原子组成
- **经验式**是化合物最简单的公式，它显示了存在的原子类型及其相对数量
- **分子式**基于化合物的实际分子。在某些情况下，经验式和分子式是相同的，在其他情况下，分子式是经验式的倍数
- **结构式**显示了原子在分子中键合的顺序以及键的类型

乙酸的各种表示方法：

经验式：CH₂O

分子式：C₂H₄O₂

结构式：



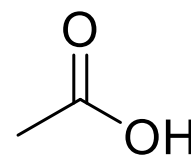
3-1 化合物的类型及其分子式

- 写在单行上的**结构简式**是一种替代的、不那么麻烦的显示分子原子如何连接的方式
- 有机化合物通常使用键线式（也称为折线简式），其中线代表化学键。碳原子存在于一条线的末端或与另一条线相遇的地方，并且假设存在完成每个碳原子的四个键所需的H原子数
- 模型用于表示分子的三维结构，包括**球棒模型**以及**填充模型**

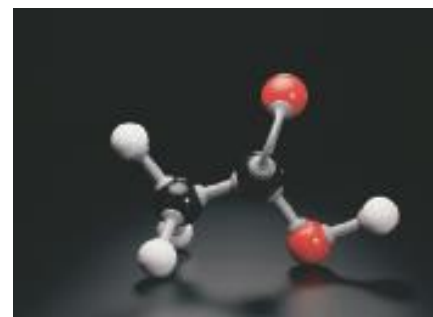
乙酸的各种表示方法：

结构简式： CH_3COOH 或： $\text{CH}_3\text{CO}_2\text{H}$

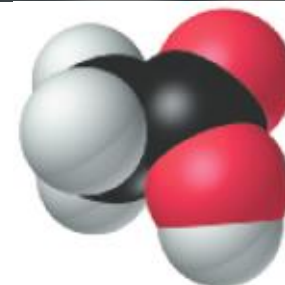
键线式：



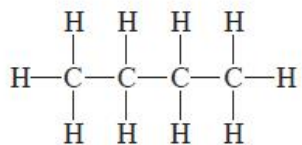
球棒模型：



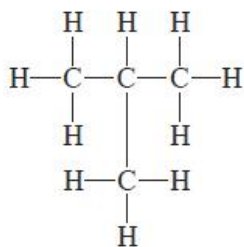
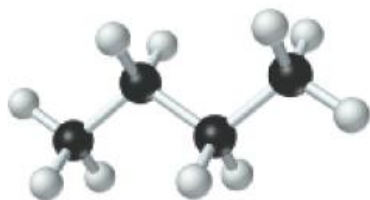
填充模型：



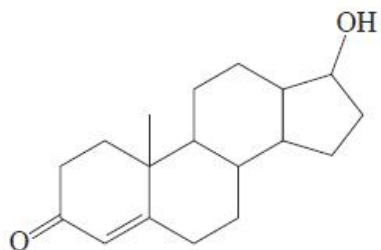
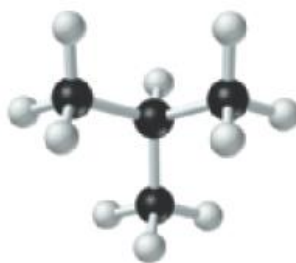
3-1 化合物的类型及其分子式



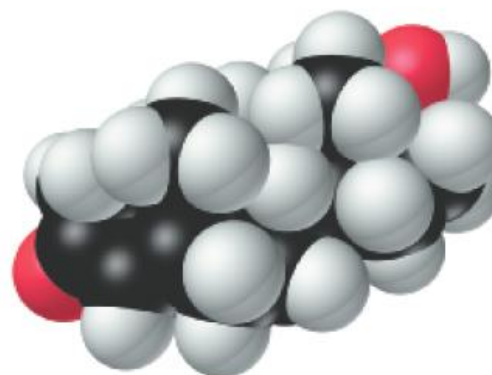
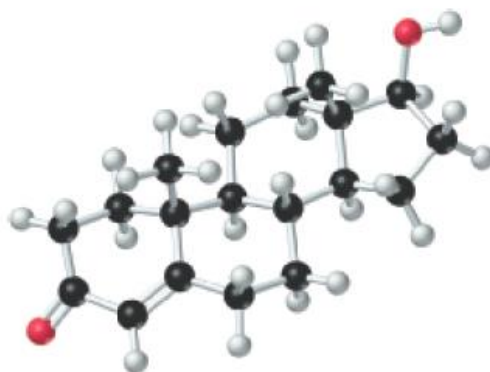
(a) Butane



(b) Methylpropane

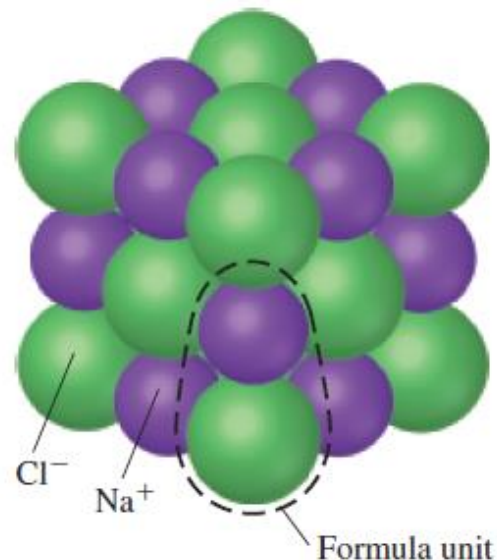


(c) Testosterone



3-1 化合物的类型及其分子式

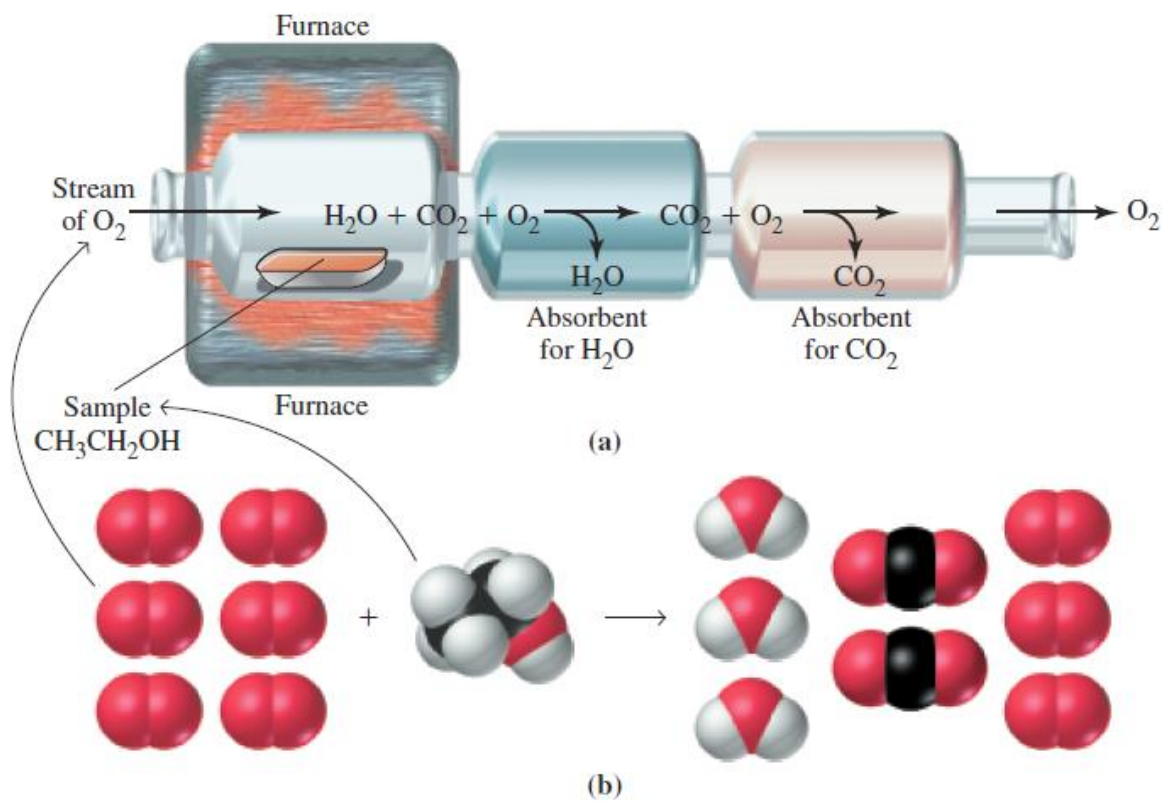
- 金属和非金属的化学结合通常会产生**离子化合物**。离子化合物由正离子和负离子通过静电引力连接在一起组成
- 氯化钠呈电中性，每个 Na^+ 离子必须有一个 Cl^- 离子。因此，氯化钠的分子式为 NaCl
- 每个 Na^+ 离子都被六个 Cl^- 离子包围，反之亦然
- 离子化合物的分子式单位是最小的电中性离子集合



NaCl离子晶体的一部分
氯化钠的分子式单位包含 Na^+ 和 Cl^- 。固体氯化钠由大量的离子组成，称为晶体。一个 Na^+ 离子和一个 Cl^- 离子的组合是我们推出公式 NaCl 的最小离子集合

3-2 摩尔的概念和化合物 3-3 化合物的组成

- 原子单位可以用于离子、分子等微观粒子
- 对于多原子单质，例如 P_4 ，1 mol 白磷和1 mol 磷的含义不同
- 从化学式计算百分组成，或从百分组成推导化学式是常见的试题
- 有机物的百分组成可通过燃烧分析获得



3-3 化合物的组成

- 例题
- 琥珀酸二丁酯是一种驱虫剂，用于对抗家养蚂蚁和蟑螂。其组成为62.58% C、9.63% H 和 27.79% O。其实验确定的分子量介于200~300 u之间。琥珀酸二丁酯的经验式和分子式是什么？
- 维生素C对于预防坏血病至关重要。燃烧0.2000克这种碳-氢-氧化合物的样品会产生 0.2998 g CO₂和0.0819 g H₂O。维生素C的经验式是什么？

3-4 氧化态：描述化合物的有用工具

- 氧化态（氧化数）不涉及可测量的特性或现象，其是为了方便而人为定义的
- 单个原子或单质的氧化数为0；中性物种的氧化数总和为0，而离子的氧化数总和等于电荷数；化合物中，第一族金属氧化态为+1，而第二族金属氧化数为2；化合物中，氟的氧化数为-1；化合物中，氢的氧化数基本为+1；化合物中，氧的氧化数基本为-2；含金属的二元化合物，17族元素氧化数为-1，16族元素氧化数为-2，15族元素氧化数为-3
- Fe_3O_4 或 NH_4NO_3 中，一个元素有两个氧化数

3-5 命名化合物 3-6 无机化合物的名称和分子式

- 金属和非金属的二元化合物称为“A化B”，金属在后面，例如氧化铝
- 某些金属有多个不同价态的离子，在金属名称后加“(罗马数字)”区分，例如氯化铁(II)
- 亚、高这些词头表示低价或高价金属，例如 Cu_2O 是氧化亚铜，这种命名不被推荐
- 非金属的二元化合物也叫“A化B”，氧化数为负的在前面。使用数字表示原子数目以区分不同的化合物，例如四溴化二硼
- 如果我们要强调其酸性，可称之为“氢某酸”，包括HF、HBr、HCl、HI、 H_2S

3-6 无机化合物的名称和分子式

- 除了 Hg_2^{2+} ，其他金属阳离子为单原子离子
- 多原子阴离子比多原子阳离子常见，最熟悉的多原子阳离子是铵 NH_4^+
- 许多多原子阴离子的共同元素是氧，通常与另一种非金属结合。这种阴离子称为酸根
- 某些非金属（如 Cl、N、P 和 S）形成一系列含不同氧原子数的氧阴离子。它们的名称与 O 原子键合的非金属原子的氧化态有关，根据以下方案增加词头，从“次”到“亚”到“Null”再到“高”
- Cl、Br 和 I 的所有常见含氧阴离子都带一个负电荷
- 些含氧阴离子还包含不同数量的H原子并因此命名,例如， HPO_4^{2-} 是磷酸氢根，而 H_2PO_4^- 是磷酸二氢根
- 前缀“硫代”表示氧原子已被硫原子取代。（硫酸根离子有一个S和四个O原子；硫代硫酸根离子有两个S和三个O原子

3-6 无机化合物的名称和分子式

- 大多数酸是三元化合物，它们包含三种不同的元素——氢和另外两种非金属，若其中有一种是氧，称其为含氧酸
- 这些酸都是分子化合物，而对应的盐是离子化合物
- Joseph Proust用来建立恒定组成定律提到的“铜的碳酸盐”叫碱式碳酸铜，但它也有不同的名称，例如碳酸二羟铜(II)
- 某些盐以水合物的形式存在，例如六水合氯化钴(II)，其在潮湿的地方变粉色，干燥的地方变蓝色，用于检测湿度



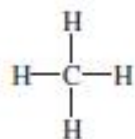
湿度对滤纸的影响
将滤纸片浸泡在氯化钴(II)的水溶液中，然后使其干燥。在干燥空气中保存时，纸张呈蓝色。在潮湿空气中，纸张变为粉红色

3-7 有机化合物的名称和分子式

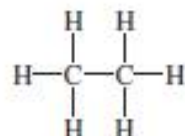
- 有机化合物的多样性非常大，以至于有机化学作为一个独特的化学领域而存在
- 碳原子连接在一起形成链或环的骨架，其他原子与之相连，这些可能性允许几乎无限数量的不同有机化合物
- 有机物详细的系统命名会在之后课程中学习
- 碳氢化合物称为烃，最简单的烃是甲烷 CH_4
- 使用天干（甲乙丙丁戊己庚辛壬癸）来表示烷烃中的碳原子数，例如己烷(C_6H_{14})
- 碳原子之间具有一个或多个双键的烃分子称为烯烃。最简单的烯烃是乙烯
- 苯（图 3-9e）是一种具有六个碳原子排列在六边形环中的分子。具有与苯相关结构的分子构成了已知有机化合物的很大一部分

3-7 有机化合物的名称和分子式

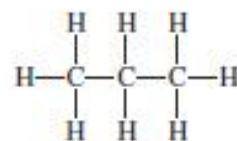
- 丁烷和甲基丙烷具有相同的分子式 C_4H_{10} ，但结构式不同
- 丁烷含有四碳链
- 甲基丙烷中， $-CH_3$ 基团（甲基）连接到了三碳链的丙烷上
- 丁烷和甲基丙烷是**同分异构体**，即分子式相同但原子在空间中排列不同的分子
- 随着有机分子变得越来越复杂，异构现象的可能性会迅速增加



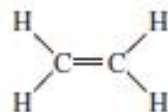
(a) Methane



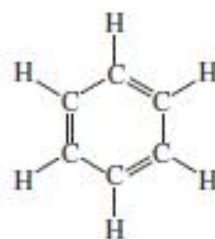
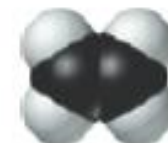
(b) Ethane



(c) Propane



(d) Ethene (ethylene)



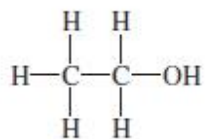
(e) Benzene



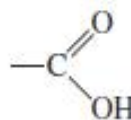
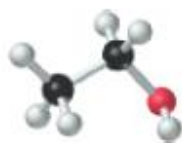
3-7 有机化合物的名称和分子式

- 乙醇， $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ ，可看成乙烷的一个H原子被一个OH基团取代
- “醇”是一类有机分子，其中包含OH基团
- $-\text{OH}$ 基团是一个**官能团**，官能团是连接到有机分子的碳链或环上并赋予分子特征的单个原子或一组原子。我们目前只需要了解少数几个官能团，之后有机化学的学习中会进一步学习
- 官能团的存在也增加了异构体的可能性，丙烷的一个H被 $-\text{OH}$ 基团取代，可能形成两个分子：1-丙醇或2-丙醇
- 羧基是另一个重要的官能团，它赋予分子酸性，写成 $-\text{COOH}$ 或 $-\text{CO}_2\text{H}$
- 单个的卤素原子也是官能团，作为官能团存在时，卤素名称作为前缀，例如氯乙酸

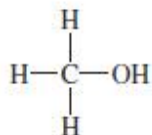
3-7 有机化合物的名称和分子式



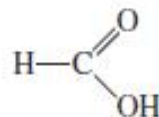
(a) Ethanol, or
Ethyl alcohol



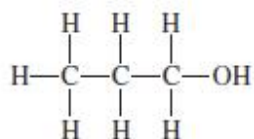
(a) Carboxyl group



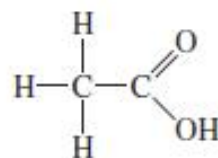
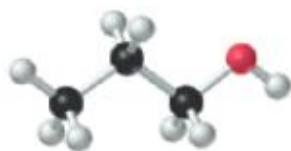
(b) Methanol, or
Methyl alcohol



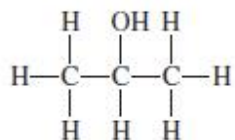
(b) Methanoic, or
Formic acid



(c) Propan-1-ol, or
Propyl alcohol



(c) Ethanoic, or
Acetic acid



(d) Propan-2-ol, or
Isopropyl alcohol

